

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**ROMPIMENTO DE BARREIRAS – ANÁLISE  
EXPERIMENTAL E NUMÉRICA NA PREVISÃO DE  
VELOCIDADES DE PROPAGAÇÃO DE FRENTES  
DE MATERIAL HIPERCONCENTRADO**

**Roberta Brondani Minussi**

**Orientador:** Prof. Dr. 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

**CERTIFICADO DE APROVAÇÃO**

TÍTULO: *ROMPIMENTO DE BARREIRAS – ANÁLISE EXPERIMENTAL E NUMÉRICA  
NA PREVISÃO DE VELOCIDADES DE PROPAGAÇÃO DE FRENTE DE  
MATERIAL HIPERCONCENTRADO*

**AUTOR: ROBERTA BRONDANI MINUSSI**

**ORIENTADOR: Prof. Dr. GERALDO DE FREITAS MACIEL**

**DATA DA REALIZAÇÃO: 04 DE DEZEMBRO DE 2007**

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de MESTRE em ENGENHARIA MECÂNICA pela Comissão Examinadora:

  
**Prof. Dr. GERALDO DE FREITAS MACIEL**

Departamento de Engenharia Civil/ Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

  
**Prof. Dr. SÉRGIO SAID MANSUR**

Departamento de Engenharia Mecânica / Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

  
**Prof. Dr. JEAN PAUL VILA**

Génie Mathématique / Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, França

---

*“Todo sacrificio vale a pena quando a alma não é pequena”*

*Fernando Pessoa (ele mesmo)*

---

---

## **DEDICATÓRIA**

*Dedico este trabalho à minha família, em especial aos meus pais, ao meu irmão, ao Marcus e, àqueles que nos deixaram, mas que estão juntos de Deus (vô Vitório, vô José, vó Almerinda, Nadine, tio Moacir e aos meus padrinhos Sidney e Euclides).*

---

---

## AGRADECIMENTOS

*Primeiramente, agradeço aos meus pais por todo carinho e amor incondicional.*

*Agradeço ao meu noivo por estar sempre presente, mesmo longe, me dando apoio, me ajudando e, principalmente, por ter me dado muito, muito amor.*

*Ao meu irmão, por ser muito mais um amigo do que irmão.*

*Aos meus sogros por me tratarem como uma filha.*

*A todos os outros membros da minha família, pelo amor.*

*Aos meus amigos, pelo carinho.*

*Ao professor Geraldo, pelos ensinamentos e pelo crédito depositado em mim.*

*Ao Joel, Hamilton, André Nonato, Daniel, Gustavo e ao pessoal da PUC – Rio de Janeiro, pela ajuda.*

*Aos professores Dib e Tsunao por cederem o laboratório de saneamento.*

*Ao professores da área de Ciências Térmicas pelos ensinamentos e por sempre estarem dispostos a tirar minhas dúvidas.*

*Ao CNPq – CT-Hidro pela bolsa de mestrado e a FAPESP por equipar o laboratório de reologia.*

*Aos funcionários da UNESP que limpavam as salas, arrumavam os computadores e faziam um cafezinho muito gostoso.*

*E, a Deus, razão de tudo, que criou as árvores, uma delas em especial, que ficava na frente da porta da minha sala e onde repousavam sabiás que me encantavam com o seu canto... Que me deu saúde e uma família maravilhosa. Que criou também um céu azul, as flores, enfim, tudo que é belo e me faz amar a vida!*

---

---

# **ROMPIMENTO DE BARREIRAS – ANÁLISE EXPERIMENTAL E NUMÉRICA NA PREVISÃO DE VELOCIDADES DE PROPAGAÇÃO DE FRENTES DE MATERIAL HIPERCONCENTRADO**

## **RESUMO**

Denominam-se problemas tipo rompimento de barreira os fenômenos nos quais um fluido é liberado de maneira abrupta. Quando o fluido apresenta natureza hiperconcentrada, a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação pode se tornar não-linear, passando a apresentar reologia não-Newtoniana. Problemas deste tipo podem ser encontrados em muitos fenômenos tanto na natureza quanto em processos industriais. O estudo de tal problema é, geralmente, conduzido usando simplificações, como a aproximação de águas rasas e a separação do escoamento em regimes predominantemente inerciais ou viscosos. O presente trabalho é composto de duas partes, uma experimental e outra, numérica. No campo experimental, duas soluções controladas são usadas: soluções aquosas de açúcar e de Carbopol 940, esta última com várias concentrações volumétricas. O aparato experimental consiste em um canal retangular de acrílico, contendo uma comporta, a montante da qual, o fluido é retido e, pela ruptura (levantamento da comporta), começa a escoar. O escoamento é estudado através de técnicas avançadas de filmagem. No campo numérico, são realizadas simulações usando o programa CFX, no qual é usado um método de rastreamento de interface, o VOF e sem o emprego das simplificações citadas. Os resultados experimentais são comparados com os numéricos e com resultados da literatura que usam tais simplificações. Na comparação a aproximação de águas rasas, apesar de descrever bem a forma da interface, se distancia dos valores reais da posição da frente de onda.

## **PALAVRAS-CHAVE:**

Reologia, Herschel – Bulkley, Carbopol, Rompimento de Barreiras, *Volume of Fluid* (VOF).

---

---

## **DAM BREAK PROBLEMS – EXPERIMENTAL AND NUMERICAL STUDY TO PREVIEW THE FRONT VELOCITIES OF HIPERCONCENTRATED MATERIALS**

### **ABSTRACT**

The dam break problem describes a phenomenon in which there is an abrupt release of fluid. When the fluid is hiperconcentrated, the relation between the shear stress and the strain rate can become non-linear, and so present a non-Newtonian rheology. The non-Newtonian dam break problem may be found in many phenomena in nature and industrial process. The study of such a problem is, generally, conducted using simplified hypothesis such as the shallow water approximation and the separation of the flow in inertial and viscous dominated regimes. The present work is composed of two parts, one experimental and other, numerical. In the experimental field, two controlled solutions were used: water solutions of sugar and of Carbopol 940, the last one with a wide range of volume concentrations. These fluids have, respectively, Newtonian and non-Newtonian rheologies. The experimental setup consists of an acrylic rectangular channel, which has a dam and upstream of that the fluid is retained and, by the rupture, it begins to flow. The flow is studied by using advanced filming techniques. In the numerical field, simulations are conducted using the CFX software, which uses an interface tracking method, the VOF, and without the shallow water approximation and the division of the flow. So the experimental, numerical and literature results, that uses such simplifications, are compared and it is showed that the shallow water approximation, however describes very well the shape of the surface, is not accurate in calculate the wave front position.

### **KEY-WORDS:**

Rheology, Herschel – Bulkley, Carbopol, Dam Break, Volume of Fluid (VOF).

---

---

# SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	17
1.1. Motivação	17
1.2. Tratamento do problema	20
1.3. Objetivos e escopo do trabalho	21
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1. Introdução à reologia	22
2.1.1. Definições preliminares	23
2.1.2. Modelos reológicos	30
2.1.3. Propriedades reológicas do Carbopol 940	33
2.2. Rompimento de barreiras	37
2.2.1. Rompimento de barreiras com fluidos invíscidos ou Newtonianos	39
2.2.1. Rompimento de barreiras com fluidos não-Newtonianos	42
2.3. Modelo numérico	46
2.3.1. Problemas multifásicos	46
2.3.2. O método VOF e a modelagem física de interfaces	47
3. MODELO EXPERIMENTAL	54
3.1. Aparato experimental e procedimentos	54
3.2. Preparo das soluções de Carbopol	57
3.3. Determinação de incertezas experimentais	59
4. MODELAGEM NUMÉRICA	66
4.1. Equações	66
4.2. Tratamento do problema multifásico	67
4.3. Esquemas de interpolação	67
4.4. Pré-processamento	68
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	73
5.1. Caracterização reológica do Carbopol 940	73
5.2. Reometria dos fluidos utilizados no canal	81
5.3. Ruptura de barreira	83
6. CONCLUSÃO	103
6.1. Sugestões para trabalhos futuros	104

---

---

REFERÊNCIAS	105
APÊNDICE	112
A. OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT	112
B. MODELO ANALÍTICO	116
B.1. Regime predominantemente inercial	120
B.2. Regime predominantemente viscoso	121
C. CÓDIGO PRÓPRIO	122
C.1. Algoritmo de reconstrução	122
C.2. Algoritmo de propagação	125
C.3. Solução das equações	125
C.4. Resultados	126

---

---

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1. Exemplos de escoamentos que podem ser modelados como rompimento de barreira.	19
Figura 2.1. Curva típica de viscosidade ( $\eta$ ) em função da taxa de deformação para um polímero em solução aquosa.	25
Figura 2.2. Relações típicas entre tensão e taxa de deformação de fluidos mostradas em ensaios de cisalhamento simples.	26
Figura 2.3. Variação da viscosidade de uma amostra (pasta MC 20 – cimento fino) em função da taxa de deformação.	26
Figura 2.4. Variação da viscosidade em função da taxa de deformação para um fluido hiperconcentrado do tipo Herschel-Bulkley.	27
Figura 2.5. Exemplo de material tixotrópico.	28
Figura 2.6. Efeito da temperatura sobre dois tipos de soluções aquosas de Carbopol.	34
Figura 2.7. Efeito do pH sobre três tipos de soluções aquosas de Carbopol 0.2%.	35
Figura 2.8. Curva reométrica de uma amostra de Carbopol 940, com reômetro sem dispositivo anti-deslizamento.	36
Figura 2.9. Desenho esquemático do problema de rompimento de barreira.	39
Figura 2.10. Variáveis utilizadas por Nsom <i>et al.</i> (2000).	41
Figura 2.11. Aproximações para uma interface real.	49
Figura 2.12. Bloco 3x3 utilizado para calcular as candidatas a interface na célula $(i,j)$ .	50
Figura 2.13. Discretização das velocidades em uma célula $(i,j)$ .	51
Figura 2.14. Desenho esquemático para entendimento do método de advecção da interface.	52
Figura 3.1. Aparelhagem utilizada para os ensaios de reometria.	54
Figura 3.2. Dimensões (em mm) do canaleta	55
Figura 3.3. Fotos do canaleta.	56
Figura 3.4. Aparelhagem utilizada nas filmagens.	57
Figura 3.5. Planilha do Excel utilizada para obtenção das massas de água, NaOH e de Carbopol 940.	58
Figura 3.6. Ambiente de escolha do tipo de ensaio no <i>software</i> RHEO 2000.	59
Figura 3.7. Ensaio típico utilizado para observação de tixotropia.	60
Figura 3.8. Resultado da regressão de um ensaio de amostra de Carbopol 940	

---

---

sem filtragem dos primeiros pontos.	61
Figura 3.9. Curvas reométricas de 10 amostras de Carbopol 940 em conjunto com a barra de erros com variação de 7% utilizadas para determinação das incertezas experimentais.	64
Figura 4.1. Desenho esquemático da malha utilizada nas simulações numéricas.	68
Figura 4.2. Ambiente de pré-processamento.	69
Figura 4.3. Ambiente de escolha das condições iniciais.	71
Figura 4.4. Ambiente de escolha de novas expressões.	72
Figura 5.1. Comparação dos comportamentos reológicos de 6 amostras de Carbopol com diferentes concentrações a uma temperatura de 25 °C.	76
Figura 5.2. Comparação dos comportamentos reológicos de 6 amostras de Carbopol com diferentes concentrações a uma temperatura de 35 °C.	76
Figura 5.3. Influência da temperatura nas curvas reométricas.	77
Figura 5.4. Comparação de curva obtida com o Carbopol 940 com outra obtida da literatura para o Carbopol 980.	78
Figura 5.5. Influência do pH nas curvas reométricas para a concentração de 0.115% e temperatura de 30 °C.	80
Figura 5.6. Influência do pH nas curvas reométricas para a concentração de 0.135% e temperatura de 30 °C.	80
Figura 5.7. Ensaio de tixotropia com a barra de erros do carregamento.	81
Figura 5.8. Comparação numérico-experimental do ensaio 1 com altura inicial de 10 cm.	83 - 85
Figura 5.9. Comparação numérico-experimental do ensaio 5 com altura inicial de 10 cm.	86 - 88
Figura 5.10. Comparação do alcance horizontal do ensaio 1.	89
Figura 5.11. Comparação do alcance horizontal do ensaio 2.	90
Figura 5.12. Comparação do alcance horizontal do ensaio 3.	91
Figura 5.13. Comparação do alcance horizontal do ensaio 4.	92
Figura 5.14. Comparação do alcance horizontal do ensaio 5.	93
Figura 5.15. Comparação dos instantes iniciais do alcance horizontal do ensaio 5 com altura inicial de 13 cm.	94
Figura 5.16. Comparação do alcance horizontal do ensaio 6.	95
Figura 5.17. Comparação do alcance horizontal do ensaio 6 com altura inicial	

---

---

de 7 cm.	96
Figura 5.18. Comparação da velocidade de frente do ensaio 5.	96
Figura 5.19. Resultados numéricos da taxa de deformação para o ensaio 2 com altura inicial de 13 cm.	98
Figura 5.20. Resultados numéricos da velocidade para o ensaio 2 com altura inicial de 13 cm.	99
Figura 5.21. Resultados numéricos da pressão para o ensaio 2 com altura inicial de 13 cm.	100
Figura 5.22. Comparação do VOF com o SPH do alcance da onda.	101
Figura 5.23. Evolução da frente de onda para os primeiros instantes do ensaio 4 com altura inicial de 10 cm.	102
Figura B.1. Sistema de coordenadas usado no modelo analítico.	116
Figura C.1. Configurações possíveis das retas dentro das células.	122
Figura C.2. Posição do fluido escuro como função do sinal das curvaturas.	123
Figura C.3. Reconstrução de uma superfície circular pelo algoritmo ELVIRA.	126
Figura C.4. Reconstrução de uma superfície circular com recorte pelo algoritmo ELVIRA.	127
Figura C.5. Teste do algoritmo de advecção de interface circular em um campo de velocidades prescrito.	128

---

---

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1. Parâmetros de Herschel-Bulkley encontrados para soluções aquosas neutralizadas de Carbopol 940.	35
Tabela 2.2. Parâmetros de Herschel-Bulkley encontrados para soluções aquosas neutralizadas de Carbopol 980, à temperatura de 25° C.	36
Tabela 3.1. Faixas de operação dos <i>spindles</i> .	60
Tabela 3.2. Parâmetros de Herschel-Bulkley e incertezas-padrão.	63
Tabela 3.3. Valores da viscosidade de mistura de água com açúcar.	65
Tabela 4.1. Condições de contorno.	69
Tabela 4.2. Condições iniciais.	70
Tabela 5.1. Resumo dos ensaios de caracterização reométrica.	73
Tabela 5.2. Parâmetros de Herschel-Bulkley obtidos para 6 amostras de Carbopol com concentrações diferentes e duas temperaturas.	74 - 75
Tabela 5.3. Parâmetros de Herschel-Bulkley obtidos para 6 amostras de Carbopol com variação de pH e concentração, à temperatura de $30 \pm 0.1$ °C.	79
Tabela 5.4. Características dos ensaios e resultados reométricos de amostras dos fluidos utilizados no canal.	82
Tabela 5.5. Comparação do alcance final dos ensaios.	94

---

---

# LISTA DE SÍMBOLOS

## SÍMBOLOS ALFABÉTICOS

$a$ : constante; curvatura (equação da reta)

$\tilde{a}$ : candidata a curvatura

$a(t)$ : posição da frente de onda

$b$ : coeficiente linear (equação da reta)

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

$c_{ijlm}$ : tensor viscosidade Newtoniana

$C$ : concentração

$C_f$ : coeficiente de atrito de fundo

$E_{i,j}^1$ : erro entre as frações volumétricas real e calculada

$\vec{f}$ : vetor forças de corpo

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

$h$ : distância do fundo até a superfície livre

$h_0$ : altura inicial do reservatório

$k$ : índice de consistência

$K$ : coeficiente de Chézy; fator de Student

$l_0$ : 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 Odroyd

$p$ : pressão termodinâmica

$p_{ini}$ : campo inicial de pressão

$Re$ : número de Reynolds

$s$ : desvio - padrão

$\vec{S}$ : termo fonte (vetorial)

$t$ : tempo

---

---

$T$ : temperatura; constante de adimensionalização do tempo

$\bar{\bar{T}}$ ,  $T_{ij}$ : 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

$VF_{i,j}$ : fração volumétrica da célula  $(i,j)$

$\tilde{VF}$ : candidata a  $VF$

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

$x_i$ : componente de direção

## SÍMBOLOS GREGOS

$\alpha$ : valor definido como 2 vezes a raiz quadrada do invariante do tensor taxa de deformação multiplicado por  $-1$ .

$\beta$ : constante

$\bar{\bar{\gamma}}$ ,  $\gamma_{ij}$ : tensor taxa de deformação

$\dot{\gamma}_{II}$ : segundo invariante do tensor taxa de deformação

$\bar{\bar{\delta}}$ ,  $\delta_{ij}$ : matriz identidade

$\Delta t$ : passo de tempo

$\Delta x_i$ : tamanho da malha vetor unitário normal à interface

$\eta$ : viscosidade aparente

$\theta$ : inclinação do canal

$\lambda$ : viscosidade expansional; grau de gelificação

$\mu$ : viscosidade Newtoniana, ou dinâmica (escalar)

$\mu_{dif}$ : viscosidade diferencial

$\rho$ : massa específica

$\bar{\bar{\tau}}$ ,  $\tau_{ij}$ : tensor tensão viscoso (ou de cisalhamento)

$\tau_c$ : tensão crítica

---

---

## **SOBRE-ESCRITOS**

T : matriz transposta

$n$ : passo de tempo

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

$ij$ : componente de uma matriz

' : utilizado para definir variáveis adimensionais

\*: utilizado para definir variáveis adimensionais; separação no método fracionado de advecção

~: utilizado para definir variáveis adimensionais; utilizado para definir valores de candidatos a parâmetros na modelagem numérica

^: utilizado para definir variáveis adimensionais

-: valor médio

## **SUB-ESCRITOS**

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; frente da onda; fases

---

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 MOTIVAÇÃO

Quando uma barragem ou barreira se rompe, o líquido represado é liberado de maneira abrupta. Nos instantes subseqüentes, a adição de matéria sólida, proveniente do leito, modifica as características físico-químicas deste líquido, alterando o seu comportamento e o material passa a ter características não-Newtonianas. Geralmente, tais escoamentos são caracterizados pelas elevadas velocidades e, em muitos casos, é possível haver destruição de infra-estrutura, acrescido de danos ao meio ambiente e, até mesmo, perda de vidas humanas, decorrentes do alagamento e de outros efeitos como a erosão e a deposição de material. Existe ainda o risco do efeito cascata, cujo escoamento gerado pela ruptura de uma barreira provocaria o rompimento de outras a jusante.

A ciência que estuda o comportamento de fluidos complexos, como é o caso de lamas produzidas pela mistura de água e solo, é chamada de reologia. Por exemplo, em regiões montanhosas, as chuvas, por vezes, geram fluxos com incorporação de material sólido. A natureza do material produzido é distinguida pela concentração dos materiais finos e dos agregados de várias granulometrias. Estes fluxos, inicialmente, apresentam características Newtonianas que, por incorporação de material, geram fluxos hiperconcentrados, com natureza relativamente homogênea, mas já apresentando características não-lineares, chegando às lavas torrenciais que, além da natureza hiperconcentrada, apresentam ainda sedimentos grossos incorporados.

As lavas torrenciais são caracterizadas como escoamentos de detritos (*debris flows*). O comportamento reológico destes materiais difere em muito das lamas, que não apresentam grandes quantidades de sólidos maiores. Segundo Coussot (1997), a lama pode ser considerada, de uma forma geral, como uma suspensão contendo uma grande fração de partículas coloidais (principalmente argila), o que forma um material relativamente homogêneo. O escoamento de lama pode ser considerado como uma subclasse do escoamento de detritos. O trabalho de Coussot e Meunier (1996) apresenta uma tentativa de classificação dos escoamentos comuns na natureza envolvendo a mistura água - solo.

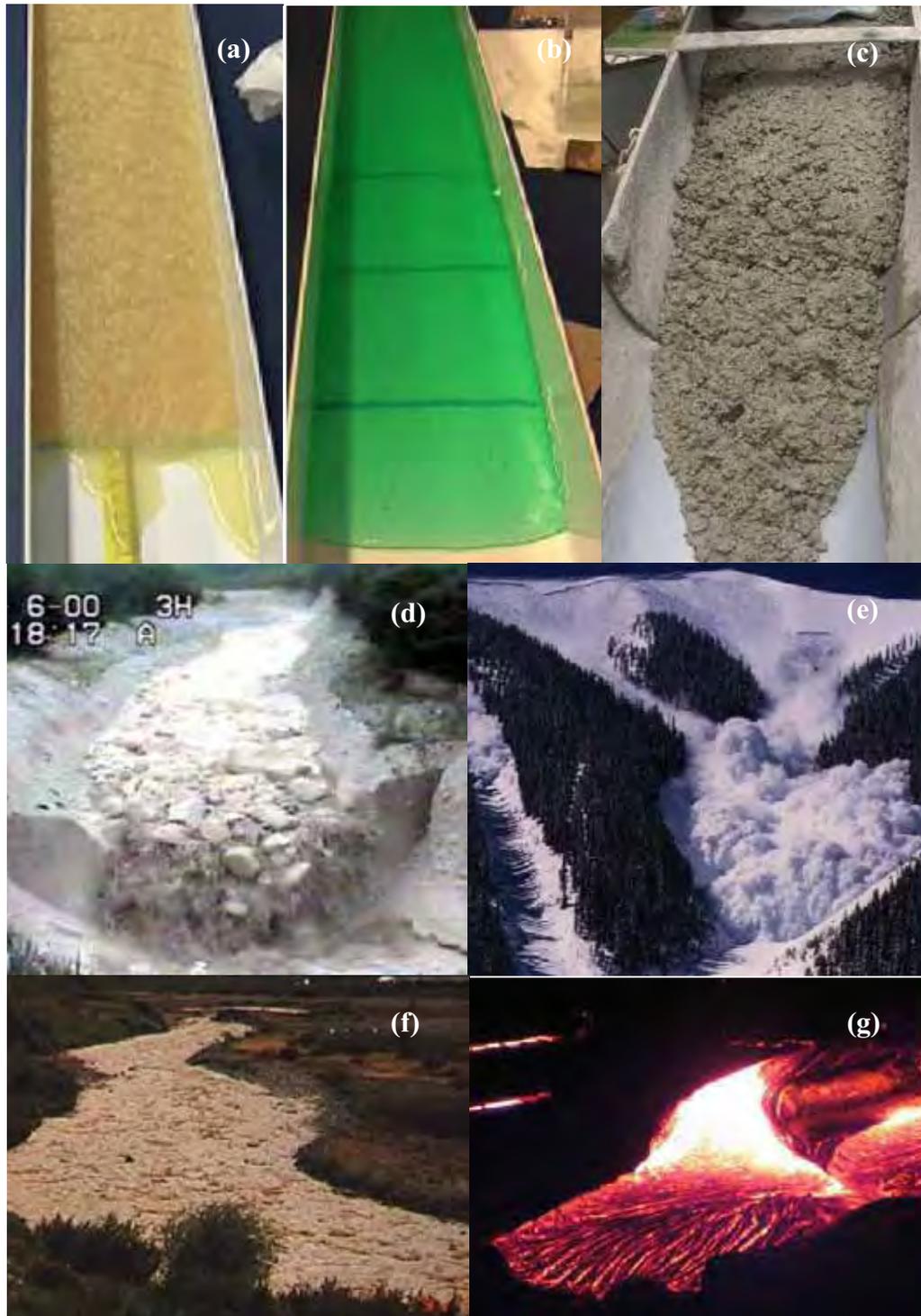
O problema tipo rompimento de barreira é muito comumente associado a barragens de rejeitos. Nestas, material proveniente de processos industriais e de atividades urbanas em

---

geral, são armazenados. Por vezes, estas barreiras se rompem, liberando o material e gerando catástrofes. Uma gama muito grande de eventos associados a tais fenômenos pode ser encontrada nos jornais, sendo muito comum, além do óbvio prejuízo material e ecológico, a perda de centenas de vidas humanas.

Portanto, fica claro que o problema tem aplicabilidade direta em muitos fenômenos tanto os associados com atividades humanas como aqueles ligados diretamente às atividades industriais.

Na Figura 1.1 ilustram-se alguns exemplos de escoamentos de fluidos não-Newtonianos encontrados na natureza e indústria.



**Figura 1.1.** Exemplos de escoamentos que podem ser modelados como rompimento de barreira. (a) escoamento de purê de maçã; (b) escoamento de Carbopol; (c) escoamento de concreto fresco; (d) escoamento de detritos; (e) avalanches; (f) escoamento de lama e (g) escoamentos de lava.

**Fontes:** Referências [64].

No estudo apresentado nesta dissertação, a barreira é representada por uma comporta, que retém material hiperconcentrado em um canal de laboratório, não havendo, portanto, incorporação de material sólido após o rompimento.

O tratamento assim determinado modela com frequência problemas encontrados tanto na natureza como na indústria, principalmente para o dimensionamento de certas estruturas de plantas industriais, como na indústria alimentícia, de tintas, de concretos auto-adensáveis, etc.

O assunto é bem explorado pela literatura, porém, quando o material represado apresenta características não-Newtonianas, estes escoamentos devem ser mais rigorosamente estudados e os modelos matemáticos melhor validados.

De fato, os problemas tipo rompimento de barreira envolvendo qualquer tipo de fluido são geralmente estudados utilizando algumas hipóteses simplificadoras, como o uso da aproximação de águas rasas. Não há na literatura estudos comparativos entre resultados teóricos com e sem tais simplificações, daí o caráter inovador do trabalho.

## 1.2 TRATAMENTO DO PROBLEMA

O estudo do problema proposto é conduzido, nesta pesquisa, usando ferramentas numéricas e experimentais. No campo experimental, é usado um fluido controlado (fluido tipo) com características reológicas semelhantes às das lamelas contendo argila encontradas nos pés das barragens. Trata-se do Carbopol 940, que, além de suas características reológicas, apresenta outras qualidades como a transparência e facilidade de visualização. Este fluido é devidamente estudado para determinação de suas características reométricas. Após este controle, o fluido é armazenado em um canal e liberado através da subida de uma comporta com acionamento automático. Seu escoamento é estudado usando-se uma câmera digital JVC profissional. Além do estudo com o Carbopol, conduzem-se também ensaios com fluido Newtoniano utilizando-se material com viscosidade alta (mistura de água com açúcar).

A partir da cinematografia dos eventos, os resultados experimentais são analisados e comparados com simulações numéricas. Essas simulações são conduzidas utilizando-se um *software* comercial, o CFX. Neste, utiliza-se um método de rastreamento de interface, o VOF (*volume of fluid*).

Além do estudo numérico-experimental do rompimento de barreira, são conduzidos, paralelamente, ensaios de reometria para avaliação da sensibilidade do Carbopol a diversos parâmetros, a fim de proporcionar resultados consistentes.

---

### **1.3 OBJETIVOS E ESCOPO DO TRABALHO**

Esta dissertação tem como objetivo estudar o escoamento de fluidos Newtonianos e não-Newtonianos, resultantes de ruptura instantânea de barreira, através de técnicas numéricas e experimentais. Encontram-se, na literatura, muitos trabalhos utilizando uma modelagem com base na hipótese de águas rasas bem como com a separação do escoamento em fases com forças viscosas ou inerciais dominantes. O principal objetivo deste trabalho é o estudo do problema utilizando-se equações completas, sem esses simplificadores comparando-os com resultados experimentais. Tal abordagem visa um estudo mais detalhado do problema, além da confrontação com os resultados da literatura. O trabalho não visa estudar a influência dos parâmetros reométricos e geométricos no escoamento, mas notadamente, reproduzir a evolução espaço-temporal da frente hiperconcentrada.

---

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste Capítulo serão abordados, inicialmente, alguns aspectos importantes do comportamento reológico de fluidos complexos, dedicando atenção especial à reologia do Carbol 940. Posteriormente, a teoria que descreve os escoamentos envolvidos no problema tipo rompimento de barreira com fluidos ideais, Newtonianos e não-Newtonianos é mostrada. No final do Capítulo é apresentado o método VOF (*volume of fluid*), como sendo a técnica numérica utilizada para a solução da evolução da interface (superfície livre).

### 2.1 INTRODUÇÃO À REOLOGIA

Pode-se dizer que a reologia é a ciência que estuda as respostas dos materiais à aplicação de uma força. Ou ainda, segundo Boger e Walters (1993), pode ser entendida como a ciência que estuda os escoamentos e as deformações.

Assim, a reologia não é exclusiva dos sistemas fluidos sendo muito mais amplo, podendo estar presente até mesmo no estudo da conformação mecânica. Na verdade, a reologia aborda o comportamento dos materiais entre os limites idealizados de fluidos e sólidos perfeitos. Portanto, todos os tipos de materiais são objetos de estudo da reologia, mas o interesse principal está no comportamento dinâmico de fluidos complexos, nos quais a relação entre a tensão e a taxa de deformação não é linear.

Doraiswamy (2002) aponta a evolução dos modelos disponíveis 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, segundo Doraiswamy (2002), com o advento 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, surgiram 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.

### 2.1.1 Definições Preliminares

- Equações do movimento

São apresentadas aqui as equações que descrevem o movimento do fluido:

- Equação da conservação da massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (2.1)$$

No caso do escoamento ser considerado isocórico, esta se reduz a:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.2)$$

- Equação da quantidade de movimento linear:

A equação da quantidade de movimento linear advém da equação de Cauchy (Aris, 1962). Na forma vetorial é dada por:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{f} + \nabla \cdot \bar{\bar{T}} \quad (2.3)$$

O tensor  $\bar{\bar{T}}$  é dado por:

$$\bar{\bar{T}} = -p\bar{\bar{\delta}} + \bar{\bar{\tau}} \quad (2.4)$$

em que:

$p$  é a pressão termodinâmica;

$\bar{\bar{\delta}}$  é a matriz identidade e

$\bar{\bar{\tau}}$  é o tensor tensão viscoso (ou de cisalhamento).

Na equação (2.4), o tensor tensão viscoso deverá ter seu comportamento descrito. É aqui que entra a reologia, através da modelagem de uma equação constitutiva.

- Fluidos Newtonianos

Quando se estuda a relação entre a tensão e a taxa de deformação, há dois tipos de fluidos, os Newtonianos, que apresentam uma relação linear, e os não-Newtonianos que são

representados por vários modelos. A relação mais simples entre tensão e taxa de deformação é a dos fluidos Newtonianos:

$$\tau_{ij} = c_{ijlm} \frac{\partial u_l}{\partial x_m} \quad (2.5)$$

em que  $c_{ijlm}$  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 é isotrópico, a viscosidade pode ser escrita como (Chiang, 2002):

$$c_{ijlm} = \lambda \delta_{ij} \delta_{lm} + \mu (\delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jl}) \quad (2.6)$$

em que  $\mu$  e  $\lambda$  são constantes.

Assim, reduz-se a apenas duas incógnitas e o tensor tensão viscoso torna-se:

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

A constante  $\lambda$  está associada à expansão volumétrica e, desconsiderando-a, tem-se:

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

em que  $\dot{\gamma} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)$  é o tensor taxa de deformação.

De agora em diante o coeficiente  $\mu$  será adotado como a viscosidade Newtoniana (absoluta ou dinâmica). Observa-se que esta pode variar conforme outras propriedades, porém, deixou de ser um tensor de quarta ordem para ser apenas um escalar.

Finalmente, por (2.3), (2.4) e (2.7), têm-se as famosas equações de Navier-Stokes:

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

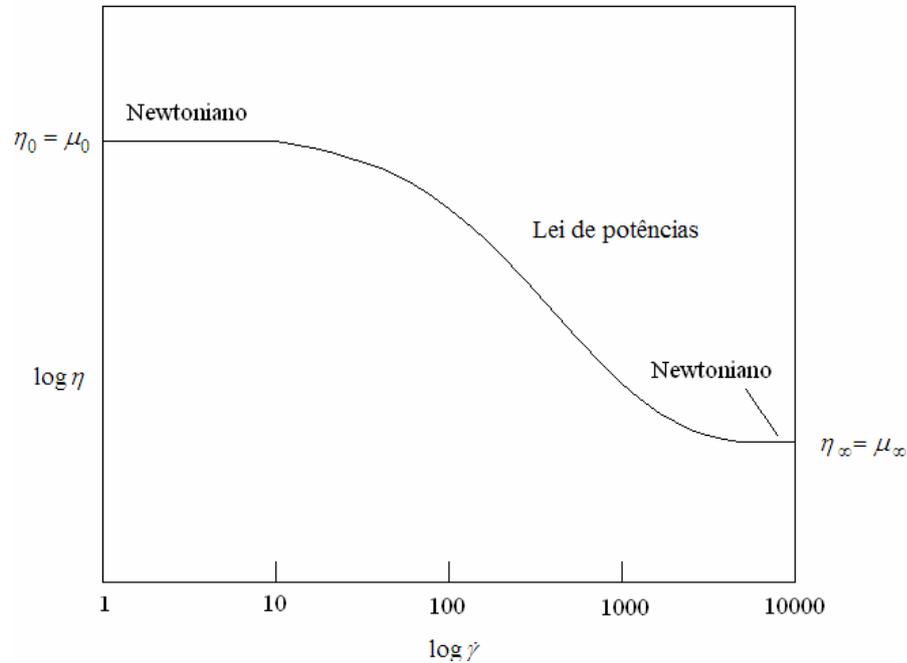
Que para escoamentos isocóricos torna-se:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{g} - \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} \quad (2.10)$$

- Fluidos não-Newtonianos

Óleo, água, mel, etc., possuem um comportamento que, na prática, pode ser definido como Newtoniano. Porém, o interesse principal da reologia é o estudo dos fluidos em que a relação entre tensão e taxa de deformação é não-linear. Por exemplo, para os polímeros,

geralmente, o comportamento pode ser considerado Newtoniano apenas para taxas de deformação muito pequenas ( $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ ) ou muito altas, como mostra a Figura 2.1.



**Figura 2.1. Curva típica de viscosidade aparente ( $\eta$ ) em função da taxa de deformação para um polímero em solução aquosa. Adaptado de Bretas e D'Ávila (2000).**

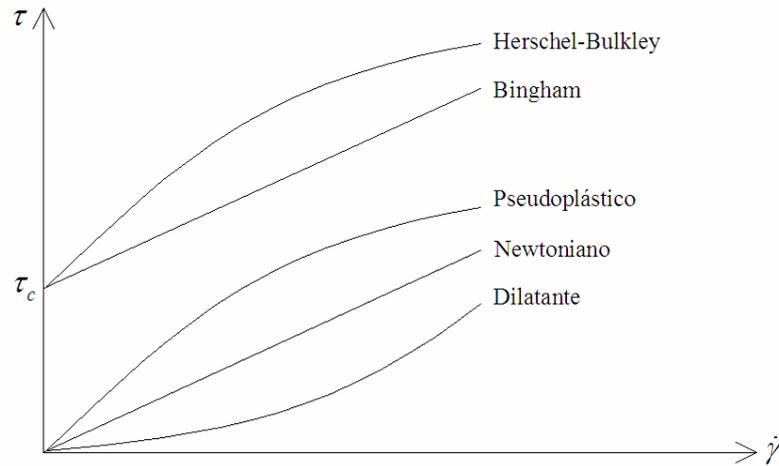
Assim, nas regiões onde o fluido não apresenta comportamento Newtoniano, alguns modelos estão disponíveis na literatura. Estes permitem relacionar a tensão com a taxa de deformação. Logo, a viscosidade (também chamada viscosidade aparente) será dada como  $\eta(\dot{\gamma})$  e, em ensaios de cisalhamento simples é definida como:

$$\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \tag{2.11}$$

em que  $\tau$  é o valor absoluto da tensão de cisalhamento e  $\dot{\gamma}$  é o valor absoluto da taxa de

deformação, ou seja  $\dot{\gamma}_{ij} = \dot{\gamma} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ .

Alguns modelos reológicos típicos são mostrados na Figura 2.2.



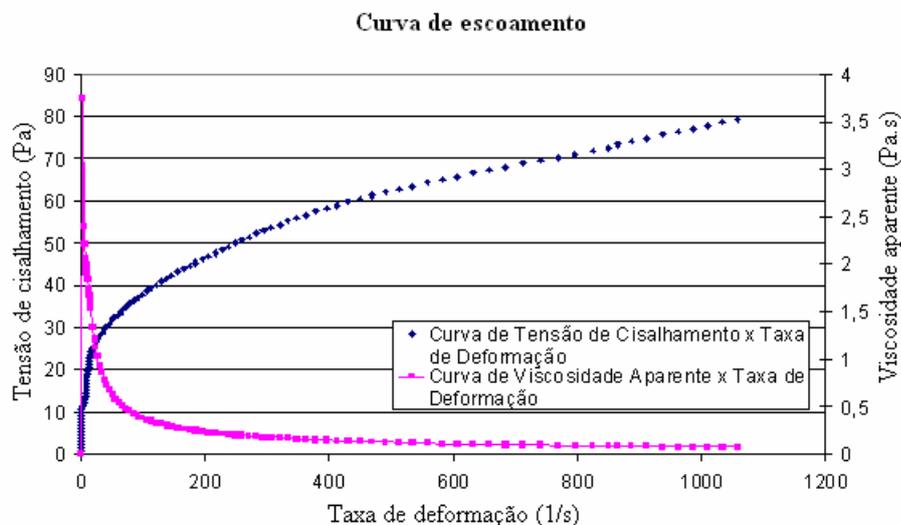
**Figura 2.2. Relações típicas entre tensão e taxa de deformação de fluidos mostradas em ensaios de cisalhamento simples.**

- Viscosidades diferencial e aparente

Como mostrado na Figura 2.2, quando a relação entre a taxa de deformação e a tensão de cisalhamento não é linear, a viscosidade varia em função da taxa de deformação. Assim, a relação dada pela Equação (2.11) fornece uma viscosidade aparente para o fluido, enquanto a Equação (2.12) fornece uma viscosidade diferencial, que é a viscosidade determinada para uma dada taxa de deformação específica.

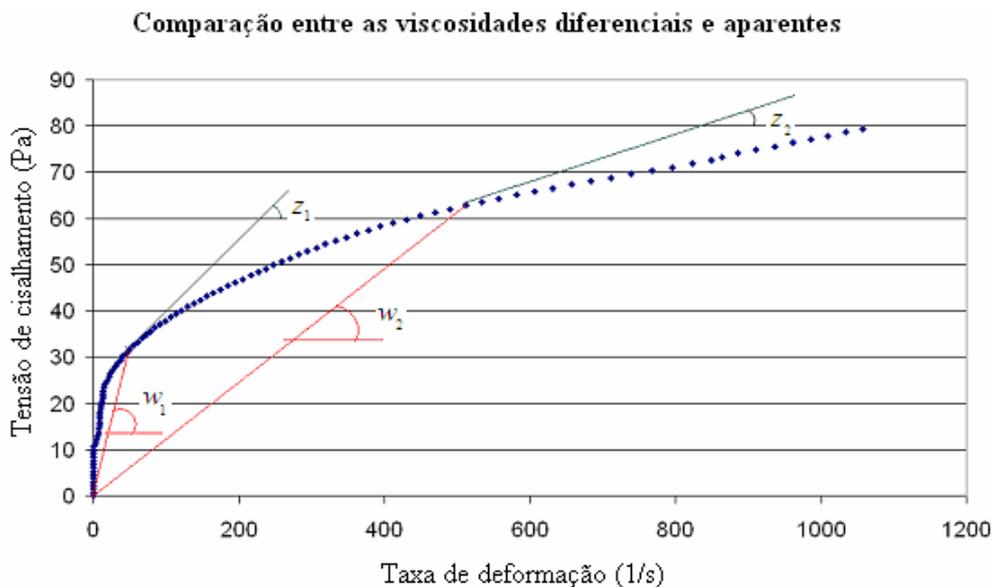
$$\mu_{dif} = \frac{d\tau}{d\dot{\gamma}} \tag{2.12}$$

Isto pode ser mais bem observado nas Figuras 2.3 e 2.4 a seguir:



**Figura 2.3. Variação da viscosidade de uma amostra (pasta MC 20 – cimento fino) em função da taxa de deformação. Kiryu *et al.* (2005).**

Na Figura 2.4 são mostradas as viscosidades diferenciais ( $\tan z$ ) e aparentes ( $\tan w$ ) para duas taxas de deformação diferentes.



**Figura 2.4. Variação da viscosidade em função da taxa de deformação para um fluido hiperconcentrado do tipo Herschel-Bulkley (viscosidades diferenciais:  $\tan z_1$  e  $\tan z_2$ ; viscosidades aparentes:  $\tan w_1$  e  $\tan w_2$ ). Adaptado de Kiryu *et al.* (2005).**

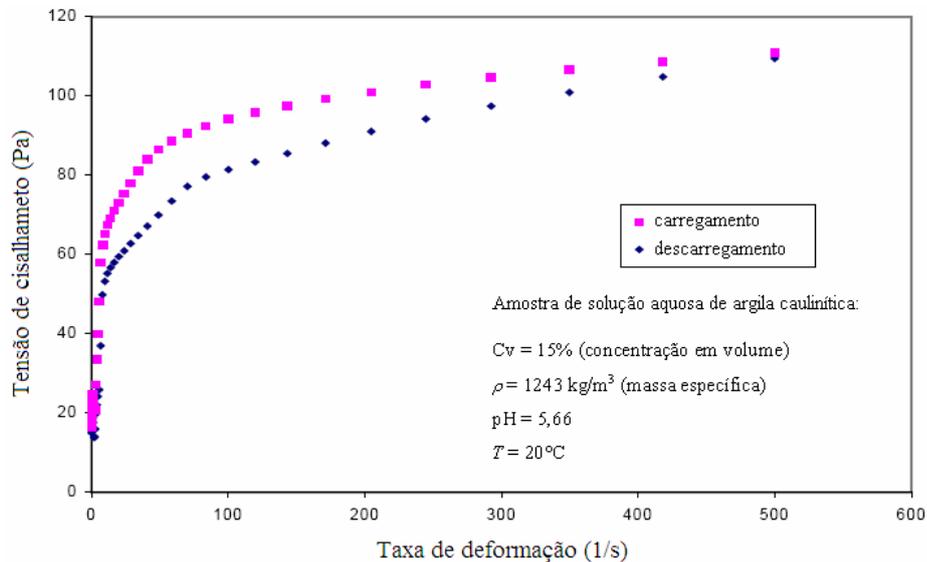
Convém salientar que, apenas para fluidos Newtonianos, as viscosidades diferencial e aparente coincidem, ou seja:  $\eta = \mu_{dif} = \mu$ .

- Tixotropia

Um material é dito tixotrópico se, ao ser submetido a uma tensão de cisalhamento constante, após um período de repouso, a viscosidade diminui (fluidos tixotrópicos), ou aumenta (fluidos reopéticos), sendo, portanto, um efeito dependente do tempo. Segundo Pignon *et al.* (1998) ao se interromper a solitação, o fluido tende a recuperar suas antigas propriedades, portanto, em geral, este é um fenômeno reversível.

Segundo Bretas e D'Ávila (2000), no caso dos polímeros, a tixotropia é causada pela quebra ou formação de aglomerados, géis ou ainda ligações químicas ou físicas das macromoléculas. Deve-se tomar cuidado para não haver confusão entre tixotropia e histerese. A diferença entre os dois conceitos é de que a tixotropia está relacionada com o tempo, já a histerese não. Observa-se que, apesar da diferença entre os dois conceitos, a tixotropia pode,

em alguns casos, ser determinada em ensaios de histerese. Uma descrição gráfica da tixotropia é dada na Figura 2.5.



**Figura 2.5. Exemplo de material tixotrópico. Santos (2003).**

- Tensão Crítica

Outra definição importante é a da tensão crítica, que é mostrada na Figura 2.2 como  $\tau_c$ . Tal definição se deve ao fato de que muitos fluidos, aparentemente, não escoam quando a tensão está abaixo de certo valor. Sabe-se que há alguma grande mudança nas proximidades deste valor, mas, a dúvida paira sobre o que acontece antes desse valor ser atingido.

No trabalho de Barnes (1998), o autor faz um resumo histórico sobre as controvérsias a respeito da tensão crítica. Ele constata ainda que, se feito com equipamentos adequados e, por um tempo suficiente, observa-se que nenhum fluido possui tensão crítica, mas, reconhece que, para muitas aplicações de engenharia, tal conceito é válido.

Harnett e Hu (1989) afirmam que a deformação dos fluidos abaixo da tensão crítica é tão pequena que, em engenharia, pode ser descartada. Seus experimentos foram feitos usando esferas de nylon mergulhadas em solução de Carbopol. O deslocamento foi assim filmado por vários meses.

Astarita (1989) comenta os trabalhos anteriores de Harnett e Hu (1989) e de Barnes e Walters (1985) afirmando que a discussão da existência ou não da tensão crítica depende do problema estudado.

Hoje em dia, parece haver um consenso de que a tensão crítica é, segundo as palavras de Barnes (1998), “uma constante conseguida via curvas matemáticas, usada junto a outros parâmetros para produzir uma equação que descreve a curva de escoamento do material dentro de valores limitados de tensão de cisalhamento”.

Para muitos fluidos, ainda existe dúvida se, antes da tensão crítica há apenas um patamar Newtoniano com grande viscosidade ou, se há, inicialmente, um comportamento Hookeano seguido de um comportamento Newtoniano de grande viscosidade até se atingir o fadado valor.

Barnes e Nguyen (2001) comentam sobre o uso de reômetros com geometria Vane, notadamente para se capturar tensões críticas quando a utilidade de se usar modelos que as incluem é grande. Møller *et al.* (2006) também comentam sobre as dificuldades de obter tensões críticas em experimentos, principalmente quando há tixotropia. Segundo eles, ambos os fenômenos advêm da mesma causa e, portanto, os modelos reológicos que admitem tensão crítica deveriam incluir também a tixotropia.

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.

- Viscoelasticidade

Certos fluidos apresentam uma parcela de comportamento elástico. Essa resposta viscoelástica indica que o material pode ter comportamento, tanto de um sólido (elástico) quanto de um líquido (viscoso). Segundo Bretas e D'Ávila (2000) o modelo de Maxwell foi 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 (que descreve o comportamento puramente 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). A viscoelasticidade é estudada experimentalmente através de ensaios oscilatórios.

---

Além disso, um fluido pode apresentar viscoelasticidade, porém, para a escala de tempo do problema, tal característica pode ser desprezada, o que pode ser indicado pelo número de Deborah (Balmforth e Craster, 2001; Boger e Walters, 1993).

Outros efeitos relacionados à viscoelasticidade são os efeitos de Weissenberg e o reemaranhamento.

### 2.1.2 Modelos reológicos

Vários modelos foram e ainda são desenvolvidos para descrição do comportamento de fluidos não-Newtonianos. Alguns levam em conta a tixotropia, outros também tratam da viscoelasticidade. Aqui, os efeitos de viscoelasticidade e tixotropia serão desprezados e, portanto, só serão mostrados os modelos que não os levam em conta.

Segundo Balmforth e Craster (2001) há várias formas de se escrever a equação constitutiva de um fluido. A forma teórica é a que leva em conta a forma e estrutura das moléculas, criando uma teoria cinética da microestrutura do fluido. A forma fenomenológica é aquela que procura representar a forma como essa microestrutura afetará a dinâmica do fluido (ex.: modelo de Maxwell). A forma fenomenológica modificada, que procura descrever o comportamento do fluido como sendo igual em todas as direções só serve, portanto, para fluidos isotrópicos. E, há ainda, a forma empírica, esta ajusta uma curva aos dados experimentais obtidos em testes de reometria. Serão tratados aqui apenas os modelos Newtonianos generalizados, que representam uma maneira simples de se escrever a relação entre a tensão e a taxa de deformação. Assim:

$$\bar{\tau} = 2\eta(\bar{\dot{\gamma}}, T, C)\bar{\dot{\gamma}} \quad (2.13)$$

em que  $C$  representa a concentração e  $T$  a temperatura.

Pode-se escrever ainda:

$$\bar{\tau} = \tau_c \frac{\bar{\dot{\gamma}}}{\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}}} + f(\dot{\gamma}_{II})\bar{\dot{\gamma}} \quad (2.14)$$

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

A função  $f(\dot{\gamma}_{II})$  determinará assim qual é o modelo. A seguir, alguns modelos clássicos são mostrados.

- Modelo de Bingham

$$f(\dot{\gamma}_{II}) = 2\mu \quad (2.15)$$

$$\bar{\tau} = \tau_c \frac{\bar{\dot{\gamma}}}{\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}}} + 2\mu\bar{\dot{\gamma}} \quad (2.16)$$

- Lei de Potências

$$\bar{\dot{\gamma}} = \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}})^{1-n}} \quad \tau_c = 0 \quad (2.17)$$

$$\bar{\tau} = \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}})^{1-n}} \bar{\dot{\gamma}} \quad (2.18)$$

- Modelo de Herschel-Bulkley

$$f(\dot{\gamma}_{II}) = \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}})^{1-n}} \quad (2.19)$$

$$\bar{\tau} = \tau_c \frac{\bar{\dot{\gamma}}}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}})} + \frac{2^n k}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}})^{1-n}} \bar{\dot{\gamma}} \quad (2.20)$$

Em condições de cisalhamento simples, estes se reduzem a:

- Modelo de Bingham

$$\tau = \tau_c + \mu\dot{\gamma} \quad (2.21)$$

- Lei de Potências

$$\tau = k\dot{\gamma}^n \quad (2.22)$$

- Modelo de Herschel-Bulkley

$$\tau = \tau_c + k\dot{\gamma}^n \quad (2.23)$$

Existem ainda outros modelos, como:

- Modelo de Casson

$$\sqrt{\tau} = \sqrt{\tau_c} + \sqrt{K_c \dot{\gamma}} \quad (2.24)$$

em que  $K_c$  é uma constante.

Como dito anteriormente, a existência de tensão crítica, além de controversa, introduz problemas principalmente em simulações numéricas. Assim, alguns modelos são propostos para tentar reduzir o problema. Tratam-se de regularizações dos outros modelos, como o de Herschel-Bulkley. Um exemplo é o modelo de Papanastasiou, relatado em Alexandrou *et al.* (2005),

$$\tau = \left\{ \tau_c \left[ 1 - e^{(-K_p \dot{\gamma})} \right] \dot{\gamma}^{-1} + k \dot{\gamma}^{n-1} \right\} \quad (2.25)$$

em que  $K_p$  é uma constante.

Tal modelo representa uma boa regularização para fluidos com tensão crítica para taxas de deformação muito pequenas.

Para os fluidos que aparentam possuir tensão crítica, geralmente, quando as curvas tensão X taxa de deformação são colocadas em uma escala di-log, o comportamento se assemelha ao da Figura 2.1. Para tal, outros modelos são mostrados:

- Modelo de Ellis

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left( \frac{\tau}{\tau_{1/2}} \right)^{\Theta-1}} \quad (2.26)$$

na qual  $\eta_0$  é a viscosidade Newtoniana mostrada na Figura 2.1,  $\tau_{1/2}$  é o valor da tensão referente à metade do valor de  $\eta_0$  e  $\Theta-1$  é a inclinação da curva  $\log(\eta_0/\eta-1)$  X  $\log(\tau/\tau_{1/2})$ .

- Modelo de Carreau–Yasuda

$$\frac{(\eta - \eta_\infty)}{(\eta_0 - \eta_\infty)} = \left[ 1 + (K_y \dot{\gamma})^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (2.27)$$

na qual  $\eta_\infty$  é a viscosidade do segundo *plateau* Newtoniano (Figura 2.1) e  $K_y$  é uma constante.

---

- Modelo de Cross

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\eta_0}{\tau^*}\right)^{1-n}} \quad (2.28)$$

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

### 2.1.3 Propriedades reológicas do Carbopol 940

O Carbopol, segundo Boger e Walters (1993), 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. Uma grande gama de propriedades reológicas pode ser obtida variando-se o pH, a concentração e o solvente utilizado. Ainda, segundo Boger e Walters (1993), as soluções de Carbopol 940 são geralmente inelásticas e pseudoplásticas. Segundo a Noveon (2002 - b) tratam-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, Debiante (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.

- Variação com a temperatura, concentração e pH

Em Lin e Ko (1995), é mostrado que, para soluções aquosas neutralizadas de Carbopol 934 (cujo comportamento é qualitativamente igual ao do Carbopol 940), a variação da viscosidade aparente com a temperatura, usando um modelo tipo Lei de Potências, acontece segundo as equações a seguir:

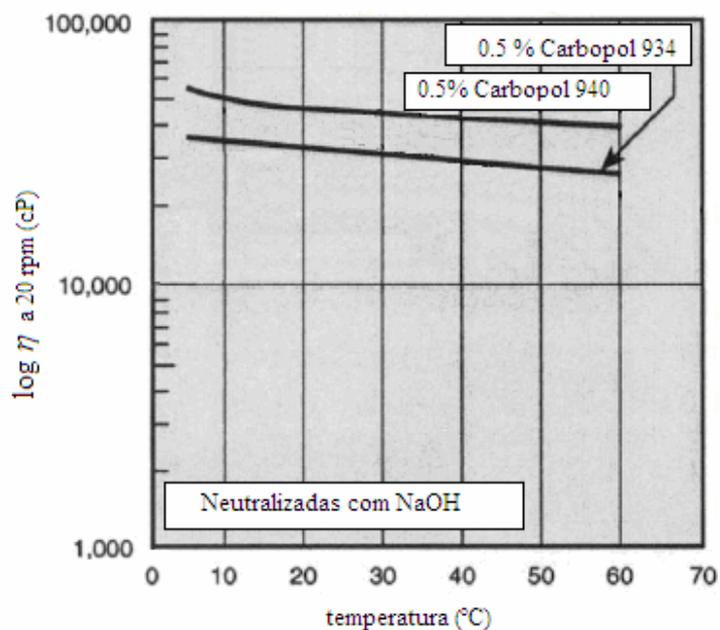
$$n = c_0 + c_1 T + c_2 T^2 \quad (2.29)$$

$$k = B T^{c_3} \quad (2.30)$$

em que  $c_0$ ,  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $B$  e  $c_3$  são coeficientes dependentes da concentração, cujos valores figuram no referido trabalho.

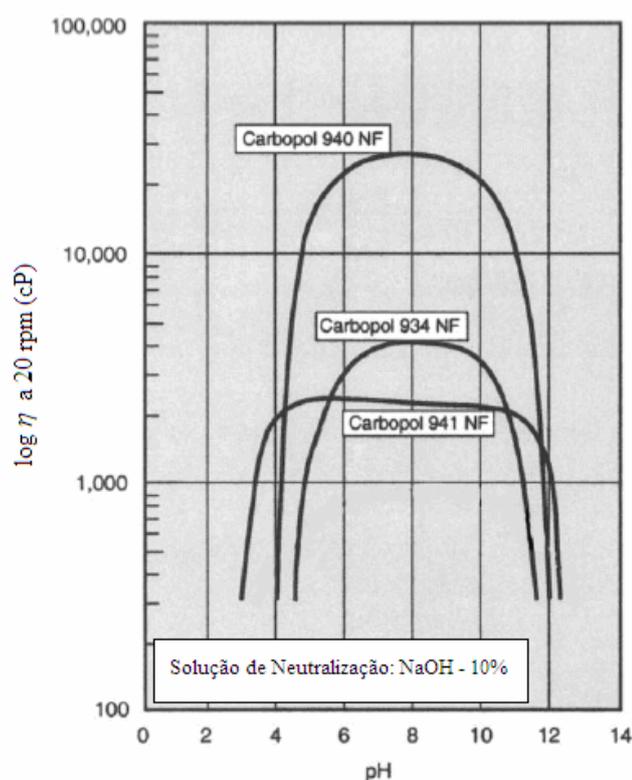
Observou-se ainda que, quanto maior a concentração, para a mesma temperatura, a viscosidade aumenta e que, quanto maior a temperatura, para a mesma concentração, a viscosidade diminui (resultados esperados). Nota-se que, para concentrações maiores, a

mesma variação de temperatura promove uma menor variação de viscosidade do que para concentrações maiores. Na Figura 2.6, tem-se um demonstrativo do efeito da temperatura sobre dois tipos de Carbopol.



**Figura 2.6.** Efeito da temperatura sobre dois tipos de soluções aquosas de Carbopol. Adaptado de Noveon (2002 - c).

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. 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. Na Figura 2.7 tem-se uma comparação dos efeitos do pH em três tipos de Carbopol.



**Figura 2.7. Efeito do pH sobre três tipos de soluções aquosas de Carbopol 0.2%. Adaptado de Noveon (2002 - c).**

Como era de se esperar, e conforme demonstrado em Noveon (1997), Lin e Ko (1995) e Debiane (2000), o aumento da concentração de Carbopol leva a um aumento da viscosidade. Lachamp (2003) mostra os parâmetros de Herschel-Bulkley obtidos com amostras de Carbopol 940, com pH entre 7.0 e 8.0 (Tabela 2.1) e concentração da ordem de grandeza da que será usada neste trabalho.

**Tabela 2.1. Parâmetros de Herschel-Bulkley encontrados para soluções aquosas neutralizadas de Carbopol 940. (Lachamp, 2003).**

Concentração	0.15%	0.16%	0.18%	0.19%
$\tau_c$ (Pa)	1.28	1.35	1.6	1.7
$k$ (Pa.s <sup>n</sup> )	5.12	4.47	7.47	7.71
$n$	0.55	0.61	0.57	0.57

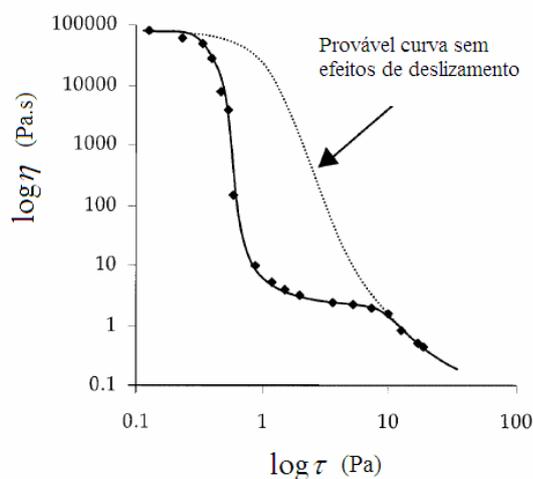
O autor encontrou dificuldades em obter parâmetros consistentes. Pela inspeção visual, acreditava-se que as tensões críticas seriam maiores. O autor ainda cita os valores encontrados por Roberts e Barnes (2001). Neste, os autores fazem ensaios de reometria de um substituto menos tóxico do Carbopol 940, o Carbopol 980, em reômetro com cilindros coaxiais e

geometria tipo Vane, para eliminar os efeitos de deslizamento. Os autores constataram que não há presença de tensão crítica, porém, confirmam a validade de engenharia da adoção do modelo de Herschel-Bulkley. Os dados obtidos por Roberts e Barnes são mostrados na Tabela 2.2.

**Tabela 2.2. Parâmetros de Herschel-Bulkley encontrados para soluções aquosas neutralizadas de Carbopol 980, à temperatura de 25° C. (Roberts e Barnes, 2001).**

Concentração	0.045%	0.06%	0.07%	0.08%	0.1%	0.3%	1.0%
$\tau_c$ (Pa)	0.3	0.3	1.25	3.0	10	70	115
$k$ (Pa.s <sup>n</sup> )	0.12	0.345	0.67	1.4	3.75	40	100
$n$	0.60	0.55	0.5	0.5	0.45	0.35	0.3

É também mostrado (Figura 2.8) um ensaio reométrico com o Carbopol 940, usando um reômetro sem dispositivo contra o deslizamento e a provável curva que seria obtida sem este efeito.



**Figura 2.8. Curva reométrica de uma amostra de Carbopol 940, com reômetro sem dispositivo anti-deslizamento. Adaptado de Roberts e Barnes (2001).**

- Modo de preparo

Alguns cuidados devem ser tomados para que as condições de preparo das soluções de Carbopol não afetem suas propriedades reológicas. Se usado um misturador (o que não é indicado em ensaios de reometria), durante o preparo, devem ser evitadas grandes rotações no equipamento, pois isso pode gerar a quebra das moléculas e diminuir a viscosidade permanentemente (Noveon, 1993). Deve-se evitar também a formação de bolhas e a

dissolução de gases após o preparo que podem alterar o pH da solução. Conforme salientado por Barry e Meyer (1979), deve-se proteger as soluções de luminosidade intensa. Ainda segundo este último, após o preparo, nota-se que, independentemente do tempo de repouso, o Carbopol não apresenta grande variação de suas propriedades reológicas, principalmente para soluções neutralizadas, desde que tomadas as precauções anteriores. Quanto à água utilizada, deve-se optar por água deionizada (Noveon, 2002 - b).

- Tixotropia

Nos trabalhos de Labanda *et al.* (2004) e Barry e Meyer (1979) é apontada uma reopexia em soluções aquosas de Carbopol 940. Porém, neste último considera-se que este comportamento é desprezível, fato também citado em Noveon (2002 - b). Apesar disso, segundo relatado por Møller *et al.* (2006), fluidos que apresentam aparente tensão crítica, possuem tixotropia.

- Tensão crítica

Observou-se que, das diversas espécies de Carbopol estudadas, o 940 é o que apresenta as maiores tensões críticas aparentes (Noveon, 2002 - b).

Estudos realizados na tese de doutorado de Debiane (2000) mostram que o Carbopol 940 apresenta valores moderados de tensão crítica e, o modelo reológico que mais se adapta, conforme observado anteriormente é o de Herschel-Bulkley. Para a definição correta de todos os parâmetros reológicos, amostras do material serão controladas rigorosamente e ensaiadas.

- Viscoelasticidade

Como era de se esperar, o Carbopol apresenta viscoelasticidade, por causa da existência de tensão crítica. Este fato é confirmado por Barry e Meyer (1978). Apesar disso, os efeitos elásticos iniciais serão desconsiderados e o modelo de Herschel-Bulkley será o adotado.

## 2.2 ROMPIMENTO DE BARREIRAS

Os escoamentos com superfície livre, pelo seu caráter multifásico, apresentam uma dificuldade adicional referente à posição da interface. Para eliminar este problema, faz-se uso da hipótese de águas rasas (*shallow water*), que pode ser utilizada quando a lâmina de fluido é muito pequena com relação ao comprimento característico (*long domain problems*). Partindo-

---

se das equações de Navier-Stokes, estas são integradas na vertical, obtendo-se o sistema de equações *shallow water* ou de Saint-Venant (Thual, 2003):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial h}{\partial x_1} + \bar{u}_3 \frac{\partial h}{\partial x_3} + h \left( \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_3} \right) = 0 \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} + \bar{u}_3 \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3} + g \cos \theta \frac{\partial h}{\partial x_1} = g \sin \theta - \frac{C_f}{2} \frac{\bar{u}_1 |\bar{u}_1|}{h} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_1} + \bar{u}_3 \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_3} + g \cos \theta \frac{\partial h}{\partial x_3} = - \frac{C_f}{2} \frac{\bar{u}_3 |\bar{u}_3|}{h} \quad (2.33)$$

em que:

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

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

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

$\theta$  é a inclinação da superfície, e

$C_f$  é um termo que leva em conta o atrito de fundo.

A obtenção destas equações é feita no Apêndice A.

Segundo Alcrudo (2002), o uso do sistema *shallow water* simplifica os problemas por várias razões:

- As velocidades verticais não são consideradas;
- O campo de pressão é considerado hidrostático;
- A inclinação do fundo deve ser pequena (para poder se desprezar o componente vertical da velocidade);
- 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.

Apesar das modernas técnicas numéricas, ainda hoje, a hipótese de águas rasas é muito utilizada em problemas hidrodinâmicos, como no tópico de rompimento de barreiras. A literatura é pobre na comparação dos resultados sem esta simplificação. Daí o caráter inovador do presente trabalho.

Nesta seção, serão apresentados a análise teórica e os trabalhos no assunto, dividido em duas etapas. Uma utilizando fluidos invíscidos e fluidos Newtonianos e outra dedicada aos trabalhos com fluidos não-Newtonianos.

### 2.2.1 Rompimento de barreiras com fluidos invíscidos ou Newtonianos

As pesquisas envolvendo rompimento de barreiras remontam ao final do século XIX, notadamente, segundo Whitham (1954), o trabalho de Ritter em 1892. Neste, o fluido é considerado invíscido e a resistência hidráulica é desconsiderada, o que provoca erros, principalmente na região da frente da onda. Além disso, despreza-se a velocidade transversal e o sistema de equações fica simplificado, obtendo-se assim as equações de Saint-Venant unidimensionais:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u_1 \frac{\partial h}{\partial x_1} + h \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0 \tag{2.34}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + g \frac{\partial h}{\partial x_1} = 0 \tag{2.35}$$

Whitham (1954) observou experimentalmente que na região da frente da onda há um amontoamento de fluido (Figura 2.9). 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, a solução de Ritter é utilizada (equações (2.36) e (2.37)).

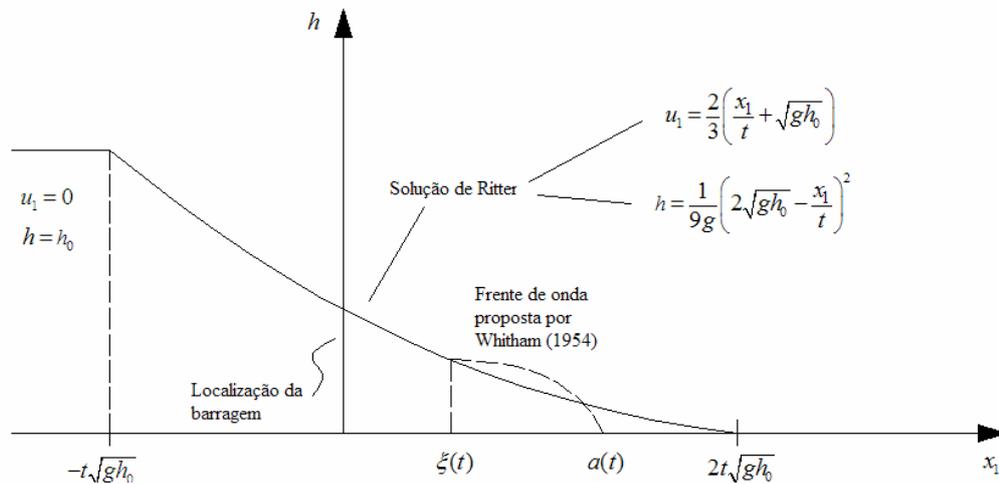


Figura 2.9. Desenho esquemático do problema de rompimento de barreira.

Adaptado de Whitham (1954).

A solução dada por Ritter em 1892, segundo Whitham (1954) é dada a seguir:

$$u_1 = \frac{2}{3} \left( \frac{x_1}{t} + \sqrt{gh_0} \right) \tag{2.36}$$

$$h = \frac{1}{9g} \left( 2\sqrt{gh_0} - \frac{x_1}{t} \right)^2 \quad (2.37)$$

Já a velocidade da onda em  $a(t)$ , encontrada por Whitham (1954), segue a seguinte lei:

$$\left( 1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}} \right)^3 \frac{t\ddot{a}}{\sqrt{gh_0}} = \left( 1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}} \right)^4 - \frac{\dot{a}^2}{\sqrt{gh_0}} \frac{K}{h_0} \left[ \frac{a}{\sqrt{gh_0}} - t \left( \frac{3\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}} - 1 \right) \right] \quad (2.38)$$

em que  $K$  é a constante de Chézy.

Note que para  $K = 0$ ,  $a = 2\sqrt{gh_0}t$ , ou seja, tem-se o resultado dado por Ritter (1892).

Para  $K \neq 0$ , outras duas variáveis adimensionais são introduzidas, a saber:

$$\alpha = (2\sqrt{gh_0}t - a) \quad (2.39)$$

$$\zeta = \sqrt{\frac{g}{h_0}} Kt \quad (2.40)$$

e, após manipulações matemáticas a equação (2.38) torna-se:

$$4\dot{\alpha}^3 \zeta \ddot{\alpha} + \dot{\alpha}^4 = 16(2 - \dot{\alpha})^2 (3\dot{\alpha}\zeta - 2\dot{\alpha}) \quad (2.41)$$

A discussão dos resultados feita por Whitham (1954) é realizada fazendo  $p = \dot{\alpha}$  como a variável independente e  $\zeta$  como a variável dependente. Os resultados obtidos por ele mostraram-se satisfatórios.

Nsom *et al.* (2000) estudam o efeito da inclinação de canais retangulares. O fluido utilizado é Newtoniano com grande viscosidade ( $\mu \approx 12$  Pa.s). Para tal, estes adimensionalizaram as equações de Navier-Stokes bidimensionais e, separaram o escoamento em duas fases: uma com predominância de forças inerciais e outra de forças viscosas. As variáveis adimensionais são as seguintes:

$$h' = \frac{h}{h_0} \quad x'_{1f} = \frac{x_1}{l_0} \quad t' = \frac{\rho h_0^3 g \cos \theta}{12\mu l_0^2} t \quad (2.42)$$

Na Figura 2.10, um esquema com as variáveis é mostrado.

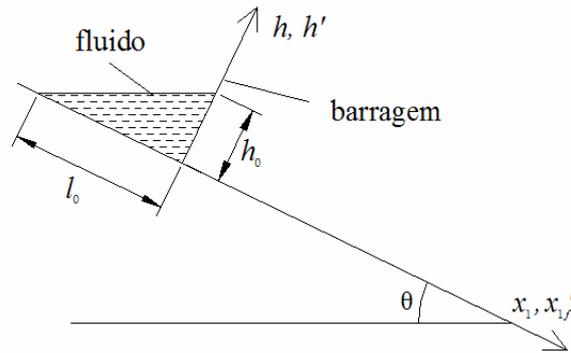


Figura 2.10. Variáveis utilizadas por Nsom *et al.* (2000). Adaptado do mesmo.

De posse das variáveis (2.42), pôde-se obter a lei de evolução para cada regime de escoamento. Para o caso de canal horizontal, e, no regime inercial, a evolução segue a lei de Ritter:

$$x'_{1f} \propto t' \quad (2.43)$$

O regime viscoso foi dividido ainda em outros dois. No primeiro, a lei de evolução resulta em:

$$x'_{1f} = 0.969\sqrt{t'} \quad (2.44)$$

se  $t' < 0.1$ .

E, no segundo regime viscoso, o resultado obtido foi:

$$x'_{1f} = 1.860t'^{0.2} - 0.962 \quad (2.45)$$

se  $t' > 0.1$ .

O valor encontrado para a máxima altura foi:

$$h'_{max} = \frac{0.640}{x'_1 + 1} \quad (2.46)$$

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.

### 2.2.2 Rompimento de barreiras com fluidos não-Newtonianos

A partir do trabalho de Whitham (1954), Yabuchi (2004), trabalhando com fluidos hiperconcentrados e, usando para tal uma reologia do tipo Lei de Potência, chega a uma variante da equação (2.38):

$$\left(1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}}\right)^3 \frac{t\ddot{a}}{\sqrt{gh_0}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}}\right)^4 - \frac{k\dot{a}^n}{\rho gh_0^{n+2} \left(1 - \frac{\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}}\right)^{2n}} \left[ a + \sqrt{gh_0} \left(1 - \frac{3\dot{a}}{2\sqrt{gh_0}}\right) t \right] \quad (2.47)$$

Yabuchi (2004) resolveu a equação (2.47), fazendo a seguinte mudança de variáveis:

$$\begin{aligned} A &= (2t\sqrt{gh_0} - a)K_1 \\ T &= K_2t \\ p &= \dot{A} \\ f'(p) &= T \end{aligned} \quad (2.48)$$

em que:

$$K_1 = \frac{k}{\rho h_0^{n+1} (gh_0)^{(2-n)/2}}$$

$$K_2 = \frac{k}{\rho h_0^{n+1} (gh_0)^{(1-n)/2}}$$

Obtendo assim, a equação a seguir:

$$4(p)^{2n+3} + f'(p)f''(p)(p)^{n+1} = 2^{2n+4}(2-p)^n(pf'(p) + 2f(p))f''(p) \quad (2.49)$$

Esta foi resolvida através de uma análise termo a termo, obtendo-se:

$$\dot{a} = 2\sqrt{gh_0} \left\{ 1 - \left[ \frac{(6n+9)2^{(3n+4)/(2n+3)}}{16} \right] (K_2t)^{2/(2n+3)} \right\} \quad (2.50)$$

que é a solução funcional da equação (2.47) para uma reologia tipo Lei de Potência. A solução final, para a reologia pretendida (Herschel-Bulkley), explicitada em Yabuchi (2004), é dada por:

$$\dot{a} = 2\sqrt{gh_0} \left\{ 1 - \frac{1}{2}(18)^{1/3} (K_2t)^{2/3} + \left[ \frac{(6n+9)2^{3n+4}}{8} \right]^{1/(2n+3)} (K_2t)^{2/(2n+3)} \right\} \quad (2.51)$$

cuja solução fornece o conhecimento da lei de evolução da frente de onda devido à ruptura.

A observação da existência de regimes distintos mostrada no tópico anterior foi apontada também por Debiante (2000) para fluidos não-Newtonianos. Ele afirma que tal existência está intimamente ligada à natureza dos materiais escoantes. Debiante (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 (regime transiente), 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 um certo tempo crítico. Portanto, uma solução correta não pode ser baseada somente do ponto de vista viscoso ou inercial, mas sim, em sua inter-relação. Assim, estudar os domínios nos quais cada efeito é predominante é essencial na análise do problema.

Debiante (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.

Debiante (2000) conclui, como dito anteriormente, 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). Mostram-se aqui apenas as equações de Debiante utilizadas neste trabalho.

O regime inercial utiliza as seguintes variáveis adimensionais:

$$x_1^* = \frac{x_1}{h_0} \quad t^* = \frac{t}{\sqrt{h_0/g}} \quad (2.52)$$

A lei de evolução é a seguinte:

$$\frac{x_1^*}{t^*} \approx 2 - \left( \frac{2n+3}{2n+4} \right) \chi_1 t_{red}^{1/(2n+3)} + \left( \frac{2n+3}{2n+5} \right) \chi_2 t_{red}^{2/(2n+3)} \quad (2.53)$$

em que:

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

$$\chi_2 \approx \frac{0.977}{m^{0.314}};$$

$$m = \frac{1}{n};$$

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

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

Para escoamentos em que  $Re$  é maior do que o  $Re_{lim} = (2+m)^n / t_{red_c}(m)$ , 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 (2.53) e (2.56). Para o cálculo do regime viscoso, introduzem-se as variáveis adimensionais,

$$\hat{x}_1 = \frac{x_1}{l_0} \quad \hat{t} = \frac{t}{T} \quad (2.54)$$

em 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:

$$Od = \frac{\tau_c l_0}{\rho gh_0^2} \quad \phi = \frac{\tau_c \varphi}{\rho gh_0} \quad (2.55)$$

em que  $\varphi$  é um parâmetro de forma (da ordem de  $\sqrt{3}$ ),  $Od$  é o número de Oldroyd e  $\phi$  é outro número adimensional que leva em conta a influência das tensões alongacionais.

A lei de evolução é dada a seguir,

$$\hat{x}_1(\hat{t}, m, Re_{lim}, Od) = \hat{c}_f(m) \left[ \hat{t} + \hat{c}_2(m, Re_{lim}) \right]^{\frac{1}{3m+2}} - 1 \quad (2.56)$$

em que:

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

$$a(m) \approx \frac{2}{3} + \frac{0.297}{m+0.705};$$

$$\hat{c}_2(m, Re_{lim}) \approx \hat{t}_{c2}(m, Re_{lim}) - \left[ \frac{\hat{x}_{f2}(m, Re_{lim}) + 1}{\hat{c}_f(m)} \right]^{3m+2};$$

$$\hat{t}_{c2}(m, Re_{lim}) = \tilde{c}_1(m, Re_{lim}) + \left( \frac{\hat{x}_{1f2}(m)}{\tilde{c}_f(m)} \right)^{m+1};$$

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

$$\tilde{c}_1(m, Re_{lim}) \approx \hat{t}_1 - \left( \frac{\hat{x}_{1f1}(m, Re_{lim})}{\tilde{c}_f(m)} \right)^{m+1}, e$$

$$\hat{x}_{1f1}(m, Re_{lim}) = (m+1) \left( \frac{1}{m+2} \right)^{\frac{m+1}{m}} Re_{lim} t_{red_c} (2 - \eta_f t_{red_c}(m))$$

Ainda, tem-se a equação que define a distância de parada. Para tal, define-se  $Od_c$ , como sendo:

$$Od_c = \frac{1}{3}(1 - \lambda\phi) \left[ 1 - \frac{3-2\lambda}{2} \phi(\lambda\phi+1) \right] \quad (2.57)$$

em que  $\lambda$  é o coeficiente de gelificação que é da ordem de 1 para fluidos considerados não-tixotrópicos.

Se  $Od > Od_c$ ,

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{6Od} (1 - \lambda\phi) [1 - \lambda\phi(2 + 2\lambda\phi - 3\phi)] \quad (2.58)$$

Se  $Od < Od_c$ ,

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{2Od} [ -(\lambda-1)^2 \phi ] - 1 \quad (2.59)$$

Piau e Debiane (2005) estudaram o problema de rompimento de barreira com o intuito de melhor conhecer os parâmetros do consistômetro de Bostwick. Estes também utilizaram as equações de Saint-Venant unidimensionais e separaram o escoamento pela predominância de efeitos viscosos ou inerciais. Outro trabalho no mesmo escopo foi feito por Balmforth *et al.* (2007) que concluíram, através de comparação analítico-experimental, que os estudos feitos com consistômetros de Bostwick devem incluir os efeitos de inércia, de atrito lateral e de deslizamento, ou, alternativamente, que tenham mudanças estruturais para poder se desprezar tais efeitos.

Um trabalho inovador foi feito por Chanson *et al.* (2006) sobre o papel da tixotropia em escoamentos devidos ao rompimento de barreira. Para modelagem da tixotropia, foi utilizada uma equação constitutiva com apenas um parâmetro estrutural, o grau de gelificação

(*jamming degree*). Para o estudo, foram utilizadas as equações *shallow water* unidimensionais, com a introdução do efeito de tixotropia e utilizado o método das características.

Piau (1996) estudou o efeito da tensão crítica em diversos escoamentos além do problema tipo rompimento de barreira. Também utilizou as equações *shallow water* com introdução de reologia tipo Herschel-Bulkley e concluiu que os tensores elongacionais não podem ser desprezados.

## 2.3 MODELO NUMÉRICO

A simulação numérica avançou muito nestas últimas décadas, abrangendo problemas muito complexos. Assim, este campo tornou-se ferramenta indispensável nas pesquisas de engenharia atuais, prevendo fenômenos e reduzindo gastos.

Neste trabalho, o escoamento de material visco-plástico devido ao rompimento de barreira, será simulado utilizando o método VOF (*volume of fluid*). As equações de conservação são discretizadas usando Volumes Finitos e não é usada a hipótese de águas rasas. Os resultados numéricos são comparados com ensaios experimentais e, com os obtidos utilizando o modelo de Saint-Venant encontrados na literatura. Atenção especial é dada à predominância dos efeitos viscosos e os inerciais.

O problema a ser simulado aqui apresenta dificuldades particulares como, por exemplo, a introdução da reologia do fluido nas equações do movimento o que dificulta o tratamento dos tensores e a necessidade de algoritmos específicos. Porém, também se apresenta, do ponto de vista numérico, bem comportado, por apresentar interface suave.

### 2.3.1 Problemas Multifásicos

Problemas com superfície livre representam um caso particular de escoamento multifásico. O tratamento numérico destes problemas pode ser feito através de dois métodos: Euler-Lagrange e Euler-Euler.

Os métodos Euler-Lagrange são utilizados 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, apesar de a massa poder ser grande. 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 – c).

Nos métodos Euler-Euler, as diferentes fases são tratadas como meios interpenetrantes separados por uma interface. Assim, há a necessidade de se introduzir o conceito de fração volumétrica.

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

Dentro de um escoamento multifásico, este ainda pode ser homogêneo ou não. Nos não homogêneos, os campos de velocidade são separados para cada fluido e, apenas o campo de pressão é comum. Já nos escoamentos ditos homogêneos, todos os fluidos compartilham os mesmos campos e as fases interagem por meio de termos de transferência através das interfaces. Dentre os modelos Euler-Euler, um método muito difundido é o VOF (*volume of fluid*).

### 2.3.2 O Método VOF e a modelagem física de interfaces

Quando se tem um problema multifásico há a necessidade de se descrever a interface para que o campo de escoamento seja resolvido. Desde já, ressalta-se que é considerado haver equilíbrio termodinâmico local.

O método VOF faz uma aproximação da interface por meio de retas em cada célula, separando-se assim o domínio do problema nas diversas fases que o compõem. As equações do movimento utilizadas são as mesmas, mas, para cada fase, as características próprias do fluido, como massa específica e viscosidade são devidamente assimiladas no cálculo.

A partir de agora, serão tratados apenas os problemas bifásicos com escoamentos considerados incompressíveis. Uma das formas de se definir uma interface  $S_{int}$  é fazendo uso de uma função discreta  $f_{i,j}$  que associa um número para cada uma das fases. Assim, pode-se diferenciar a fase mais densa por fase 1 e a fase menos densa por 2 e, portanto:

---

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} 0 & \text{para fase 2} \\ 1 & \text{para fase 1} \end{cases} \quad (2.60)$$

e, designando a fração volumétrica da fase 1 na célula  $i,j$  por  $VF_{i,j}$ , tem-se:

$$VF_{i,j} \Delta x_1 \Delta x_2 = \int_{i,j} f_{i,j} dx_1 dx_2 \quad (2.61)$$

Esta forma de definir a fração volumétrica é a utilizada pelo VOF.

A evolução da interface é definida pelo vetor normal  $\vec{n}$  em cada ponto desta. Assumindo que não há deslizamento na interface, tem-se que:

$$\vec{u}_{f1} = \vec{u}_{f2} \quad (2.62)$$

e, então:

$$\vec{u}_{f1} \cdot \vec{n} = \vec{u}_{f2} \cdot \vec{n} \quad (2.63)$$

em que os subscritos  $f1$  e  $f2$  correspondem, respectivamente, às fases 1 e 2.

A equação anterior é uma conseqüência direta da conservação da massa. O movimento da interface em problemas sem mudança de fases é dado por:

$$\frac{\partial (VF)}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla (VF) = 0 \quad (2.64)$$

que é a chamada equação da advecção da fração volumétrica.

Para o balanço de quantidade de movimento, usam-se que as equações de Cauchy. Os termos de forças capilares e tensão superficial serão desprezados. As únicas propriedades descontínuas através da interface são: a massa específica e a viscosidade. Assim, longe da interface o método VOF trabalha como um método de solução convencional para um problema monofásico.

Um algoritmo do método VOF é, em geral, composto de duas partes:

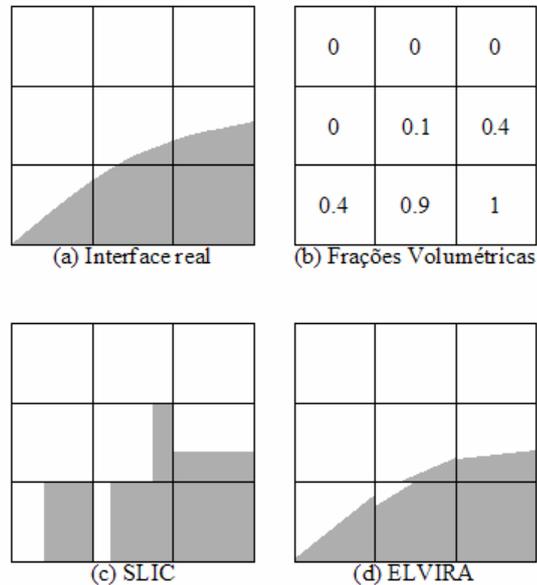
- Reconstrução da interface e,
- Propagação desta.

O método VOF é um método aplicado geralmente a malhas fixas e regulares. Porém, na literatura, encontram-se aplicações para malhas não regulares. Uma revisão dos principais métodos de rastreamento de interface é feita por Scardovelli e Zaleski (1999).

- Reconstrução

Os algoritmos de reconstrução têm por função fazer uma aproximação da interface real em cada célula. Tal aproximação é feita por retas que, dependendo do método, podem ser

horizontais e verticais ou apresentarem qualquer inclinação. Na Figura 2.11, têm-se algumas aproximações de interface.



**Figura 2.11. Aproximações para uma interface real.**  
Adaptado de Pilliod e Puckett (2004).

Vários são os métodos de reconstrução encontrados na literatura. Um dos mais simples é devido a Noh e Woodward (1976) e tem como nome SLIC (*Simple Line Interface Calculation*). Neste, a interface é aproximada por retas horizontais ou verticais. Dentre os métodos que admitem inclinação da reta, tem-se o algoritmo de Parker e Youngs (1992). O LVIRA (*Least Squares Volume of Fluid Interface Reconstruction Algorithm*), de Puckett (1991) e o ELVIRA (*Efficient Least Squares Volume of Fluid Interface Reconstruction Algorithm*), de Pilliod e Puckett (2004). Este último algoritmo é tratado aqui com mais profundidade, por ser um dos métodos que melhor descreve a interface pelo fato de ser de segunda ordem.

O método será mostrado em um espaço bidimensional, embora possa ser usado para problemas tridimensionais.

Dada uma reta,

$$x_2 = a x_1 + b \quad (2.65)$$

têm-se seis candidatas a  $a$ , designadas por  $\tilde{a}$ . As candidatas à curvatura são calculadas através de diferenças finitas das frações volumétricas em um bloco de células 3x3, conforme a Figura 2.12.

• $VF(i-1,j+1)$	• $VF(i,j+1)$	• $VF(i+1,j+1)$
• $VF(i-1,j)$	• $VF(i,j)$	• $VF(i+1,j)$
• $VF(i-1,j-1)$	• $VF(i,j-1)$	• $VF(i+1,j-1)$

**Figura 2.12. Bloco 3x3 utilizado para calcular as candidatas a interface na célula (i,j).**

Assim, as candidatas são:

$$\tilde{a}_b^{x_1} = \sum_{l=-1}^1 VF_{i,j+l} - VF_{i-1,j+l} \tag{2.66}$$

$$\tilde{a}_c^{x_1} = \frac{1}{2} \sum_{l=-1}^1 VF_{i+1,j+l} - VF_{i-1,j+l} \tag{2.67}$$

$$\tilde{a}_f^{x_1} = \sum_{l=-1}^1 VF_{i+1,j+l} - VF_{i,j+l} \tag{2.68}$$

$$\tilde{a}_b^{x_2} = \sum_{k=-1}^1 VF_{i+k,j} - VF_{i+k,j-1} \tag{2.69}$$

$$\tilde{a}_c^{x_2} = \frac{1}{2} \sum_{k=-1}^1 VF_{i+k,j+1} - VF_{i+k,j-1} \tag{2.70}$$

$$\tilde{a}_f^{x_2} = \frac{1}{2} \sum_{k=-1}^1 VF_{i+k,j+1} - VF_{i+k,j} \tag{2.71}$$

em que os subscritos  $b$ ,  $c$  e  $f$  correspondem, respectivamente, as diferenças para trás (*back*), central e para frente (*forward*).

Para cada candidata à curvatura, associa-se um valor de  $b$ , e assim têm-se seis pares  $(\tilde{a}, \tilde{b})$  de possíveis soluções para a reta. A escolha é feita, expandindo-se a reta candidata no bloco 3x3, calculando a diferença entre as frações volumétricas verdadeiras e candidatas e, somando-se esses erros no bloco. O menor erro corresponderá à melhor alternativa, ou seja:

$$E_{i,j}^1(\tilde{a}) = \sum_{k,l=-1}^1 \left| \tilde{VF}_{i+k,j+l}(\tilde{a}) - VF_{i+k,j+l} \right| \tag{2.72}$$

$$\tilde{a} = \min \left[ E_{i,j}^1(\tilde{a}_b^{x_1}), E_{i,j}^1(\tilde{a}_c^{x_1}), \dots, E_{i,j}^1(\tilde{a}_c^{x_2}), E_{i,j}^1(\tilde{a}_f^{x_2}) \right] \tag{2.73}$$

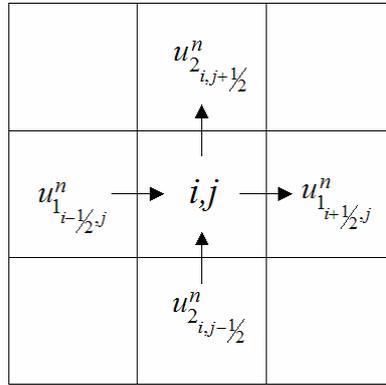
- Propagação

O algoritmo de propagação é o responsável pela advecção da fração volumétrica. Em outras palavras, resolve a equação (2.64). Existem dois métodos para se fazer isso: através dos algoritmos com passo fracionado (*split operator* ou *fractional step*) ou com passo não fracionado (*unsplit step*). Apenas o primeiro é mostrado aqui.

Primeiramente, discretiza-se a equação da conservação da massa para escoamentos incompressíveis em um dado tempo  $n$ .

$$\frac{(u_{1+i/2,j}^n - u_{1-i/2,j}^n)}{\Delta x_1} + \frac{(u_{2,i,j+1/2}^n - u_{2,i,j-1/2}^n)}{\Delta x_1} = 0 \quad (2.74)$$

em que as velocidades são dadas conforme a Figura 2.13.



**Figura 2.13. Discretização das velocidades em uma célula  $(i,j)$ .**

Quer-se encontrar o campo de frações volumétricas em um tempo  $t^{n+1} = (n+1)\Delta t$ .

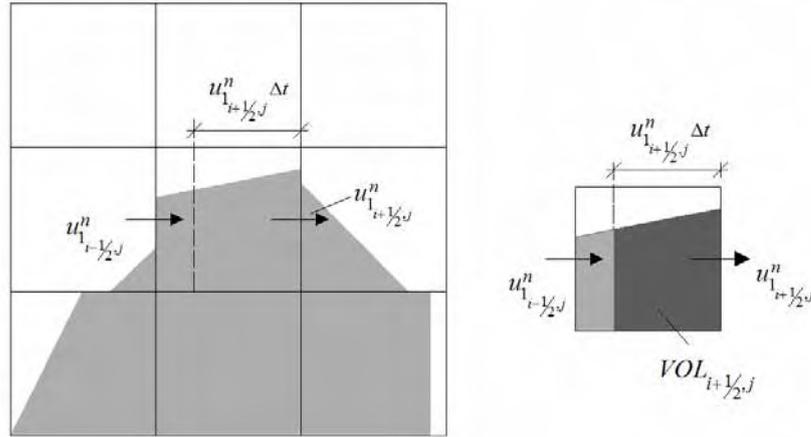
Assim:

$$VF_{i,j}^{n+1} = VF_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x_1} [F_{i-1/2,j}^n - F_{i+1/2,j}^n] + \frac{\Delta t}{\Delta x_2} [G_{i,j-1/2}^n - G_{i,j+1/2}^n] \quad (2.75)$$

em que:

$F_{i-1/2,j}^n = (VF u_1)_{i-1/2}^n$  é o fluxo de fração volumétrica na face esquerda da célula  $i,j$  e etc.

O *operator split* consiste em dividir a solução de (2.75) em dois passos. Para tal, observe a Figura 2.14.



**Figura 2.14. Desenho esquemático para entendimento do método da advecção da interface.**  
 Adaptado de Pilliod e Puckett (2004).

Na Figura 2.14, é considerado que só há movimento nas abscissas (para facilitar o entendimento). O fluido na célula  $i,j$  delimitado pela área  $\left(u_{i+1/2,j}^n \Delta t\right)\left(\Delta x_2\right)$  possui volume igual a  $VOL_{i+1/2,j}$ , o qual atravessará a face direita da célula durante o intervalo  $\Delta t$ .

O método consiste em separar os fluxos nas duas direções, da seguinte forma:

$$VF_{i,j}^* = VF_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x_1} \left[ F_{i-1/2,j}^n - F_{i+1/2,j}^n \right] \quad (2.76)$$

$$VF_{i,j}^{n+1} = VF_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{\Delta x_2} \left[ G_{i,j-1/2}^n - G_{i,j+1/2}^n \right] \quad (2.77)$$

e, os fluxos são dados por:

$$F_{i+1/2,j}^n = \frac{u_{i+1/2,j}^n VOL_{i+1/2,j}}{u_{i+1/2,j}^n \Delta x_2 \Delta t} = \frac{VOL_{i+1/2,j}}{\Delta x_2 \Delta t} \quad (2.78)$$

O raciocínio é o mesmo para os demais fluxos.

O algoritmo fracionado (*fraction step*) é de fácil implementação, porém apresenta certos problemas, como a possibilidade de não conservação exata da massa em certas células (Černe et al., 2002).

Outra ressalva se faz com respeito à restrição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL *constraint*). Tal restrição está relacionada com o fato de que a quantidade de fluido que deixa uma célula em um passo de tempo não pode ser maior do que a quantidade de fluido que existia na célula. Esta restrição deve ser feita para que a conservação da massa seja mantida.

O respeito à condição CFL pode fazer com que o passo de tempo necessite ser diminuído durante o processo iterativo.

Em problemas cujos fluidos apresentam grande diferença de massa específica e viscosidade, a malha tem de ser muito refinada, o que dificulta a condição CFL, conforme salientado por Etienne *et al.* (2004).

Após a reconstrução da interface e propagação desta, faz-se a solução do sistema de equações. O método utilizado é o dos Volumes Finitos. Este consiste na realização de balanços das propriedades nas células (volumes de controle) integrando as equações nestes. As equações são discretizadas tanto no espaço quanto no tempo e, vários métodos podem ser utilizados para tal finalidade. Depois de discretizadas, obtêm-se um sistema linear de equações que deve ser resolvido por algoritmos específicos. Para um estudo detalhado do método dos Volumes Finitos, pode-se consultar Maliska (2004), Patankar (1980), Versteeg e Malalasekera (1995), além de muitos outros autores.

---

### 3 MODELO EXPERIMENTAL

O modelo experimental consiste no estudo do escoamento tipo rompimento de barreira em modelo reduzido. Para tal, é necessário também o conhecimento da reologia do fluido utilizado. Assim, são mostrados neste Capítulo o aparato experimental e os procedimentos adotados tanto para o estudo em modelo reduzido em si, como também os necessários para produção dos géis de Carbopol 940 e para obtenção de seus parâmetros reométricos.

#### 3.1 APARATO EXPERIMENTAL E PROCEDIMENTOS

O aparato experimental consiste nos equipamentos necessários para a reometria e para a simulação do escoamento em modelo reduzido.

O reômetro utilizado é um R/S Rheometer, da Empresa Brookfield Engineering, que acompanha quatro conjuntos de cilindros coaxiais (*spindles* e copos). Os cilindros internos são rotacionados e o equipamento possui duas formas de trabalho: controlando a tensão e medindo a taxa de deformação (CSS – *controlled shear stress*) ou, o contrário (CSR – *controlled shear rate*) que pode ser feito diretamente na tela do reômetro ou através do *software* RHEO 2000. Em todos os ensaios deste trabalho, optou-se pelo controle da tensão. A manutenção da temperatura é feita através de um equipamento de banho térmico da mesma empresa. O reômetro, os cilindros e o equipamento de banho térmico são mostrados na Figura 3.1.

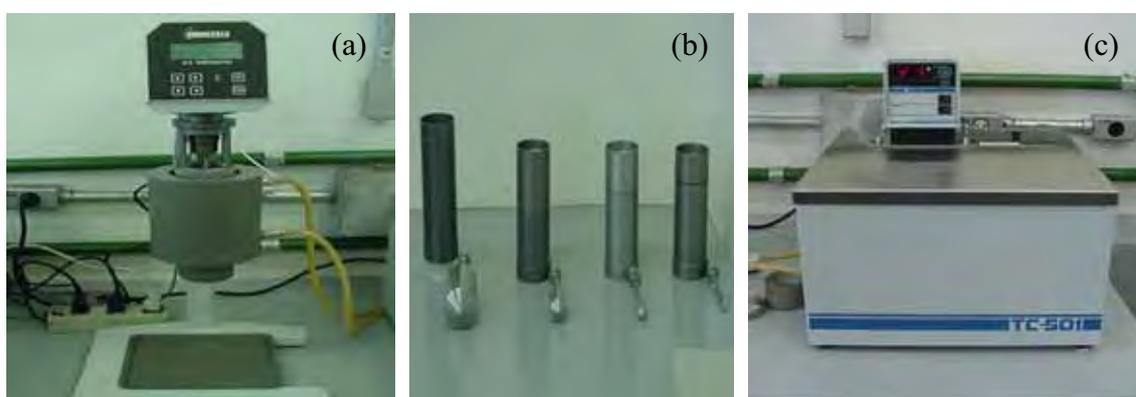
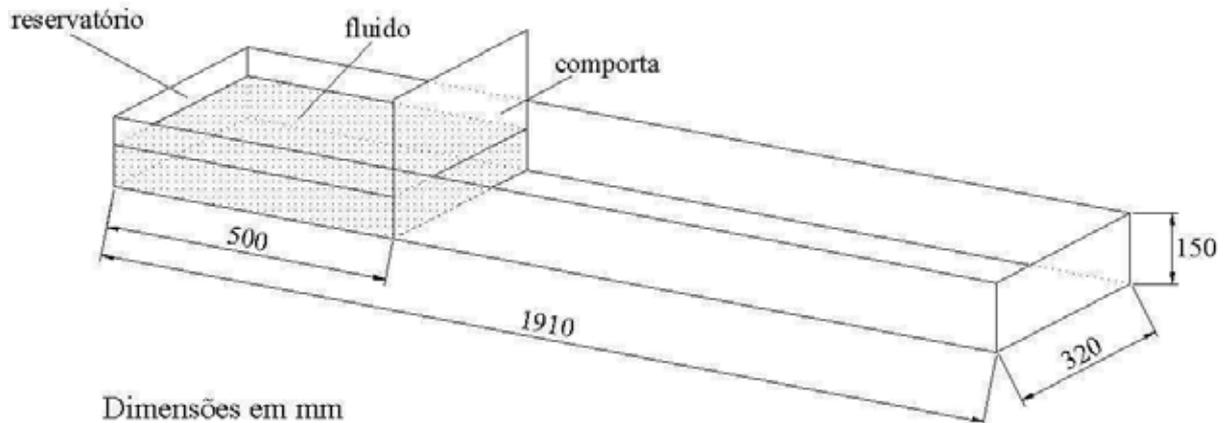


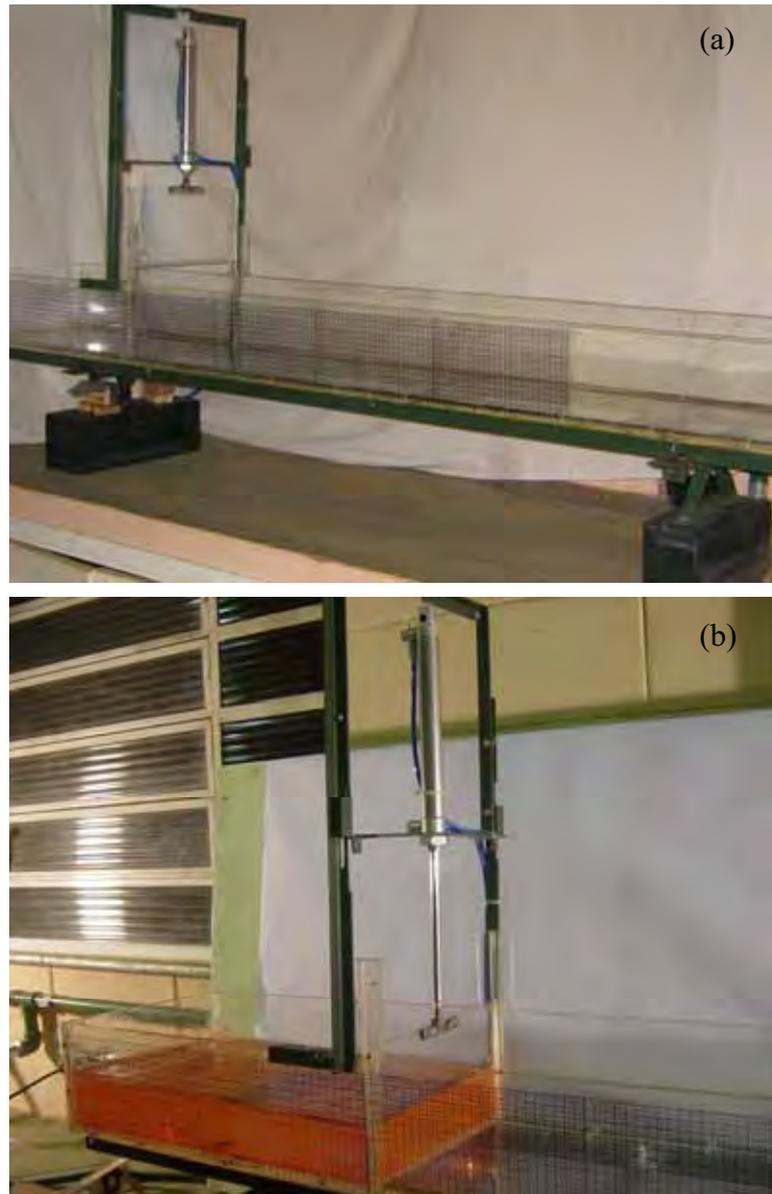
Figura 3.1. Aparelhagem utilizada para os ensaios de reometria. (a) reômetro; (b) *spindles*; (c) equipamento de banho térmico.

O canaleta utilizado foi confeccionado em chapas de acrílico de 10 mm de espessura. Muito cuidado foi necessário para a fabricação destes, principalmente na uniformidade de medidas das chapas, para evitar deformações. Além disso, o abrigo de luminosidade intensa e cuidados na limpeza (como a proibição do contato com álcool) são medidas muito importantes. As dimensões do canaleta são mostradas na Figura 3.2.



**Figura 3.2. Dimensões (em mm) do canaleta.**

O canaleta é dotado de um pistão para o acionamento automático da comporta (barreira), para a simulação da ruptura “instantânea”. Uma foto do canaleta e do pistão é mostrada na Figura 3.3.



**Figura 3.3. Fotos do canaleta. (a) canaleta com a comporta e o pistão;  
(b) canaleta contendo Carbopol no reservatório.**

Uma filmadora digital JVC (GY DV 500) foi utilizada para realização das filmagens da evolução da frente de onda. Na Figura 3.4, tem-se uma foto da aparelhagem completa de filmagem.

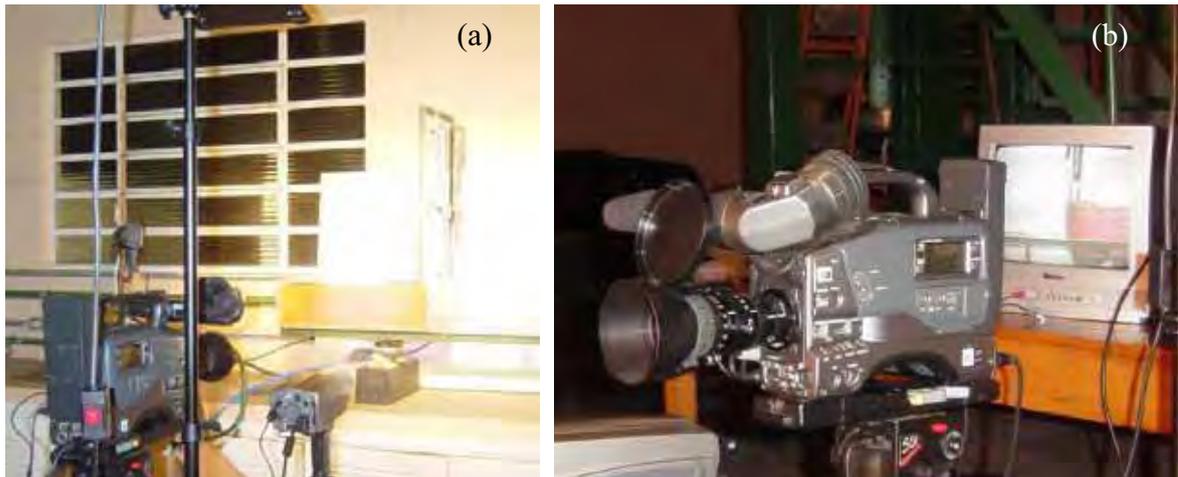


Figura 3.4. Aparelhagem utilizada nas filmagens. (a) aparelhagem montada; (b) detalhe da câmera.

### 3.2 PREPARO DAS SOLUÇÕES DE CARBOPOL

Muito cuidado é necessário na produção dos géis. Primeiramente, define-se a concentração em massa do Carbopol e, a quantidade de gel a ser produzida. A concentração é dada por:

$$C = \frac{m_{carb}}{m_{H_2O} + m_{H_2O-neutr} + m_{carb} + m_{NaOH}} \quad (3.1)$$

em que,

$C$  é a concentração em massa do Carbopol;

$m_{carb}$  é a massa de Carbopol;

$m_{H_2O}$  é a massa de água utilizada na mistura com o Carbopol;

$m_{H_2O-neutr}$  é a massa de água utilizada na solução de hidróxido de sódio, e

$m_{NaOH}$  é a massa de hidróxido de sódio.

Para a neutralização, é necessária uma massa 3.2 vezes menor do que a massa do Carbopol 940, ou seja:

$$\text{taxa} = \frac{\text{massa de Carbopol 940}}{\text{massa de NaOH}} = 3.2 \quad (3.2)$$

Este valor foi obtido através da titulação de amostras de soluções de Carbopol 940 com diferentes concentrações.

Escolhida a concentração, os valores das massas necessárias para a produção do gel são obtidos com o auxílio de uma planilha feita em Excel, que é mostrada na Figura 3.5.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	<b>PRODUÇÃO DE GEL DE CARBOPOL 940</b>							
2								
3	Lista de produtos:							
4	NaOH							
5	Carbopol 940							
6	Água deionizada							
7								
8	Solução							
9	Carbopol 940	Massa de água (g)	Massa de Carbopol (g)	Concentração de Carbopol				
10		2000.00	2.95	0.147%				
11	NaOH	Massa de água (g)	Massa de NaOH (g)	Concentração de NaOH				
12		100.00	0.92	0.914%				
13	Solução neutralizada de Carbopol 940	Massa de água adicionada (g)	Massa de Carbopol (g)	Massa de NaOH (g)	Massa de água (g)	Concentração de Carbopol	Concentração de NaOH	taxa: Carb./NaOH (para neutr. 3.2)
14		0.0	2.95	0.92	2100.00	0.140%	0.044%	3.20

Figura 3.5. Planilha do Excel utilizada para obtenção das massas de água, NaOH e de Carbopol 940.

Primeiramente, colocam-se os valores das massas de água. A célula B10 corresponde à água a ser misturada inicialmente com o Carbopol, a célula B12 corresponde à água utilizada para a solução de NaOH e, a B14 é utilizada no caso de se adicionar água posteriormente. A seguir, coloca-se um valor estimado de Carbopol na célula C10. Este valor deve ser mudado até que, na célula F14, atinja-se a concentração requerida. Para a massa de NaOH, utiliza-se a ferramenta “atingir meta”, para 3.2 modificando a célula C12. Esta é modificada automaticamente. Como neste trabalho a concentração é pequena, a massa de hidróxido de sódio não deve modificar o valor da concentração final fornecido em F14.

Após obtenção dos valores das massas a serem utilizados, mede-se em balança a quantidade de água e de Carbopol. A água utilizada é deionizada, de modo que sua condutância seja menor do que  $0.4 \mu\text{S}/\text{cm}$ . A água é armazenada em recipiente com bocal largo. Pulveriza-se o Carbopol sobre a superfície, tampa-se o recipiente e deixa-se em repouso até a dissolução (de 8 a 24 horas). Após a dissolução completa, mistura-se lentamente a solução de hidróxido de sódio até atingir a homogeneização, evitando-se a formação de bolhas.

### 3.3 DETERMINAÇÃO DE INCERTEZAS EXPERIMENTAIS

Para a estimativa dos erros envolvidos na obtenção dos parâmetros de Herschel-Bulkley, foram feitos ensaios reométricos na busca da existência de erros sistemáticos e aleatórios e para determinação da incerteza total envolvida.

A incerteza do equipamento é da ordem de 3% da escala (Brookfield Viscometers, 1998). O controle de todos os ensaios de reometria foi feito utilizando-se o *software* RHEO2000. Neste, primeiramente, define-se como será o ensaio. Escolhe-se o tipo de controle, o *spindle* utilizado e o tempo de ensaio. Na Figura 3.6, é mostrado um ensaio de cisalhamento simples.

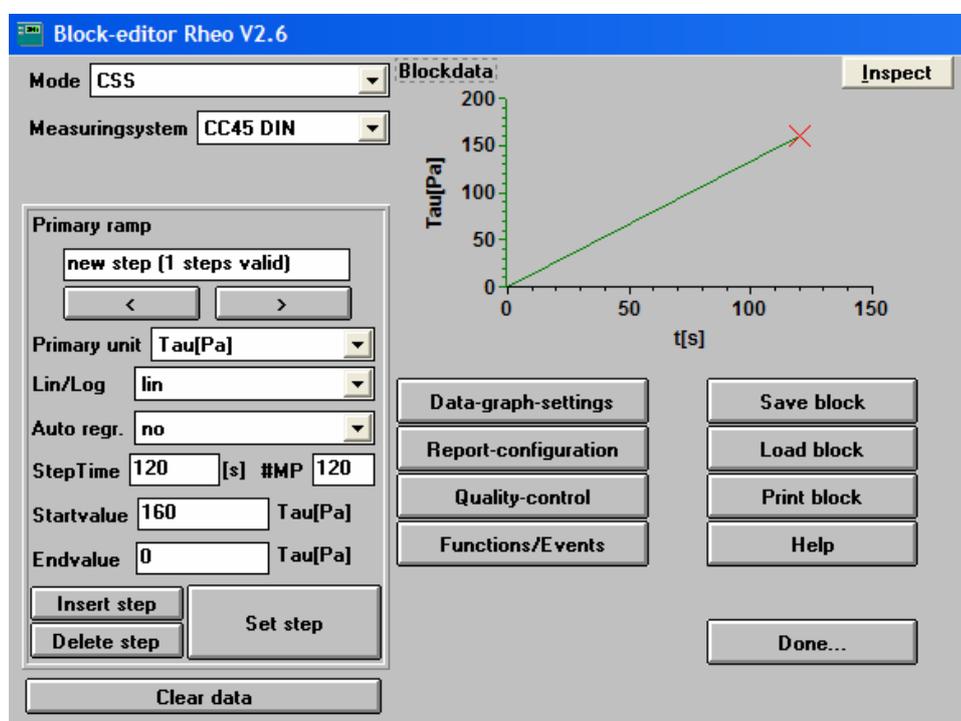


Figura 3.6. Ambiente de escolha do tipo de ensaio no *software* RHEO 2000.

Para os ensaios tipo CSS, o equipamento só pode medir até um ponto por segundo. Todos os ensaios foram de dois minutos e, portanto, com 120 pontos. A figura anterior mostra um ensaio no qual a amostra é cisalhada durante dois minutos de 0 a 160 Pa.

Foram realizados também ensaios para verificação de tixotropia. Na Figura 3.7 é mostrado um ensaio deste tipo.

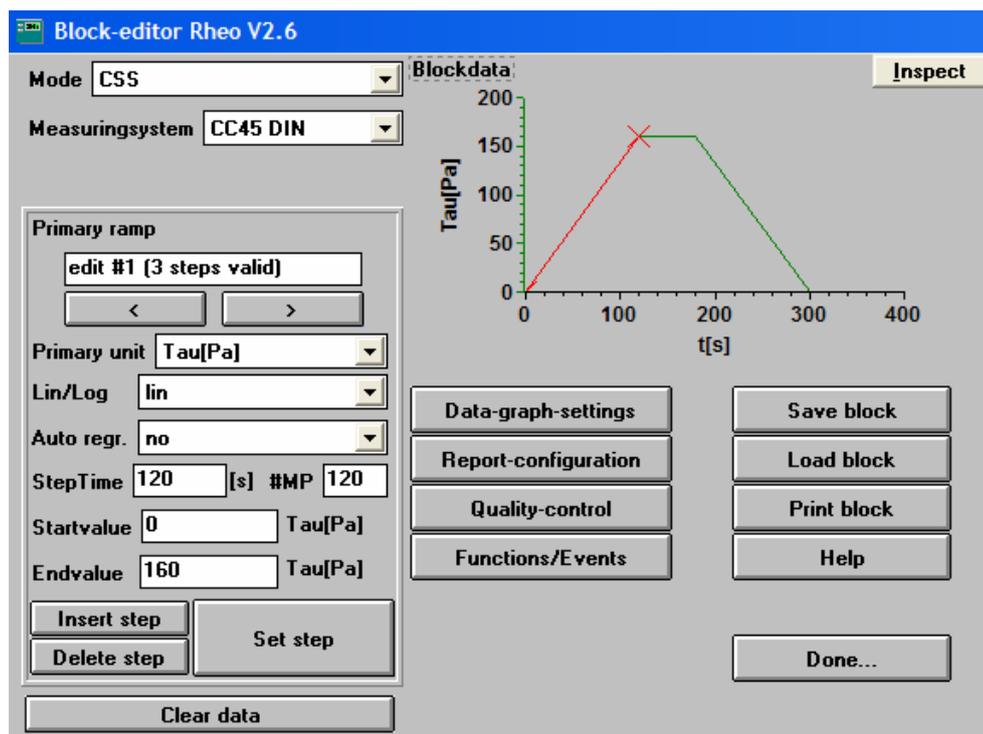


Figura 3.7. Ensaio típico utilizado para observação de tixotropia.

Todos os ensaios de tixotropia foram feitos através de um patamar de elevação de tensão por 2 minutos, seguido de um patamar de 1 minuto com tensão constante e, um patamar de decrescimento de tensão por 2 minutos.

Para a caracterização reológica dos géis de Carbopol 940, estudou-se a sensibilidade com as variações de pH, concentração e temperatura, bem como a existência de tixotropia. Os detalhes são mostrados no Capítulo 5.

O equipamento não apresenta boa sensibilidade para taxas de deformação da ordem de 1% do valor máximo que se pode atingir para cada *spindle*. Assim, todos os ensaios passaram por uma filtragem dos pontos iniciais. Na Tabela 3.1 são mostradas as características técnicas de cada *spindle*.

Tabela 3.1. Faixas de operação dos *spindles* (Brookfield Viscometers, 1998).

Variável	<i>Spindles</i>				
	CC 48	CC 45	CC 25	CC 14	CC 8
$\dot{\gamma}$ (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	0.672 - 500	3.60 - 3000

Os únicos *spindles* utilizados foram o CC 48 e o CC 45. No primeiro, a filtragem foi feita para os pontos com taxa de deformação menor do que  $41.14 \text{ s}^{-1}$ , já para o segundo, a filtragem foi para os primeiros  $10.32 \text{ s}^{-1}$ . Após a filtragem, utiliza-se o *software* para obter-se uma regressão e, assim, os parâmetros reológicos de um dado modelo. Pode-se optar por seis modelos (Newtoniano, Ostwald, Bingham, Casson, SteigerOry e Herschel-Bulkley). Na Figura 3.8, é mostrada uma curva obtida em um ensaio e a regressão utilizando-se o modelo de Herschel-Bulkley, sem a filtragem dos primeiros pontos.

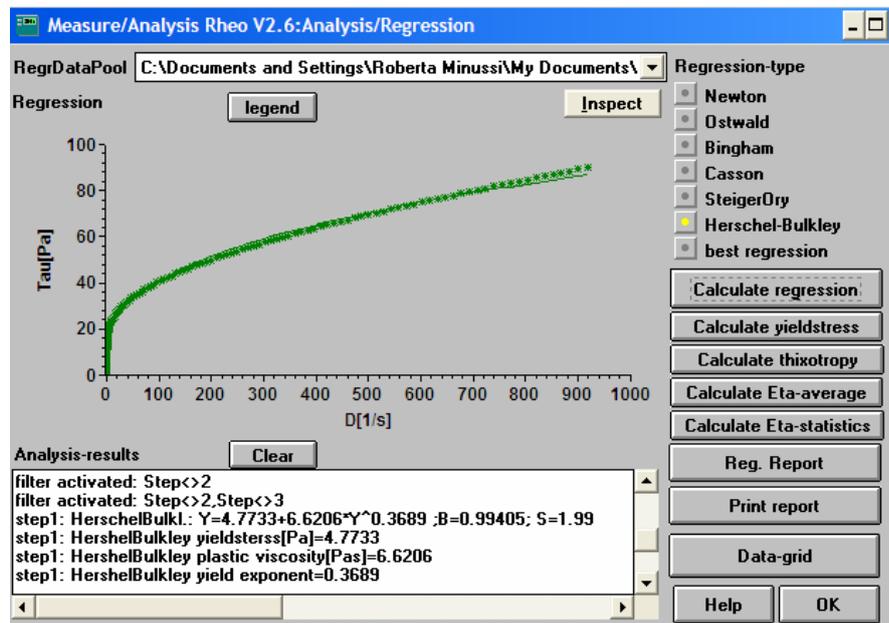


Figura 3.8. Resultado da regressão de um ensaio de amostra de Carbopol 940 sem filtragem dos primeiros pontos.

As incertezas foram obtidas segundo a metodologia apresentada por Abernethy *et al.* (1985), Moffat (1988) e SBM (2002). Primeiramente, listam-se todas as fontes de incerteza. Para cada uma delas, calcula-se a incerteza-padrão:

$$u_p = \frac{s}{\sqrt{N}} \tag{3.3}$$

em que  $s$  é o desvio-padrão e  $N$  é o número de amostras. O desvio-padrão é igual a:

$$s = \sqrt{\frac{\sum(\bar{X} - x)^2}{G}} \tag{3.4}$$

em que:

$\bar{X}$  é o valor médio da medida;

$x$  é o valor de cada medição; e

$G$  é o grau de liberdade ( $G = N - 1$ ).

Calcula-se então a incerteza combinada que leva em conta todas as fontes de incertezas calculadas anteriormente:

$$u_c = \sqrt{(u_{p_1})^2 + (u_{p_2})^2 \dots (u_{p_{N_{inc}}})^2} \quad (3.5)$$

em que  $N_{inc}$  é o número de fontes de incerteza.

E, assim, a incerteza total ou expandida é dada por:

$$u_t = Ku_c \quad (3.6)$$

em que  $K$  é o fator de abrangência ou coeficiente de Student.

Este fator está associado ao número de amostras de cada fonte de incerteza e, da probabilidade utilizada (aqui será adotada 95%). Se o número de amostras de cada fonte for maior do que 5, adota-se  $K = 2.0$ . 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, dado por:

$$G_{efe} = \frac{u_c^4}{\sum_{i=1}^{N_{inc}} \frac{u_{p_i}^4}{G_i}} \quad (3.7)$$

De posse do  $G_{efe}$  utiliza-se 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 de 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 reômetro (3%). A temperatura em que as amostras foram submetidas foi controlada pelo aparelho de banho térmico. Os valores de temperatura foram obtidos de medidas diretas e, portanto, adotou-se a incerteza do equipamento (0.1 °C). O erro no pH foi obtido através de 10 amostras e, portanto, seguindo o método acima (incerteza do pHmetro igual a 0.05) e o erro na concentração é uma combinação das medidas diretas das massas dos produtos utilizados. Os erros obtidos nos cálculos de todas as concentrações de Carbopol foram muito pequenos e adotou-se um valor único igual a  $10^{-4}$  g/g.

Primeiramente, preparou-se uma amostra de Carbopol com concentração de  $0.13 \pm 10^{-4} \%$ . A amostra foi neutralizada chegando-se a um pH de  $6.726 \pm 0.197$ . Do total, 10 amostras foram ensaiadas numa temperatura de  $22 \pm 0.5 \text{ }^\circ\text{C}$ . Os parâmetros de Herschel-Bulkley são mostrados na Tabela 3.2.

**Tabela 3.2. Parâmetros de Herschel-Bulkley e incertezas-padrão.**

amostra	$\tau_c$ (Pa)	$k$ (Pa.s <sup>n</sup> )	$n$
1	40.0954	6.9981	0.4497
2	38.1415	7.4796	0.4363
3	39.8678	7.7197	0.4359
4	40.4687	8.6802	0.4222
5	39.2366	8.2364	0.4259
6	40.6109	7.0622	0.4449
7	44.2677	5.2138	0.484
8	41.0046	6.4972	0.4546
9	39.5394	7.0897	0.4452
10	35.1093	7.2093	0.4383
média	39.8342	7.2186	0.4437
$s$	2.30302	0.9499	0.0173
$u_p$	nominal	0.72828	0.3004
	(%)	1.83	4.16

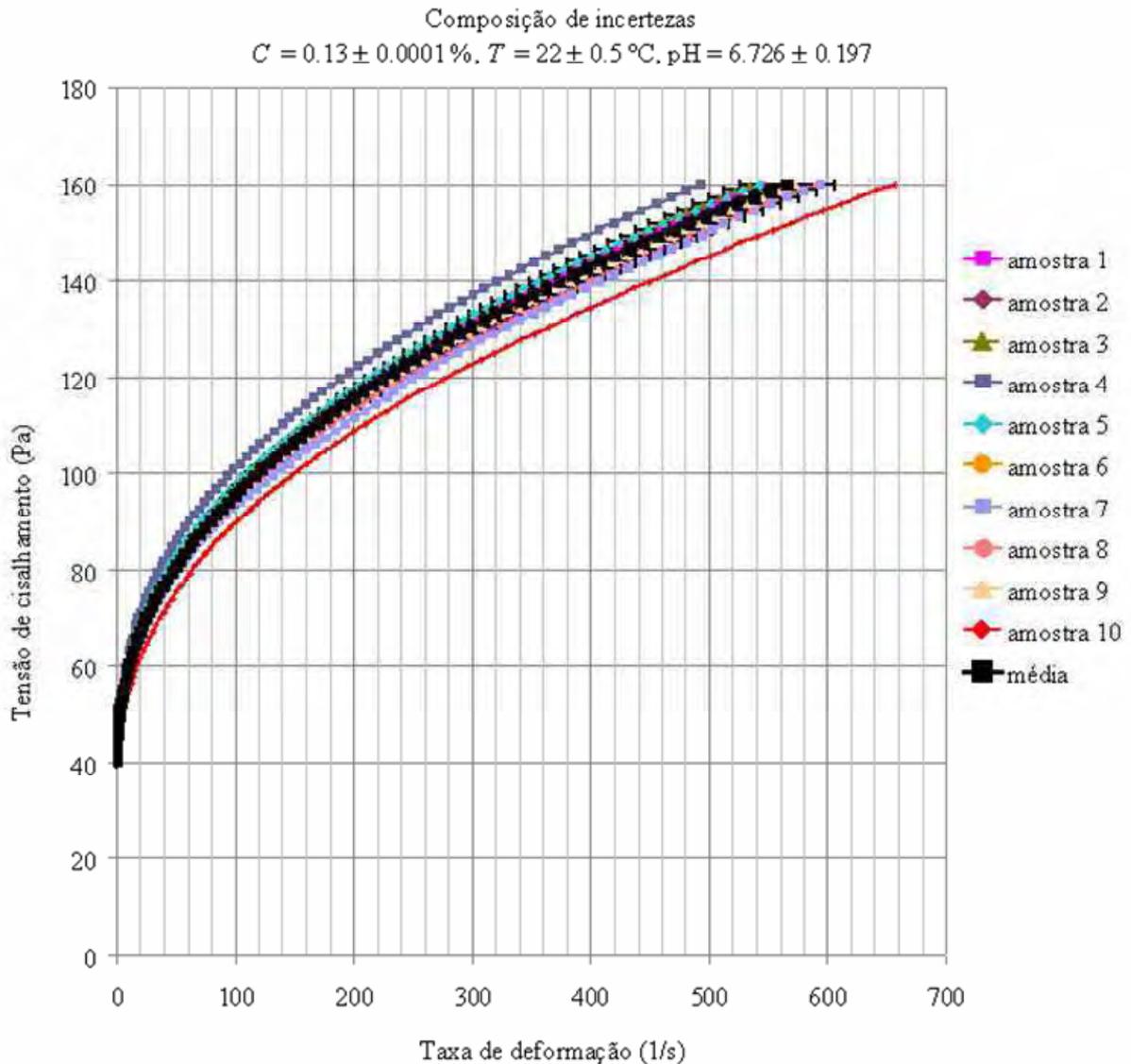
Pela Tabela 3.2, observa-se que as maiores incertezas ocorrem com o parâmetro  $k$ . Isto se deve ao fato da relação de Herschel-Bulkley ser não-linear e o parâmetro ser uma variável de ajuste, que leva consigo a incerteza dos demais parâmetros. Para composição da incerteza total, optou-se pelo uso da maior incerteza relacionada à tensão crítica e, portanto, igual a 1.83%. Assim, de (3.5) e (3.6):

$$u_c = \sqrt{u_{i-p}^2 + u_e^2} = \sqrt{1.83^2 + 3^2} = 3.51\% \quad (3.8)$$

$$u_t = 7.026\% \quad (3.9)$$

A incerteza total calculada é de 7%. Nos demais ensaios, a incerteza adotada será sempre este valor, a não ser quando maior.

As respectivas curvas reométricas são mostradas na Figura 3.9.



**Figura 3.9.** Curvas reométricas de 10 amostras de Carbopol 940 em conjunto com a barra de incertezas com variação de 7% utilizadas para determinação das incertezas experimentais.

Foi realizado também um ensaio para previsão de erros sistemáticos. Uma mistura de água com açúcar foi feita e a viscosidade obtida experimentalmente foi comparada a um valor fornecido por Perry *et al.* (1973).

A amostra é de  $59.999 \pm 0.003\%$  de açúcar em água e a mistura foi mantida a  $10 \pm 0.1\text{ }^\circ\text{C}$ . A viscosidade, segundo a literatura deveria ser de  $0.1139\text{ Pa}\cdot\text{s}$ . A Tabela 3.3 mostra os resultados de 5 amostras ensaiadas.

**Tabela 3.3. Valores da viscosidade de mistura de água com açúcar ( $C = 59.999 \pm 0.003 \%$ ,  $T = 10 \pm 0.1 \text{ }^\circ\text{C}$ ).**

amostra	$\mu$ (Pa.s)	
1	0.11096	
2	0.11181	
3	0.11301	
4	0.11203	
5	0.11196	
média	0.11195	
$s$	$7.297 \cdot 10^{-4}$	
$u_p$	nominal	$3.26 \cdot 10^{-4}$
	(%)	0.29

Pela precisão do equipamento e, lembrando que a amostra em questão apresenta uma viscosidade muito baixa, pode-se desprezar os erros sistemáticos.

## 4 MODELAGEM NUMÉRICA

Para obtenção dos resultados numéricos, utilizou-se um código comercial, o CFX 5. Neste Capítulo é mostrado como foram feitas essas simulações (baseado nas Documentações – CFX, 2005 – a; b; c; d).

### 4.1 EQUAÇÕES

A introdução da reologia não-Newtoniana modifica a equação da quantidade de movimento.

- Conservação da massa:

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

- Equação da quantidade de movimento linear:

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

em que  $\eta$  é a viscosidade aparente,  $\bar{\dot{\gamma}} = \frac{1}{2} (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)$  é o tensor taxa de deformação e  $\bar{S}$  é o termo fonte. Chamando o segundo invariante do tensor taxa de deformação de  $\dot{\gamma}_{II}$  e adotando o modelo bidimensional, tem-se que:

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

ou

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

Adotando o modelo de Herschel-Bulkley (equação 2.20) e, como  $\tau_{ij} = 2\eta \dot{\gamma}_{ij}$ , tem-se:

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

Substituindo (4.4) em (4.5):

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

Assim, a equação da quantidade de movimento torna-se igual a:

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

A equação anterior é resolvida pelo *software*. Esta é expandida e mostrada no Apêndice B.

## 4.2 TRATAMENTO DO PROBLEMA MULTIFÁSICO

Quando se tem um problema multifásico e utiliza-se modelagem Euleriana, pode-se escolher entre um modelo homogêneo ou não-homogêneo. Neste trabalho, fez-se a primeira opção.

Neste tipo de modelagem, apenas um campo de escoamento é resolvido e o que diferencia um fluido de outro é a fração volumétrica, a massa específica e a viscosidade. Assim, a equação da quantidade de movimento torna-se igual a:

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

em que:

$$\rho = \sum_{f=1}^N V F_f \rho_f, \quad \bar{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{f=1}^N V F_f \rho_f \bar{u}_f, \quad \Gamma = \sum_{f=1}^N V F_f \Gamma_f, \quad \eta = \sum_{f=1}^N V F_f \eta_f, \quad f \text{ designa cada uma das}$$

fases e  $N$  é o número total destas.

E, a equação da conservação da massa torna-se:

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

em que  $\bar{S}_f$  é um termo fonte de massa e  $\sum_f \Gamma_{f1f2}$  é um termo de transferência de massa entre as fases  $f1$  e  $f2$  (que não é usado aqui).

Com relação ao algoritmo de reconstrução, a documentação não é clara. Ao que tudo indica, faz-se apenas uma interpolação gráfica do campo de frações volumétricas.

## 4.3 ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO

As equações diferenciais do modelo matemático são resolvidas através do Método dos Volumes Finitos, que consiste basicamente em integrar estas equações em um volume de

controle finito, avaliar as derivadas ainda presentes nas equações através de uma função de interpolação, e depois linearizar os termos de ordem superior. Os termos transientes 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 é realizado de forma acoplada, sendo que há apenas uma matriz contendo as informações das variáveis das equações do movimento.

Uma vez que as equações tenham sido obtidas, estas 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.

#### 4.4 PRÉ-PROCESSAMENTO

As simulações foram feitas utilizando aproximação bidimensional. Para tal, fez-se um domínio em formato de paralelepípedo, com 1900 mm de comprimento, 145 mm de altura e 5 mm de largura. Utilizou-se uma malha regular de 5 mm em todos os lados, ou seja, volumes cúbicos de 5 mm. Totalizaram-se assim 11020 células. Observe que desta forma têm-se apenas um volume na direção transversal ( $x_3$ ), conseguindo-se assim a bidimensionalidade requerida. A seguir, tem-se um desenho esquemático da malha (Figura 4.1).

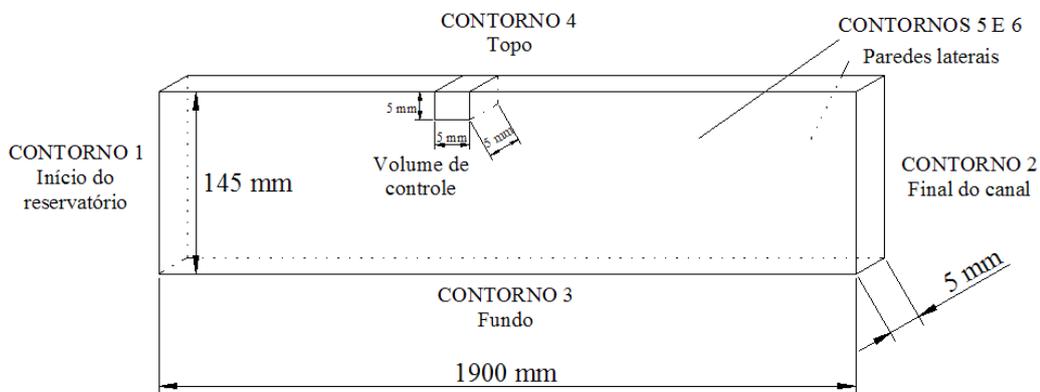


Figura 4.1. Desenho esquemático da malha utilizada nas simulações numéricas.

Na Figura 4.2 é mostrado o ambiente de pré-processamento do *software*.

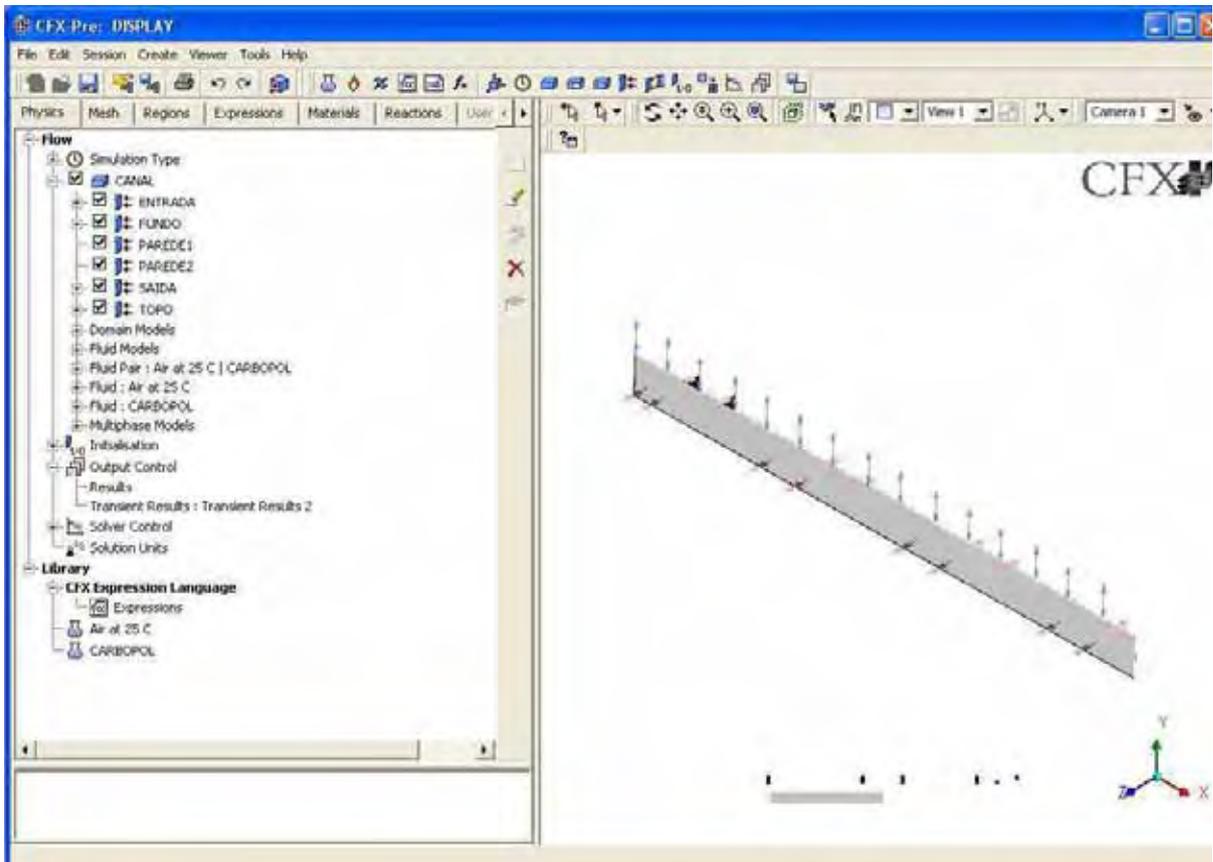


Figura 4.2. Ambiente de pré-processamento.

Na Tabela 4.1. são mostradas as condições de contorno.

Tabela 4.1. Condições de contorno.

Contorno	Condição
1, 2 e 3	Parede, não deslizamento: $u_1 = 0$ e $u_2 = 0$
4	Aberto: Escoamento perpendicular ao contorno, pressão atmosférica, $VF_{carb} = 0$
5 e 6	Condição de simetria

Para criação das condições iniciais, utilizou-se a função  $STEP[X]$ . Esta retorna o valor 1, se  $X$  for positivo, 0.5 se  $0 < X < 1$  e 0, se  $X$  for negativo. Ainda, chamando, o comprimento e

altura inicial do Carbopol no reservatório de  $l_0$  e  $h_0$ , respectivamente, tem-se que o campo de frações volumétricas inicial de Carbopol ( $VF_{carb}$ ) é dado por:

$$VF_{carb} = STEP[l_0 - x_1]STEP[h_0 - x_2] \quad (4.10)$$

E, portanto, o campo de frações volumétricas do ar se dá como:

$$VF_{ar} = 1 - VF_{carb} \quad (4.11)$$

A força motriz do escoamento se dá pela diferença de pressão existente. O campo de pressão inicial é dado por:

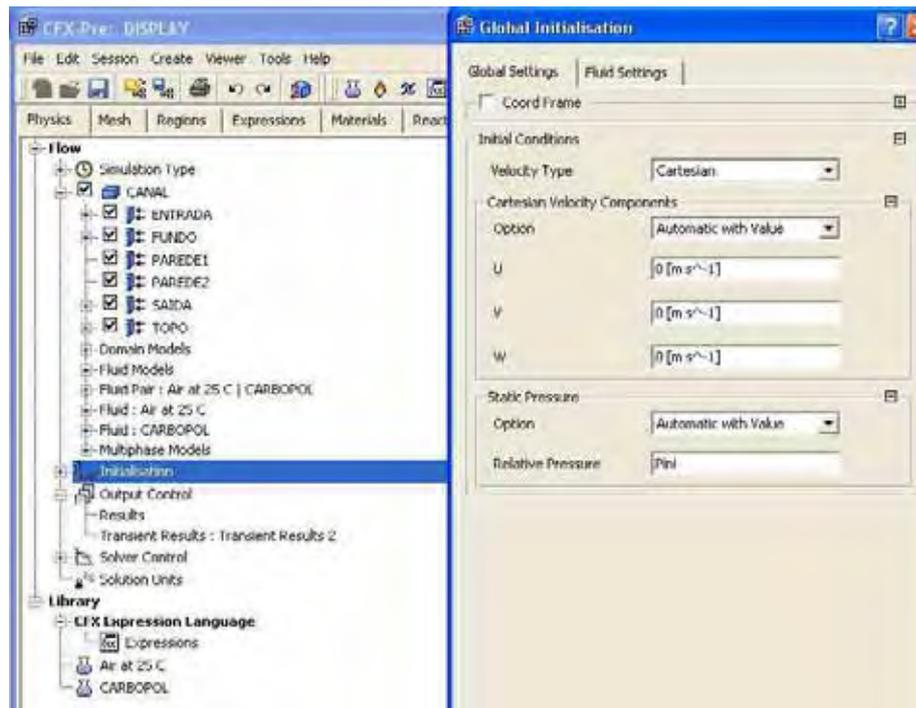
$$p_{ini} = \rho_{carb} g_2 VF_{carb} (h_0 - x_2) \quad (4.12)$$

As condições iniciais são resumidas na Tabela 4.2.

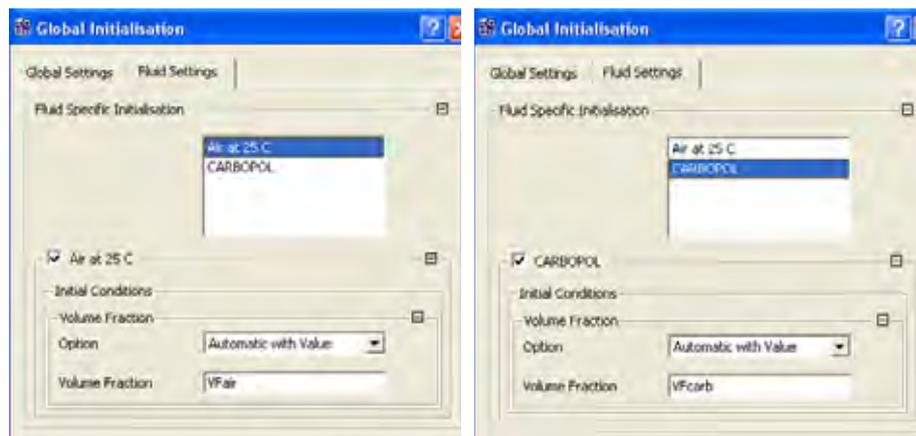
**Tabela 4.2. Condições iniciais.**

Variável	Condição
Velocidade	0 (em todas as direções)
Pressão	$p_{ini}$
Fração Volumétrica	$VF_{ar}$ e $VF_{carb}$

O ambiente de escolha das condições iniciais é mostrado na Figura 4.3.



(a)



(b)

(c)

Figura 4.3. Ambiente de escolha das condições iniciais. (a) velocidade e pressão; (b) fração volumétrica do ar; (c) fração volumétrica do Carbopol.

O valor da viscosidade aparente do Carbopol foi introduzida no código, utilizando-se a equação (4.6). Nesta, incluiu-se também limitantes superior e inferior para as taxas de deformação e, portanto:

$$\eta = \eta_{carb} = \tau_c \left\{ \max[\dot{\gamma}_{menor}, \alpha] \right\}^{-1} + k \left\{ \min[\dot{\gamma}_{maior}, (\alpha + \dot{\gamma}_{menor})] \right\}^{n-1} \quad (4.13)$$

em que:

$\dot{\gamma}_{menor}$  e  $\dot{\gamma}_{maior}$  são os limites impostos às taxas de deformação.

Observe que várias equações foram introduzidas no pré-processamento. O ambiente de criação destas é mostrado na Figura 4.4.

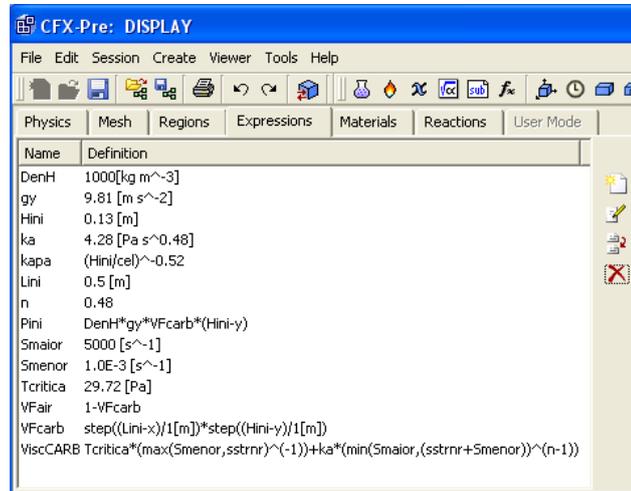


Figura 4.4. Ambiente de criação de novas expressões.

Todas as simulações foram feitas utilizando-se passo de tempo igual a 0.001 s, tempo total de simulação de 1.5 s e critério de convergência de resíduo máximo de  $10^{-4}$ . Por vezes, as simulações foram modificadas durante sua execução para melhorar a performance, modificando-se o critério e o controle de convergência.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste Capítulo são mostrados a análise reométrica do Carbopol 940 e os resultados numéricos e experimentais do escoamento de Carbopol e de soluções de glicose devido ao rompimento de barreira.

### 5.1 CARACTERIZAÇÃO REOLÓGICA DO CARBOPOL 940

As amostras foram feitas seguindo o procedimento mostrado no Capítulo 3. Foram realizados ensaios de reometria variando-se pH, temperatura e concentração, totalizando-se 18 ensaios. A tabela 5.1 resume os dados destes.

**Tabela 5.1. Resumo dos ensaios de caracterização reométrica.**

Tipo de ensaio	$C \pm 10^{-4}$ (%)	pH	$T \pm 0.1$ (°C)	Nome do ensaio
pH neutralizado ( $\approx 7.0$ ), variação da temperatura e da concentração	0.077	$7.796 \pm 0.112$	35	Ensaio carac. 1
			25	Ensaio carac. 2
	0.096	$7.123 \pm 0.125$	35	Ensaio carac. 3
			25	Ensaio carac. 4
	0.115	$6.722 \pm 0.100$	35	Ensaio carac. 5
			25	Ensaio carac. 6
	0.134	$6.735 \pm 0.100$	35	Ensaio carac. 7
			25	Ensaio carac. 8
	0.154	$6.693 \pm 0.106$	35	Ensaio carac. 9
			25	Ensaio carac. 10
	0.174	$6.358 \pm 0.153$	35	Ensaio carac. 11
			25	Ensaio carac. 12
Temperatura constante, variação do pH e da concentração	0.115	$5.372 \pm 0.129$	30	Ensaio carac. 13
		$6.931 \pm 0.018$		Ensaio carac. 14
		$8.573 \pm 0.118$		Ensaio carac. 15
	0.135	$5.387 \pm 0.101$	30	Ensaio carac. 16
		$6.893 \pm 0.114$		Ensaio carac. 17
		$8.455 \pm 0.116$		Ensaio carac. 18

Na Tabela 5.2 são mostrados os resultados das regressões de Herschel-Bulkley obtidas para os ensaios de influência da concentração e da temperatura (ensaios de caracterização de 1 a 12).

**Tabela 5.2. Parâmetros de Herschel-Bulkley obtidos para 6 amostras de Carbopol com concentrações diferentes e duas temperaturas.**

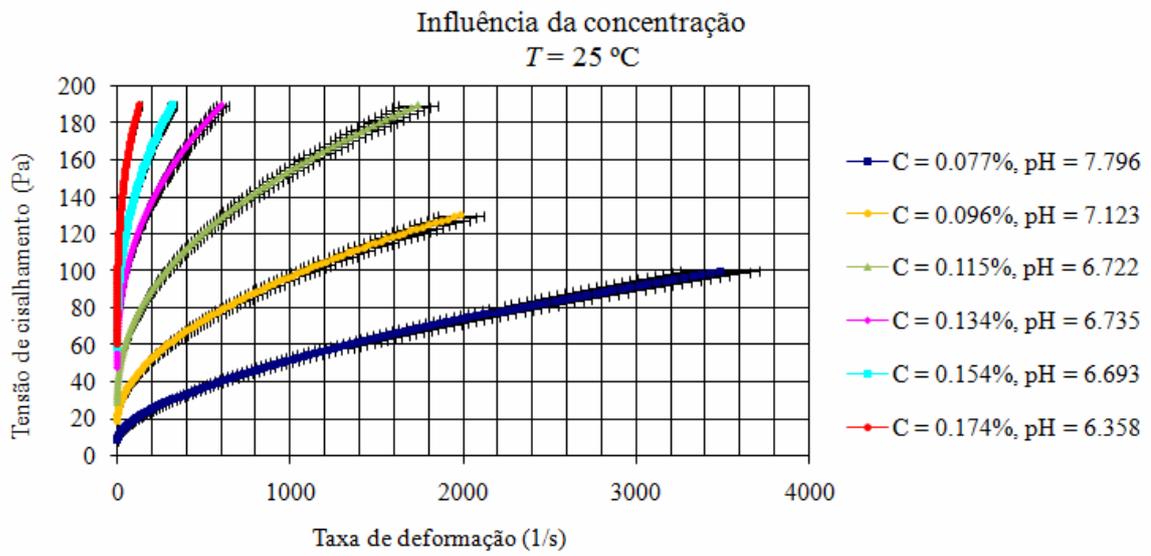
$C \pm 10^{-4}$ (%)	$T \pm 0.1$ (°C)	amostra	$\tau_c$ (Pa)	$k$ (Pa.s <sup>n</sup> )	$n$
0.077	25	1	8.409	0.664	0.603
		2	8.380	0.695	0.598
		3	8.151	0.750	0.5910
		média	8.313	0.703	0.597
		$u_t$ (%)	6.31	9.27	6.12
	35	1	8.855	0.552	0.612
		2	9.394	0.513	0.622
		3	9.581	0.650	0.600
		média	9.277	0.572	0.611
		$u_t$ (%)	7.61	15.45	6.37
0.096	25	1	18.017	2.408	0.508
		2	16.553	2.401	0.507
		3	17.630	2.178	0.517
		média	17.399	2.329	0.511
		$u_t$ (%)	7.83	8.84	6.11
	35	1	19.054	2.231	0.510
		2	18.073	2.188	0.510
		3	19.499	2.127	0.515
		média	18.875	2.182	0.512
		$u_t$ (%)	7.48	6.61	6.04
0.115	25	1	26.464	6.408	0.433
		2	28.89	5.473	0.453
		3	27.274	5.661	0.451
		média	27.543	5.848	0.446
		$u_t$ (%)	7.92	11.46	6.65
	35	1	25.680	5.429	0.444
		2	25.399	5.286	0.447
		3	27.401	4.630	0.460
		média	26.160	5.115	0.450
		$u_t$ (%)	7.67	11.34	6.38

Continua ...

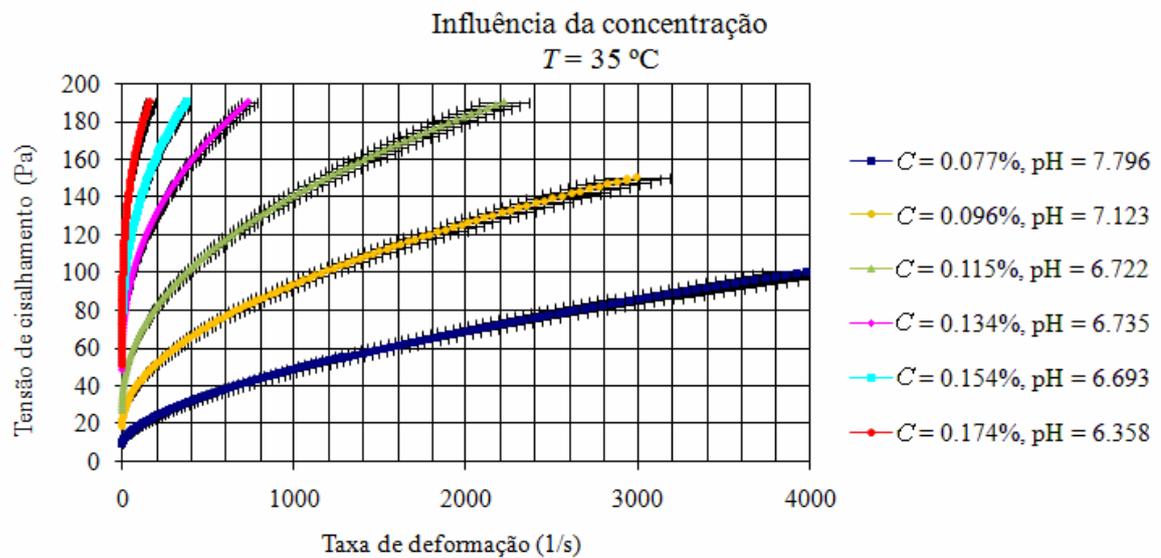
Continuação da Tab. 5.2 ...

0.134	25	1	48.198	9.443	0.421
		2	46.330	10.272	0.411
		3	46.409	10.616	0.409
		média	46.979	10.110	0.414
		$u_t$ (%)	6.54	9.13	6.29
	35	1	47.696	8.739	0.421
		2	47.898	9.2774	0.415
		3	45.873	9.825	0.406
		média	47.156	9.280	0.414
		$u_t$ (%)	6.59	9.04	6.34
0.154	25	1	56.66	12.802	0.405
		2	58.181	12.686	0.410
		3	60.684	11.072	0.424
		média	58.508	12.187	0.412
		$u_t$ (%)	7.22	10.95	6.59
	35	1	53.004	14.190	0.382
		2	53.652	14.180	0.383
		3	51.806	15.040	0.373
		média	52.821	14.470	0.379
		$u_t$ (%)	6.34	7.18	6.22
0.174	25	1	58.048	27.588	0.323
		2	64.408	21.509	0.355
		3	57.401	28.455	0.320
		média	59.952	25.851	0.333
		$u_t$ (%)	9.57	17.939	8.93
	35	1	48.748	27.918	0.309
		2	41.181	37.228	0.278
		3	58.351	25.511	0.320
		média	49.427	30.219	0.302
		$u_t$ (%)	20.98	24.39	10.289

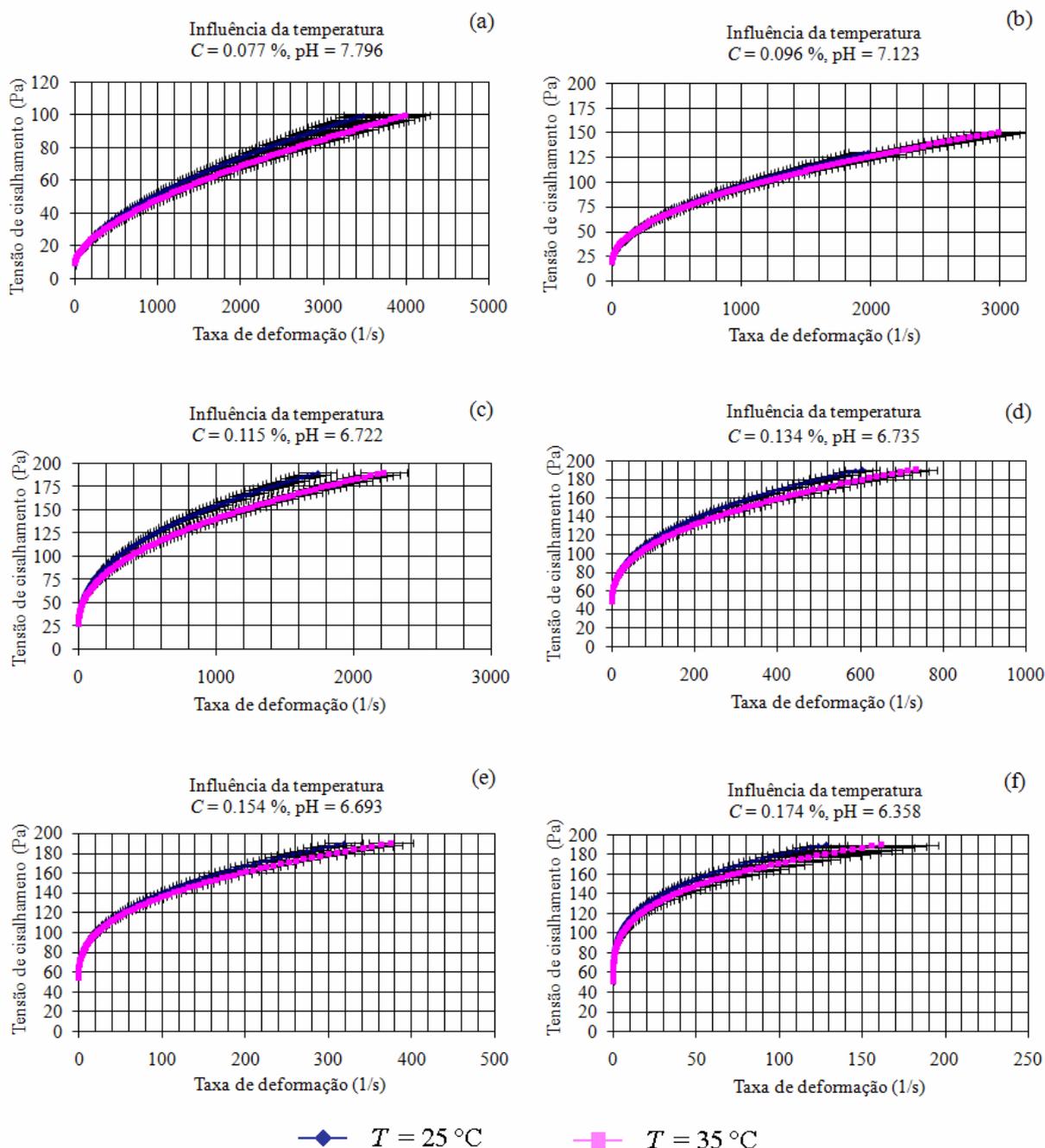
As Figuras 5.1 e 5.2 mostram a influência da concentração. A Figura 5.3 contém a influência da temperatura. Vale aqui relembrar que a incerteza total é considerada igual a 7 % salvo quando for maior.



**Figura 5.1.** Comparação dos comportamentos reológicos de 6 amostras de Carbopol com diferentes concentrações a uma temperatura de 25 °C.



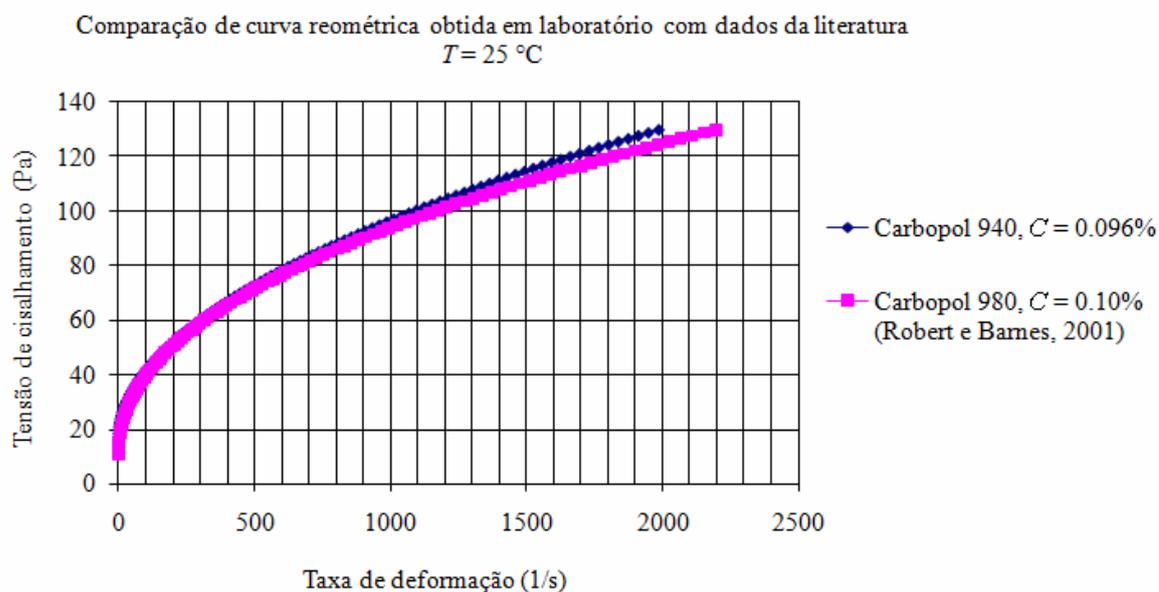
**Figura 5.2.** Comparação dos comportamentos reológicos de 6 amostras de Carbopol com diferentes concentrações a uma temperatura de 35 °C.



**Figura 5.3.** Influência da temperatura nas curvas reométricas. (a)  $C = 0.077\%$ , (b)  $C = 0.096\%$ , (c)  $C = 0.115\%$ , (d)  $C = 0.134\%$ , (e)  $C = 0.154\%$ , (f)  $C = 0.174\%$ .

Como era esperado, pequenas variações da concentração influenciam muito o comportamento do Carbopol. Já a influência da temperatura, para a faixa utilizada nesta pesquisa, não é significativa.

Para efeito de comparação, na Figura 5.4 é mostrada a curva reométrica da amostra com concentração de  $0.096 \pm 10^{-4} \%$  à temperatura de  $25 \pm 0.1 \text{ }^\circ\text{C}$  e a obtida por Robert e Barnes (2001) com o Carbopol 980, com concentração de 0.10%, à mesma temperatura.



**Figura 5.4. Comparação de curva obtida com o Carbopol 940 com outra da literatura para o Carbopol 980 (ambas neutralizadas).**

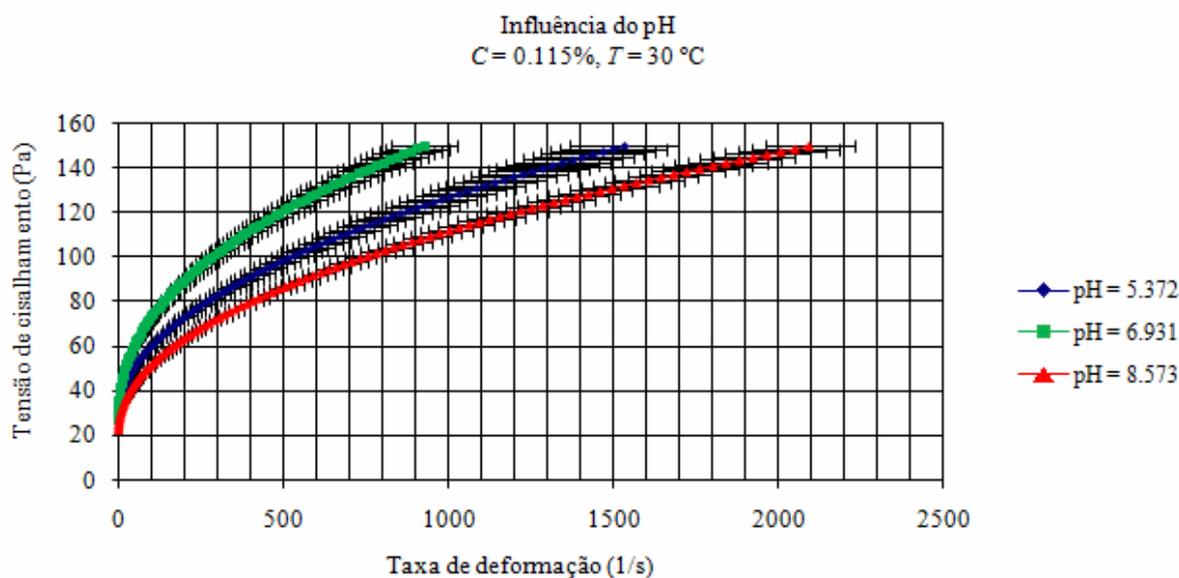
Como se pode observar, apesar de se tratar de outro tipo de Carbopol, as curvas são bem semelhantes o que atesta a qualidade dos dados do reômetro.

Na Tabela 5.3 são mostrados os resultados das regressões de Herschel-Bulkley obtidas nos ensaios de sensibilidade ao pH (ensaios de caracterização de 13 a 18).

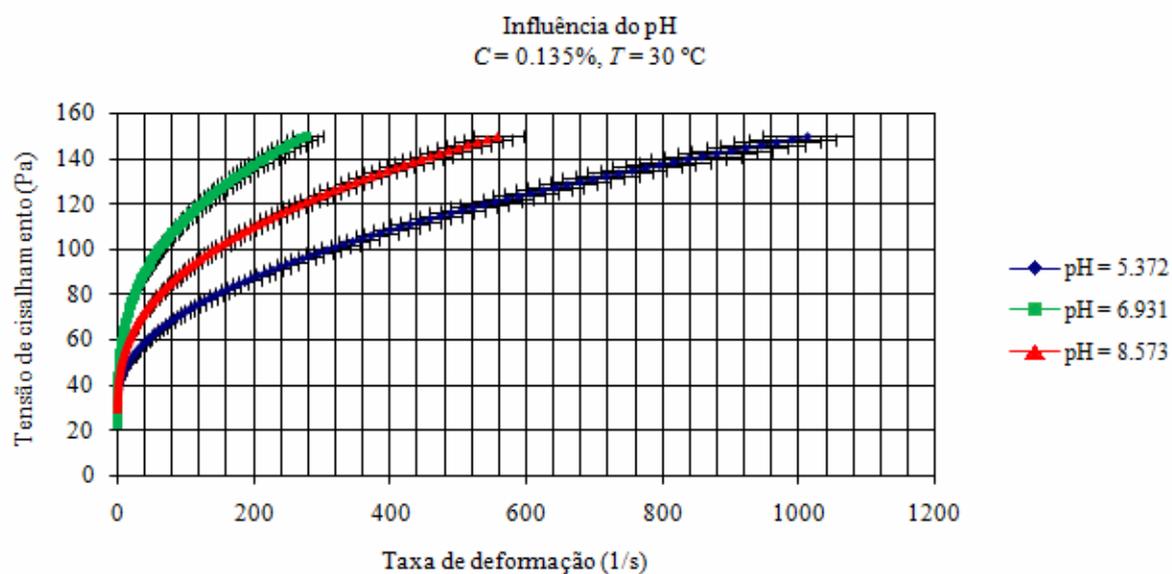
**Tabela 5.3. Parâmetros de Herschel-Bulkley obtidos para 6 amostras de Carbopol com variação de pH e concentração, à temperatura de  $30 \pm 0.1$  °C.**

$C \pm 10^{-4}$ (%)	pH	amostra	$\tau_c$ (Pa)	$k$ (Pa.s <sup>n</sup> )	$n$
0.115	$5.372 \pm 0.129$	1	27.402	3.125	0.491
		2	24.861	2.684	0.500
		3	30.666	4.608	0.466
		média	27.643	3.472	0.486
		$u_t$ (%)	13.55	34.06	7.31
	$6.931 \pm 0.018$	1	22.261	7.067	0.423
		2	26.483	6.327	0.436
		3	27.126	6.057	0.440
		média	25.290	6.483	0.433
		$u_t$ (%)	13.48	11.08	6.46
	$8.573 \pm 0.118$	1	21.562	4.172	0.456
		2	22.868	3.283	0.477
		3	20.209	2.810	0.489
		média	21.546	3.422	0.474
		$u_t$ (%)	9.32	24.08	7.24
0.135	$5.387 \pm 0.101$	1	33.835	4.407	0.474
		2	32.940	4.079	0.48
		3	32.679	4.750	0.467
		média	33.151	4.41	0.473
		$u_t$ (%)	6.36	10.63	6.21
	$6.893 \pm 0.114$	1	22.476	20.239	0.328
		2	19.373	21.937	0.319
		3	22.577	19.075	0.334
		média	21.476	20.417	0.327
		$u_t$ (%)	11.48	10.11	6.61
	$8.455 \pm 0.116$	1	28.922	10.956	0.387
		2	27.689	10.428	0.387
		3	29.438	9.570	0.395
		média	28.683	10.318	0.390
		$u_t$ (%)	7.01	9.86	6.168

Nas Figuras 5.5 e 5.6 são mostradas as curvas reométricas destes ensaios.



**Figura 5.5.** Influência do pH nas curvas reométricas para a concentração de 0.115% e temperatura de 30 °C.



**Figura 5.6.** Influência do pH nas curvas reométricas para a concentração de 0.135% e temperatura de 30 °C.

Além dos ensaios de cisalhamento simples, foram também retiradas 3 amostras de cada ensaio para observação da existência de tixotropia. Na Figura 5.7 tem-se o ensaio que apresentou o maior valor desta propriedade.

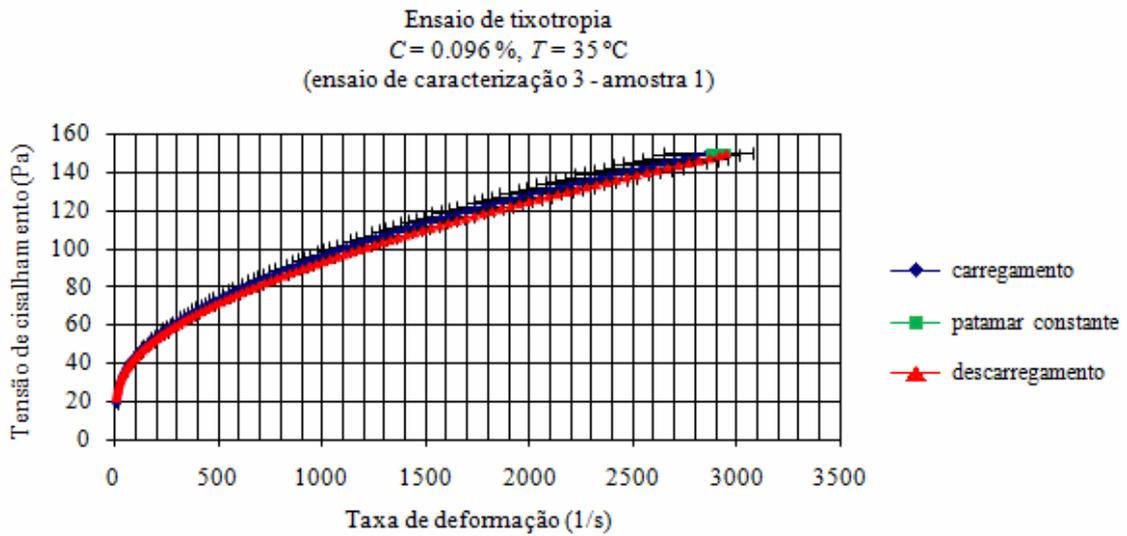


Figura 5.7. Ensaio de tixotropia com a barra de erros do carregamento.

Observe que a curva de descarregamento está dentro do intervalo de incerteza. Esta análise foi realizada em todas amostras concluindo-se que, embora presente, a tixotropia pode ser desprezada para os devidos fins deste trabalho.

Da análise dos resultados, observou-se que, para os ensaios no canal, deve-se optar por concentrações entre 0.10% e 0.14%, e que a temperatura, embora deva ser controlada, não é um parâmetro que influencie muito, quando em condições ambientes. As amostras devem ser neutralizadas e o pH bem controlado.

## 5.2 REOMETRIA DOS FLUIDOS UTILIZADOS NO CANAL

Uma série de ensaios foi feita utilizando-se o canal em modelo reduzido. Os resultados são comparados com ensaios numéricos e com resultados da literatura. Um resumo das características desses ensaios são mostradas na Tabela 5.4.

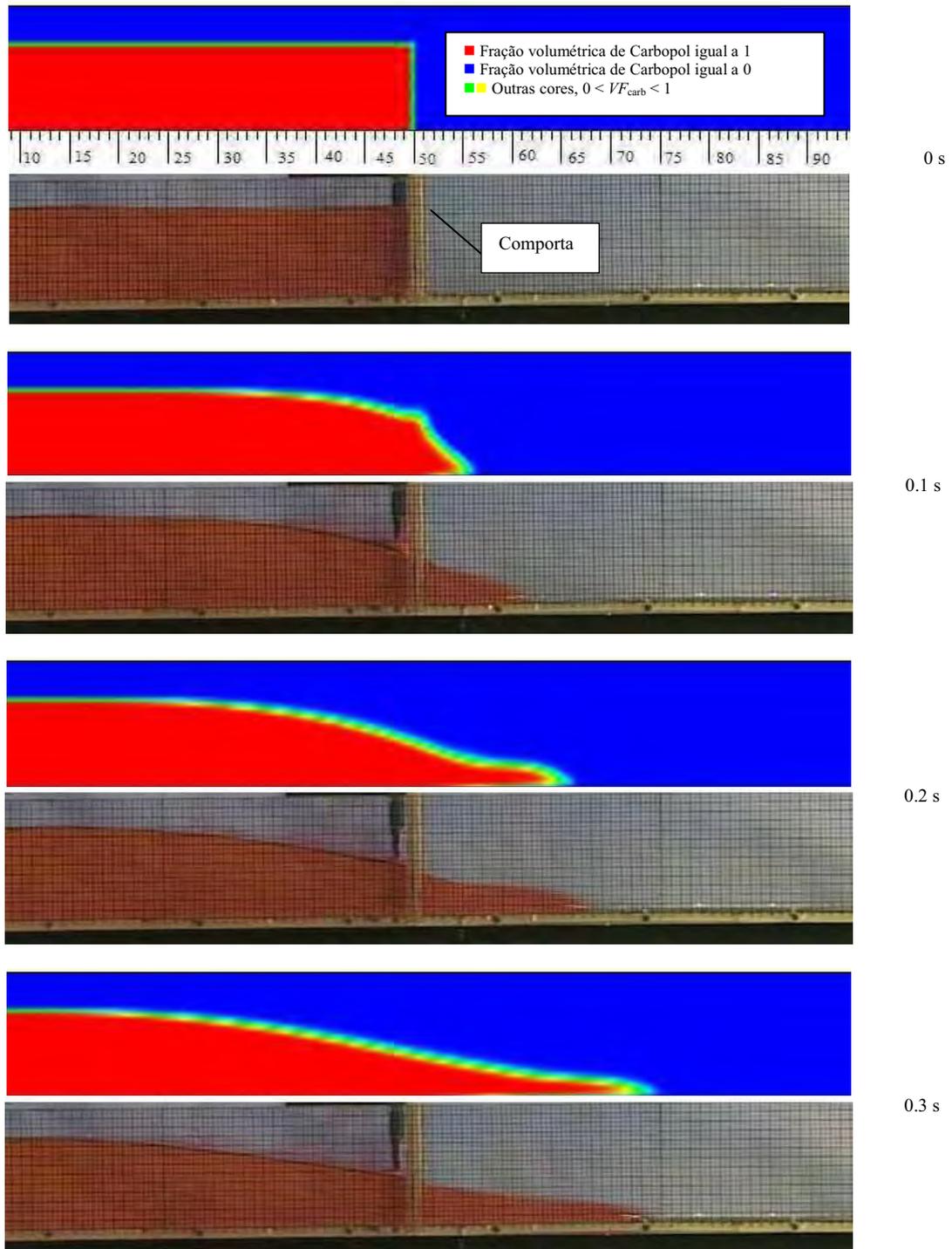
Tabela 5.4. Características dos ensaios e resultados reométricos dos fluidos utilizados no canal.

Ensaio	$h_0 \pm 0.5$ (cm)	$C$ (%)	$T \pm 0.1$ (°C)	pH	amostra	$\tau_c$ (Pa)	$k$ (Pa.s <sup>n</sup> )	$n$
1	10 e 13	$0.116 \pm 10^{-4}$	28	$7.418 \pm 0.265$	1	28.829	3.884	0.491
					2	29.556	4.046	0.484
					3	31.622	4.959	0.464
					média	30.002	4.297	0.479
					$u_t$ (%)	8.19	16.69	6.90
2	7, 10 e 13	$0.099 \pm 10^{-4}$	28	$6.945 \pm 0.140$	1	17.794	1.742	0.540
					2	18.828	1.853	0.535
					3	18.103	2.116	0.517
					média	18.242	1.904	0.531
					$u_t$ (%)	6.88	13.09	6.55
3	7, 10 e 13	$0.139 \pm 10^{-4}$	30	$7.003 \pm 0.114$	1	49.351	8.021	0.437
					2	48.723	8.348	0.434
					3	49.462	7.143	0.455
					média	49.179	7.837	0.442
					$u_t$ (%)	6.07	10.97	6.72
4	10 e 13	$0.112 \pm 10^{-4}$	30	$7.184 \pm 0.157$	1	30.693	4.514	0.472
					2	31.395	4.288	0.476
					3	32.010	4.848	0.462
					média	31.366	4.550	0.470
					$u_t$ (%)	6.472	9.33	6.28
5	7, 10 e 13	$0.139 \pm 10^{-4}$	18	$6.726 \pm 0.197$	1	38.301	6.363	0.462
					2	39.837	7.523	0.442
					3	39.371	7.902	0.436
					média	39.170	7.263	0.446
					$u_t$ (%)	6.43	14.09	6.95
6 (Newt.)	7 e 10	$0.723 \pm 10^{-3}$	18	-	1	-	$\mu = 0.206$	-
					2	-	$\mu = 0.205$	-
					3	-	$\mu = 0.204$	-
					média	-	$\mu = 0.205$	-
					$u_t$ (%)	-	$\mu = 6.03$	-

O valor da massa específica obtido foi de  $1.007 \pm 0.05 \text{ g/cm}^3$ . Por simplicidade, adotou-se igual a  $1 \text{ g/cm}^3$ . Já para a solução de glicose o valor obtido foi de  $1.285 \pm 0.05 \text{ g/cm}^3$ .

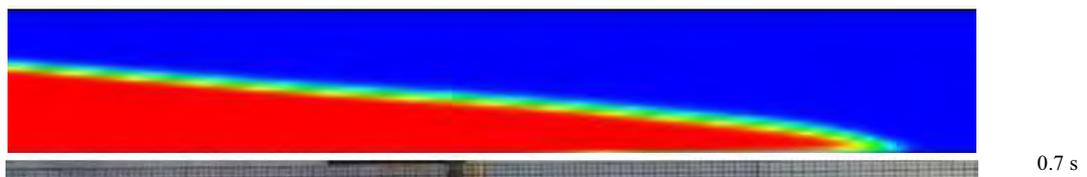
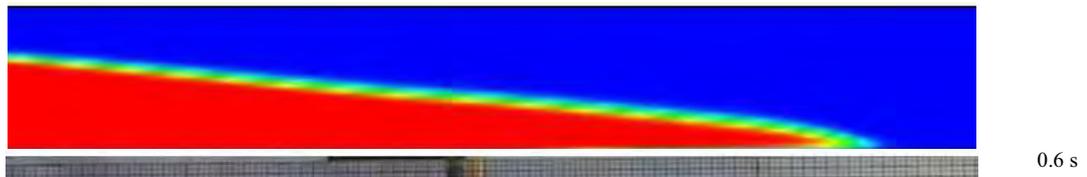
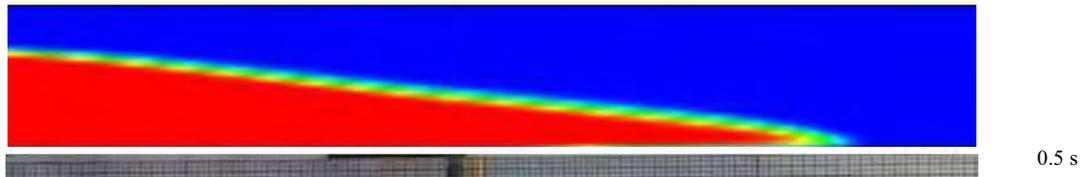
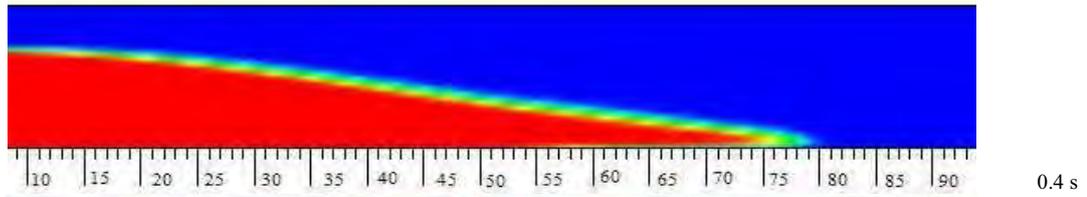
### 5.3 RUPTURA DE BARREIRA

Na Figura 5.8 é mostrada a comparação de alguns *frames* das filmagens do ensaio 1 (para  $h_0 = 10$  cm) com a simulação numérica.



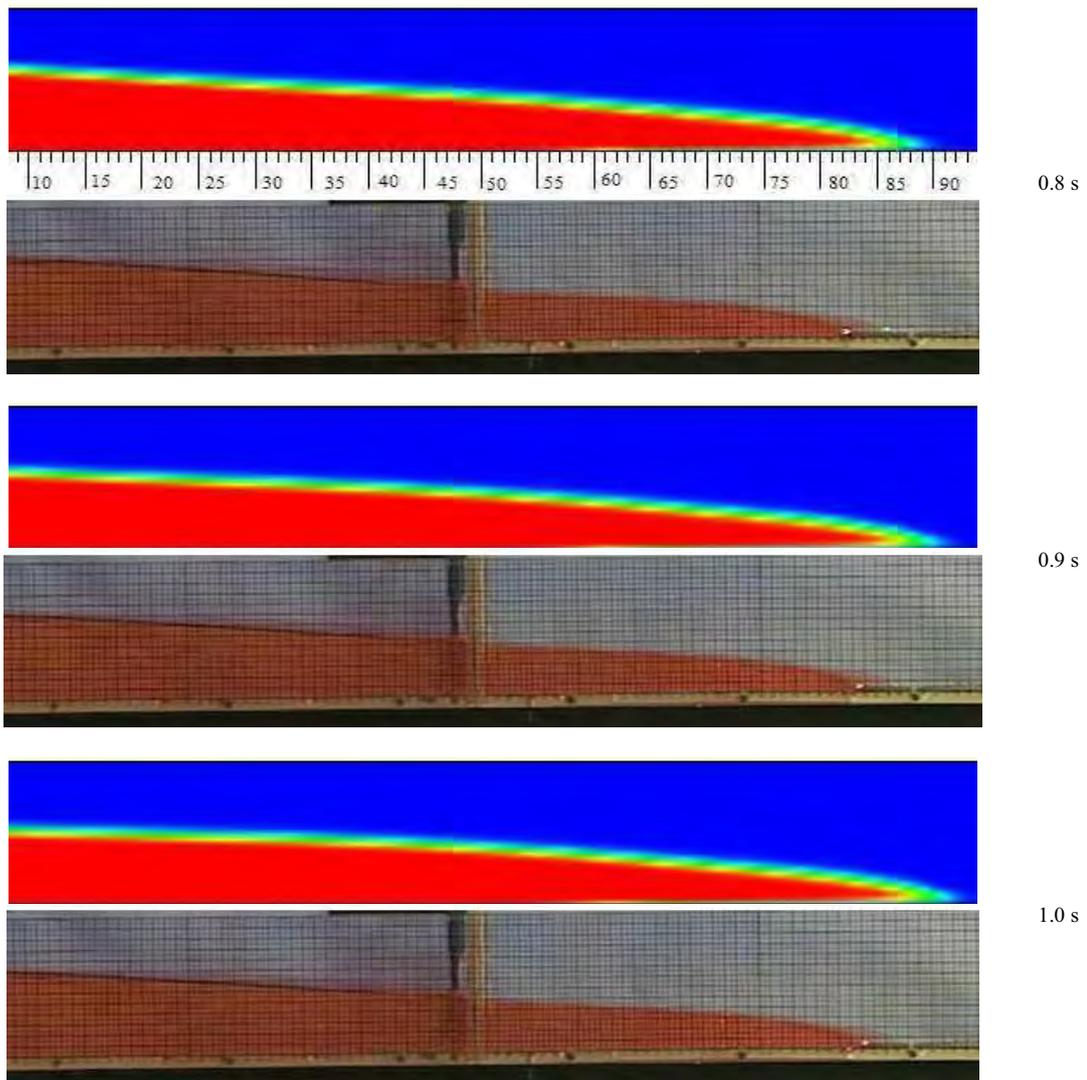
Continua ...

Continuação da Fig. 5.8 ...



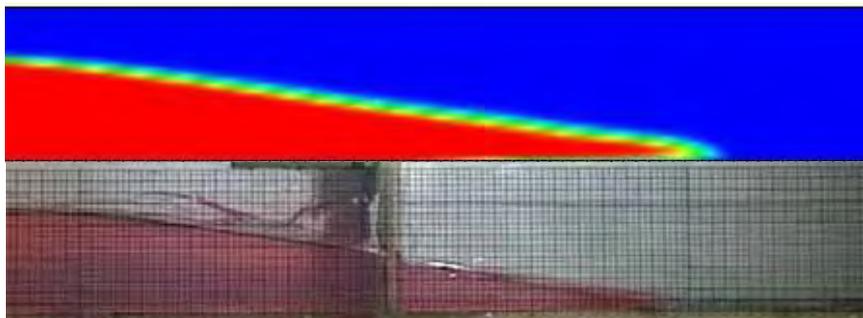
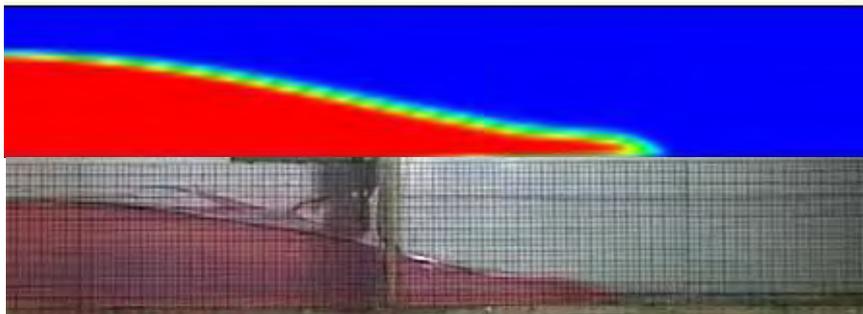
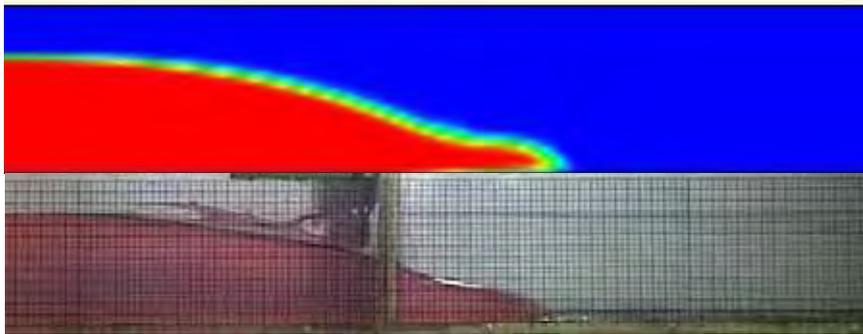
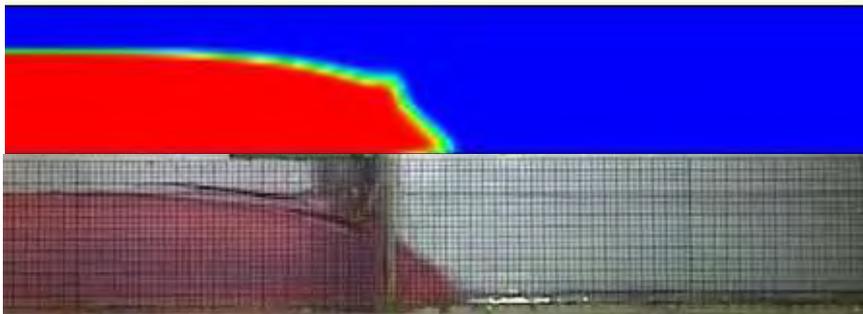
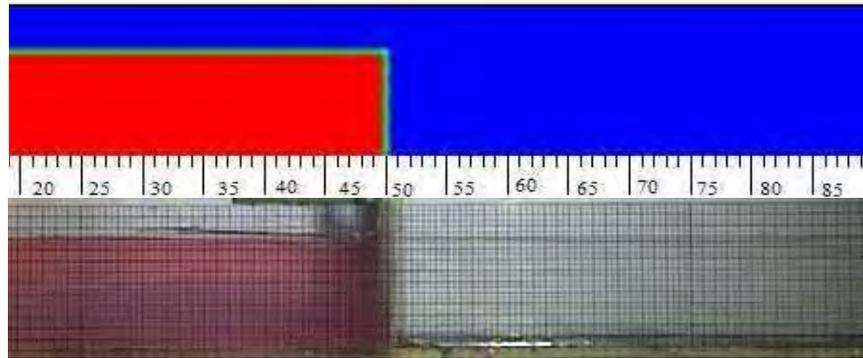
Continua ...

Continuação da Fig. 5.8 ...



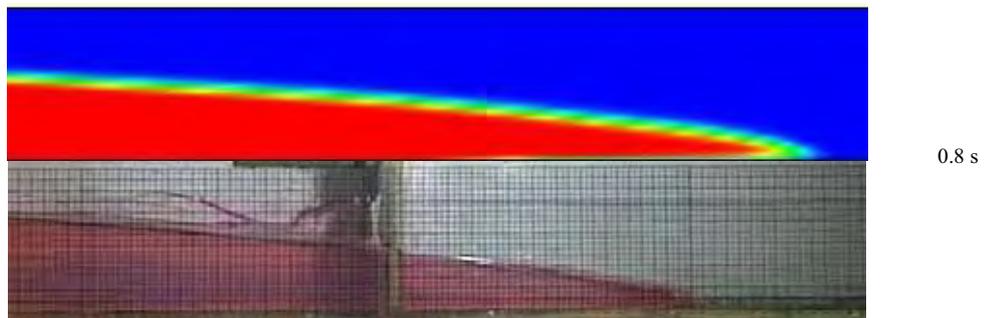
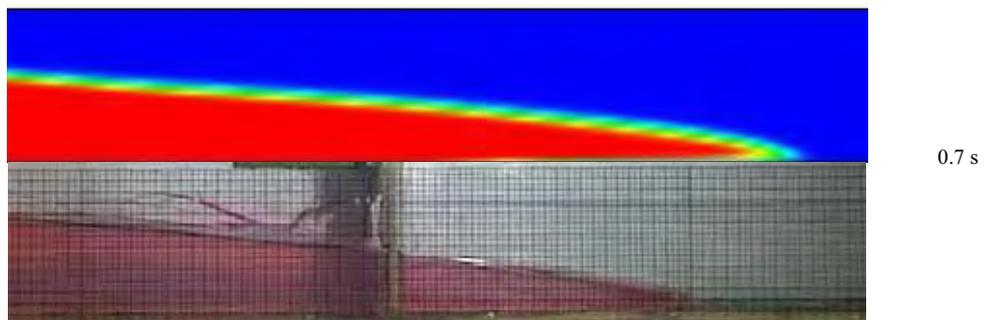
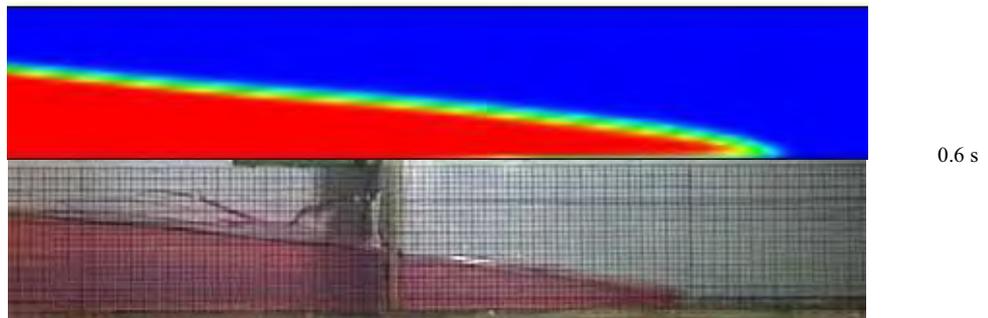
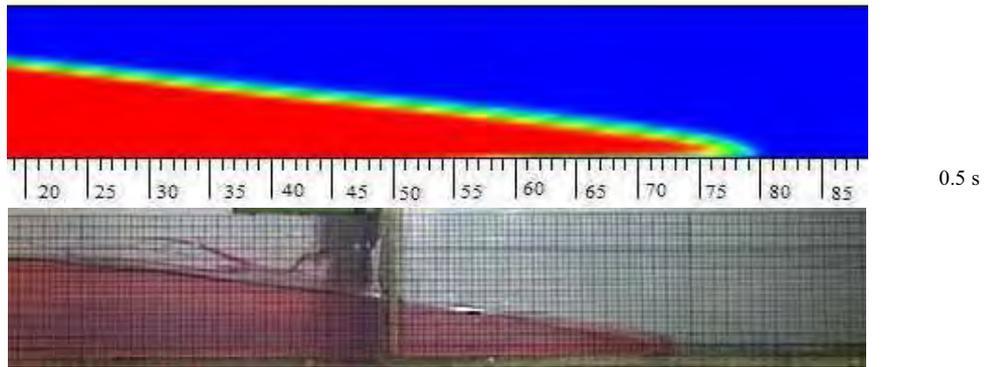
**Figura 5.8.** Comparação numérico-experimental do ensaio 1 com altura inicial de 10 cm.

Através da análise das imagens, verificou-se uma pequena inclinação no canal ( $0.13^\circ$  ascendente). O problema persistiu nos ensaios 2, 3 e 4, sendo solucionado nos ensaios 5 e 6. Na Figura 5.9 é mostrada a comparação numérico-experimental para o ensaio 5 e  $h_0 = 10$  cm.



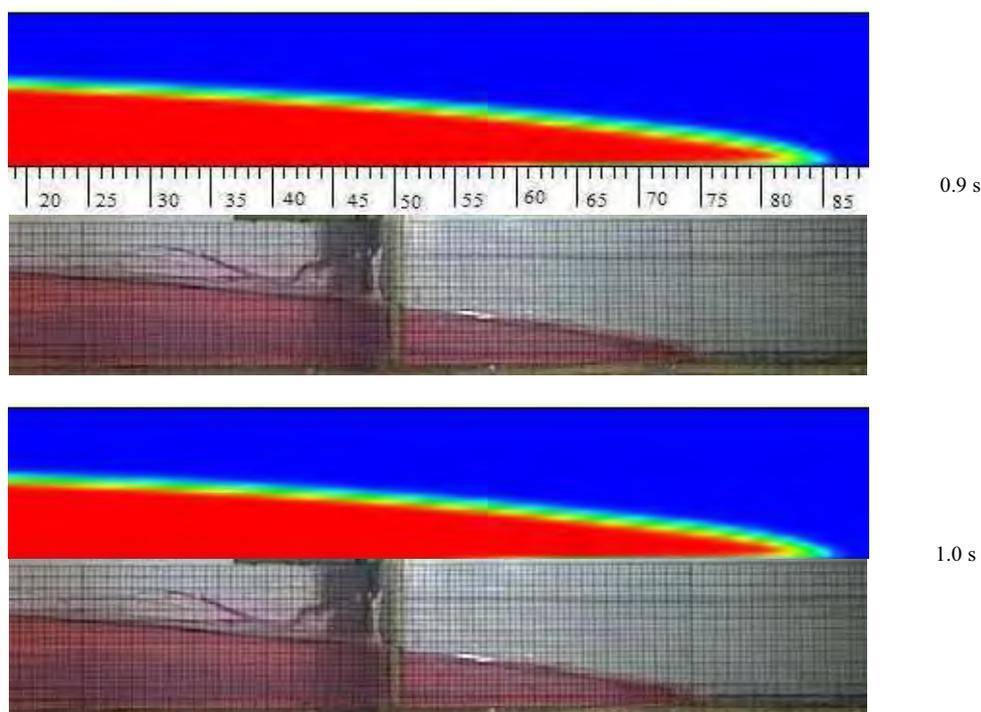
Continua ...

Continuação da Fig. 5.9 ...



Continua ...

Continuação da Fig. 5.9 ...



**Figura 5.9. Comparação numérico-experimental do ensaio 5 com altura inicial de 10 cm.**

Das Figuras 5.8 e 5.9, observou-se que os resultados numéricos, após algum tempo, mostram distâncias alcançadas maiores do que os experimentais. Essa diferença deve ser causada, principalmente, por efeitos de atrito das paredes laterais. Além disso, a comporta demora cerca de 0.2 s para liberar todo o fluido, freando-o. É importante salientar também que uma certa quantidade de fluido fica retida na comporta, o que diminui, embora muito pouco, a quantidade de fluido liberado.

Outro fato que pode ter contribuído para a diferença dos resultados é a não inclusão de efeitos de tensão superficial nas simulações numéricas. Além disso, há também os erros de escala, e os resultados anteriores só podem ser analisados visualmente.

Para contornar o problema de visualização, são mostrados nas próximas figuras os resultados das distâncias horizontais da frente de onda (alcance) em função do tempo. Comparou-se nestas, as curvas experimental, numérica e os resultados teóricos de Debiante (2000) e Yabuchi (2004) de cada um dos ensaios. Os valores numéricos foram definidos como a distância máxima da frente para uma fração volumétrica igual a 0.5.

Como dito anteriormente, os resultados numéricos apresentam distâncias alcançadas maiores do que os experimentais, porém, no início do escoamento, esta diferença parece ser menor. Isto pode ser devido a dificuldades do código numérico em se alcançar a convergência

nos primeiros instantes. Observe que a ruptura da comporta é feita artificialmente através da diferença de pressão, fazendo com que o programa tenha dificuldades de convergir a interface. Isto fica bem observado no instante 0.1 s nas duas figuras anteriores.

Na Figura 5.10, tem-se as comparações de alcance do ensaio 1.

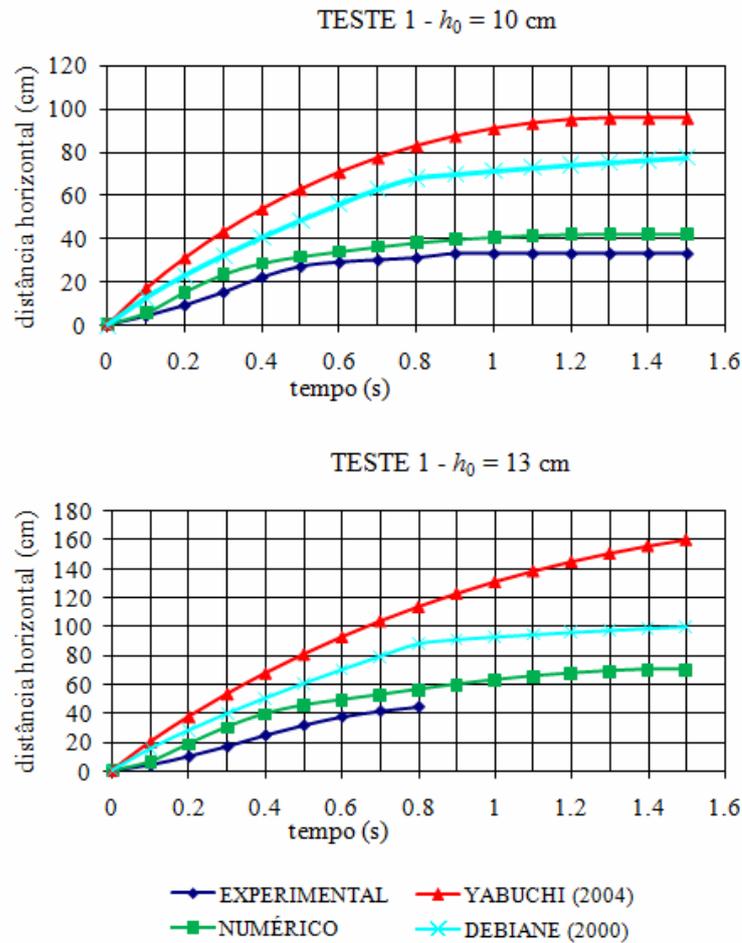


Figura 5.10. Comparação do alcance horizontal do ensaio 1.

Observa-se que o ensaio 1 (com  $h_0$  de 13 cm) apresenta apenas uma parte da curva experimental. Isto se deve ao fato de que para este, a frente de onda saiu do campo de filmagem antes de completados os 1.5 s.

Comparando os resultados, observa-se melhor a boa concordância numérico-experimental, principalmente quando se compara com resultados teóricos da literatura.

Na Figura 5.11, tem-se os resultados do ensaio 2.

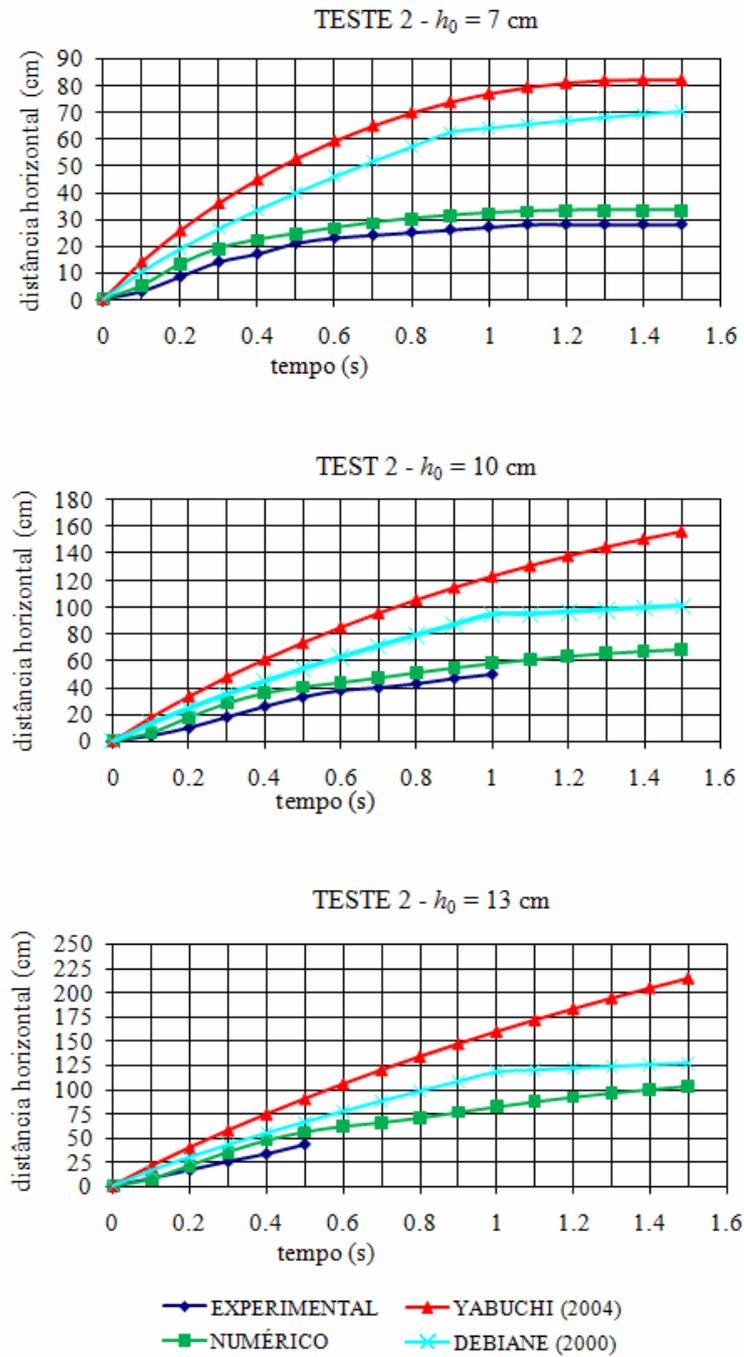
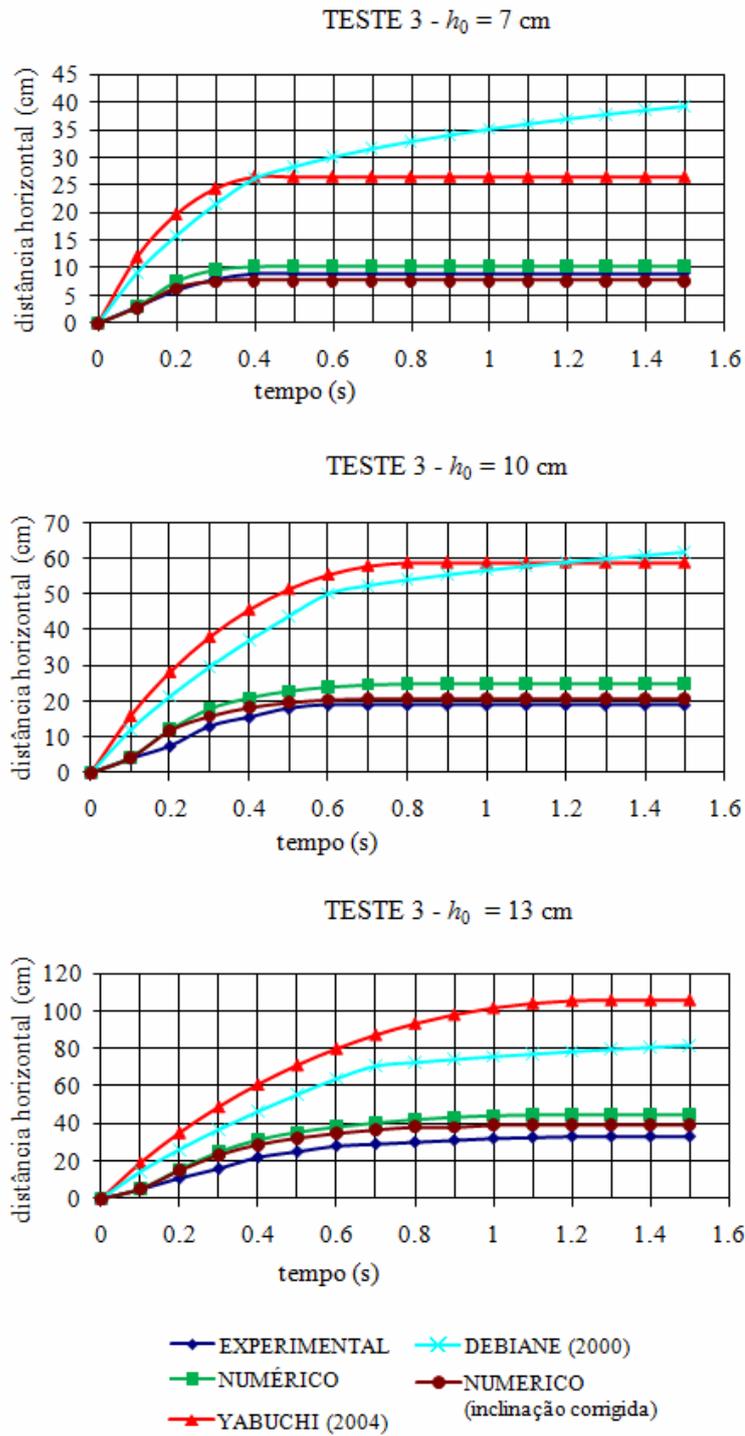


Figura 5.11. Comparação do alcance horizontal do ensaio 2.

Como dito anteriormente, observou-se uma pequena inclinação nos ensaios 1, 2, 3 e 4. Para analisar sua influência, no ensaio 3, incluiu-se os resultados numéricos, nos quais, corrigiu-se a inclinação na simulação (Figura 5.12).



**Figura 5.12. Comparação do alcance horizontal do ensaio 3.**

Observa-se, portanto, que o modelo numérico tem uma resposta ótima, se comparado a outras soluções. Talvez, o mais importante seja o fato de que, nos modelos apresentados, utilizou-se a hipótese de águas rasas e, na modelagem numérica, tal hipótese não foi utilizada.

Apesar da resposta ser mais próxima dos valores experimentais, pelas Figuras 5.8 e 5.9, observa-se que a interface não é muito nítida.

Os resultados dos demais ensaios com o Carbopol são mostrados nas Figuras 5.13 e 5.14.

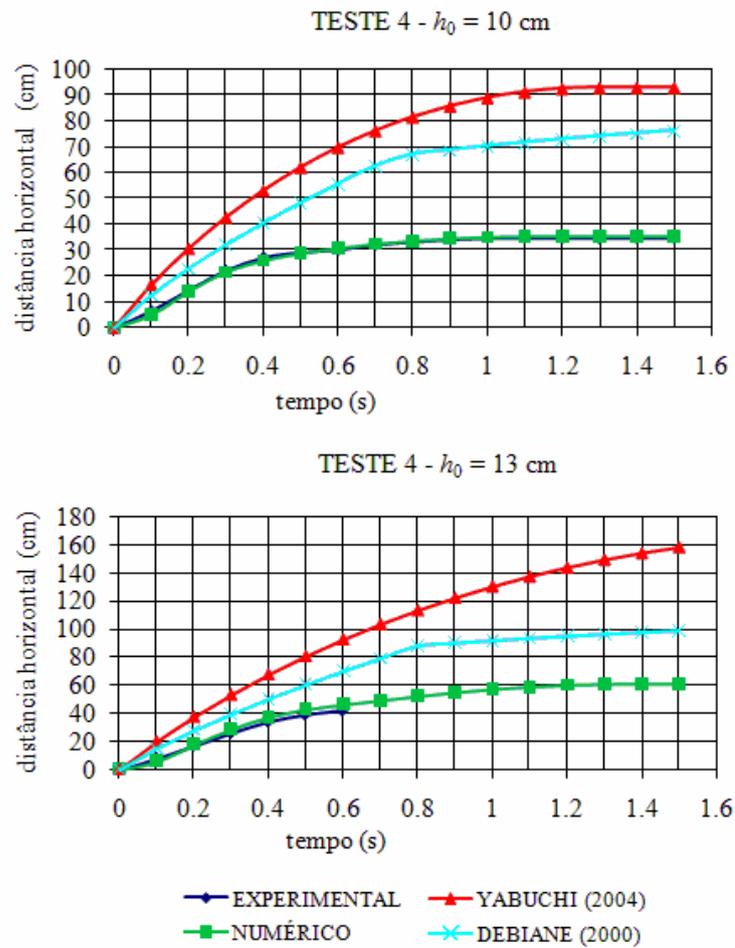


Figura 5.13. Comparação do alcance horizontal do ensaio 4.

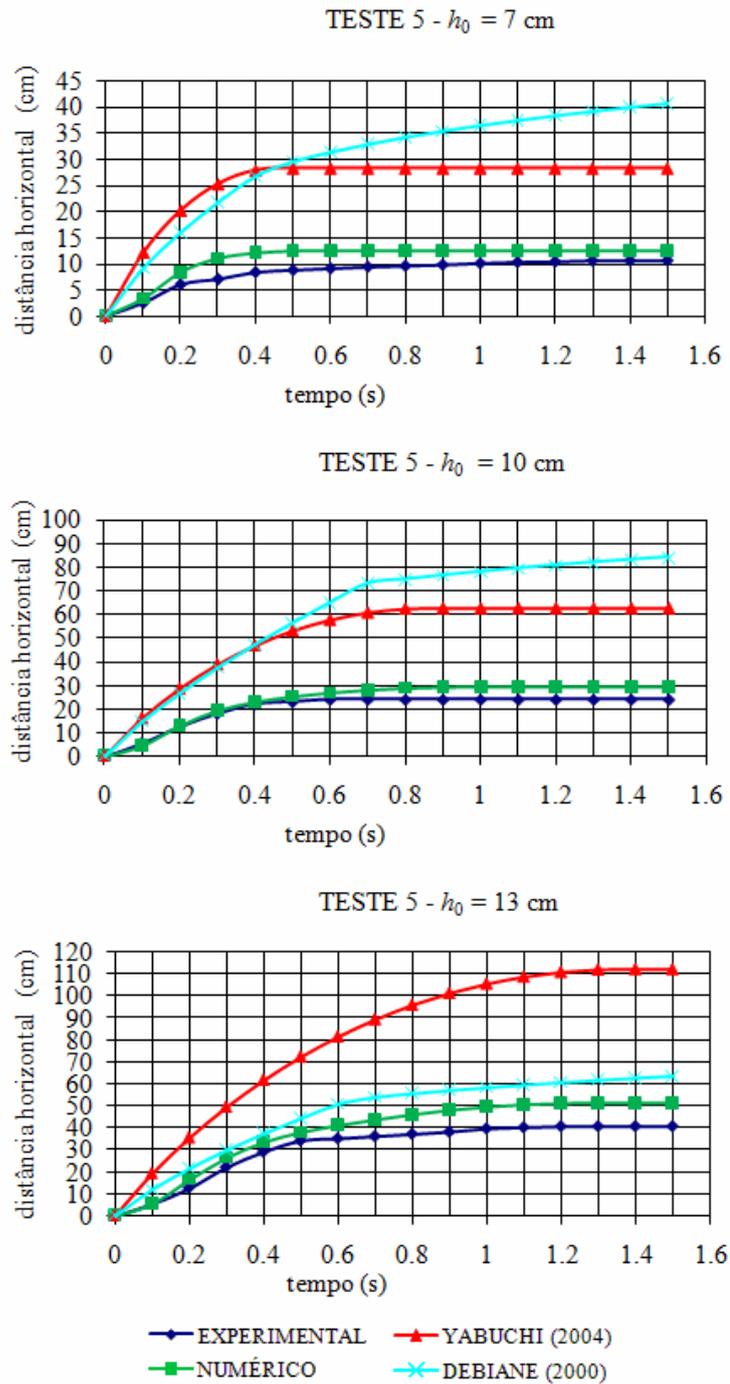


Figura 5.14. Comparação do alcance horizontal do ensaio 5.

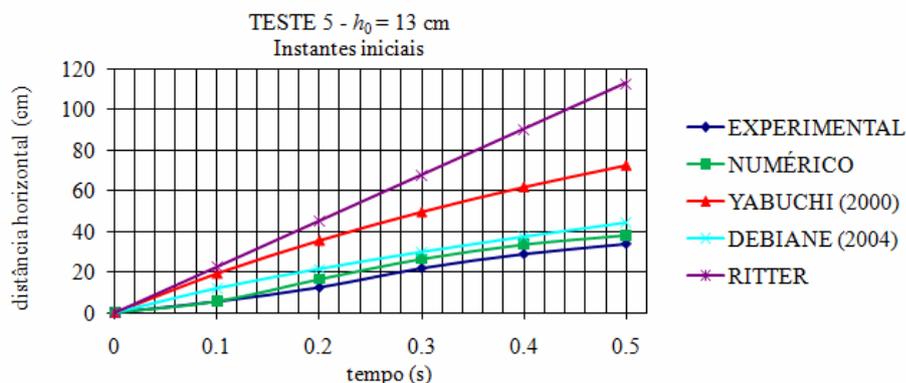
Como mostrado no Capítulo 2, as leis de evolução de Debiane (2000) são separadas em uma fase inercial (eq. 2.53) e outra viscosa (eq. 2.56), além do cálculo da distância de parada (eq. 2.58 ou 2.59). As curvas fornecidas pela equação 2.56 deveriam tender para o valor dado pela equação da distância de parada, porém, tal fato não ocorre. Os valores das distâncias de parada fornecidos pela equação 2.58 ou 2.59 são mostrados na Tabela 5.5.

**Tabela 5.5. Comparação do alcance final dos ensaios.**

Ensaio	$h_0$ (cm)	Distâncias finais (cm)		
		Experimental	Numérico	Debiane (eq. 2.58 ou 2.59)
1	10	33	42.3	40.7
	13	-	70.6	58.6
2	7	28	33.4	35.5
	10	-	69	59.2
	13	-	105	80.6
3	7	9	7.7	21.9
	10	19	20.9	24.8
	13	33	39.2	39.8
4	10	34.5	35.6	39.2
	13	-	60.6	56.8
5	7	10.5	12.6	29.9
	10	24	29.7	48.2
	13	40.5	51.6	31.8

Assim, fica demonstrado que as leis de evolução de Debiante (2000) se afastam bastante dos valores experimentais. Porém a estimativa do alcance final, dada pela equação 2.58 ou 2.59, é muito boa. Além disso, os resultados numéricos mostram-se bons em todas as fases do escoamento.

Nota-se também, como salientado anteriormente, que no início do escoamento, os resultados da literatura e o numérico ficam mais próximos das curvas experimentais. Para melhor observar isso, na Figura 5.15 são mostrados, em detalhe, os instantes iniciais (0.5 s) do ensaio 5, com  $h_0$  de 13 cm. Insere-se também o resultado teórico de Ritter.



**Figura 5.15. Comparação dos instantes iniciais do alcance horizontal do ensaio 5 com altura inicial de 13 cm.**

Da figura anterior, observa-se que a hipótese de regime dominadamente inercial no início do escoamento apresenta bons resultados.

Os ensaios com fluido Newtoniano foram comparados com o resultado teórico de Nsom *et al.* (2000) e Yabuchi (2004). Na Figura 5.16 são mostrados estes resultados.

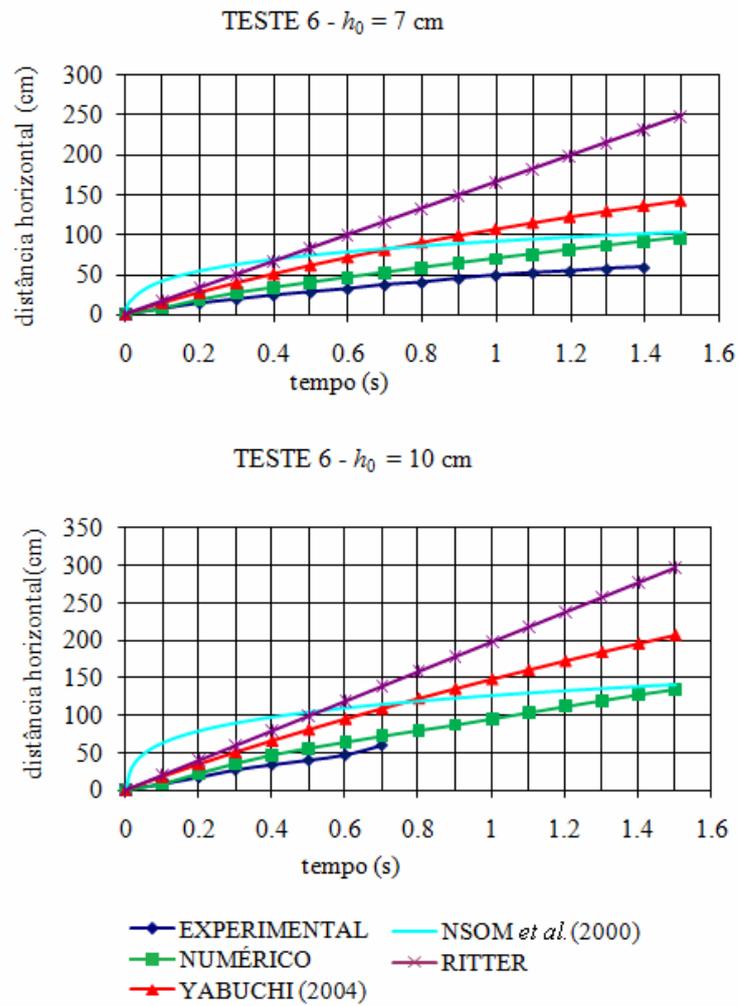


Figura 5.16. Comparação do alcance horizontal do ensaio 6.

Mostram-se também os resultados para os instantes iniciais do ensaio 6 com  $h_0$  de 7 cm.

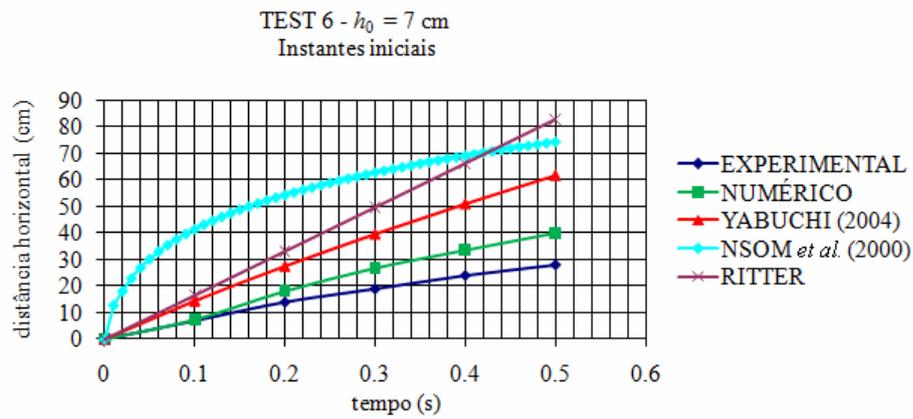


Figura 5.17. Comparação dos instantes iniciais do alcance horizontal do ensaio 6 com altura inicial de 7 cm.

Mais uma vez, a ótima concordância numérico-experimental. Observa-se também que o resultado de Nsom *et al.* (2000) fica muito distante dos outros. Provavelmente, há algum erro nas equações 2.44 e 2.45.

Na Figura 5.18 são mostrados os resultados da velocidade da frente para o ensaio 5 com alturas iniciais de 10 cm e 13 cm.

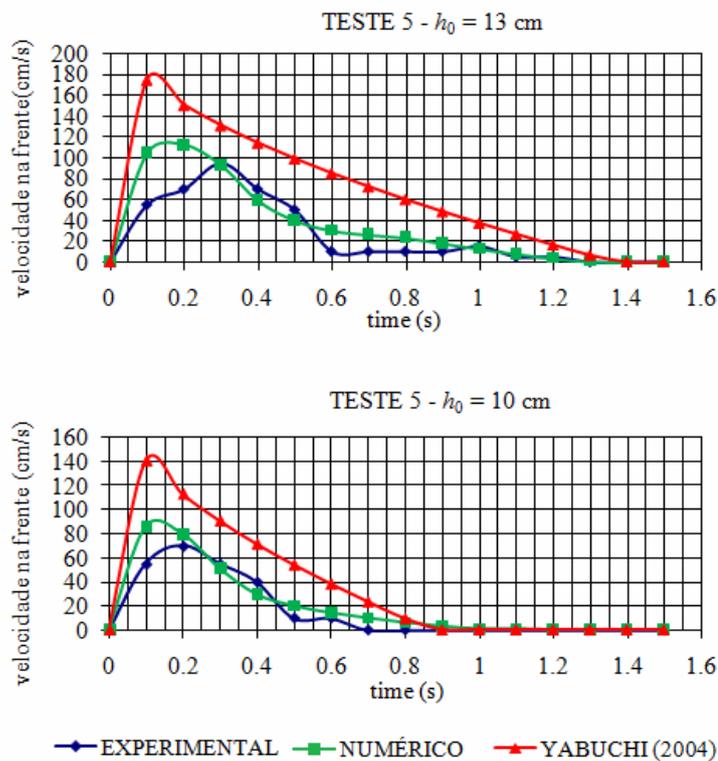


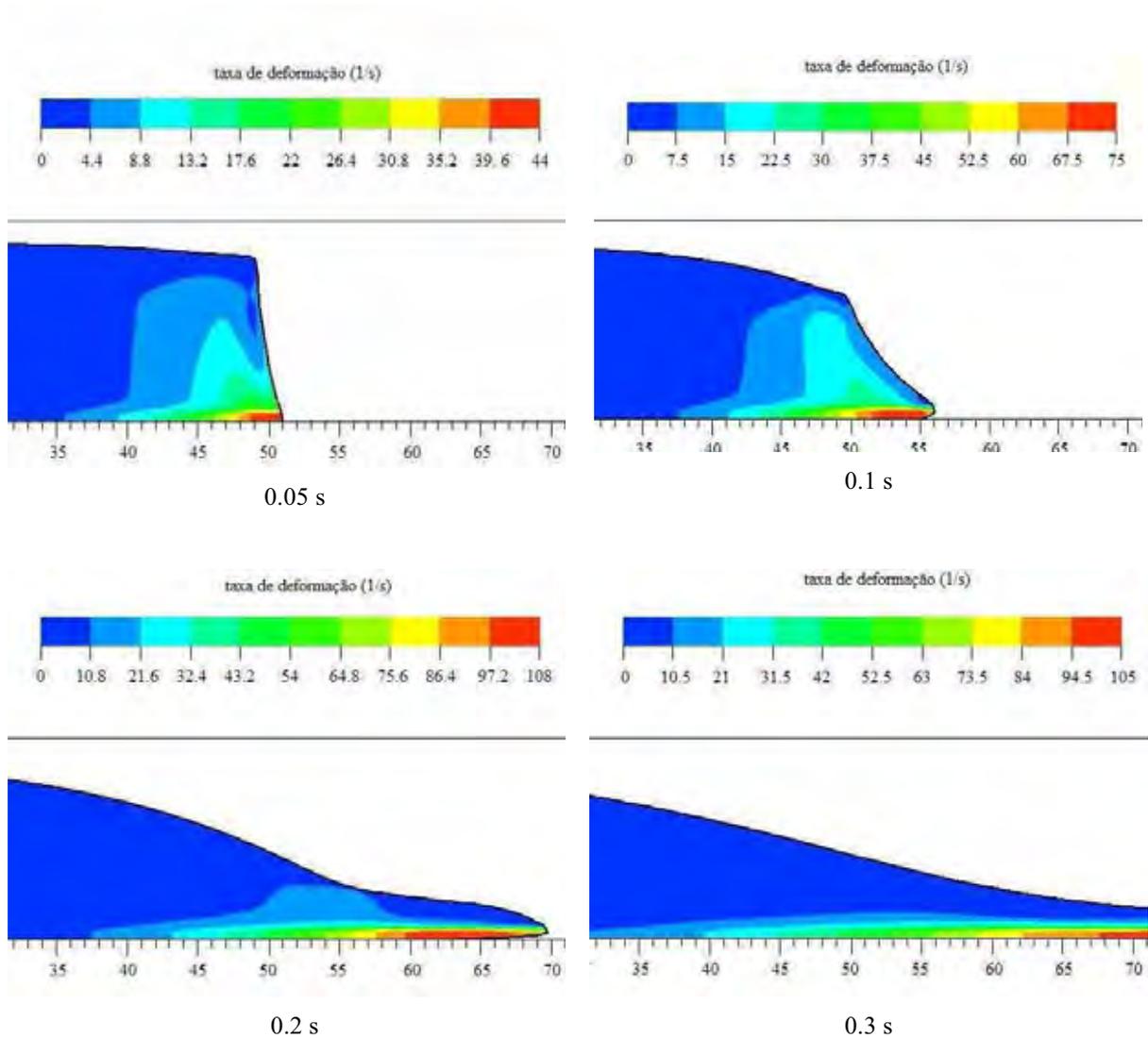
Figura 5.18. Comparação da velocidade da frente do ensaio 5.

Os resultados foram bons, mas ressalta-se aqui a dificuldade de se estabelecer a velocidade da frente da onda nos ensaios experimentais. Tal valor foi obtido como a diferença entre as distâncias da frente atingidas para cada intervalo de tempo de 0.1 s. Além disso, existe o efeito de frenagem do escoamento devido a ruptura não instantânea da comporta, fazendo com que os picos de velocidade iniciais sejam suavizados.

A velocidade experimental possui um valor máximo para tempos maiores. Isto também deve ser devido à abertura não instantânea da comporta.

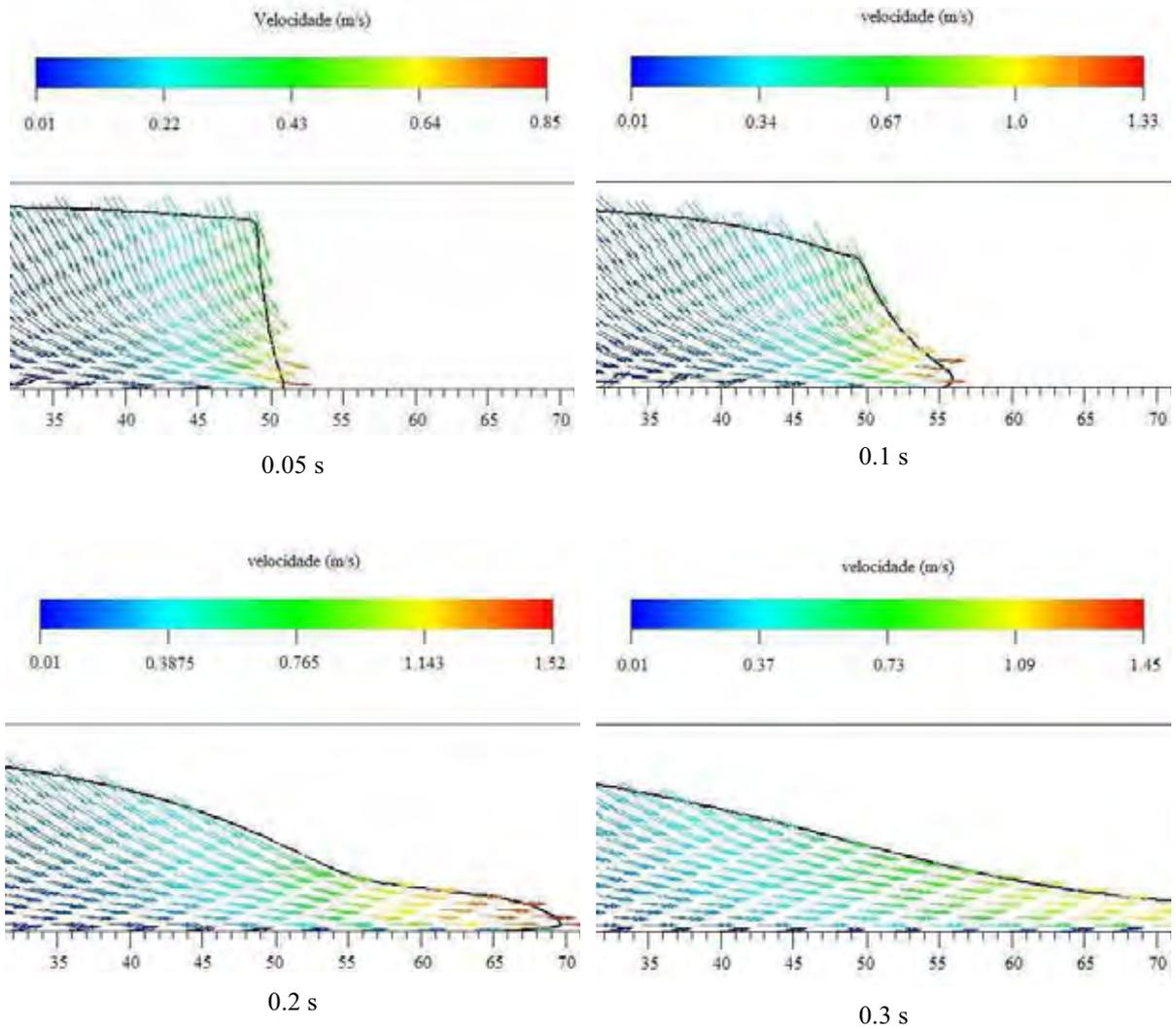
Dois imposições foram necessárias ao modelo numérico no que diz respeito à viscosidade. Tratam-se dos limites superior e inferior para a taxa de deformação. O limite superior adotado foi de 5000 1/s e o inferior igual a 0.001 1/s. O limite inferior não causa grandes problemas de ordem física, porém, para eliminar a possibilidade de erros por causa do limite superior, fez-se uma análise das máximas taxas de deformação no ensaio de menor concentração (ensaio 2) e com maior carga inicial ( $h_0 = 13$  cm). Os resultados são mostrados na Figuras 5.19.

---



**Figura 5.19. Resultados numéricos da taxa de deformação para o ensaio 2 com altura inicial de 13 cm (primeiros instantes).**

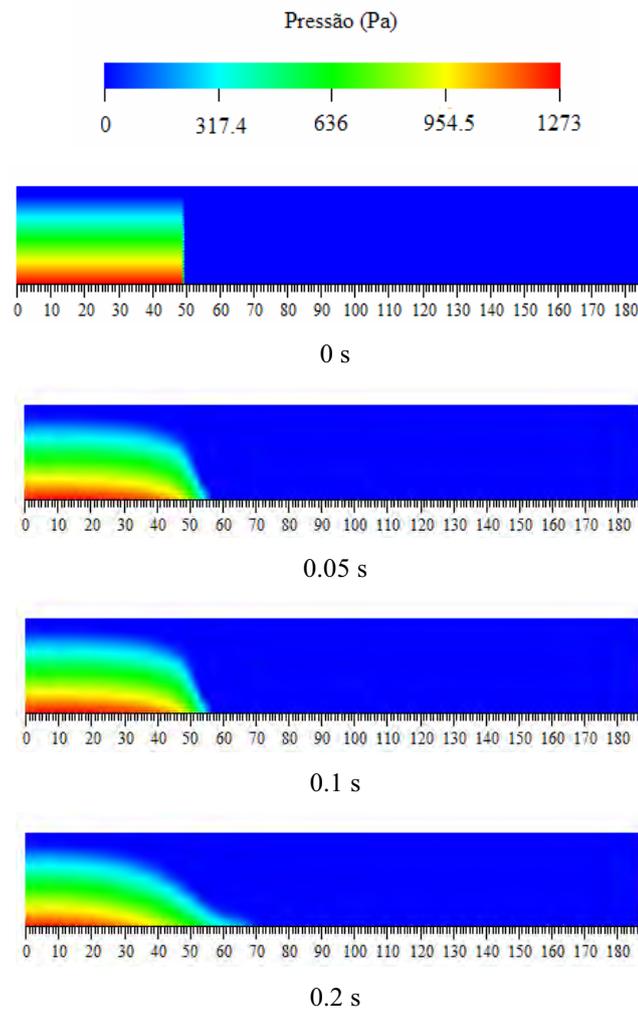
Mesmo no ensaio que possui as maiores taxas de deformação, os valores não alcançam o limite máximo estipulado. Observe ainda que grande parte do fluido permanece em repouso, constituindo uma zona rígida. Na Figura 5.20, o campo de velocidades do mesmo ensaio é mostrado.



**Figura 5.20. Resultados numéricos da velocidade para o ensaio 2 com altura inicial de 13 cm (primeiros instantes).**

Pode-se observar que, apesar da existência do componente vertical da velocidade nos instantes iniciais, a solução pioneira de Ritter dá uma boa estimativa da velocidade. Substituindo  $x_1$  por 1 mm,  $t$  por 0.05 s,  $h_0$  por 0.13 m na Eq. 2.36, chega-se a um valor de  $u_1 = 0.77$  m/s, que é da mesma ordem de grandeza obtida.

É mostrado ainda, na Figura 5.21, os campos de pressão dos instantes iniciais.



**Figura 5.21. Resultados numéricos da pressão para o ensaio 2 com altura inicial de 13 cm (primeiros instantes).**

Para validação, foi realizada ainda a comparação de resultados numéricos da literatura com o código numérico usado neste trabalho. Tais resultados foram obtidos em Shao e Lo (2003). Neste, usa-se um método Lagrangeano (*SPH – Smoothed Particle Hydrodynamics*) para solução do problema tipo rompimento de barragem bidimensional com inclinação de 1% e fluido tipo Bingham. O fluido hipotético (experimento numérico) possui  $\tau_c = 25$  Pa,  $\mu = 0.07$  N/m<sup>2</sup>,  $\rho = 1200$  kg/m<sup>3</sup>. Foi utilizado um espaçamento entre as partículas de 1 cm, 2000 partículas e passo de tempo ajustado dinamicamente. No caso do VOF, fez-se uma malha de 1 cm e passo de tempo igual a 0.0005 s. A comparação é mostrada na Figura 5.22.

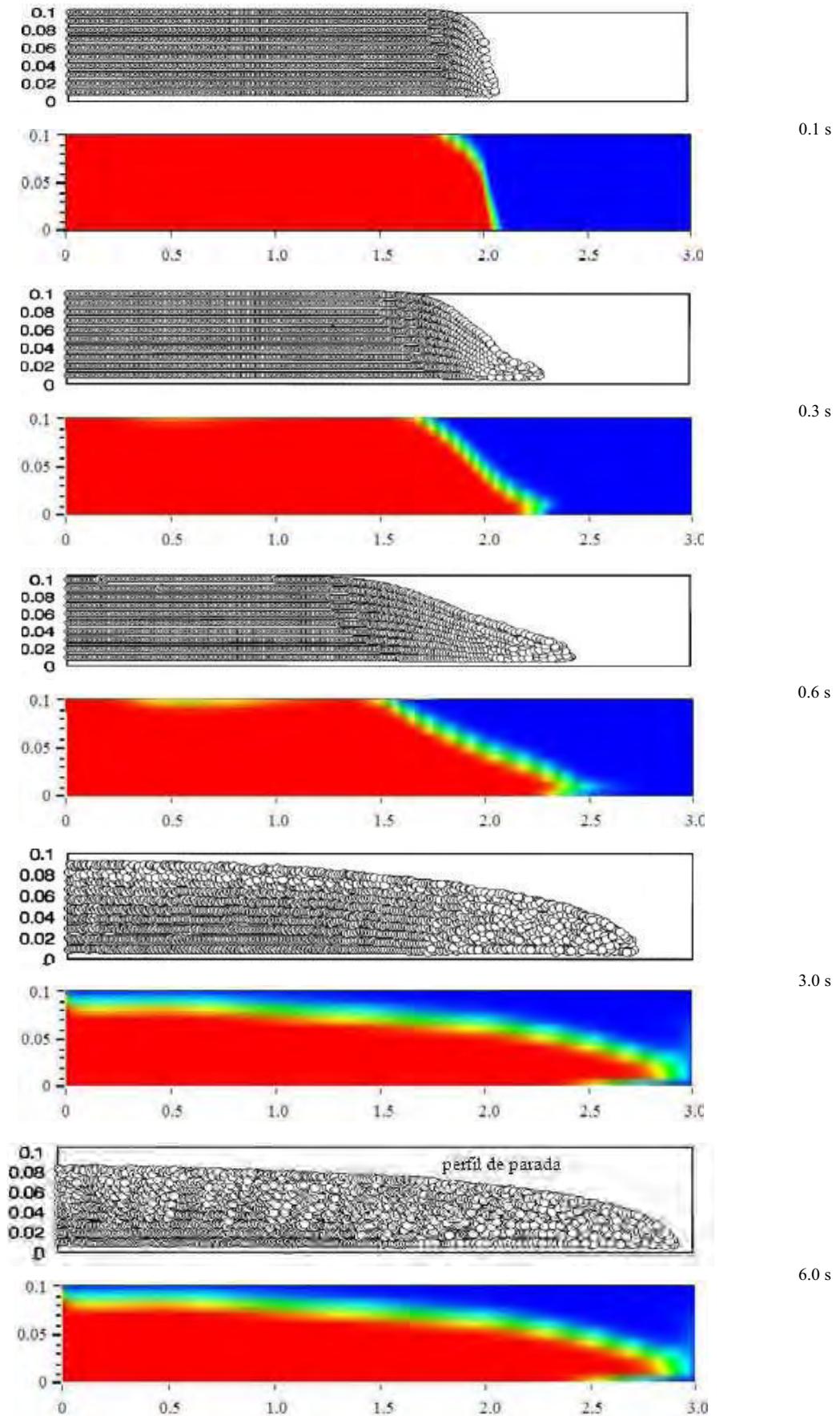
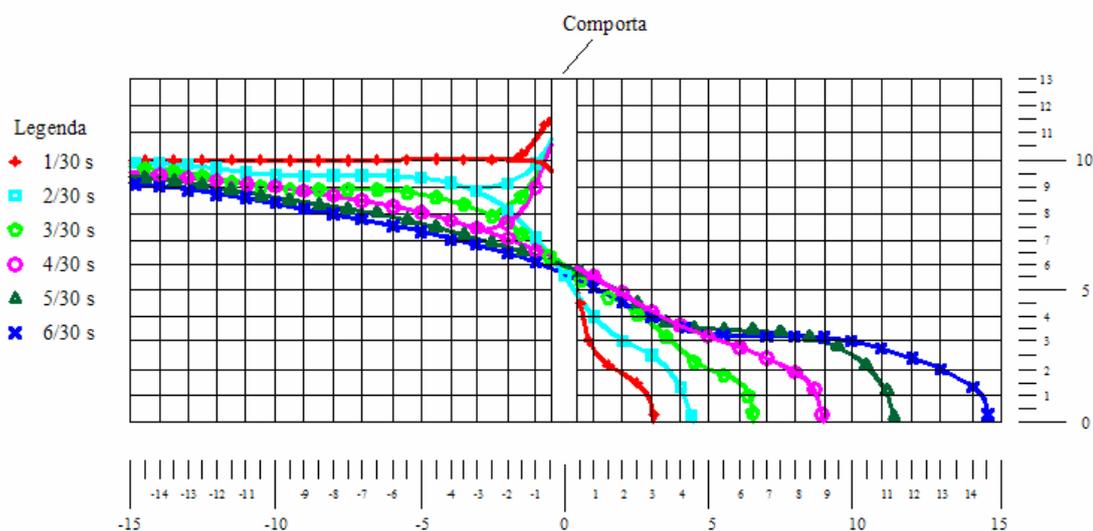


Figura 5.22. Comparação do VOF com o SPH do alcance da onda.

Os resultados com o SPH mostram muito mais nitidez na interface. Esta, utilizando o VOF, pode ser em muito melhorada, modificando-se o algoritmo de reconstrução ou refinando a malha. Infelizmente, o autor não apresenta o tempo computacional gasto para obtenção dos resultados acima. O tempo computacional gasto na simulação em VOF foi de 74 horas e 16 minutos, utilizando um computador Core 2 Duo 6300, com 2 Gb de memória RAM, trabalhando em paralelo.

Segue-se ainda um último resultado experimental pertinente (Figura 5.23). Trata-se de uma comparação das superfícies em diversos tempos do ensaio 4 com altura inicial de 10 cm. As posições das superfícies foram obtidas através da análise dos *frames* iniciais.



**Figura 5.23. Evolução da frente de onda para os primeiros instantes do ensaio 4 com altura inicial de 10 cm (resultados experimentais).**

Observa-se que as primeiras três curvas possuem uma elevação da superfície livre, próximo à comporta. Isso se deve ao fato de que a comporta não havia completado toda a subida, mantendo-se em contato com o fluido.

Outro fato importante observado é de que, mesmo para os instantes iniciais, o formato da superfície mostra forças viscosas importantes. Salienta-se aqui que este formato íngreme é muito bem descrito pelo modelo *shallow water*, embora este não descreva de forma precisa as velocidades dessas frentes.

## 6 CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo o estudo do escoamento de fluidos Newtonianos e não-Newtonianos (tipo Herschel-Bulkley) devido ao rompimento “instantâneo” de barreira. A motivação se deu principalmente por se tratar de um problema que modela muitos fenômenos que ocorrem na natureza e na indústria. A revisão bibliográfica abordou aspectos fundamentais de reologia, o comportamento reológico do fluido tipo (soluções aquosas de Carbopol 940), as principais teorias que descrevem o escoamento tipo “ruptura de barreira” e, uma breve amostra de ferramentas numéricas de problemas de interface.

O trabalho foi feito em duas frentes. Uma experimental, que objetivou a caracterização reológica dos materiais e, do estudo em modelo reduzido da ruptura de barreira. Várias amostras de soluções aquosas de Carbopol 940 e glucose foram liberadas de um reservatório e, seus escoamentos foram acompanhados através de técnicas de filmagem. A outra frente, numérica, simulou os experimentos para comparação.

Através dessa comparação, os resultados foram obtidos e as conclusões são mostradas a seguir:

- conforme salientado na literatura, as melhores concentrações do Carbopol 940 para o estudo do rompimento de barreira são da ordem de 0.13%. Porém, observou-se que em quase todos os testes, grande parte do fluido permanece em repouso.
  - embora os resultados dos parâmetros de Herschel-Bulkley variem bastante na literatura, os encontrados neste trabalho parecem consistentes.
  - conforme já se esperava, a variação de temperatura é quase desprezível para os níveis existentes neste trabalho. Já a variação do pH deve ser bem controlada;
  - o Carbopol, apesar da dificuldade em seu controle no início do trabalho, mostrou atender às necessidades e se constituiu num bom fluido tipo, principalmente pela possibilidade de se misturar agentes colorantes;
  - a comparação dos resultados experimentais com os numéricos da ruptura de barreira mostraram boa concordância, principalmente ao se comparar com outros da literatura. As diferenças entre os resultados da literatura e os experimentais foram menores nos instantes iniciais, o que demonstra que a eliminação dos efeitos viscosos no início do problema traz bons resultados. Porém, nos instantes subseqüentes, as maiores
-

diferenças aparecem, demonstrando que a hipótese de águas rasas deve ser revista para certas análises.

- o algoritmo de construção da interface, utilizado nas comparações não mostra muita clareza, o que demonstra a importância de se continuar investindo na proposta inicial (algoritmo próprio escrito em Fortran e mostrado no Apêndice C).
- os resultados mostrados nas Figuras 5.10 a 5.18 mostram a tendência de que os fenômenos viscosos possam ser desprezados até tempos da ordem de 0.1s ou menores. Como salientado por Debiane (2000), a fase inercial é muito curta e difícil de ser quantificada.
- a principal conclusão é sobre a importância de se estudar as equações “completas” (sem a hipótese de águas rasas) em estudos mais detalhados.

## 6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Algumas melhorias podem ser implementadas, principalmente no campo experimental. É comum com fluidos não-Newtonianos, a ocorrência de deslizamento nas paredes. Tal efeito pode ser diminuído tanto no canal quanto no reômetro. No canal, recomenda-se aumentar a rugosidade das paredes, e no reômetro, a utilização de tanto de cobertura rugosa quanto de geometria Vane, que, além da diminuição desse efeito, é mais apropriado para a obtenção de tensões críticas. Recomenda-se ainda um controle mais efetivo do tempo de subida da comporta.

O uso de concentrações de Carbopol 940 menores, da ordem de 0.8% a 0.10%, geraria fluxos com velocidades maiores e maior parte do fluido participaria do escoamento, o que tornaria a exploração dos ensaios mais fácil.

Outra ressalva se faz com relação a efeitos não incluídos neste trabalho e, que podem ter influenciado os resultados: difração, paralaxe e a tensão superficial na frente viscoplástica.

---

## REFERÊNCIAS

- [1] ABERNETHY, R. B.; BENEDICT, R. P.; DOWDELL, R. B. ASME measurement uncertainty. **Journal of Fluid Engineering**, New York, v. 107, p. 161-162, 1985.
- [2] 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.
- [3] ALEXANDROU, A. N.; FLORIDES, G.; GEORGIU, G. Compression of materials with yield stress. In: GRACM INTERNATIONAL CONGRESS ON COMPUTATIONAL MECHANICS, 5, 2005, Limassol. **Congress of the....** Limassol: S.n, 2005.
- [4] ARIS, R. **Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics**. New York: Dover Publications Inc, 1969. 286 p.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] BALMFORTH, N. J.; CRASTER, R. V. **Very high resolution photoelectron spectroscopy**. Berlin: Heidelberg: Springer-Verlag, v. 582, p. 34-51, 2001.
- [8] BARNES, H. A. The yield stress—a review or ‘παντα ρει’—everything flows? **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, n. 81, p. 133-178, 1998.
- [9] BARNES, H. A.; WALTERS, K. The yield stress myth? **Rheological Acta**, Berlin, v. 24, n. 4, p. 323-326, 1985.
- [10] BARNES, H. A.; NGUYEN, Q. D. Rotating vane rheometry — a review. **Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, n. 98, p. 1-14, 2001.
-

- [11] 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.
- [12] BOGER, D. V.; WALTERS, K. **Rheological phenomena in focus**. Amsterdam: Elsevier, 1993. 155 p. (Rheology Series - 4)
- [13] BRETAS, R. S.; D'ÁVILA, M. A. **Reologia de polímeros fundidos**. São Carlos: Ed. UFSCar, 2000. 196 p.
- [14] BROOKFIELD VISCOMETERS. **Operational Manual R/S Rheometer.**, Harlow, Essex, UK: Brookfield Viscometers Ltd, 1998. 112 p.
- [15] ČERNE, 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.
- [16] CHANSON, H. **Analytical solutions of laminar and turbulent dam break wave**. Lisboa: River Flow, 2006.
- [17] CHANSON, H.; JARNY, S.; COUSSOT, P.; Dam break wave of thixotropic fluid. **Journal of Hydraulic Engineering**, New York, p. 280 – 293, mar. 2006.
- [18] CHIANG, C. M. Lecture Notes on Fluid Dynamics: 1.6 Relations between stress and rate-of-strain tensors. 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. 2006.
- [19] COUSSOT, P. **Mudflow rheology and dynamics**. Netherlands: Balkema, 1997. 255 p.
- [20] COUSSOT, P.; GAULARD, F. Gravity flow instability of viscoplastic materials: The ketchup drip. **Physical Review**, n. 72, p. 1 – 5, 2005.
-

- [21] COUSSOT, P.; MEUNIER, M. Recognition, classification and mechanical description of debris flows. **Earth-Science Reviews**, Amsterdam, n. 40, p. 209-227, 1996.
- [22] DEBIANE, K. **Hydraulique des écoulements laminaires à surface libre dans un 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, França, 2000.
- [23] DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Manager, ANSYS Inc., 2005 - a.
- [24] DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Modelling, ANSYS Inc., 2005 - b.
- [25] DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Modelling - Basic Capabilities Modelling, ANSYS Inc., 2005 - c.
- [26] DOCUMENTAÇÃO CFX - ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Theory, ANSYS Inc., 2005 - d.
- [27] DOCUMENTAÇÃO FLUENT - Chapter 20. Introduction to Modeling Multiphase Flows, Fluent Inc., January 28, 2003.
- [28] 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. 2006.
- [29] ETIENNE, J.; HOPFINGER, E.; SARAMITO, P. A mass-averaged velocity model for mixture flows of high density ratios: Numerical simulations and comparison with experiments. In: Canum, Grenoble, France, 2004.
- [30] HARNETT, J.; HU, R. Y. The yield stress- an engineering reality. *Journal of Rheology*, The Society of Rheology, Inc. John Wiley & Sons, n. 33(4), p. 671-679, 1989.
-

- [31] 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.
- [32] 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.
- [33] LACHAMP, P. **Modélisation numérique de l'effet d'un obstacle sur les écoulements de fluides à seuil par la méthode SPH**. 2003, f. 89-98. Tese (Doutorado em Ciências da Terra e do Universo) - Université Joseph Fourier-Grenoble I, Grenoble, França, 2003.
- [34] 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.
- [35] MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC, 2004. 453 p.
- [36] MARINHO, J. R. D. M. **Macromoléculas e polímeros**. Barueri: Ed. Manole, 2005. p. 55 – 117.
- [37] MOFFAT, R. J. Describing the uncertainties in experimental results. **Experimental Thermal and Fluid Science**, New York, n. 1, p. 3-17, 1988.
- [38] 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.
- [39] NOH, W.F.; WOODWARD, W. F. SLIC - Simple line interface calculation. **Lecture Notes in Physics**, New York, v.59, p. 330–340, 1976.
-

- [40] NOVEON™ - The specialty chemicals innovator© (1997) applications technology for carbopol ® resins and cosmetic formulations. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 10 jan. 2006.
- [41] NOVEON™ - The specialty chemicals innovator© (1993) dispersion techniques for carbopol® resins. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 9 jan. 2006.
- [42] NOVEON™ - The specialty chemicals innovator© (2002 – a) advances in polymer technology. Bulletin 11. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 10 jan. 2006.
- [43] NOVEON™ - The specialty chemicals innovator© (2002 - b) flow and suspension properties. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 11 jan. 2006.
- [44] NOVEON™ - The specialty chemicals innovator© (2002 – c) thickening properties. Bulletin 11. Disponível em: <<http://www.noveon.com>>. Acesso em: 11 jan. 2006.
- [45] 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.
- [46] 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).
- [47] PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere Pub. Corp, 1980. 197p.
- [48] PERRY, H.; CHILTON, C. H. **Manual de engenharia química**. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 5ª edição, 1973.
- [49] 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.
- [50] PIAU, J. M.; DEBIANE, K.; Consistometers rheometry of power-law viscous fluids. **Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Amsterdam, v.127, p. 213 – 224, 2005.
-

- [51] 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.
- [52] 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.
- [53] PUCKETT, E.G. A volume-of-fluid interface tracking algorithm with applications to computing shock wave refraction. In: PROCEEDINGS OF THE FOURTH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS, 1993, Davis, CA. **Proceedings of the...** Davis, S.n., 1991. p. 933–938.
- [54] 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.
- [55] 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 de Ilha Solteira, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Ilha Solteira, 2003.
- [56] SBM. GUIA EURACHEM/CITAC - **Determinando a incerteza na medição analítica**. 2. ed. São Paulo: Sociedade Brasileira de Metrologia, 2002.
- [57] SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Palo Alto, v.31, p. 567 – 603, 1999.
- [58] SHAO, S.; LO, E. Y. M. Incompressible SPH method for simulating Newtonian and non-Newtonian flows with a free surface. **Advances in Water Resources**, New York, v.26 p. 787–800, 2003.
- [59] THUAL, O. Les équations de Saint-Venant. *Articles Pédagogiques Multimedia*. Institut National Polytechnique de Toulouse. 2003. Texto obtido via Internet. Disponível em:
-

<<http://thual.perso.enseeiht.fr/otapm/ond-derisv/allpdf/corpus.pdf>>. Acesso em: 25 abr. 2007.

[60] VERTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics. In: \_\_\_. **The finite volume method**. Harlow: S.n., 1995. 257p.

[61] WRITE, F. M. **Viscous fluid flow**. New York: McGraw-Hill, 1974. p. 1- 109.

[62] WHITHAM, G. B The effects of hydraulic resistance in the dam break problem. **Proc. Royal Society of London**, Series A, 227, p. 399 – 407, 1954.

[63] YABUCHI, S. T. **Estudo teórico-experimental para a determinação da velocidade de frentes de lama escoando em canais**. 2004. 84 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil, Ênfase em Recursos Hídricos e Tecnologias Ambientais) – Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, Universidade Estadual Paulista, Ilha Solteira, 2004.

[64] Figura 1.1. (a) e (b) – Referência [6];

(c) <[http://userpage.fu-berlin.de/~cheubeck/res\\_inter/res\\_Int\\_mass\\_movements/pouring\\_concrete\\_large.jpg](http://userpage.fu-berlin.de/~cheubeck/res_inter/res_Int_mass_movements/pouring_concrete_large.jpg)> ;

(d) <[http://images.google.com.br/imgres?imgurl=http://www.wsl.ch/hazards/kti/media/ig\\_000628-9.jpg](http://images.google.com.br/imgres?imgurl=http://www.wsl.ch/hazards/kti/media/ig_000628-9.jpg)>;

(e) <<http://vortex.accuweather.com/adc2004/pub/includes/columns/community/2006/avalanche-nps.jpg>>;

(f) <[http://co.water.usgs.gov/toxics/gallery/cement\\_mud/mud2.html](http://co.water.usgs.gov/toxics/gallery/cement_mud/mud2.html)>;

(g) <[http://www.delargy.com/2005\\_2\\_Hawaii/hawaii\\_lava.htm](http://www.delargy.com/2005_2_Hawaii/hawaii_lava.htm)>.

---

## APÊNDICE A – OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES DE SAINT-VENANT

Relembrando as equações de Navier-Stokes para escoamentos isocóricos:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{g} - \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} \quad (\text{A.2})$$

Considerando ainda um modelo bidimensional, têm-se então:

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = g_1 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} \right) \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = g_2 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_2} + \mu \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \quad (\text{A.5})$$

Mas, para problemas com superfície livre, a posição da interface é uma incógnita. Para isso, adota-se a hipótese de águas rasas, criando-se assim o modelo de Saint-Venant.

Define-se a função,

$$F(x_1, x_2, t) = x_2 - h(x_1, t) \quad (\text{A.6})$$

como sendo uma função posição, na qual, para pontos abaixo da interface  $F < 0$ , na interface é igual a zero e no ar  $F > 0$ .

Considerando-se uma partícula fictícia situada na interface cuja a posição é dada por  $\vec{\tilde{x}}(t)$ , tem-se que:

$$F[\tilde{x}_1(t), \tilde{x}_2(t), t] = 0 \quad (\text{A.7})$$

e, portanto:

$$\frac{D}{Dt} [F(\tilde{x}_1(t), \tilde{x}_2(t), t)] = \left[ \frac{\partial F}{\partial t} + \vec{u}(t) \cdot \nabla F \right] (\tilde{x}_1(t), \tilde{x}_2(t), t) \quad (\text{A.8})$$

em que  $\vec{u}(t) = \frac{d\vec{\tilde{x}}(t)}{dt}$  é a velocidade desta.

Definindo  $\vec{w}$  como o componente do vetor velocidade na direção normal a superfície, têm-se:

$$\vec{w} = w\vec{n} \quad (\text{A.9})$$

$$w = \vec{u} \cdot \vec{n} = \frac{\partial F}{\partial t} \frac{1}{|\nabla F|} \quad (\text{A.10})$$

E, considerando que há continuidade da velocidade na interface:

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = w \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla F = 0 \quad (\text{A.12})$$

Substituindo (A.6) em (A.12):

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla F = \frac{\partial x_2}{\partial t} - \frac{\partial h}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla (x_2 - h) = 0 \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u_1 \frac{\partial h}{\partial x_2} = u_2 \quad (\text{A.14})$$

As condições de contorno adotadas para o problema de superfície livre são:

$$\begin{aligned} x_2 = 0 &\rightarrow \{u_1 = u_2 = 0 \\ x_2 = h &\rightarrow \begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = 0 \\ p = p_0 \\ \frac{\partial h}{\partial t} + u_1 \frac{\partial h}{\partial x_2} = u_2 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

então:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_2} + g \cos \theta = 0 \quad \rightarrow \quad p = p_0 - \rho g \cos \theta (x_2 - h) \quad (\text{A.16})$$

O próximo passo é a adimensionalização das equações de Navier-Stokes. Aplicam-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$\begin{aligned} x_1^* &= \frac{x_1}{L_0} & x_2^* &= \frac{x_2}{H_0} & t^* &= t \frac{U_0}{L_0} \\ u_1^* &= \frac{u_1}{U_0} & u_2^* &= \frac{u_2 L_0}{H_0 U_0} & p^* &= \frac{p}{\rho U_0^2} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

em que  $L_0$  é um comprimento horizontal de referência,  $H_0$  é um comprimento vertical de referência e  $U_0$  é uma velocidade de referência.

E, portanto, as equações de Navier-Stokes adimensionais são iguais a:

$$\frac{\partial u_1^*}{\partial x_1^*} + \frac{\partial u_2^*}{\partial x_2^*} = 0 \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial u_1^*}{\partial t^*} + u_1^* \frac{\partial u_1^*}{\partial x_1^*} + u_2^* \frac{\partial u_1^*}{\partial x_2^*} = \frac{\tan \theta}{\epsilon \text{Fr}^2} - \frac{\partial p^*}{\partial x_1^*} + \frac{1}{\epsilon \text{Re}} \left( \frac{\partial^2 u_1^*}{\partial x_1^{*2}} + \frac{\partial^2 u_1^*}{\partial x_2^{*2}} \right) \quad (\text{A.19})$$

$$\epsilon^2 \left( \frac{\partial u_2^*}{\partial t^*} + u_1^* \frac{\partial u_2^*}{\partial x_1^*} + u_2^* \frac{\partial u_2^*}{\partial x_2^*} \right) = -\frac{1}{\text{Fr}^2} - \frac{\partial p^*}{\partial x_2^*} + \frac{\epsilon}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 u_2^*}{\partial x_1^{*2}} + \frac{\partial^2 u_2^*}{\partial x_2^{*2}} \right) \quad (\text{A.20})$$

em que  $\theta$  é a inclinação do fundo,  $\text{Fr} = \frac{U_0}{\sqrt{H_0 g \cos \theta}}$  é o número de Froude,  $\text{Re} = \frac{H_0 U_0}{\mu}$  é o

número de Reynolds e  $\epsilon = \frac{H_0}{L_0}$  é um parâmetro adimensional.

Admitindo que  $\epsilon \ll 1$ ,  $\frac{1}{\text{Re}} = O(\epsilon)$  e  $\tan \theta = O(\epsilon)$  e, utilizando-se as condições de contorno, tem-se:

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0 \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = -g \cos \theta \frac{\partial h}{\partial x_1} + g \sin \theta + \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} \quad (\text{A.22})$$

que são as equações de Navier-Stokes sob as aproximações de Saint-Venant.

Mas, para obter as equações de Saint-Venant, algumas manipulações ainda são necessárias. As equações anteriores são integradas na vertical. Para isso, define-se a velocidade horizontal média na vertical:

$$\bar{u}_1(x_1, t) = \frac{1}{h(x_1, t)} \int_0^{h(x_1, t)} u_1(x_1, x_2, t) dx_2 \quad (\text{A.23})$$

Integra-se a equação (A.21):

$$\int_0^{h(x_1, t)} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_2 + \int_0^{h(x_1, t)} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} dx_2 = 0 \quad (\text{A.24})$$

e utiliza-se Leibnitz:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} \int_0^{h(x_1,t)} u_1(x_1, x_2, t) dx_2 - u[x_1, h(x_1, t), t] \frac{\partial h(x_1, t)}{\partial x_1} + \\ + u_2[x_1, h(x_1, t), t] - u_2(x_1, 0, t) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Aplicando as condições de contorno e a definição dada por (A.23), tem-se a equação da conservação da massa do modelo Saint-Venant:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial h}{\partial x_1} + h \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} = 0 \quad (\text{A.26})$$

Aplicando o mesmo processo à equação da quantidade de movimento (A.22):

$$\frac{\partial(\bar{u}_1 h)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1} \int_0^h u_1^2 dx_2 + g \cos \theta h \frac{\partial h}{\partial x_1} = g h \sin \theta - \frac{\tau_f}{\rho} \quad (\text{A.27})$$

em que  $\tau_f = \rho \mu \frac{\partial u(x_1, 0, t)}{\partial x_2}$  é a tensão de cisalhamento no fundo.

Fazendo  $u_1(x_1, x_2, t) = \bar{u}_1(x_1, t) + u_{1c}(x_1, x_2, t)$ , tem-se que:

$$\int_0^h u_1^2 dx_2 = \bar{u}_1^2 h + \int_0^h u_{1c}^2 dx_2 = \bar{u}_1^2 h + \beta \bar{u}_1^2 h \quad (\text{A.28})$$

em que  $u_{1c}$  é a velocidade complementar na vertical e  $\beta$  é uma constante que soluciona a integração.

Pela hipótese de águas rasas, faz-se  $\beta = 0$  e, a tensão de cisalhamento no fundo é feita igual a:

$$\tau_f = \frac{1}{2} C_f (h, \bar{u}_1) \rho \bar{u}_1 |\bar{u}_1| \quad (\text{A.29})$$

então:

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial t} + \bar{u}_1 \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1} + g \cos \theta \frac{\partial h}{\partial x_1} = g \sin \theta - \frac{C_f}{2} \frac{\bar{u}_1 |\bar{u}_1|}{h} \quad (\text{A.30})$$

Expandindo para um problema tridimensional, tem-se o sistema de equações de Saint-Venant bidimensional (equações 2.31 a 2.33).

## APÊNDICE B - MODELO ANALÍTICO

Neste Apêndice as equações do movimento para fluidos com reologia tipo Herschel-Bulkley são obtidas. As seguintes hipóteses são utilizadas:

- Fluido isotrópico;
- escoamento incompressível;
- Modelo contínuo;
- Modelo bidimensional;
- Condição de não deslizamento nas paredes, e
- Temperatura constante.

O sistema de coordenadas adotado é mostrado na Figura B.1.

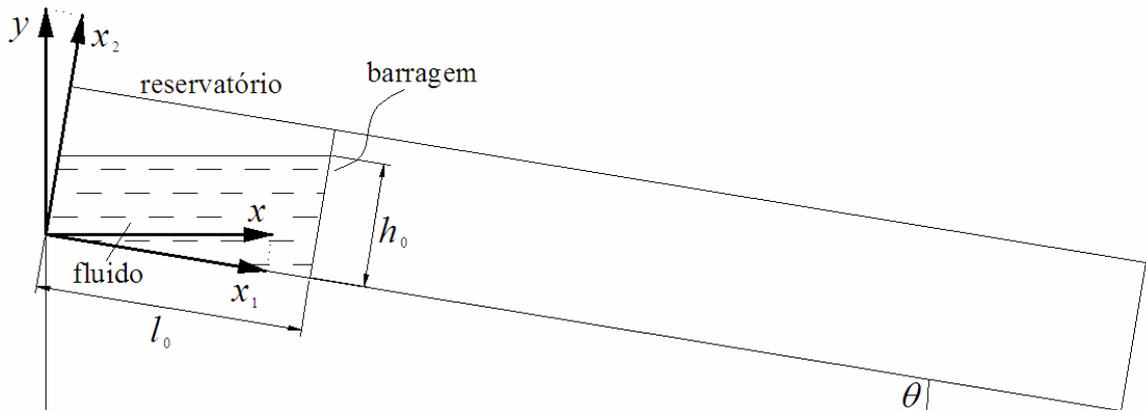


Figura B.1. Sistema de coordenadas usado no modelo analítico.

Retomando, a equação do movimento de Cauchy na forma vetorial:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{f} + \nabla \cdot \vec{\bar{T}} \quad (\text{B.1})$$

em que  $\vec{\bar{T}}$  é dado por:

$$\vec{\bar{T}} = -p\vec{I} + \vec{\bar{\tau}} \quad (\text{B.2})$$

E, da reologia tipo Herschel-Bulkley:

$$\vec{\bar{\tau}} = \tau_c \frac{\vec{\dot{\gamma}}}{\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}}} + 2^n k \frac{\vec{\dot{\gamma}}}{(\sqrt{-\dot{\gamma}_{II}})^{1-n}} \quad (\text{B.3})$$

na qual:

$\bar{\gamma} = \frac{1}{2}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T)$  e, adotando modelo bidimensional,

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

Então,

$$\bar{\tau} = \frac{\tau_c}{\alpha}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T) + \frac{k}{\alpha^{1-n}}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T) \quad (\text{B.4})$$

Mas, o interesse é em se encontrar o  $\nabla \cdot \bar{\tau}$ .

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{T} = \bar{\nabla} \cdot (-p\bar{I} + \bar{\tau}) = -\bar{\nabla} p + \bar{\nabla} \cdot \bar{\tau} \quad (\text{B.5})$$

Substituindo (B.4) em (B.5), tem-se

$$\nabla \cdot \bar{T} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \frac{\tau_c}{\alpha}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T) + \frac{k}{\alpha^{1-n}}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T) \right] \quad (\text{B.6})$$

E, substituindo em (B.1) :

$$\rho \left[ (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} \right] = \rho \bar{f} - \nabla p + \nabla \cdot \left[ \frac{\tau_c}{\alpha}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T) + \frac{k}{\alpha^{1-n}}(\nabla\bar{u} + \nabla\bar{u}^T) \right] \quad (\text{B.7})$$

Ou, em notação indicial:

$$\begin{aligned} \rho \left[ \partial_t u_k + (\partial_i u_k) u_i \right] &= \rho f_k - \partial_k p + \\ &+ \partial_i \left\{ \frac{\tau_c \left[ (\partial_i u_k + \partial_k u_i) \right]}{\alpha} + \frac{k}{\alpha^{1-n}} \left[ (\partial_i u_k + \partial_k u_i) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

em que:

$$\alpha = 2\sqrt{\frac{1}{8}(\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2 \parallel e_i e_j \parallel}$$

As Equações (B.7) e (B.8) são as representações, respectivamente, vetorial e indicial da equação do movimento para fluido com reologia tipo Herschel-Bulkley. Desenvolvendo o divergente do tensor viscoso e adotando o modelo bidimensional, os componentes da equação do movimento ficam iguais a:

- Na direção  $x_1$ :

$$\rho \left( \frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) = \rho f_1 - \frac{\partial p}{\partial x_1} + k(a_1 + b_1) + \tau_c(c_1 + d_1) \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned}
a_1 &= 2 \left\{ \frac{1}{\alpha^{1-n}} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) + 2 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} (n-1) \alpha^{n-3} \left[ 2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \right] \right\} \\
b_1 &= \left\{ \frac{1}{\alpha^{1-n}} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) + 2 \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) (n-1) \alpha^{n-3} \left[ 2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) \right] \right\} \\
c_1 &= 2 \left\{ \frac{1}{\alpha} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) - 2 \frac{1}{\alpha^3} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \left[ 2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \right] \right\} \\
d_1 &= \left\{ \frac{1}{\alpha} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) - 2 \frac{1}{\alpha^3} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

- Na direção  $x_2$ :

$$\rho \left( \frac{\partial u_2}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) = \rho f_2 - \frac{\partial p}{\partial x_2} + k(a_2 + b_2) + \tau_c(c_2 + d_2) \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned}
a_2 &= \left\{ \frac{1}{\alpha^{1-n}} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) + 2 \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) (n-1) \alpha^{n-3} \left[ 2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \right] \right\} \\
b_2 &= 2 \left\{ \frac{1}{\alpha^{1-n}} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) + 2 \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) (n-1) \alpha^{n-3} \left[ 2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) \right] \right\} \\
c_2 &= \left\{ \frac{1}{\alpha} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) - 2 \frac{1}{\alpha^3} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \right] \right\} \\
d_2 &= 2 \left\{ \frac{1}{\alpha} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) - 2 \frac{1}{\alpha^3} \left( \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} \right) \right] \right\}
\end{aligned}$$

Pode-se agora, adimensionalizar estas equações. Usando as variáveis encontradas em Coussot (1997):

$$\begin{aligned}
X_1 &= \frac{x_1}{L}; & X_2 &= \frac{x_2}{L}; & U_1 &= \frac{u_1}{V}; & U_2 &= \frac{u_2}{V} \\
T &= \frac{t}{L/V}; & P &= \frac{p}{\rho V^2}
\end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

em que:

$L$  é a dimensão de referência e  $V$  é a velocidade de referência.

Têm-se então:

- Na direção  $x_1$ :

$$\frac{\partial U_1}{\partial T} + U_1 \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + U_2 \frac{\partial U_1}{\partial X_2} = \frac{\tan \theta}{\text{Fr}^2} - \frac{\partial P}{\partial X_1} + \frac{1}{\text{Re}_{\text{H-B}}} (A_1 + B_1) + \frac{\tan \theta}{\text{Fr}^2 G} (C_1 + D_1) \quad (\text{B.12})$$

$$A_1 = 2^n c^{\frac{(n-1)}{2}} \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} + 2^{n-1} (n-1) c^{\frac{(n-3)}{2}} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \left[ 2 \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} \right) \right]$$

$$B_1 = 2^{n-1} c^{\frac{(n-1)}{2}} \left( \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \right) + 2^{n-2} (n-1) c^{\frac{(n-3)}{2}} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \right) \right]$$

$$C_1 = \frac{1}{c^{1/2}} \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} - \frac{1}{2c^{3/2}} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \left[ 2 \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} - \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \right) \right]$$

$$D_1 = \frac{1}{2c^{1/2}} \left( \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \right) - \frac{1}{4c^{3/2}} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \right) \right]$$

- Na direção  $x_2$ :

$$\frac{\partial U_2}{\partial T} + U_1 \frac{\partial U_2}{\partial X_1} + U_2 \frac{\partial U_2}{\partial X_2} = -\frac{1}{\text{Fr}^2} - \frac{\partial P}{\partial X_2} + \frac{1}{\text{Re}_{\text{H-B}}} (A_2 + B_2) + \frac{\tan \theta}{\text{Fr}^2 G} (C_2 + D_2) \quad (\text{B.13})$$

$$A_2 = 2^{n-1} c^{\frac{(n-1)}{2}} \left( \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} - \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \right) + 2^{n-2} (n-1) c^{\frac{(n-3)}{2}} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} - \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \right) \right]$$

$$B_2 = 2^n c^{\frac{(n-1)}{2}} \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} + 2^{n-1} (n-1) c^{\frac{(n-3)}{2}} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} \left[ 2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \right) \right]$$

$$C_2 = \frac{1}{2c^{1/2}} \left( \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} - \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \right) - \frac{1}{4c^{3/2}} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left[ 2 \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} - \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \right) \right]$$

$$D_2 = \frac{1}{c^{1/2}} \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} - \frac{1}{2c^{3/2}} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} \left[ 2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_2} + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \left( \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_2^2} - \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \right) \right]$$

em que:

$$c = -D_{II}$$

As grandezas  $Re_{H-B}$ ,  $Fr$ ,  $G$  são números adimensionais, respectivamente chamados de: Reynolds de Herschel – Bulkley, Froude e Número Gravitacional e, são dados por:

$$Re_{H-B} = \frac{\rho V L}{k} \frac{L^{n-1}}{V^{n-1}} = Re \kappa^{n-1} \quad (B.14)$$

$$Fr = \frac{V}{\sqrt{gL \cos \theta}} \quad (B.15)$$

$$G = \frac{\rho g L \sin \theta}{\tau_c} \quad (B.16)$$

Pode-se usar ainda o “Número de Herschel-Bulkley”:

$$H_{H-B} = \frac{\tau_c}{k} \left( \frac{L}{V} \right)^n \quad (B.17)$$

Assim,

$$\frac{\tan \theta}{Fr^2 G} = \frac{H_{H-B}}{Re_{H-B}} \quad (B.18)$$

E, portanto,  $H_{H-B}$ ,  $Fr$  e  $Re_{H-B}$  serviriam como parâmetro de análise de similaridade. Assim, pode-se reescrever as equações (B.12) e (B.13), como:

$$\frac{\partial U_1}{\partial T} + U_1 \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + U_2 \frac{\partial U_1}{\partial X_2} = \frac{\tan \theta}{Fr^2} - \frac{\partial P}{\partial X_1} + \frac{1}{Re_{H-B}} (A_1 + B_1) + \frac{\tau_c}{V^2 \rho} (C_1 + D_1) \quad (B.19)$$

$$\frac{\partial U_2}{\partial T} + U_1 \frac{\partial U_2}{\partial X_1} + U_2 \frac{\partial U_2}{\partial X_2} = -\frac{1}{Fr^2} - \frac{\partial P}{\partial X_2} + \frac{1}{Re_{H-B}} (A_2 + B_2) + \frac{\tau_c}{V^2 \rho} (C_2 + D_2) \quad (B.20)$$

Portanto, as equações (B.12) e (B.13) ou as equações (B.19) e (B.20) correspondem às formas adimensionais da equação do movimento para um fluido tipo Herschel-Bulkley.

Segundo a hipótese levantada por Debiante (2000), de que há regimes predominantemente viscosos e inerciais, pode-se fazer uma análise de ordem de grandeza.

## B.1 REGIME DOMINANTEMENTE INERCIAL

Para,  $Re_b = \frac{\rho V^{2-n} L^n}{k}$ ,  $Fr$  e  $V$  grandes:

- Na direção  $x_1$ :

$$\frac{\partial U_1}{\partial T} + U_1 \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + U_2 \frac{\partial U_1}{\partial X_2} = -\frac{\partial P}{\partial X_1} \quad (B.21)$$

- Na direção  $x_2$ :

$$\frac{\partial U_2}{\partial T} + U_1 \frac{\partial U_2}{\partial X_1} + U_2 \frac{\partial U_2}{\partial X_2} = -\frac{\partial P}{\partial X_2} \quad (\text{B.22})$$

## B.2 REGIME DOMINANTEMENTE VISCOSO

- Na direção  $x_1$ :

$$\frac{\tan \theta}{Fr^2} - \frac{\partial P}{\partial X_1} + \frac{1}{Re_{H-B}} (A_1 + B_1) + \frac{H_{H-B}}{Re_{H-B}} (C_1 + D_1) = 0 \quad (\text{B.23})$$

- Na direção  $x_2$ :

$$-\frac{1}{Fr^2} - \frac{\partial P}{\partial X_2} + \frac{1}{Re_{H-B}} (A_2 + B_2) + \frac{H_{H-B}}{Re_{H-B}} (C_2 + D_2) = 0 \quad (\text{B.24})$$

## APÊNDICE C - CÓDIGO PRÓPRIO

Anteriormente ao uso do CFX, uma tentativa de se escrever em Fortran, um algoritmo usando o VOF foi realizada. O algoritmo para reconstrução utilizado foi o ELVIRA e, para propagação o *split*. Usou-se, um código antigo para soluções das equações de conservação. Trata-se do programa escrito por Patankar. Tal código precisou ser modificado para se adaptar ao problema de interface. Porém, a tentativa não funcionou como era esperado. Observou-se que o código seria promissor, porém, o tempo necessário para realização de tal feito seria demasiadamente grande e sairia do previsto, portanto, optou-se por deixá-lo para investimentos posteriores. Os resultados parciais são mostrados aqui.

### C.1 ALGORITMO DE RECONSTRUÇÃO

Como dito no Capítulo 2, o ELVIRA consiste na construção de uma reta, cujos parâmetros são escolhidos entre seis candidatos.

Dentro de uma célula, a reta pode possuir oito configurações, essas são mostradas na Figura C.1.

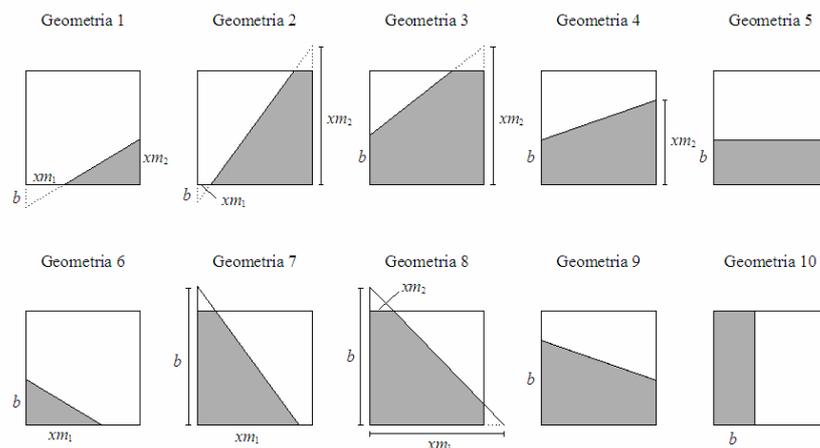


Figura C.1. Configurações possíveis das retas dentro das células.

em que  $xm_1$  e  $xm_2$  são variáveis utilizadas no algoritmo para se descobrir qual é a geometria correta. Observe ainda que, nem sempre  $b$  refere-se ao mesmo parâmetro  $b$  da equação da reta. Isto foi feito assim para facilitar o algoritmo.

O algoritmo foi escrito a partir dessas oito configurações básicas. Porém, nada impede de o “fluido escuro” estar na posição invertida. Para isso, uma outra variável, chamada de  $COR$  é usada. Esta pode assumir o valor  $VF$ , quando o fluido escuro está na posição padrão ou  $(1 - VF)$  quando na posição contrária. Um método foi desenvolvido para se saber qual é o valor correto e é mostrado a seguir.

Quando a candidata a reta é vertical, faz-se:

$$C_1 = VF(I - 1, J - 1) + VF(I - 1, J) + VF(I - 1, J + 1) \tag{C.1}$$

$$C_2 = VF(I + 1, J - 1) + VF(I + 1, J) + VF(I + 1, J + 1) \tag{C.2}$$

E, observa-se que:

$$\text{Se } C_1 \geq C_2 \rightarrow COR(I, J) = VF(I, J) \tag{C.3}$$

$$\text{Se } C_1 < C_2 \rightarrow COR(I, J) = 1 - VF(I, J) \tag{C.4}$$

Do mesmo modo, se a candidata a reta é horizontal, faz-se:

$$C_3 = VF(I - 1, J - 1) + VF(I, J - 1) + VF(I + 1, J - 1) \tag{C.5}$$

$$C_4 = VF(I - 1, J + 1) + VF(I, J + 1) + VF(I + 1, J + 1) \tag{C.6}$$

$$\text{Se } C_3 \geq C_4 \rightarrow COR(I, J) = VF(I, J) \tag{C.7}$$

$$\text{Se } C_3 < C_4 \rightarrow COR(I, J) = 1 - VF(I, J) \tag{C.8}$$

em que,  $C_1, C_2, C_3$  e  $C_4$  são variáveis auxiliares.

Para retas inclinadas, observa-se que a escolha da função  $COR$  depende dos sinais dos  $\tilde{a}$ , conforme a Figura C.2.

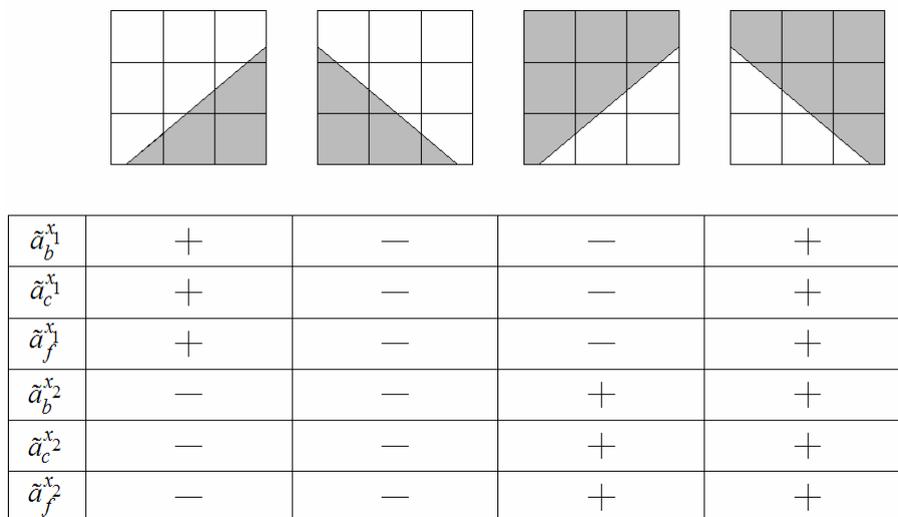


Figura C.2. Posição do fluido escuro como função do sinal das curvaturas.

Ou seja, para a interface possuir uma curvatura positiva e o fluido escuro estar abaixo, é necessário que  $\tilde{a}_b^{x_1}$ ,  $\tilde{a}_c^{x_1}$  e  $\tilde{a}_f^{x_1} \geq 0$  e  $\tilde{a}_b^{x_2}$ ,  $\tilde{a}_c^{x_2}$  e  $\tilde{a}_f^{x_2} \leq 0$  e assim por diante.

Após a definição do valor da função  $COR$ , resta a obtenção do parâmetro  $\tilde{b}$ . Este é obtido, respectivamente na Figura C.1, das seguintes formas:

$$\text{Geometria 1:} \quad \tilde{b} = \frac{(2\Delta x_1 \tilde{a}) \pm \sqrt{8COR\Delta x_1\Delta x_2\tilde{a}}}{2} \quad (\text{C.9})$$

$$\text{Geometria 2:} \quad \tilde{b} = \left( 2\Delta x_1 - 2COR\Delta x_1 - \frac{\Delta x_2}{\tilde{a}} \right) \frac{\tilde{a}}{2} \quad (\text{C.10})$$

$$\text{Geometria 3:} \quad \tilde{b} = \frac{2\Delta x_2 \pm \sqrt{8\tilde{a}\Delta x_1\Delta x_2(1-COR)}}{2} \quad (\text{C.11})$$

$$\text{Geometria 4:} \quad \tilde{b} = COR\Delta x_2 - \frac{\Delta x_1\tilde{a}}{2} \quad (\text{C.12})$$

$$\text{Geometria 5:} \quad \tilde{b} = COR\Delta x_2 \quad (\text{C.13})$$

$$\text{Geometria 6:} \quad \tilde{b} = \sqrt{2|\tilde{a}|COR\Delta x_1\Delta x_2} \quad (\text{C.14})$$

$$\text{Geometria 7:} \quad \tilde{b} = |\tilde{a}|COR\Delta x_1 + \frac{\Delta x_2}{2} \quad (\text{C.15})$$

$$\text{Geometria 8:} \quad \tilde{b} = \frac{2(\Delta x_1|\tilde{a}| + \Delta x_2) \pm \sqrt{8|\tilde{a}|\Delta x_1\Delta x_2(1-COR)}}{2} \quad (\text{C.16})$$

$$\text{Geometria 9:} \quad \tilde{b} = COR\Delta x_2 + \frac{\Delta x_1|\tilde{a}|}{2} \quad (\text{C.17})$$

$$\text{Geometria 10:} \quad \tilde{b} = COR\Delta x_1 \quad (\text{C.18})$$

em que:

$\Delta x_1$  e  $\Delta x_2$  são as dimensões respectivamente, horizontal e vertical das células.

É necessário ressaltar também que os valores calculados de  $\tilde{a}_b^{x_2}$ ,  $\tilde{a}_c^{x_2}$  e  $\tilde{a}_f^{x_2}$  devem ser transladados em 90 graus.

Resta agora, escolher a melhor reta. Cada candidata a reta (binômio  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{b}$ ), é estendida dentro do volume 3 X 3 que circunda a célula. O valor de  $VF$  é calculado para este volume. A reta escolhida é aquela que possuir o menor erro com relação ao valor real.

## C.2 ALGORITMO DE PROPAGAÇÃO

O algoritmo denominado *Split* consiste em se dividir o cálculo da advecção da interface ao longo das direções coordenadas, ou seja, para um problema bidimensional, o cálculo é feito em dois passos. Relembrando alguns conceitos mostrados no Capítulo 2, a conservação da massa é discretizada da seguinte forma:

$$\frac{(u_{1,i+\frac{1}{2},j}^n - u_{1,i-\frac{1}{2},j}^n)}{\Delta x_1} + \frac{(u_{2,i,j+\frac{1}{2}}^n - u_{2,i,j-\frac{1}{2}}^n)}{\Delta x_1} = 0 \quad (\text{C.19})$$

O campo de  $VF$  deve ser encontrado em um tempo  $t^{n+1} = (n+1)\Delta t$ . Assim:

$$VF_{i,j}^{n+1} = VF_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x_1} [F_{i-\frac{1}{2},j}^n - F_{i+\frac{1}{2},j}^n] + \frac{\Delta t}{\Delta x_2} [G_{i,j-\frac{1}{2}}^n - G_{i,j+\frac{1}{2}}^n] \quad (\text{C.20})$$

em que:

$F_{i-\frac{1}{2},j}^n = (VF u_1)_{i-\frac{1}{2}}^n$  é o fluxo de fração volumétrica na fase esquerda da célula  $i,j$  e assim por diante.

O método consiste em separar os fluxos nas duas direções, da seguinte forma:

$$VF_{i,j}^{n+1} = VF_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{\Delta x_2} [G_{i,j-\frac{1}{2}}^n - G_{i,j+\frac{1}{2}}^n] \quad (\text{C.21})$$

$$VF_{i,j}^* = VF_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x_1} [F_{i-\frac{1}{2},j}^n - F_{i+\frac{1}{2},j}^n] \quad (\text{C.22})$$

e, os fluxos são dados por:

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^n = (VF u_1)_{i+\frac{1}{2},j}^n \quad (\text{C.23})$$

$$F_{i-\frac{1}{2},j}^n = (VF u_1)_{i-\frac{1}{2},j}^n \quad (\text{C.24})$$

$$G_{i+\frac{1}{2},j}^n = (VF u_2)_{i,j+\frac{1}{2}}^n \quad (\text{C.25})$$

$$G_{i-\frac{1}{2},j}^n = (VF u_2)_{i,j-\frac{1}{2}}^n \quad (\text{C.26})$$

Calculam-se assim os fluxos e a interface pode ser movimentada.

## C.3 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

A solução do sistema de equações foi feita através do método dos Volumes Finitos. Este consiste no balanço das propriedades do escoamento nas unidades elementares do domínio

físico (os volumes de controle). Estas propriedades são substituídas por uma única, genérica, que representa a tal quantidade transportada por unidade de massa. Tal equação é escrita na forma conservativa e, integrada nos volumes de controle e no tempo, transformando-se assim as EDP's em equações algébricas, que são resolvidas por métodos iterativos.

A grande vantagem do método está na conservação das propriedades em cada volume o que relaciona o modelo numérico à realidade física.

Quanto aos esquemas de discretização no espaço e no tempo, existem muitas possibilidades. A escolha do esquema deve levar em conta o problema a ser resolvido e o comportamento destes com relação ao transporte e conservação das propriedades. O programa original foi escrito utilizando-se o *Power-Law* (esquema de interpolação no espaço) e formulação totalmente implícita no tempo.

A solução do sistema de equações obtido foi feito utilizando-se um método iterativo, o TDMA. O acoplamento pressão-velocidade foi resolvido através do SIMPLE. A malha utilizada é regular com arranjo desencontrado.

#### C.4 RESULTADOS

Primeiramente, mostram-se testes do algoritmo de reconstrução. O primeiro teste refere-se a construção de uma interface circular de raio igual a 4 unidades em uma malha com 20 unidades. Na Figura C.3 tem-se o resultado do teste.

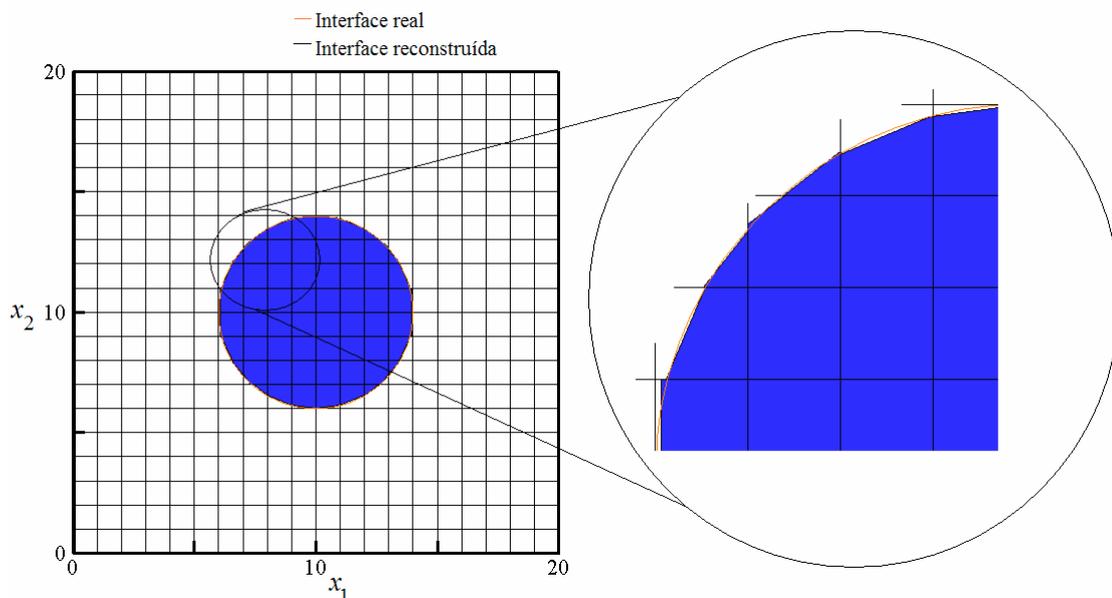
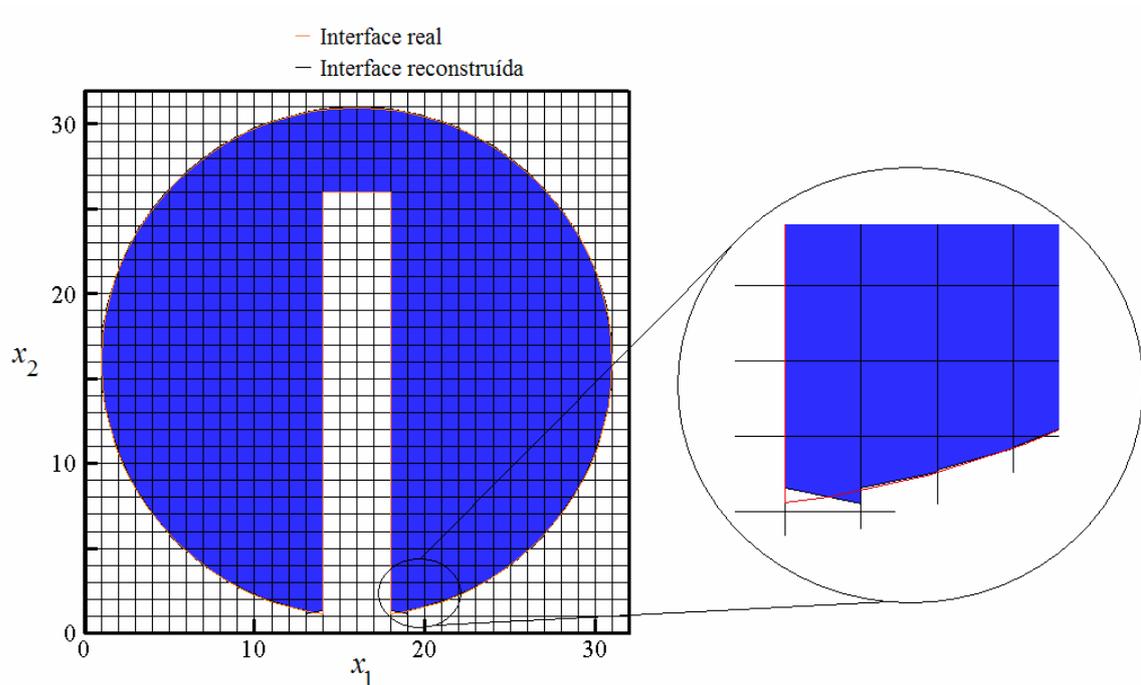


Figura C.3. Reconstrução de uma superfície circular pelo algoritmo ELVIRA.

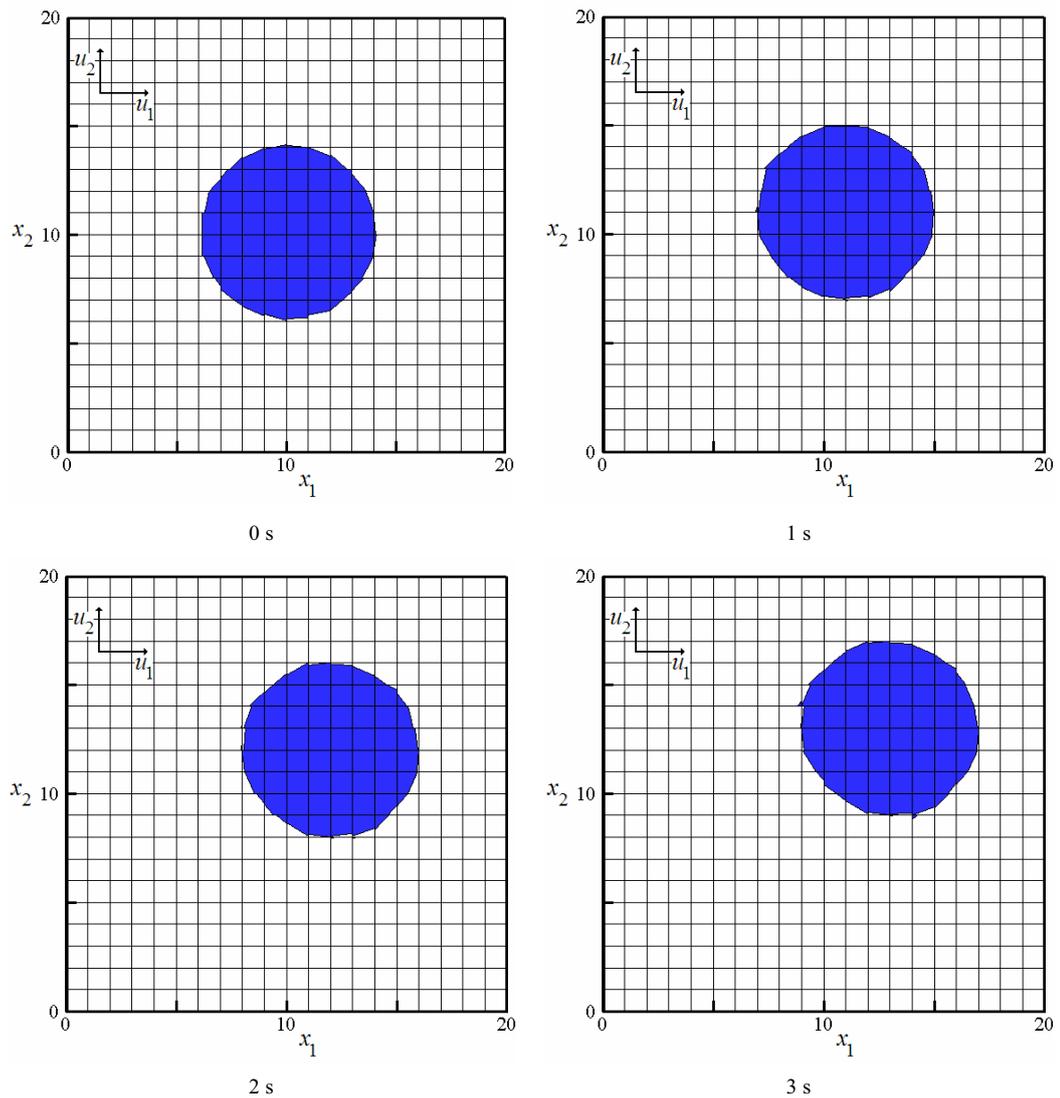
O próximo teste refere-se a um círculo recortado. O teste pode ser encontrado em Pilliod e Pucket (2004).



**Figura C.4. Reconstrução de uma superfície circular com recorte pelo algoritmo ELVIRA.**

Observe que, na posição entre o círculo e o recorte, o algoritmo não reconstrói de maneira adequada a superfície. Isto se deve ao fato da mudança no formato da superfície ser brusca.

Fez-se também testes do algoritmo de advecção. De fato, tratam-se de testes do conjunto dos de reconstrução e advecção, já que este último só tem sentido na presença do outro. O teste consiste em, ao se estabelecer um campo de velocidades, observar a advecção da interface.



**Figura C.5. Teste do algoritmo de advecção de interface circular em um campo de velocidades prescrito ( $u_1 = 1$  un./s e  $u_2 = 1$  un./s).**

Os resultados do programa completo serão omitidos. Observou-se que a convergência era muito lenta. Isto se deve ao fato de que além do programa original ter sido escrito para problemas monofásicos e com condição de contorno de velocidade prescrita, os métodos adotados não são muito robustos para problemas tipo gravidade.