

**unesp**  UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

**FACULDADE DE ENGENHARIA DE ILHA SOLTEIRA**

**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**DETERMINAÇÃO FÍSICA E NUMÉRICA DE CORRIDAS DE LAMA  
RESULTANTES DE RUPTURA DE BARREIRA RETENDO MATERIAL  
VISCOPLÁSTICO**

**Leandro de Oliveira Barbosa Leite**

**Orientador:** Geraldo de Freitas Maciel

Dissertação apresentada à Faculdade  
de Engenharia - UNESP – Campus  
de Ilha Solteira, para obtenção do  
título de Mestre em Engenharia  
Mecânica.

Área de Conhecimento: Ciências  
Térmicas

Ilha Solteira – SP

Dezembro/2009

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

## FICHA CATALOGRÁFICA

Elaborada pela Seção Técnica de Aquisição e Tratamento da Informação  
Serviço Técnico de Biblioteca e Documentação da UNESP - Ilha Solteira.

L533d Leite, Leandro de Oliveira Barbosa.  
Determinação física e numérica de corridas de lama resultantes de ruptura de barreira retendo material viscoplástico / Leandro de Oliveira Barbosa Leite. Ilha Solteira : [s.n.], 2009.  
185 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira. Área de conhecimento: Ciências Térmicas, 2009

Orientador: Geraldo de Freitas Maciel  
Bibliografia: p. 173-177

1. Reologia. 2. Fluidos não-newtonianos. 3. Rompimento de barreira.



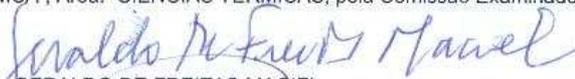
UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA  
CAMPUS DE ILHA SOLTEIRA  
FACULDADE DE ENGENHARIA DE ILHA SOLTEIRA

**CERTIFICADO DE APROVAÇÃO**

**TÍTULO:** DETERMINAÇÃO FÍSICA E NUMÉRICA DE CORRIDAS DE LAMA EM ESCOAMENTOS RESULTANTES DE RUPTURA DE BARREIRA RETENDO MATERIAL VISCOPLÁSTICO

**AUTOR:** LEANDRO DE OLIVEIRA BARBOSA LEITE  
**ORIENTADOR:** Prof. Dr. GERALDO DE FREITAS MACIEL

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de MESTRE em ENGENHARIA MECÂNICA, Área: CIÊNCIAS TÉRMICAS, pela Comissão Examinadora:

  
Prof. Dr. GERALDO DE FREITAS MACIEL  
Departamento de Engenharia Civil / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

  
Prof. Dr. CASSIO ROBERTO MACEDO MAIA  
Departamento de Engenharia Mecânica / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

  
Profa. Dra. MÔNICA FEIJÓ NACCACHE  
Departamento de Engenharia Mecânica / Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Data da realização: 02 de dezembro de 2009.

---

*"Existem apenas duas maneiras de ver a vida. Uma é pensar que não existem milagres e a outra é que tudo é um milagre."  
Albert Einstein*

---

## *Dedicatória*

*Dedico este trabalho a toda minha família, meu pai e minha mãe que sempre me apoiaram nesta batalha da vida, meu irmão sempre companheiro, e todos os meus amigos que direta ou indiretamente participaram deste trabalho.*

---

## *Agradecimentos*

*Aos meus pais, Wilson Benevenuto Barbosa Leite e Marli Lúcia de Oliveira Barbosa Leite pelo amor incondicional e força desde sempre.*

*Ao meu irmão, Leonardo de Oliveira Barbosa Leite por sempre estar ao meu lado.*

*Meus tios, Dercir Pedro de Oliveira e Glória Maria Gelle de Oliveira pela ajuda e apoio.*

*Meus avós, em especial meu avô Deoclides Maciel de Oliveira que sempre colocou a educação em primeiro lugar, servindo de exemplo para minha vida.*

*Todos os membros da minha família.*

*Ao professor Geraldo de Freitas Maciel, mais que um mestre para mim um grande amigo que sempre me depositou crédito e pelo o qual sou eternamente grato.*

*Aos meus amigos, Carlos, Evandro, Gustavo, Fernando, Guilherme, Allan, Bruno, minha amiga Fargane, e todos os parceiros de faculdade que sempre farão parte da minha vida.*

*Aos Professores da área de Ciências Térmicas pelos ensinamentos valiosos.*

*Aos funcionários da UNESP de Ilha Solteira, e em especial aos profissionais do laboratório de Saneamento que tanto me ajudaram neste trabalho.*

*Ao Departamento de Engenharia Mecânica e Engenharia Civil pelo suporte técnico e financeiro.*

*A FAPESP e CNPQ pelos financiamentos que foram tão importantes para a realização deste trabalho.*

*E acima de tudo a Deus.*

# DETERMINAÇÃO FÍSICA E NUMÉRICA DE CORRIDAS DE LAMA RESULTANTES DE RUPTURA DE BARREIRA RETENDO MATERIAL VISCOPLÁSTICO

---

## Resumo

---

**R**ompimentos de Barreira são fenômenos caracterizados por um campo de escoamento inicialmente represado e submetido nos instantes subseqüentes a uma liberação abrupta. Diversos modelos matemáticos e leis de comportamento reológico podem ser associados a este problema e cada um deles deve ser estudado e compreendido de maneira a predizer, a partir de testes físicos e numéricos, sua adequação à descrição da evolução espaço-temporal de frentes resultantes deste fenômeno, tipo ruptura de barragem, retendo água, rejeitos ou materiais de reologia complexa. O desenvolvimento de técnicas analíticas possibilitou entender de maneira impar o desenvolvimento desses fenômenos, porém, a difícil obtenção de dados que alcançassem consonância com aqueles obtidos experimentalmente, demonstrava a fragilidade desse tipo de análise perante a descrição de sistemas dinâmicos complexos. Sendo assim, optou-se pela tentativa de recriar estes fenômenos a partir de técnicas que utilizassem a manipulação de equações governantes completas. Sistemas contínuos podem ser analisados através de aproximações discretas, resultando em valores realísticos, muito próximos aos obtidos experimentalmente, e a capacidade computacional atual, permite diminuir sensivelmente os erros envolvidos, aumentando cada vez mais a consistência física destes métodos. Neste trabalho utilizou-se o software comercial ANSYS-CFX para simular os fenômenos de ruptura de barreira, configurando a reologia de dois materiais, o Carbopol 940 representando um material de reologia complexa (Herschel-Bulkley) e o Glicerol (Newtoniano), esses dados foram então confrontados com os obtidos experimentalmente através de um modelo em escala reduzida. Campos de velocidade, pressão e evolução temporal das frentes foram analisadas, verificando-se valores com grande consonância entre numérico e experimental, mostrando uma grande consistência física dos métodos utilizados.

### Palavras Chaves:

Reologia, Herschel-Bulkley, Newtoniana, Carbopol, Glicerol, Rompimento de Barreira.

# PHYSICAL AND NUMERICAL STUDY OF MUD RACES RESULTING OF DAM BREAK RETAINING VISCOPLASTIC MATERIAL

---

## Abstract

---

The Dam Break problem is a phenomenon characterized by a flow field initially dammed and submitted in the subsequent moments of an abrupt release. Various mathematical models and laws of rheological behavior may be associated with this type of problem and each must be studied and understood in order to predict from physical and numerical tests the temporal evolution of their fronts resulting from this phenomenon, type Dam Break problems, retaining water or rheology complex materials. The development of analytical techniques enabled the understanding the development of these phenomena, however, the difficulty to obtain a reach agreement data with those obtained experimentally, showed the fragility of this type of analysis to the description of complex dynamic systems. But, it was decided by attempt of recreate these phenomena from techniques that use the manipulation of complete government equations. Continuous systems can be analyzed by discrete approximations, leading to realistic values, very close to those obtained experimentally, and current computational capacity, enables to reduce the errors involved significantly, increasing the consistency of these physical methods. This work used the commercial software ANSYS-CFX to simulate the phenomena of breaking the barrier, setting the rheology of two materials, the Carbopol 940 representing a material of complex rheology (Herschel-Bulkley) and glycerol (Newtonian), these data were then compared with those obtained experimentally using a model in scale. Fields of velocity, pressure and temporal evolution of the fronts were analyzed. Found very similar values between numerical and experimental simulations, showing the physical consistency of the methods used.

### Key -Words:

Rheology, Herschel-Bulkley, Newtonian, Carbopol, Glycerol, Dam Break.

---

## *Sumário*

1. Introdução.....	20
1.1. Motivação.....	20
1.2. Objetivos.....	22
2. Análises Reológicas.....	23
2.1. Reologia.....	23
2.2. Terminologias Básicas.....	25
2.3. Terminologias Avançadas.....	26
2.4. Comportamento Reológico.....	29
2.5. Modelos Reológicos.....	38
2.6. Caracterização do Carbopol 940.....	45
2.7. Metodologia de preparação.....	49
2.8. Caracterização do Glicerol.....	51
2.9. Produção do glicerol.....	54
3. Rompimento de Barreira.....	55
3.1. Problema tipo.....	55
3.2. Equações Governantes.....	59
3.2.1. Condições iniciais.....	60
3.2.2. Condições de contorno.....	61
3.3. Regime de escoamento.....	62
3.4. Problema tipo para fluidos Invíscidos ou Newtonianos.....	63
3.5. Problema tipo para fluidos Não-Newtonianos (Herschel-Bulkley.....	67
3.6. Equações de altura média.....	73
3.7. Equações de altura média para fluidos Newtonianos.....	74
3.8. Equações de altura média para fluidos Não-Newtonianos (Herschel-Bulkley.....	77
4. Simulação Numérica.....	80
4.1. Análise Numérica.....	80
4.2. Escoamento Multifásico.....	83
4.3. Tratamento numérico da reologia Não-Newtoniana.....	84
4.4. Tratamento numérico do problema Multifásico.....	86
4.5. Métodos Numéricos.....	87

---

4.5.1. Aspectos Gerais da Mecânica dos fluidos Computacionais.....	87
4.5.2. Pré-Processamento do problema “Dam Break.....	89
5. Simulação Experimental.....	112
5.1. Simulação Experimental.....	111
5.2. Aparato Experimental.....	112
5.2.1. Descrição dos equipamentos de Reometria.....	112
5.2.2. Descrição dos equipamentos utilizados na preparação do Gel Carbopol 940....	114
5.2.3 Descrição dos equipamentos de Filmagem.....	117
5.2.4. Descrição do Canal.....	119
5.3. Formulação do Gel Carbopol 940.....	120
5.4. Procedimentos experimentais em análises reométricas.....	124
5.5. Ambientalização com Software RHEO 2000.....	124
5.6. Incertezas Experimentais.....	129
6. Resultados e Discussão.....	131
6.1. Análises reométricas e deliberações.....	131
6.2.1. Análise CSR (Controlled Shear Rate) - Carbopol 940.....	131
6.2.2. Análise CSS (Controlled Shear Stress) - Carbopol 940.....	134
6.3. Análise reométrica do Glicerol.....	138
6.3.1. Análise CSR Glicerol.....	138
6.3.2. Análise CSS (Controlled Shear Stress) – Glicerol.....	141
6.4. Rompimento de Barreira (Dam Break.....	146
6.4.1. Análise das Frentes.....	146
6.4.2. Análise do Campo de Velocidade e Campo de Pressão.....	159
6.4.3. Análise para Taxas de Cisalhamento do Glicerol.....	169
7. Conclusão.....	170
Referências.....	173
<b>Apêndice</b>	
A.1. Teorias Reométricas.....	178
A.2. Reômetro rotacional de cilindros concêntricos.....	179
A.3. Obtenção de $\tau$ e $\gamma$ em reômetros de cilindros concêntricos.....	180
A.4. Para fluidos Newtonianos.....	184
A.5. Para fluidos de reologia complexa – Estudo de caso com Power Law.....	185

---

## *Lista de Figuras*

Figura 1.1. Rompimento de dique na Mineradora Rio Pomba Cataguases Ltda em Miraf (MG). .....	21
Figura 2.1. Estimativa da Tensão critica de uma amostra de Maionese por Mendes e Dutra (2004). .....	27
Figura 2.2. Estimativa da Tensão critica a partir do pico da viscosidade, neste exemplo a tensão critica é de 34 [Pa]. .....	28
Figura 2.3. Curva típica de viscosidade aparente ( $\eta$ ) em função da taxa de cisalhamento para um fluido polimérico. Adaptado de Bretas e D'Ávila (2000). .....	31
Figura 2.4. Variação da viscosidade em função da taxa de deformação para um fluido do tipo Herschel-Bulkley (viscosidade diferencial: $\tan(B)$ ; viscosidade aparentes $\tan(I)$ ), adaptado de Mendes e Dutra (2004). .....	33
Figura 2.5. Curvas teóricas para cada modelo Reológico .....	33
Figura 2.6. Croqui com teste viscoelástico em bolas com diferentes materiais. ....	36
Figura 2.7. Exemplo de teste de histerese com gelificante Carbopol 940, Minussi (2006). ....	38
Figura 2.8. Reograma para fluido Binghamiano. ....	40
Figura 2.9. Reograma para fluido Power-Law com configuração Pseudoplástica. ....	41
Figura 2.10. Variações do modelo Power Law com dependência do índice n, sendo a curva azul, um fluido com índice 1 (Newtoniano). ....	41
Figura 2.11. Reograma para fluido de Herschel Bulkley. ....	42
Figura 2.12. Molécula de Carbopol. ....	46
Figura 2.13. Efeito térmico sobre duas soluções de Carbopol, adaptado de Noveon(2002). ....	47
Figura 2.14. Efeito do pH sobre três soluções de Carbopol à 0,2%, adaptado de Noveon(2002). ....	48
Figura 2.15. Estrutura química do Glicerol. ....	52
Figura 3.1. Modelo do problema tipo Rompimento de Barreira com duas configurações para o fator declividade, com os respectivos estados: inicial e final para a barreira, adaptado de Cochard (2004). ....	56

---

Figura 3.2. Regimes de escoamento para material viscoplástico: (a) Regime Inercial, (b) Regime Hidrodinâmico e (c) Regime de parada. ....	58
Figura 3.3. Croqui com as condições Iniciais.....	60
Figura 3.4. Croqui para o problema tipo rompimento de barreira adaptado de Whitham (1954). ....	64
Figura 3.5. Croqui com as variáveis utilizadas, adaptado de Nsom <i>et al.</i> (2000). ....	66
Figura 3.6. Altura $h$ é a pseudo-superfície que separa as zonas de comportamento do escoamento $Y$ , para $B=0.1$ e $n=1$ nos tempos $t=0.1, 0.4, 1.6, 3.6, 8, 20, 60, 200, 420$ e $720$ . A linha traço ponto em azul expressa à condição inicial.....	73
Figura 3.7. Solução de Debiane para $L=1$ no tempo $t=1$ . ....	76
Figura 4.1. Motor elétrico e ventilação em torno de uma cabeça humana, ANSYS CFX – REALESE (2007). ....	83
Figura 4.2. Fatia central do canotele.....	89
Figura 4.3. Malha bidimensional associada à fatia central do canotele com as condições de contorno (superfície livre e simetria laterais). ....	90
Figura 4.4. Condições de contorno aplicadas a cada superfície do domínio.....	91
Figura 4.5. Dimensões do domínio numérico. ....	93
Figura 4.6. Malha quadrática, visualização lateral com a altura ( $H$ ) e o comprimento ( $L$ ) de cada elemento regular do grid. ....	94
Figura 4.7. Histograma de qualidade da malha com 44.898 elementos entre 0.95 e 1 de qualidade global.....	94
Figura 4.8. Histograma de qualidade da malha com 133.879 elementos entre 0.95 e 1 de qualidade global.....	95
Figura 4.9. Croqui de uma malha com volume de controle. ....	96
Figura 4.10. Discretização. ....	97
Figura 4.11. Interface do CFX-Pré com as principais abas de configurações destacadas em cores.....	98
Figura 4.12. Interface de criação de materiais, no círculo vermelho temos o nome do material criado, em amarelo a aba para entrada de dados básicos como tipo de substancia e estado termodinâmico, em verde têm-se a entrada das propriedades termodinâmicas do material, assim como dados de densidade e transporte (viscosidade dinâmica). ....	99
Figura 4.13. Entrada de expressões adicionais a serem computadas na simulação.....	101

---

Figura 4.14. Janela de edição do domínio “canalete”, caracterização de sistemas uni ou multifásicos e escolha do modelo como homogêneo ou não.....	102
Figura 4.15. Interfaces de configuração das condições de contorno com destaque em azul têm a condição de superfície livre (Opening) sendo associado à superfície “topo” do domínio numérico. ....	103
Figura 4.16. Dados de inicialização como campo de velocidades e campo de pressão inicial (Pini).....	103
Figura 4.17. Diferentes visões da malha com as condições de contorno. ....	104
Figura 4.18. Tempo de simulação, passo e regime de escoamento. ....	104
Figura 4.19. Output Control destacado em vermelho e variáveis analisadas em amarelo. ....	105
Figura 4.20. “Solver Control” destacado em azul e a janela de configurações, com entrada de critério de convergência, tipo de resíduo e esquemas advectivos e transientes do problema.	106
Figura 4.21. Interface de entrada para o Solver-CFX.....	107
Figura 4.22. Tela do CFX-Solver com gráfico RMS e memorial de cálculo. ....	108
Figura 4.23. Visualização vetorial para um campo de velocidades - propagação da frente...	110
Figura 4.24. Visualização em contornos para um campo de escoamento – Fração Volumétrica. ....	110
Figura 5.1. Aparelhagem utilizada para os ensaios de reometria, reômetro e spindles respectivamente. ....	113
Figura 5.2. Banho térmico utilizado nos ensaios de Reometria. ....	114
Figura 5.3. Aparelhagem Millipore. (a)Modelo Simplicity Milli-Q; (b)Milli-Q ligado a um sistema deionizador por osmose reversa. ....	114
Figura 5.4. pHmetro e Balança utilizados na preparação do gel Carbopol 940 respectivamente. ....	116
Figura 5.5. Equipamentos de filmagem, câmera ultra-rápida i-Speed2-Olympus e JVC (GY DV 500) respectivamente. ....	117
Figura 5.6. Posicionamento das câmeras no set de filmagem. ....	118
Figura 5.7. Aparelhagem montada e esquema de iluminação com fundo negro.....	118
Figura 5.8. Visão aérea do canal com o foco da câmera ultra-rápida explicitada no retângulo em grid amarelo. ....	119
Figura 5.9. Croqui do canaleta com suas dimensões em milímetros.....	119
Figura 5.10. Imagem frontal do canaleta. ....	120

---

Figura 5.11. Planilha do Excel utilizada para obtenção das massas de água, NaOH e de Carbopol 940. ....	121
Figura 5.12. Base inorgânica de NaOH em micropérolas e recipiente com água Milli-Q e Becker para medidas volumétricas. ....	123
Figura 5.13. Interface de apresentação .....	125
Figura 5.14. Interface de configuração. ....	126
Figura 5.15. Interface de análise e verificação. ....	127
Figura 5.16. Interface de resultados. ....	128
Figura 6.1. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Carbopol 940. ....	132
Figura 6.2. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Carbopol 940. ....	133
Figura 6.3. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Carbopol 940. ....	134
Figura 6.4. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Carbopol 940. ....	135
Figura 6.5. Resultados CSS para o Carbopol 940, com regressão no modelo de Herschel-Bulkley. ....	135
Figura 6.6. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Carbopol 940. ....	136
Figura 6.7. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Carbopol 940. ....	137
Figura 6.8. Análise CSR para o Glicerol, Taxa de Cisalhamento em 5000 [ $s^{-1}$ ]. ....	138
Figura 6.9. Regressão numérica para a análise CSS do Glicerol. ....	139
Figura 6.10. Gráfico-CSR Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Glicerol. ....	140
Figura 6.11. Gráfico-CSR Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Glicerol. ....	140
Figura 6.12. Análise CSS para o Glicerol com tensão de cisalhamento em 170 [Pa]. ....	141

---

Figura 6.13. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Glicerol. ....	142
Figura 6.14. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Glicerol. ....	143
Figura 6.15. Resultados CSS para o Glicerol com regressão para o modelo Newtoniano. ....	143
Figura 6.16. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Glicerol. ....	144
Figura 6.17. Gráfico-CSS Viscosidade [Pas] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Glicerol. ....	144
Figura 6.18. Frentes da simulação numérica para Carbopol 940 com 12 cm iniciais. ....	147
Figura 6.19. Frentes da simulação experimental para Carbopol 940 com 12 cm iniciais. ....	148
Figura 6.20. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) e os resíduos RMS da simulação numérica. ....	149
Figura 6.21. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise experimental. ....	149
Figura 6.22. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise numérica. ....	150
Figura 6.23. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise experimental. ....	150
Figura 6.24. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise numérica. ....	151
Figura 6.25. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise experimental. ....	151
Figura 6.26. Frentes da simulação numérica para Glicerol com 12 cm iniciais. ....	154
Figura 6.27. Frentes da simulação numérica para Glicerol com 12 cm iniciais. ....	155
Figura 6.28. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) e os resíduos RMS da simulação numérica para Glicerol – 12cm . ....	156
Figura 6.29. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na Análise experimental para Glicerol – 12cm. ....	156
Figura 6.30. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na simulação numérica para Glicerol - 10 cm. ....	157
Figura 6.31. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na Análise experimental para Glicerol – 10cm. ....	157

---

Figura 6.32. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na simulação numérica para Glicerol - 8 cm. ....	158
Figura 6.33. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na Análise experimental para Glicerol – 8cm. ....	158
Figura 6.34. Campos de velocidade para Carbopol 940 com 12 cm iniciais. ....	160
Figura 6.35. Campos de velocidade para Carbopol 940 com 10 cm iniciais. ....	161
Figura 6.36. Campos de velocidade para Carbopol 940 com 8 cm iniciais. ....	163
Figura 6.37. Campos de velocidade para Glicerol com 12 cm iniciais. ....	164
Figura 6.38. Campos de velocidade para Glicerol com 10 cm iniciais. ....	165
Figura 6.39. Campos de velocidade para Glicerol com 8 cm iniciais. ....	166
Figura 6.40. Campo de pressão ao longo da evolução temporal para Carbopol 940. ....	167
Figura 6.41. Campo de pressão ao longo da evolução temporal para Glicerol. ....	168
Figura 6.42. Taxa de cisalhamento ao longo da evolução temporal para Glicerol.....	169
Figura A.1 Croqui esquemático do reômetro de cilindros concêntricos, Schramm (2000). ..	180

---

## *Lista de Tabelas*

Tabela 2.1. Parâmetros reológicos de Herschel Bulkley para gelificante Carbopol 940 – Lachamp (2003).....	48
Tabela 2.2. Parâmetros reológicos de Herschel Bulkley para gelificante Carbopol 980 – Robert e Barnes (2001).....	49
Tabela 2.3 – Dados físico-químicos do Glicerol. ....	53
Tabela 5.1. Faixas de Operação dos Spindles (Brookfield Viscometers, 1998) .....	113
Tabela 5.2. Especificações Millipore Simplicity (2008) .....	116
Tabela 5.3. Produção de Gel Carbopol 940.....	122
Tabela 5.4. Solução neutralizada de Gel Carbopol 940.....	122
Tabela 6.1 – Dados do software REO 2000 para análise CSR.....	133
Tabela 6.2 - Dados do software REO 2000 para análise CSS.....	136
Tabela 6.3 - Dados do software REO 2000 para análise CSS do Carbopol 940.....	137
Tabela 6.4 – Dados do software REO 2000 para análise CSR.....	141
Tabela 6.5 - Dados do software REO 2000 para análise CSS do Glicerol.....	143
Tabela 6.6 - Dados do software REO 2000 para análise CSS do Glicerol.....	145
Tabela 6.7 – Soluções de Ritter (1892).....	161

---

## *Símbolos*

$a$  - constante; curvatura

$\tilde{a}$  - candidata a curvatura

$a(t)$  - posição frontal da onda

$b$  - coeficiente linear (equação da reta)

$\tilde{b}$  - candidata a  $b$

$C$  – concentração

$C_{ijlm}$  - tensor Newtoniano

$C_f$  - coeficiente de atrito de fundo

$\vec{f}$  - vetor forças de corpo

$\vec{g}$  - vetor aceleração da gravidade

$h$  - distância do fundo até a superfície livre

$h_o$  - altura inicial do reservatório

$H$  – altura da frente represada

$k$  - índice de consistência

$K$  - coeficiente de Chézy; fator de Student

$l_o$  - comprimento do reservatório

$m$ - inverso do índice de escoamento; massa

$n$  - índice de escoamento

$\vec{n}$  - vetor unitário normal à interface

$N$  - número de amostras; número de fases em problemas multifásicos

$Od$  - número de Oldroyd

$p$  - pressão termodinâmica

$p_a$  - pressão atmosférica

$p_{ini}$ : campo inicial de pressão

$R$  - raio de curvatura

$Re$  - número de Reynolds

$S$  - desvio - padrão

$\vec{S}$  - termo fonte

$t$  - tempo

$T$  - temperatura; constante de adimensionalização do tempo

---

$\bar{T}, T_{ij}$  - tensor tensão total

$\vec{u}$  - vetor velocidade

$u_c$  - incerteza combinada

$u_i$  - componente do vetor velocidade

$u_p$  - incerteza padrão

$u_t$  - incerteza total

$U$  - velocidade de propagação

$VF$  - fração volumétrica

$x$  - direções horizontal, vertical e transversal; valor de uma medição em ensaios experimentais

$x_i$  - componente de direção

$x_f$  - posição da frente

## *Simbologias Gregas*

$\Delta t$  - passo de tempo

$\bar{\gamma}, \gamma_{ij}$  - matriz identidade

$\alpha - 2x$  a raiz quadrada do invariante do tensor taxa de deformação multiplicado por  $-1$ .

$\beta$  - constante

$\bar{\dot{\gamma}}, \dot{\gamma}_{ij}$  - tensor taxa de deformação

$\eta$  - viscosidade aparente

$\lambda$  - grau de gelificação

$\mu$  - viscosidade Newtoniana, ou dinâmica

$\mu_{dif}$  - viscosidade diferencial

$\rho$  - massa específica

$\theta$  - inclinação do canal

$\bar{\tau}, \tau_{ij}$  - tensor tensão de cisalhamento

$\tau_c$  - tensão crítica

---

## ***Sobre-Escrito***

$n$  - passo de tempo (timestep)

$i, j$  - célula ( $i$  direção horizontal,  $j$  direção vertical)

$ij$  - posição de uma matriz

T - matriz transposta

- - valor médio

' - define variáveis adimensionais

\* - define variáveis adimensionais

~ - define variáveis adimensionais

^ - define variáveis adimensionais

## ***Sub-Escrito***

1 - abscissa; diferenciação de variáveis

2 - ordenada; diferenciação de variáveis

3 - direção transversal; diferenciação de variáveis

*B* - *backward* (para trás)

*C* - *central* (central)

*F* - *forward* (para frente)

# CAPÍTULO 1

---

## Introdução

---

### 1.1. Motivação

A liberação súbita de líquidos represados caracteriza o problema tipo rompimento de barreira que notadamente explicita, para a sociedade, comparativos de destruição de infra-estrutura, meio ambiente e até catástrofes, envolvendo perdas de vidas humanas decorrentes dos alagamentos subseqüentes ao rompimento, deposição detrítica e efeitos como a erosão.

Como exemplo, podemos citar mais recentemente, incidentes envolvendo duas empresas mineiras, a Mineração Rio Verde em 2001, e a Indústria Cataguases de Papel, em abril de 2003, que pela ruptura de suas barragens de rejeito, ocasionou verdadeiras catástrofes ambientais. Somam-se a esses, o acidente ocorrido na cidade de Camará, na Paraíba, em junho de 2004 e na cidade de Miraiá pela Mineradora Rio Pomba Cataguases em março de 2006 que despejou 400 milhões de litros de lama tóxica no Rio Fubá e dez meses depois foi acometida por outro incidente liberando desta vez dois bilhões de litros de lama que inundaram a cidade de Miraiá, figura (1.1), e poluíram importantes afluentes do rio Paraíba do Sul, principal fonte de água potável para o estado do Rio.

Tais fatores já estabelecem como uma motivação ímpar para o estudo detalhado deste problema, que vem tornando-se cada vez mais o foco de grupos científicos especializados devido aos últimos acontecimentos envolvendo o rompimento abrupto de barragens de rejeitos no Brasil.

Ao estabelecer o problema tipo rompimento de barreira como centro de um processo reflexivo racional, diversas variáveis entram em jogo e devem ser delicadamente analisadas para então, termos um mapa eloqüente e representativo do problema.



**Figura 1.1. Rompimento de dique na Mineradora Rio Pomba Cataguases Ltda em Mirai (MG).**

Uma característica importante é entender como a variação de sistemas reológicos se processam neste sistema dinâmico e assim obter uma idéia direcionada referente a simulações empíricas e numéricas que representem com fidelidade o fenômeno estudado.

A liberação abrupta de um líquido do sistema Newtoniano é acometida nos instantes subsequentes a uma mistura com materiais sólidos proveniente do leito, com isso a natureza do material produzido é distinguida pela concentração dos materiais finos e dos agregados de várias granulometrias, o que acarreta em modificações físico-químicas do líquido inicialmente represado e assim alterações reológicas significativas, podendo até mesmo alterar um sistema a priori Newtoniano para não-Newtoniano.

Daí a necessidade de utilização de um material que apresentasse as características reológicas de uma lama e misturas de argilas e águas, encontradas nos pés das barragens, mas que pudessem ser confeccionadas de maneira homogênea e controladas em todos os aspectos físico-químicos necessários para permitir uma repetibilidade adequada ao âmbito experimental. O material escolhido foi o produto polimérico Carbopol 940, que apresenta um comportamento pseudo-plástico com tensão crítica e características reológicas observadas nas lamas, mas com a possibilidade de controle e reprodutibilidade homogênea em todas as etapas de sua confecção.

## 1.2. Objetivos

Este trabalho tem por objetivo, em um primeiro estágio, a compreensão metodológica da preparação do gelificante Carbopol 940, bem como os parâmetros que influenciam sua estabilidade física, para a utilização do mesmo como fluido representativo de lamas, uma vez que apresentam as mesmas características reológicas, porém, com propriedades físico-químicas bem definidas e passíveis de reprodutibilidade homogênea.

A prática experimental tem por finalidade o desenvolvimento de habilidades a partir da aplicação empírica de conceitos teóricos bem fundamentados; tais ferramentas são primordiais para a execução confiável de análises e pesquisas no âmbito laboratorial e com isso obter uma ligação íntima com a preparação e controle do objeto de análise.

Após uma compreensão sucinta referente à preparação, uma análise reológica de materiais é estabelecida utilizando-se de equipamentos dedicados a este tipo de pesquisa, como é o caso do reômetro R/S Rheometer da Empresa Brookfield Engineering utilizado neste projeto, onde foram estudadas as características reológicas do gel hidrofílico Carbopol 940, e do composto orgânico Glicerol, para assim, obter um comparativo de operacionalidade dos fluidos “tipo” junto ao estudo.

È então desenvolvida uma análise junto ao campo de escoamento dos fluidos de trabalho para com o problema de ruptura de barragem retendo material viscoplástico.

Duas temáticas referentes a uma estratégia operacional de atuação junto ao estudo foram deliberadas, a primeira voltada para a análise empírica do problema tipo, por meio de análises reométricas e simulação em modelo reduzido.

Numa segunda instância, fechando outra temática deste estudo, uma análise referente à montagem de um simulador computacional que irá notadamente descrever o fenômeno no âmbito numérico para então, junto com dados experimentais e da literatura especializada, se fixar como base comparativa, e assim mostrar a consistência do método numérico de análise referente ao campo de escoamento estudado, visando prever as velocidades e perfis das frentes.

Para isso será utilizado o pacote computacional CFX-ANSYS, uma ferramenta consolidada no mercado para cálculos envolvendo fluidos.

## CAPÍTULO 2

---

### Análises Reológicas

---

#### 2.1. Reologia

Conceitualmente reologia é o estudo do escoamento e da deformação da matéria, ou seja, o estudo do comportamento de fluidez. Os componentes dos fluidos podem apresentar diferentes formas geométricas, características diversas de ligação e tamanhos variados que lhe conferem comportamentos distintos.

Devido a características físico-químicas, alguns fluidos podem possuir uma única viscosidade aparente a uma dada temperatura, independente da taxa de cisalhamento e são denominados fluidos Newtonianos, enquanto que a maioria dos fluidos apresenta comportamento reológico mais complexo e a determinação da viscosidade aparente não é um tópico simples.

Outros fluidos apresentam um comportamento reológico bastante variado dependentes do tempo e ou viscoelasticidade.

A evolução dos modelos disponíveis é apontada por Doraiswamy (2002) para descrever o comportamento dos materiais, do ponto de vista cronológico. Inicialmente, dispunham-se dos modelos ideais, tais como: corpos sólidos rígidos ou euclidianos (~250 a.C.), e fluidos invíscidos (século XVIII). Posteriormente, outros modelos como: sólidos elásticos (século XVII) e os fluidos Newtonianos (início do século XIX) foram propostos. Apenas na metade do século XIX surgem os primeiros trabalhos abordando viscoelasticidade linear, seguidos dos estudos acerca de escoamentos de fluidos Newtonianos generalizados. No início do século XX surgiram as teorias viscoelásticas não-lineares juntamente com trabalhos sobre polímeros de grandes cadeias, suspensões e viscosidade extensional, até que, em 1929, a reologia surge como um novo campo da ciência.

Ainda com a aclamação da reologia como ciência, muitos esforços foram feitos no campo da reologia teórica, através da obtenção de equações constitutivas para estudo da dinâmica destes materiais. Além dos desenvolvimentos no campo teórico, surgiu também a Reometria, responsável pelas medições físicas das propriedades reológicas, a Reologia Computacional, responsável pela solução numérica das equações do movimento envolvendo fluidos não-Newtonianos, a Reologia Interfacial que estuda os fenômenos de transporte existentes na interface entre tais fluidos, ou entre um fluido Não-Newtoniano e outro qualquer, além de muitos outros sub-campos para estudo de materiais específicos.

Os dados reológicos nas indústrias são importantes para:

1. Determinar a funcionalidade de ingredientes no desenvolvimento de produtos;
2. Controle de qualidade do produto final ou intermediário;
3. Determinação da vida de prateleira;
4. Avaliação da textura pela correlação com dados sensoriais;
5. Cálculo de engenharia de processos englobando uma grande quantidade de equipamentos tais como agitadores, extrusoras, bombas, trocadores de calor, tubulações ou homogeneizadores.

Existem hoje diversos instrumentos disponíveis para a realização de medidas de viscosimetria absoluta com os mais variados princípios de funcionamento. Podem-se citar como exemplo os rotacionais, os tubulares e os de análise placa-placa dentre outros. Os instrumentos rotacionais, por exemplo, podem ainda operar em cisalhamento estacionário (velocidade angular constante) ou dinâmico (oscilatório).

Os equipamentos comerciais mais simples fornecem curvas de escoamento (viscosidade), enquanto que instrumentos mais sofisticados fornecem comportamento reológico e também dão informações de viscoelasticidade do material. Todos os parâmetros, curva de escoamento, tendência reológica e viscoelasticidade, são importantes para a completa caracterização do fluido.

É importante observar que os comportamentos não são exclusivos, ou seja, um material pode apresentar pseudoplasticidade, tixotropia e viscoelasticidade.

## 2.2. Terminologias Básicas

Alguns conceitos básicos devem ser devidamente fundamentados para uma correta compreensão de técnicas e metodologias reológicas.

### *Fluxo*

Quando um líquido é submetido a uma tensão de cisalhamento este origina uma deformação continua, tal ocorrência se estabelece devido à existência de coesão entre as camadas adjacentes do fluido, esta variação na qualidade de estado do material no tempo caracteriza fluxo.

### *Tensão de cisalhamento*

A quantidade de força (tensão) aplicada em uma determinada área de um fluido em contato com um plano estacionário (adjacente) é a tensão de cisalhamento.

### *Taxa de cisalhamento*

É o gradiente de velocidade de cisalhamento por uma determinada distância, caracterizando uma variação temporal continua da qualidade de estado do material.

$$\gamma = \frac{dv}{dx} = \frac{(m/s)}{(m)} = s^{-1} \quad (2.1)$$

*Exemplo de tensão e taxa de cisalhamento:* Espalhar margarina com uma espátula em um pão.

Quando a margarina é espalhada com uma espátula, aplica-se uma força com a mão (tensão) e uma velocidade de espalhamento (dv). A altura da camada de margarina formada entre o pão e a espátula implica em uma abrupta e extrema mudança no comportamento da

mesma em relação ao estado de menor resistência (descanso). Ou seja, é como o próprio nome diz, a tensão mínima exigida para que um material comece a fluir.

A tensão de deformação é benéfica para evitar sedimentação, sinerese ou para estabelecer a característica de um produto em cima de uma faca ou colher sem escorrer.

Esse parâmetro será desfavorável se um produto tem que preencher cavidades através de escoamento do material. Com relação ao nivelamento, se a tensão de cisalhamento é muito alta, o produto exibe nivelção irregular à distância.

### **Viscosidade**

É a resistência de um material a deformação contínua, uma das principais propriedades dos fluidos correspondentes ao transporte microscópico de quantidade de movimento por difusão molecular e objeto central de ciências como a Reologia.

$$\eta = \frac{\text{Tensão de Cisalhamento (dinas / m}^2\text{)}}{\text{Taxa de Cisalhamento (s}^{-1}\text{)}} \quad (2.2)$$

### **2.3. Terminologias Avançadas**

#### ***Tensão de deformação inicial (Yield stress) – Tensão Crítica***

A definição típica de dicionário para o verbo “Yield” é “abrir caminho por ação de uma força” que em união com “stress” nos dá à idéia de força necessária para começar o processo de fluidez.

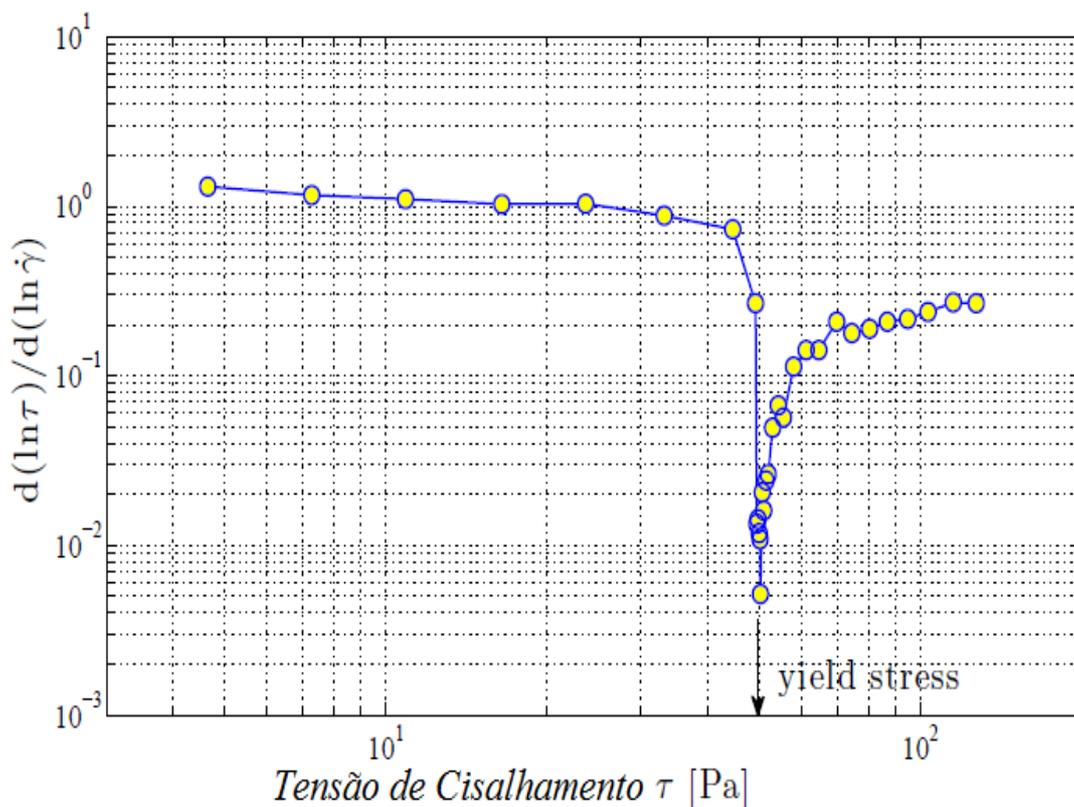
A tensão crítica não pode ser medida diretamente, é extrapolada a partir da curva de escoamento. Com isso surge uma importante indagação: O quão perto do zero a taxa de cisalhamento deve ser medida a fim de se obter um valor consistente para a tensão crítica? De Kee e Chan Man Fong (1993) dão uma resposta surpreendente: "A medida da tensão crítica é a medida da paciência do pesquisador". Em outras palavras (CHENG, 1986): "A magnitude de qualquer medida referente à tensão crítica depende do tempo de medição ", uma vez que a viscoelasticidade e a tixotropia podem mascarar outros efeitos.

O pesquisador James et al.(1987) demonstrou que variações na magnitude da tensão crítica podem ser obtidas em função do modo como o mesmo é medido.

Existem diversos métodos para a obtenção da tensão crítica, um deles foi descrito, por exemplo, por Mendes e Dutra (2004), que envolve a plotagem de:

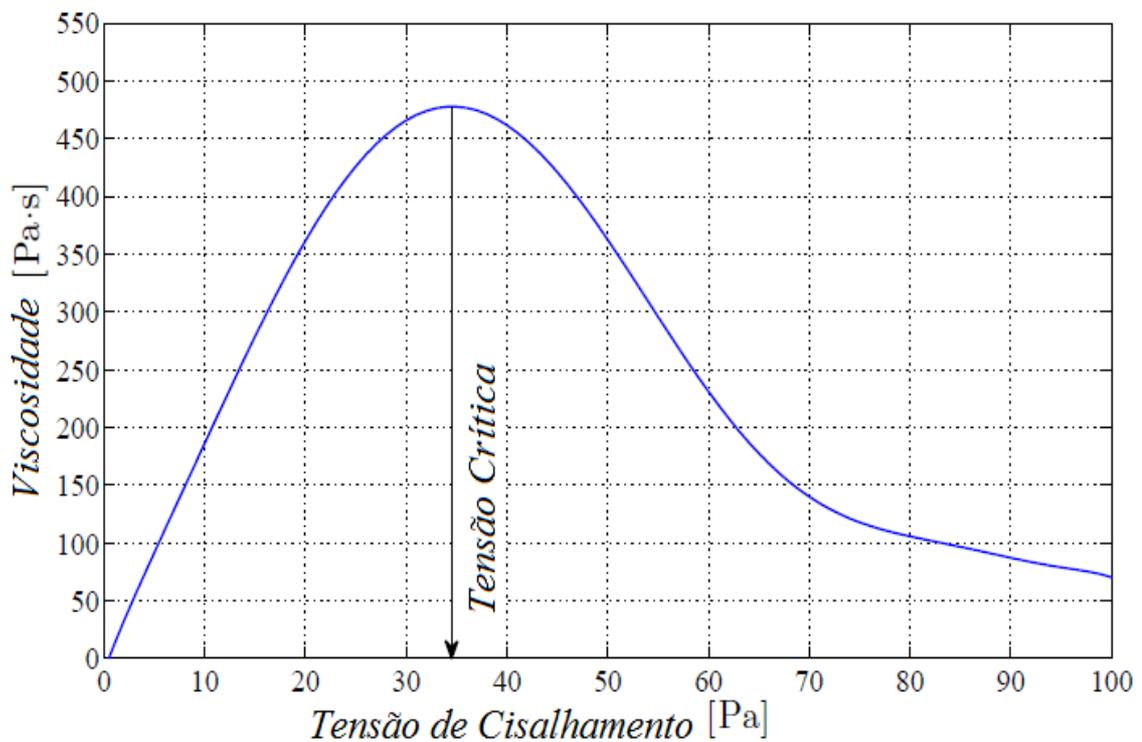
$$\frac{d \ln \tau}{d \ln \dot{\gamma}} = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \frac{d \tau}{d \dot{\gamma}} \quad (2.3)$$

em função de  $\tau$ , a tensão crítica será dada pelo pico da curva como mostrado na figura(2.1) :



**Figura 2.1. Estimativa da Tensão crítica de uma amostra de Maionese por Mendes e Dutra (2004).**

Outro método que pode também ser citado é aquele que relaciona valores da viscosidade ( $\mu$ ) e da tensão de cisalhamento (Pa), figura (2.2).



**Figura 2.2. Estimativa da Tensão crítica a partir do pico da viscosidade, neste exemplo a tensão crítica é de 34 [Pa].**

### Um mito?

No ano de 1985 Barnes e Walters (1985) apresentaram um artigo deveras inusitado, concluindo que a rigidez inicial não existirá, e que era na verdade um mito.

Relembrando os ensinamentos de Heródoto que dizia “tudo passa”, a declaração de Barnes e Walters deixa o âmbito especulativo e entra para o científico tornando-se evidente: Se o tempo de observação for longo o suficiente, uma taxa de cisalhamento será registrada.

Como exemplo deste efeito, temos os famosos vitrais da catedral francesa de Chartres que “fluíram”, uma vez que foram produzidos há mais de 600 anos.

As vidraças apresentavam uma espessura uniforme de cima até em baixo nos tempos medievais, mas hoje as moléculas do vidro fluíram para baixo com a influência da força gravitacional. Assim, a espessura da parte de cima está atualmente como uma folha de papel. O longo tempo “t” resulta então em um pequeno número de “Deborah”.

Essa propriedade não está restrita apenas aos materiais viscoplásticos, mas a todos os materiais segundo Barnes (2000), e explica o comportamento de fluidez dos sólidos.

Na determinação do tempo de deformação do material pelo tempo de duração da observação (experimento), Reiner (1964) define o número de Deborah:

$$De = \frac{Tr}{Tobs} \quad (2.4)$$

onde,  $Tr$  é uma característica associada ao tempo de relaxamento e  $Tobs$  a duração da observação (experiência). Sendo o número adimensional de Deborah igual zero, tem-se um fluido newtoniano e se infinito tem-se um sólido. A tensão crítica está diretamente relacionado ao número de Deborah.

Saindo do contexto se há ou não tal tensão, este comportamento é, muitas vezes, desejável, principalmente na indústria alimentícia e de cosméticos. Controlando-se a tensão crítica e a tixotropia, podem-se produzir materiais mais práticos de serem manuseados. Coussot e Gaulard (2005) fazem um estudo detalhado de como a tixotropia e a tensão crítica afetam o escoamento de fluidos Não-Newtonianos na indústria de alimentos quando estes estão sob a ação da gravidade.

## 2.4. Comportamento Reológico

### Sistema Newtoniano

O fluido Newtoniano, ou um material classificado como de reologia Newtoniana, é aquele cuja viscosidade aparente é igual, independente da taxa de cisalhamento a qual é submetido, em uma dada temperatura.

Ao medir a viscosidade aparente de um material em diferentes velocidades num viscosímetro rotacional, ou sob várias condições de pressão num viscosímetro capilar e as viscosidades resultantes forem equivalentes, então o material é Newtoniano, sob as condições de cisalhamento em que foi submetido.

É possível para um dado material ser caracterizado por ambos os modelos reológicos, Newtoniano e não-Newtoniano, quando medido em uma larga faixa de taxa de cisalhamento.

A relação entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação estão explicitadas a seguir:

$$\tau_{ij} = C_{ijklm} \frac{\partial u_l}{\partial x_m} \quad (2.5)$$

Sendo que  $C_{ijklm}$  é a viscosidade Newtoniana..

Observe que a viscosidade é um tensor de quarta ordem e, portanto, apresenta oitenta e um componentes. Mas, considerando que o fluido seja isotrópico, a viscosidade pode ser escrita como Chiang (2002):

$$C_{ijklm} = \lambda \delta_{ij} \delta_{lm} + \mu (\delta_{ij} \delta_{lm} + \delta_{lm} \delta_{ij}) \quad (2.6)$$

Sendo  $\mu$  e  $\lambda$  constantes.

O tensor viscoso em apenas duas incógnitas fica:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \quad (2.7)$$

Desconsiderando a expansão volumétrica associada à constante  $\lambda$ , fica:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \mu (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) = 2\mu \bar{\gamma}_{ij} \quad (2.8)$$

onde  $\bar{\gamma} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)$  é o tensor de tensões.

A partir daqui, o coeficiente  $\mu$  será adotado como a viscosidade Newtoniana. Observe-se que esta pode variar conforme outras propriedades, porém, deixou de ser um tensor de quarta ordem para ser apenas um escalar.

Por fim, através da equação de Cauchy na forma vetorial e a equação (2.7), têm-se as equações de Navier-Stokes:

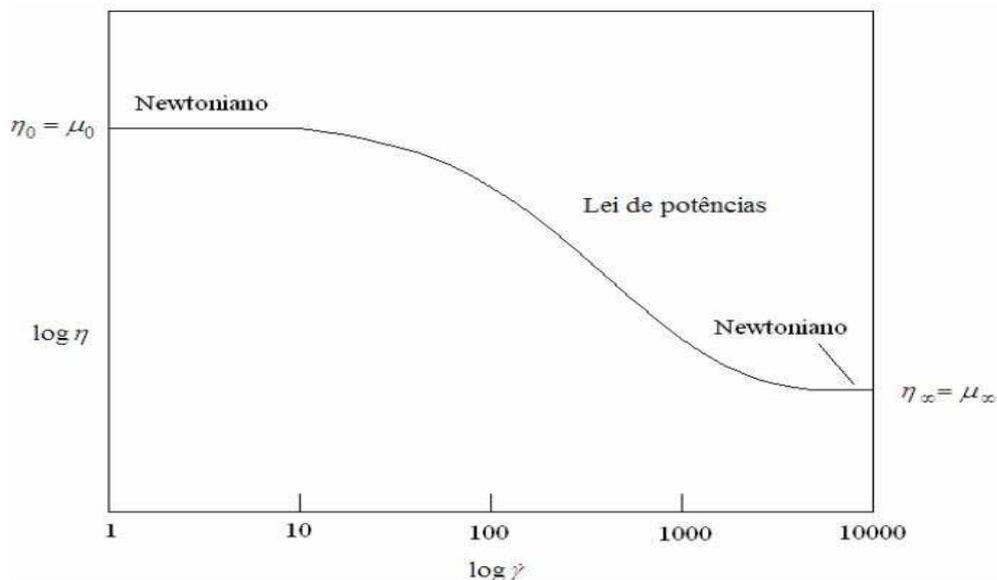
$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{g} - \nabla p + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \nabla \cdot \vec{u} \right] \quad (2.9)$$

### Sistema Não - Newtoniano

Materiais submetidos a análises de viscosimetria absoluta, onde a curva de escoamento apresenta relações não lineares entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação, caracterizam fluidos do sistema Não-Newtoniano.

Outra característica observada neste tipo de fluido é a presença de particulados assimétricos em sua composição.

No caso dos fluidos poliméricos, observa-se comportamento Newtoniano apenas para valores extremos associados à taxa de cisalhamento, para mais e para menos.



**Figura 2.3. Curva típica de viscosidade aparente ( $\eta$ ) em função da taxa de cisalhamento para um fluido polimérico. Adaptado de Bretas e D'Ávila (2000).**

Nas áreas onde o fluido não apresenta comportamento Newtoniano, dispomos de vários modelos na literatura que tentam explicar a qualidade de estado dos materiais. Estes permitem relacionar a tensão de cisalhamento com a taxa de deformação. Logo, a viscosidade será dada como  $\eta(\dot{\gamma})$ , que em ensaios de cisalhamento simples é definida como:

$$\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \quad (2.10)$$

Sendo que,  $\tau$  é o valor absoluto da tensão de cisalhamento e  $\dot{\gamma}$  é o valor absoluto da taxa de deformação.

### Viscosidade Diferencial e Aparente

Considerando a análise de materiais Não-Newtonianos, caracterizados por relações não lineares entre tensão de Cisalhamento e taxa de deformação, certos conceitos devem estar devidamente fundamentados para que o desenvolvimento das análises reológicas se estabeleça corretamente.

A viscosidade não é constante para diferentes taxas de deformação, elas podem mudar positiva ou negativamente dependendo do material, por isso deve se entender o significado de termos como viscosidade diferencial e aparente.

A partir da relação entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação, podemos observar a evolução da viscosidade de um material. Alguns materiais quando submetidos a uma taxa de deformação crescente, apresentam uma viscosidade que decai acompanhando o aumento da taxa de deformação, outros possuem comportamento contrário, dependendo do modelo reológico que o descreve, figura (2.5).

A viscosidade aparente é obtida a partir da tangente tomada com relação entre um determinado ponto de relação entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação e o centro do sistema coordenado do Reograma, figura (2.4).

Já a viscosidade diferencial é aquela obtida a partir da tangente em uma determinada faixa de deformação específica, figura (2.4).

$$\mu_{dif} = \frac{d\tau}{d\dot{\gamma}} \quad (2.11)$$

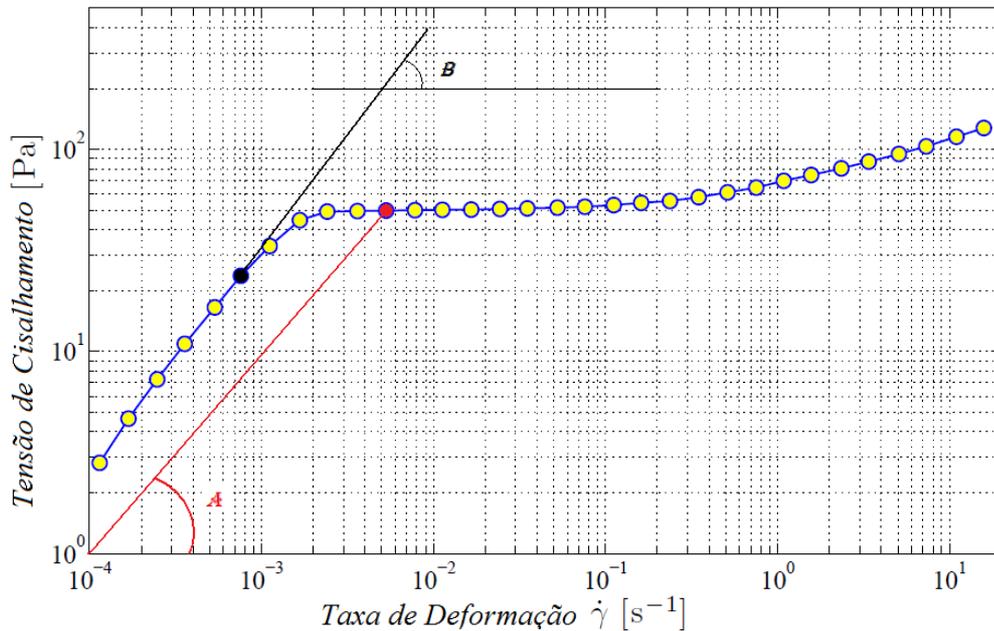


Figura 2.4. Variação da viscosidade em função da taxa de deformação para um fluido do tipo Herschel-Bulkley (viscosidade diferencial:  $\tan(B)$ ; viscosidade aparentes  $\tan(A)$ ), adaptado de Mendes e Dutra (2004).

### Curvas Reológicas

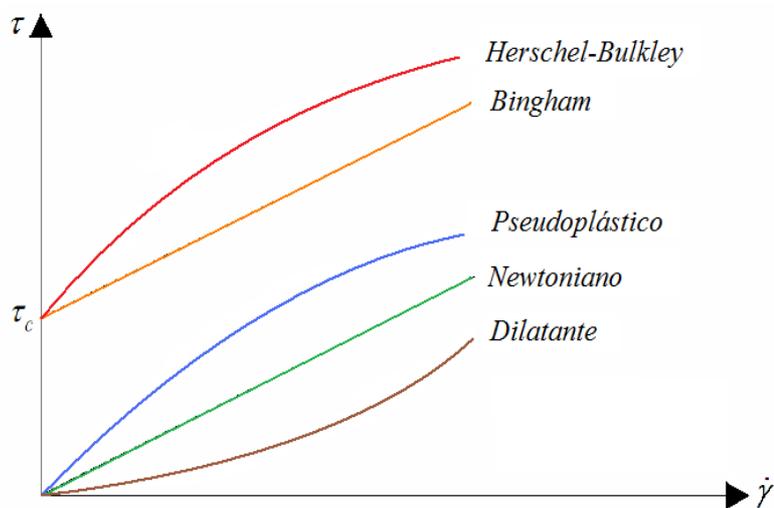


Figura 2.5. Curvas teóricas para cada modelo Reológico.

As curvas reológicas de cada modelo teórico nos permitem observar o comportamento da viscosidade aparente e diferencial, uma vez estabelecida uma deliberação correta de seus conceitos.

### **Fluidos Não – Newtonianos e seus subgrupos**

Os materiais não-Newtonianos podem ser classificados em dois subgrupos:

1. Não-Newtoniano - independente de tempo
2. Não-Newtoniano - dependente de tempo

#### **Não – Newtoniano - Independente do Tempo**

Os fluidos não-newtonianos independentes do tempo podem ser subdivididos em fluidos pseudoplásticos, fluidos dilatantes e fluidos binghamianos ou plásticos, Van Wazer (1966), Tattersall e Banfil (1983), Tanner (1988), Fox e McDonald (1998), Pandolfelli (2000); Schramm (2006). Caracterizados por não apresentar variações temporais de viscosidade a tensões constantes de cisalhamento.

Pode-se citar como exemplos deste tipo de fluido:

#### ***Fluidos Pseudoplásticos***

A viscosidade decresce com o aumento da taxa de cisalhamento (com ou sem tensão de deformação inicial).

Ao efetuar a leitura em um Viscosímetro, rotacionando de baixa para alta velocidade e voltar para a baixa e as leituras nestas mesmas velocidades coincidirem, o material é considerado pseudoplástico independente de tempo, este processo é chamado de "cisalhamento fino".

Este parâmetro deve ser levado em consideração no desenvolvimento de produtos. Ex.: maioria dos alimentos, tintas, emulsões.

### ***Fluidos Dilatantes***

A viscosidade aumenta com o aumento da taxa de cisalhamento. Se o material é medido de baixa para alta velocidade e a viscosidade aumenta com o aumento da velocidade (gradiente de cisalhamento), o material é classificado como Dilatante. Este tipo de comportamento é mais raro que a pseudoplasticidade, e observado em fluidos contendo altos níveis de defloculantes como amido de milho em água e ingrediente de balas.

### ***Viscoelásticos***

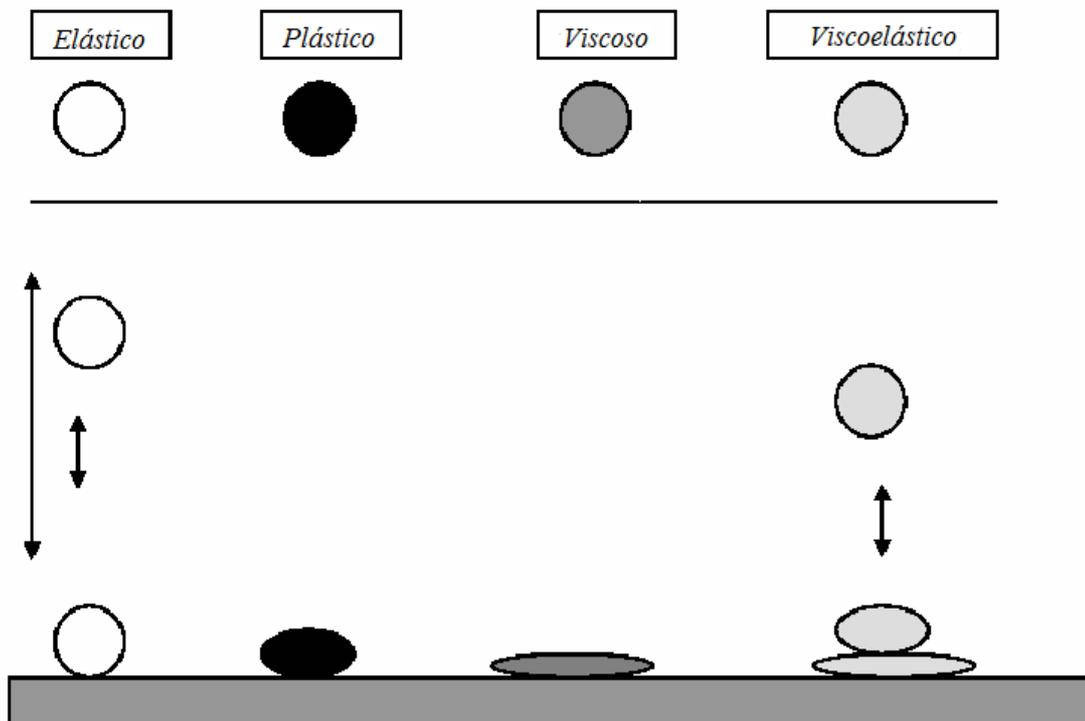
A resposta viscoelástica de certos fluidos indica que o mesmo pode apresentar qualidades de estado tanto de um sólido (elástico) até um líquido (viscoso). O modelo de Maxwell foi segundo Bretas e D'Ávila (2000) uma das primeiras tentativas de se descrever o comportamento viscoelástico dos fluidos Não-Newtonianos. Neste, considera-se um sistema em série composto de uma mola (comportamento elástico) e um fluido viscoso Newtoniano (que descreve o comportamento puramente viscoso). Uma das manifestações mais comuns deste comportamento é o relaxamento apresentado por polímeros Marinho (2005).

Um fluido pode apresentar viscoelasticidade, mais esta característica pode ser desprezada dependendo do tempo de observação do problema, o que pode ser indicado pelo número de Deborah em Balmforth e Craster (2001), Boger e Walters (1993). Outros efeitos relacionados à viscoelasticidade são os efeitos de Weissenberg e o reemaranhamento.

A medida da viscoelasticidade pode ser feita por métodos estáticos e dinâmicos, porém somente através de ensaios oscilatórios (dinâmicos), as propriedades podem ser medidas simultaneamente. A resposta dinâmica de materiais viscoelásticos pode ser usada para dar informação sobre o aspecto estrutural de um sistema em nível molecular ou prever o comportamento em escala macroscópica, desde que o ensaio seja feito dentro do intervalo de viscoelasticidade linear.

Os líquidos viscoelásticos freqüentemente contêm uma rede de moléculas tridimensional que se deformam elasticamente devido às grandes moléculas. Na deformação oscilatória de líquidos viscoelásticos, somente parte da energia aplicada é recuperada, porque uma parte da rede tridimensional tende a escoar sob tensão. Redes mais resistentes à ruptura possuem uma maior elasticidade.

O armazenamento e perda de energia associados à elasticidade e à viscosidade do material, respectivamente, podem ser ilustrados quando uma bola é batida no chão. Quanto menos elástico for o material da bola, mais baixa será a altura alcançada pela mesma. Um material viscoelástico responde como: Um sólido em intervalos de tempo curtos (alta frequência) e um líquido em intervalos de tempo longos (baixa frequência), figura (2.6).



**Figura 2.6. Croqui com teste viscoelástico em bolas com diferentes materiais.**

### ***Plásticos***

Este tipo de fluido comporta-se como sólido em condições estáticas ou de repouso e após aplicação de certa força começa a fluir.

Esta força aplicada denomina-se tensão crítica de deformação. Após começar a fluir o comportamento pode ser Newtoniano, pseudoplástico ou dilatante. Ex: Catchup.

### ***Plástico de Bingham***

Se o material apresenta forças internas que o impeçam de fluir, até atingir a tensão de deformação inicial e em seguida começa a fluir apresentando um comportamento newtoniano este material é classificado como um Plástico de Bingham.

### ***Não – Newtoniano - Dependente do Tempo***

Alguns fluidos apresentam mudança na viscosidade em função do tempo sob condições constantes de tensão de cisalhamento. Há duas categorias a serem consideradas.

### ***Tixotropia***

Fluidos que decrescem a viscosidade com o tempo enquanto são submetidos a uma tensão de cisalhamento constante.

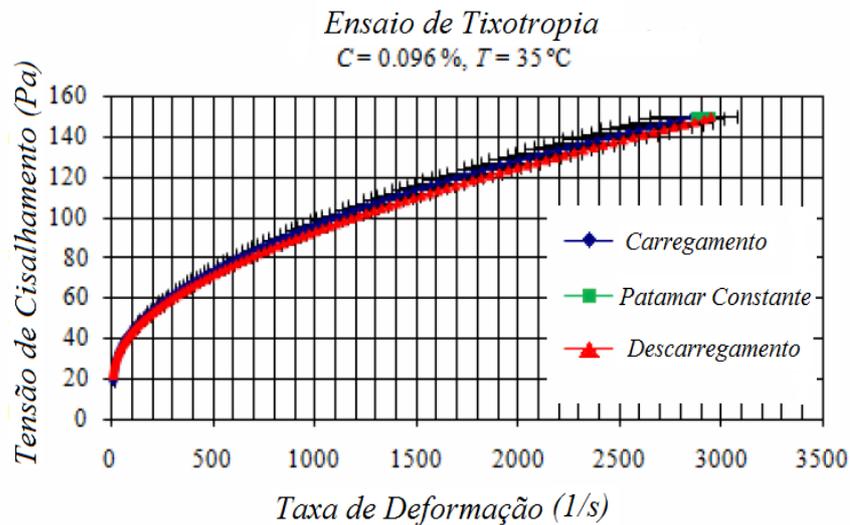
A determinação deste parâmetro é comumente obtida a partir de testes de histerese, com carregamento seguido de uma tensão de cisalhamento constante e descarregamento subsequente. Medidas de viscosidade num curso de velocidade de alta para baixa e vice-versa, obtendo nas leituras ascendentes valores diferentes dos obtidos nas leituras descendentes, o material é classificado como sendo tixotrópico e dependente do tempo.

Uma importante característica dos materiais tixotrópicos é a sua sempre possível reversibilidade, a viscosidade aparente de um material em estado gel diminui quando submetido a uma taxa de cisalhamento constante, partindo assim para o estado sol, contudo, tal viscosidade aparente é recuperada se um tempo de relaxamento for oferecido ao material.

No caso de polímeros a tixotropia é causada pela quebra ou formação de aglomerados, géis ou ainda ligações químicas ou físicas das macromoléculas, como explicitado por Bretas e D'Ávila (2000). Deve-se tomar cuidado para não haver confusão entre os termos tixotropia e histerese.

A diferença conceitual entre tixotropia e histerese, está na associação com o tempo. Tixotropia é associada ao tempo, mas histerese não. Observa-se que, apesar da diferença entre

os dois conceitos, a tixotropia pode, em alguns casos, ser determinada em ensaios de histerese, figura (2.7).



**Figura 2.7. Exemplo de teste de histerese com gelificante Carbopol 940, Minussi [2006].**

### *Reopexia*

Fluidos aumentam a viscosidade com o tempo a uma taxa de cisalhamento constante. A tixotropia e a reopexia podem ocorrer em combinação com as diferentes qualidades de estado do campo de escoamento.

## **2.5. Modelos Reológicos**

Uma vez entendido os sistemas reológicos, o segundo passo está em analisar os modelos existentes dentro de cada sistema.

A ciência reológica dos materiais como ramo da mecânica dos fluidos, se preocupa em estudar as propriedades físicas que influenciam no transporte de quantidade de movimento dos fluidos, quando solicitados por uma tensão de cisalhamento. Diversos modelos foram e ainda são desenvolvidos para descrição da qualidade de estado dos fluidos, muitos levam em

conta efeitos como a Reopexia e Tixotropia assim como a viscoelasticidade no caso de sistemas Não-Newtonianos.

Existem várias formas de se escrever a equação constitutiva de um fluido segundo BIRD (1987). A forma teórica leva em conta a forma e estrutura das moléculas, criando uma teoria cinética da microestrutura do fluido, enquanto que a fenomenológica procura representar a forma como essa microestrutura afetará a dinâmica do fluido. A forma fenomenológica modificada, que procura descrever o comportamento do fluido como sendo igual em todas as direções só serve, portanto, para fluidos isotrópicos.

Tem-se ainda a forma empírica, que ajusta uma curva aos dados experimentais obtidos em testes de viscosimetria absoluta.

### **Modelo Newtoniano**

Relação linear entre tensão de cisalhamento e taxa de deformação caracterizam este modelo.

A equação que descreve o modelo é:

$$\bar{\tau} = 2\eta(\bar{\tau}, T, C)\bar{\dot{\gamma}} \quad (2.12)$$

Onde C é a concentração e T a temperatura.

Outra forma de se escrever:

$$\bar{\tau} = \tau_c \frac{\bar{\dot{\gamma}}}{\sqrt{-\dot{\gamma}_H}} + f(\dot{\gamma}_H)\bar{\dot{\gamma}} \quad (2.13)$$

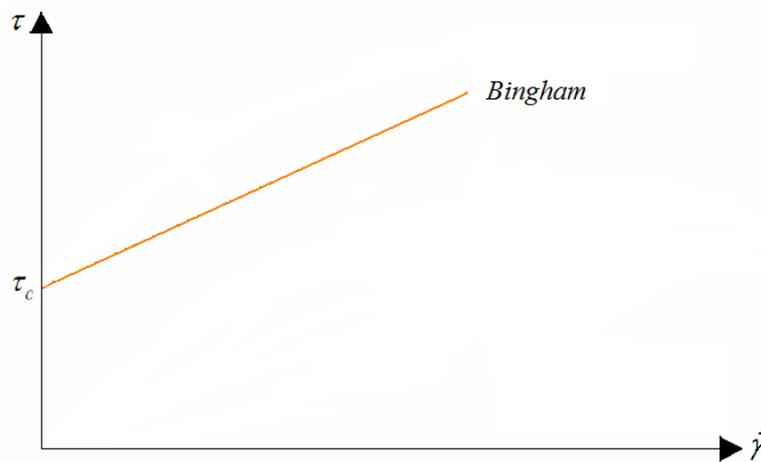
em que  $\dot{\gamma}_H$  é o segundo invariante do tensor  $\bar{\dot{\gamma}}$  e  $f(\dot{\gamma}_H)$  é uma função positiva contínua de  $\dot{\gamma}_H$

**Modelo de Bingham**

Reograma caracterizado por tensão crítica seguido de uma relação linear entre tensão cisalhante e taxa de deformação, ou seja, o modelo Newtoniano com limite de rigidez inicial.

A equação que descreve o modelo é:

$$\bar{\tau} = \tau_c \frac{\bar{\dot{\gamma}}}{\sqrt{-\dot{\gamma}_H}} + 2\mu\bar{\dot{\gamma}} \quad (2.14)$$



**Figura 2.8. Reograma para fluido Binghamiano.**

**Modelo Exponencial - Power Law**

Apresenta em sua formulação matemática o índice “n” chamado índice de escoamento Power-Law, com tensão crítica nula ( $\tau_c = 0$ ).

A equação que descreve o modelo é:

$$\bar{\dot{\gamma}} = \tau_c \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_H})^{1-n}} \quad (2.15)$$

$$\bar{\tau} = \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_H})^{1-n}} \bar{\dot{\gamma}} \quad (2.16)$$

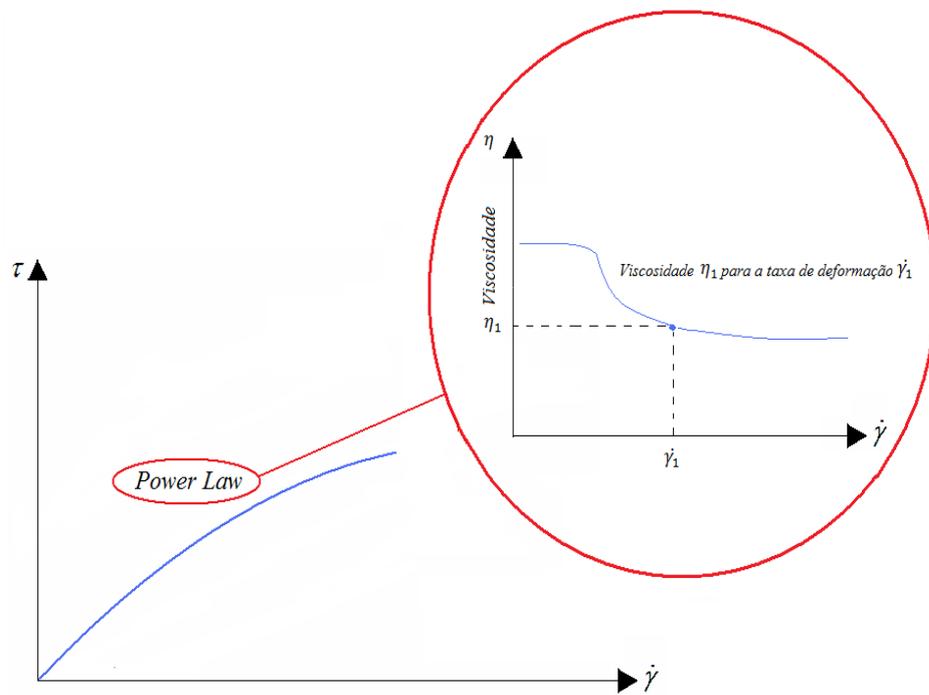


Figura 2.9. Reograma para fluido Power-Law com configuração Pseudoplástica ( $n < 1$ ).

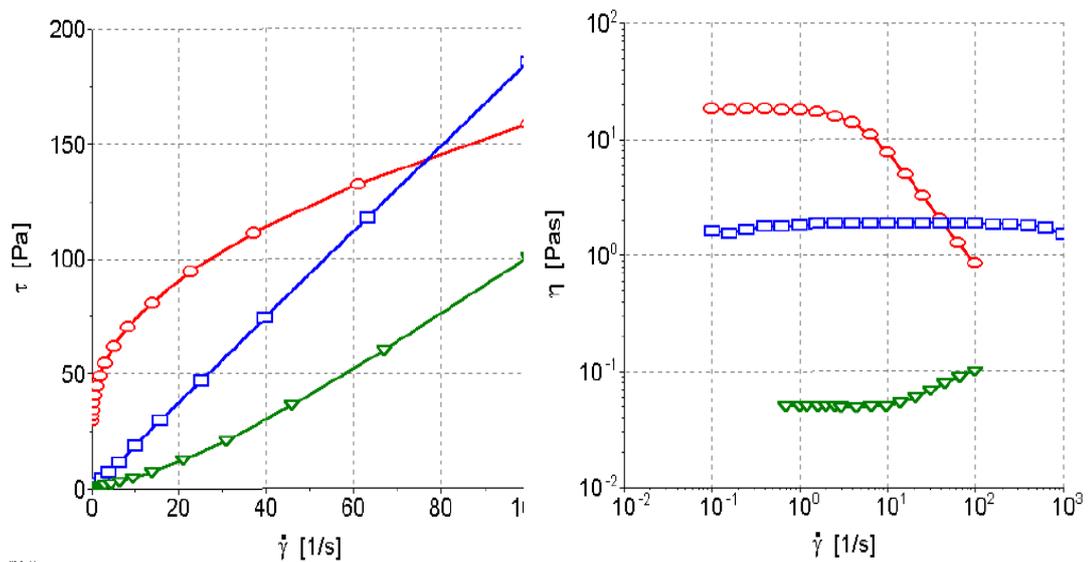


Figura 2.10. Variações do modelo Power Law com dependência do índice  $n$  (coeficiente Power law), sendo a curva azul, um fluido com índice  $n = 1$  (Newtoniano).

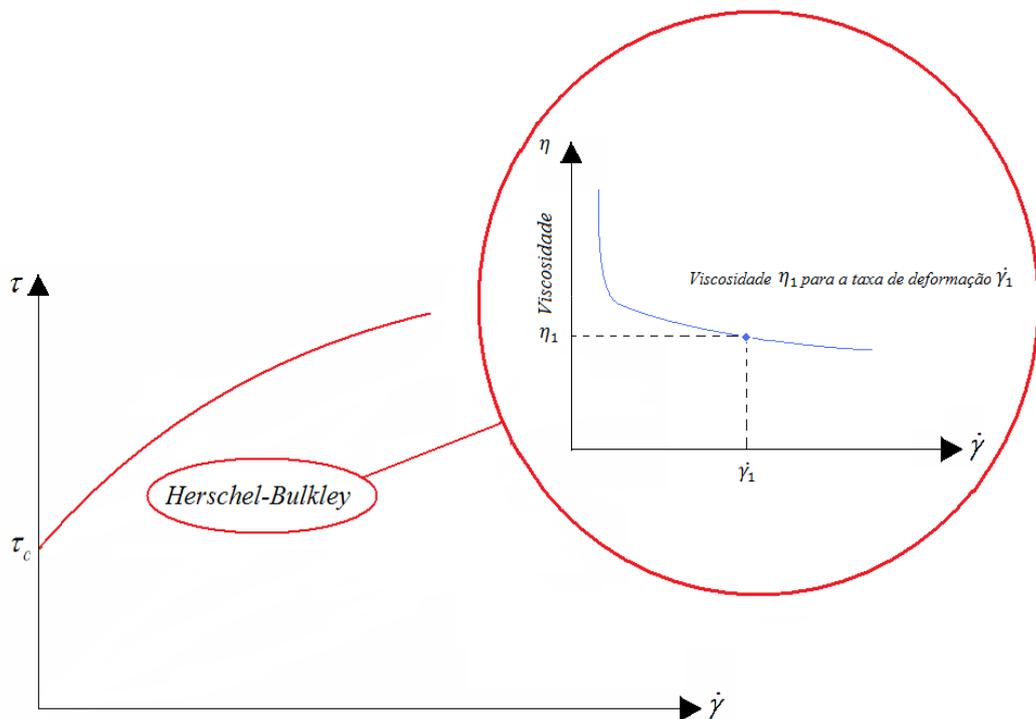
**Modelo de Herschel-Bulkley**

O modelo de Herschel-Bulkley (1926) é adaptado para relações não lineares observáveis na curva de escoamento Ostwald (1925), Waele (1923), onde  $n$  é o índice power-law

Na maioria dos casos práticos  $n < 1$ . Se  $n = 1$  o modelo de Herschel-Bulkley é equivalente ao modelo de Bingham. Se  $n = 1$  e  $\tau_c = 0$  o fluido é newtoniano.

$$f(\dot{\gamma}_H) = \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_H})^{1-n}} \tag{2.17}$$

$$\bar{\tau} = \tau_c \frac{\bar{\dot{\gamma}}}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_H})} + \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_H})^{1-n}} \bar{\dot{\gamma}} \tag{2.18}$$



**Figura 2.11. Reograma para fluido de Herschel Bulkley.**

Existem ainda outros modelos que em cisalhamento simples ficam:

**Modelo de Casson**

$$\sqrt{\tau} = \sqrt{\tau_c} + \sqrt{\mu_c \left(\frac{du}{dy}\right)} \tag{2.19}$$

Sendo que  $\mu_c$  é uma constante.

A existência de tensão crítica pode introduzir problemas principalmente em simulações numéricas. Assim, alguns modelos foram propostos para tentar reduzir a magnitude desses problemas. Trata-se de regularizações de outros modelos, como o de Herschel-Bulkley. Com no modelo de Papanastasiou, relatado em Alexandrou et al.(2005),

$$\tau = \left\{ \tau_c \left[ 1 - e^{\left(-\mu_p \left(\frac{du}{dy}\right)\right)} \right] \left(\frac{du}{dy}\right)^{-1} + \mu_n \left(\frac{du}{dy}\right)^{n-1} \right\} \tag{2.20}$$

sendo que  $\mu_p$  é uma constante.

Este modelo representa uma regularização para fluidos com tensão crítica com baixas taxas de deformação.

**Modelo de Ellis**

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\tau}{\tau_1}\right)^{\frac{\theta-1}{2}}} \tag{2.21}$$

sendo  $\eta_0$  é a viscosidade Newtoniana e  $\tau_{\frac{1}{2}}$  o valor da tensão referente à metade do valor de

$$\eta_0 \text{ e } \theta - 1 \text{ a inclinação da curva } \log \eta = \frac{\eta_0}{\eta - 1} \times \log \tau = \frac{\tau}{\tau_{\frac{1}{2}}}.$$

**Modelo de Carreau–Yasuda**

$$\frac{\eta - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = \left[ 1 + \left( \mu_y \left( \frac{du}{dy} \right)^2 \right)^{\frac{n-1}{2}} \right]^{-\frac{n-1}{2}} \quad (2.22)$$

sendo  $\eta_{\infty}$  a viscosidade do segundo *plateau* Newtoniano e  $\mu_y$  é uma constante.

**Modelo de Cross**

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left( \frac{\eta_0}{\tau^*} \right)^{1-n}} \quad (2.23)$$

sendo  $\tau^*$  a tensão para a qual ocorre a transição entre a região Newtoniana e a da Lei de Potência.

**Modelo Viscoplastico Colisionar de Chen**

Caracterizado por fluxos hiperconcentrados “Debris Flows”.

$$\tau = C \cos \phi + P \sin \phi + \mu_1 \left( \frac{du}{dy} \right)^n \quad (2.24)$$

Característica da velocidade:

$$U = \frac{\eta}{\eta+1} \left( \frac{\rho^* g H \sin \theta}{\mu_1} \right)^{\frac{1}{n}} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{y}{H} \right)^{\frac{\eta+1}{n}} \right] \quad (2.25)$$

## 2.6. Caracterização do Carbopol 940

Geralmente, as substâncias formadoras de géis são polímeros que quando dispersos em meio aquoso assumem conformação doadora de viscosidade à preparação. Logo, pode-se definir o gel como uma preparação semi-sólida composta de partículas coloidais que não sedimentam (ficam dispersas).

Polímero é uma palavra derivada do grego, onde “polys” significa muitos e “meros” significa partes. Portanto, os polímeros são basicamente substâncias de alto peso molecular, também chamadas de macromoléculas.

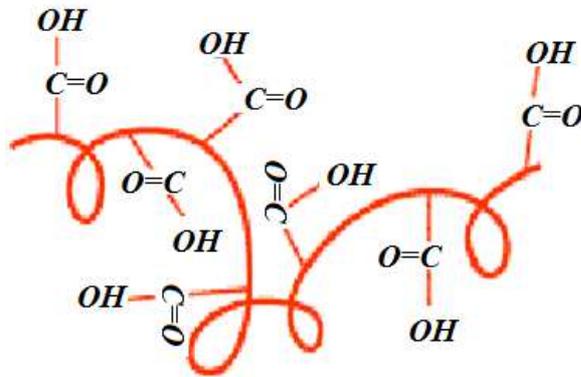
Estas substâncias são provenientes do encadeamento de moléculas menores.

De acordo com as características dos polímeros, os géis podem apresentar natureza iônica ou não-iônica. Os géis de natureza não-iônica possuem estabilidade em ampla faixa de pH, tornando-se possível a veiculação de substâncias de caráter ácido, como os alfa-hidroxiácidos.

Já os de caráter aniônico são pH-dependentes, ou seja, apresentam-se estáveis em pH neutro ou próximo do neutro.

Dentre as matérias primas usadas na preparação de géis, tem-se destacado o ácido carboxivinílico “Carbopol”, que apresenta características reológicas impares que se enquadram no escopo deste estudo.

O Carbopol é o nome comercial de uma família de polímeros, poliacrílicos, poliacrílicos “crosslink” e ácidos poliacrílicos, muito usados como espessantes. No caso do Carbopol 940, trata-se de um ácido poliacrílico, figura (2.12). Uma grande gama de propriedades reológicas podem ser obtidas variando-se o pH, a concentração e o solvente utilizado.



**Figura 2.12. Molécula de Carbopol.**

Segundo Boger e Walters (1993), as soluções de Carbopol 940 são geralmente inelásticas e pseudoplásticas. Segundo a Noveon (2002) trata-se de soluções pseudoplásticas com tensão crítica, cujo modelo reológico usado poderia ser, por exemplo, o de Ellis. Encontram-se também na literatura, modelos de Herschel–Bulkley, Debiene (2000) e Lachamp (2003); a Lei de Potência é proposta por Lin e Ko (1995). Labanda et al. (2004) propõem o modelo de Lei de Potência, porém admitem tensão inicial. Barnes (1998) propõe o uso do modelo de Cross.

Lin e Ko (1995) mostram que para soluções aquosas neutralizadas de Carbopol 934 (comportamento similar ao Carbopol 940), ocorrem variações da viscosidade aparente com a temperatura seguindo o modelo tipo Lei de Potências.

Observa-se ainda que, quanto maior a concentração, para a mesma temperatura, a viscosidade aumenta e que, quanto maior a temperatura, para a mesma concentração, a viscosidade diminui (resultados esperados). Nota-se que, para concentrações maiores, a mesma variação de temperatura promove uma menor variação de viscosidade do que para concentrações maiores.

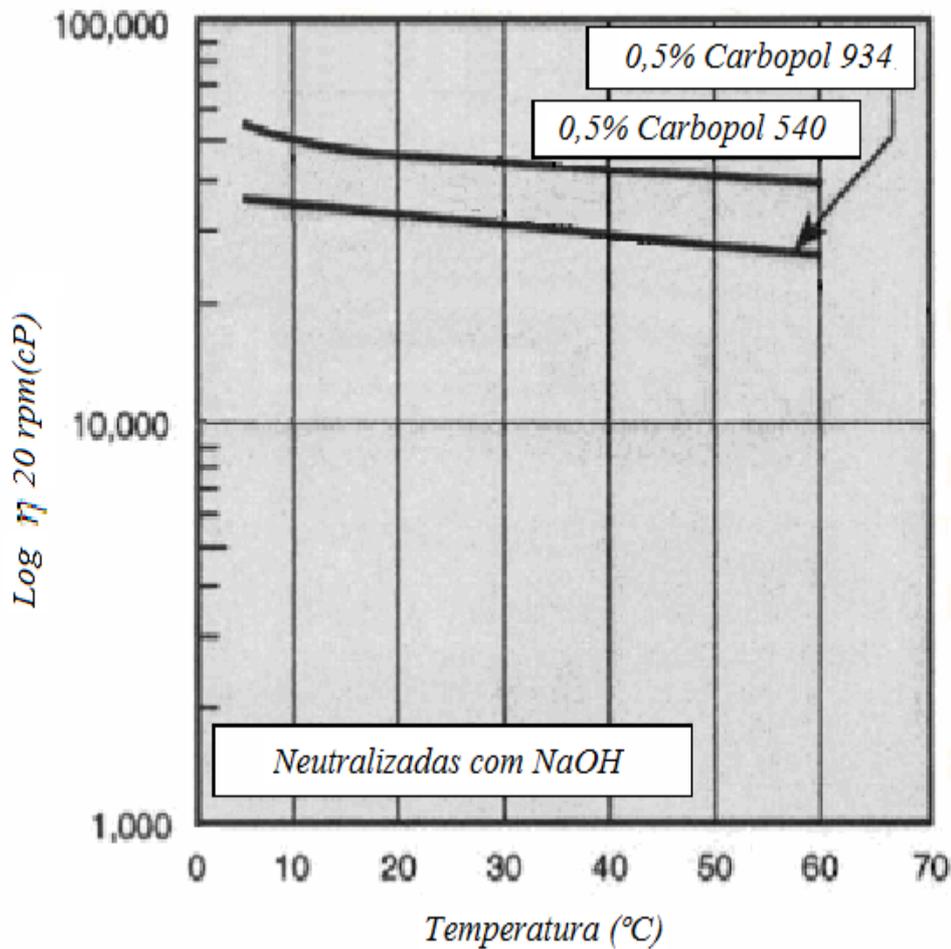
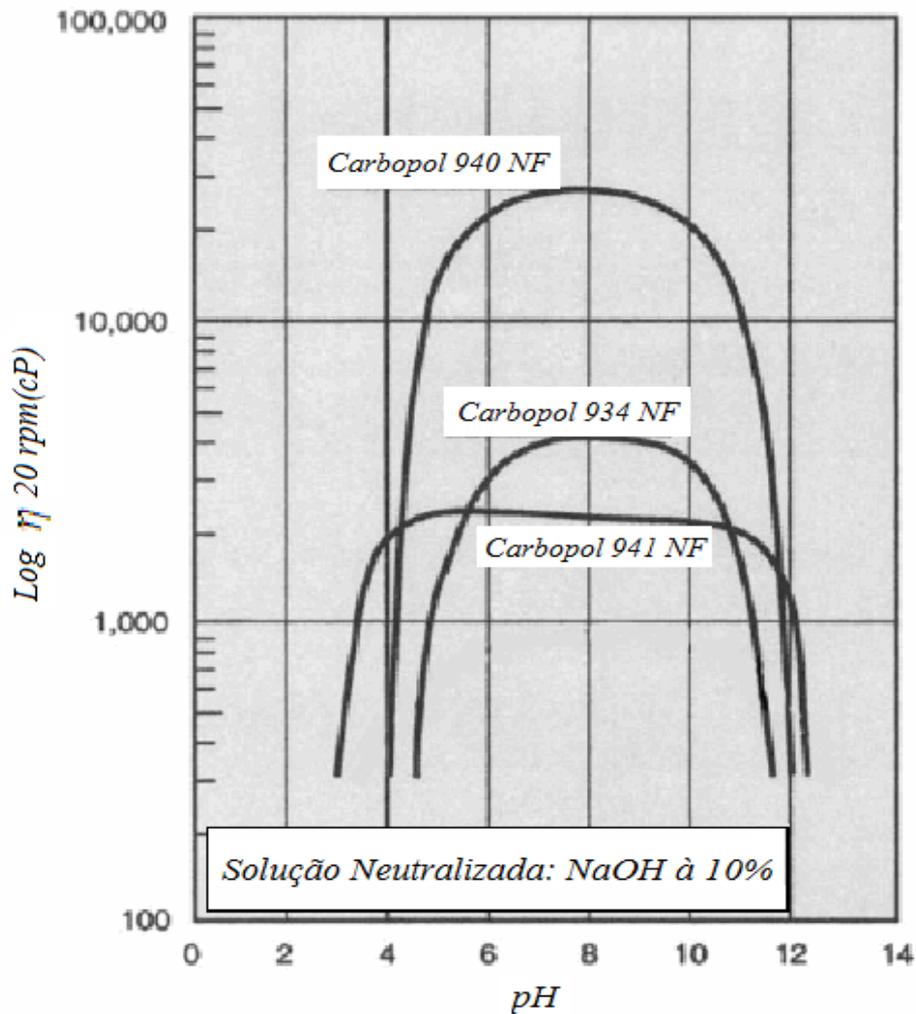


Figura 2.13. Efeito térmico sobre duas soluções de Carbopol, adaptado de Noveon[2002].

Em Noveon (1997) é mostrado que a faixa que promove a maior viscosidade para o Carbopol 940 é quando este se encontra próximo à neutralização, ou seja, com um potencial hidrogeniônico próximo a 7,0. Observa-se ainda, que as soluções aquosas de Carbopol são muito sensíveis à variação do pH. De fato, o Carbopol só atinge suas verdadeiras propriedades quando devidamente neutralizado.



**Figura 2.14.** Efeito do pH sobre três soluções de Carbopol à 0,2%, adaptado de Noveon[2002].

Conforme demonstrado em Noveon (1997), Lin e Ko (1995) e Debiane (2000), o aumento da concentração de Carbopol leva a um aumento da viscosidade.

A seguir, temos valores reológicos encontrados por Lachamp (2003) para solução neutralizada de Carbopol 940 e de Robert e Bane (2001) para o Carbopol 980, uma versão menos tóxica e que apresenta maior facilidade de confecção que o gelificante obtido do ácido carboxivinílico, o Carbopol 940.

**Tabela 2.1. Parâmetros reológicos de Herschel Bulkley para gelificante Carbopol 940 – Lachamp (2003).**

<i>Concentração</i>	<i>0,15%</i>	<i>0,16%</i>	<i>0,18%</i>	<i>0,19%</i>
<i>K(Pa.s<sup>n</sup>)</i>	5,12	4,47	7,47	7,71
<i><math>\tau_c</math> (Pa)</i>	1,28	1,35	1,6	1,7
<i>n</i>	0,55	0,61	0,57	0,57

**Tabela 2.2. Parâmetros reológicos de Herschel Bulkley para gelificante Carbopol 980 – Robert e Barnes (2001).**

<i>Concentração</i>	<i>0,06%</i>	<i>0,07%</i>	<i>0,08%</i>	<i>0,1%</i>
<i>K(Pa.s<sup>n</sup>)</i>	0,12	0,345	0,67	1,4
<i><math>\tau_c</math> (Pa)</i>	0,3	1,25	3,0	10
<i>n</i>	0,60	0,55	0,5	0,5

Lachamp (2003) constatou valores de tensão crítica abaixo da expectativa em comparação com os valores de Robert e Barnes, porém foi constatado por ambos a adoção do modelo reológico de Hurschel Bulkley como o modelo reológico mais representativo para os gelificantes Carbopois 940 e 980.

## 2.7. Metodologia de preparação

A metodologia de preparação do gelificante Carbopol 940 deve seguir uma série de normas para a obtenção de um produto final com as características reológicas que o tornam ótimo para o estudo com os fins já explicitados.

A priori deve-se entender que a manipulação de produtos e equipamentos laboratoriais requer um experimentador com pré-requisitos na área empírica, e neste caso, principalmente na área química, uma vez que a confecção do gelificante é desenvolvida em sua totalidade em laboratórios químicos.

A preparação é iniciada com a escolha do veículo da solução, neste caso utiliza-se a água deionizada, que é uma água com pré-tratamento por destilação e para então ser submetida à deionização. A deionização é o processo de remoção total dos íons presentes na água, através de resinas catiônicas e aniônicas; é a água que teve sua carga elétrica neutralizada pela remoção ou adição de elétrons. Esse processo remove da água nitratos, cálcio e magnésio além de cádmio, bário, chumbo e algumas formas de rádio.

A água deionizada é amplamente empregada na indústria química e em produção farmacêutica.

Com o veículo em mãos o polímero Carbopol 940, que é fornecido na forma de um pó branco extremamente fino e leve deve ser polvilhado sobre a água, lembrando que o controle térmico do ambiente de preparação deve ser rigoroso, preferencialmente mantido na faixa dos 25 °C.

Enquanto polvilhada a preparação deve ser mexida manualmente, não deve ser utilizado nenhum tipo de mixer ou agitador magnético, pois isso pode gerar a quebra das moléculas e diminuir a viscosidade permanentemente Noveon (1993). Este estágio deve ser executado com o auxílio de um equipamento de banho Maria, fornecendo um equilíbrio térmico inicial em 70°C para a solução, facilitando o pré-dissolvimento.

As proporções mássicas de água e Carbopol 940 devem ser obviamente pré-determinadas obedecendo a normas de preparação que serão discutidas de maneira plena posteriormente.

Após a mistura manual do polímero no veículo, a solução deve ser tampada e deixada em descanso “overnight” para uma pré-dissolução acentuada, sempre protegendo a mesma de luminosidade intensa conforme salientado por Barry e Meyer (1979), deixando assim a preparação mais homogênea, evitando a formação de bolhas e micelas típicas de manipulações mal executadas.

Com o descanso estabelecido a etapa de pré-dissolução é completada e assim a preparação deve ser então neutralizada, para a quebra dos grupos carboxilas e assim a obtenção de espessamento e transparência típica dos Carbopois. Para tanto utilização uma base inorgânica NaOH cuja proporção mássica é estabelecida através de um relação direta com o a proporção do Carbopol.

Uma vez neutralizada a preparação estará completa e assim tem-se em mãos um gelificante espesso, transparente e que possui o modelo reológico descrito pela Noveon (2000).

### ***Tensão crítica***

O Carbopol 940 apresenta valores moderados de tensão crítica segundo estudos desenvolvidos por Debiante (2000), Noveon (2002), o modelo reológico que mais se adapta é o de Herschel-Bulkley. Para a definição correta de todos os parâmetros reológicos, amostras do material serão controladas rigorosamente e ensaiadas.

### ***Tixotropia***

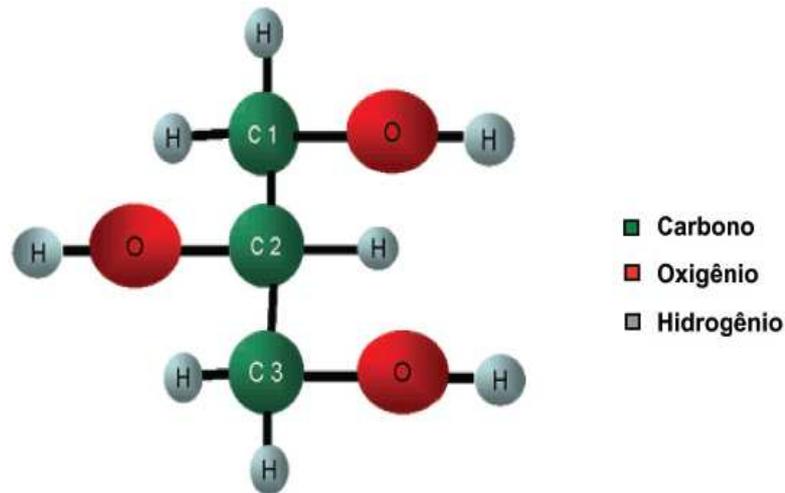
Em Labanda et al. (2004), Barry e Meyer (1979) é apontada uma tixotropia em soluções aquosas de Carbopol 940. Porém, neste último considera-se que este comportamento é desprezível, fato também citado em Noveon (2002). Apesar disso, segundo relatado por Møller et al. (2006), fluidos que apresentam aparente tensão crítica, possuem tixotropia. Em análises reométricas desenvolvidas neste trabalho, verificou-se também que a tixotropia pôde ser desconsiderada.

## **2.8. Caracterização do Glicerol**

O glicerol (1,2,3 propanotriol ou glicerina) foi descoberto pelo químico Sueco Carl Wilhelm Scheele em 1779 durante o processo de saponificação de azeite de oliva (aquecimento de uma mistura de litargírio (PbO) com óleo de oliva). Pasteur (1858) também observou sua formação como um subproduto da fermentação alcoólica, em concentrações de 2,5 - 3,6% do conteúdo de etanol, podendo ser o glicerol o segundo maior produto formado durante a fermentação alcoólica.

### ***Características***

O glicerol é um poliálcool de fórmula estrutural apresentada na Figura (2.14), o qual está presente em diferentes espécies, incluindo protistas unicelulares e mamíferos.



**Figura 2.15. Estrutura química do Glicerol.**

É difícil encontrarmos o glicerol na sua forma “livre” nesses organismos, pois geralmente se encontra como um triglicerídeo combinado como, por exemplo, a ácidos graxos como os ácidos: oléico, palmítico e esteárico. Grandes quantidades de glicerol podem ser encontradas também em óleos ou azeites como o de coco, dendê, soja, algodão e oliva, bem como em gorduras de animais como a banha de porco e sebo.

O termo glicerol aplica-se somente ao composto puro, 1,2,3 propanotriol, enquanto o termo glicerina aplica-se à purificação de compostos comerciais que contém normalmente quantidades maiores ou iguais a 95% de glicerol.

O glicerol, desde 1959, é reconhecido como substância atóxica, permitido como aditivo em alimentos, e também considerado como substância GRAS “Generally Regraded as Safe” pelo “Food and Drug Administration” dos Estados Unidos.

Estudos mostraram que a administração de 5% de glicerol em animais e humanos não causou toxicidade ou efeitos indesejáveis nestes organismos, relata-se apenas que uma leve irritação da pele pode ocorrer com o contato de glicerol não diluído, devido à retirada de água da pele em função de seu forte poder higroscópico.

Dentre as características físico-químicas do glicerol (Tabela 2.3) destacam-se as propriedades de ser um líquido oleoso, incolor, viscoso e de sabor doce, solúvel em água e álcool em todas as proporções e pouco solúvel em éter, acetato de etila e dioxano e insolúvel

em hidrocarbonetos. Devido à combinação de propriedades físico-químicas como não toxicidade, ausência de cor e odor, o glicerol é uma substância com grande variedade de aplicações.

**Tabela 2.3 – Dados físico-químicos do Glicerol.**

<i>Massa molar</i>	92,09 g/mol
<i>Densidade (glicerol 100%) - 25°C</i>	1.262 Kg/m <sup>3</sup>
<i>Viscosidade - 20°C</i>	939 cps
<i>Ponto de ebulição – 101,3 KPa</i>	290°C
<i>Ponto de fusão</i>	18°C
<i>Ponto de inflamação</i>	177°C
<i>Tensão superficial – 20°C</i>	63,4 mN/m
<i>Calor específico (glicerol 99.94%) 26°C</i>	2,435 J/g
<i>Calor de evaporação 55°C</i>	88,12 J/mol
<i>Calor de dissolução</i>	5,8 KJ/mol
<i>Calor de formação</i>	667,8 KJ/mol
<i>Condutividade térmica</i>	0,28 W/(m.K)

Na indústria de alimentos o glicerol é utilizado como aditivo alimentar em função de suas propriedades estabilizantes, antioxidantes, sequestrantes, emulsificantes e umectantes.

Como produto farmacêutico sua aplicação se deve à sua alta viscosidade, o que permite sua utilização em xaropes. Também, é considerado como um agente crioprotetor em microrganismos, pois não permite a formação de cristais de gelo na célula, mantendo a estabilidade da parede celular e vitalidade da mesma durante o processo de congelamento para sua conservação.

Além das aplicações na indústria de alimentos, terapêuticas e em diagnósticos, o glicerol é ainda empregado para produção de resinas e poliésteres devido à sua reatividade polifuncional e também como lubrificante na indústria têxtil. Tem também um importante papel no processamento do tabaco, pois este ajuda a manter a umidade prevenindo o ressecamento deste produto, além deste poder ser utilizado como solvente de muitos compostos.

Recentemente novas aplicações do glicerol vêm sendo descobertas, como seu emprego como substrato para fermentações bacterianas com a finalidade de se obter produtos de alto valor agregado como polímeros biodegradáveis, raminolipídeos, biosurfactantes, dentre outros.

## **2.9. Produção do glicerol**

O processo de produção do Glicerol se desenvolve tradicionalmente por saponificação de óleos, gorduras ou sebos através de lixívias alcalinas, sendo obtido como subproduto na fabricação de sabão, no entanto, esse processo não tem sido mais utilizado a nível industrial devido à substituição do sabão por detergentes. A sua obtenção pode ser estabelecida a partir de derivados do petróleo por cloração a altas temperaturas, mas devido à formação de subprodutos prejudiciais ao meio ambiente essa rota entrou em declínio. Outra via de sua obtenção é a hidrogenação da sacarose na presença de um catalisador a alta pressão e temperatura.

Devido às diferentes possibilidades de aplicações do Glicerol na indústria, vem aumentando o número de pesquisas para a sua produção por via fermentativa a partir de fontes renováveis de energia, cujo. No processo fermentativo a matéria-prima empregada incide apreciavelmente nos custos de fabricação do Glicerol.

## CAPÍTULO 3

---

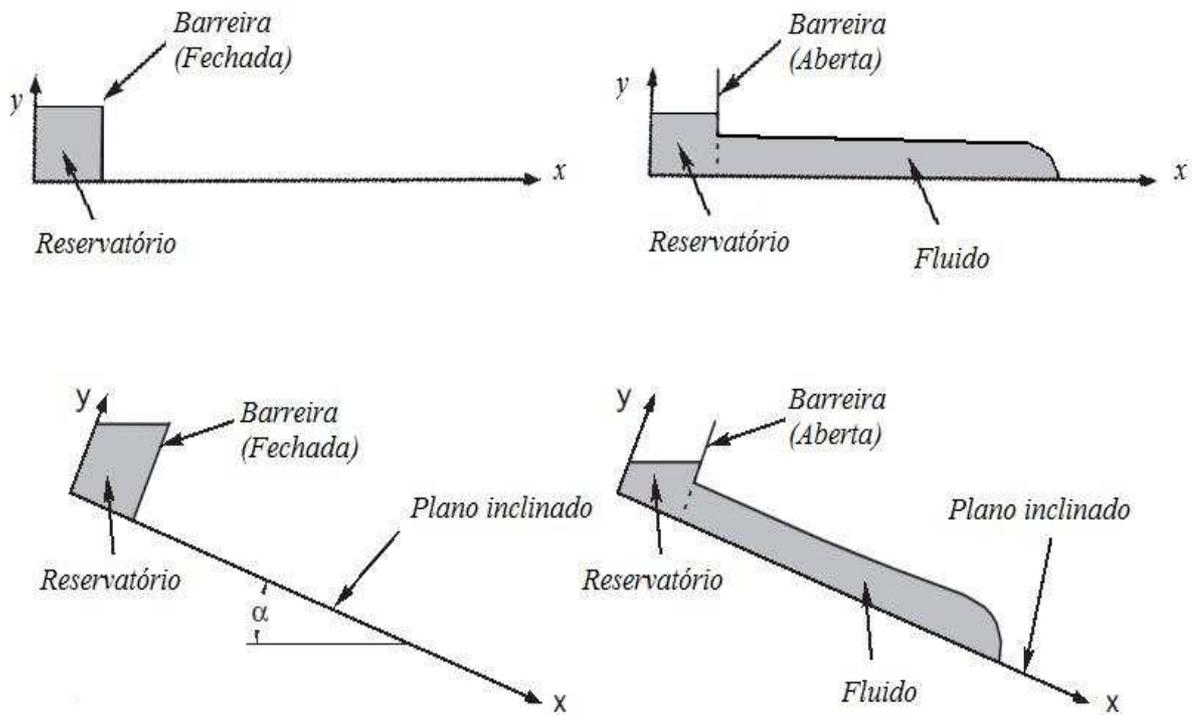
### Rompimento de Barreira

---

#### 3.1. Problema tipo

A análise do problema tipo “Dam Break”, rompimento de barreira, nos permite investigar, a partir de uma configuração específica de fluido de trabalho, os fenômenos associados à variação da qualidade de estado de líquidos inicialmente represados submetidos a uma liberação abrupta. Uma simulação representativa do problema seja empírica ou numérica, deve transparecer a seguinte configuração: Um determinado volume do líquido de trabalho com suas especificações reológicas devidamente estabelecidas deve ser colocado em um reservatório na extremidade de um plano, podendo existir ou não o fator declividade, figura (3.1). Uma comporta é então utilizada para simular o efeito de liberação instantânea “rompimento” através da ação de abertura. As configurações iniciais deste sistema dinâmico (volume do fluido, características reológicas, densidade, etc.) e as condições-limite (fator declividade com seu ângulo, rugosidade superficial do plano, topografia) podem ser facilmente impostas.

O foco almejado está em observar os efeitos do fluxo gravitacional do fluido de trabalho para o problema “tipo” especificado, em condições ambientais prescritas extremamente controladas.



**Figura 3.1. Modelo do problema tipo Rompimento de Barreira com duas configurações para o fator declividade, com os respectivos estados: inicial e final para a barreira, adaptado de Cochard (2004).**

Um grande número de modelos baseados na hipótese de águas rasas são atualmente utilizados para descrever fluxos naturais. A propagação de líquidos abertos “superfície livre”, confinados em uma determinada área, como no caso de inundações decorrentes de precipitações extremamente elevadas, é um exemplo segundo Hogg e Pritchard (2004), inundações com transporte de sedimentos Pritchard (2005), avalanchas torrenciais Bartelt et al. (1999)], fluxos hiperconcentrados com Iverson (1997), Huang e Garcia (1997), lava vulcânica com Griffiths (2000) e outras que se encaixam neste perfil.

As equações de águas rasas foram inicialmente elaboradas por Saint-Venant (1871) para calcular a propagação de líquidos em superfície livre, no caso, os fluxos dos rios. O seu uso foi gradualmente aprimorado incorporando, por exemplo, o efeito de ondas induzidas pela ruptura de uma represa Ritter (1892).

O caráter multifásico dos escoamentos com superfície livre apresenta um notório problema referente à posição da interface entre as fases. Para eliminar este problema, faz-se

uso da hipótese de águas rasas “Shallow-Water”, que pode ser utilizada quando a dimensão da lâmina de fluido é muito pequena com relação ao comprimento característico “long domain problems”.

O sistema “Shallow-Water” ou Saint-Venant é obtido através da integração vertical das equações de Navier-Stokes como demonstrado em Thual (2003):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial h}{\partial x_1} + \bar{u}_3 \frac{\partial h}{\partial x_3} + h \left( \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_3} \right) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} + \bar{u}_3 \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3} + g \cos\theta \frac{\partial h}{\partial x_1} = g \sin\theta - \frac{C_f \bar{u}_1 |\bar{u}_1|}{2 h} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_1} + \bar{u}_3 \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_3} + g \cos\theta \frac{\partial h}{\partial x_3} = - \frac{C_f \bar{u}_3 |\bar{u}_3|}{2 h} \quad (3.3)$$

Sendo:

$h$  : distância do fundo até a superfície livre;

$\bar{u}_1$  : componente horizontal médio na vertical da velocidade,  $\bar{u}_1 = u_1(x_1, x_3, t)$ ;

$\bar{u}_3$  : componente transversal médio na vertical da velocidade,  $\bar{u}_3 = u_3(x_1, x_3, t)$ ;

$\theta$  : inclinação da superfície, e

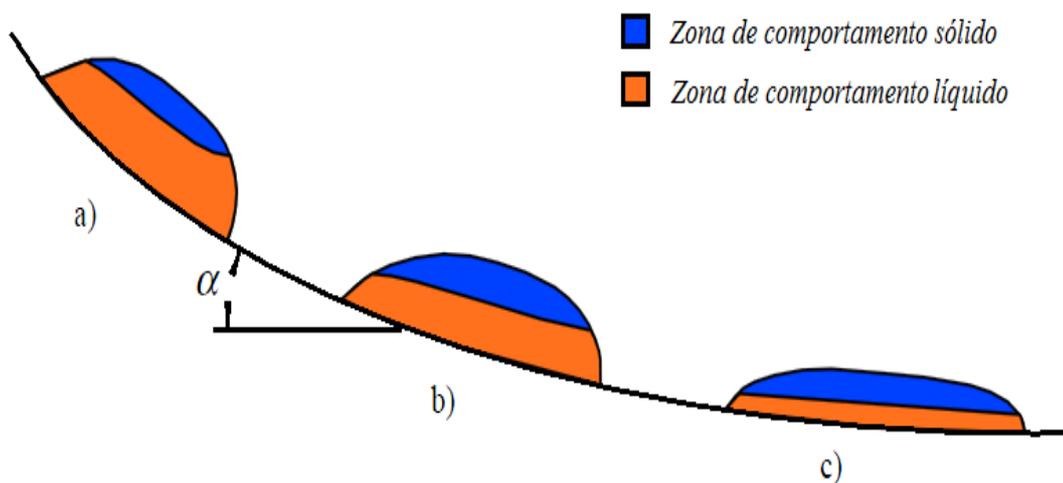
$C_f$  : coeficiente que leva em conta o atrito do fundo do canal.

O sistema de Saint-Venant é caracterizado por varias simplificações, como por exemplo, as velocidades verticais que não são consideradas, a inclinação do fundo deve ser pequena (para poder se desprezar o componente vertical da velocidade), o campo de pressão é considerado hidrostático, a velocidade horizontal não varia na direção vertical  $\bar{u}_1 = u_1(x_1, x_3, t)$ , os efeitos de turbulência são incorporados nos termos de resistência, e o atrito é obtido de condições uniformes.

No problema tipo rompimento de barreira, a esquematização de um material viscoplástico escoando num canal irregular inclinado pode ser dividido em duas zonas. A primeira zona é a parte superior do material que se comporta como um sólido, caracterizado por grande coesão entre as camadas adjacentes do mesmo, e a segunda seria a inferior, onde o

material se comporta como um líquido, modificando constantemente sua qualidade de estado. Podemos identificar ainda três regimes de escoamento ao longo do processo.

- *Regime inercial*: o balanço dominante é entre inércia e o gradiente de pressão. O material viscoplástico apresenta uma forte curvatura, onde a maior parte da massa se comporta como um líquido, Figura 3.2 (a);
- *Regime hidrodinâmico*: o balanço dominante é entre aceleração da gravidade e a viscosidade. O fluxo aumenta e as variações de velocidade são pequenas, o termo inercial pode ser desprezado, Figura 3.2 (b). Liu e Mei (1990) explicaram como a tensão crítica altera o perfil da superfície livre em escoamentos uniformes,
- *Regime de parada (run-out)*: o balanço dominante se estabelece entre o gradiente de pressão e a viscosidade (e às vezes aceleração gravitacional), Figura 3.2 (c). Coussot et al., (1996), Matson e Hogg (2007) previram que o último estado é assintótico



**Figura 3.2. Regimes de escoamento para material viscoplástico: (a) Regime Inercial, (b) Regime Hidrodinâmico e (c) Regime de parada.**

### 3.2. Equações Governantes

Com o intuito de deixar mais claro a forma com as equações representativas do problema tipo Rompimento de Barreira foram obtidas, segue-se uma compilação de informações de grande relevância neste estudo.

As equações governantes locais para a qualidade de estado dos fluidos Newtonianos são dadas pelas equações de Navier-Stokes, que são compostas pela equação da continuidade:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.1)$$

E pela equação da quantidade de movimento:

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \rho g \sin \theta - \frac{\partial p}{\partial x} + \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\rho g \cos \theta - \frac{\partial p}{\partial y} + \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (3.3)$$

A variação da altura  $h$  pode ser expressa a partir da integração da equação (3.2):

$$\int_{y=0}^h \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) dy = 0 \quad (3.4)$$

A partir da equação (3.4) e da equação referente às condições de contorno (Ver equação (3.9), a altura  $h$  torna-se:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h \bar{u}}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

onde,  $\bar{u} = \int_{y=0}^h u(x, y, t) dy / h$  é a velocidade através de uma seção do fluido a ser determinada.

### 3.2.1. Condições iniciais

Considera-se que no início do processo o fluido esteja em repouso no reservatório, com isso as condições iniciais tem a seguinte configuração:

$$h = H[1 - (L - x)\text{sen } \alpha], u = 0 \text{ para } \alpha \leq x \leq L \quad (3.6)$$

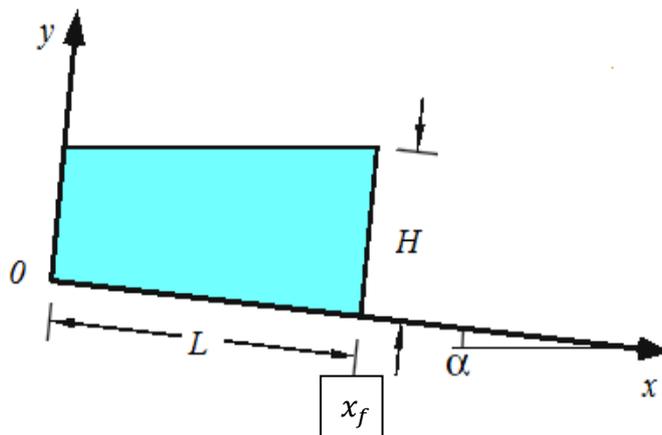
$$h = 0 \text{ e } u = 0 \text{ para } x > L \quad (3.7)$$

$h_0 = h(L/2)$  é a altura que o fluido possui ainda no reservatório.

Com isso a equação da continuidade fica:

$$\int_0^{x_f} h(x, t) dx = Lh_0 \quad (3.8)$$

sendo  $x_f$  a posição frontal do fluido no reservatório.



**Figura 3.3. Croqui com as condições Iniciais.**

### 3.2.2. Condições de contorno

Para o problema tipo Rompimento de Barreira as condições de contorno seguem a seguinte configuração:

- Para a superfície livre:

$$v|_h = \frac{dh}{dt} = \frac{\partial h}{\partial t} + u|_h \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.9)$$

- Para o fundo:

$$y = 0: u = v = 0 \quad (3.10)$$

O equilíbrio de tensões no contorno é dado por:

$$-p_a n + (-p1 + \sigma) \cdot n + \gamma \frac{1}{R} n = 0 \quad (3.11)$$

sendo  $n = \left(-\frac{\partial h}{\partial x}, 1\right) / \sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2}$  o vetor normal a superfície livre,  $p_a$  a pressão atmosférica,  $R = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} / \left[1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right]^{3/2}$  o raio de curvatura,  $\gamma$  a tensão superficial,  $\sigma = 2\mu[\nabla\mathbf{u}]$  o tensor de tensões.

Considerando a não interação do ar com o fluido, as condições de contorno ficam:

- Componente normal da tensão:

$$-p_a + (-pn + \sigma) \cdot n + \gamma \frac{1}{R} n = 0 \quad (3.12)$$

que se torna,

$$p - p_a + \gamma \frac{\frac{d^2 h}{dx^2}}{\left[1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right]^{3/2}} - \frac{2\mu}{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2} \left[ \frac{\partial v}{\partial y} + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial h}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \quad (3.13)$$

- A componente tangencial da tensão fica:

$$(-pn + \sigma \cdot n) \cdot t = 0 \quad (3.14)$$

sendo  $t = \left(1, \frac{\partial h}{\partial x}\right) / \sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2}$  o vetor tangente a superfície livre.

$$\left[1 - \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right] \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + 2 \frac{\partial h}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x}\right) \quad (3.15)$$

A tensão superficial por ser desprezada quando a ordem de grandeza da curvatura for pequena.

### 3.3. Regime de escoamento

A equação da quantidade de movimento expressa um balanço entre aceleração gravitacional, inércia, gradiente de pressão e dissipação viscosa, cuja ordem de grandeza é respectivamente,  $\rho sen\theta$ ,  $\rho U^2/L$ ,  $p/L$  e  $\eta U/H^2$ . Dependendo do balanço entre esses termos, diferentes configurações de regime de escoamento podem ocorrer. A seguir temos quatro possíveis configurações, a saber.

#### *Regime Inercial*

O balanço dominante ocorre entre Inércia e gradiente de pressão, resultando na velocidade característica ( $U$ ):

$$U = \sqrt{gH\cos\alpha} \quad (3.16)$$

### ***Regime Viscoso***

O balanço dominante ocorre entre os termos inerciais e a tensão viscosa do material.

$$U = \frac{\rho g \cos\alpha H^3}{\eta L} \quad (3.17)$$

### ***Regime Visco-Inercial***

O balanço dominante ocorre entre os termos inerciais e viscosos, sendo caracterizada por contribuições quase iguais.

$$U = \frac{1}{\epsilon} \frac{\eta}{\rho H} \quad (3.18)$$

### ***Regime Hidrodinâmico***

O balanço ocorre entre as contribuições viscosas e a aceleração gravitacional

$$U = \frac{\rho g \sin\alpha H^2}{\eta} \quad (3.19)$$

Esta classificação dos regimes em quatro grupos é estabelecida para fluidos Newtonianos. Ela também pode descrever fluidos Não-Newtonianos para os quais a viscosidade não varie significativamente com o aumento da taxa de deformação.

## **3.4. Problema tipo para fluidos Invíscidos ou ideais**

Dadas as equações de Saint-Venant unidimensionais:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u_1 \frac{\partial h}{\partial x_1} + h \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + g \frac{\partial h}{\partial x_1} = 0 \quad (3.21)$$

Whitham (1954) observou experimentalmente a existência de uma região frontal da onda com amontoamento de fluido, (Figura 3.4). Ele propõe que esta região (limitada por  $\xi(t)$  e  $a(t)$ ), seja tratada como uma camada limite, adaptando o método de integração de Pohlhausen e, nas outras regiões, utiliza-se a solução de Ritter (1892).

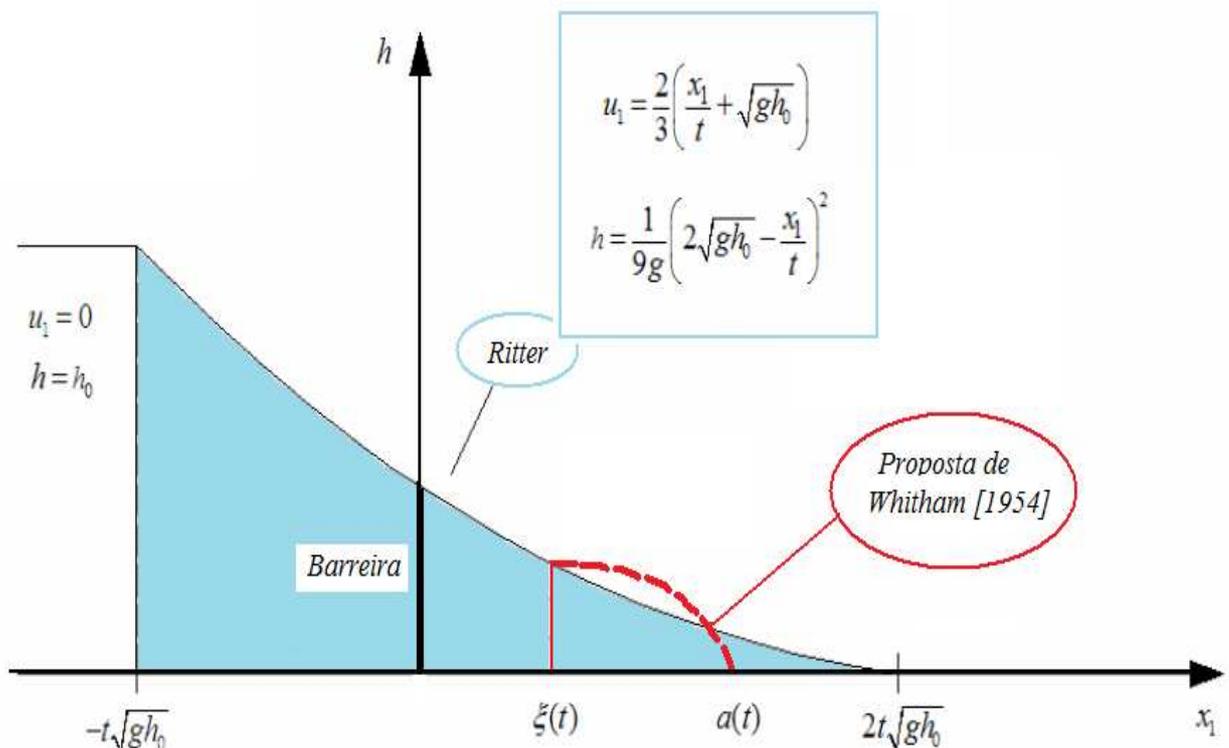


Figura 3.4. Croqui para o problema tipo rompimento de barreira adaptado de Whitham (1954).

A seguir temos a proposta de Whitham (1954) sobre a solução de Ritter (1892):

Whitham (1954) considera que em  $a(t)$  a velocidade da frente da onda deve seguir a seguinte idéia, equação (3.22):

$$\left(1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}}\right)^3 \frac{t\ddot{a}}{\sqrt{gh_0}} = \left(1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}}\right)^4 - \frac{\dot{a}^2}{\sqrt{gh_0}} \frac{K}{h_0} \left[ \frac{a}{\sqrt{gh_0}} - t \left( \frac{3\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}} - 1 \right) \right] \quad (3.22)$$

Sendo  $K$  o coeficiente de Chézy.

Se  $K = 0$ ,  $a = 2\sqrt{gh_0}t$ , ou seja, tem-se o resultado mostrado na equação (3.23).

$$u_1 = \frac{2}{3} \left( \frac{x_1}{t} + \sqrt{gh_0} \right) \quad (3.23)$$

A equação (3.23) é a mesma solução dada por Ritter (1892).

Se  $K$  for diferente de zero, outras variáveis adimensionais são introduzidas :

$$\alpha = (2\sqrt{gh_0}t - a) \quad (3.24)$$

$$\zeta = \sqrt{\frac{g}{h_0}} Kt \quad (3.25)$$

Associando estas novas variáveis à equação (3.23) e após algumas manipulações, Whitham (1954) obteve a seguinte expressão:

$$4\dot{\alpha}^3 \zeta \ddot{\alpha} + \dot{\alpha}^4 = 16(2 - \dot{\alpha})^2 (3\alpha \zeta - 2\dot{\alpha}) \quad (3.26)$$

A discussão dos resultados feita por Whitham (1954) é realizada fazendo  $P = \dot{\alpha}$  como a variável independente e  $\zeta$  como a variável dependente, mostrando resultados satisfatórios.

Os efeitos da inclinação de canais retangulares no escoamento de fluidos também foram estudados por Nsom et al. (2000). O fluido utilizado por ele era Newtoniano com elevada viscosidade ( $\mu = 12 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ). Para tal, as equações de Navier-Stokes bidimensionais foram adimensionalizadas, e o escoamento separado em duas fases: uma com predominância de forças inerciais e outra de forças viscosas. As variáveis adimensionais são as seguintes:

$$h' = \frac{h}{h_0} \quad (3.27)$$

$$x'_{lf} = \frac{x_1}{l_0} \quad (3.28)$$

$$t' = \frac{\rho h_0^3 g \cos \theta}{12 l_0^2} t \quad (3.29)$$

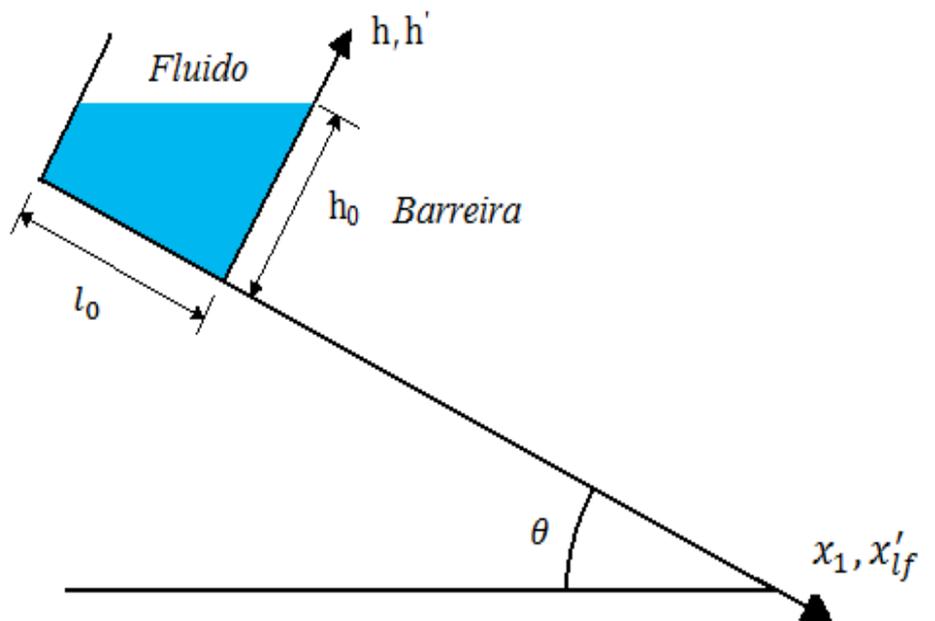


Figura 3.5. Croqui com as variáveis utilizadas, adaptado de Nsom et al. (2000).

Com as variáveis adimensionais (3.27), (3.28) e (3.29), é possível obter as leis de evolução para cada regime de escoamento. Para o regime inercial em canais horizontais, temos a lei de Ritter (1892) como caráter evolutivo:

$$x'_{lf} \propto t' \quad (3.30)$$

O regime viscoso é ainda dividido em duas leis evolutivas, Nsom et al. (2000):

Se  $t' < 0,1$

$$x'_{lf} = 0,969\sqrt{t'} \quad (3.31)$$

Se  $t' > 0,1$

$$x'_{lf} = 1.860t'^{0.2}0.962 \quad (3.32)$$

Sendo a máxima altura ( $h'_{max}$ ) estabelecida em:

$$h'_{max} = \frac{0.640}{x'_1+1} \quad (3.33)$$

Uma solução análoga foi encontrada para o canal em posição inclinada.

Chanson [2006] utilizou as equações “Shallow-Water” introduzindo os efeitos de atrito e de inclinação do canal. Ele as resolveu usando o método das características e dividindo o escoamento em inercial e viscoso, encontrando soluções para escoamentos turbulentos e laminares.

### 3.5. Problema tipo para fluidos Não-Newtonianos (Herschel-Bulkley)

A notória existência de regimes distintos, como discutida em observações anteriores, foi apontada também por Debiane (2000) para fluidos não-Newtonianos. Ele afirma que tal existência está intimamente ligada à natureza dos materiais. Debiane (2000) dividiu o

escoamento da mesma forma que Nsom et. al. (2000) e seus resultados mostram que o comportamento de cada uma das fases são distintos, específicos e assintóticos. O fluido escoar até que as tensões sejam menores do que a tensão crítica do material. Nos primeiros instantes após a ruptura de uma barragem, o escoamento é do tipo inercial, porém os efeitos viscosos não podem ser desprezados. O que acontece, de fato, é que estes são mais relevantes na frente da onda e, passam, com o tempo, a serem cada vez mais importantes, até certo tempo crítico. Portanto, uma solução correta não pode ser baseada somente no ponto de vista viscoso ou inercial, mas sim, em sua interface. Assim, estudar os domínios nos quais cada efeito é predominante é essencial na análise do problema. Debiane (2000), após um longo e detalhado estudo teórico, determinou leis de evolução da frente laminar de dois materiais: uma solução aquosa de Carbopol 940 e, soluções de glucose. A solução do problema foi obtida através da utilização de séries de potências e variáveis adimensionais. As hipóteses de águas rasas foram empregadas. Foram determinadas as soluções do problema, tanto para o regime predominantemente inercial, quanto para regime viscoso, seja para reservatório infinito quanto para o finito. Debiane (2000) conclui que o escoamento apresenta duas fases. A primeira é predominantemente inercial e, a segunda se apresenta como uma fase viscosa, que é dividida ainda em duas fases, até a parada do escoamento. Esta fase viscosa refere-se ao amontoamento apontado por Whitham (1954).

A seguir as equações utilizadas por Debiane (2000):

Variáveis adimensionais utilizadas para regime inercial:

$$x_1^* = \frac{x_1}{h_0} \quad (3.34)$$

$$t^* = \frac{t}{\sqrt{\frac{h_0}{g}}} \quad (3.35)$$

Lei de evolução:

$$\frac{x_1^*}{t^*} \approx 2 - \left(\frac{2n+3}{2n+4}\right) \chi_1 t_{red}^{\frac{1}{2n+3}} + \left(\frac{2n+3}{2n+5}\right) \chi_2 t_{red}^{\frac{2}{2n+3}} \quad (3.36)$$

sendo que,

$$\chi_1 \approx \left( \frac{2+3m}{1+m} \right) \left[ \frac{(m+1)(3m+1)2^n}{(4+7m)m} \right]^{\frac{2}{2+3m}} \quad (3.37)$$

$$\chi_2 \approx \frac{0.977}{m^{0.314}} \quad (3.38)$$

$$m = \frac{1}{n} \quad (3.39)$$

$$t_{red} = \left( \frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{t^*}{Re} \quad (3.40)$$

$$Re = \frac{\rho h_0^n (\sqrt{gh_0})^{2-n}}{k} \quad (3.41)$$

Para escoamentos em que  $Re$  é maior do que o  $Re_{lim} = \frac{(2+m)^n}{t_{redc}(m)}$ , não há o primeiro regime viscoso. A transição entre o regime inercial e o regime viscoso (segundo regime viscoso) se dá na intersecção das curvas definidas por (3.36) e (3.46). Para o cálculo do regime viscoso, introduzem-se as variáveis adimensionais,

$$\hat{x}_1 = \frac{x_1}{l_0} \quad (3.42)$$

$$\hat{t} = \frac{t}{T} \quad (3.43)$$

sendo que  $T = (m+2) \left[ \frac{2(m+2)}{m} \right]^m \left( \frac{k}{\rho gh_0} \right)^m \left( \frac{l_0}{h_0} \right)^{m+1}$ , e os números adimensionais:

$$Od = \frac{\tau_c l_0}{\rho gh_0^2} \quad (3.44)$$

$$\Phi = \frac{\tau_c \varphi}{\rho g h_0^2} \quad (3.45)$$

sendo  $Od$  o número de Oldroyd e  $\Phi$  a influência das tensões elongacionais e  $\varphi$  um valor na ordem de  $\sqrt{3}$ .

A lei da evolução segundo Debiante (2000) fica:

$$\hat{x}_1(\hat{t}, m, Re_{lim}, Od) = \hat{c}_f(m) [\hat{t} + \hat{c}_2(m, Re_{lim})]^{3m+2} \quad (3.46)$$

sendo que,

$$\hat{c}_f(m) = \left[ \frac{(3m+2)}{a(m)^{2m+1}} \left( \frac{2(m+1)^2}{m(2m+1)} \right)^m \right]^{\frac{1}{3m+1}} \quad (3.47)$$

$$\hat{c}_2(m, Re_{lim}) \approx \hat{t}_{c2}(m, Re_{lim}) - \left[ \frac{\hat{x}_{f2}(m, Re_{lim}) + 1}{\hat{c}_f(m)} \right]^{3m+1} \quad (3.48)$$

$$\hat{t}_{c2}(m, Re_{lim}) \approx \hat{c}_1(m, Re_{lim}) - \left[ \frac{\hat{x}_{1f2}(m) + 1}{\tilde{c}_f(m)} \right]^{m+1} \quad (3.49)$$

$$\tilde{c}_f(m) \approx \frac{1}{3} + \frac{0.944}{(m+0.548)^{0.85}} \quad (3.50)$$

$$\tilde{c}_1(m, Re_{lim}) \approx \hat{t}_1 - \left[ \frac{\hat{x}_{1f2}(m) + 1}{\tilde{c}_f(m)} \right]^{m+1} \quad (3.51)$$

$$\hat{x}_{1f1}(m, Re_{lim}) \approx (m, 1) \left( \frac{1}{m+2} \right)^{\frac{m+1}{m}} Re_{lim} t_{redc}(m) \quad (3.52)$$

A equação que define a distância de parada é dada por:

$$Od = \frac{1}{3}(1 - \lambda\phi) \left[ 1 - \frac{3-2\lambda}{2}\phi(\lambda\phi - 1) \right] \quad (3.53)$$

sendo  $\lambda$  o coeficiente de gelificação, que é da ordem para fluidos não tixotrópicos.

Se  $Od > Od_c$ ,

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{6Od}(1 - \lambda\phi)[1 - \lambda\phi(2 + 2\lambda\phi - 3\phi)] \quad (3.54)$$

Se  $Od < Od_c$ ,

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{2Od} [-(1 - \lambda\phi)^2\phi] \quad (3.55)$$

O problema de ruptura de barreira foi utilizado como estudo de caso por Piau e Debiane (2005) com o intuito de melhor conhecer os parâmetros do consistômetro de Bostwick. Utilizaram também as equações de Saint-Venant separando o escoamento pela predominância de efeitos viscosos ou inerciais. Outro trabalho no mesmo escopo foi feito por Balmforth et al (2007), cuja solução pra o problema é baseado no pré-suposto que o escoamento é suficientemente lento para a inércia ser desprezada, sendo que as equações que regem esta solução podem ser reduzidas a uma única equação para a altura do escoamento  $h(x, t)$ :

$$\partial_t h = \left( \frac{\rho g}{K} \right)^{\frac{1}{n}} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{n|\partial_x h|^{\frac{1}{n-1}} Y^{1+\frac{1}{n}}}{(n+1)(2n+1)} [(1 + 2n)h + nY] \partial_x h \right] \quad (3.56)$$

sendo,

$$Y = h - \frac{\tau_c}{\rho g |\partial_x h|} \quad (3.57)$$

uma pseudo-superfície que separa as zonas de comportamento do escoamento.

As seguintes variáveis adimensionais são introduzidas:

$$\hat{x} = \frac{x}{L} \quad (3.58)$$

$$\hat{z} = \frac{z}{H} \quad (3.59)$$

$$\hat{h} = \frac{h}{H} \quad (3.60)$$

$$\hat{Y} = \frac{Y}{H} \quad (3.61)$$

$$\hat{t} = \frac{t}{\frac{L}{H} \left( \frac{KL}{\rho g H^2} \right)^{\frac{1}{n}}} \quad (3.62)$$

Com isso, reescrevendo a equação (3.56) na forma adimensional a apenas dois parâmetros  $B$  e  $n$ , temos:

$$\partial_{\hat{t}} \hat{h} = \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \left[ \frac{n |\partial_{\hat{x}} \hat{h}|^{\frac{1}{n-1}} \hat{Y}^{1+\frac{1}{n}}}{(n+1)(2n+1)} [(1+2n)\hat{h} + n\hat{Y}] \partial_{\hat{x}} \hat{h} \right] \quad (3.63)$$

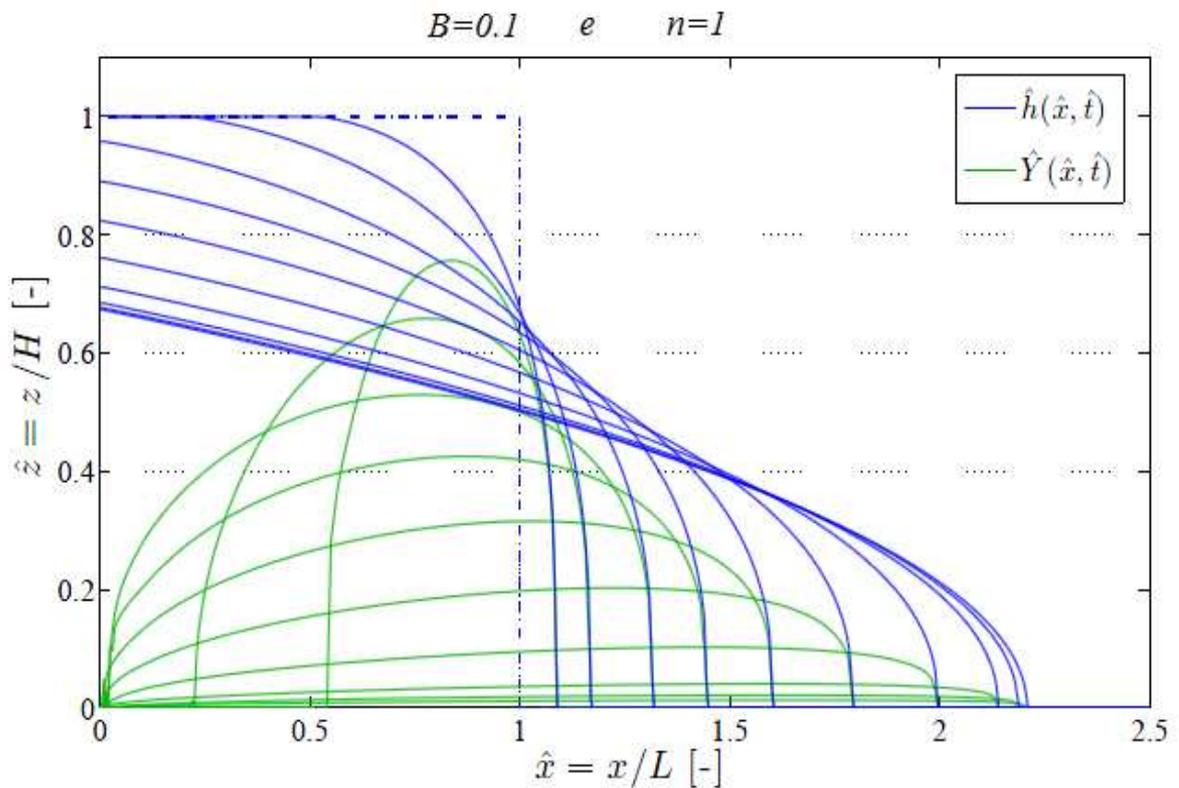
sendo,

$$\hat{Y} = \hat{h} - \frac{B}{\partial_{\hat{x}} \hat{h}} \quad (3.64)$$

onde,  $B$  é dito número de Bingham.

$$B = \frac{\tau_c L}{\rho g H^2} \quad (3.65)$$

A figura (3.6) mostra uma solução numérica para a equação (3.63) para  $B=0.1$  e  $n=1$



**Figura 3.6.** Altura  $\hat{h}$  é a pseudo-superfície que separa as zonas de comportamento do escoamento  $\hat{Y}$ , para  $B=0.1$  e  $n=1$  nos tempos  $\hat{t}=0.1, 0.4, 1.6, 3.6, 8, 20, 60, 200, 420$  e  $720$ . A linha traço ponto em azul expressa à condição inicial.

### 3.6. Equações de altura média

Para a obtenção destas equações utiliza-se o método de alturas médias. Este método lida com as equações de Saint Venant, também referidas como “the long-wave approximation”, e consiste em integrar na vertical as equações da quantidade de movimento e da continuidade. As equações de Saint Venant são compostas por:

*Equação da Continuidade*

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h\bar{u}}{\partial x} = 0 \quad (3.66)$$

*Equação da quantidade de movimento*

$$\rho \left( \frac{\partial h\bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial h\bar{u}^2}{\partial x} \right) = \bar{\rho}g \sin \alpha - g \cos \alpha \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{h\partial \bar{\sigma}_{xx}}{\partial x} - \tau_b \quad (3.67)$$

onde  $h(x,t)$  é a altura do escoamento,  $\bar{u}(x,t)$  a velocidade média da frente,  $\bar{\rho}$  a densidade média,  $\alpha$  é a inclinação do canal e  $\tau_b$  a tensão de cisalhamento do fundo.

A pressão é inicialmente da ordem hidrostática:

$$P = \rho g(h - y) \cos \alpha \quad (3.68)$$

A integração na vertical de uma função “depth-averaged” é definida como:

$$\bar{f}(x, t) = \frac{1}{h(x,t)} \int_0^{h(x,t)} f(x, y, t) dy \quad (3.69)$$

Para fechar o sistema é utilizado ainda o coeficiente de Boussinesq, fornecendo assim a velocidade média quadrática:

$$\bar{u}^2 = \frac{1}{h} \int_0^h u^2(y) dy = \beta \bar{u}^2 \quad (3.70)$$

onde o parâmetro  $\beta$  é na maior parte do tempo uma unidade.

Soluções analíticas de Saint Venant podem ser obtidas através de técnicas similares e métodos característicos.

### 3.7. Equações de altura média para fluidos Newtonianos

A solução dada por Debiane (2000) segue a abordagem de Hunt (1994), associada à cinemática da onda. A solução analítica é obtida a partir do método da perturbação.

As variáveis adimensionais usadas por Debiane (2000) são:

$$\hat{h} = \frac{h}{H} \quad (3.71)$$

$$\hat{x} = \frac{x}{L} \quad (3.72)$$

$$\hat{t} = t \frac{\rho g H^3 \cos \alpha}{12 \mu L^2} \quad (3.73)$$

$$\hat{x}_f = \frac{x_f}{L} \quad (3.74)$$

A solução completa é dada a partir das soluções internas e externas do problema.

A superfície livre é dada por:

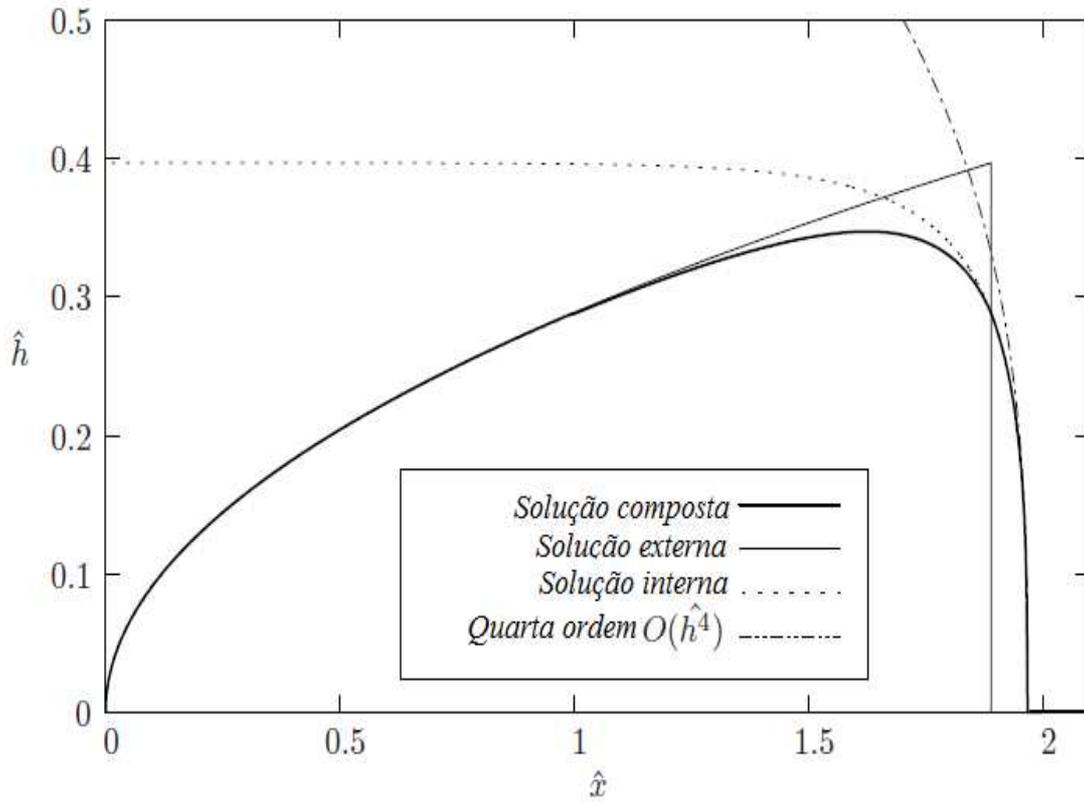
$$\hat{h}_i(\hat{x}, \hat{t}) = \left( \frac{\hat{x}}{12 \hat{L} \hat{t}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.75)$$

Para a posição frontal a solução externa é dada por:

$$\hat{x}_{Fk}(\hat{t}) = \left( \frac{27}{4} \hat{L} (2 - \hat{L})^2 \right)^{\frac{1}{3}} \hat{t}^{\frac{1}{3}} \quad (3.76)$$

Substituindo a equação (3.76) na equação (3.75) a altura da frente da onda é estabelecida em:

$$\hat{h}_{Fk}(\hat{t}) = \left(\frac{2-\hat{L}}{16\hat{L}\hat{t}}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.77)$$



**Figura 3.7. Solução de Debiane para  $\hat{L}=1$  no tempo  $\hat{t}=1$ .**

Esta solução não possui significado físico se observada a frente do escoamento, mais através da abordagem de Hunt (1994) podemos obter uma solução interna mais representativa para o fenômeno.

$$\hat{L}(x - \hat{x}_{Fk}(\hat{t})) = \hat{h} + \frac{\hat{h}_{Fk}(\hat{t})}{2} \ln \left( \frac{\hat{h}_{Fk}(\hat{t}) - \hat{h}}{\hat{h}_{Fk}(\hat{t}) + \hat{h}} \right) + (\ln(4) - 1) \frac{\hat{h}_{Fk}(\hat{t})}{2} \quad (3.78)$$

Para  $\hat{h}=0$  obtemos a posição da frente do escoamento

$$\hat{x}_f(\hat{t}) = \hat{x}_{Fk}(\hat{t}) + (\ln(4) - 1) \frac{\hat{h}_{Fk}(\hat{t})}{2\hat{L}} \quad (3.79)$$

A equação (3.75) pode ser reescrita utilizando-se o desenvolvimento do termo de quarta ordem  $O(\hat{h}^4)$ :

$$\hat{h}(\hat{x}, \hat{t}) \approx [3\hat{h}^2\hat{L}(\hat{x}_f - \hat{x})]^{\frac{1}{3}} \quad (3.80)$$

A solução composta fica:

$$\hat{h}(\hat{x}, \hat{t}) = \begin{cases} \hat{h}_i + \hat{h}_e - \hat{h}_{Fk}, & \hat{\xi} < 0 \\ \hat{h}_e, & \hat{\xi} \geq 0 \end{cases} \quad (3.81)$$

sendo  $\hat{\xi} = \hat{x} - \hat{x}_{Fk}$ .

### 3.8. Equações de altura média para fluidos Não-Newtonianos (Herschel-Bulkley)

Huang e García (1998) consideraram duas equações parciais a fim de complementar as equações da continuidade e quantidade de movimento para a altura utilizada por Saint Venant. Uma para cada zona que caracteriza a frente do escoamento.

A solução externa é dada por:

$$x = \left[ \rho g h^n (h - h_y) \frac{\text{sen}\alpha}{K} \right]^{\frac{1}{n}} t \quad (3.82)$$

$$A = \frac{n}{2n+1} \left[ \frac{\rho g h^n (h_f - h_y) \text{sen}\alpha}{K} \right]^{\frac{1}{n}} \left( \frac{n+1}{n} h_f^2 + \frac{1}{n+1} h_f h_y \frac{n}{n+1} h_y^2 \right) t \quad (3.83)$$

$$x_f = \frac{n}{2n+1} \left( \frac{n+1}{n} h_f + \frac{1}{n+1} h_y \frac{n}{n+1} \frac{h_y^2}{h_f} \right)^{-1} A \quad (3.84)$$

$$\frac{x}{x_f} = \frac{h(h-h_y)^{\frac{1}{n}}}{h_f(h_f-h_y)^{\frac{1}{n}}} \quad (3.85)$$

$$\frac{dx_f}{dt} = \frac{n}{2n+1} \left[ \frac{\rho g (h_f - h_y)^{n+1} \text{sen} \alpha}{K} \right]^{\frac{1}{n}} \left( 1 + \frac{n}{n+1} \frac{h_y}{h_f} \right) \quad (3.86)$$

sendo  $A$  o volume do fluido dividido pela largura do reservatório  $D$ ,  $x_f$  a posição da frente,  $h_f$  a altura da frente e  $h_y$  a profundidade do escoamento.

$$h_y = \frac{\tau_c}{\rho g \text{sen} \alpha} \quad (3.87)$$

A solução interna fica da forma:

$$\left( \frac{h_i \phi - h_i}{h_f - h_y} \right)^{\frac{(n+1)}{n}} = \frac{\left( 1 - \frac{n}{2n+1} \frac{h_f - h_y}{h_y} \right) \phi}{\left( 1 - \frac{n}{2n+1} \frac{h_i - h_y}{h_i} \right)} \quad (3.88)$$

que, com as condições de contorno fica:

$$\int_{-\infty}^0 (h_f - h_i) d\xi = \int_0^{\delta} h_i d\xi \quad (3.89)$$

onde,

$$\phi = 1 - \frac{dh_i}{d\xi} \quad (3.90)$$

onde  $\xi = x - x_f$ . A solução composta  $h_c$  é então obtida somando-se as soluções interna e externa e subtraindo o termo comum  $h_f$ .

$$h_c = h_e + h_i - h_f \quad (3.91)$$

## CAPÍTULO 4

---

### Simulação Numérica

---

#### 4.1. Análise Numérica

A compreensão do movimento de campos de escoamento é fundamental em muitos ramos da engenharia. Até recentemente, o estudo do movimento dos fluidos eram confinados ao âmbito laboratorial. Mas com o rápido desenvolvimento tecnológico mundial, a utilização de computadores para análises de fenômenos complexos tornou-se cada vez mais uma realidade, trazendo soluções precisas e confiáveis para um ambiente de trabalho que não é mais excepcionalmente um laboratório. Além disso, o uso de interfaces amigáveis e processos de “workflow” tornam a dinâmica dos fluidos acessível não apenas a desenvolvedores mais também a analistas interessados.

A dinâmica dos fluidos computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) é o termo dado ao grupo de técnicas matemáticas, numéricas e computacionais usadas para obter, visualizar e interpretar soluções computacionais para as equações de conservação de grandezas físicas de interesse em um dado escoamento. A origem destas equações de conservação é a teoria de Fenômenos de Transporte. Assim, pode-se resumir CFD como o conjunto das técnicas de simulação computacional usadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos, ou ainda, uma análise associada a sistemas envolvendo transferência de calor e outros processos de transporte de energia - Versteeg & Malalasekera (1995).

A simulação é usada por físicos, químicos e engenheiros para prever o comportamento de um produto, processo ou material em determinadas condições assumidas ou aferidas. A importância das técnicas de simulação tem aumentado muito e podem-se citar várias razões para tal fato.

### ***Custo experimental***

A prática experimental é a única alternativa à simulação numérica, e é cara. De acordo com Patankar (1980), um único dia de trabalho em um grande túnel de vento trans-sônico gira em torno dos milhares de dólares, isso a mais de duas décadas atrás, não incluindo os custos de planejamento, preparação do modelo, análise dos resultados, etc. Hoje em dia, tanto os hardwares quanto os softwares estão mais avançados, contudo, a busca pela perfeição evolui no mesmo ritmo, exigindo cada vez mais de ambos, e com isso, encarecendo o processo mais ainda.

### ***Necessidade de predição***

A necessidade de prever com precisão o desempenho de um novo produto e a impossibilidade de fazê-lo tem um efeito devastador nas empresas. Por exemplo, a possibilidade de falhas escondidas no projeto de um avião ou reator químico, podendo levar a inoperabilidade dos mesmos, até mesmo, a perda do apelo de venda do equipamento. Os custos do desenvolvimento de novos produtos são tão grandes que a falta de retorno do investimento devido ao desempenho inadequado dos produtos pode rapidamente levar as empresas à falência. O único modo de minimizar o risco de se encontrar casos de desempenho insatisfatório é coletar um grande volume de informações do comportamento do produto sob as mais diversas condições operacionais. Técnicas de simulação, como CFD, podem fornecer este tipo de informação.

### ***Impossibilidade experimental***

Em certos casos, a prática experimental é impossível de ser realizada. Podem-se citar alguns exemplos, como eventos astronômicos e situações biomédicas que poderiam colocar o paciente em risco de vida.

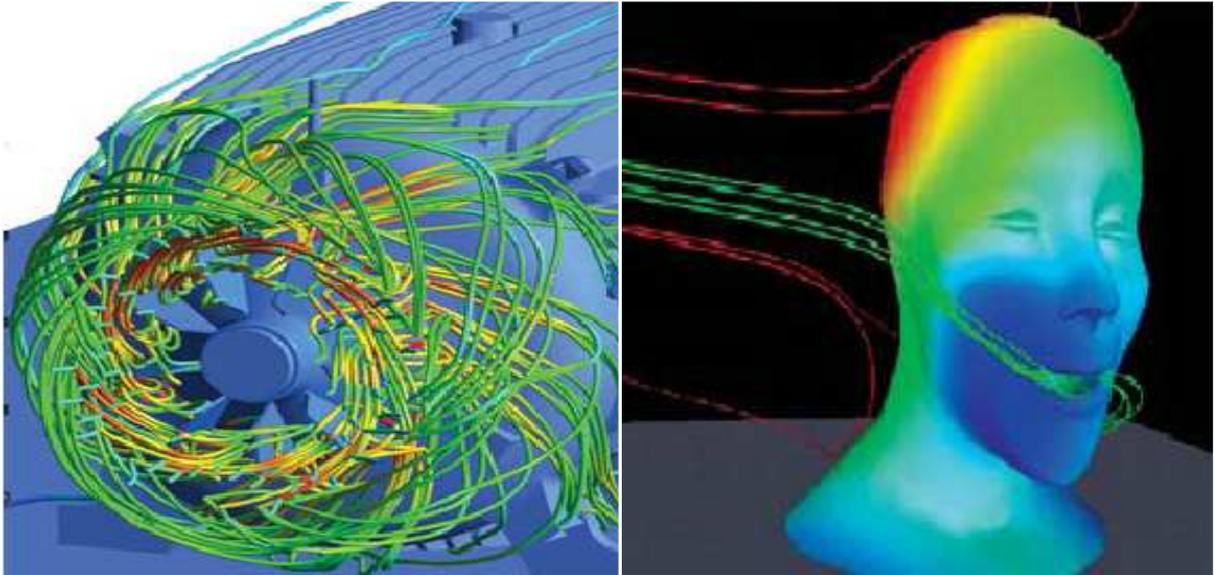
### ***Detalhes de experimentos***

Um grande ponto a favor das simulações numéricas é que a mesma é capaz de fornecer uma gama muito maior de informações que a experimental. O número de pontos discretizados na simulação é equivalente ao mesmo número de pontos de medida direta em um experimento. Além disso, os resultados das simulações permitem calcular dados derivados, como por exemplo, vorticidade, tempo de residência, tensão, etc., enquanto que os mesmos são muito difíceis ou mesmo impossíveis de serem obtidos experimentalmente.

### ***Velocidade computacional e memória***

O desenvolvimento computacional (processamento e memória) continua a aumentar seu poderio constantemente, ultrapassando os preceitos da lei de Moore (1965), que veio abaixo em 2004 com o lançamento dos processadores de múltiplos núcleos. Ao mesmo tempo, os algoritmos de solução continuam a ser desenvolvidos, com acurácia e desempenhos cada vez maiores. Deste modo, as simulações tendem a ser cada vez mais realísticas, com a inclusão de modelos mais abrangentes e uma maior resolução espacial do domínio de cálculo.

A dinâmica dos fluidos computacional é utilizada nos mais diversos ramos da indústria, incluindo a área aeroespacial, automotiva, processamento químico, geração de energia, aquecimento, ventilação, ar condicionado, biomédicas, óleo e gás natural, marinha e muitas outras. Desde o conforto térmico em grandes edifícios a micro-bombas e nanotecnologia, uma enorme gama de aplicações que podem ser abordadas devido ao grande leque de possibilidades oferecidas pela dinâmica dos fluidos. Uma área que vem conquistando a cada dia maior grandeza junto ao mundo da engenharia de projetos. Uma opção prática e eficiente utilizada por diversas empresas que ambicionam prever o desempenho de novos modelos e processos antes de serem fabricadas ou implementadas.



**Figura 4.1. Motor elétrico e ventilação em torno de uma cabeça humana, ANSYS CFX – REALESE [2007].**

É importante ressaltar que simulações CFD possuem limitações. Na maioria das áreas, ainda é necessário o desenvolvimento de modelos mais acurados como, por exemplo, nas áreas de turbulência, radiação, combustão, escoamentos multifásicos, etc.

A aplicação de condições de contorno necessita do desenvolvimento de ferramentas cada vez melhores para descrever em detalhe a geometria do domínio de cálculo. Enfim, existe a necessidade constante de aperfeiçoamento das técnicas numéricas para ampliar a capacidade de resolução dos problemas mais complexos.

#### **4.2. Escoamento Multifásico**

Sistemas multifásicos são acometidos pela presença de mais de um tipo de fluido, geralmente pertencentes a espécies químicas distintas ou representantes de diferentes fases termodinâmicas de uma mesma espécie.

Os fluidos componentes deste tipo de sistema são na verdade misturas em nível macroscópico, diferindo de sistemas multicomponentes que possuem essa mistura a nível molecular. O tratamento numérico destes problemas pode ser feito através de dois métodos distintos, Euler-Euler e Euler-Lagrange.

No método Euler-Euler, as fases distintas são tratadas como sendo totalmente estratificadas, separadas por uma interface bem definida. Sendo assim, existe a necessidade de se introduzir o conceito de fração volumétrica.

É a fração volumétrica que um determinado fluido ocupa no interior de um volume de controle, ou elemento. Na modelagem Euler-Euler, as frações volumétricas são funções contínuas no espaço e no tempo, onde, uma fase não pode ocupar o volume da outra. Documentação do Fluent (2004).

Já os métodos Euler-Lagrange são mais recorridos quando se têm fases dispersas que são distribuídas de forma discreta em uma fase contínua (fluida). As fases fluidas são tratadas como um meio contínuo e, as equações de conservação médias no tempo são calculadas. As fases dispersas são solucionadas rastreando-se um grande número de partículas, bolhas ou gotas através do campo de escoamento estudado. As fases dispersas podem trocar quantidade de movimento, massa e energia com as outras fases.

Uma suposição muito importante é a de que as fases dispersas ocupam uma fração volumétrica pequena. As trajetórias das partículas ou das gotas são calculadas individualmente em intervalos específicos durante o cálculo das fases fluidas. Documentação Fluent (2004) e Documentação – CFX (2005).

### 4.3. Tratamento numérico da reologia Não-Newtoniana (Herschel-Bulkley)

A análise de campos de escoamento em reologia complexa é uma área de importância impar na engenharia, uma vez que na natureza muitos fenômenos ocorrem em razão dos diferenciais Não-Newtonianos dos fluidos.

Sendo assim, a simulação numérica de tais fenômenos deve ter o tratamento adequado das equações constitutivas que regem esses fenômenos, modificando a reologia para a mais adequada e configurando estas informações no simulador.

A seguir temos as equações da continuidade e quantidade de movimento para a reologia Não-Newtoniana respectivamente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \times \vec{u}) = \nabla \cdot [-p \vec{\delta} + \eta (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)] + \vec{S} \quad (4.2)$$

sendo a viscosidade aparente é representada pela letra grega  $\eta$ , e  $\dot{\gamma} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)$  o tensor taxa de deformação.

Adotando-se o modelo bidimensional e chamando o segundo invariante do tensor taxa de deformação de  $\dot{\gamma}_H$  temos:

$$\sqrt{-\dot{\gamma}_H} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right)^2} \quad (4.3)$$

ou

$$2\sqrt{-\dot{\gamma}_H} = 2\sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right)^2} = \alpha \quad (4.4)$$

Associando então o modelo de Herschel-Bulkley, onde  $\tau_{ij} = 2\eta \dot{\gamma}_{ij}$ , temos:

$$\eta = \frac{1}{2} \left( \frac{\tau_c}{\sqrt{-\dot{\gamma}_H}} + \frac{2^k k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_H})^{1-n}} \right) \quad (4.5)$$

com a devida substituição de (4.4) em (4.5), temos:

$$\eta = \frac{\tau_c}{\alpha} + \frac{k}{\alpha^{1-n}} \quad (4.6)$$

chegando a seguinte equação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \times \vec{u}) = \nabla \cdot \left[ -p \vec{\delta} + \left( \frac{\tau_c}{\alpha} + \frac{k}{\alpha^{1-n}} \right) (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) \right] + \vec{S} \quad (4.7)$$

#### 4.4. Tratamento numérico do problema Multifásico

Dois tipos de modelos podem ser utilizados para o tratamento de problemas com sistemas multifásicos a partir da modelagem Euleriana, sendo associados conforme o tipo de sistema estudado, ou seja, conforme a morfologia sistemática existente, sendo que a mesma descreve a conectividade ou distribuição das espécies que interagem dinamicamente.

##### Modelo Homogêneo

É caracterizado por fases completamente estratificadas e interface bem delineada, os campos de escoamento são diferenciados através de propriedades físicas como massa específica, viscosidade e visualmente por suas frações volumétricas. A seguir são dadas as equações que regem este modelo e suas particularidades.

##### Quantidade de movimento

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \vec{u} \times \vec{u} - \eta(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^{-t})] = \vec{S} - \nabla p \quad (4.8)$$

##### Conservação da Massa

$$\frac{\partial V F_f \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (V F_f \rho_f \vec{u}_f) = \vec{S}_f + \sum_{f=1}^N \Gamma_{f1f2} \quad (4.9)$$

onde  $f$  se refere a cada uma das fases,  $N$  o número total das mesmas,  $\vec{S}_f$  o termo fonte de massa e  $\sum_f \Gamma_{f1f2}$  o termo de transferência de massa entre as fases 1 e 2.

$$\rho = \sum_{f=1}^N V F_f \rho_f \quad (4.10)$$

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{f=1}^N V F_f \rho_f \vec{u}_f \quad (4.11)$$

$$\Gamma = \sum_{f=1}^N VF_f \Gamma_f \quad (4.12)$$

$$\eta = \sum_{f=1}^N VF_f \eta_f \quad (4.13)$$

### **Modelo Não-homogêneo**

Sistemas multifásicos Não-Homogêneos referem-se a casos onde os campos de velocidade e outros, são separados para cada fluido do sistema. O campo de pressão é dividido por todas as fases. Esta abordagem não foi escolhida devido à razão de transferência interfásica, no caso estudado, ser muito grande. Como resultado todas as fases acabam por dividir os mesmos campos de escoamento.

## **4.5. Métodos Numéricos**

### **4.5.1 Aspectos gerais da mecânica dos fluidos computacional**

Os pacotes computacionais desenvolvidos e estruturados para a resolução de problemas de escoamentos de fluidos, com o objetivo de prover acesso fácil ao seu poder de solução, incluem interfaces sofisticadas cada vez mais amigáveis e intuitivas para a entrada dos parâmetros do problema e deliberação dos resultados. Por esta razão, todos os códigos contêm três elementos principais: um pré-processador, um solver e um pós – processador.

#### ***Pré-processamento***

É a preparação do processamento em si e consiste em:

- Definição da geometria de interesse - domínio computacional;
- Escolher o modelo físico que será incluído na modelagem (modelos de turbulência e funções de parede);
- Definir as propriedades do fluido;

- Especificar as condições de contorno e geração da malha do volume de controle.

A exatidão da solução CFD é governada pelo número de células na malha confeccionada. Em geral, quanto maior o número de células, maior a convergência. Quanto maior o refinamento da malha empregada na geometria, mais exato será o problema, porém maior o custo computacional. Malhas consideradas ótimas geralmente são não uniformes, isto é, refinadas onde há mudanças bruscas das propriedades e relativamente grossas onde não há mudanças significativas. Geralmente leva-se mais que 50% do tempo (tempo total de modelagem do problema) na definição da geometria e na obtenção da malha mais adequada ao mesmo.

### ***Solver - Processamento***

É a responsável pelo processo de obtenção de dados (soluções), podendo citar quatro técnicas distintas de solução numérica: diferenças finitas, elementos finitos, método espectral e volumes finitos.

O método de volumes finitos, utilizado neste trabalho, foi desenvolvido originalmente como uma formulação especial da formulação de diferenças finitas.

### ***Pós-processador***

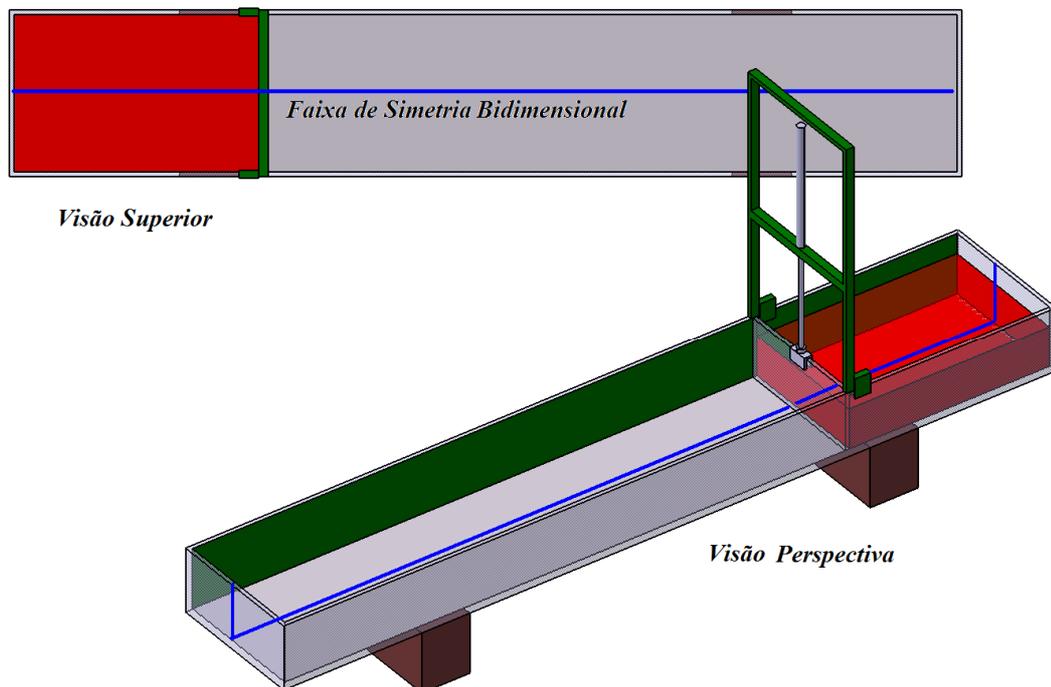
É a parte responsável pela apresentação dos dados obtidos na simulação (Solver). Exemplos de alguns aspectos importantes do pós-processamento são:

- Visualização da geometria e do volume de controle (visualização da malha);
- Visualização de vetores, contornos e “streamlines”, mostrando a direção e magnitude do escoamento;
- Visualização do gradiente de variáveis escalares (como temperatura) no domínio;
- Animação;
- Gráficos 2D e 3D.

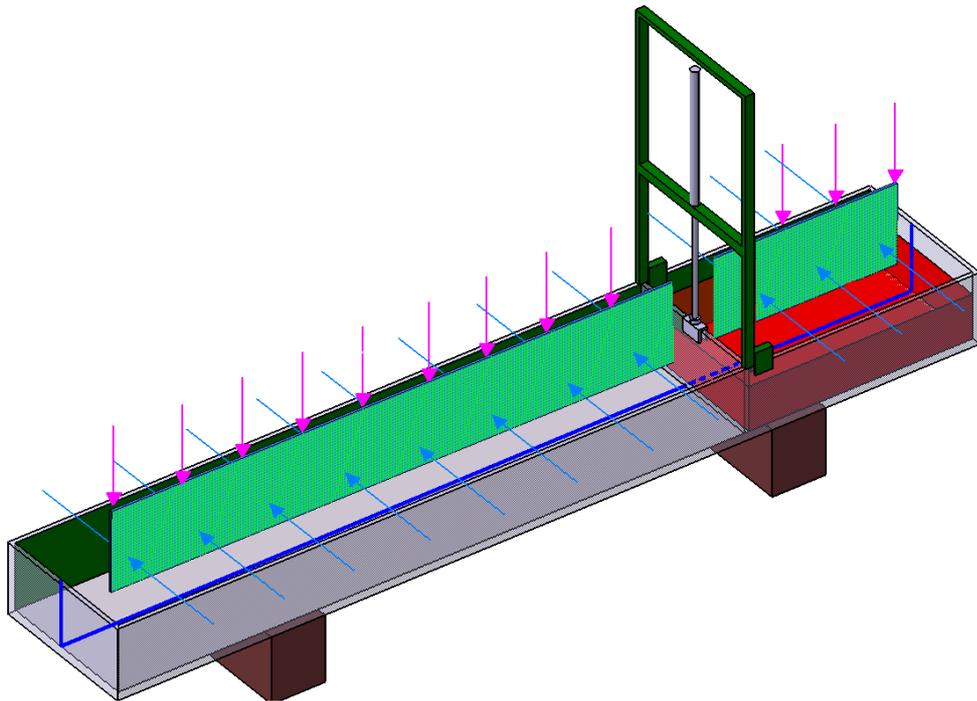
#### 4.5.2. Pré-Processamento do problema “Dam Break”

As simulações desenvolvidas foram estabelecidas através de uma aproximação bidimensional do problema analisado, tal escolha foi deliberada com o intuito de diminuição do custo computacional, uma vez que soluções em problemas CFD requerem equipamentos extremamente potentes, e para os fins almejados, a aproximação 2D se mostrou em consonância e eloqüência para com o modelo físico visto em âmbito experimental.

A geometria associada ao canaleta foi desenvolvida com ferramentas 3D do software ICEM-ANSYS, no caso, o objetivo era o desenvolvimento de um modelo que fizesse referência a uma fatia central do canaleta, com isso, foram dadas características de simetria as laterais da geometria obtendo-se assim a aproximação bidimensional requerida, abaixo um croqui do esquema utilizado.



**Figura 4.2. Fatia central do canaleta.**



**Figura 4.3. Malha bidimensional associada à fatia central do canaleta com as condições de contorno (superfície livre e simetria laterais).**

A figura 4.3 mostra a fatia com as condições de simetria laterais e de superfície livre no topo, observadas no problema físico real, o objetivo é criar numericamente tal deliberação.

Seguindo esta orientação, o modelo numérico deve ser estabelecido seguindo as demais características físicas do problema, ou seja, o modelo deve ser confeccionado levando-se em conta todos os elementos que influenciam o desenvolvimento do movimento do fluido tipo analisado.

Abaixo (Figura 4.4) temos uma idéia de como as condições de contorno serão aplicadas à fatia central do canaleta.

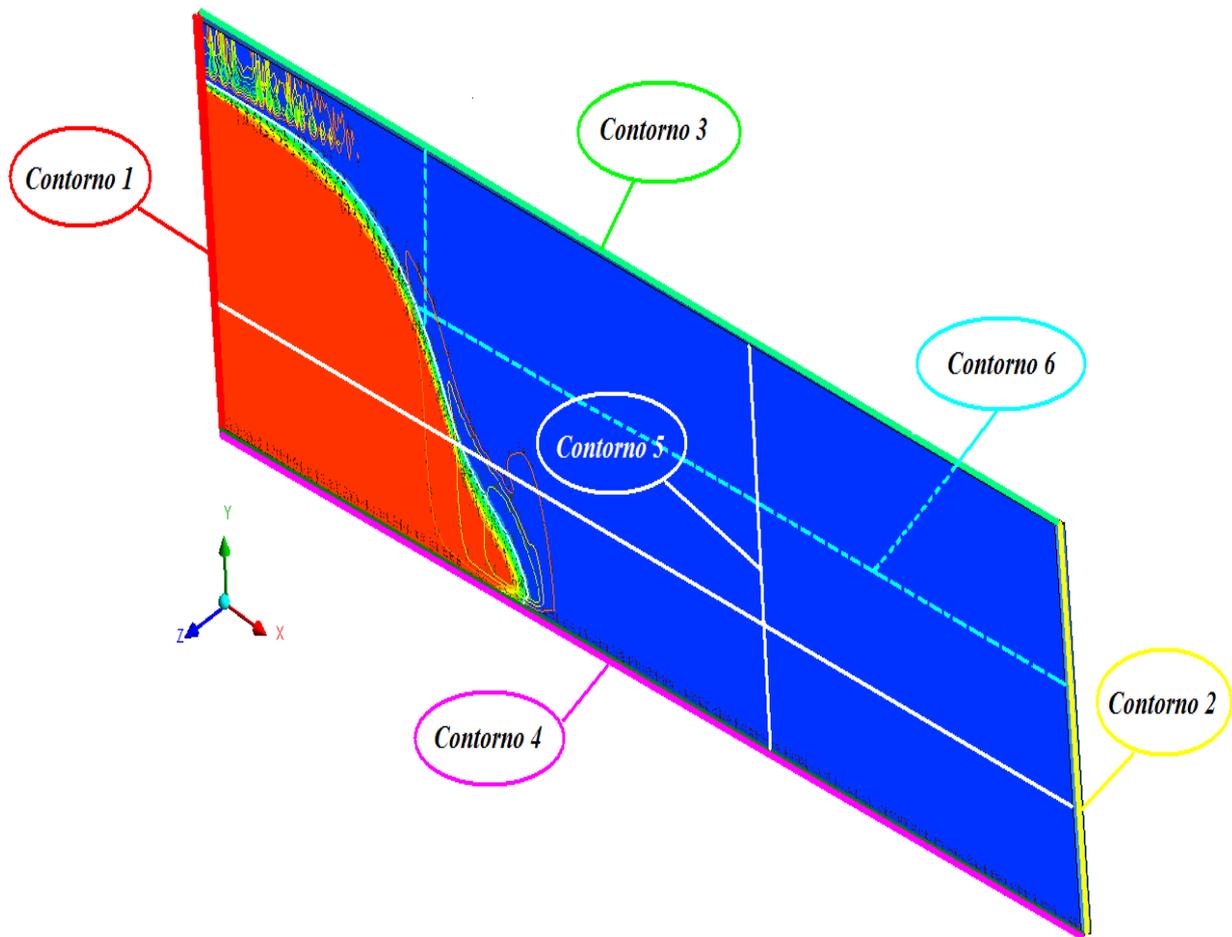


Figura 4.4. Condições de contorno aplicadas a cada superfície do domínio.

*Condições de contorno:*

- **Contorno 1:** Parede, condição de não deslizamento
- **Contorno 2:** Parede, condição de não deslizamento
- **Contorno 3:** Topo, condição de superfície livre
- **Contorno 4:** Fundo, condição de não deslizamento
- **Contorno 5:** Parede lateral esquerda, condição de simetria
- **Contorno 6:** Parede lateral direita, condição de simetria

Como observado, temos um domínio resultante com a forma geométrica de um paralelepípedo, que associado a uma malha hexaédrica linear quadrática (escolhida a partir da geometria do domínio), ou seja, cubos ao longo do domínio, que resultarão em volumes apenas na direção transversal “x”; A seguir temos os passos utilizados na confecção do modelo numérico, juntamente com a caracterização das ferramentas utilizadas.

### **ICEM**

O ICEM-ANSYS é um software da categoria CAD que conta com inúmeras funções que permitem ao usuário a construção de modelos de geometrias quaisquer, carros, aviões, tubulação de ventilação, canais, etc. A utilização deste software sobre o problema estudado deve-se a facilidade com que a plataforma absorve os dados e parâmetros envolvidos para com a simulação, possibilitando uma maior desenvoltura do usuário, uma vez que a sintaxe e a arquitetura do programa são similares para com o software utilizado no solver.

A construção numérica do canal através desta plataforma inspirou como procedimento inicial a construção da geometria do objeto, passando para a criação de blocos interativos, lembrando que a malha é confeccionada sobre estes blocos e não sobre a geometria, e a criação final da malha.

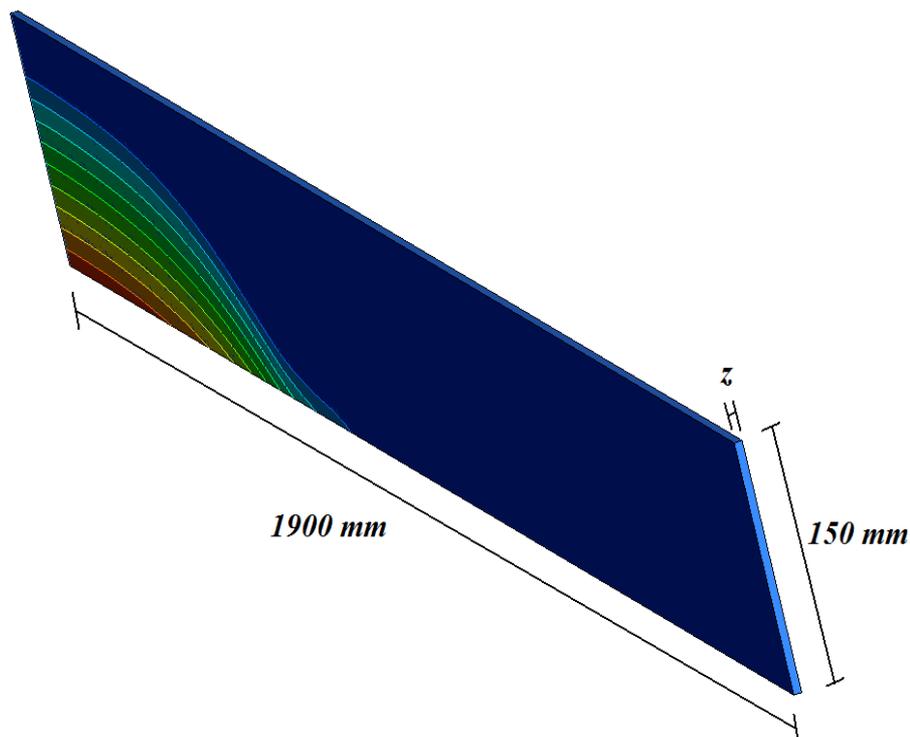
Para a formulação do modelo do canal e sua geometria, utilizaram-se funções básicas como a criação de pontos nomeados e linhas que interligam estes pontos. Após todo o esqueleto do canal ser levantado, foram dadas a ele superfícies, e essas recebem nomes adequados uma vez que no final do processamento é necessária grande atenção para a interpretação dos dados. Em seguida são deliberados blocos interativos para o canal, para que este pudesse ser malhado de maneira adequada. Para a criação da malha, primeiro deve-se criar a pré-malha que serve para a identificação de problemas e também facilita, se houver algum erro, a correção. Na pré-malha entramos com configurações básicas referentes à forma desejada dos volumes finitos associados à geometria e o bloco, ou seja, elementos na forma de cubos, pirâmides, hexaedros, ou outros, visualizando a melhor opção e assim obtendo uma

aproximação da pré-malha para a malha definitiva. Após a pré-malha estar pronta com todos os seus problemas corrigidos deve-se construir a malha adequada. A definição de uma boa malha é importantíssima para os resultados finais, uma vez que para uma boa aproximação dos resultados experimentais o modelo numérico deve ser confeccionado com o maior rigor possível. Por fim, após todo o modelo estar pronto, exportou-se este modelo para a plataforma CFX-ANSYS para que as simulações numéricas pudessem ser executadas.

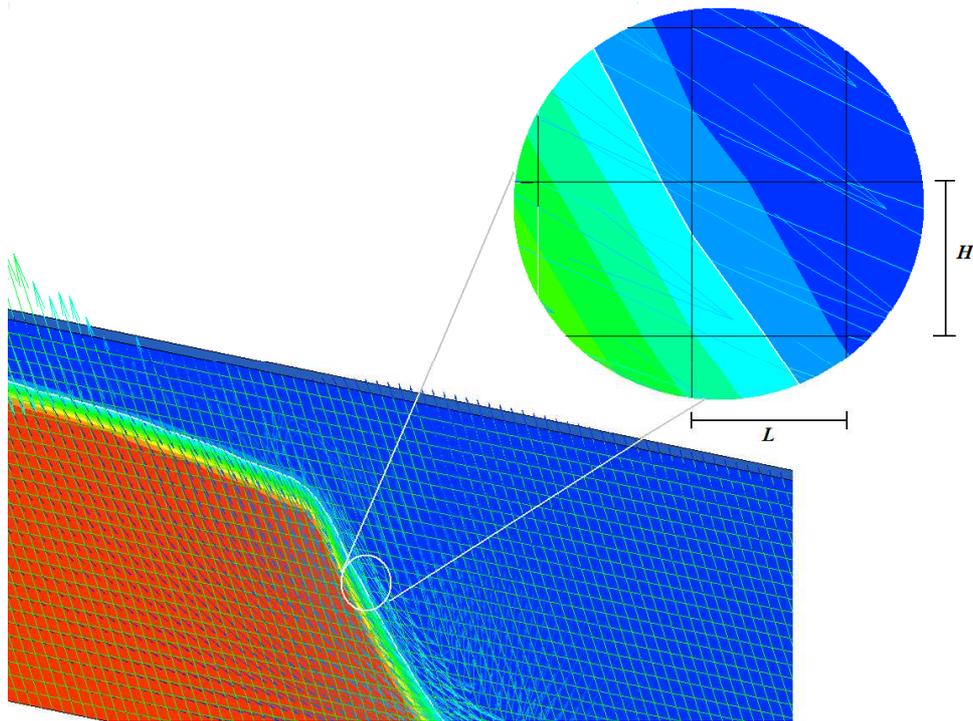
***Dados geométricos do domínio numérico:***

Na elaboração da geometria, dois valores se mantiveram constantes, o comprimento e a altura, porém, como a malha será gerada através de geometrias quadráticas ao longo da direção transversal, as células devem apresentar a largura da fatia com a mesma dimensão do quadrado lateral, resultando em cubos em todo domínio.

Foram desenvolvidas duas malhas, a primeira com cubos de 5 mm e uma segunda com cubos de 2.5 mm, para testar o refinamento do grid.



**Figura 4.5. Dimensões do domínio numérico.**



**Figura 4.6. Malha quadrática, visualização lateral com a altura ( $H$ ) e o comprimento ( $L$ ) de cada elemento regular do grid.**

*Dados referentes às malhas obtidas*

**Malha 1: Cubos de 5 mm**

Foi gerada uma malha com cubos ao longo da direção transversal do domínio com dimensões de 5 mm – malha hexaédrica linear quadrática.

**Número total de elementos:** 44.898

**Número total de nós:** 22.860



**Figura 4.7. Histograma de qualidade da malha com 44.898 elementos entre 0.95 e 1 de qualidade global.**

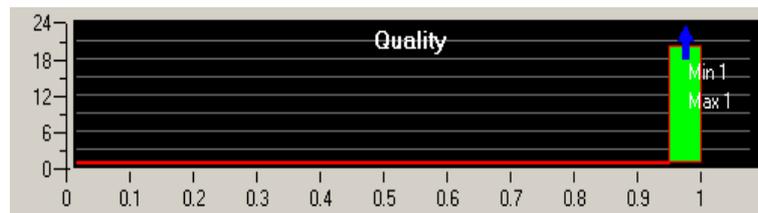
Este histograma exibe a qualidade global da malha. O eixo X mede a qualidade, com a numeração “0” para uma qualidade ruim e “1” para alta qualidade. O eixo Y mede o número de elementos que pertencem à determinada qualidade em cada sub-região da malha.

### Malha 2: Cubos de 2.5 mm

Foi gerada agora uma malha com cubos ao longo da direção transversal do domínio com dimensões de 2.5 mm para teste de refinamento.

**Número total de elementos:** 133.876

**Número total de nós:** 89.798



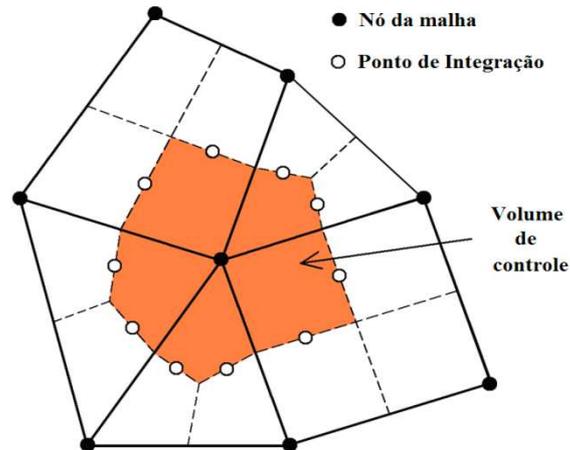
**Figura 4.8. Histograma de qualidade da malha com 133.879 elementos entre 0.95 e 1 de qualidade global.**

### 4.5.3. CFX-ANSYS

O CFX-ANSYS é baseado no método numérico de Volumes Finitos (FVM). Sendo assim, para uma maior compreensão dos tópicos seguintes, a seguir uma explanação sobre o assunto.

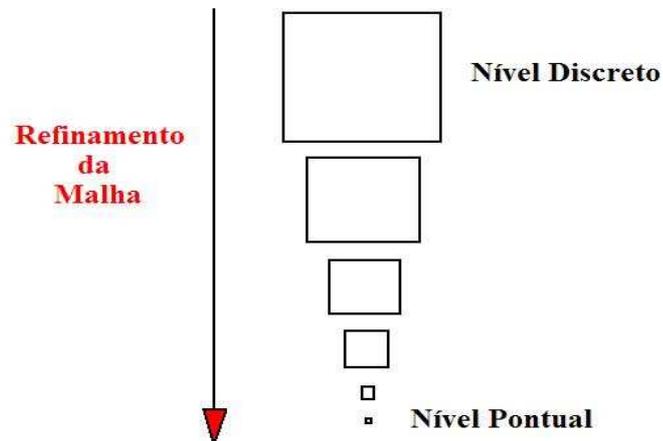
#### *Volumes Finitos*

Nesta técnica cada nó da malha está no centro de um volume de controle finito.



**Figura 4.9. Croqui de uma malha com volume de controle.**

O método de Volumes Finitos consiste basicamente em integrar as equações diferenciais governantes do fenômeno analisado em um volume de controle, avaliar as derivadas ainda presentes nas equações através de uma função de interpolação, e depois linearizar os termos de ordem superior. Os termos transientes no CFX são aproximados através de um esquema de segunda ordem, totalmente implícito. A função de interpolação utilizada na aproximação das derivadas espaciais é a *WUDS – Weighted Upstream Differencing Scheme*. O acoplamento pressão-velocidade ocorre conjuntamente, sendo que apenas uma matriz contém as informações das variáveis das equações do movimento. Com as equações algébricas obtidas, as mesmas são organizadas na matriz de coeficientes de acordo com a malha, que neste caso utiliza sempre uma formulação baseada no arranjo co-localizado. A matriz é resolvida através de decomposição ILU – MG (*Incomplete Lower Upper – MultiGrid*), que é realizado iterativamente, possibilitando uma solução robusta para o sistema de equações do modelo matemático. Este princípio, aplicado para todo o volume de controle, resulta em um sistema de equações que conserva a propriedade no nível do volume de controle. Lembrando que resolvendo, exatamente, a equação diferencial governante, significa obedecer ao princípio da conservação em nível pontual enquanto que, resolvendo-a usando volumes finitos significa obedecer ao princípio da conservação em nível discreto. A figura 4.10 dá uma idéia do que significa ir do nível pontual ao nível discreto. As equações de volumes finitos são, conseqüentemente, as equações discretas para o princípio físico da conservação.



**Figura 4.10. Discretização.**

A importância da busca por esquemas conservativos em níveis discretos está na física do fenômeno a ser resolvido. O transporte advectivo da quantidade de movimento, energia e qualquer outra quantidade escalar são realizadas pelo fluxo da massa. Então, para assegurar a conservação de qualquer quantidade escalar, é necessário que a conservação da massa seja estritamente imposta em cada intervalo de tempo.

### ***CFX-Pré***

Nesta frente do CFX, importa-se o arquivo criado através do ICEM-ANSYS, ou seja, a geometria do objeto e a sua malha. Após a importação do arquivo delibera-se a priori a criação do material, a definição das expressões matemáticas que regem o comportamento do mesmo, a localização dos materiais analisados a partir de suas frações volumétricas, as condições de contorno para o canal (lei de atrito para o fundo, simetria das laterais e condições de superfície livre para a região aberta). Todos os dados de entrada para uma sucinta simulação do campo de escoamento no canal devem ser devidamente inseridos, tais como o campo de pressão, velocidade inicial, temperatura, a direção da gravidade e a sua norma, a definição do modelo como homogêneo ou não homogêneo para os fluidos envolvidos, os detalhes destes, como a morfologia e constantes adicionais para a análise adimensional e interação entre os fluidos em caso de sistemas multifásicos.

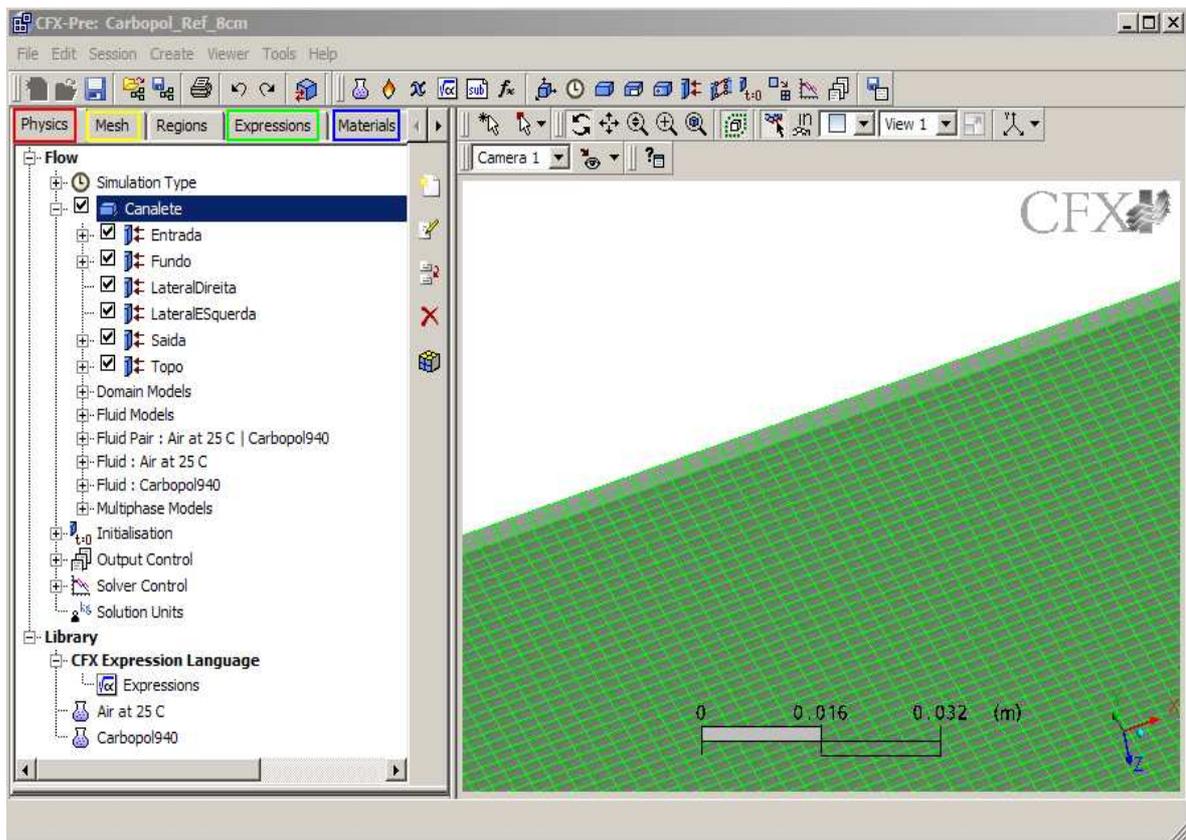
Para os dados almejados após o desenvolvimento da frente Solver do CFX, deve-se selecionar ainda no estágio Pré, as variáveis a serem calculadas e valores associados ao controle de convergência, tanto para o tamanho do resíduo como do passo. Neste caso o passo selecionado foi da ordem de 0.001s e um tempo de simulação total variando entre 1,0 e 1,5 segundos.

Após o termino desses procedimentos é iniciada a resolução do mesmo a partir da frente Solver.

A seguir serão explicitados os passos para entrada de dados, de tal forma que sua recriação posterior seja de fácil execução por parte do leitor.

### 1º Passo

Chamada do domínio e malha, pré-desenvolvidos, tipo de simulação geral com unidade configurada para milímetros no domínio.

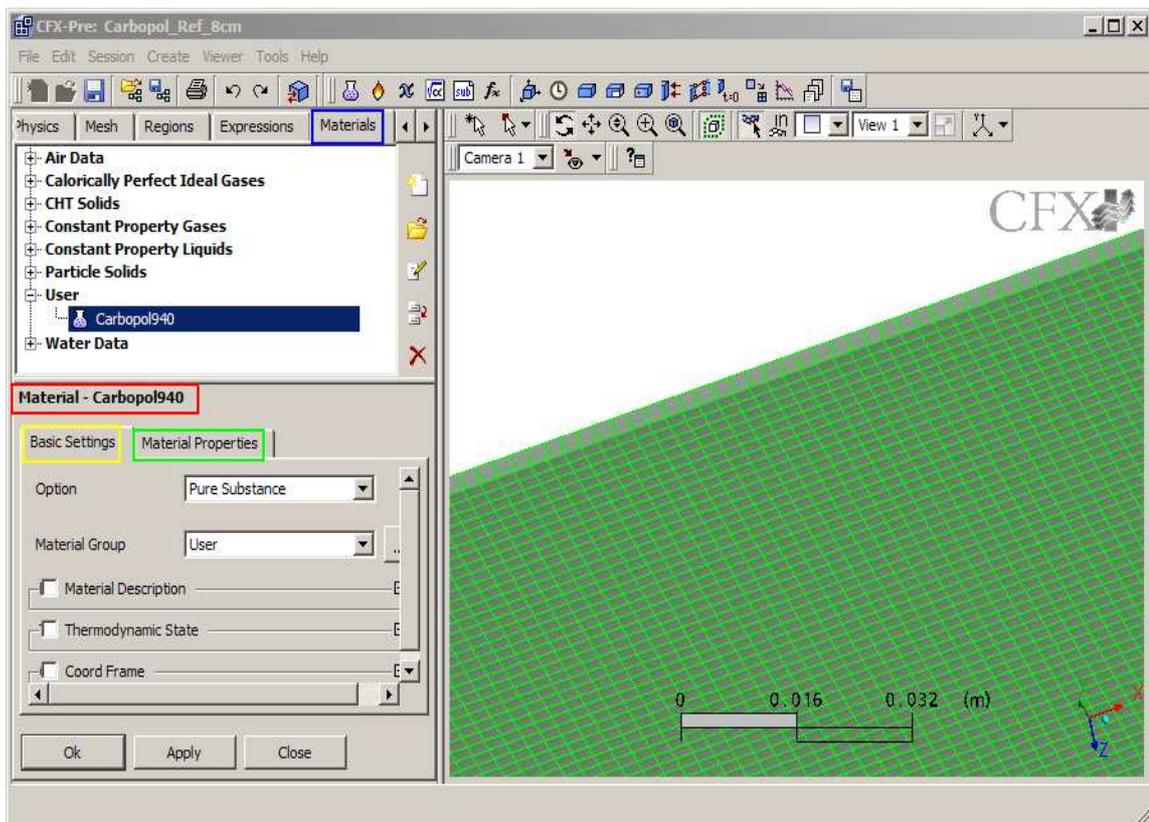


**Figura 4.11. Interface do CFX-Pré com as principais abas de configurações destacadas em cores.**

Conforme a figura 4.11, temos as principais abas de configurações destacadas em cores, o destaque em vermelho “Physics” esta associada à entrada de dados físicos do modelo, como, tempo de simulação, condições de contorno, condições iniciais e associação de materiais criados entre outros; Em amarelo “Mesh” temos a área responsável pela chamada da malha; Em verde a área de criação de expressões matemáticas associadas a simulação e variáveis a serem calculadas; Em azul a área associada a criação de matérias simulados.

## 2º Passo

Criação dos materiais simulados, no caso, criação do gelificante Carbopol 940 e posteriormente do Glicerol com todas as suas características físico-químicas associadas.



**Figura 4.12.** Interface de criação de materiais, no círculo vermelho temos o nome do material criado, em amarelo a aba para entrada de dados básicos como tipo de substancia e estado termodinâmico, em verde têm-se a entrada das propriedades termodinâmicas do material, assim como dados de densidade e transporte (viscosidade dinâmica).

### 3º Passo

Construção das equações associadas ao modelo, levando-se em conta dados referentes à reologia do material criado, assim como, dados associados às condições de contorno, condições iniciais, volume de material simulado e demais variáveis a serem computadas durante a simulação.

#### Condições Iniciais

A partir da idéia de modelo Euler-Euler, onde as fases são separadas por uma interface bem definida e visualizadas através de suas frações volumétricas distintas, as condições iniciais foram estabelecidas utilizando-se a função STEP (X) que permite delinear o volume de material no domínio numérico a partir de dados geométricos simples. A função STEP (X) retorna o valor “1” quando X for positivo, 0.5 se  $0 < X < 1$  e 0 se X for negativo. Desta forma o programa identifica a existência do material analisado sempre que X for positivo.

A fração Volumétrica do Carbopol 940 no canaleta foi chamada de VFcarb, e do ar de VFair, já que se trata de um problema bifásico. Com isso a seguinte equação pode ser deliberada utilizando-se a função STEP (X):

$$VFcarb = STEP(Lini - x) \cdot STEP(Hini - y) \quad (4.13)$$

Onde Lini e Hini, são respectivamente o comprimento e altura almejados por parte do fluido de trabalho, armazenado inicialmente no canaleta.

Sendo assim o campo de frações volumétricas do ar, será aquele que não é Carbopol 940, ou seja:

$$VFair = 1 - VFcarb \quad (4.14)$$

Outras variáveis podem ser definidas nesta área, como o campo pressão inicial responsável pela força motriz do campo de escoamento, uma vez que o mesmo se desenvolve a partir do gradiente de pressão.

$$P_{ini} = \rho_{Carb} \cdot g_y \cdot (H_{ini} - y) \quad (4.15)$$

**Campo de Velocidades iniciais:**

O campo de Velocidades iniciais é nulo, ou seja, possui valor zero em todas as direções, sendo configurado após o domínio numérico ser estabelecido.

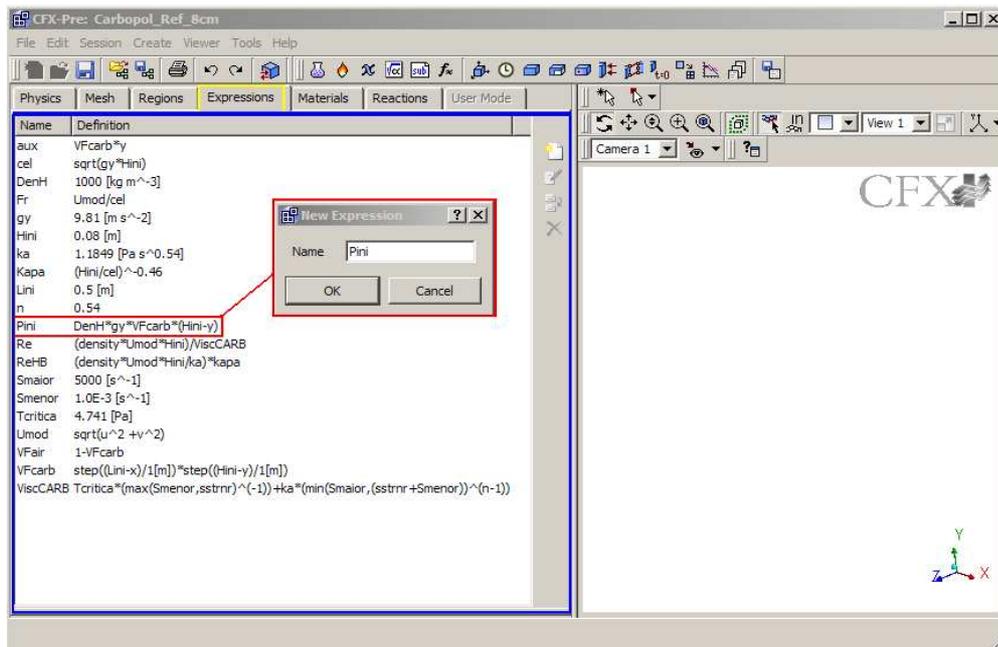


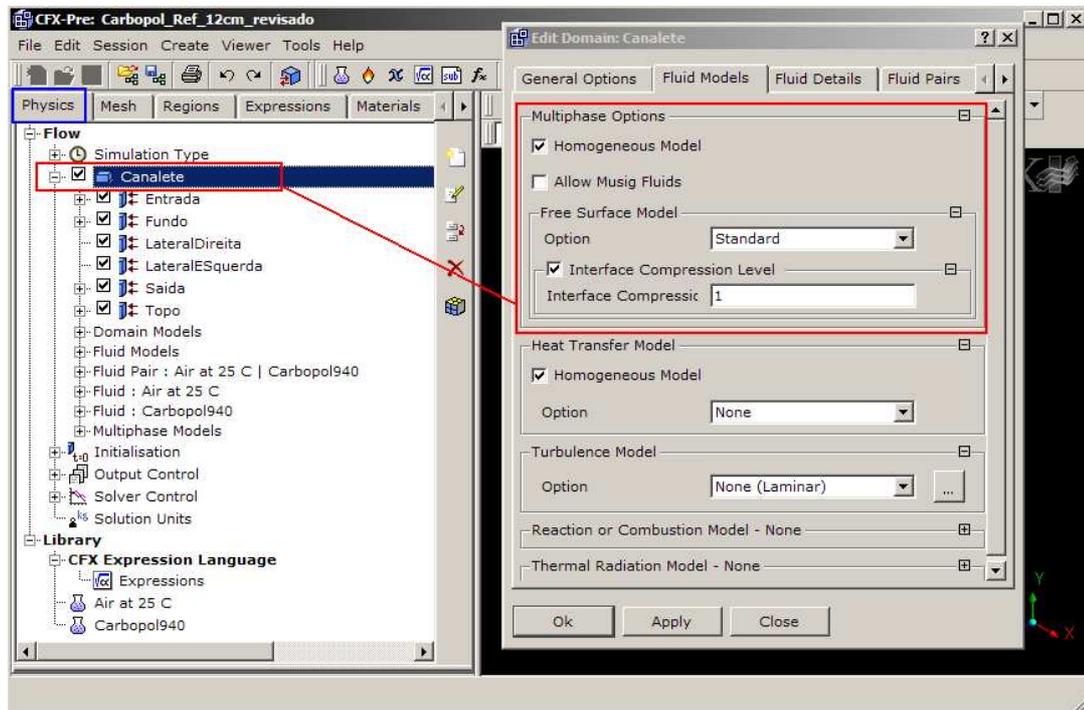
Figura 4.13. Entrada de expressões adicionais a serem computadas na simulação.

**4º Passo**

Criação do domínio físico, configuração das condições de contorno e dados de inicialização do simulador.

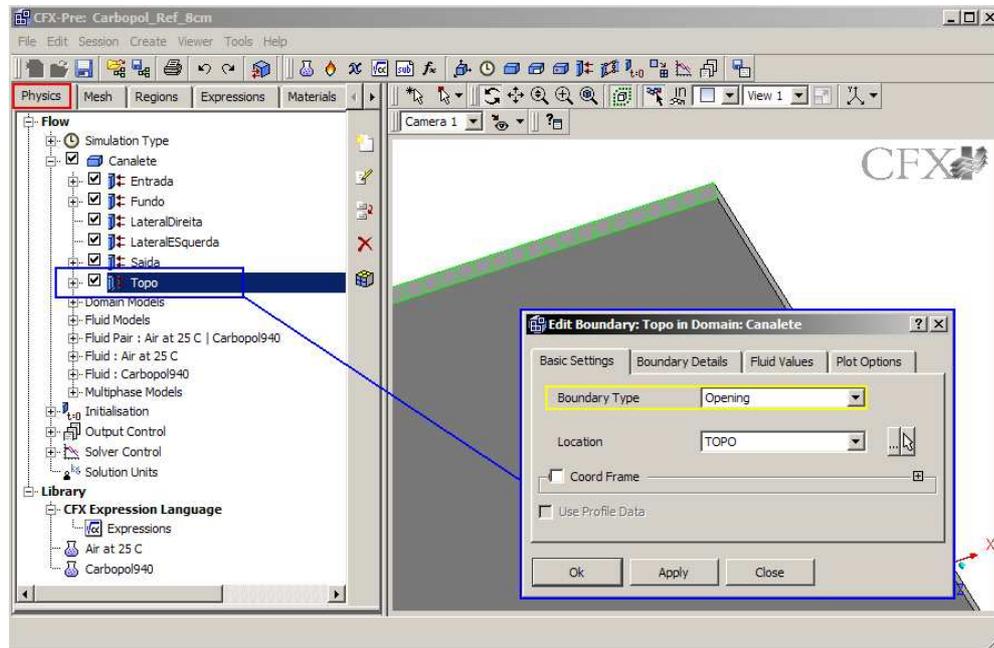
Após a criação das equações adicionais no passo anterior, associamos a malha já aberta no primeiro passo a um domínio passível de configurações, entrando com campos de

velocidades iniciais e atribuição de condições de contorno em todas as superfícies do domínio.

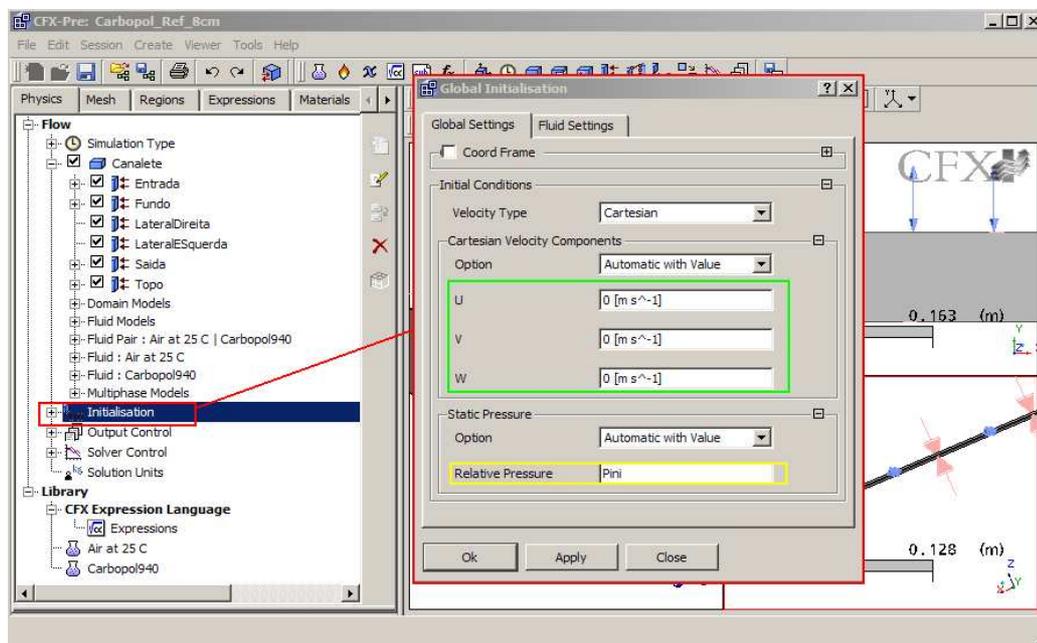


**Figura 4.14. Janela de edição do domínio “canalete”, caracterização de sistemas uni ou multifásicos e escolha do modelo como homogêneo ou não.**

Dentre as opções passíveis de configuração para a simulação, alguns pontos devem ser analisados e se julgados importantes, incorporados na mesma. Alguns modelos como o “Fluid Buoyancy model” que dita que diferenças de densidade entre as distintas fases de um problema multifásico é acometido por força de flutuabilidade, ou o “Surface tension force”, um modelo de tensão superficial baseado no modelo de Brackbill et al (1992), descrito no trabalho “A Continuum Method for Modelling Surface Tension”. Neste modelo a tensão superficial é tratada como uma força volumétrica concentrada nas interfaces. Quando a interface entre os dois fluidos cruzam uma parede, é possível através de cálculos envolvendo tensão superficial e gradientes de frações volumétricas, o ângulo de contato que a interface faz com a parede, como por exemplo, no caso de um problema multifásico caracterizado por um fluido residindo em um recipiente aberto.



**Figura 4.15.** Interfaces de configuração das condições de contorno com destaque em azul têm a condição de superfície livre (Opening) sendo associado à superfície “topo” do domínio numérico.



**Figura 4.16.** Dados de inicialização como campo de velocidades e campo de pressão inicial (Pini)

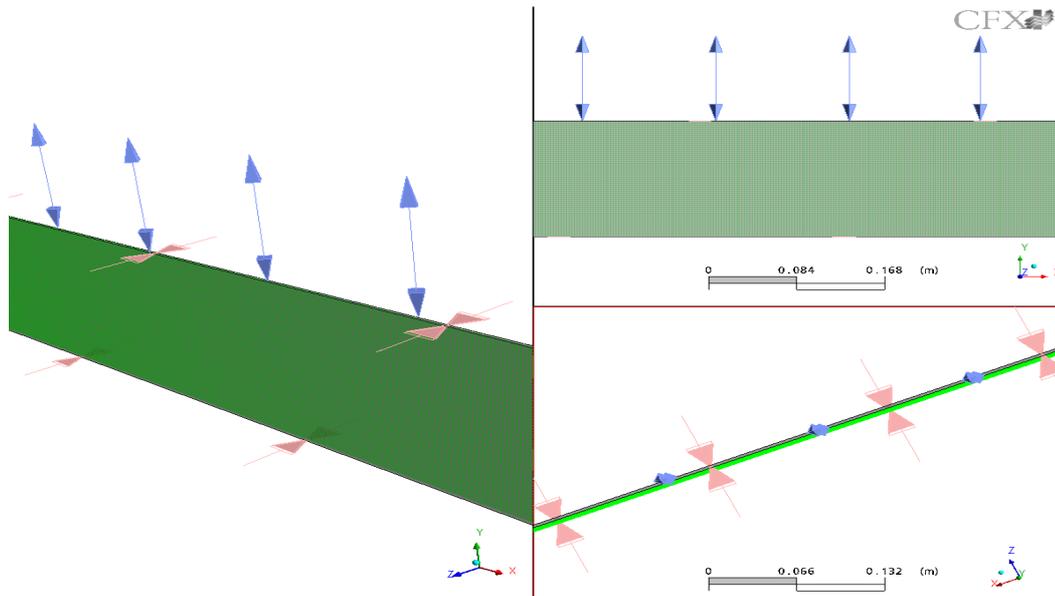


Figura 4.17. Diferentes visões da malha com as condições de contorno.

### Tempo de Simulação

Nesta área da aba “Physics” entramos com dados referentes ao tempo de simulação, tamanho do passo (timestep) e regime de escoamento.

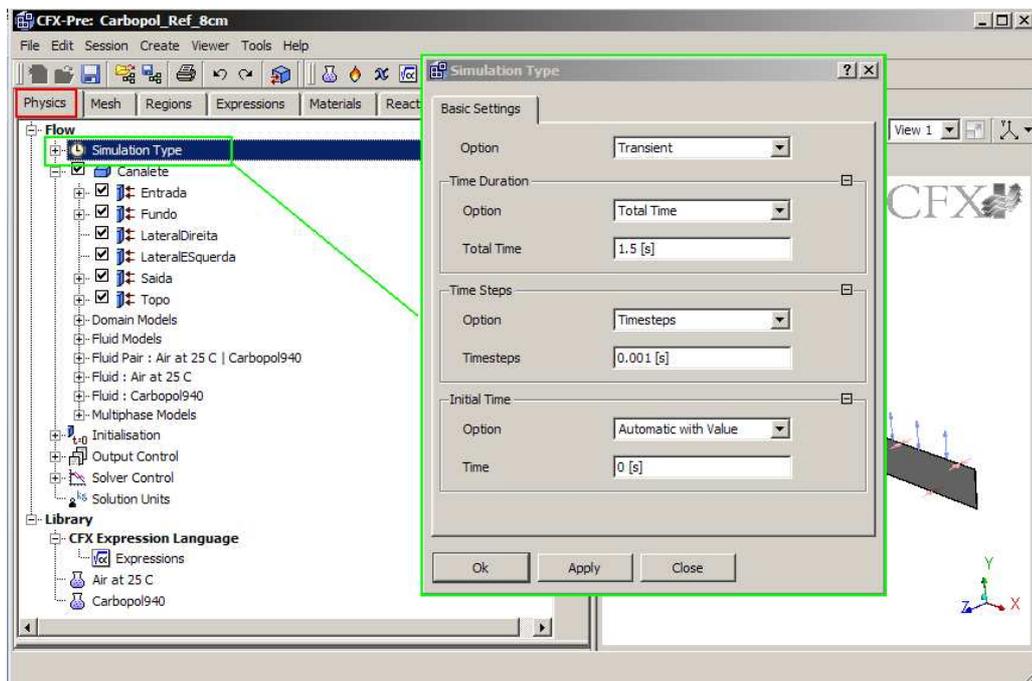
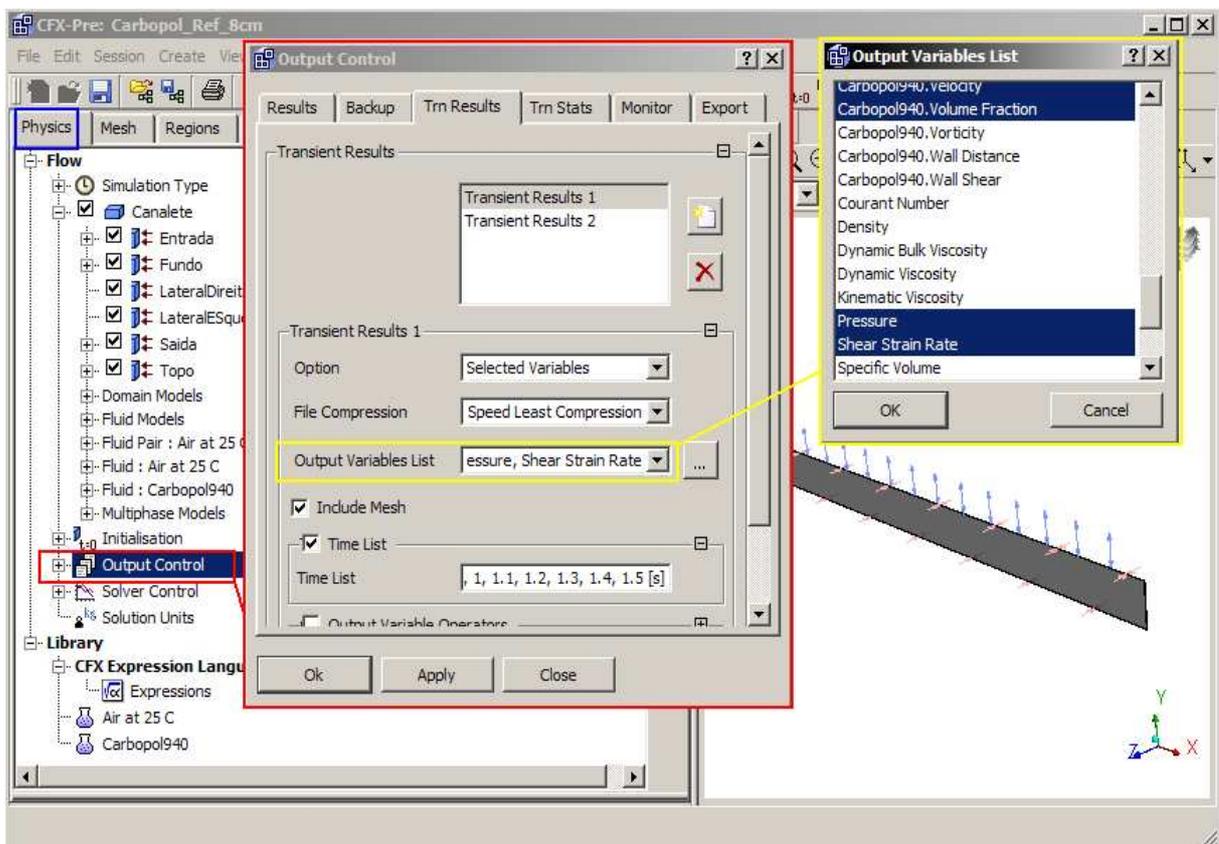


Figura 4.18. Tempo de simulação, passo e regime de escoamento.

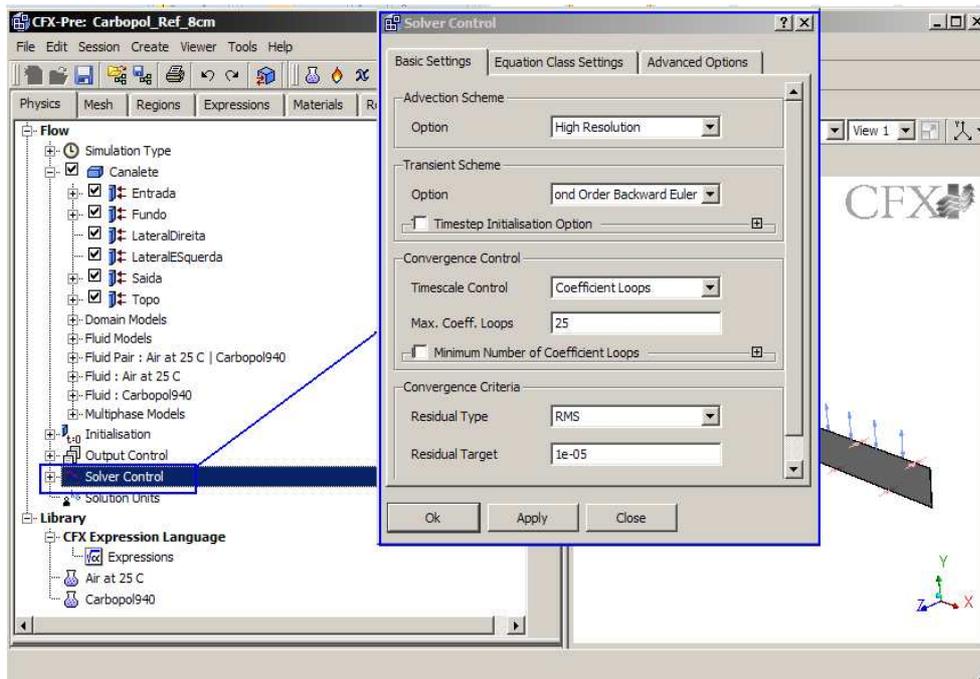
**5º Passo**

Configuração do “Output Control” e “Solver Control”, nesta área entramos com as variáveis de saída a serem analisadas, campos de pressão, velocidade, taxa de cisalhamento e etc. Além disso, configura-se também os pontos de cálculo completo dos campos ao longo do tempo, por exemplo, numa simulação de 2 segundos, podemos configurar que todos os campos sejam completamente resolvidos em frações desse tempo, de tal forma a obtermos dados quantitativos em diferentes períodos de tempo.

No “Solver Control” configura-se o tipo de esquema advectivo e transiente utilizados, além de critério e controle de convergência do método numérico de resolução.



**Figura 4.19. Output Control destacado em vermelho e variáveis analisadas em amarelo.**



**Figura 4.20. “Solver Control” destacado em azul e a janela de configurações, com entrada de critério de convergência, tipo de resíduo e esquemas advectivos e transientes do problema.**

### *CFX-Solver*

Nesta frente importa-se o projeto a ser simulado e após procedimentos padrões de salvamento e configurações referentes à precisão e processamento computacional o mesmo é iniciado.

Conforme a figura 4.21 abaixo, temos a janela de definição inicial do solver, tais como, definição da simulação salva no pré-processamento do CFX destacada em verde; em azul, temos a entrada de dados referentes a uma simulação já iniciada, cujos valores iniciais podem ser reaproveitados; possibilidade de processamento paralelo a partir do número de núcleos de processamento disponível na Workstation, neste caso, optou-se por um processamento paralelo PVM utilizando-se quatro processadores com prioridade total com dupla precisão.

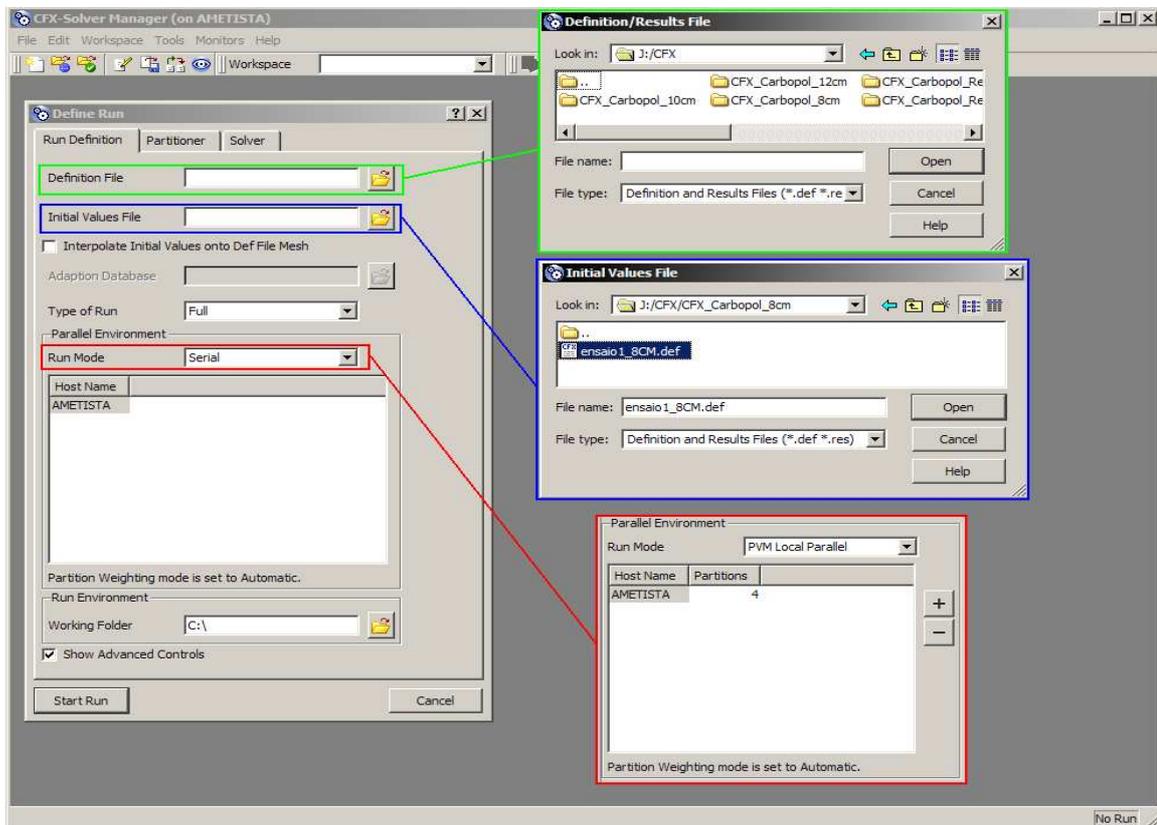


Figura 4.21. Interface de entrada para o Solver-CFX.

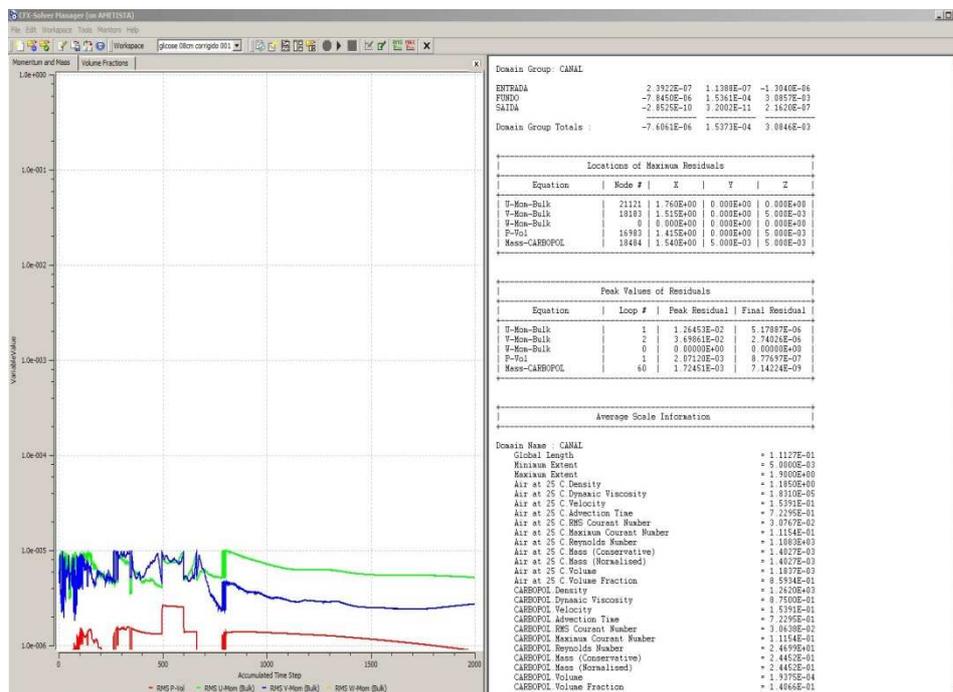
### *Processamento Paralelo*

Dentre os diferentes tipos de estruturas utilizadas para implementar o processamento paralelo, destaca-se o processamento paralelo com SMP (Symetric Multi Processor), uma sigla que designa computadores com mais de um processador com as mesmas características que também compartilham o mesmo BUS e a mesma memória física.

Para que uma simulação possa aproveitar esta tecnologia, disponível em Workstations multi-processadas, a mesma deve conter certas bibliotecas devidamente definidas em seu código fonte. Os dois grandes padrões para troca de mensagens em clusters são o Parallel Virtual Machine (PVM) e o Message Passing Interface (MPI), sendo o PVM o padrão mais antigo e estudado, muito utilizado em programas de engenharia e matemática e utilizado neste trabalho.

**Janela de processamento**

A janela do CFX-Solver é caracterizada por gráficos referentes a uma análise de resíduos para quantidade de movimento, conservação da massa e fração volumétrica, além de uma memorial de cálculo das variáveis anteriormente selecionadas, a partir do passo (timestep) estabelecido, e do tempo de processamento da máquina.



**Figura 4.22. Tela do CFX-Solver com gráfico RMS e memorial de cálculo.**

**Convergência dos resultados**

Uma medida referente à qualidade de convergência de uma solução pode ser obtida através da plotagem de um gráfico com os resíduos das equações analisadas ao término de cada passo (timestep). Para uma solução de convergência consistente, é esperado um resíduo máximo em torno  $10^{-3}$ . Tipicamente, o resíduo RMS terá um valor de magnitude inferior a este. O RMS (Root Mean Square que significa valor médio quadrático é uma medida estatística da magnitude de uma quantidade variável, ou seja, a raiz quadrada da média aritmética dos quadrados dos valores. Com isso temos uma idéia da ordem de grandeza geral

dos resíduos. O aumento do resíduo depois de um passo (timestep) particular qualquer, não significa que a solução está divergindo. É normal que os resíduos aumentem ocasionalmente, especialmente no início de uma simulação. Também é possível obter valores simulados que não convergem em nenhum ponto, mas simplesmente divergem em torno dos mesmos valores.

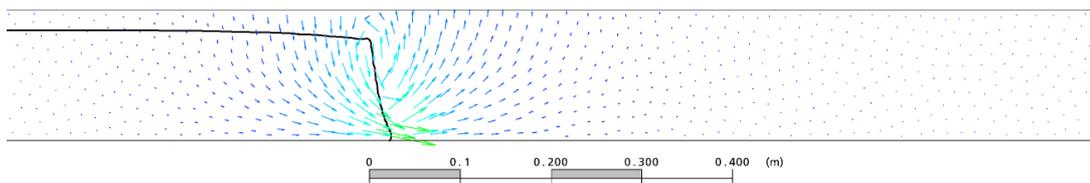
O ANSYS CFX-Solver desenvolve a solução de várias equações estabelecidas a partir de uma adaptação de modelos físicos reais em modelos teóricos equivalentes, equações estas que se moldam conforme o problema CFD particular analisado. Em qualquer fase de um cálculo, pode-se esperar que as equações não sejam exatamente satisfeitas. Na verdade, as equações analisadas quase sempre não serão satisfeitas de maneira exata, por isso é importante analisar os resíduos das equações, de forma a determinar a consistência dos dados revelados pelo software. Se a solução é “exata”, então os resíduos são nulos e a equação de volumes finitos foi precisamente satisfeita. Todavia, é importante lembrar que as mesmas são resultados de um modelo físico aproximado, e nem sempre condizem com a realidade. Se uma solução estiver convergindo, os resíduos devem diminuir com os passos (timesteps) subsequentes. Ao assumirmos que um determinado resíduo é  $0.0005 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ , é impossível determinarmos sua ordem de grandeza sem uma referencia real do problema analisado. Por exemplo, se o problema envolve fluxos onde entram e saem  $0.5 \text{ kg}$  de massa por segundo em cada volume da malha, então um resíduo de  $0.0005 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$  implica que a equação é satisfeita dentro de uma parte em mil, o que é uma solução razoável. Contudo, se o problema envolver fluxos de cerca de  $0.001 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$  em cada volume da malha, então o resíduo é quase tão grande quanto o fluxo, e a solução não é satisfatória. O desenvolvimento de uma escala com ordem de grandeza significativa para os resíduos se estabelece com a normalização dos resíduos em cada passo. São esses Resíduos Normalizados que são plotados pelo gerenciador do CFX-Solver.

Sendo importante dizer, que os resíduos são divididos pela gama da solução. Se a solução linear divergir, esta gama pode ser muito grande e os resíduos normalizados perdem o significado – CFX (2005).

### ***CFX-Post***

Na terceira frente do CFX, tem-se a possibilidade de interpretação dos dados obtidos por meio do Solver. O pós-processamento é uma etapa fundamental no processo de análise CFD. A enorme quantidade de dados gerados pelo Solver deve ser apresentada de maneira clara, de forma a ajudar o usuário na tomada de decisões referentes ao julgamento da consistência dos valores simulados obtidos. Um pós-processamento adequado deve fornecer ferramentas que permitam ao usuário não só a possibilidade de análises qualitativas através de visualizações elegantes, mas também, a extração de valores quantitativos que permitam ao mesmo, retiradas de dúvidas pontuais abrangendo todo o escopo de variáveis da simulação.

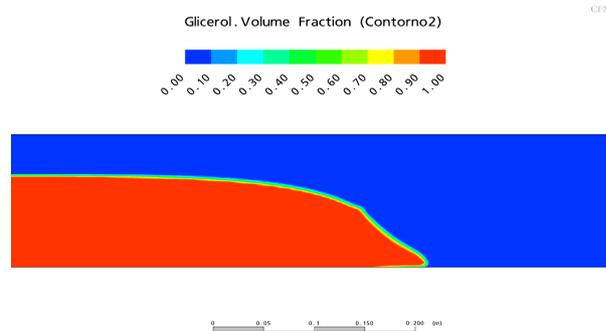
### Visualização em vetores



**Figura 4.23. Visualização vetorial para um campo de velocidades - propagação da frente.**

A visualização vetorial permite analisar de maneira clara não apenas a magnitude da variável especificada no campo de escoamento através de cores quentes e frias documentadas pela legenda lateral, mais também obter informações referentes às linhas de trajetória do campo de escoamento, e a possibilidade de uma visão privilegiada das frentes.

### Visualização em contornos



**Figura 4.24. Visualização em contornos para um campo de escoamento – Fração Volumétrica.**

## CAPÍTULO 5

---

### Simulação Experimental

---

#### 5.1. Simulação Experimental

**R**esultados numéricos devem sempre ser confrontados com dados reais, para assim obtermos o grau de sua consistência física. Esta validação é de extrema importância para a engenharia, pois permite depositar a confiança de novos projetos em resultados conseguidos em cima de modelos teóricos. Neste trabalho, utilizou-se uma serie de equipamentos sofisticados para obter experimentalmente uma visualização da propagação das frentes de fluidos de diferentes reologias, a fim de simular empiricamente o efeito de ruptura instantânea de barreira.

As imagens do desenvolvimento das frentes, desde o momento estático, passando pela iminência do movimento nos instantes subseqüentes a abertura da comporta, até a total plenitude do escoamento, foram captadas em duas frentes, a primeira com foco direcionado na abertura da comporta, e a segunda com uma visão mais aberta do fenômeno, mostrando o desenvolvimento da frente em maior escala, visualizando uma maior área do canal em modelo reduzido.

Na primeira frente da análise experimental, ou seja, com foco na abertura da comporta, utilizou-se uma câmera ultra-rápida *i-Speed2-Olympus* capaz de captar até 33.000 frames por segundo, e na segunda frente uma filmadora digital JVC (GY DV 500) para uma visão mais ampla do fenômeno.

A priori é levantada a ficha reológica dos fluidos simulados, tendo-se assim a certeza de que todo o processo empírico será cuidadosamente controlado, tornando possível a recriação do mesmo com total fidelidade em âmbito numérico.

Para isso, voltando na ordem cronológica dos ensaios, foi necessária a confecção de um dos fluidos tipo analisados, o Carbopol 940-Cabopol<sup>®</sup> (Não-Newtoniano), sendo assim possível levantar dados referentes a sua identidade reológica e assim passar para o próximo estágio experimental, a simulação do fenômeno “Dam Break” Ruptura de barreira.

O fluido tipo utilizado para a simulação Newtoniana foi o Glicerol, obtido de laboratório químico, onde a única modificação em sua composição foi um corante artificial que nada alterou em sua reologia conforme análises pré-estabelecidas aos ensaios e colocadas mais a frente neste trabalho.

O canal utilizado foi inteiramente construído em acrílico, e a comporta associada a um atuador pneumático, tornando o processo automatizado para o maior controle do experimento.

Com isso temos uma idéia inicial do estágio experimental deste trabalho, a seguir cada passo é discutido mais apropriadamente e assim um melhor entendimento será alcançado pelo leitor.

## **5.2. Aparato Experimental**

Nesta parte do trabalho estão dados relativos aos equipamentos utilizados na simulação experimental, englobando desde aparatos de Reometria, canaleta, filmadoras e itens de laboratório químico utilizados na confecção do Carbopol 940.

### **5.2.1. Descrição dos equipamentos de Reometria**

#### ***Reômetro***

O reômetro utilizado é um R/S Rheometer, da empresa Brookfield Engineering, possuindo quatro conjuntos de cilindros coaxiais para a análise de diferentes tipos de materiais a partir de faixas de operações (tensões, taxas de deformação, viscosidades) distintas.

Os conjuntos de cilindros coaxiais (copos e “spindles”) são diferenciados a partir de uma numeração característica e apresentam o seguinte mecanismo físico de trabalho:

1. O cilindro interno é rotacionado (“Spindle”);
2. O cilindro externo é mantido estático;
3. O material no “Gap” é submetido à tensão cisalhante.

O reômetro apresenta duas configurações de trabalho: controle da tensão de cisalhamento (CSS – Controlled Shear Stress) e controle da taxa de deformação (CSR – Controlled Shear Rate), tais configurações podem ser estabelecidas pelo usuário a partir da interface de operações do próprio reômetro ou através do software *REO 2000* que acompanha o equipamento.



**Figura 5.1.** Aparelhagem utilizada para os ensaios de reometria, reômetro e spindles respectivamente.

**Tabela 5.1.** Faixas de Operação dos Spindles (Brookfield Viscometers, 1998)

<i>Variável</i>	<i>CC 48</i>	<i>CC 45</i>	<i>CC 25</i>	<i>CC 14</i>	<i>CC 8</i>
$\dot{\gamma}$ (1/s)	0 - 4114	0 - 1032	0 - 1032	0 - 1032	0 - 1032
$\tau$ (Pa)	0 - 206	0 - 195	0 - 1141	0 - 6501	0 - 34844
$\eta$ (Pa.s)	0.005-32	0.020-15	0.118-100	0.675-500	3.60-3000

**Banho térmico:**



**Figura 5.2. Banho térmico utilizado nos ensaios de Reometria.**

Para que o material analisado mantivesse uma temperatura constante de trabalho, foi utilizado um equipamento que permite controlar a temperatura do mesmo no “Gap”, entre o “Spindle” e o copo externo. O equipamento para banho térmico utilizado é o *TC – 501* sendo da mesma empresa do reômetro.

**5.2.2. Descrição dos equipamentos utilizados na preparação do Gel Carbopol 940**

***Millipore - Simplicity® Ultrapure water Systems***

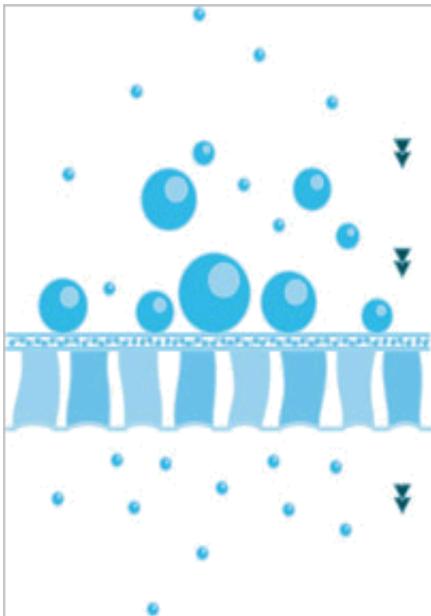


**Figura 5.3. Aparelhagem Millipore. (a)Modelo Simplicity Milli-Q; (b)Milli-Q ligado a um sistema deionizador por osmose reversa.**

A água Milli-Q é uma água ultra pura obtida somente em um sistema Milli-Q fornecido pela Millipore Corporation.

O sistema Simplicity® Ultrapure water é abastecido por uma central deionizadora (osmose reversa) que desenvolve um pré-tratamento dos eletrólitos da água.

### ***Ultrafiltração***



Um filtro de membrana micro porosa remove partículas de acordo com o tamanho dos poros. Em contrapartida, uma membrana de ultrafiltração (UF) funciona como uma peneira molecular. Ela separa moléculas dissolvidas em função de suas dimensões, passando através de um filtro de tamanho infinitesimal.

O filtro para ultrafiltração é uma dura, fina e permeável membrana que retém a maior parte das macromoléculas acima de certo tamanho (Peso Molecular nominal Limite), incluindo colóides, microorganismos e pirogêneos, além de moléculas menores, tais como solventes e contaminantes ionizados, que estão autorizados a passar pelo filtro. Assim, a ultrafiltração fornece uma fração retida que é rica em macromoléculas, e um filtrado que contém poucas dessas moléculas.

### ***Aplicações***

- a) Análise de cromatografia de íons;
- b) Preparação soluções padrão para espectrofotometria, espectroscopia ou outras técnicas analíticas;
- c) Preparação de soluções bioquímicas.

*Especificações*

**Tabela 5.2. Especificações Millipore Simplicity (2008)**

<i>Simplicity<sup>®</sup> Ultrapure water Systems</i>	
<b>Resistivity, MW·cm at 25 °C</b>	18.2
<b>TOC, ppb</b>	<15
<b>Flow Rate, L/min</b>	>0.5
<b>Final Filter, µm</b>	0.05
<i>Dimensions</i>	
<b>Height, cm (in.)</b>	51 (20.1)
<b>Width, cm (in.)</b>	29 (11.4)
<b>Depth, cm (in.)</b>	36 (14.2)
<b>Operating Weight, kg (lb)</b>	8.4 (18.4)

*Balança e pHmetro*



**Figura 5.4. pHmetro e Balança utilizados na preparação do gel Carbopol 940 respectivamente.**

A balança com tara apresenta precisão de  $10^{-4}$  e o Instrumento de aferição de pH que funciona basicamente através da imersão do eletrodo na solução e análise da diferença de potencial entre as placas do eletrodo apresenta precisão de  $10^{-3}$ .

### 5.2.3. Descrição dos equipamentos de Filmagem



**Figura 5.5. Equipamentos de filmagem, câmera ultra-rápida i-Speed2-Olympus e JVC (GY DV 500) respectivamente.**

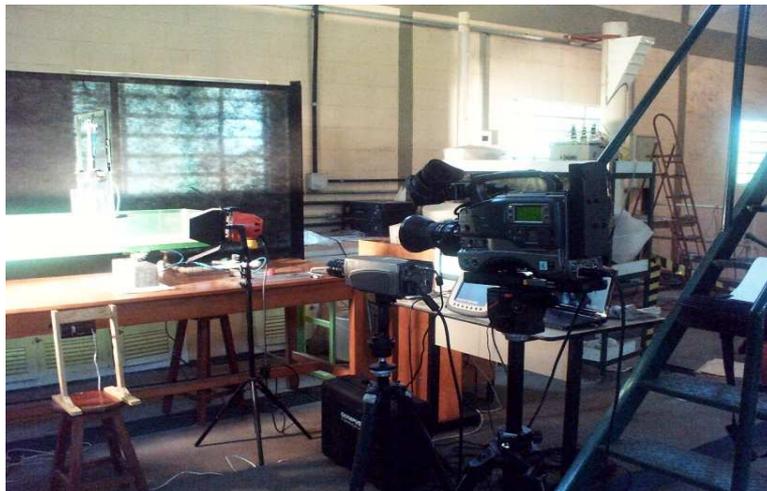
A câmera ultra-rápida i-Speed2-Olympus apresenta um desempenho que possibilita visualizar frame a frame a evolução da frente do fluido inicialmente retido, com imagens únicas dos instantes subseqüentes a abertura da comporta. Proporcionando assim a possibilidade de comparar segundo a segundo o desenvolvimento da frente do campo de escoamento com os resultados numéricos. Utilizou-se a mesma com configuração em 150 frames por segundo, uma vez que o aumento no número de frames está intimamente ligada a potência de iluminação do objeto filmado.

#### *Especificações*

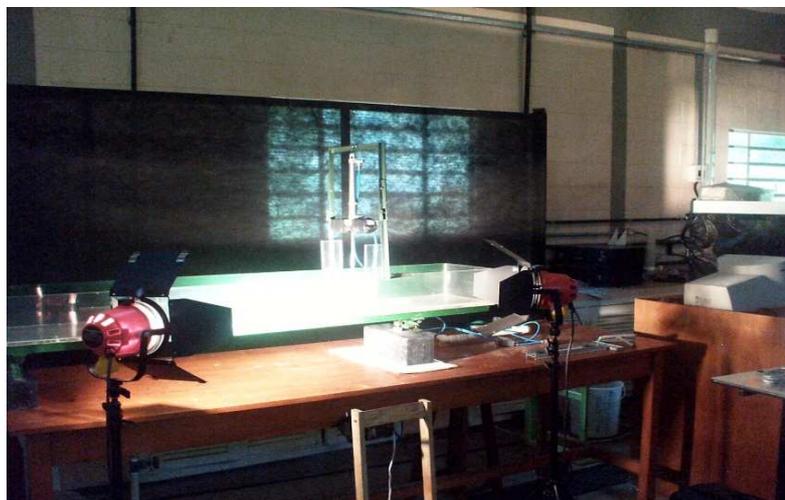
- a) Olympus quality custom designed CMOS 800x600 sensor
- b) Full resolution recordings to 1,000 fps
- c) 33,000 fps maximum recording speed

- d) Monochrome or Color 2GB and 4GB upgradeable Memory Options
- e) Ruggedised HiG options (100G)
- f) 100 Base T Ethernet Connection
- g) Trigger options 0-5V TTL / Normal / ROC / BROCC
- h) C-mount lens connection
- i) Download to CF Card

A câmera digital JVC (GY DV 500) profissional apresenta uma perfil menos sofisticado, sendo utilizada para abordar os campos que a ultra-rápida não focalizava, no caso, as áreas do canal onde o campo de escoamento se desenvolvia em plenitude.



**Figura 5.6. Posicionamento das câmeras no set de filmagem.**

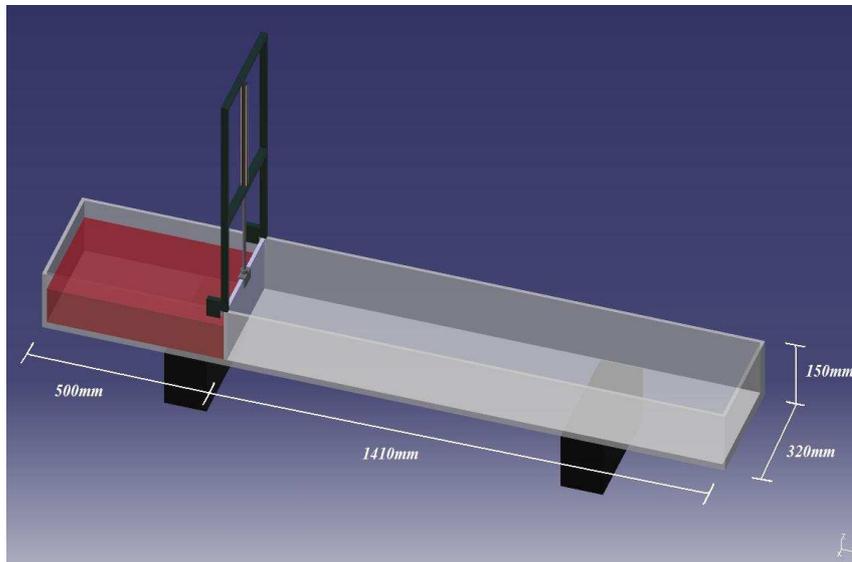


**Figura 5.7. Aparelhagem montada e esquema de iluminação com fundo negro.**



**Figura 5.8.** Visão aérea do canal com o foco da câmera ultra-rápida explicitada no retângulo em grid amarelo.

#### 5.2.4. Descrição do Canal



**Figura 5.9.** Croqui do canaleta com suas dimensões em milímetros.

O canaleta foi fabricado utilizando-se chapas de acrílico de 10 milímetros de espessura nas regiões: lateral direita, fundo e extremidade superior. Na lateral esquerda utilizou-se um acrílico com coloração verde, no intuito de evitar reflexos causados pela iluminação direcionada dos olofotes de alta potencia.

A comporta foi confeccionada também com acrílico, na mesma espessura do canaleta, sendo conectada a uma garra metálica associada a um atuador pneumático, um pistão de acionamento automático, que irá notadamente simular a ruptura estantânea de maneira controlada e precisa.



**Figura 5.10. Imagem frontal do canaleta.**

### 5.3. Formulação do Gel Carbopol 940

É necessário muito cuidado na preparação de um gelificante. A priori define-se a concentração em massa do Carbopol 940 e a quantidade de gel a ser produzida. A concentração é dada por:

$$C = \frac{m_{Carb}}{m_{H_2O-Milli-Q} + m_{carb} + m_{NaOH}} \quad (5.1)$$

$C$  é a concentração em massa do Carbopol;

- $m_{\text{Carb}}$  é a massa de Carbopol;
- $m_{\text{H}_2\text{O-Milli-Q}}$  é a massa de água utilizada na mistura com o Carbopol;
- $m_{\text{NaOH}}$  é a massa de hidróxido de sódio;

Para a neutralização, é necessária uma massa 3.2 vezes menor de hidróxido de sódio com relação à massa de Carbopol.

$$\frac{m_{\text{Carb}}}{m_{\text{NaOH}}} = 3.2 \quad (5.2)$$

Escolhida a concentração, os valores das massas necessárias para a produção do gel são obtidos com o auxílio de uma planilha feita em Excel.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	<b>Preparação do Gel Carbopol 940</b>										
2											
3											
4	<b>Solução</b>										
5											
6											
7	Carbopol 940		Massa de água (g)			Massa de Carbopol 940 (g)					
8			2000			2,95					
9											
10	<b>Bases Inorgânicas</b>										
11											
12	NaOH		Massa de água (g)			Massa de NaOH (g)					
13			100			0,92186					
14											
15											
16	Trietanolamina		Massa de água (g)			Massa de Trietanolamina (g)					
17											
18											
19											
20	<b>Solução Neutralizada de Carbopol 940</b>										
21											
22	Concentrações requeridas										
23											
24						<b>Proporção Polímero - Base</b>					
25						Carbopol - NaOH				3,200051	
26						Carbopol - Trietanolamina				1	
27											
28											
29	Carbopol 940 (%)				NaOH (%)					Trietanolamina (%)	
30	0,140218				0,043817						
31											
32											

Figura 5.11. Planilha do Excel utilizada para obtenção das massas de água, NaOH e de Carbopol 940.

A planilha relaciona as proporções mássicas exatas para a concentração requerida, a partir da quantidade de gel a ser produzido.

### Composições mássicas

A priori foi desenvolvido para a bateria de testes reológicos, um gelificante com percentual de massa de Carbopol 940 estabelecido em 0,13%, uma vez que estudos anteriores, Minussi (2007), mostraram que essa concentração promove um característico reológico ótimo para este trabalho, ou seja, o modelo reológico ideal com viscosidade aparente impar.

**Tabela 5.3. Produção de Gel Carbopol 940.**

<i>Carbopol 940</i>	<i>Massa de água(g)</i>	<i>Massa de Carbopol (g)</i>	<i>Concentração de Carbopol</i>
	2000,00	2,95	0,137%
<i>NaOH</i>	<i>Massa de água(g)</i>	<i>Massa de NaOH (g)</i>	<i>Concentração de NaOH</i>
	100,00	0,92	0,914%

**Tabela 5.4. Solução neutralizada de Gel Carbopol 940.**

<i>Massa de água(g)</i>	<i>Massa de Carbopol (g)</i>	<i>Massa de NaOH (g)</i>	<i>Massa de água(g)</i>	<i>Concentração de Carbopol</i>	<i>Concentração de NaOH</i>	<i>Taxa Carb/NaOH p/ neutr 3.2</i>
0.0	2.95	0,92	2100,00	0,137%	0,044%	3,20

### Modo de Preparo

Inicialmente é analisado o pH da água Milli-Q (pré-Deionizada por osmose reversa) através de um pHmetro devidamente calibrado, sendo constatado o valor de 6,16 pH a temperatura de 25°C.

A quantidade exata de água Milli-Q (2000g) é submetida a um banho-maria para o alcance do equilíbrio térmico em 70°C.

O polímero Carbopol 940 deve ser então polvilhado sobre a água Milli-Q pré-aquecida sob agitação manual.

Após o pré-dissolvimento do carbopol é adicionada a solução com NaOH para a quebra dos grupos Carboxilas e com isso a obtenção do espessamento característico de um gelificante Carbopol 940.

Um “Overnight” é necessário para a estabilização da preparação, ou seja, um tempo de descanso para o gel em torno de 12 horas.

A preparação com água Milli-Q “ultra-pura” resultou num gelificante totalmente homogêneo (condutância em torno de  $0,22 \mu S / cm$ ), livre de bolas ou miselas resultantes de partículas iônicas dispersas na água (devido ao processo Milli-Q).

**Necessidade do tratamento Millipore para obtenção de água ultrapura (sem necessidade de “Over Night” prolongado):** A água dura de ilha solteira (altas concentrações de sódio e magnésio) que mesmo submetida ao processo de deionização (tratamento de eletrólitos), quando feita análise de cromatografia de íons, ainda apresenta íons dispersos na mesma, o que inviabiliza a produção direta de gel sem o tratamento Millipore.



**Figura 5.12. Base inorgânica de NaOH em micropérolas e recipiente com água Milli-Q e Becker para medidas volumétricas.**

#### 5.4. Procedimentos experimentais em análises reométricas

O procedimento utilizado nos ensaios de reometria é bem simples e repetitivo, podendo ser resumido da seguinte forma:

Inicialmente é ligada toda a aparelhagem (reômetro, banho térmico e microcomputador);

A temperatura do banho térmico é então configurada e ajustada. O princípio de funcionamento deste equipamento é a manutenção da temperatura de um fluido circulante por meio de aletas aquecedoras e refrigeradoras. Este fluido circula pela “jaqueta térmica” (acessório acoplado ao reômetro, que envolve o “spindle”, mantendo constante a temperatura da amostra. Dependendo da faixa de temperatura na qual se está trabalhando, é usado um tipo de fluido circulante. Para temperaturas variando entre 5 e 80°C, o fluido é a água (típico fluido de trabalho em fins de refrigeração).

Encaixa-se o “spindle” escolhido, contendo a amostra previamente preparada, ao reômetro. A escolha do “spindle” é feita de acordo com a “consistência” da amostra, pois cada acessório abrange uma faixa de viscosidade na qual pode trabalhar. Quando o “spindle” escolhido não é capaz de realizar o teste, este deve ser substituído.

No software, configura-se todo o procedimento de ensaio: é feita a opção por ensaio controlando tensão ou deformação, deve ser indicado o “spindle” utilizado, define-se o tempo de ensaio e a faixa de deformação ou tensão imposta (para a coleta dos dados de tensão ou deformação, respectivamente). Em seguida, o reômetro é acionado do próprio software e o teste tem início.

Devido à alta sensibilidade do reômetro, deve-se fazer a calibração semanalmente, de modo a se ter sempre dados confiáveis.

#### 5.5. Ambientalização com Software RHEO 2000

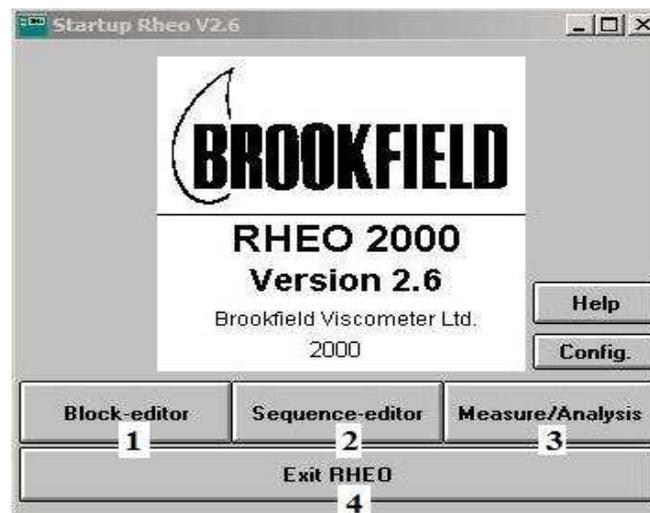
O reômetro R/S Rheometer, da empresa “Brookfield Engineering”, apresenta uma interface direta com o usuário através de um visor digital localizado na parte superior do equipamento com os comandos básicos de funcionamento, o que permite realizar sem problemas qualquer ensaio reométrico, porém, para aproveitar todo o potencial do

equipamento, a empresa “Brookfield Engineering” disponibiliza um software que acompanha o conjunto, denominado RHEO 2000.

O software RHEO 2000 apresenta uma interface simples que possibilita configurar qualquer tipo de análise reométrica, sendo o mesmo subdividido em três partes, cada uma direcionada a um estágio distinto do processo.

A seguir um rápido menu de funcionamento do software para a maior ambientalização do leitor com o mesmo.

### *Startup RHEO 2000 – Estabelecendo as configurações de uma análise*



**Figura 5.13. Interface de apresentação**

1. **Block-editor:** Bloco de edição da análise reométrica almejada;
2. **Sequence-editor:** Edição para análises sequenciais de blocos distintos;
3. **Measure/Analysis:** Carregamento de blocos editados para o início físico da análise reométrica e verificação posterior dos dados obtidos.
4. **Exit RHEO:** Sair do programa.

### *Block-editor – Estabelecendo as configurações de uma análise*

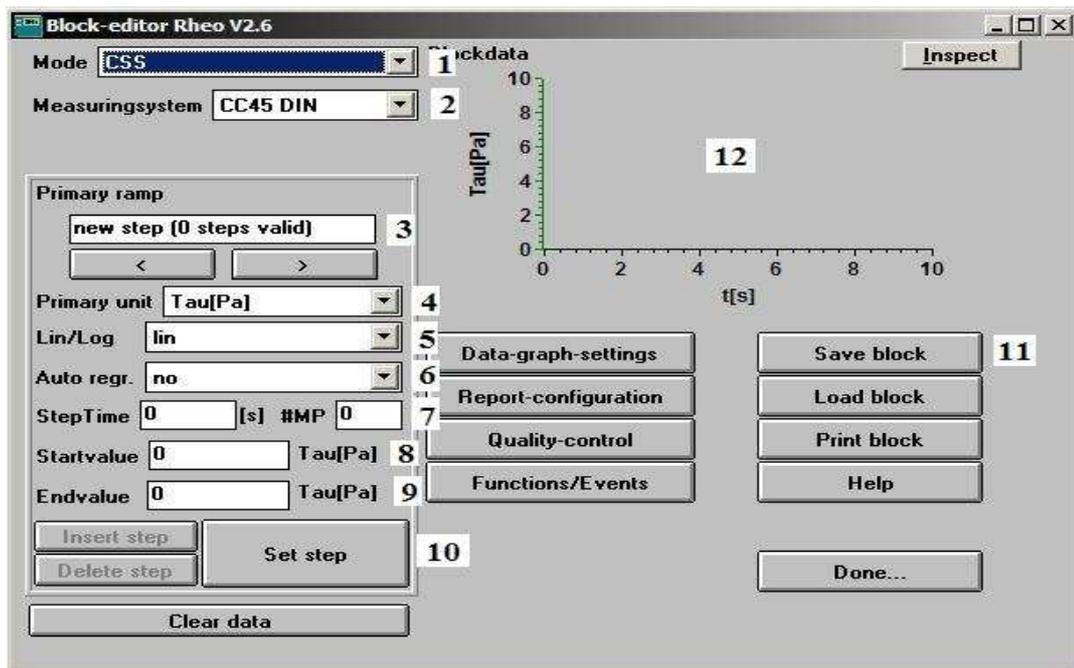
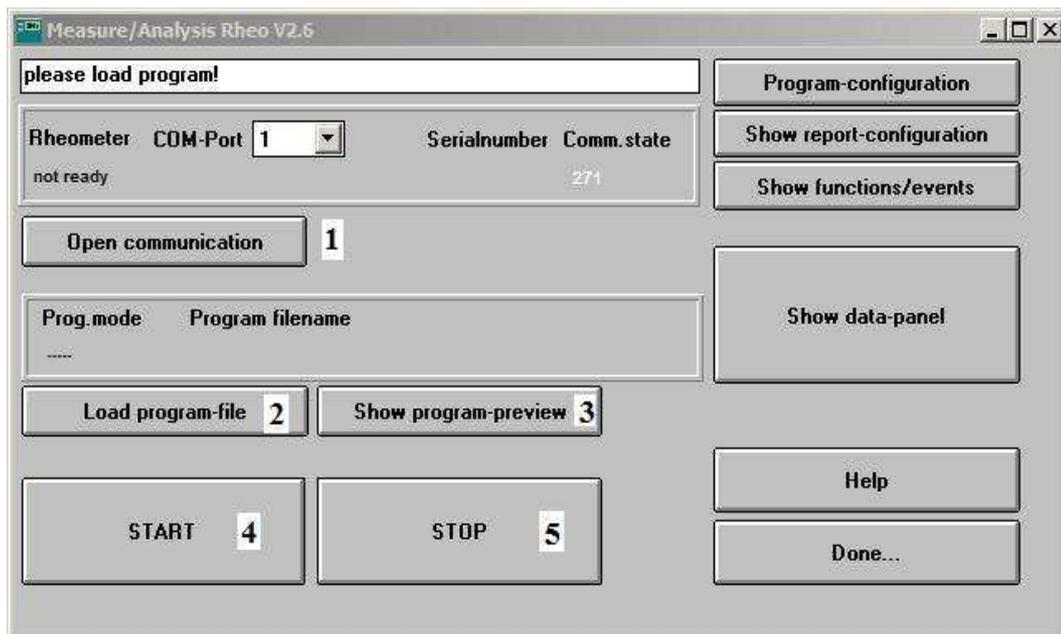


Figura 5.14. Interface de configuração.

1. **Mode:** Escolha do tipo de análise a ser efetuada (CSS – Controle da Tensão de Cisalhamento ou CSR – Controle da Taxa de Deformação);
2. **Measuringsystem:** Escolha do tipo de spindle utilizado na análise reométrica (para cada faixa de operação utiliza-se um respectivo spindle, dependendo assim do tipo de material analisado);
3. **Primary ramp – new step:** Escolha do passo (é possível configurar simulações sucessivas, submetendo o material analisado a diferentes tipos de solicitações – análise tipo Histeres por exemplo);
4. **Primary unit:** Escolha da unidade utilizada para a variável configurada;
5. **Lin/Log:** Escolha do reograma plotado como linear ou em gráfico logarítmico;
6. **Auto regr:** Escolha de auto-regressão para o modelo reológico que mais se aproxima da curva reológica obtida empiricamente através de análise por correlação estatística;
7. **Step Time, #MP:** Escolha do tempo de análise reométrica, assim como o número de pontos almejados no reograma (o reômetro R/S permite a obtenção máxima de até um ponto de análise por segundo de trabalho executado);
8. **Startvalue:** Escolha do valor inicial para a variável configurada;
9. **Endvalue:** Escolha do valor final para a variável configurada;
10. **Set step:** Finalização do passo;

11. **Save Block:** Salvamento das configurações para este bloco;
12. **Gráfico:** Gráfico que possibilitar visualizar as configurações estabelecidas no bloco editor.

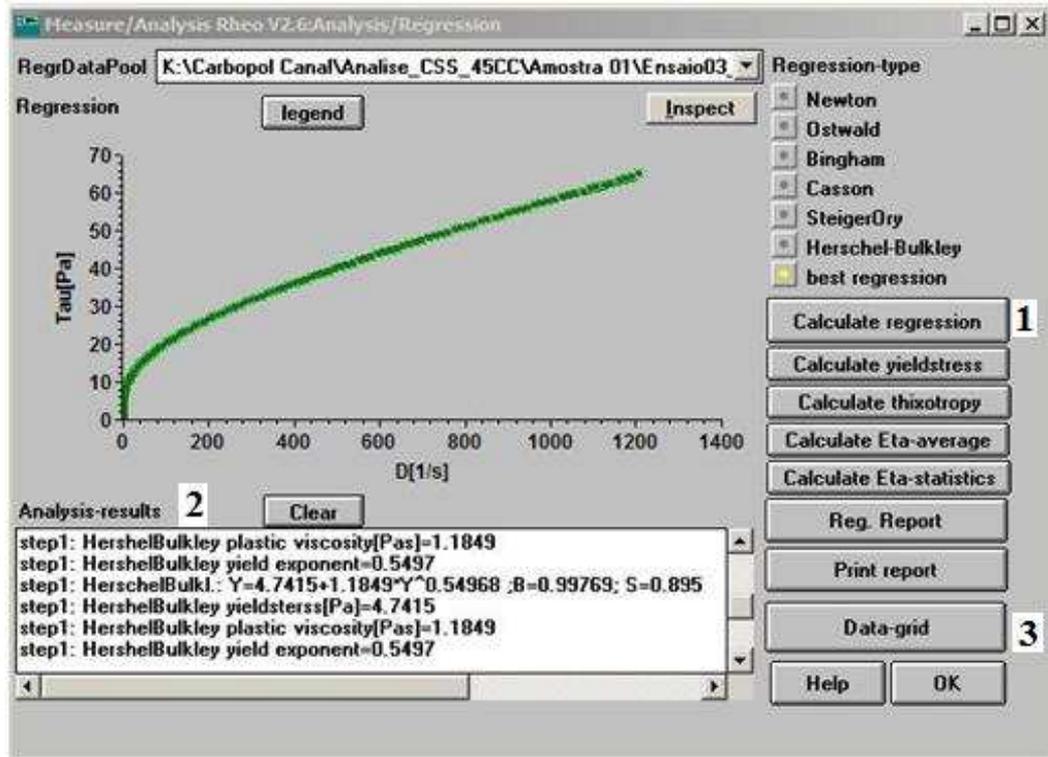
*Measure/Analysis: – Iniciando a análise e verificando os dados obtidos*



**Figura 5.15. Interface de análise e verificação.**

1. **Open communication:** Responsável pela comunicação reômetro-computador;
2. **Load program-file:** Carrega o bloco com as configurações pré-estabelecidas para a análise reométrica;
3. **Show program-file:** Mostra a tela do bloco-editor para o bloco carregado no load program-file;
4. **Start:** Inicia a análise;
5. **Stop:** Finaliza a análise em execução.

**Analysis – Analisando os resultados obtidos**



**Figura 5.16. Interface de resultados.**

1. **Calculate regression:** Desenvolve uma regressão numérica da curva reométrica para com um modelo reológico com maior correlação estatística, esta análise pode ser também configurada para um modelo específico de modo a deliberar se o material apresenta ou não grande dispersão dos valores para com a curva teórica. Pode-se optar por seis modelos (Newtoniano, Ostwald, Bingham, Casson, SteigerOry e Herschel-Bulkley);
2. **Analysis-results:** Janela que mostra os parâmetros reométricos da curva, como viscosidade dinâmica, índice de consistência do escoamento e equação da curva reométrica através da interpolação dos pontos obtidos – O fator correlacional de Person é também deliberado pelo software possibilitando verificar a consistência do modelo reológico estabelecido pelo pesquisador ou estipulado pelo programa através do comando “best regression”;
3. **Data-grid:** Janela que explicita os valores obtidos ao longo do tempo para todas as variáveis analisadas em forma de tabela, possibilitando também a filtragem de pontos

para determinadas variáveis de modo a estabelecer uma análise mais aprofundada a partir de uma espaço amostral mais condizente com os procurados pelo pesquisador.

Através deste software foram efetuadas todas as análises reométricas dos fluidos tipo utilizados neste trabalho, sendo que o mesmo ocorreu de maneira eloqüente e concisa, possibilitando uma análise reométrica consistente para com os casos almejados.

### 5.6. Incertezas Experimentais

A incerteza do reômetro R/S Rheometer é estabelecida na ordem de 3% da escala de trabalho do equipamento - Brookfield Viscometers (1998).

Para a determinação das incertezas experimentais, a priori é obtida a incerteza-padrão ( $u_p$ ) para cada possível fonte de incerteza, para isso, após a deliberação de parâmetros estatísticos básicos como o valor médio ( $\bar{X}$ ) e grau de liberdade ( $G$ ), a partir de certo número de amostras, e com isso o desvio padrão ( $S$ ), o cálculo da incerteza combinada ( $u_c$ ) torna-se plausível.

$$u_c = \sqrt{\sum_i^n (u_{pi})^2} \quad (5.3)$$

sendo  $i=1,2,3,4\dots n$  conforme o número de incertezas estabelecidas.

Com a incerteza combinada em mãos, a mesma é multiplicada por um fator de abrangência ( $K$ ), fornecendo a incerteza total ou expandida ( $u_t$ ). Este fator está associado ao número de amostras de cada fonte de incerteza.

$$u_t = K u_c \quad (5.4)$$

Se o número de amostras de cada fonte for maior do que 5, adota-se  $K = 2.0$  (95% de confiabilidade). Porém, se o número de amostras de alguma fonte de incerteza for menor do que 5 e se para aquela fonte  $(u_p / u_c) > 0.5$ , então, deve-se fazer o cálculo de um grau de

liberdade efetivo ( $G_{efe}$ ), utiliza-se então uma tabela de coeficientes de Student, SBM (2002).

Para valores de ( $G_{efe}$ ) maiores do que 50, utiliza-se  $K = 2.0$ .

Os parâmetros reológicos foram obtidos através da regressão numérica via software RHEO 2000 para cada uma das amostras e, depois, a média de cada um dos parâmetros.

Para os ensaios de reometria, considerou-se a incerteza-padrão e a incerteza do equipamento de reometria, o reômetro R/S Rheometer (3%). O equilíbrio térmico das amostras, durante a análise reométrica, foi estabelecido através do banho térmico (0.1°C). O erro na concentração é uma combinação das medidas diretas das massas dos produtos utilizados. Sendo assim, referente aos cálculos da concentração de Carbopol 940 adota-se como erro um valor único igual a  $10^{-4}$  g/g.

## CAPÍTULO 6

---

### Resultados e Discussão

---

#### 6.1. Análises reométricas e deliberações

Uma vez estabelecidos os procedimentos laboratoriais de confecção do gelificante Carbopol 940, seguimos as análise a partir da caracterização reológica dos fluidos “tipo” almejados, no caso, o Carbopol 940 representando um fluido de reologia complexa e o Glicerol, caracterizando um material de reologia Newtoniana.

#### 6.2. Análise reométrica do gelificante Carbopol 940

Foi produzido um gelificante com concentração mássica  $0,13 \pm 10^{-4}$  (%) de Carbopol 940, o fluido de trabalho utilizado foi a água derivada do processo Milli-Q de purificação (6,16 pH), caracterizada por baixíssimas condutâncias ( $0,22 \mu S / cm$ ).

O pH desta preparação (gelificante Carbopol 940) foi aferido em 6,96 pH (neutro), que coloca a mesma em total consonância físico-química para com o gel desenvolvido e relatado pela empresa Noveon (2002).

A temperatura de análise reométrica foi estabelecida em torno de  $25 \sim 29 \pm 0,5$  °C, uma vez que os ensaios desenvolvidos no canaleta se estabeleceram em dias muito quentes na cidade de Ilha Solteira –SP, sendo este o valor térmico aferido no laboratório.

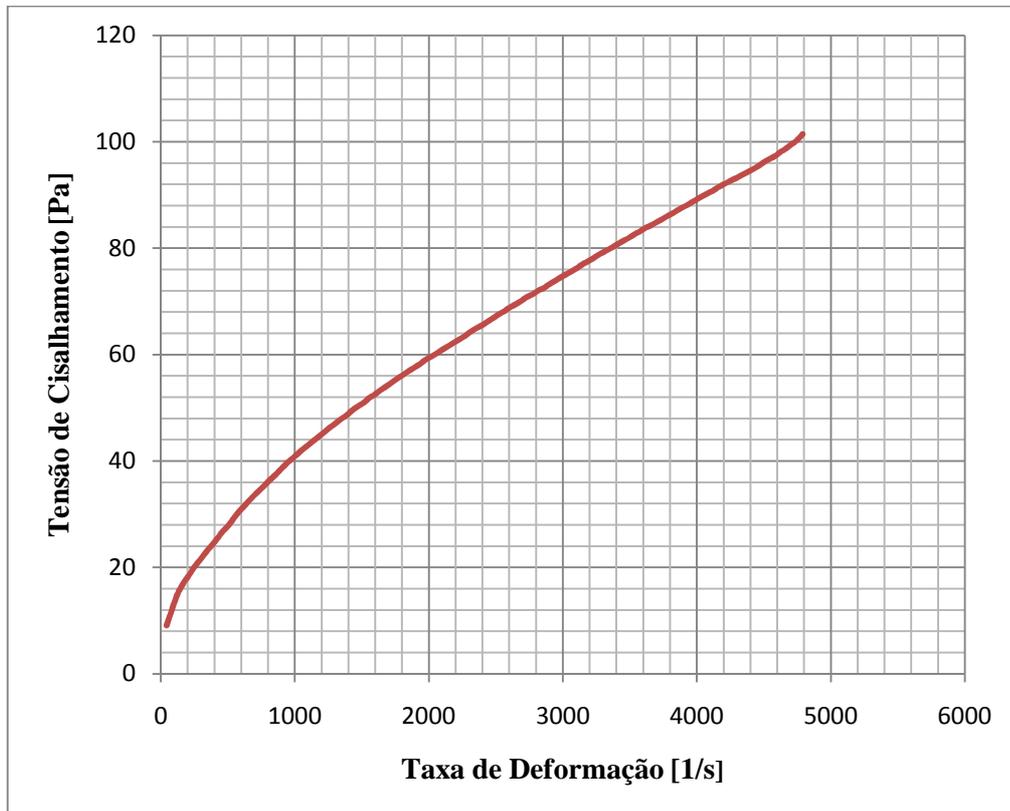
##### 6.2.1. Análise CSR (Controlled Shear Rate) - Carbopol 940

A análise do comportamento reológico do Carbopol 940 é iniciada através da preparação do equipamento dedicado, este procedimento inclui além da correta manipulação do objeto de análise até a escolha do “spindle” mais indicado.

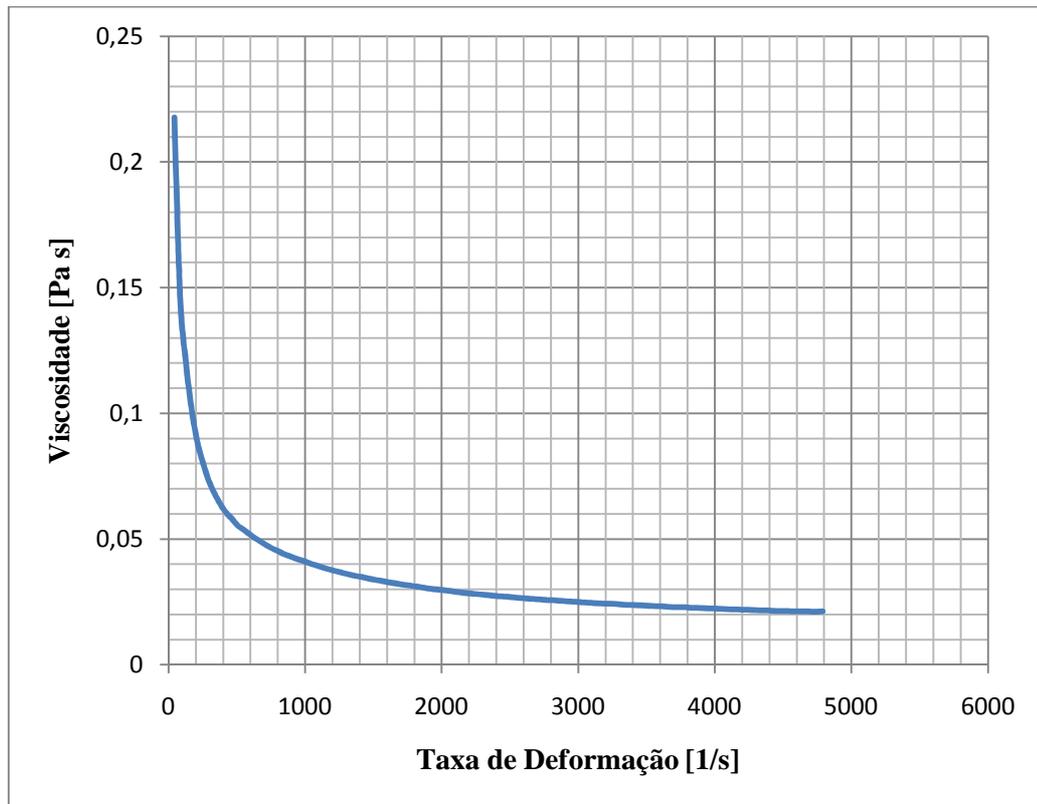
A escolha do “spindle” é estabelecida através de uma pré-análise, configurando empiricamente faixas de trabalho do Carbopol 940, uma vez que sua viscosidade é desconhecida.

Foram testados os “spindles” CC48 e CC45, e foi verificada a faixa de trabalho para o Carbopol 940 nas proximidades de 4800 [s<sup>-1</sup>] para uma taxa de deformação máxima e 100 [Pa] para a tensão de cisalhamento respectivamente (o ensaio CSR foi configurado em 5000 [s<sup>-1</sup>] sendo parado por um “break” no processo, o “spindle” CC45 apresenta assim a melhor faixa de operação para a análise requerida.

A figura 6.1 mostra de maneira clara os dados descritos acima.



**Figura 6.1. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [s<sup>-1</sup>] para o Carbopol 940.**



**Figura 6.2. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Carbopol 940.**

Um característico construtivo do equipamento é que o mesmo desenvolve análises mais precisas através do controle da tensão de cisalhamento (CSS – *Controlled Shear Stress*), sendo assim, a busca por uma taxa de deformação que mostre a máxima tensão de cisalhamento que o Carbopol 940 suporte sem provocar um “break” no processo é primordial.

**Tabela 6.1 – Dados do software REO 2000 para análise CSR.**

<i>t[s]</i>	<i>T[°C]</i>	<i>D[1/s]</i>	<i>Tau[Pa]</i>	<i>Eta[Pa s]</i>	<i>MP#</i>
112	28,3	4705,86	99,493	0,0211	112
113	28,3	4747,87	100,26	0,0211	113
114	28,3	4789,93	<b>100,59</b>	0,0212	114

Com a tensão de cisalhamento limite em mãos, a análise CSS pode ser devidamente estabelecida e com isso a análise reológica do Carbopol 940.

### 6.2.2. Análise CSS (Controlled Shear Stress) - Carbopol 940

Para a análise CSS (Controle da tensão de cisalhamento) do Carbopol 940, foi estabelecida inicialmente uma análise CSS com a tensão de cisalhamento configurada em 100 [Pa], porém, notou-se o encerramento do processo por um “break” novamente para análise CSS em torno de 70 [Pa], com isso o teste de análises se estabeleceu configurando a tensão de cisalhamento em 65 [Pa] sem regressão inicial, valor inicial da tensão nula e 120 pontos.

Abaixo temos as figuras 6.3 e 6.4 com os resultados obtidos.

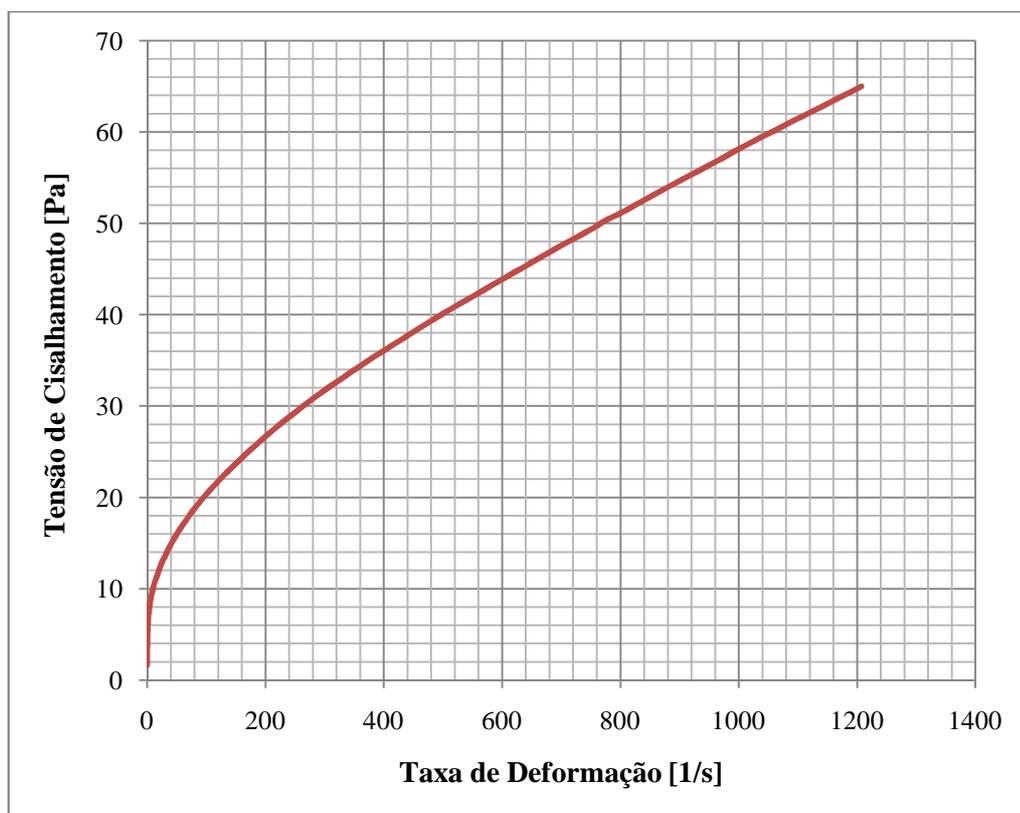


Figura 6.3. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Carbopol 940.

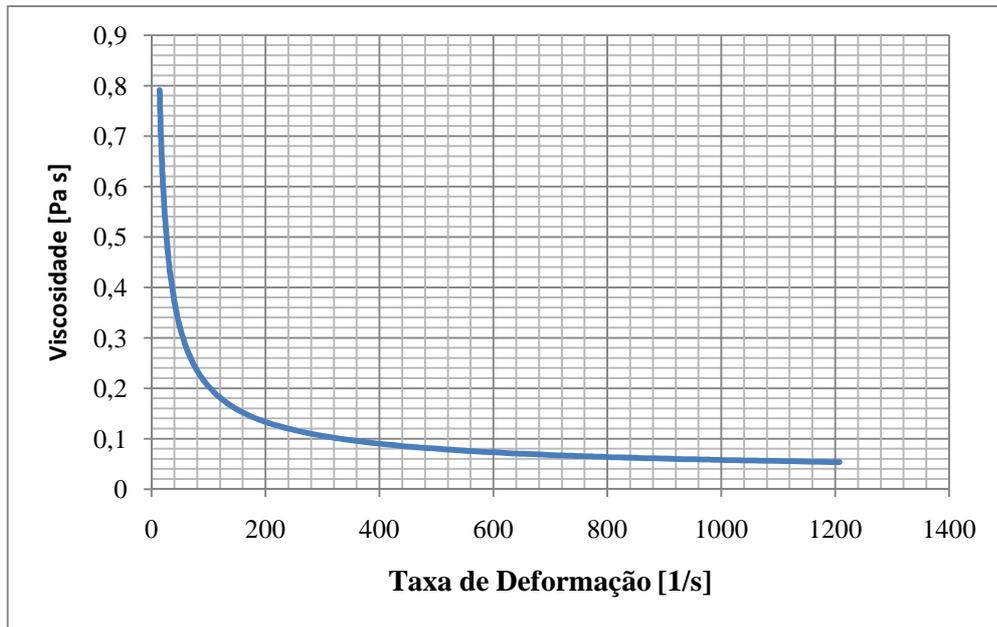


Figura 6.4. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Carbopol 940.

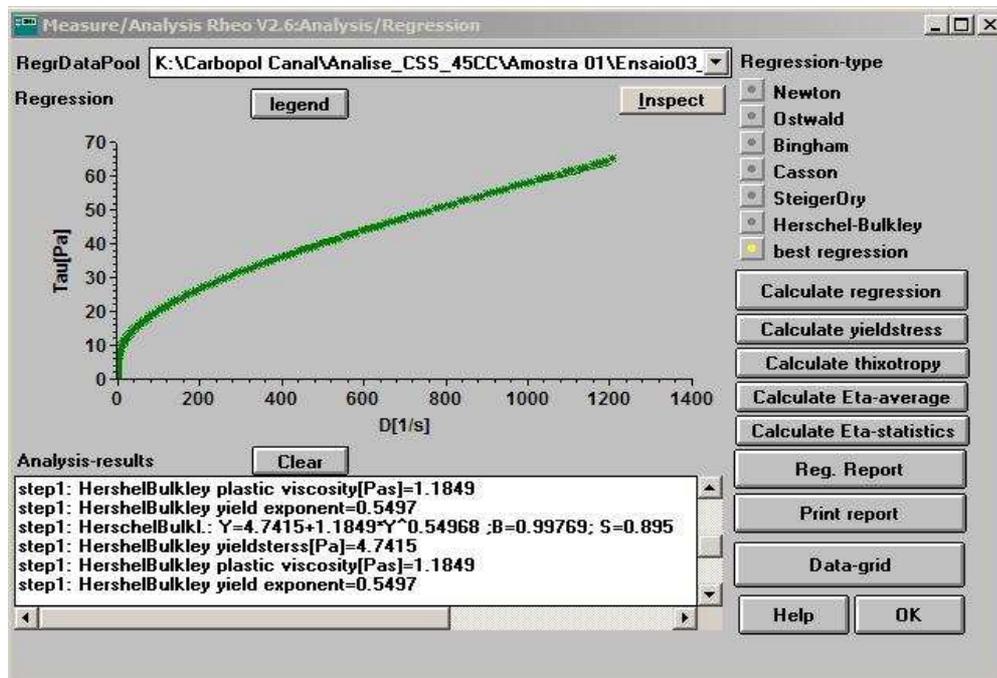


Figura 6.5. Resultados CSS para o Carbopol 940, com regressão no modelo de Herschel-Bulkley.

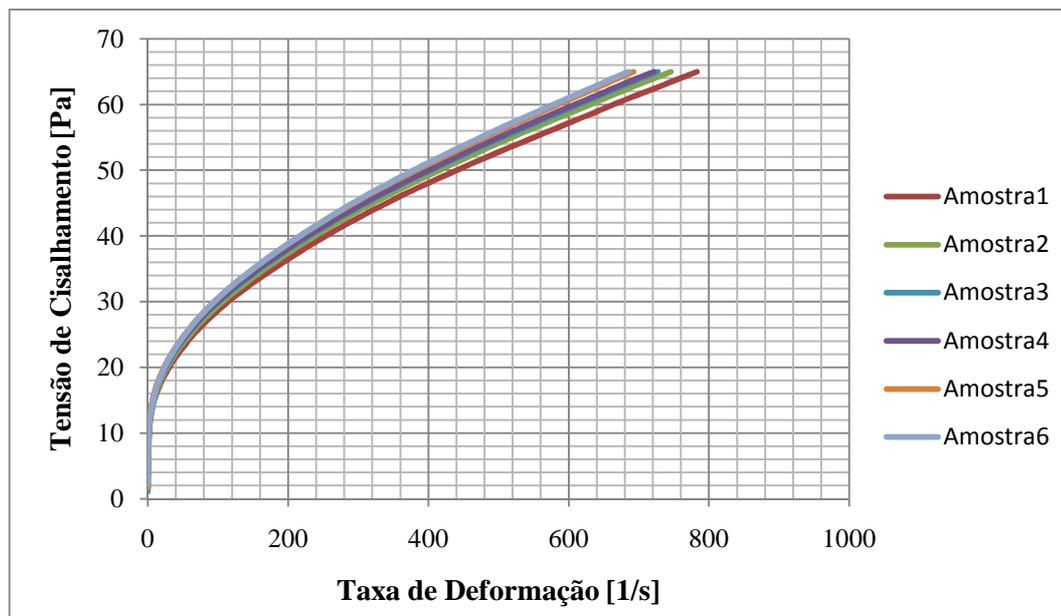
O gráfico da figura 6.5 foi estabelecido sem qualquer filtragem posterior, onde o software REO 2000 desenvolveu uma regressão numérica “best regression” para o modelo reológico de Herschel-Bulkley, obtendo os seguintes resultados:

**Tabela 6.2 - Dados do software REO 2000 para análise CSS.**

$\tau_c$ [Pa]	$K$ [Pa.s <sup>n</sup> ]	Correlação <i>H-B</i>	n	Desvio Padrão
4,7415	1,1849	0,99769	0,5497	0,89

Em estatística descritiva, o coeficiente de correlação de *Pearson*, também chamado de “coeficiente de correlação produto-momento” mede o grau da correlação entre duas variáveis. A correlação da curva reológica do Carbopol 940 com o modelo reológico de Herschel-Bulkley obteve um valor de 0,99769, o que mostra uma correlação quase perfeita entre as curvas teórico-experimental.

A seguir (figura 6.6) um gráfico com as demais análises desenvolvidas.



**Figura 6.6. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [s<sup>-1</sup>] para o Carbopol 940, lembrando que a incerteza do reometro é de 3%.**

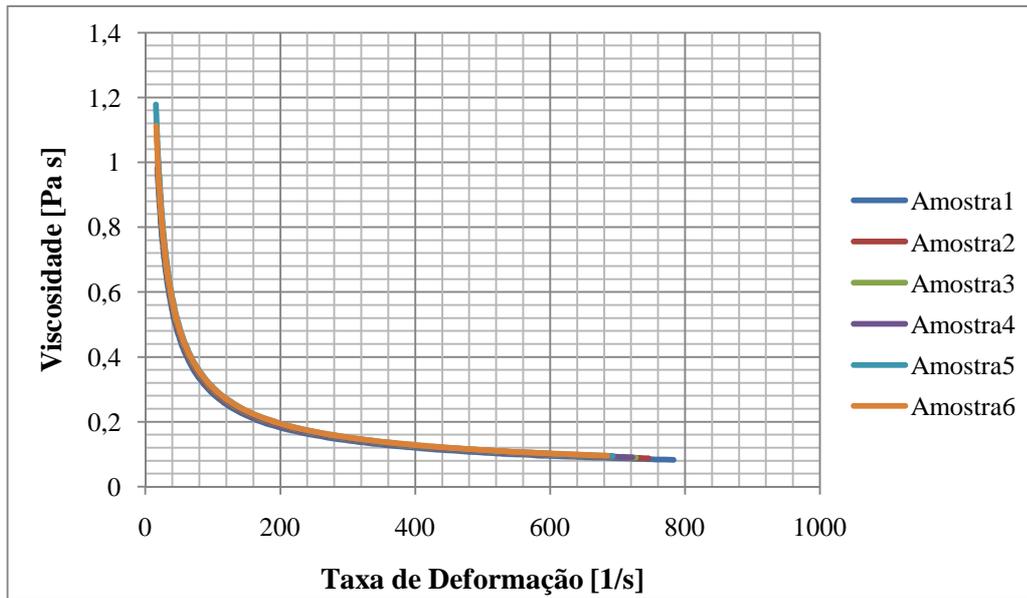


Figura 6.7. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Carbopol 940.

Tabela 6.3 - Dados do software REO 2000 para análise CSS do Carbopol 940.

<i>Amostra</i>	$\tau_c$ [Pa]	$K$ [Pa.s <sup>n</sup> ]	<b>n</b>	<i>Correlação H-B</i>	<i>Desvio Padrão</i>
<b>1</b>	4,7415	3,1849	0,5497	0,99769	0,89
<b>2</b>	4,1453	3,5384	0,4224	0,99641	1,12
<b>3</b>	4,4100	3,6157	0,4218	0,99698	1,04
<b>4</b>	4,1254	3,7849	0,4027	0,99751	1,18
<b>5</b>	3,9874	4,0597	0,4069	0,99654	1,17
<b>6</b>	4,1452	3,9962	0,4125	0,99666	1,07
<i>Média</i>	4,2591	3,3633	0,4360	-	-
<i>S</i>	0,2732	1,0866	0,0563	-	-
<i>u<sub>p</sub> Nominal</i>	0,1115	0,4436	0,0230	-	-
<i>u<sub>p</sub> (%)</i>	2,6184	32,3064	12,9022	-	-
<i>u<sub>t</sub> (%)</i>	7,9639	9,3279941	12,123415	-	-

**Incertezas totais**

### 6.3. Análise reométrica do Glicerol

A partir da deliberação das características reológicas do Carbopol 940, são realizadas as análises referentes ao fluido “tipo” de reologia Newtoniana, o Glicerol.

#### 6.3.1. Análise CSR Glicerol

A análise reométrica do Glicerol é iniciada através de um teste CSR (*Controlled Shear Rate*) para determinação da sua faixa de trabalho operacional junto à taxa de cisalhamento e assim escolha correta do conjunto copo – “spindle”.

Foram testados os “spindles” CC45 e CC48, e foi verificada a faixa de trabalho para o Glicerol nas proximidades de 200 [s<sup>-1</sup>] para uma taxa de deformação máxima e 170 [Pa] para a tensão de cisalhamento respectivamente, o “spindle” CC45 apresenta assim a melhor faixa de operação para a análise requerida.

O ensaio CSR foi configurado em 5000 [s<sup>-1</sup>] sendo parado por um “break” no processo por volta de 209 [s<sup>-1</sup>].

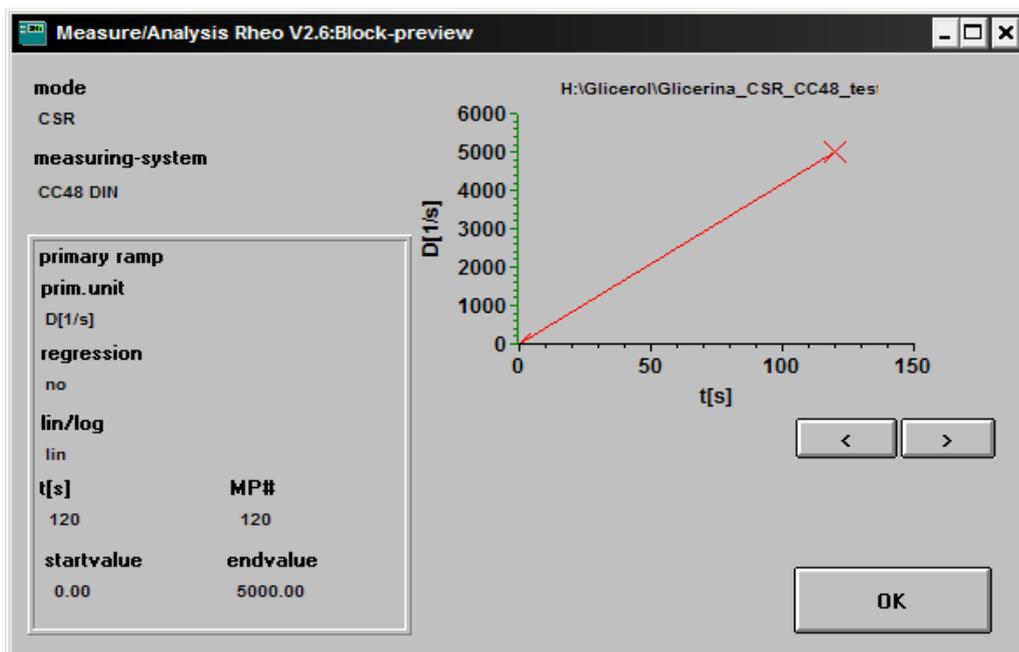


Figura 6.8. Análise CSR para o Glicerol, Taxa de Cisalhamento em 5000 [s<sup>-1</sup>].

Como mencionado anteriormente, a análise por controle de tensão de cisalhamento apresenta maior precisão, sendo assim, obtidos os dados referentes à escolha do “spindle” mais adequado, é então desenvolvida uma análise CSS.

Mesmo com uma precisão notadamente menor (característico construtivo do equipamento) podemos obter a partir de uma pré análise dados preciosos, a regressão ao modelo Newtoniano com um coeficiente de correlação produto momento em 0,99995 nos mostra que o material analisado atende as expectativas almejadas, com valores plausíveis com os da literatura especializada.

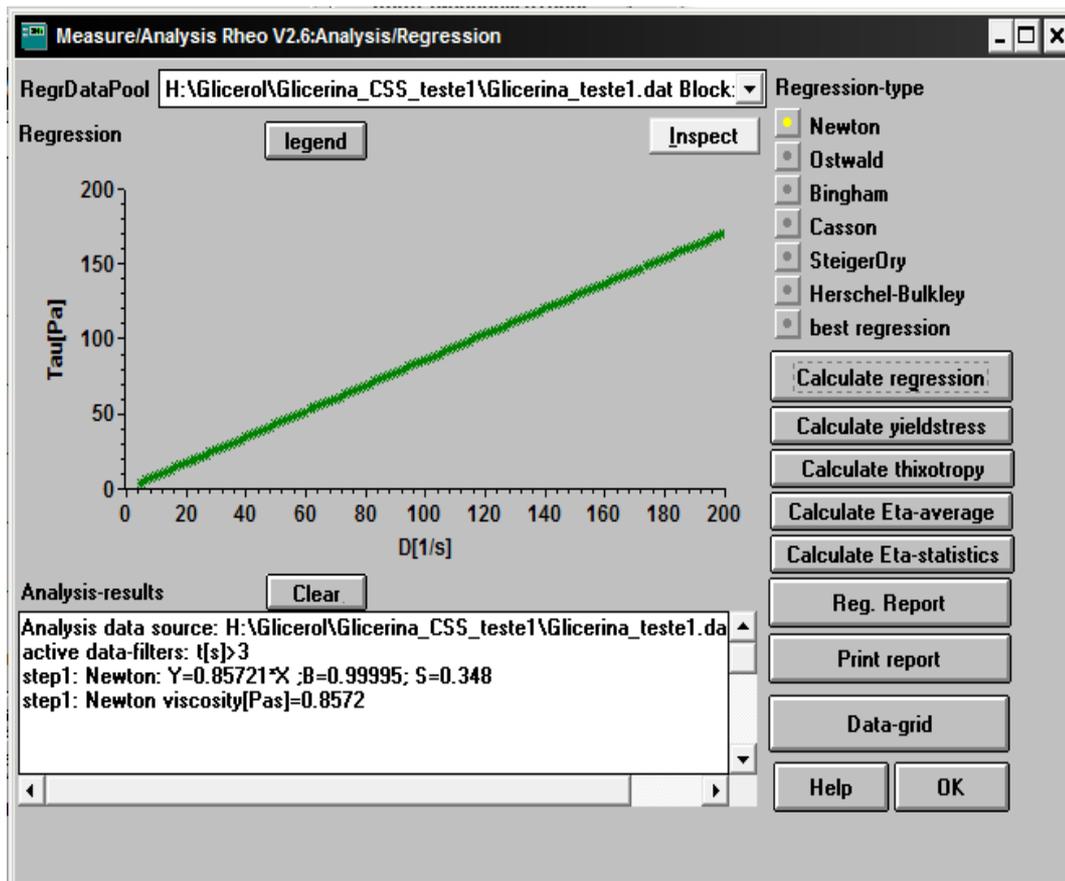
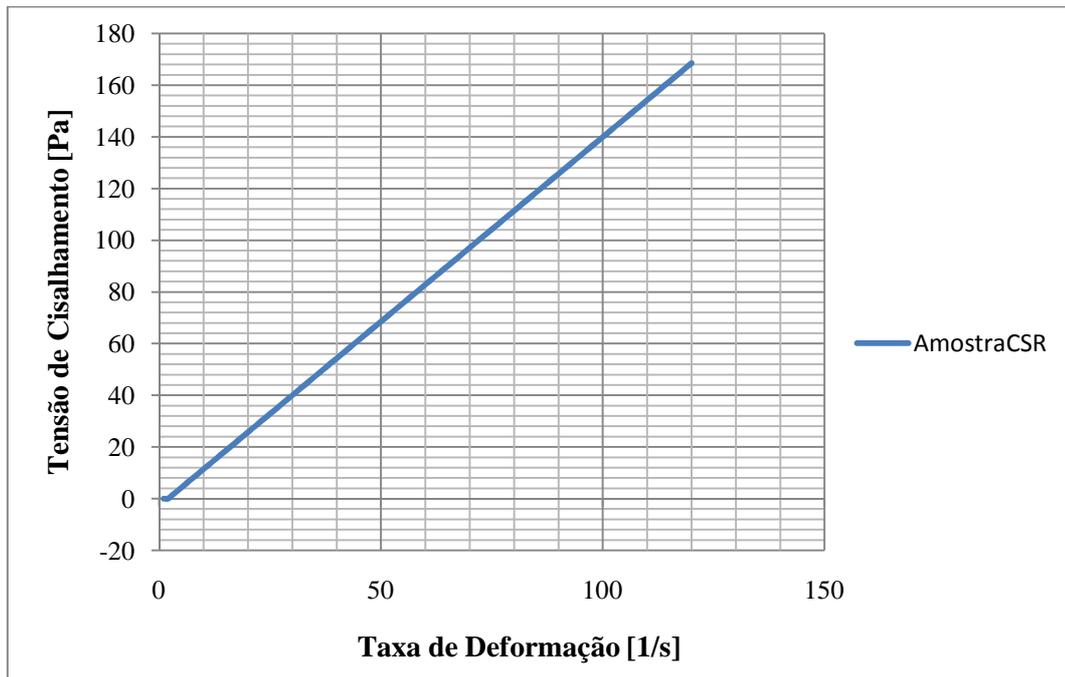
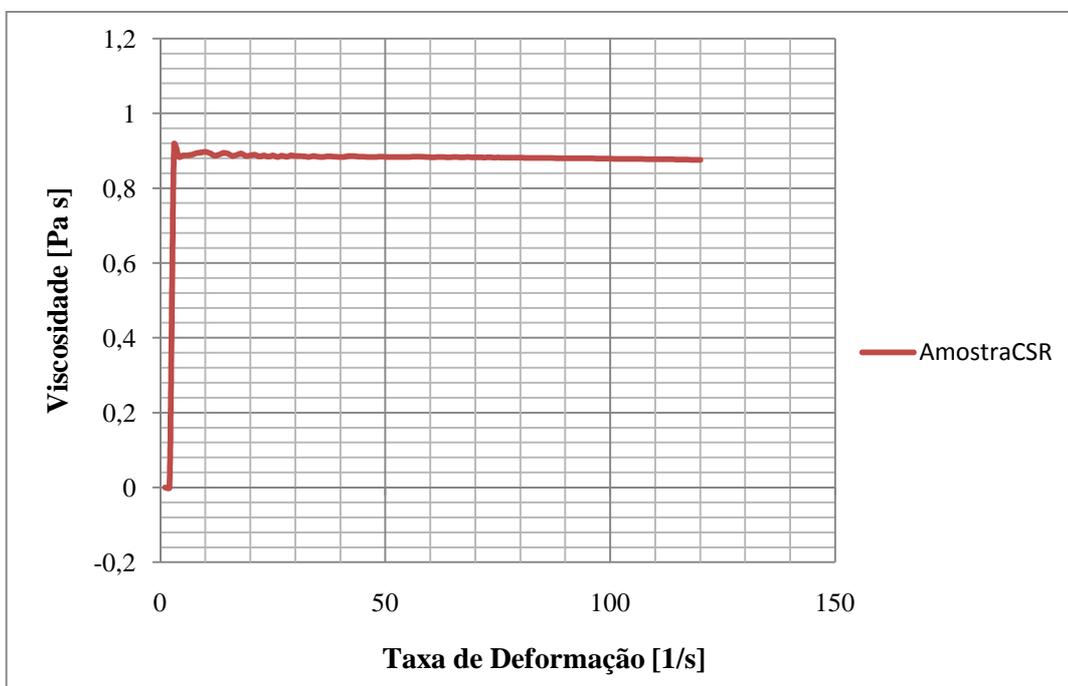


Figura 6.9. Regressão numérica para a análise CSS do Glicerol.



**Figura 6.10. Gráfico-CSR Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação[ $s^{-1}$ ] para o Glicerol.**



**Figura 6.11. Gráfico-CSR Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação[ $s^{-1}$ ] x para o Glicerol.**

Tabela 6.4 – Dados do software REO 2000 para análise CSR.

$t[s]$	$T[°C]$	$D[1/s]$	$Tau[Pa]$	$Eta[Pas]$	$MP\#$
4	24,8	126,03	104,695	0,8329	4
5	24,8	168,19	140,089	0,8329	5
6	24,8	209,9	<b>173,669</b>	0,8274	6

### 6.3.2. Análise CSS (Controlled Shear Stress) – Glicerol

Os parâmetros de entrada para a análise CSS do Glicerol podem ser visualizados na figura 6.12, a tensão de cisalhamento foi configurada em 170 [Pa], sem regressão inicial, com valor inicial da tensão nula e 120 pontos.

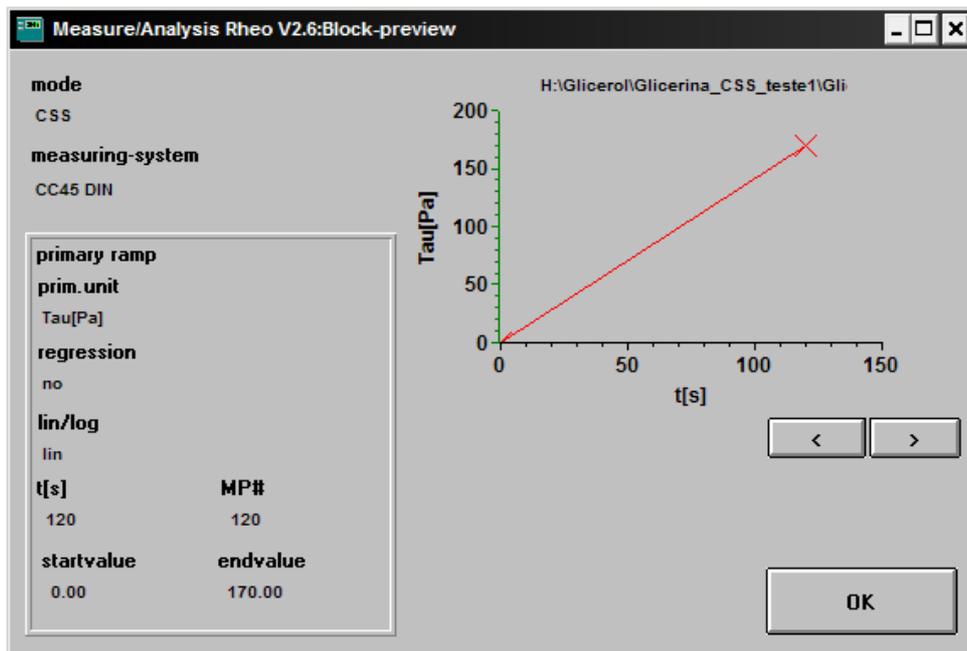


Figura 6.12. Análise CSS para o Glicerol com tensão de cisalhamento em 170 [Pa].

A seguir temos as figura 6.13 e 6.14 com os resultados obtidos.

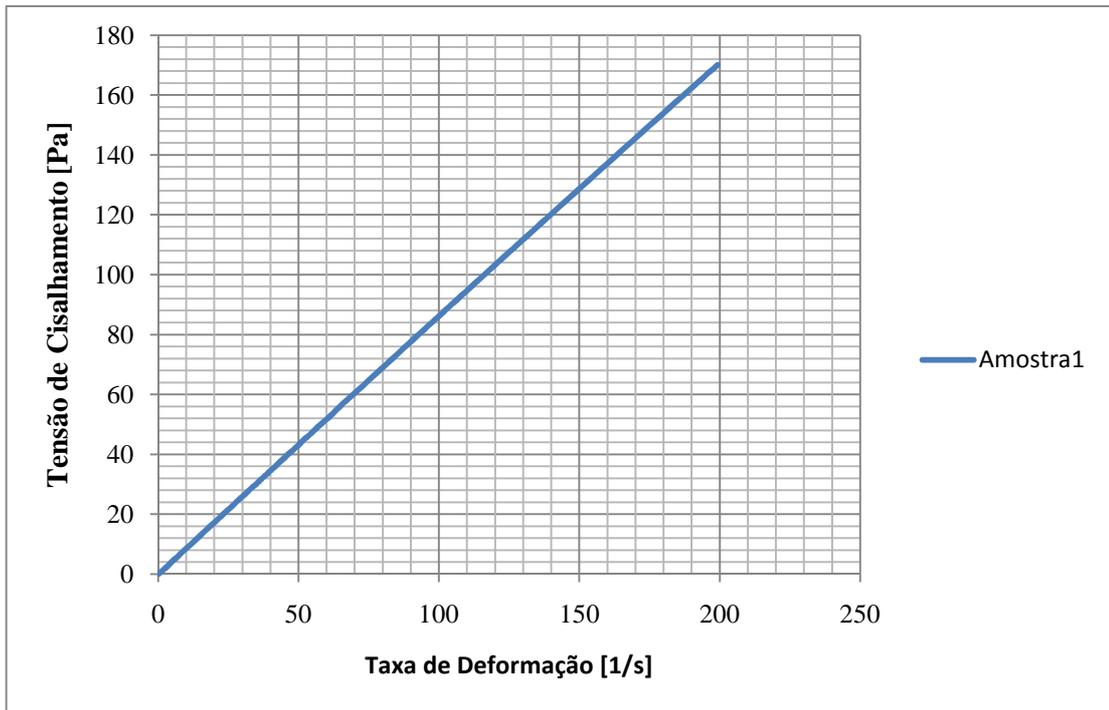


Figura 6.13. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] para o Glicerol.

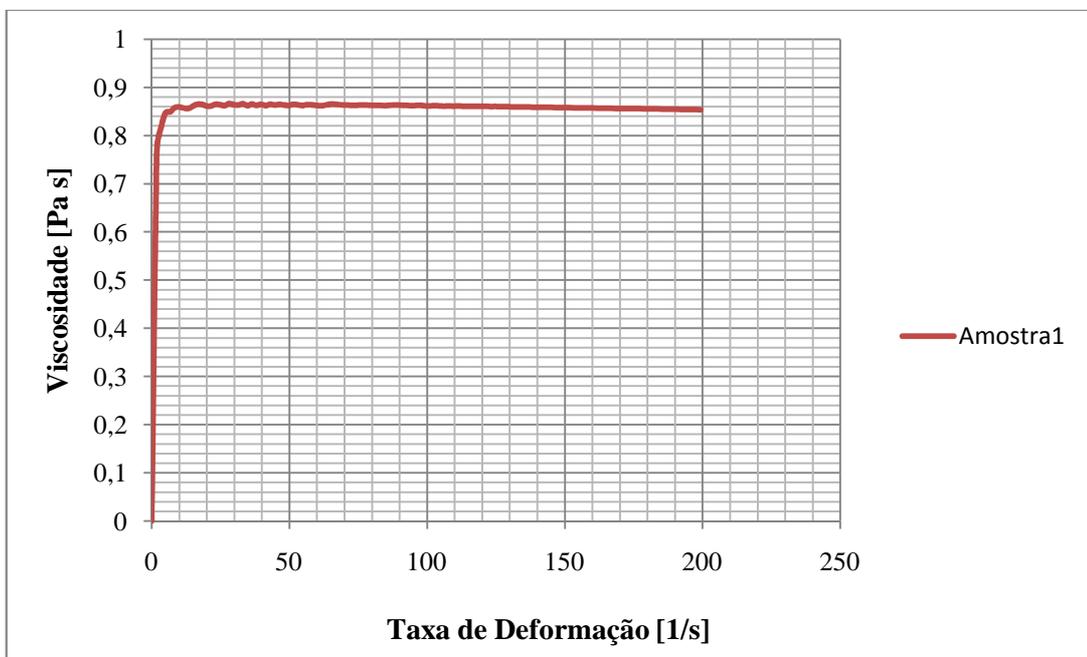
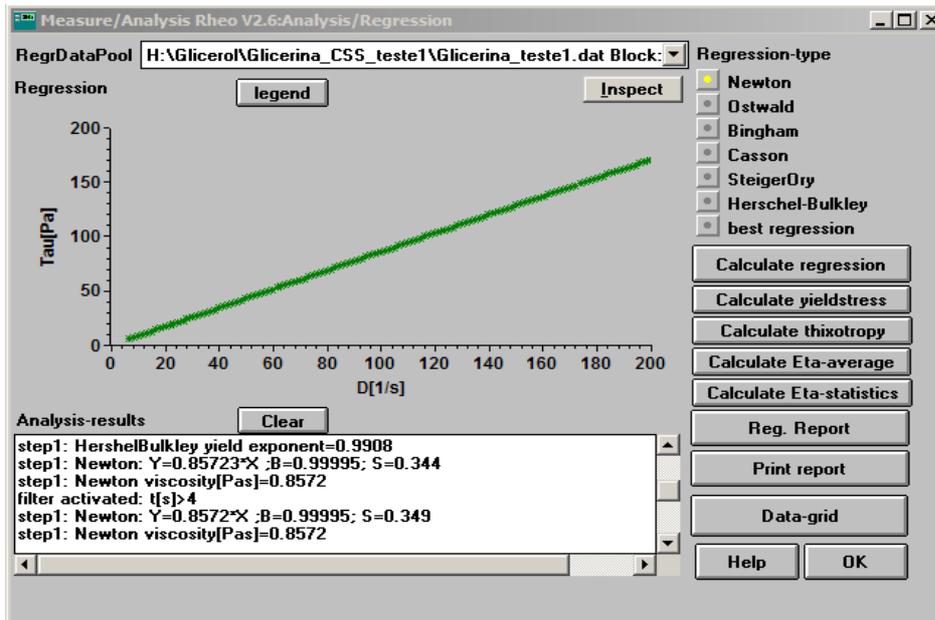


Figura 6.14. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação [ $s^{-1}$ ] x para o Glicerol.



**Figura 6.15. Resultados CSS para o Glicerol com regressão para o modelo Newtoniano.**

O gráfico da figura 6.15 foi estabelecido com uma filtragem para os pontos com tempo inferior a 4 segundos iniciais e uma viscosidade menor que 0,847 [Pa s]. A pós a filtragem o software REO 2000 desenvolve uma regressão numérica “Newton regression” para o modelo reológico Newtoniano, obtendo os seguintes resultados:

**Tabela 6.5 - Dados do software REO 2000 para análise CSS do Glicerol.**

$\tau_c [Pa]$	$\mu [Pa.s]$	Correlação de Pearson	Desvio Padrão
0	0,8572	0,99995	0,344

A correlação entre a curva teórica associada ao modelo da regressão numérica com a curva experimental, obtida a partir de análise reométrica, mostrou uma relação praticamente linear entre as duas variáveis, o que comprova as características do material analisado para com dados da literatura especializada, KIRK-OTHMER (2007).

A seguir um gráfico com as demais análises desenvolvidas.

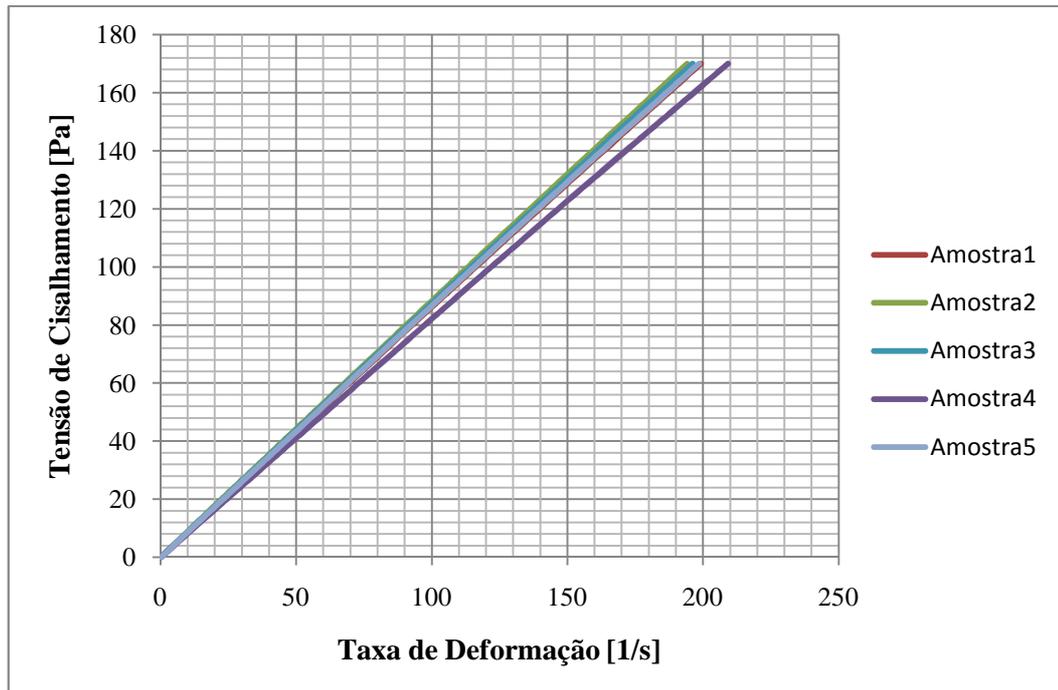


Figura 6.16. Gráfico-CSS Tensão de Cisalhamento [Pa] x Taxa de Deformação[ $s^{-1}$ ] para o Glicerol.

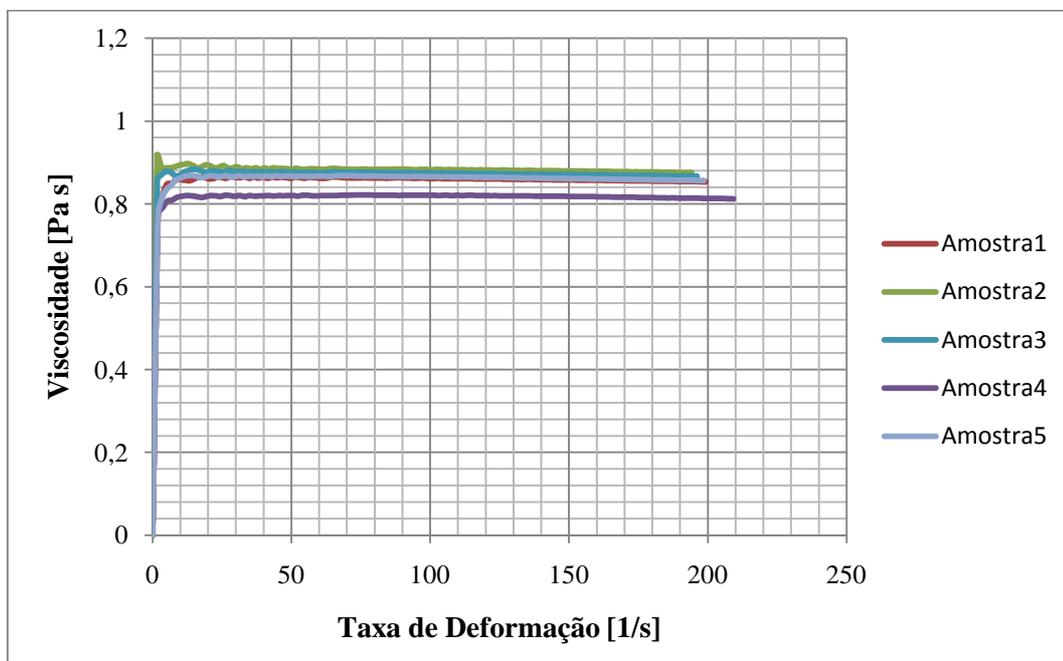


Figura 6.17. Gráfico-CSS Viscosidade [Pa s] x Taxa de Deformação[ $s^{-1}$ ] para o Glicerol, com incertezas totais em torno de 6,5%.

A seguir temos valores associados a todos os testes reométricos estabelecidos com o produto Glicerol.

**Tabela 6.6 - Dados do software REO 2000 para análise CSS do Glicerol.**

<i>Amostra</i>	$\mu$ [Pa.s]	<i>Correlação de Pearson</i>	<i>Desvio Padrão</i>
<b>1</b>	0,8572	0,99995	0,344
<b>2</b>	0,8792	0,99996	0,306
<b>3</b>	0,8704	0,99996	0,324
<b>4</b>	0,8167	0,99995	0,337
<b>5</b>	0,8605	0,99994	0,381
<b>Média</b>	0,8568	-	-
<b>S</b>	0,0240	-	-
<b><math>u_p</math> - Nominal</b>	0,0107	-	-
<b><math>u_p</math> - (%)</b>	1,2539	-	-
<b><math>u_t</math> (%)</b>	6,5030	-	-



$$u_t = Ku_c = K\sqrt{\sum_i^n (u_{pi})^2}$$

## 6.4. Rompimento de Barreira (Dam Break)

Nesta parte do trabalho serão expostos os dados referentes às simulações experimentais e numéricas obtidas ao longo de todo processo de pesquisa em relação ao fenômeno de ruptura de barreira.

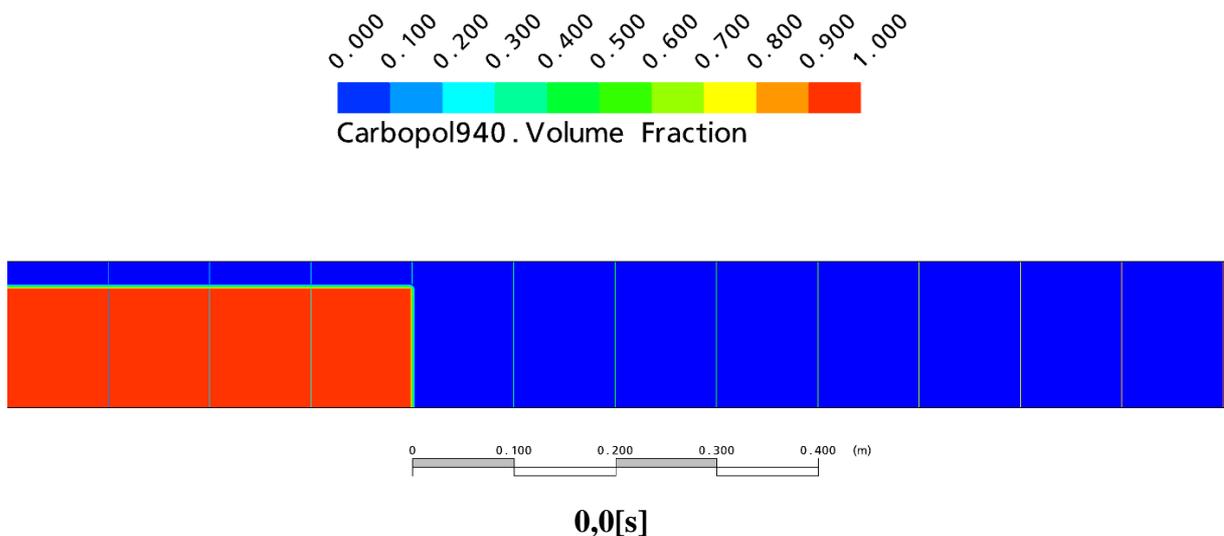
### 6.4.1. Análise das Frentes

Aqui estaremos confrontando os resultados relativos às frentes evolutivas de propagação dos materiais analisados para cada uma das alturas iniciais ( $h_0$ ) submetidas a uma liberação abrupta.

A priori uma análise utilizando os resultados numéricos com a malha de melhor convergência (volumes de 2,5 mm) associados às frações volumétricas dos materiais e gráficos com as frentes nos instantes iniciais de propagação.

### Carbopol 940

#### *Análise Numérica – Altura Inicial 12 cm*



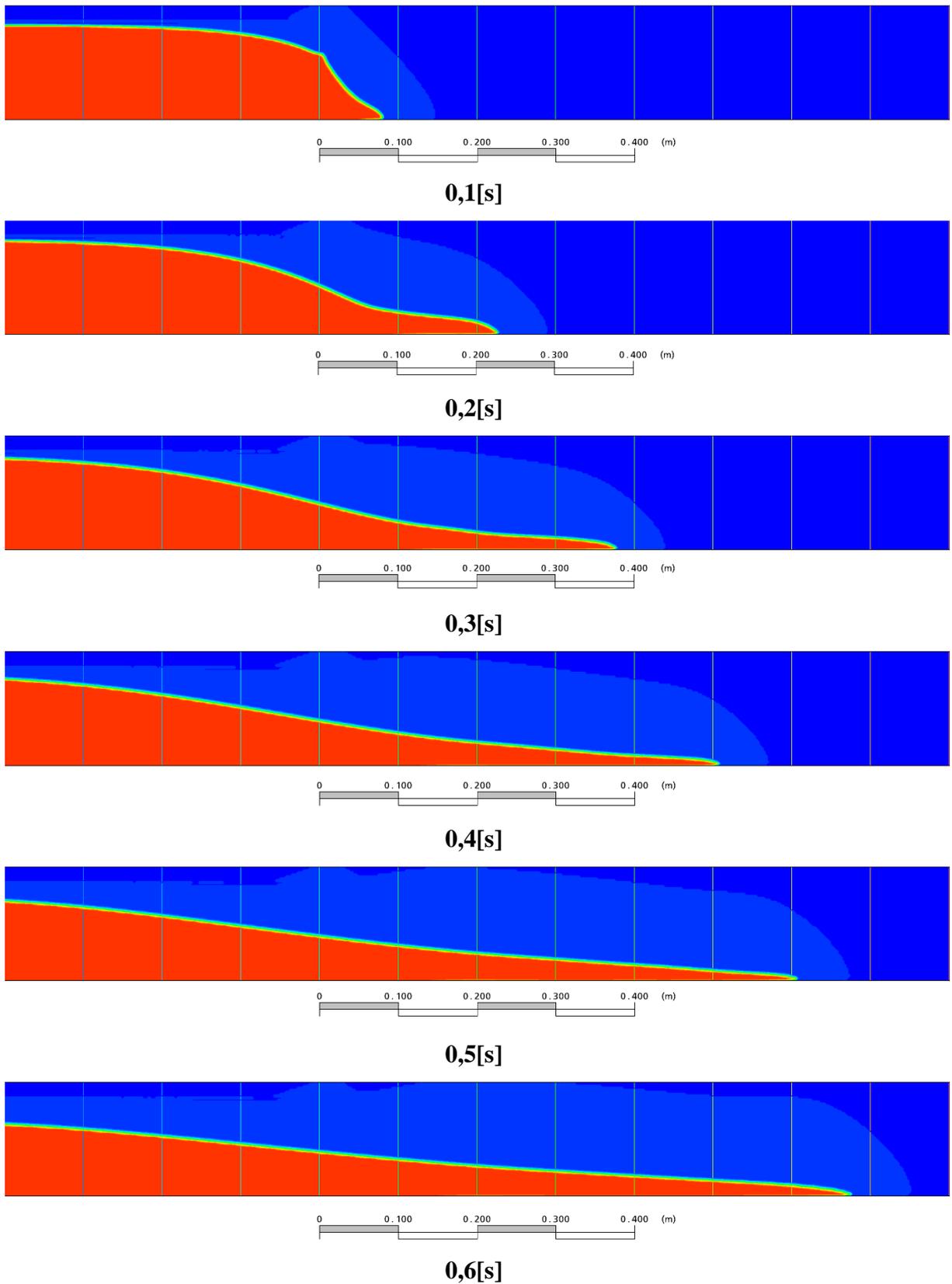
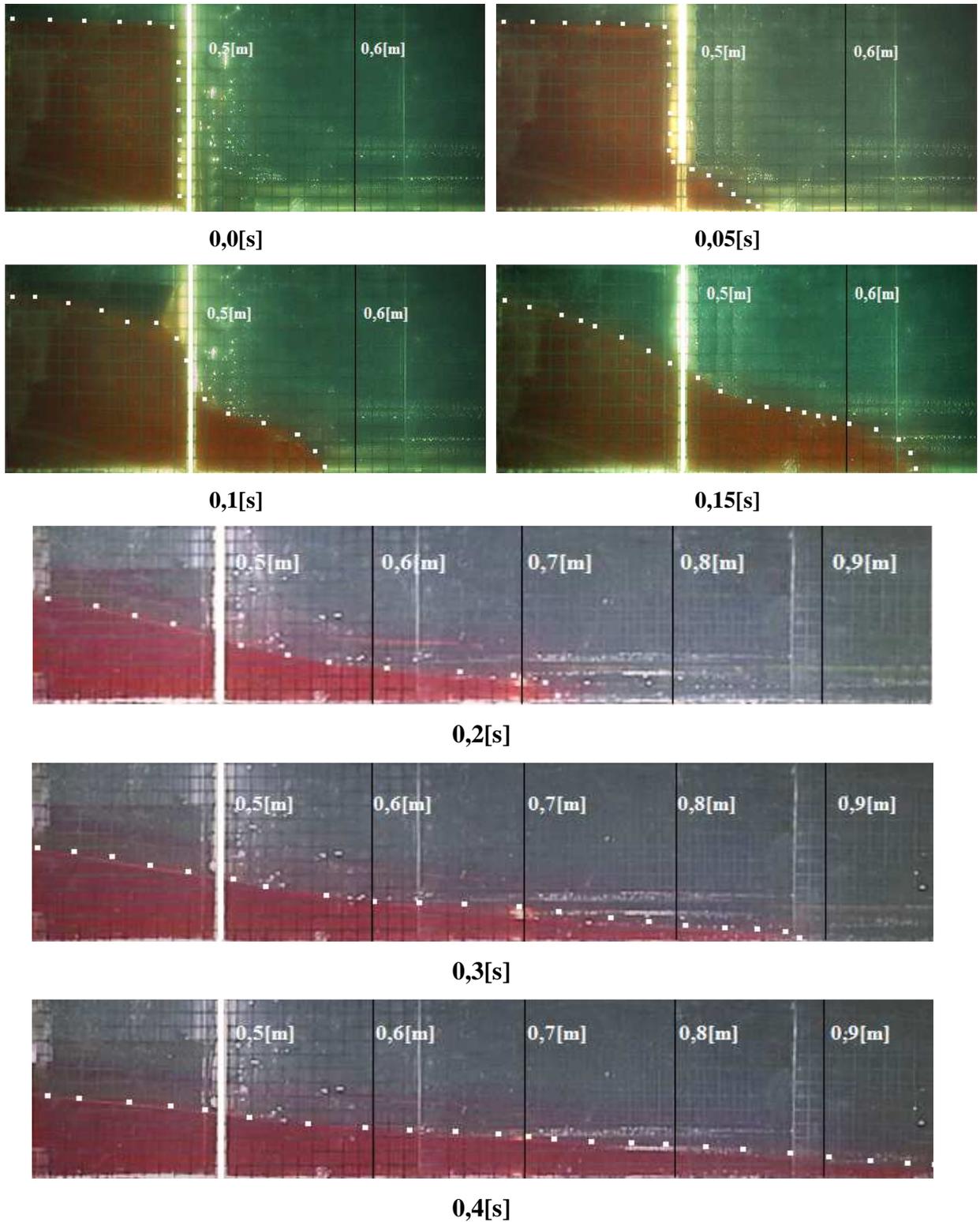


Figura 6.18. Frentes da simulação numérica para Carbopol 940 com 12 cm iniciais.

**Análise Experimental – Altura inicial 12 cm**



**Figura 6.19. Frentes da simulação experimental para Carbopol 940 com 12 cm iniciais.**

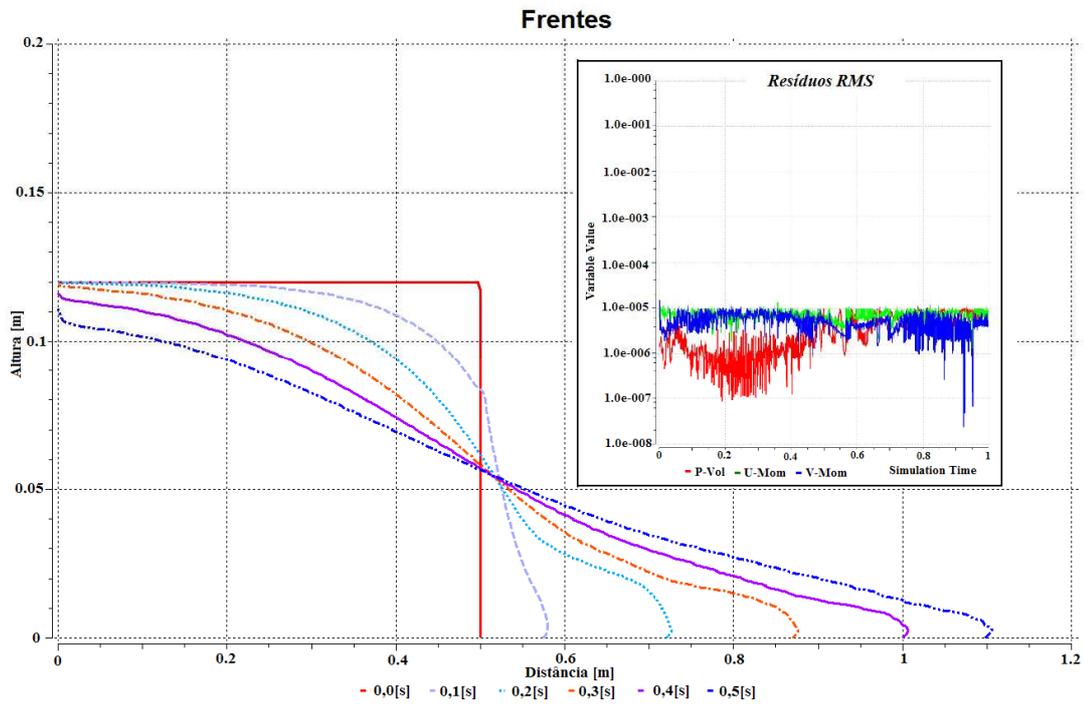


Figura 6.20. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) e os resíduos RMS da simulação numérica.

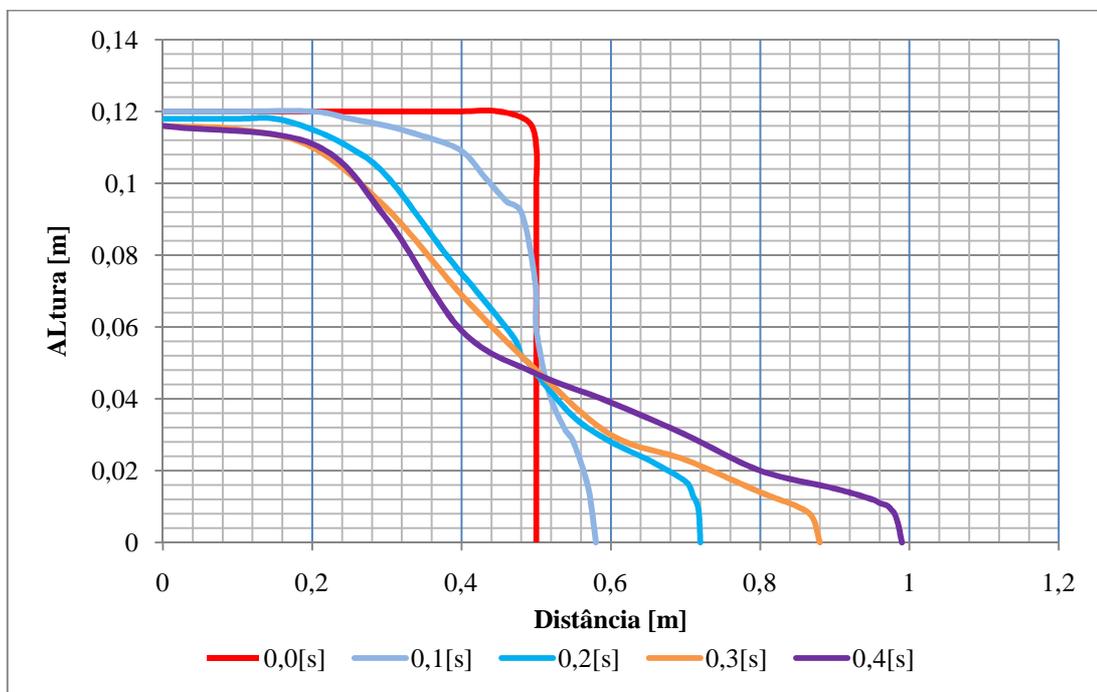
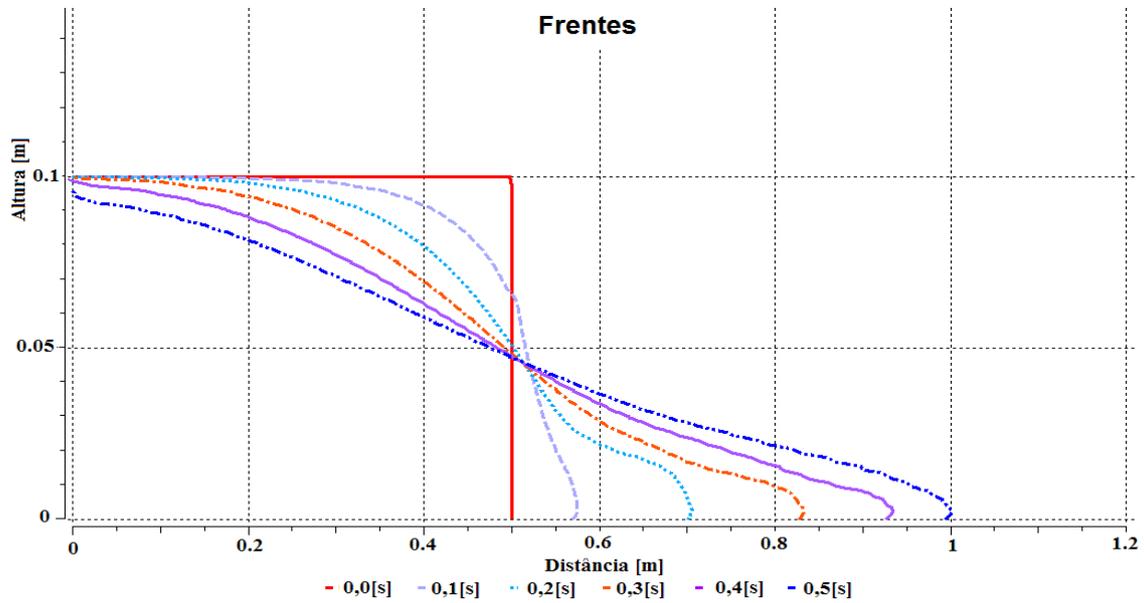
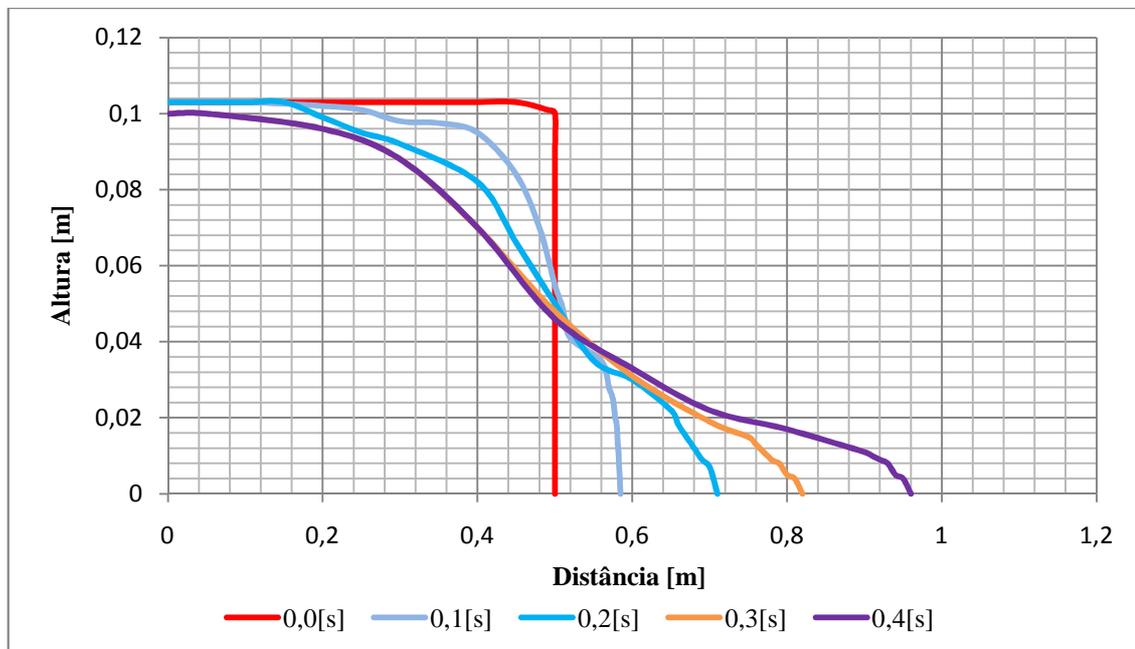


Figura 6.21. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise experimental.

**Carbopol 940: Altura Inicial – 10cm**

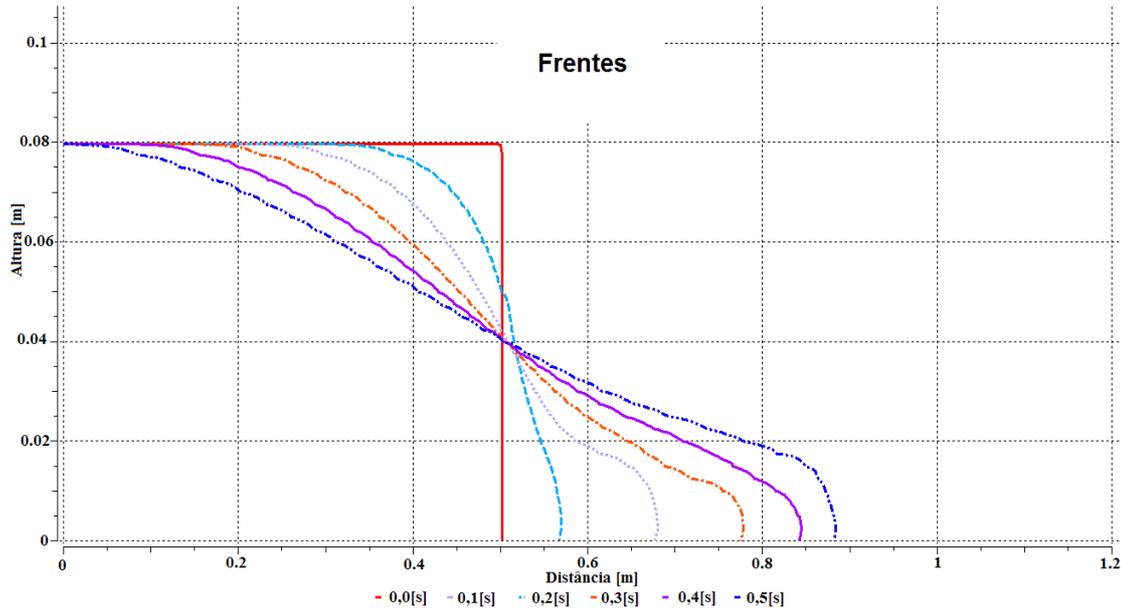


**Figura 6.22.** Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise numérica.

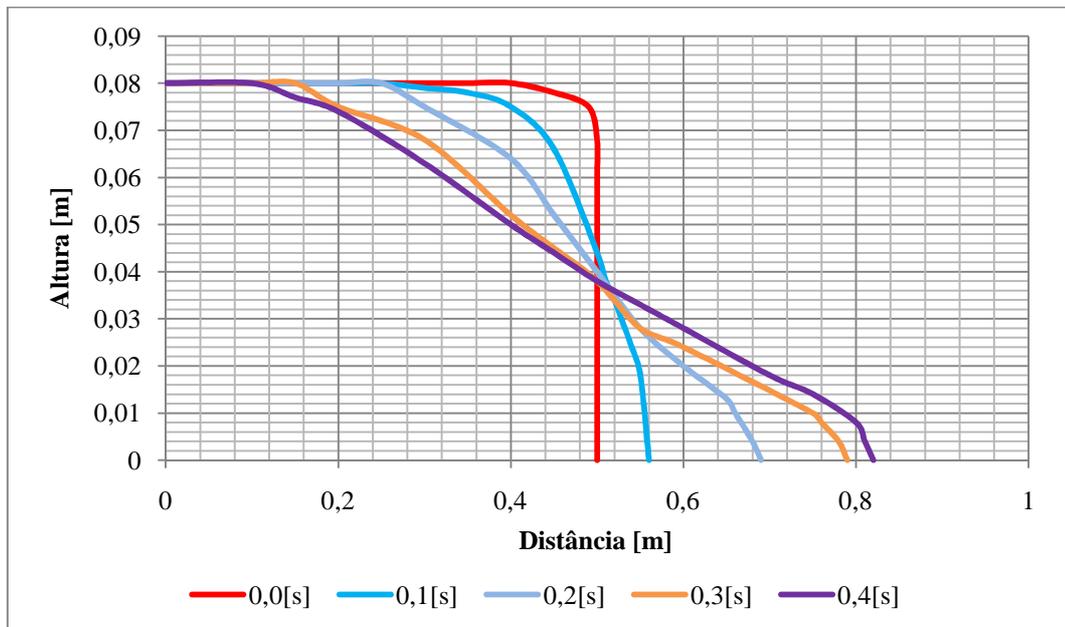


**Figura 6.23.** Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise experimental.

**Carbopol 940: Altura Inicial – 8cm**



**Figura 6.24.** Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise numérica.



**Figura 6.25.** Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) para Carbopol 940 - Análise experimental.

Em materiais de reologia complexa (Carbopol 940), a não linearidade observável em reogramas, explicitam um comportamento físico muito importante, no caso de materiais de fluxo pseudo-plásticos.

Materiais com rigidez inicial, uma tensão que separa a fase elástica da plástica, com deformações contínuas no tempo, seguidas de uma curva em que a taxa de deformação aumenta conforme as tensões de cisalhamento sugerem que a viscosidade está decrescendo, e com isso a resistência ou oposição do fluido ao escoamento diminuindo, com isso ficam evidentes acelerações de frentes em determinados momentos, uma vez que o fluido até em tão submetido a uma maior resistência, devido à maior viscosidade, se vê em estantes subsequentes a uma maior facilidade de escoamento, possibilitando que o gradiente de pressão, que é a força motriz do fluxo analisado exerça toda a sua grandeza.

Como visualizado nas imagens com as frentes em cada uma das simulações e suas respectivas alturas iniciais, a consonância para com os dados numérico-experimentais foi entusiasmante, certos pontos junto à imprecisão eram eminentes e esperados, a complexidade de um sistema dinâmico envolvendo campos de escoamento quando adaptados em um sistema discretizado e suas soluções sendo apenas aproximações de uma solução analítica evidenciam a não exatidão do processo, porém, estas podem ser sensivelmente diminuídas adotando-se um modelo robusto de análise. A utilização de equações completas e não adoção da hipótese de “Águas Rasas”, como estabelecida por célebres estudiosos da área em tentativas de soluções analíticas, aumenta a consistência física dos dados simulados numericamente.

As frentes numéricas deveriam apresentar distâncias maiores para mesmos valores temporais de análise quando comparados com os experimentais, uma vez que efeitos como atrito de parede e fatores como tensões superficiais que alteram os perfis da superfície livre, agindo como forças volumétricas na interface, foram realmente visualizadas atendendo as expectativas, porém, os valores não foram tão grandes, acredito que tal fato se deve a temperatura com a qual a simulação numérica foi realizada (25°C) e durante as simulações experimentais as temperaturas oscilavam sobre este patamar (25°/30°C), como a viscosidade é uma propriedade física intimamente ligada a temperatura, as frentes experimentais se desenvolveram com maiores velocidades, alcançando maiores distâncias.

Outro fator importante que “brecava” a frente experimental era a lei temporal de abertura da comporta pneumática utilizada no canaleta, foram cronometrados tempos de abertura entre 0,1 e 0,15 segundos, já na simulação numérica a liberação instantânea foi

implementada com exatidão, modificando os resultados esperados. A interação fluido-estrutura no caso da comporta, ainda retinha certa quantidade de fluido, diminuindo um pouco a liberação do mesmo.

Visando não deixar dúvidas sobre as distâncias das frentes em sua evolução temporal, foram estabelecidos gráficos nas duas vertentes (numérico - experimental) para melhor entender seu desenvolvimento. Num primeiro instante os perfis pareciam um tanto quanto distintos como no caso da altura inicial de 12 cm no instante de 0,1 segundos, todavia quando colocados em gráficos de mesma escala os perfis se moldaram muito próximos, provando os preceitos do ilustre exercício mental “Gato de Schrödinger”.

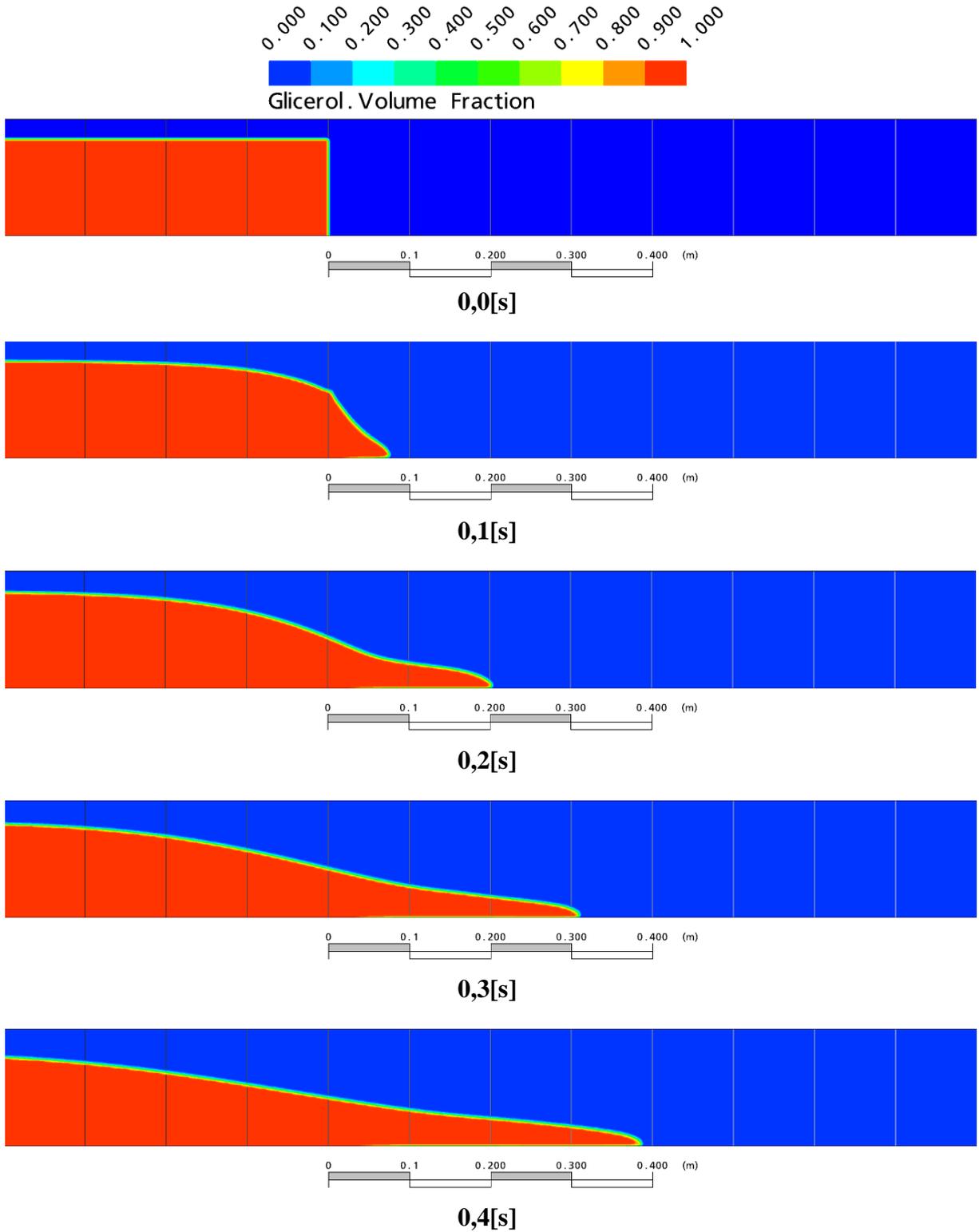
O critério de análise junto à frente numérica foi à determinação da distância máxima a partir das frações volumétricas em 0,5 segundos, uma vez que seria a média entre o máximo e mínimo valor estabelecido pelo software de reconstrução das frentes no CFX. As frentes experimentais foram analisadas para a montagem dos gráficos até o instante de 0,4 segundos, pois as câmeras estavam focadas permitindo imagens nítidas até 1 metro após a comporta.

As variações das alturas promoveram valores dentro do esperado, continuando a consonância de resultados com consistência física da simulação inicial de 12 cm de altura para o Carbopol 940.

### ***Glicerol***

A seguir serão colocados os dados referentes às simulações do Glicerol para análise das frentes

#### ***Análise Numérica – Altura Inicial 12 cm***



**Figura 6.26. Frentes da simulação numérica para Glicerol com 12 cm iniciais.**

Análise Experimental – Altura inicial 12 cm

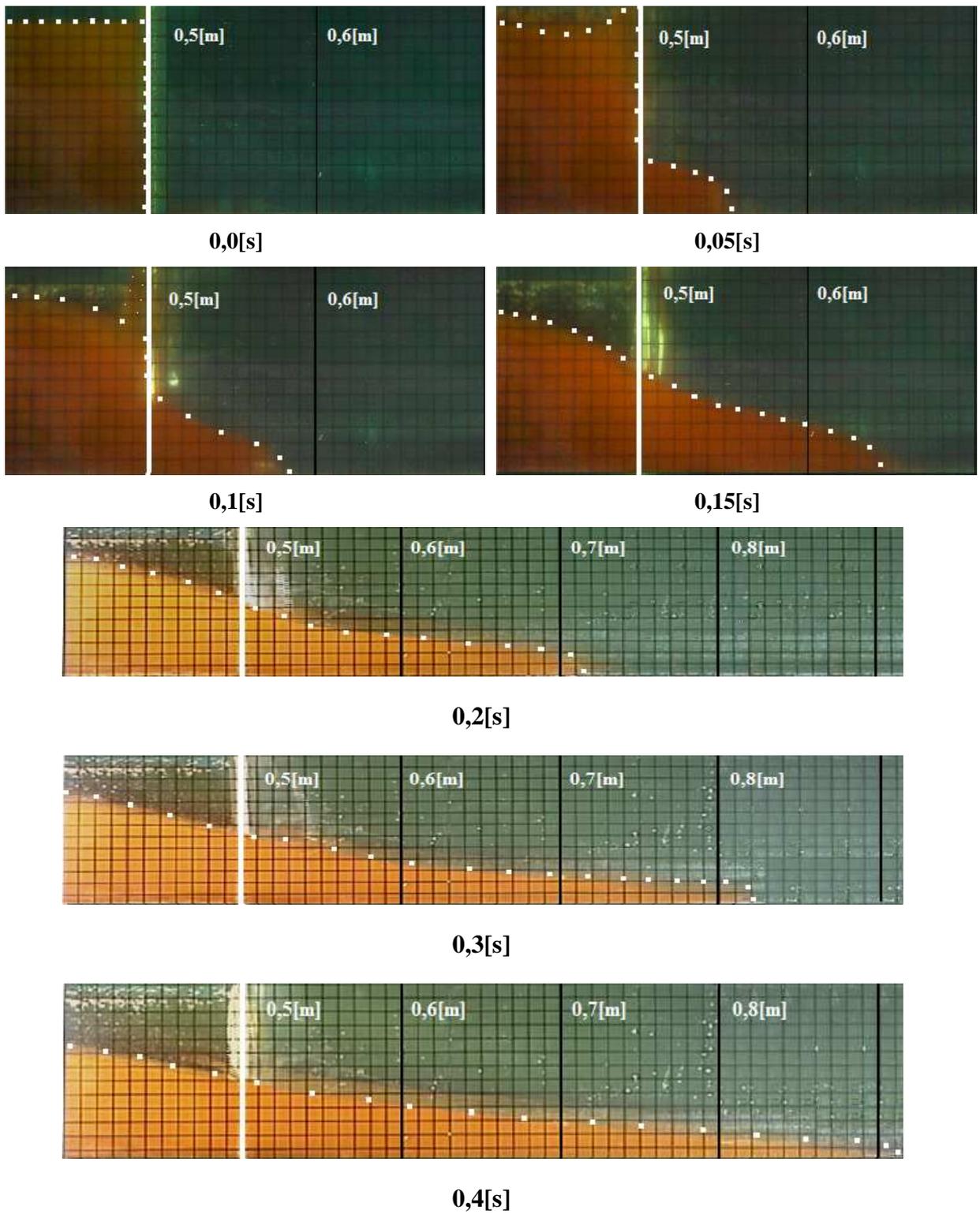


Figura 6.27. Frentes da simulação numérica para Glicerol com 12 cm iniciais.

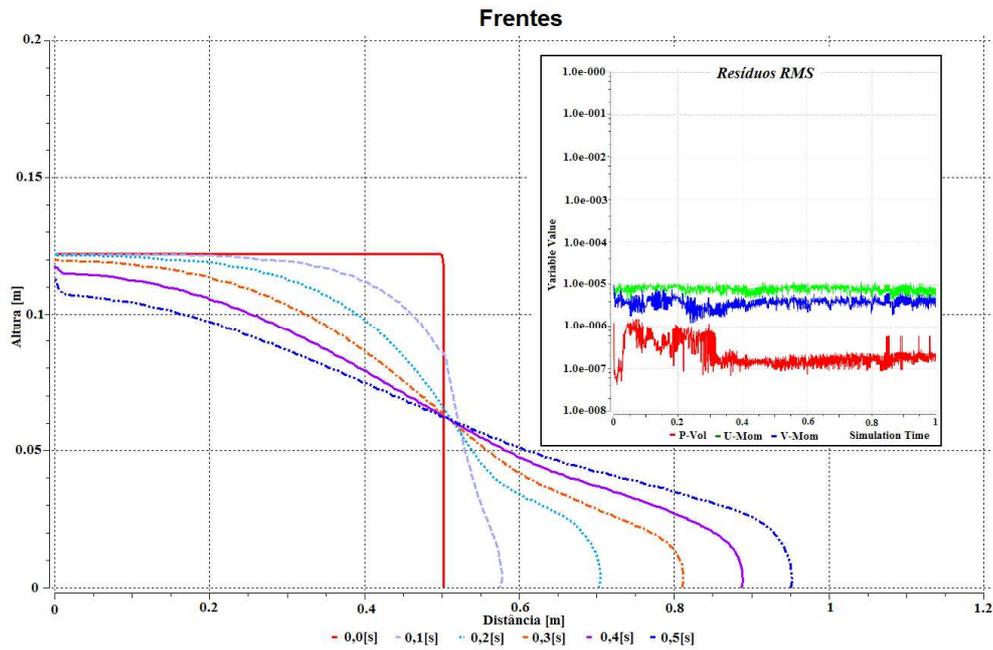


Figura 6.28. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) e os resíduos RMS da simulação numérica para Glicerol – 12cm .

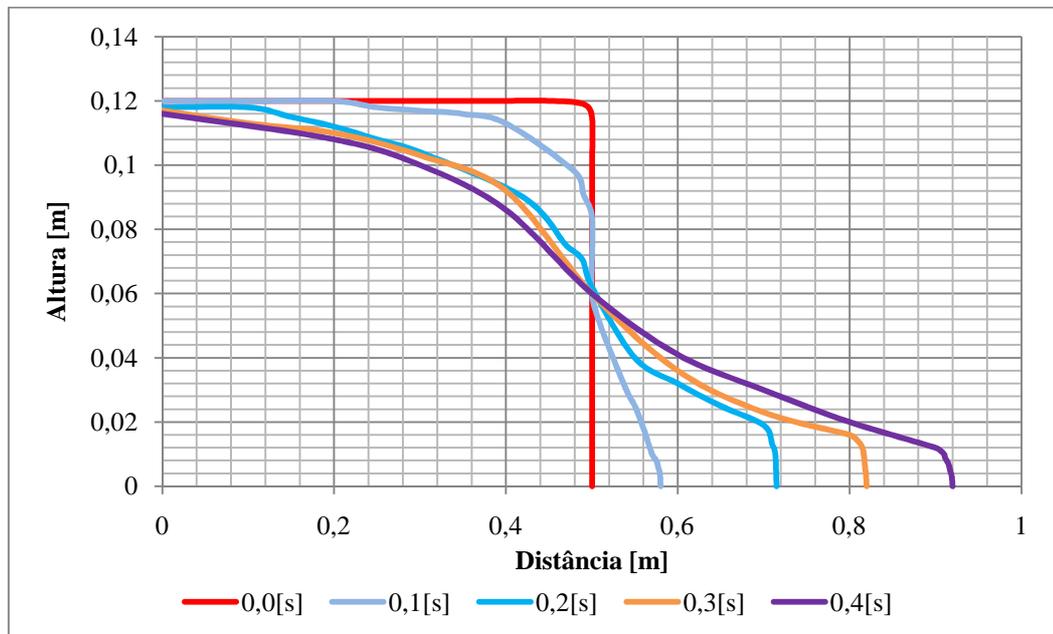
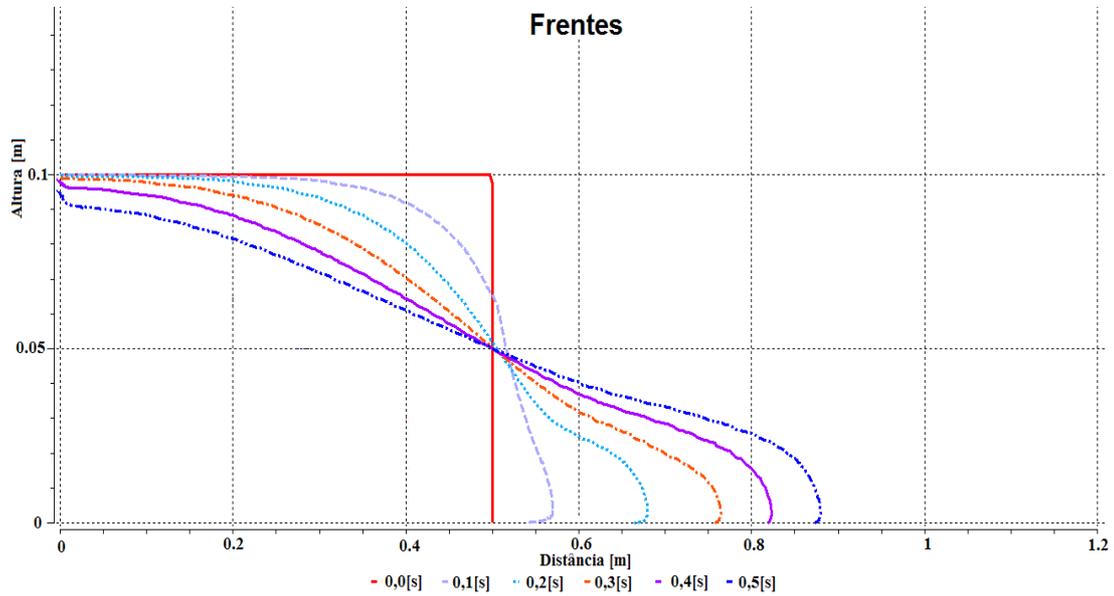
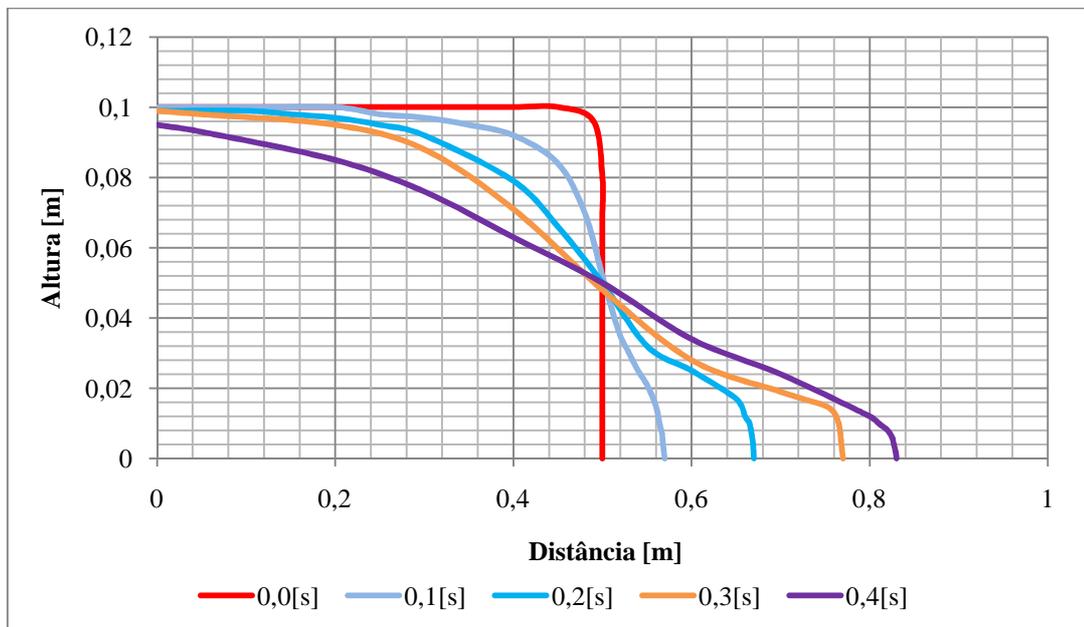


Figura 6.29. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na Análise experimental para Glicerol – 12cm.

**Glicerol: Altura Inicial – 10cm**

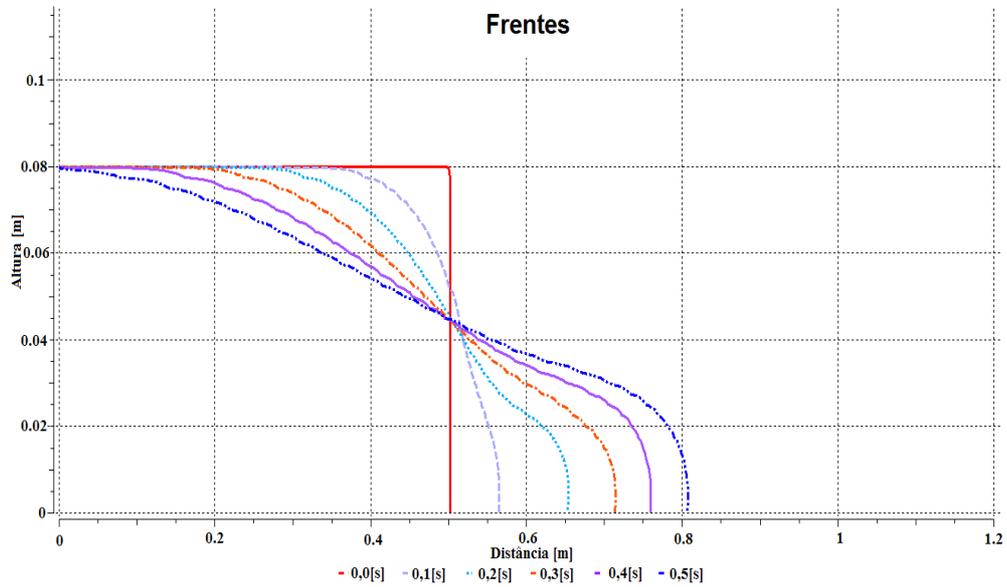


**Figura 6.30.** Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na simulação numérica para Glicerol - 10 cm.

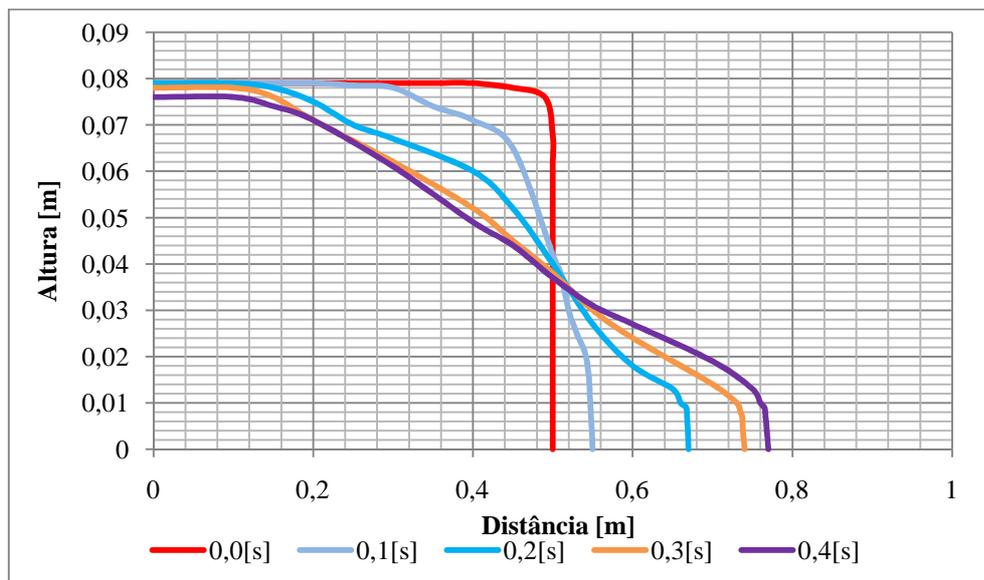


**Figura 6.31.** Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na Análise experimental para Glicerol – 10cm.

**Glicerol: Altura Inicial – 8m**



**Figura 6.32. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na simulação numérica para Glicerol - 8 cm.**



**Figura 6.33. Gráfico com as frentes nos instantes iniciais (Altura x Distância) na Análise experimental para Glicerol – 8cm.**

O material representante da reologia Newtoniana, ou seja, que apresenta uma relação linear entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação com viscosidade constante ao longo da evolução temporal, com média de 0,8568 [Pa s], era caracterizado por uma densidade superior a do Carbopol 940, influenciando o campo de pressões iniciais e o desenvolvimento das frentes e seus perfis. O glicerol era acometido por velocidades iniciais superiores ao do Carbopol 940, devido a sua resistência ao fluxo notadamente inferior, conseqüência da menor viscosidade quando comparada aos tempos iniciais do Carbopol 940, porém, ao longo do tempo a viscosidade do Carbopol 940 decaí e a do Glicerol se mantém constante, caracterizando a homogeneidade do campo de velocidades e conseqüentemente do ritmo de evolução das frentes.

As simulações numéricas e experimentais apresentaram valores muito próximos, demonstrando a consistência física do simulador, os mesmos problemas observados na simulação com o Carbopol 940 foram identificados aqui como o atrito de parede, tensão superficial e lei de abertura da comporta, porém, os valores acabaram sendo muito próximos mais uma vez devido ao fator temperatura que ajudou o fluido a compensar uma maior resistência ao fluxo proporcionada pelas variantes estabelecidas, além de outros fatores de ordem aleatória que insistem em ocorrerem em ambientes não totalmente controlados, como descreve a teoria do caos, que tenta entender certos resultados inesperados em sistemas dinâmicos complexos.

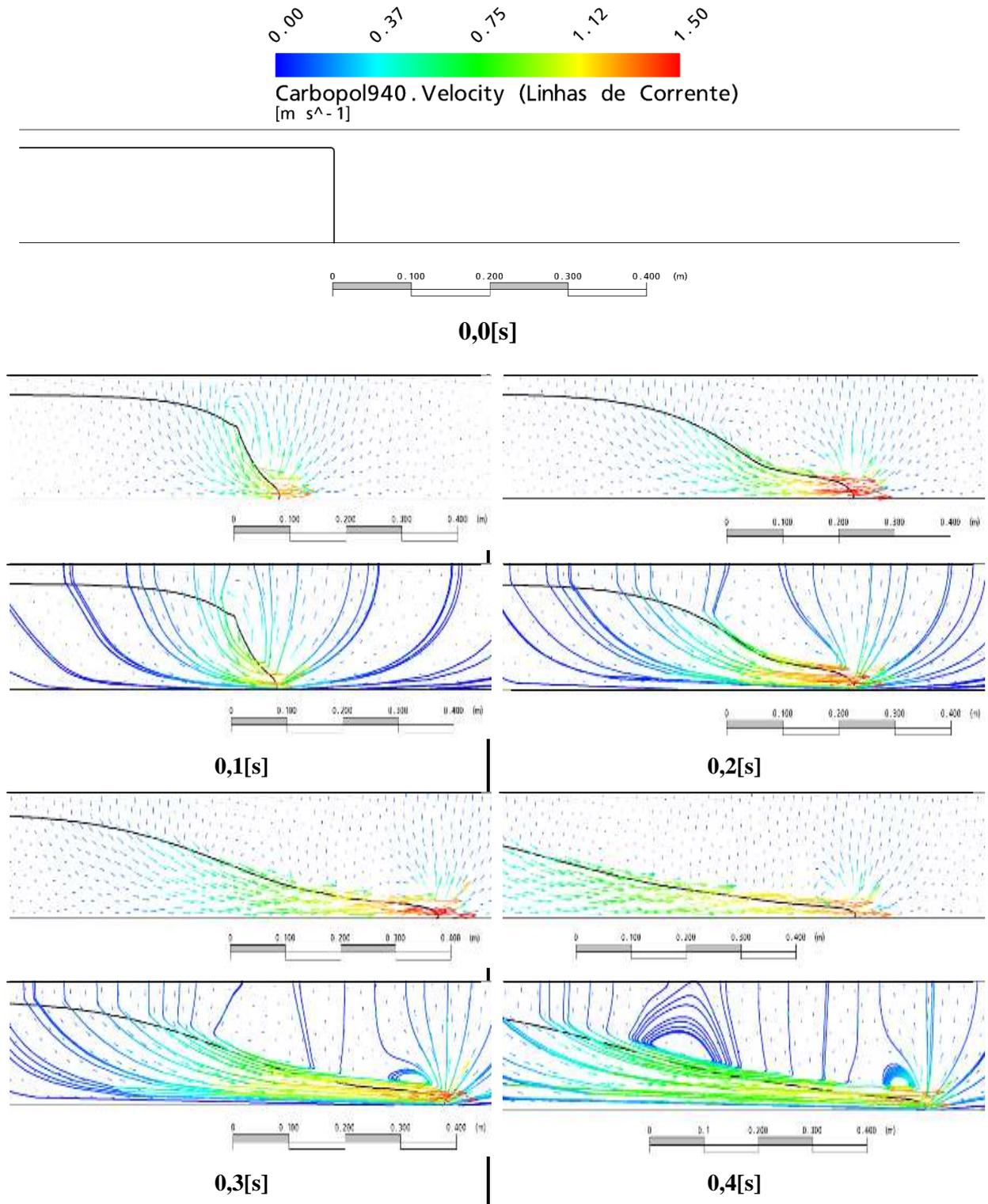
Os gráficos das simulações em 12 e 10 cm apresentaram perfis muito próximos, já a simulação de 8 cm apresentou a maior variação do perfil, na numérica as frentes se mostraram mais altas e robustas, porém na experimental apesar das distâncias praticamente iguais estavam com um perfil mais ameno, possivelmente devido aos atritos não deliberados na simulação numérica.

Em ambas a análise optou-se pela comparação direta entre o numérico e experimental, sem o confronto direto com valores obtidos de equações que utilizam a teoria de “Água Rasas” que embora sejam historicamente importantes na descrição do desenvolvimento de campos de escoamento e entender seus mecanismos pré-requisito para a compreensão do fenômeno, diferem da proposta do software que utiliza equações completas para o processo de discretização do sistema contínuo, sendo que outros trabalhos já mostraram que apesar de obter valores próximos, não são tão exatos quanto os obtidos a partir da manipulação das equações governantes completas.

#### **6.4.2. Análise do Campo de Velocidades e Campo de Pressão**

Aqui estarão os resultados obtidos junto aos campos de velocidades e pressão no âmbito numérico para cada material estudado (Carbopol 940 e Glicerol).

**Carbopol 940 - Campo de Velocidades e Linhas de Corrente: Altura Inicial – 12cm**



**Figura 6.34. Campos de velocidade para Carbopol 940 com 12 cm iniciais.**

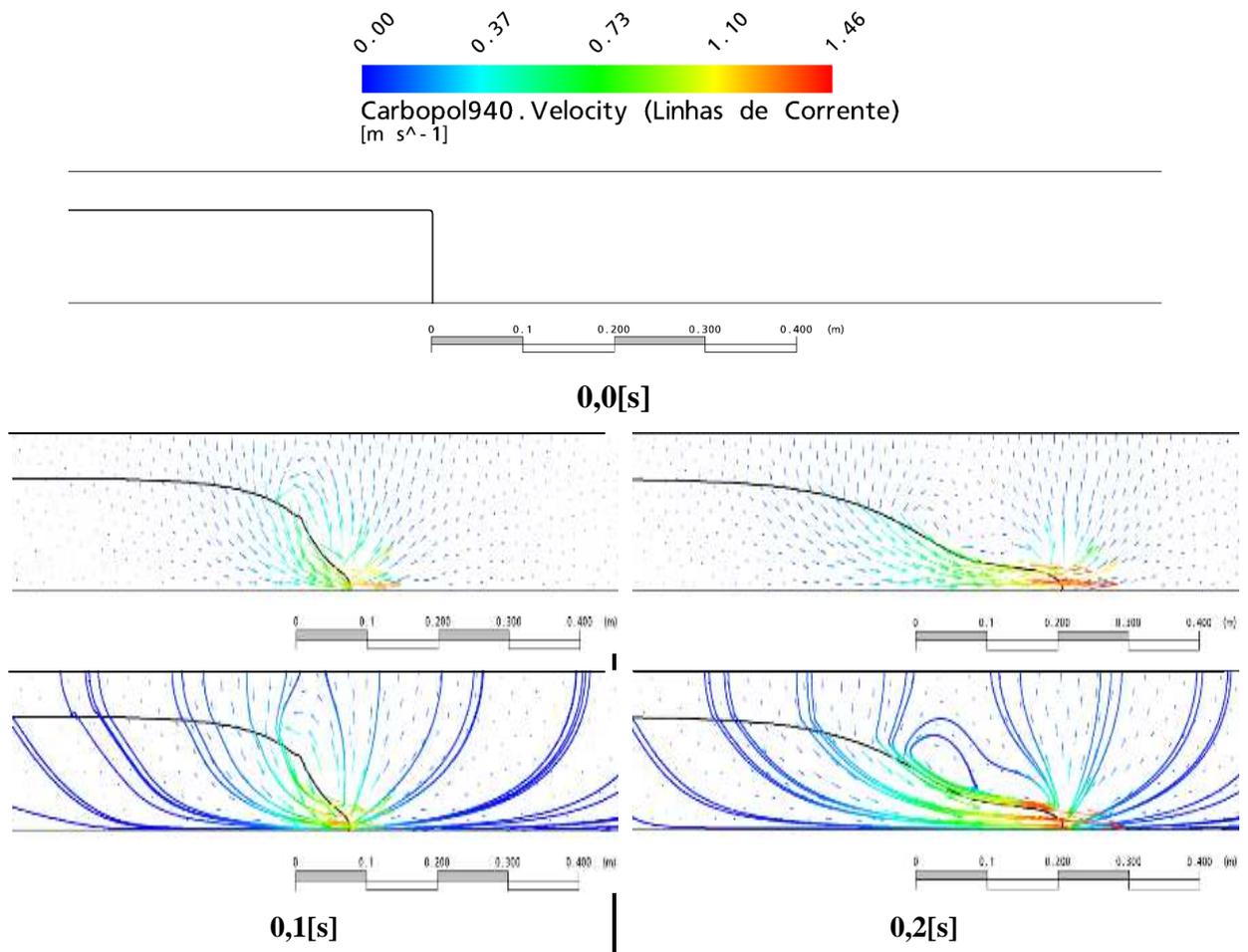
**Soluções de Ritter:**

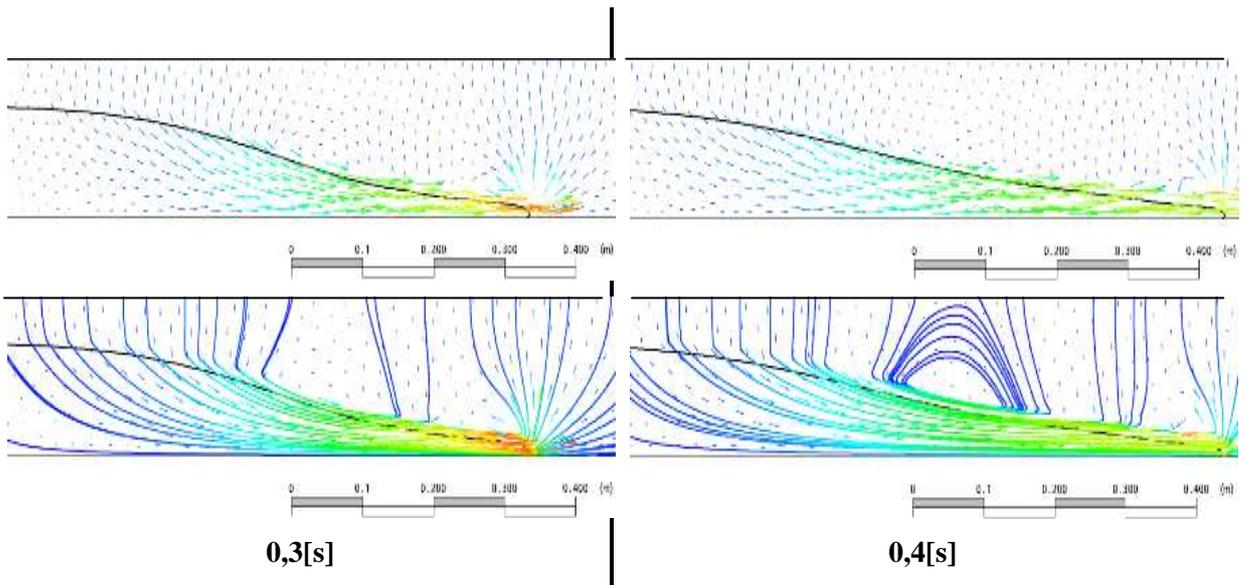
Considerando as regiões que antecedem a camada limite proposta por Whitham (1954), a solução de Ritter (1892) mostra valores consistentes e em consonância com os valores obtidos na simulação numérica.

**Tabela 6.7 – Soluções de Ritter (1892).**

<i>Ritter solution [m/s]</i>	<i>X[m]</i>	<i>T[s]</i>
0,99	0,04	0,1
1,02	0,09	0,2
1,03	0,14	0,3
1,06	0,2	0,4

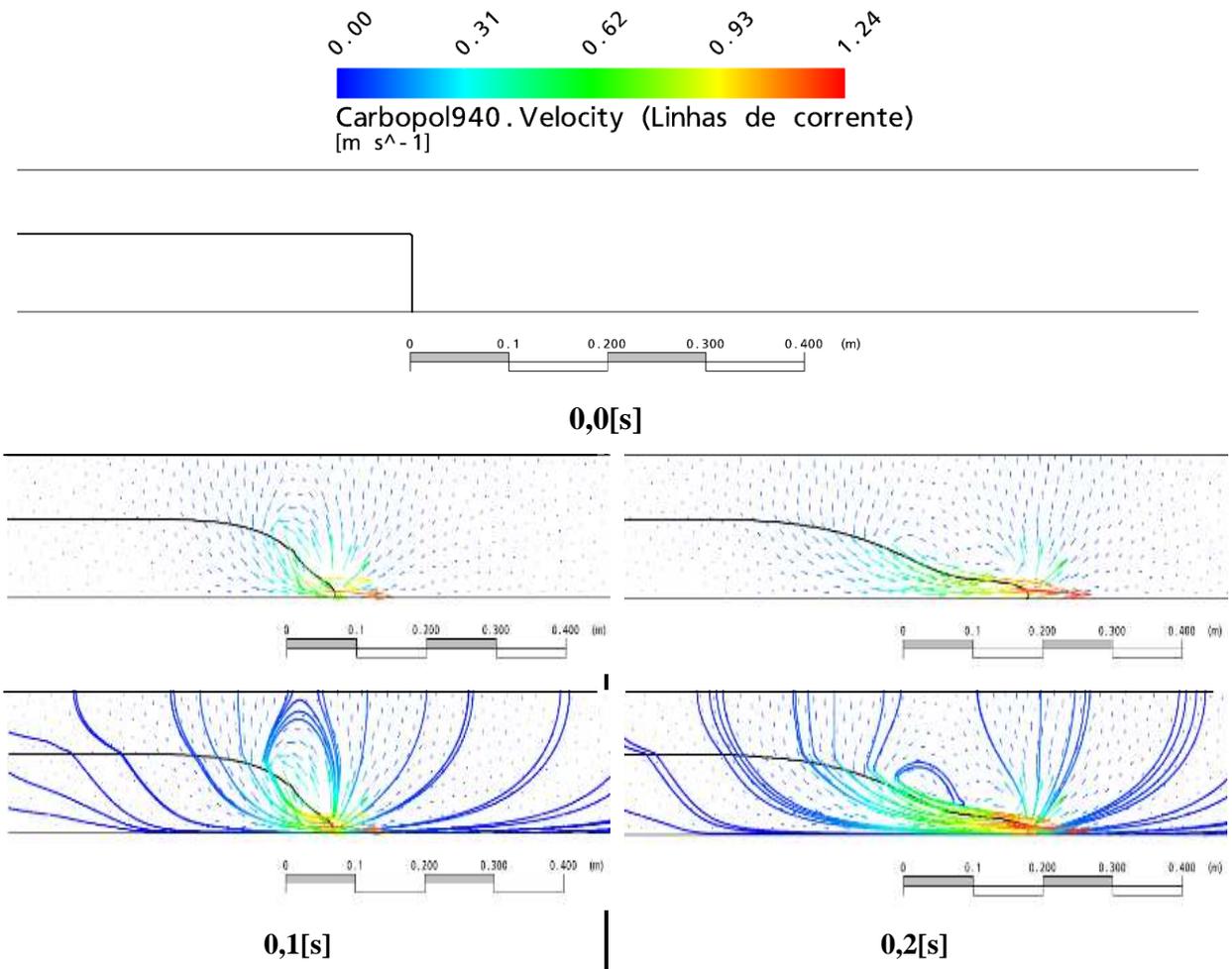
***Campo de Velocidades e Linhas de Corrente para Carbopol 940: Altura Inicial – 10cm***

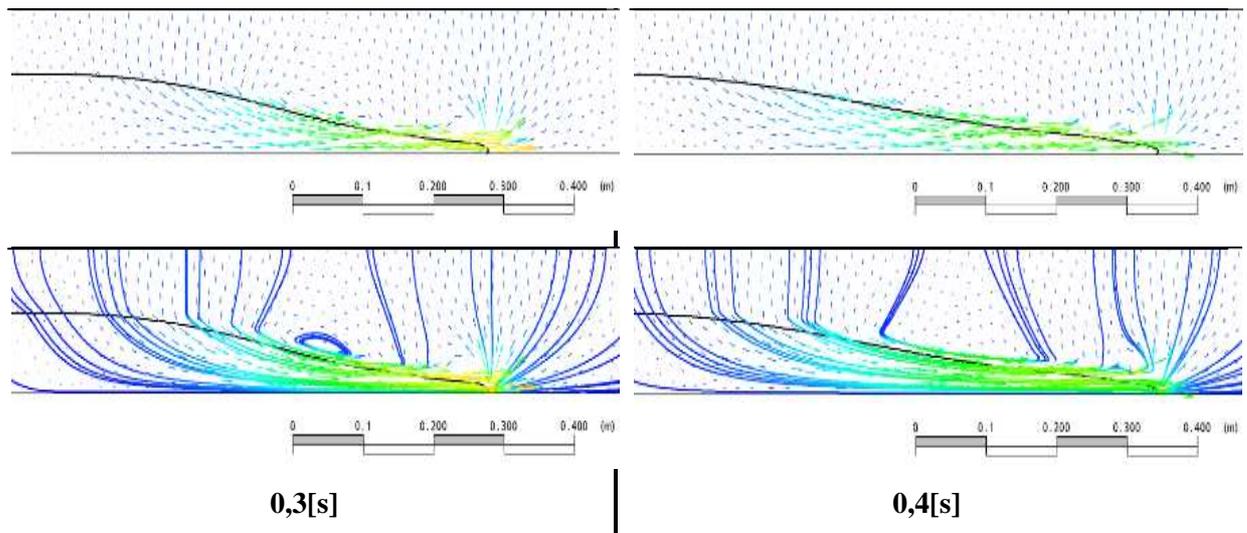




**Figura 6.35. Campos de velocidade para Carbopol 940 com 10 cm iniciais.**

*Campo de Velocidades e Linhas de Corrente para Carbopol 940: Altura Inicial – 8cm*





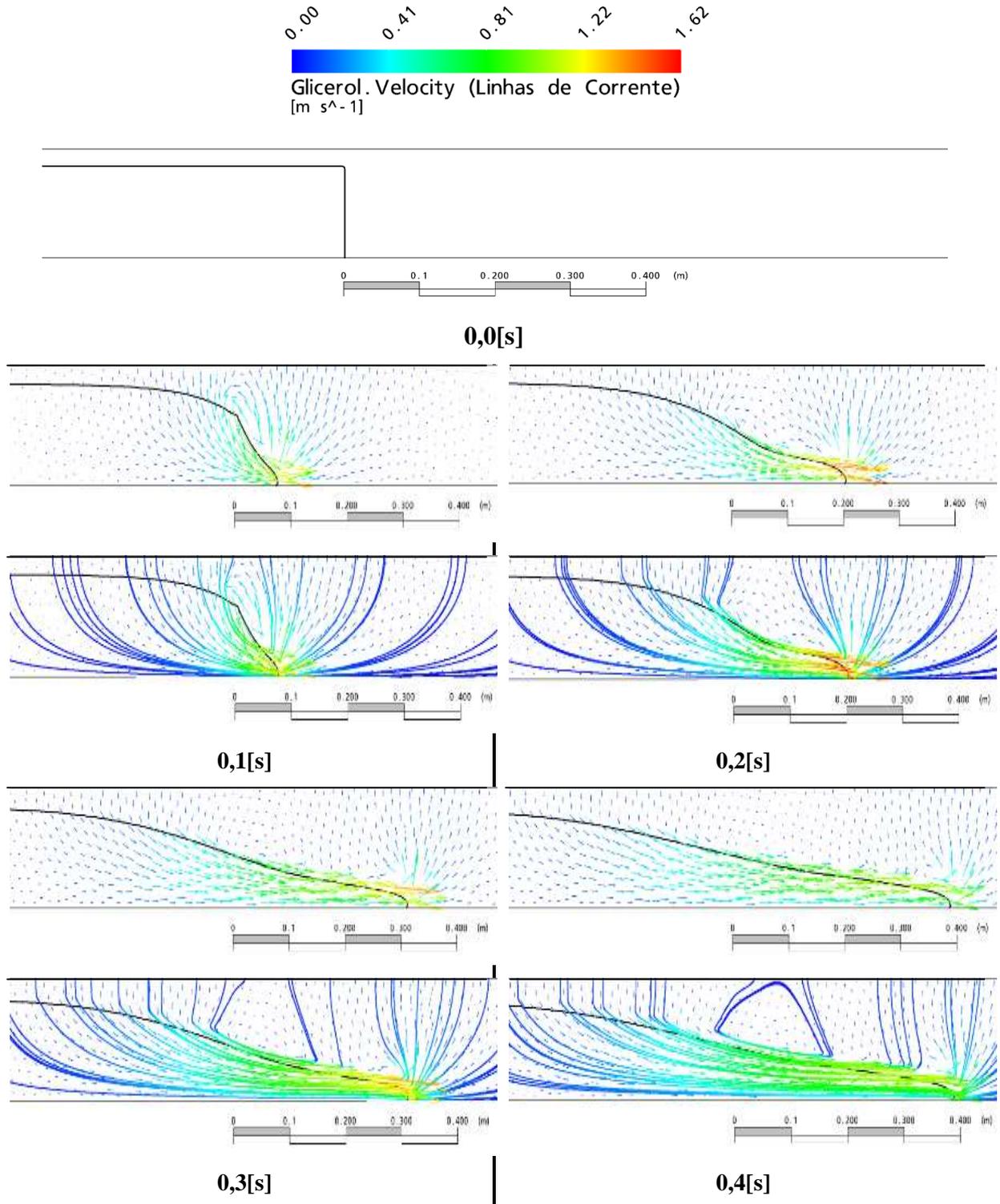
**Figura 6.36. Campos de velocidade para Carbopol 940 com 8 cm iniciais.**

Os campos de velocidade para cada simulação se mostraram eloqüentes para com as distâncias obtidas durante a evolução temporal deste sistema dinâmico complexo. Para cada campo de velocidades as imagens mostram também as linhas de corrente, linhas imaginárias traçadas de tal forma que se posicionem tangentes as velocidades em cada ponto no espaço.

Vale ressaltar que o modelo homogêneo adotado, dentro do escopo do modelo de resolução para sistemas multifásicos, Euler-Euler, evidenciam fases dividindo um mesmo campo de escoamento, ou seja, campos de pressão e velocidades. As interações entre as fases se estabeleciam através de termos de transferência interfásicos, possibilitando uma visualização do campo de velocidades das duas fases de maneira homogênea. A ordem de grandeza das velocidades foram comparadas com as soluções de Ritter (1892), nas faixas que antecederiam a camada limite de Whitham (1954) obtidas a partir de manipulações do método de integração de Pohlhausen, e demonstram que as soluções de Ritter ficam bem próximas das obtidas a partir das fornecidas pelo método numérico discretizado de equações completas.

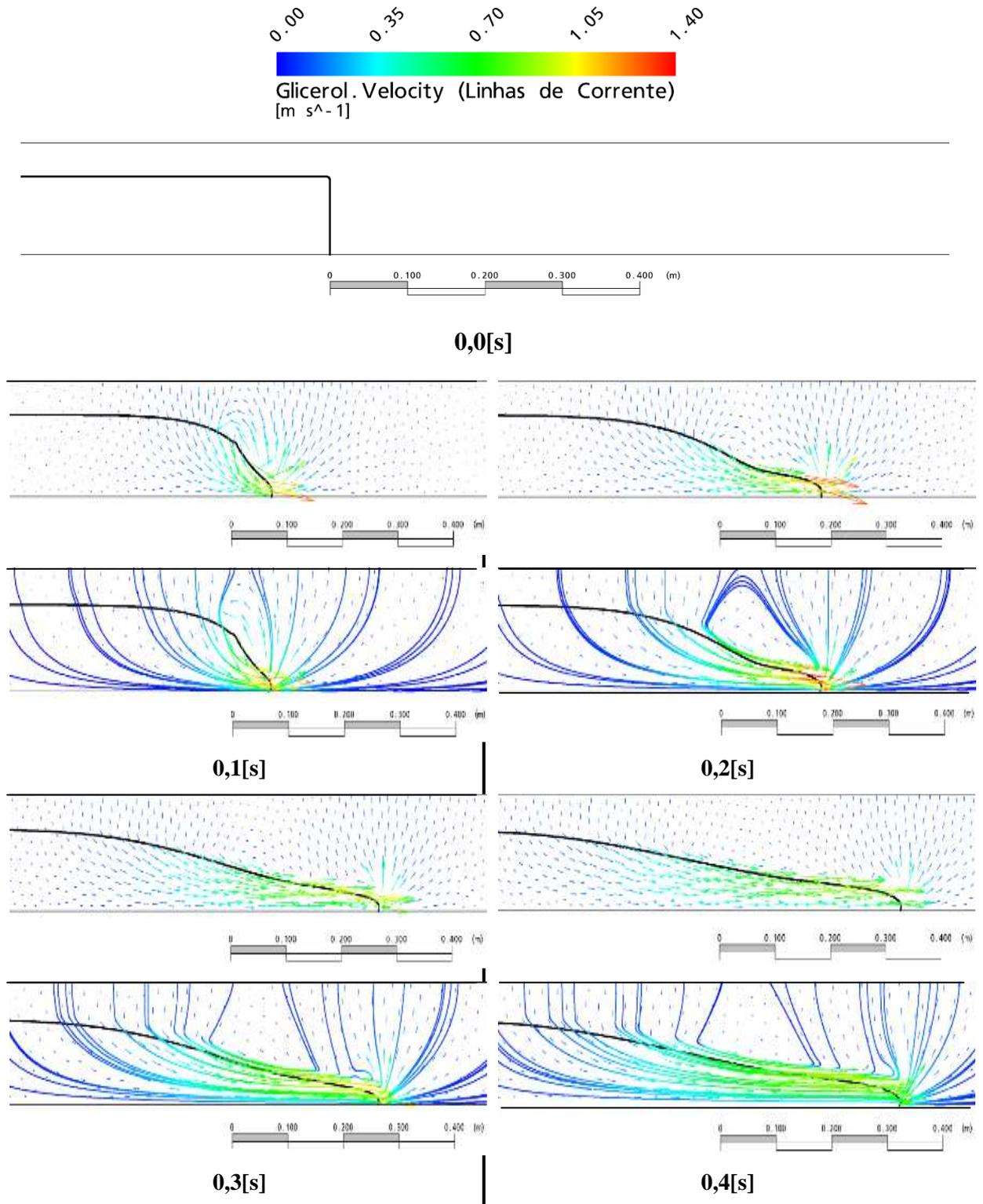
Experimentalmente os campos de velocidade são estabelecidos a partir de métodos que utilizam a não homogeneidade do campo de escoamento, como as técnicas de Velocimetria Laser baseadas no efeito Doppler ou em franjas de interferência, porém, infelizmente não foram adotadas neste trabalho, que utilizou como base a análise visual de imagens no espaço tempo.

**Glicerol - Campo de Velocidades e Linhas de Corrente: Altura Inicial – 12cm**



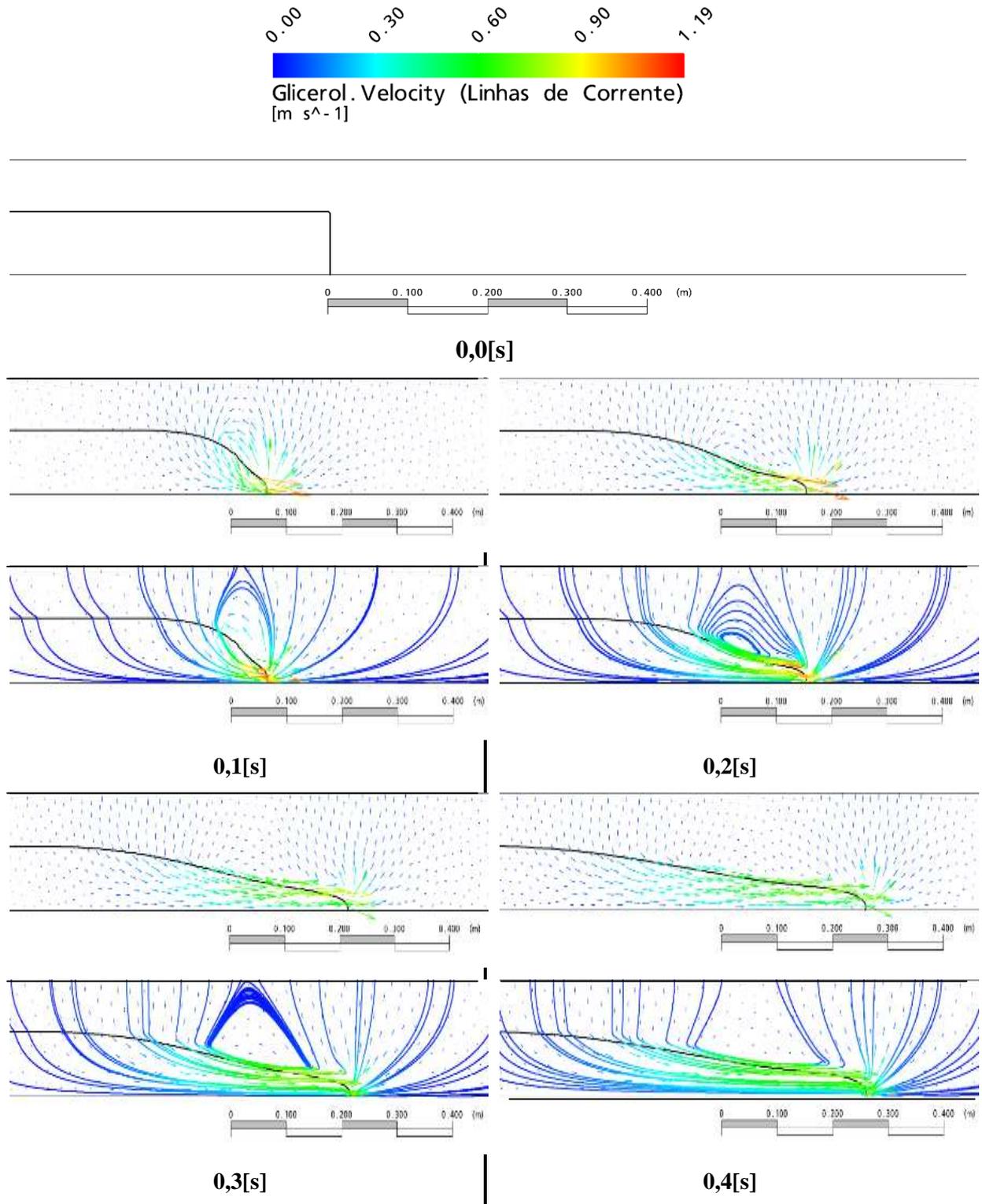
**Figura 6.37. Campos de velocidade para Glicerol com 12 cm iniciais.**

**Campo de Velocidades e Linhas de Corrente para Glicerol: Altura Inicial – 10cm**



**Figura 6.38. Campos de velocidade para Glicerol com 10 cm iniciais.**

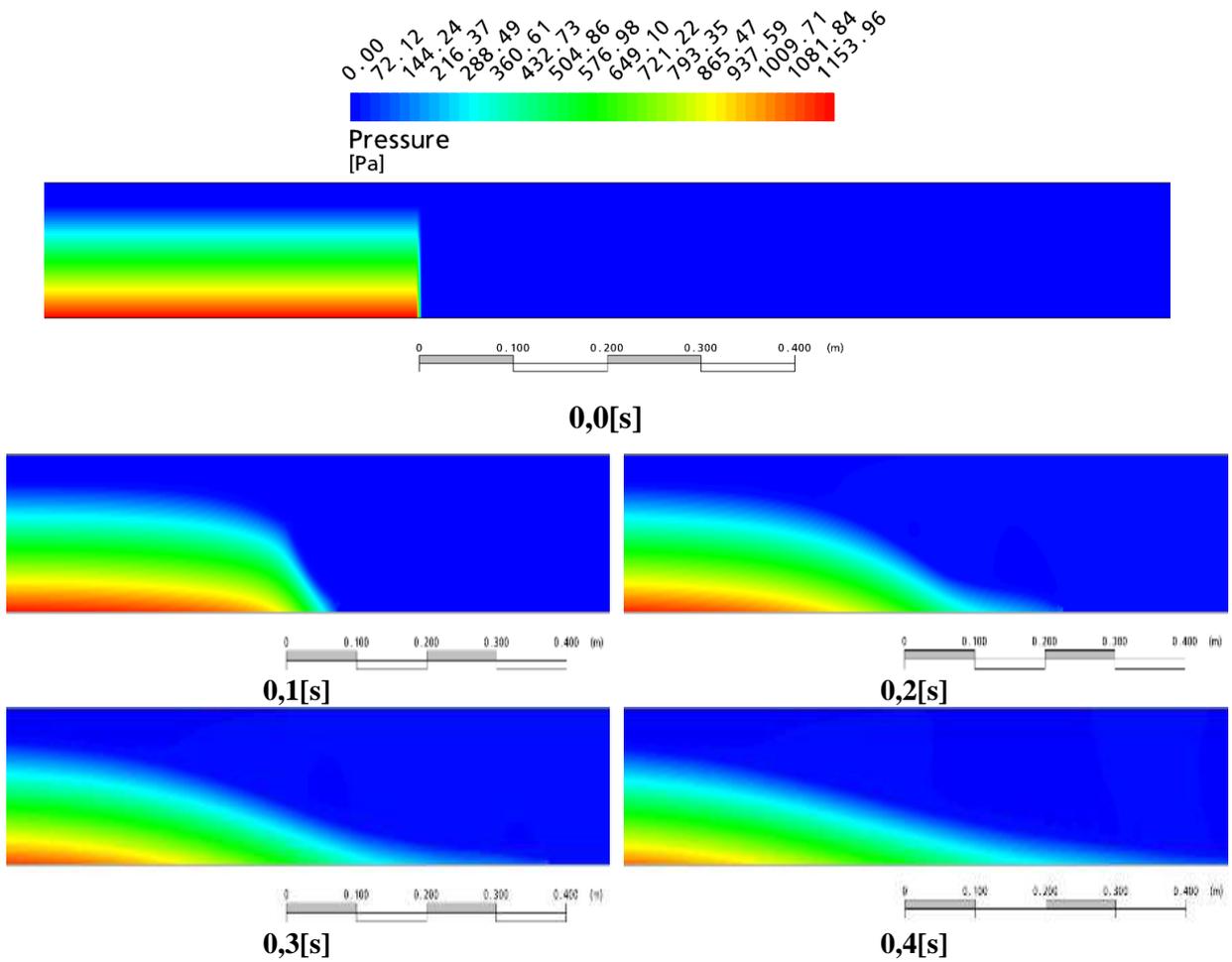
**Campo de Velocidades e Linhas de Corrente para Glicerol: Altura Inicial – 8cm**



**Figura 6.39. Campos de velocidade para Glicerol com 8 cm iniciais.**

**Campos de Pressão**

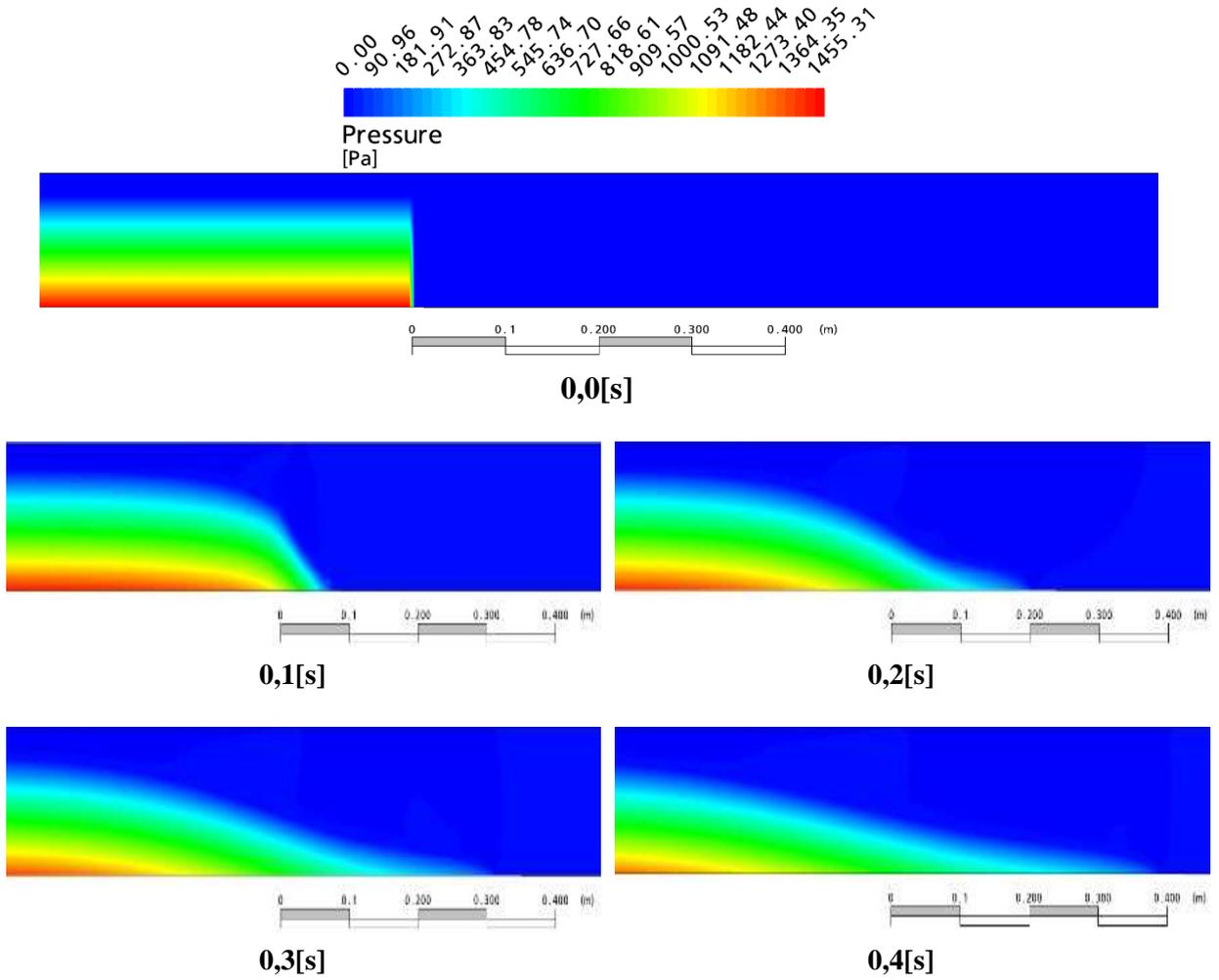
**Carbopol 940: Altura Inicial - 12cm**



**Figura 6.40. Campo de pressão ao longo da evolução temporal para Carbopol 940.**

A força motriz do campo de escoamento numérico se desenvolve pelo gradiente de pressão. Aqui podemos visualizar o campo de pressões ao longo da evolução temporal a partir da liberação instantânea da barreira. A pressão de referência foi configurada como 0 [Pa] conforme evidenciam as figuras 6.40 e 6.41 com a tonalidade azul escura.

**Glicerol: Alturas Inicial – 12cm**



**Figura 6.41. Campo de pressão ao longo da evolução temporal para Glicerol.**

### 6.4.3. Análise para Taxas de Cisalhamento do Glicerol

Glicerol: Altura Inicial - 8cm

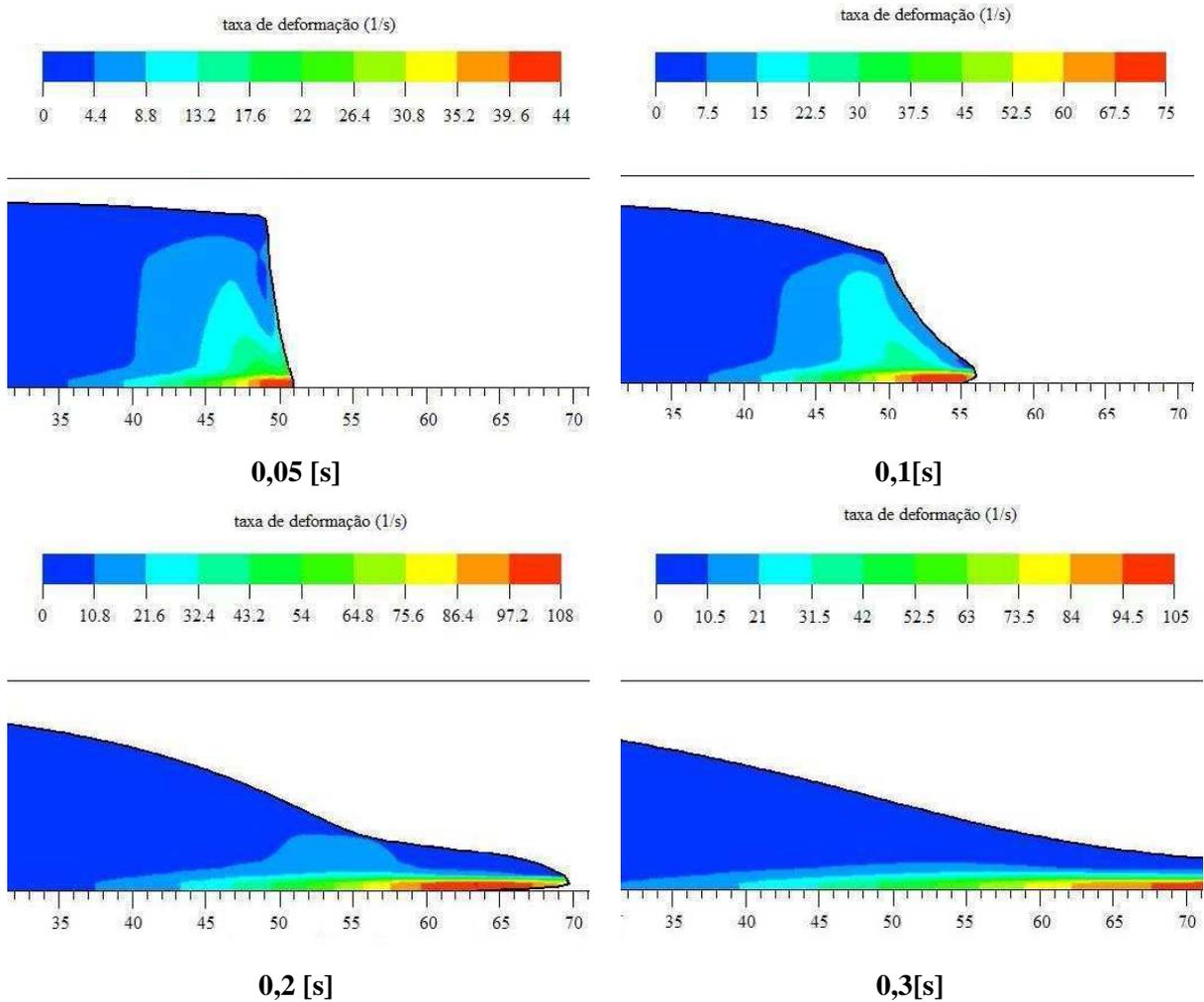


Figura 6.42. Taxa de cisalhamento ao longo da evolução temporal para Glicerol.

Ao analisarmos as taxas de cisalhamento, podemos verificar que a maior parte do campo de escoamento permanece em repouso, ou com baixíssimos valores associados ao gradiente de cisalhamento por uma dada distância, caracterizando uma zona rígida.

## CAPÍTULO 7

---

### Conclusão

---

Os objetivos estavam focados no confronto numérico experimental de um fenômeno passível de ocorrência, seja em situações naturais, quanto em situações artificiais, o problema “tipo” rompimento de barreira retendo materiais de reologias diversas (Newtoniana e Não-Newtoniana). Recriar um sistema dinâmico complexo é extremamente difícil, uma vez que fatores aleatórios podem atuar sobre o mesmo, desenvolvendo resultados inesperados e muitas vezes promovendo uma visão errônea da essência do problema, conforme estabelece a teoria física-matemática do caos. Em contrapartida, uma análise desenvolvida sobre um sistema dinâmico complexo controlado na medida do possível, pode dar informações relevantes e possibilita assim testar a consistência física das mais diversas propostas discutidas na atualidade referentes a soluções de problemas deste calibre. A capacidade humana de abstração perante problemas complicados é extremamente limitada, tornando a resolução de fenômenos através de um único operador praticamente impossível, daí a necessidade de dividir o problema em partes, de forma a compreender o todo entendendo-se as partes. Esta é a proposta deste trabalho, que visa fechar uma análise referente à consistência física de simuladores computacionais que manipulam equações completas na tentativa de descrever, de maneira discreta, sistemas contínuos.

Optou-se em analisar dois fluidos reologicamente distintos, visualizar o desenvolvimento da evolução temporal de suas qualidades de estado e confrontar esses valores com os obtidos numericamente através do pacote computacional ANSYS-CFX. O material representante da reologia complexa foi o Carbopol 940 (Herschel-Bulkley), e o controle junto a sua confecção foi um fator ímpar, uma vez que suas características seriam posteriormente recriadas numericamente, juntamente com o material de reologia Newtoniana,

o Glicerol (este obtido através de um laboratório químico). A simulação experimental foi realizada com um modelo em escala reduzida de um canal com comporta de acionamento pneumático, recriando o fenômeno de ruptura instantânea de barreira. Os fluidos reologicamente controlados eram represados neste canal artificial e submetidos a uma liberação abrupta. Equipamentos de filmagem captavam o desenvolvimento das frentes e assim possibilitando o confronto com dados numéricos.

O Carbopol 940 confeccionado apresentava concentração mássica fixada em 0,13%, considerada pela literatura como a concentração ótima para simulações de ruptura de barreira; Segundo análises reológicas a partir de técnicas de reometria, o Carbopol 940 apresentou características bem comportadas para um fluido de Herschel-Bulkley, com valores próximos aos encontrados por Lachamp (2003).

Obter prática na preparação do Carbopol 940, possibilitando a confecção de volumes elevados do produto, mantendo as características ótimas estabelecidas pela Noveon foram difíceis no início, porém, o material atendeu as expectativas, o umectante presente na formulação do polímero (Ácido Carboxivinílico) preservou a integridade física do gelificante, possibilitando seu armazenamento e utilização posterior sem alterações significativas em sua estrutura. O glicerol mostrou após análises reométricas que suas características newtonianas (viscosidade constante) estavam preservadas, e sendo um material com uma ficha técnica muito bem explorada, possibilitou o fornecimento de dados físico-químicos importantes na recriação numérica do mesmo.

O confronto numérico experimental demonstrou grande consonância nos resultados, o modelo homogêneo de Euler-Euler adotado e condições de superfície livre configuradas junto aos termos de transferência interfásicos se mostraram eficazes para este problema, isso mostra a importância de configurações consistentes junto as condições de contorno e condições iniciais, pois elas separam resultados confiáveis de resultados ruins junto a problema elípticos e parabólicos.

As imagens mostraram perfis levemente distintos nos instantes iniciais na comparação numérico-experimental, onde os fenômenos viscosos podem ser praticamente desprezados, devido à influência direta da comporta sobre o fluido de trabalho (interação fluido-estrutura), porém nos instantes subsequentes os resultados estavam muito próximos. Daí a importância de se utilizar equações completas, que descrevem de maneira consistente esses fenômenos dinâmicos.

### 7.1. Sugestões Futuras

Após o desenvolvimento deste trabalho, algumas deliberações foram estabelecidas e apontam como sugestões para realizações científicas futuras.

No campo empírico um maior controle das condições ambientais, como temperatura do laboratório e total automatização dos processos envolvendo o canaleta, desde um maior controle para a abertura da comporta até a injeção do material analisado novamente em condições iniciais de simulação. Maior controle sobre a iluminação ambiente para obtenção de imagens mais nítidas e utilização de maior número de frames, possibilitando captar os instantes iniciais do desenvolvimento das frentes com maior precisão, não se esquecendo do fator temperatura, uma vez que a maior iluminação resulta em maiores temperaturas do ambiente, afetando a integridade reológica do material analisado.

No campo numérico, a interação fluido-estrutura possibilitaria observar fenômenos verificados experimentalmente como a retenção de material na comporta nos instantes iniciais ao acionamento da mesma, setar com maior precisão fatores como rugosidade superficial do canal, saindo da análise 2D com relações de simetria laterais do canal para uma análise 3D, recriando as condições reais do mesmo e suas singularidades. Trabalhar com análises Eulerianas-Eulerianas não-homogêneas, mesmo que a razão de transferência interfásica seja grande, possibilitando analisar os campos multifásicos separadamente, e inclusão de efeitos com a tensão superficial da frente viscoplástica.

---

## REFERÊNCIAS

ABERNETHY, R. B.; BENEDICT, R. P.; DOWDELL, R. B. ASME measurement uncertainty. **Journal of Fluid Engineering**, New York, v. 107, p. 161-162, 1985.

ALCRUDO, F. **A State of the art review on mathematical modelling of flood propagation**. Disponível em: <[http://www.samui.co.uk/impact-project/cd/Papers/Screen/008\\_s\\_02-05-16\\_IMPACT\\_Alcrudo.pdf](http://www.samui.co.uk/impact-project/cd/Papers/Screen/008_s_02-05-16_IMPACT_Alcrudo.pdf)>. Acesso em: 15 fev. 2007.

ALEXANDROU, A. N.; FLORIDES, G.; GEORGIU, G. Compression of materials with yield stress. In: GRACM INTERNATIONAL CONGRESS ON COMPUTATIONAL MECHANICS, 5., 2005, Limassol. **Congress...** Limassol: [s.n], 2005.

ARIS, R. **Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics**. New York: Dover, 1969. 286 p.

ASTARITA, G. The engineering reality of the yield stress the Society of Rheology. **Journal of Rheology**, New York, v. 34, n. 2, p. 275-277, 1989.

BALMFORTH, N. J.; CRASTER, R. V. **Very high resolution photoelectron spectroscopy**. Berlin: Springer-Verlag, 2001. v. 582, p. 34-51.

BALMFORTH, N. J.; CRASTER, R. V.; PERONA, P.; RUST, A. C.; SASSI, R. Viscoplastic dam breads and the Bostwick consistometer. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, n. 142, p. 63 – 78, 2007.

BARNES, H. A. The yield stress - a review or everything flows? **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, n. 81, p. 133-178, 1998.

BARNES, H. A.; NGUYEN, Q. D. Rotating vane rheometry - a review. **Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, n. 98, p. 1-14, 2001.

BARNES, H. A.; WALTERS, K. The yield stress myth? **Rheological Acta**, Berlin, v. 24, n. 4, p. 323-326, 1985.

BARRY, B. W.; MEYER, M. C. The rheological properties of carbopol gels I. continuous shear and creep properties of carbopol gels. **International Journal of Pharmaceutics**, Amsterdam, n. 2, p. 1-25, 1979.

BOGER, D. V.; WALTERS, K. **Rheological phenomena in focus**. Amsterdam: Elsevier, 1993. 155 p. (Rheology Series, 4).

BRETAS, R. S.; D'ÁVILA, M. A. **Reologia de polímeros fundidos**. São Carlos: UFSCar, 2000. 196 p.

MILLIPORE CORPORATION. Billerica, 2008. Disponível em:<<http://www.millipore.com/catalogue/module/c9210>>. Acesso em: 08 jun. 2008.

CHANSON, H.; JARNY, S.; COUSSOT, P. Dam break wave of thixotropic fluid. **Journal of Hydraulic Engineering**, New York, p. 280-293, mar. 2006.

CHANSON, H. **Analytical solutions of laminar and turbulent dam break wave**. Lisboa: River Flow, 2006.

CHIANG, C. M. **Lecture notes on fluid dynamics: 1.6 relations between stress and rate-of-strain tensors**. [S.l]: MIT, 2002. Disponível em: <<http://ocw.mit.edu/OcwWeb/Civil-and-Environmental-Engineering/1-63Advanced-Fluid-Dynamics-of-the-EnvironmentFall2002/LectureNotes/index.htm>>. Acesso em: 06 jun. 2007.

COUSSOT, P.; GAULARD, F. Gravity flow instability of viscoplastic materials: the ketchup drip. **Physical Review**, New York, n. 72, p. 1-5, 2005.

COUSSOT, P.; MEUNIER, M. Recognition, classification and mechanical description of debris flows. **Earth-Science Reviews**, Amsterdam, n. 40, p. 209-227, 1996.

DEBIANE, K. **Hydraulique des écoulements laminaires à surface libre dans um canal pour des milieux visqueux ou viscoplastiques**. 2000. 275 f. Tese (Doutorado em Mecânica dos Fluidos e Fenômeno de Transporte) - Université Joseph Fourier-Grenoble I, Grenoble, 2000.

DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Manager. [S. l.]: ANSYS, 2005a.

DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Modelling - Basic Capabilities Modelling. [S. l.]: ANSYS, 2005c.

DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Modelling. [S. l.]: ANSYS, 2005-b.

DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Theory. [S. l.]: ANSYS, 2005d.

DOCUMENTAÇÃO FLUENT - Introduction to Modeling Multiphase Flows. [S. l.]: Fluent, January 28, 2003. Chapter 20.

DORAISWAMY, D. The origins of rheology: a short historical excursion. **Rheology Bulletin**, Melville, v. 71, n. 1, p. 1-9, 2002. Disponível em: <[http://www.rheology.org/sor/publications/rheology\\_b/Jan02/Origin\\_of\\_Rheology.pdf](http://www.rheology.org/sor/publications/rheology_b/Jan02/Origin_of_Rheology.pdf)>. Acesso em: 09 out. 2007.

ERNE, G.; PETELIN, S.; TISELJ, I. Numerical errors of the volume-of-fluid interface tracking algorithm. **International Journal Numerical Methods Fluids**, Chichester, v. 38, p. 329-350, 2002.

ETIENNE, J.; HOPFINGER, E.; SARAMITO, P. **A mass-averaged velocity model for mixture flows of high density ratios: numerical simulations and comparison with experiments**. [S. l: s. n], 2004.

- HARNETT, J.; HU, R. Y. The yield stress - an engineering reality. **Journal of Rheology**, New York, v. 33, n. 4, p. 671-679, 1989.
- KIRK-OTHMER, E. T. Glycerol. In: AMERICAN SOCIETY OF CHEMISTRY. **Encyclopedia of chemical technology**. 5. ed. New York: John Wiley, 2007.
- KIRYU, H. S.; BARBOSA, M. P.; MACIEL, G. F.; SALLES, F. M.; BRESEGHELLO, A. C. Avaliação do comportamento reológico e mecânico da calda de cimento fabricada com microcimento do tipo mc-20 e mc-30. In: CONGRESSO BRASILEIRO DO CONCRETO, 47., 2005, Pernambuco. **Anais...** Pernambuco: ABC, 2005.
- LABANDA, J.; MARCO, P.; LLORENS, J. Rheological model to predict the thixotropic behaviour of colloidal dispersions. *colloids and surfaces A: Physicochem Eng. Aspects*, Amsterdam, n. 249, p. 123–126, 2004.
- LACHAMP, P. **Modélisation numérique de l'effet d'un obstacle sur les écoulements de fluides à seuil par la méthode SPH**. 2003.98 f. Tese (Doutorado em Ciências da Terra e do Universo) - Université Joseph Fourier-Grenoble I, Grenoble, 2003.
- LIN, C. X.; KO, S. Y. Effects of temperature and concentration on the steady shear properties of aqueous solutions of Carbopol and CMC. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, New York, v. 22, n. 2, p. 157-166, 1995.
- MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 453 p.
- MARINHO, J. R. D. M. **Macromoléculas e polímeros**. Barueri: Manole, 2005. p.55-117.
- MILLIPORE CORPORATION. Billerica, 2008. Disponível em: <<http://www.millipore.com/catalogue/module/c9210>>. Acesso em: 08 jun. 2008.
- MINUSSI, R. **Rompimento de barreiras: análise experimental e numérica na previsão de velocidades de propagação de frentes de material hiperconcentrado**. Ilha Solteira: UNESP/FE, 2007.
- MOFFAT, R. J. Describing the uncertainties in experimental results. **Experimental Thermal and Fluid Science**, New York, n. 1, p. 3-17, 1988.
- MØLLER, P. C.F.; MEWIS, J.; BONN, D. Yield stress and thixotropy: on the difficulty of measuring yield stresses in practice. **Soft Matter**, Les Ulis, n. 2, p. 274-283, 2006.
- MOORE, G.E. Cramming more components onto integrated circuits. **Electronics Magazine**, v. 38, n. 8, 1965.
- MORRISON, LR. *Glycerol*. In: ENCYCLOPEDIA of Chemical Technology. New York: Wiley, 1994. p. 921-932.
- NOH, W.F.; WOODWARD, W. F. Simple line interface calculation – SLIC. **Lecture Notes in Physics**, New York, v. 59, p. 330–340, 1976.

NOVEON™ - **The specialty chemicals innovator**©. flow and suspension properties. [S. l.: s. n.], 2002. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 11 jan. 2007.

NOVEON™ - **The specialty chemicals innovator**©. advances in polymer technology. Bulletin 11. [S. l.: s.n.], 2002. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 10 jan. 2008.

NOVEON™ - **The specialty chemicals innovator**©. dispersion techniques for carbopol® resins. [S. l.: s. n.], 1993. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 9 jan. 2007.

NOVEON™ - **The specialty chemicals innovator**©. applications technology for carbopol® resins and cosmetic formulations. [S. l.: s. n.], 1997. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 10 jan. 2007.

NOVEON™ - **The specialty chemicals innovator**©. thickening properties. Bulletin 11. [S. l.: s. n.], 2002. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 11 jan. 2007.

NSOM, B.; DEBIANE, K.; PIAU, J. M. Bed slope effect on dam break problem. **Journal of Hydraulic Research**, Delft, v. 38, n. 6, p. 459–464, 2000.

PARKER, B. J.; YOUNGS, D.L. **Two and three dimensional eulerian simulation of fluid flow with material interfaces**. Berkshire: Establishment, 1992. (Technical Report. UK Atomic Weapons).

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere, 1980. 197 p.

PATANKAR, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Taylor & Francis, 1980.

PERRY, H.; CHILTON, C. H. **Manual de engenharia química**. 5. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1973.

PIAU, J. M. Equations of plastic flow for yield stress fluid in a long domain – application to flow on an inclined plane. **Journal Rheology**, New York, n. 40, p. 711-723, 1996.

PIAU, J. M.; DEBIANE, K. Consistometers rheometry of power-law viscous fluids. **Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, v. 127, p. 213–224, 2005.

PIGNON, F.; MAGNIN, A.; PIAU, J. M. Thixotropic behavior of clay dispersions: Combinations of scattering and rheometric techniques. **Journal of Rheology**, New York, v. 42, n. 6, p. 1349–1373, 1998.

PILLIOD, J. E. J.; PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. **Journal of Computational Physics**, New York, v. 199, p. 465-502, 2004.

BIRD R.B, ARMSTRONG R.C, HASSAGER O. **Dynamics of Polymeric Fluids**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 1987.v. 1.

ROBERTS, G.P.; BARNES, H.A. New measurements of the flow-curves for carbopol dispersions without slip artefacts. **Rheological Acta**, Berlin, n. 40, p. 499–503, 2001.

SANTOS, F. S. **Estudo teórico:** experimental em via de determinação de uma lei de atrito em escoamento de fluidos hiperconcentrados. 2003. 116 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil, Área de Hidráulica) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira, 2003.

TOSETTO M.G; ANDRIETTA S.R. Cinética de produção de glicerol em processo de fermentação alcoólica utilizando diferentes matérias primas industriais. In: SIMPÓSIO NACIONAL DE FERMENTAÇÕES, 14., 2003, Florianópolis. **Anais...** Florianópolis: [s. n], 2003. 1 CD-ROM.

## Apêndice – A

---

### Reometria

---

#### A.1. Teoria Reométrica

A palavra reometria refere-se genericamente as técnicas experimentais usadas para determinar as propriedades físicas (reológicas) de materiais, ou seja, determinação de dados quantitativos e qualitativos das relações entre tensões de cisalhamento e taxas de deformação.

A escolha da técnica experimental adequada depende das propriedades reológicas a serem determinadas, estas podem ser desde uma viscosidade aparente estável para sistemas Newtonianos até propriedades viscoelásticas mais complexas. É sabido que, sob mesmas condições iniciais e de contorno, as características de um fluido dependem, unicamente, da composição do material (em escoamento). Este fato fez com que se desenvolvessem métodos empíricos (como, por exemplo, o “slump test”) nos quais os materiais são submetidos a forças e movimentos, reagindo de maneira diferente de acordo com sua composição. Assim, as diferentes reações apresentadas pelos materiais eram usadas para comparação entre eles. Essas são técnicas usualmente padronizadas em concreto fresco ou na indústria alimentícia, por exemplo. No entanto, no caso de escoamento de fluidos, esses métodos não nos dão informações relevantes, pois as condições desses escoamentos são complexas e estão longe de serem controláveis, assim os dados colhidos no teste (velocidade, altura da lâmina, etc.) retratam o comportamento do escoamento em um instante particular, sendo assim não confiáveis para a caracterização do fluido.

O objetivo da reometria é determinar as características dos fluidos a partir de medições, desenvolvidas em escoamentos simples e controlados. Nestes testes o fluido é tensionado de maneira simples, de tal forma que poucas componentes do seu tensor de tensões

sejam diferentes de zero. Assim, a partir das componentes da tensão cisalhante e da taxa de deformação, pode-se chegar a uma equação característica.

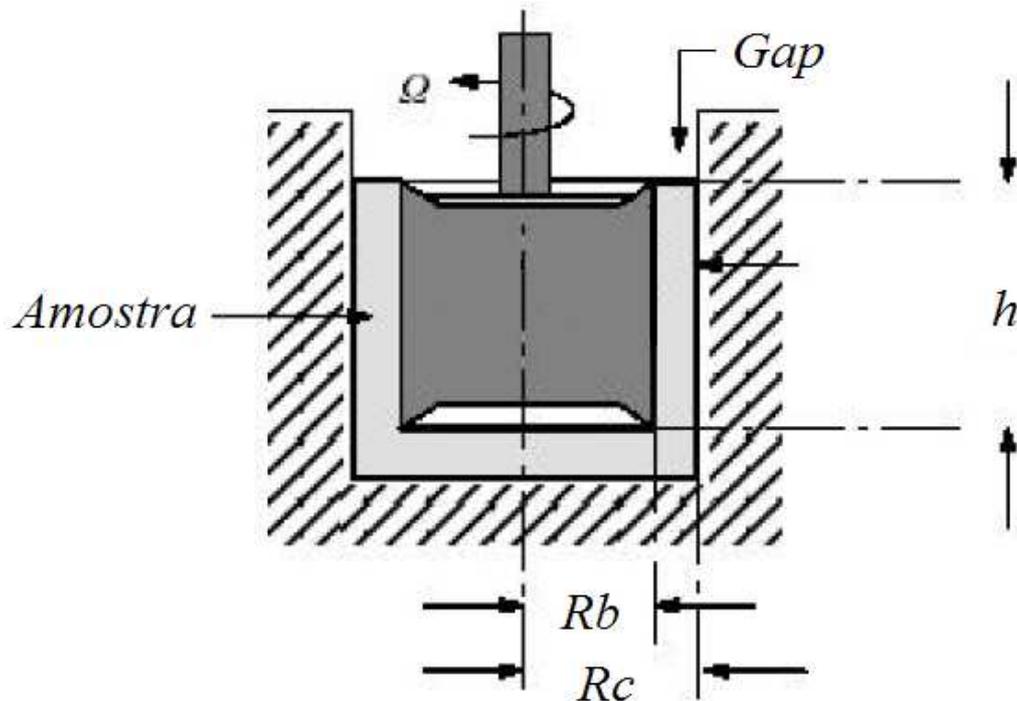
Na prática, a fim de se medir a viscosidade de um fluido, este deve ser confinado entre alguns dispositivos, com condições de borda fixas e determinadas (dentro de um tubo, entre placas paralelas, entre cilindros concêntricos, etc.). Esses aparelhos são definidos como reômetros.

A escolha da geometria mais apropriada para materiais complexos, como lama, é um ponto extremamente importante. Na prática, para qualquer fluido, é muito difícil encontrar a geometria que nos forneça uma taxa de deformação perfeitamente homogênea entre as placas (cones, cilindros, discos). Então, na maioria dos casos, têm-se uma taxa de deformação heterogênea e os dados reométricos convencionais nos mostram apenas as características médias do escoamento (torque, velocidade de rotação, pressão) nas bordas. Nesses casos são necessários alguns cálculos para a obtenção dos dados de tensão de cisalhamento x taxa de deformação a partir dos valores de torque x velocidade de rotação. Os métodos de cálculo são diferentes para cada geometria.

## **A.2. Reômetro rotacional de cilindros concêntricos**

O entendimento teórico dos instrumentos utilizados no âmbito experimental é de imprescindível importância para a obtenção de dados confiáveis de maneira legítima, aqui iremos explicar sobre o funcionamento de um equipamento dedicado a viscosimetria absoluta, o reômetro.

O reômetro de cilindros concêntricos é um instrumento que opera em uma faixa de taxa de cisalhamento moderada, fazendo deste uma boa escolha para coleta de dados utilizados em muitos cálculos de engenharia, Steffe (1996). Estes reômetros mantêm uma velocidade de rotação constante a certa taxa de cisalhamento e a tensão de cisalhamento é então obtida através da medida do torque no cilindro. Estes equipamentos são projetados para causar um cisalhamento no fluido localizado entre dois cilindros concêntricos, sendo que um gira e outro permanece estacionário permitindo-se obter curvas reológicas, Vidal (2000). A figura A.1 apresenta um esquema do reômetro de cilindro concêntrico:



**Figura A.1** Croqui esquemático do reômetro de cilindros concêntricos, Schramm (2000).

Sendo

$\Omega$  = Velocidade do “spindle” (rotor)

$R_b$  = Raio do rotor

$R_c$  = Raio do cilindro estacionário

$h$  = Altura do “spindle”

### A.3. Obtenção de $\tau$ e $\gamma$ em reômetros de cilindros concêntricos

Steffe (1996) explica de maneira concisa a base teórica de como a análise reométrica em cilindros concêntricos é deliberada.

No momento em que o rotor “spindle” gira a uma velocidade constante e o cilindro é estacionário (figura A.1), o instrumento mede o torque (M) requerido para manter a velocidade angular ( $\omega$ ) do rotor constante. O torque oposto vem da tensão de cisalhamento exercida sobre o rotor pelo fluido. O balanço de força é dado por:

$$M = 2\pi hr^2\sigma \quad (\text{A.1})$$

Sendo

$M$  = Torque

$r$  = Raio interno do cilindro

$h$  = Altura interna do cilindro

$\sigma$  = Tensão de cisalhamento no cilindro

Isolando-se a tensão de cisalhamento na equação A.1, observa-se que a mesma ( $\sigma$ ) diminui ao mover-se do rotor para o cilindro:

$$\sigma = f(r) = \frac{M}{2\pi hr^2} \quad (\text{A.2})$$

A tensão de cisalhamento para o rotor ( $r = R_b$ ) pode ser definida da seguinte forma, utilizando-se a equação A.2:

$$\sigma_b = \frac{M}{2\pi h R_b^2} \quad (\text{A.3})$$

Para determinar a taxa de cisalhamento, considera-se a velocidade linear de  $r$  em termos da velocidade angular ( $\omega$ ):

$$u = r\omega \quad (\text{A.4})$$

A derivada da velocidade em relação ao raio é:

$$\frac{du}{dr} = \frac{rd\omega}{dr} + \omega \quad (\text{A.5})$$

Sendo que a velocidade angular ( $\omega$ ) está relacionada com a rotação de todo conjunto, e esta não está relacionada com o cisalhamento interno, a equação A.5 pode ser descrita como:

$$\frac{du}{dr} = \frac{rd\omega}{dr} \quad (\text{A.6})$$

Usando a definição da taxa de cisalhamento,  $\gamma$  pode ser definido em termos da velocidade angular ( $\omega$ ):

$$\gamma = -\frac{du}{dr} = -\frac{rd\omega}{dr} \quad (\text{A.7})$$

O desenvolvimento da relação entre velocidade angular e tensão de cisalhamento é facilmente deliberada quando notamos que o torque é constante com o fluxo em regime de escoamento estacionário, sendo assim, uma expressão para  $r$  pode ser determinada a partir da equação A.2:

$$r = \left(\frac{M}{2\pi h\sigma}\right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{M}{2\pi h}\right)^{\frac{1}{2}} (\sigma)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{A.8})$$

Diferenciando a equação A.8 em relação à tensão de cisalhamento, tem-se que:

$$\frac{dr}{d\sigma} = \left(\frac{M}{2\pi h}\right)^{\frac{1}{2}} + \left(-\frac{1}{2}\right) (\sigma)^{-\frac{3}{2}} \quad (\text{A.9})$$

Substituindo o valor do torque definido na equação A.1, na equação A.8, obtêm-se:

$$\frac{dr}{d\sigma} = \left(\frac{M2\pi hr^2}{2\pi h}\right)^{\frac{1}{2}} + \left(-\frac{1}{2}\right) (\sigma)^{-\frac{3}{2}} = \frac{-r}{2\sigma} \quad (\text{A.10})$$

ou seja,

$$\frac{d}{r} = \frac{-d\tau}{2\sigma} \quad (\text{A.11})$$

Sendo a taxa de cisalhamento função da tensão de cisalhamento, tem-se:

$$\gamma = r \frac{d\omega}{dr} = f(\sigma) \quad (\text{A.12})$$

Resolvendo a equação A.12 pela diferenciação da velocidade angular:

$$d\omega = -\frac{dr}{r}f(\sigma) \quad (\text{A.13})$$

Sendo esta expressa em termos da derivada da tensão de cisalhamento ( $d\tau$ ) pela substituição da equação A.11 na equação A.13:

$$d\omega = \frac{1}{2}f(\sigma)\frac{d\tau}{\tau} \quad (\text{A.14})$$

Integrando a equação A.14, resulta numa expressão geral para velocidade angular do rotor ( $\Omega$ ), como uma função da tensão de cisalhamento na abertura:

$$\int_{\omega=\Omega}^{\omega=0} d\omega = \frac{1}{2} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} f(\sigma) \frac{d\sigma}{\sigma} \quad (\text{A.15})$$

Pode-se observar que os limites de integração são uma expressão da condição limite de não deslizamento adotado na derivação: a velocidade angular é zero no cilindro (superfície estacionária) e igual a  $\Omega$  no rotor (superfície em movimento). O lado esquerdo da equação A.15 é facilmente integrado, resultando na equação A.16, que relaciona a velocidade angular e a tensão de cisalhamento:

$$\Omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} f(\sigma) \frac{d\sigma}{\sigma} \quad (\text{A.16})$$

A solução da equação A.16 dependerá da função da tensão de cisalhamento, a qual é regida pelo comportamento reológico do fluido em questão. Pode ser resolvida diretamente se a relação funcional entre a tensão de cisalhamento e a taxa de cisalhamento for conhecida.

A equação A.15 reflete uma solução geral para o reômetro de cilindro concêntrico, porque os limites da integral podem ser facilmente mudados para o caso onde o rotor é estacionário e o cilindro rotaciona (o torque é igual em magnitude, mas oposto no sinal se medido no cilindro), ou mesmo em uma situação em que ambos o rotor e o cilindro estejam rotacionando.

#### A.4. Para fluidos Newtonianos

Por definição temos que a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de cisalhamento para um fluido newtoniano é:

$$\gamma = f(\sigma) = \frac{\sigma}{\mu} \quad (\text{A.17})$$

Substituindo a equação A.17 na expressão geral para a  $\Omega$  (equação A.16), resulta em:

$$\Omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} f(\sigma) \frac{d\sigma}{\sigma} = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} \left(\frac{\sigma}{\mu}\right) \frac{d\sigma}{\sigma} = -\frac{1}{2\mu} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} d\sigma \quad (\text{A.18})$$

Com isso delibera-se que:

$$\Omega = \frac{1}{2\mu} (\sigma_b - \sigma_c) \quad (\text{A.19})$$

Reescrevendo a equação A.19 em termos da geometria do sistema e da resposta do torque (M) do instrumento, temos:

$$\Omega = \frac{1}{2\mu} \left[ \frac{M}{2\pi h R_b^2} - \frac{M}{2\pi h R_c^2} \right] \quad (\text{A.20})$$

Esta expressão simplificada (equação A.20), a qual é chamada de equação de Margules, descreve o comportamento de um fluido newtoniano em um sistema de cilindro concêntrico.

Esta equação indica claramente que os dados experimentais para um fluido Newtoniano mostrarão que o torque pode ser diretamente proporcional a velocidade do rotor.

### A.5. Para fluidos de reologia complexa – Estudo de caso com Power Law

No caso de um fluido que apresenta um comportamento descrito pela lei da potência, a relação entre tensão de cisalhamento e taxa de cisalhamento é:

$$\gamma = f(\sigma) = \left(\frac{\sigma}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \quad (\text{A.21})$$

Substituindo a equação A.21 na equação A.20 temos:

$$\Omega = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} f(\sigma) \frac{d\sigma}{\sigma} = -\frac{1}{2} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} \left(\frac{\sigma}{K}\right)^{\frac{1}{n}} \frac{d\sigma}{\sigma} = -\frac{1}{2\mu} \int_{\sigma_b}^{\sigma_c} d\sigma \quad (\text{A.22})$$

Integrando, temos:

$$\Omega = \frac{1}{2K^{\frac{1}{n}}} \left( (\sigma_b)^{\frac{1}{n}} - (\sigma_c)^{\frac{1}{n}} \right) \quad (\text{A.23})$$

Uma expressão alternativa para fluidos que seguem a lei da potência é obtida utilizando-se da equação A.2:

$$\Omega = \frac{1}{2K^{\frac{1}{n}}} \left[ \left( \frac{M}{2\pi h R_b^2} \right)^{\frac{1}{n}} - \left( \frac{M}{2\pi h R_c^2} \right)^{\frac{1}{n}} \right] \quad (\text{A.24})$$

A equação A.24 mostra que o torque não é diretamente proporcional a velocidade do rotor, devido este ser fortemente influenciado pelo índice de comportamento do fluido.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)