

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

Desenvolvimento e implementação numérica de modelos viscoelásticos generalizados e o estudo de fluidos complexos

Rosalía Taboada Leiva

Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Rosalía Taboada Leiva

**Desenvolvimento e implementação numérica de modelos
viscoelásticos generalizados e o estudo de fluidos
complexos**

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutora em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

Coorientador: Prof. Dr. Luís Jorge Lima Ferrás

**USP – São Carlos
Agosto de 2022**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados inseridos pelo(a) autor(a)

L533d Leiva, Rosalía Taboada
Desenvolvimento e implementação numérica de
modelos viscoelásticos generalizados e o estudo de
fluidos complexos / Rosalía Taboada Leiva;
orientador Antonio Castelo Filho; coorientador Luís
Jorge Lima Ferrás. -- São Carlos, 2022.
135 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
Ciências de Computação e Matemática Computacional) --
Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, 2022.

1. Mittag-Leffler. 2. HiG-Flow. 3. gPTT. 4. gK-
BKZ. 5. modelos viscoelásticos. I. Castelo Filho,
Antonio, orient. II. Lima Ferrás, Luís Jorge,
coorient. III. Título.

Rosalía Taboada Leiva

**Numerical Development and Implementation of Generalised
Viscoelastic Models and the Study of Complex Fluids**

Doctoral dissertation submitted to the Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, in partial fulfillment of the requirements for the degree of the Doctorate Program in Computer Science and Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

Co-advisor: Prof. Dr. Luís Jorge Lima Ferrás

USP – São Carlos

August 2022

*Este trabalho é dedicado a minha família (meu esposo José e ao meu filho Manassés),
aos meus pais (Hugo e Carmen) e a minhas irmãs (Verónica e Ana).*

AGRADECIMENTOS

- Agradeço primeiramente a Deus que neste tempo ajudou-me a confiar mais nele, e por colocar pessoas na minha vida que fizeram a minha trajetória pela USP mais leve e alegre.
- Agradeço ao meu esposo José Miguel que me animou a me candidatar ao doutorado e acompanhar-me em todo este caminho.
- Agradeço também ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC - USP) pois me deram a oportunidade de entrar no Programa e aprender todo o necessário para desenvolver este trabalho.
- Agradeço ao meu orientador Dr. Antonio Castelo Filho por me aceitar como orientanda e por me ensinar tudo o que aprendi até agora. Além disso, recebi muita compreensão da parte dele em diferentes momentos da minha caminhada ao longo do doutorado.
- Um agradecimento especial ao meu coorientador Dr. Luís Lima Ferrás, pois ele tem-me ajudado demais. Desde preparar-me para a qualificação até agora na escrita da tese, ele tem acreditado em mim e em meu desempenho no doutorado, e, tem tido muita paciência para comigo.
- Uma grande admiração para uma colega e amiga, Dra. Juliana Bertoco, quem não duvidou em me ajudar e explicar muitas coisas que ela desenvolveu, e que foram usadas de base para o trabalho feito aqui.
- Agradeço aos pesquisadores Prof. Alexandre Miguel Prior Afonso (FEUP-Universidade de Porto), Profa. Luísa Morgado (UTAD - Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro) e a Profa. Magda (NOVA School of Science and Technology) pelo aporte matemático assim como os trabalhos que foram usados nesta dissertação.
- Além disso, agradeço pelas bolsas outorgadas pela CAPES e pela FAPESP (processo 2017/21105-6) através do CeMEAI (Centro de Ciências Matemática Aplicadas à Indústria), as quais foram de muita ajuda no meu mantimento na cidade de São Carlos.
- Agradeço o uso do Cluster. "Pesquisa desenvolvida com utilização dos recursos computacionais do Centro de Ciências Matemáticas Aplicadas à Indústria (CeMEAI), financiados pela FAPESP (proc. 2013/07375-0)."
- Agradeço ao pessoal do LMACC (Laboratório de Matemática Aplicada e Computação Científica), os quais transmitiram muita colaboração e amizade, amo vocês!
- Agradeço as orações dos membros da Igreja Metodista em São Carlos, e o companheirismo que tive durante o tempo que morei em São Carlos. Sempre levarei vocês no meu coração.

*“Mas, buscai primeiro o reino de Deus, e a sua justiça,
e todas estas coisas vos serão acrescentadas.”*

Mateus 6:33

RESUMO

LEIVA R. T. **Desenvolvimento e implementação numérica de modelos viscoelásticos generalizados e o estudo de fluidos complexos**. 2022. 135 p. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2022.

A modelagem dos fenômenos físicos melhorou bastante nos últimos anos, principalmente devido ao desenvolvimento contínuo de novas ferramentas matemáticas (numéricas e analíticas). Hoje em dia, a simulação numérica de grande parte do trabalho experimental é uma demanda e, o objetivo é geralmente a otimização do processo e a redução de custos. Um caso clássico é o estudo de escoamentos de fluidos e mecânica dos sólidos, onde a modelagem numérica desempenha um papel fundamental. Nas últimas décadas, muita atenção foi dada à modelagem fracionária, onde a derivada de ordem inteira típica é substituída por uma não-inteira, levando a uma definição mais geral de derivada e a uma definição mais geral de (sistemas de) equações diferenciais. Neste trabalho, estamos interessados na solução numérica de equações de modelagem constitutivas que usam funções resultantes do cálculo fracionário, para modelar materiais viscoelásticos. Portanto, neste trabalho, começamos por mostrar a conexão entre os modelos de Maxwell viscoelásticos clássicos e fracionários, apresentando a teoria básica por trás dessas equações constitutivas. Em seguida desenvolvemos novos modelos generalizados que permitem fazer uma boa modelagem de diferentes materiais viscoelásticos, mas que, não apresentam os problemas de núcleos singulares encontrados nos modelos fracionários (os núcleos singulares representam um problema na implementação numérica dos modelos). Os novos modelos são implementados em códigos numéricos gerais, mais particularmente, no código HiG-Flow. A implementação numérica é verificada desenvolvendo novas soluções analíticas e comparando as soluções numéricas mais complexas com resultados de referência da literatura.

Palavras-chave: Modelos viscoelásticos generalizados, gPTT, gK-BKZ, Mittag-Leffler, HiG-Flow.

ABSTRACT

LEIVA R. T. **Numerical Development and Implementation of Generalised Viscoelastic Models and the Study of Complex Fluids**. 2022. 135 p. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2022.

The modeling of physical phenomena has greatly improved in recent years, mainly thanks to the continuous development of new mathematical tools (numerical and analytical). Today, numerical simulation of much of the experimental work is in demand, and the goal is usually process optimization and cost reduction. A classical case is the study of fluid flow and solid mechanics, where numerical modeling plays a key role. In recent decades, much attention has been paid to fractional modeling, where the typical integer order derivative is replaced by a non-integer one, leading to a more general definition of the derivative and a more general definition of (systems of) differential equations. In this work, we are interested in the numerical solution of constitutive modeling equations using functions resulting from fractional calculus to model viscoelastic materials. Therefore, in this work, we start by showing the connection between the classical and fractional Maxwell viscoelastic models and present the basic theory behind these constitutive equations. We then develop new generalized models that provide good modeling of various viscoelastic materials, but do not exhibit the problems with singular kernels that occur in fractional models (singular kernels pose a problem in the numerical implementation of the models). The new models will be implemented in general numerical codes, in particular the HiG-Flow code. The numerical implementation will be verified by developing new analytical solutions and comparing more complex numerical solutions with reference results from the literature.

Keywords: Generalised viscoelastic models, gPTT, gK-BKZ, Mittag-Leffler, HiG-Flow.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Função Gamma.	30
Figura 2 – Mola e amortecedor usados na representação mecânica do modelo de Maxwell.	42
Figura 3 – Relaxação de um fluido viscoelástico. O fluido está em repouso, quando é aplicada uma deformação constante, que, se mantém constante ao longo do tempo.	43
Figura 4 – Rede Lodge-Yamamoto. O líquido polimérico consiste em segmentos poliméricos conectados por junções e muda constantemente sua topologia. Cada cadeia é feita de N moléculas com um vetor de ponta a ponta comum h	45
Figura 5 – (Topo) Combinação infinita de molas e êmbolos levando à formação de um springpot. (abaixo) Modelo Fracionário de Maxwell (FMM). As constantes \mathbb{V} e \mathbb{G} são usadas para substituir o símbolo Φ . Estas constantes são conhecidas como quasi-propriedades (JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014).	55
Figura 6 – Diferentes casos limite que podem ser obtidos do FMM. (a) O limite $\alpha \rightarrow 1$: fluido newtoniano com duas <i>dashpots</i> em série (topo - $\beta \rightarrow 1$), ou um fluido newtoniano com um <i>dashpot</i> e uma mola rígida em série (abaixo - $\mathbb{G} \rightarrow \infty$); (b) O limite $\beta \rightarrow 0$: dá um sólido Hookeano (topo) com duas molas em série, o modelo clássico Maxwell (abaixo).	57
Figura 7 – Ajuste de dados viscoelásticos lineares para G' e G'' obtidos para um HDPE a 190°C (ANSARI; HATZIKIRIAKOS; MITSOULIS, 2012): (a) Ajuste do modelo de Maxwell; (b) Ajuste do fluido viscoelástico fracionário; (c) Ajuste do modelo fracionário de Maxwell; (d) Ajuste em modo Maxwell de 8 modos (os parâmetros são dados em (MITSOULIS,)).	59
Figura 8 – (a) Rede Lodge-Yamamoto. O líquido polimérico consiste em segmentos poliméricos conectados por junções e muda constantemente sua topologia. Cada cadeia é feita de N moléculas com um vetor de ponta a ponta comum h . (b) Forma exponencial da função K que foi intuitivamente sugerida por Nhan Phan-Thien (PHAN-THIEN, 1978) para descrever a taxa de destruição de junções, considerando dois valores diferentes de ε (denotados por ε_1 e ε_2). Também traçamos a forma linear de $K(\sigma_{kk})$ para comparação.	63
Figura 9 – Influência de α e β na forma de $\Gamma(\beta)E_{\alpha,\beta}(z)$ onde $z = \varepsilon\lambda\sigma_{kk}/\eta_p$. (a) $\beta = 1$, (b) $\alpha = 1$. (O software Mathematica foi usado para traçar esta função.)	64

Figura 10 – Ajuste do modelo (FERRÁS <i>et al.</i> , 2019; FERRÁS <i>et al.</i> , 2019) aos dados de viscosidade de cisalhamento e primeira diferença de tensão normal obtidos por Quinzani et al. para uma solução de polímero concentrado (QUINZANI; ARMSTRONG; BROWN, 1994). Observe que no limite $Wi \ll 1$ temos $\lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) \rightarrow \eta_p = G\lambda$. (a) Exponential PTT, (b) PTT generalizado. Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas cheias e tracejadas representam o ajuste obtido com cada modelo para $\varepsilon = 3000, 0.25$, respectivamente. O erro foi calculado apenas para o melhor ajuste (linhas tracejadas em (a) e linhas sólidas em (b)).	67
Figura 11 – Ajuste à viscosidade extensional usando os modelos PTT exponencial e generalizado. Os dados reológicos foram obtidos de Nielsen et al. (NIELSEN <i>et al.</i> , 2006).	69
Figura 12 – Geometrias de canal e tubo	70
Figura 13 – Ajuste das contribuições elásticas e viscosas G' e G'' ao módulo viscoelástico linear obtido a partir da caracterização reológica de um poliestireno, Polystyrol 158K da BASF utilizando (a) modelo Maxwell; (b) modelo Maxwell com 2 modos; (c) O modelo proposto neste trabalho, com a função ML de um parâmetro $E_\alpha(\cdot)$ Maxwell-ML.	76
Figura 14 – Variação do tempo de relaxação com α e β	77
Figura 15 – Diagrama de Pipkin que ilustra os modelos lineares e não lineares através de um escoamento oscilatório de cisalhamento.	77
Figura 16 – Variação de α (com $\beta = 1.0$ fixo) da tensão normal σ_{xx} (eq. (4.71)) e da tensão de cisalhamento σ_{xy} (eq. (4.72)) num escoamento de cisalhamento.	82
Figura 17 – Variação de β (com $\alpha = 1.0$ fixo) nas expressões tensão normal σ_{xx} (eq. (4.71)) e da tensão de cisalhamento σ_{xy} (eq. (4.72)) num escoamento de cisalhamento.	82
Figura 18 – Variação de α (com $\beta = 1.0$ fixo) nas expressões das tensões normais σ_{xx} (eq. (4.73)) e σ_{yy} (eq. (4.74)) num escoamento elongacional.	85
Figura 19 – Variação de β (com $\alpha = 1.0$ fixo) nas expressões das tensões normais σ_{xx} (eq. (4.73)) e σ_{yy} (eq. (4.74)) num escoamento elongacional.	85
Figura 20 – Geometria do canal usado para a dedução.	89
Figura 21 – HiGTree estrutura de dados: (a) Representação de uma malha hierárquica, (b) Árvore que representa a estrutura do domínio (a).	98
Figura 22 – <i>Stencil</i> de diferenças finitas de 2da. ordem sobre U_c	98
Figura 23 – Geometria dos canais e tubos usados para o cálculo do comprimento de desenvolvimento. (a) Escoamento em canal. (b) Escoamento em tubo.	106
Figura 24 – Representação adimensional da geometria.	107
Figura 25 – Três níveis de refinamento de malha.	108
Figura 26 – Malha com refinamento na linha central.	108

Figura 27 – Comparação entre a solução analítica (linha sólida) (FERRÁS <i>et al.</i> , 2019) e a solução numérica (símbolos) para a malha M_3 com $Re = 10^{-3}$, $Wi = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 com $\varepsilon = 0.25$ (ξ foi definido como 0). (a) $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.5$. (b) $\alpha = 1.5$ e $\beta = 1.5$	109
Figura 28 – (a) Comparação entre o comprimento de desenvolvimento obtido com o modelo gPTT (com $Wi = 0.001$), um fluido Newtoniano, e a correlação proposta por Durst <i>et al.</i> (DURST <i>et al.</i> , 2005), para três malhas diferentes M_1 , M_2 e M_3 . (b) Perfis de velocidade na região totalmente desenvolvida para a malha M_3 , considerando os modelos gPTT e Newtoniano, para $Re = 0,001$ e $Re = 100$	110
Figura 29 – Comprimento de desenvolvimento em função de Wi considerando 99% U_{max} ($\mathcal{L}_{99\%}$) e a malha M_2	112
Figura 30 – Representação adimensional da geometria usada nas simulações do modelo gK-BKZ.	113
Figura 31 – Malhas com diferentes níveis de refinamento usadas na simulação do fluido gK-BKZ	116
Figura 32 – Comparação do perfil de velocidade $u(y)$ com a solução numérica em diferentes tipos de malhas. (a) $u(y)$ comparado com a solução numérica nas malhas M_0 , M_1 , M_2 , M_3 e M_4 . (b) $u(y)$ comparado com a solução numérica nas malhas R_1 , R_2 , R_3 , R_4 e R_5 . Nota: a linha é apenas usada para se perceber melhor o perfil obtido e não representa a solução analítica nos locais onde não aparecem símbolos.	117
Figura 33 – Perfis de tensão obtidos numericamente com diferentes malhas e sua comparação com a solução analítica. As figuras (a), (c) e (e) mostram os resultados obtidos para malhas uniformes. As figuras (b), (d) e (f) mostram os resultados obtidos para malhas com diferentes graus de refinamento.	120
Figura 34 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.9$ e $\beta = 1$	121
Figura 35 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.5$ e $\beta = 1$	122
Figura 36 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.75$ e $\beta = 1$	123
Figura 37 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.75$ e $\beta = 1.25$	124
Figura 38 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 1.0$ e $\beta = 1.25$	125
Figura 39 – Comparação de resultados numéricos obtidos com o modelo gK-BKZ (num escoamento entre placas paralelas) fixando $\beta = 1.0$ e variando $\alpha \in \{0.5, 0.75, 0.9, 1.0\}$. 126	

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Casos particulares da função Mittag - Leffler de 1 parâmetro	31
Tabela 2 – Casos particulares da função Mittag - Leffler de 2 parâmetros	32
Tabela 3 – Valores de comprimento de desenvolvimento de referência para a velocidade ($L_{99\%}$).	113
Tabela 4 – Erro numérico obtido para a velocidade $u(y)$, $\sigma_{xx}(y)$ e $\sigma_{yy}(y)$ nas diferentes malhas.	117

SUMÁRIO

1	CÁLCULO FRACIONÁRIO	29
1.1	Conceitos Básicos	29
1.1.1	<i>Função Mittag - Leffler</i>	30
1.2	Integral Fracionária de Riemann-Liouville	33
1.3	Derivada Fracionária de Riemann-Liouville	35
1.4	Derivada Fracionária de Caputo	36
2	FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	39
2.1	Equações de Navier - Stokes	39
2.1.1	<i>Formulação do Modelo Matemático para Fluidos Poliméricos</i>	41
2.2	Modelo de Maxwell	42
2.3	Modelos Viscoelásticos Não Lineares Diferenciais	45
2.3.1	<i>Modelo Phan-Thien-Tanner (PTT)</i>	45
2.4	Modelos Integrais Não Lineares	46
2.4.1	<i>Modelo K-BKZ</i>	48
2.4.1.1	<i>O Tensor de Finger:</i>	49
2.4.1.2	<i>Equações Governantes:</i>	50
3	MODELOS VISCOELÁSTICOS FRACIONÁRIOS	53
3.1	Algumas Propriedades do FMM	55
3.2	Modelo K-BKZ Fracionário Invariante	56
3.3	Ajuste de Dados Experimentais	58
3.3.1	<i>Limitações do Modelo K-BKZ Fracionário Invariante</i>	59
4	NOVOS MODELOS VISCOELÁSTICOS GENERALIZADOS	61
4.1	Modelo gPTT (PTT Generalizado)	62
4.1.1	<i>Dedução do Modelo gPTT</i>	62
4.1.2	<i>Equações Governantes</i>	65
4.1.3	<i>Estudo Paramétrico do Modelo gPTT</i>	66
4.1.4	<i>Solução Analítica do Modelo gPTT</i>	69
4.1.5	<i>Conclusões</i>	72
4.2	Modelo Maxwell-ML	73
4.2.1	<i>Dedução do Modelo Maxwell-ML</i>	73
4.2.2	<i>Ajuste a Dados Experimentais</i>	75

4.2.3	Modelo Invariante	77
4.2.4	Solução Analítica para Escoamentos Simples	79
4.2.4.1	<i>Escoamento Simples de Cisalhamento</i>	79
4.2.4.2	<i>Escoamento Extensional Uniaxial:</i>	83
4.2.5	Conclusões	85
4.3	Modelo gK-BKZ	86
4.3.1	Dedução do Modelo	86
4.3.2	Solução Analítica para o Escoamento Entre Placas Paralelas	87
4.3.3	Solução Semi-Analítica	89
4.3.4	Conclusões	95
5	IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DOS MODELOS GPTT E GK-BKZ	97
5.1	O Sistema HiG-Flow	99
5.1.1	Discretização Espaço-Temporal	99
5.1.2	Discretização do Termo Convectivo	100
5.1.3	Discretização do Termo Difusivo	100
5.1.4	Discretização do Termo Fonte	100
5.1.5	Acoplamento Velocidade-Pressão	100
5.1.6	Métodos Numéricos para a Equação Constitutiva	101
5.1.6.1	Método Numérico para o Modelo gPTT	102
5.1.6.2	Método Numérico para o Modelo gK-BKZ	103
5.2	Conclusões	104
6	RESULTADOS NUMÉRICOS	105
6.1	Comprimento de Desenvolvimento: gPTT	105
6.1.1	Introdução	105
6.1.2	Condições de Contorno, Geometria e Malhas	107
6.1.3	Validação do Método Numérico	108
6.1.3.1	<i>Comparação com a Solução Analítica:</i>	108
6.1.3.2	<i>Comparação com o Comprimento de Desenvolvimento de um Fluido Newtoniano:</i>	109
6.1.4	Comprimento de Desenvolvimento de um Fluido gPTT	110
6.1.4.1	<i>Simulações:</i>	110
6.1.5	Creeping Flow	111
6.1.6	Conclusões	112
6.2	Escoamento em Canal: gK-BKZ	113
6.2.1	Conclusões	119
7	CONCLUSÕES FINAIS E TRABALHO FUTURO	127

REFERÊNCIAS 131

INTRODUÇÃO

O estudo de materiais viscoelásticos está aumentando em muitas áreas de pesquisa e isso faz com que o conhecimento do comportamento desse tipo de fluidos cresça cada vez mais. Dentro da grande gama de aplicações o leitor ficaria surpreso ao saber que podemos encontrar a viscoelasticidade em coisas tão simples como as sacolas que recebemos ao fazer uma compra no supermercado, nos alimentos que diariamente comemos como é o caso do pão ou outros produtos de panificação, as frutas, ovos, ou alimentos como a mandioquinha, etc. É importante dizer que também no nosso corpo podemos encontrar viscoelasticidade como é o caso de nossa pele, sangue, saliva e até nos nossos ossos.

Para se conseguir melhorar a qualidade de tais produtos, diminuir o desperdício ou entender melhor o funcionamento do nosso corpo e assim obter meios para curar certas enfermidades é de interesse descrever tal comportamento através de modelos matemáticos e simulações computacionais.

Para entender melhor o conceito podemos dizer de uma forma concisa que um fluido viscoelástico é um fluido que se comporta como viscoso e elástico ao mesmo tempo. Se tivermos um material elástico ideal, sob uma tensão, este responde com uma deformação tal que ao cessar a tensão o corpo retorna à sua forma e volume original. A diferença para um material viscoso, quando este está sob uma tensão de cisalhamento (por exemplo), é que este responde de forma irreversível às deformações sofridas. Outra diferença é que o fluido viscoso dissipa energia enquanto que, o fluido viscoelástico dissipa alguma energia e armazena o restante (dependendo do grau de elasticidade e viscosidade).

Dada a complexidade das equações diferenciais ou integrais que governam o escoamento de fluidos, ao longo dos anos têm vindo a ser desenvolvidos vários *softwares* para a resolução de problemas que envolvem escoamentos de fluidos viscoelásticos complexos. Porém, continuam a existir limitações quer ao nível dos modelos, que não conseguem descrever corretamente todos os comportamentos de fluidos viscoelásticos, quer ao nível da solução numérica, que na maior parte das vezes está limitada a problemas com características muito específicas.

Por outro lado, o cálculo fracionário tem demonstrado ser uma ferramenta útil para diversas áreas da matemática, física, engenharia, química, principalmente devido à propriedade de não localidade que possuem os operadores de derivada e integral fracionário. Esta característica ajuda em muito no estudo de problemas com memória, como é o caso dos fluidos viscoelásticos. Nos últimos 30 anos, foram então apresentados na literatura alguns modelos viscoelásticos que substituem as derivadas clássicas dos modelos tradicionais, por, derivadas fracionárias.

Estes novos modelos apresentam propriedades muito boas no que diz respeito ao ajuste a dados experimentais. De notar que a simples substituição dos operadores não deve ser vista como uma prática correta, e que, no passado mais recente, já foi apresentada uma dedução molecular para alguns desses modelos.

A grande generalidade dos modelos fracionários sofre de um problema grave: não são invariantes. Ou seja, o resultado físico obtido com esses modelos pode ser diferente para diferentes observadores. Este problema ainda não está totalmente resolvido, porém, já podemos encontrar na literatura escassos trabalhos que resolvem este problema, para modelos particulares (YANG; LAM; ZHU, 2010). Outros *problemas* dos modelos fracionários são: o fato de apresentarem integrais com núcleos singulares (que podem trazer problemas numéricos na sua implementação); os parâmetros/propriedades do modelo terem unidades *fracionárias*. Este último caso, não é visto por muitos como um problema, sendo dado o nome de *quasi-propriedade* a estes novos parâmetros.

Portanto, os objetivos propostos neste trabalho são:

- o desenvolvimento de novos modelos generalizados, diferenciais e integrais, que usam as funções geradas nos modelos fracionários, mas que, não apresentam núcleos singulares, e que todos os parâmetros tenham unidades inteiras. Estes novos modelos deverão permitir obter um bom ajuste a dados experimentais;
- a implementação numérica, dos novos modelos desenvolvidos, num código numérico de diferenças finitas. Tal implementação será feita no sistema HiG-Flow, desenvolvido na Universidade de São Paulo – campus de São Carlos. Este código irá permitir o estudo do escoamento de fluidos complexos, com aplicações na indústria.

A tese está organizada da seguinte forma:

No capítulo 1 expomos os conceitos, definições e resultados básicos do Cálculo Fracionário, especificamente trataremos as derivadas fracionárias de Riemann–Liouville e de Caputo.

No capítulo 2, serão apresentadas as formulações matemáticas para fluidos newtonianos e fluidos viscoelásticos com o objetivo de mostrar as diferenças entre elas. Também serão apresentados os modelos constitutivos diferenciais e integrais usados para representação do comportamento de fluidos poliméricos. Para o nosso interesse veremos a vantagem do modelo K-BKZ sobre os modelos diferenciais.

No capítulo 3, apresentamos a aplicação do Cálculo Fracionário em modelos viscoelásticos, particularmente no modelo integral K-BKZ, e com isso algumas das propriedades importantes (entre elas o fato de que o modelo K-BKZ fracionário é invariante). É ainda abordado o fato dos núcleos deste modelos integrais serem singulares.

No capítulo 4 são desenvolvidos os novos modelos diferenciais e integrais com núcleos suaves. São apresentadas as vantagens do uso destes novos modelos, quando comparados com as suas versões clássica e fracionária (os novos modelos não têm o problema das dimensões fracionárias nos parâmetros usados, e, os núcleos são suaves). Este capítulo apresenta alguns dos novos desenvolvimentos desta tese.

No capítulo 5 se apresentará o sistema Hig-Flow, as suas principais características, assim como o tipos de discretização e métodos numéricos implementados. Ainda neste capítulo, é feita uma descrição detalhada das novas implementações numéricas dos dois modelos.

No capítulo 6 são apresentados os resultados numéricos de aplicação.

Finalmente, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões e as seguintes etapas a desenvolver no futuro.

CÁLCULO FRACIONÁRIO

As derivadas fracionárias resultam de uma generalização das derivadas de ordem inteira clássica, através da substituição dessa ordem inteira por um número real. Nos últimos anos, o interesse no cálculo fracionário aumentou bastante, tendo sido utilizado em muitos campos de investigação, tais como: redes elétricas, teoria de controle de sistemas dinâmicos, probabilidade e estatística, eletroquímica da corrosão, física química, óptica, engenharia, acústica, ciência de materiais e processamento de sinal. Todos estes campos beneficiaram do cálculo fracionário, o que permitiu uma melhor modelagem de diversos fenômenos através do uso de equações diferenciais de ordem fracionária linear ou não linear. (MILLER; ROSS, 1993), (SAMKO; KILBAS; MARICHEV, 1993), (PODLUBNY, 1999).

Neste capítulo apresentaremos de uma forma resumida a origem do cálculo fracionário, além de algumas das definições dos operadores fracionários mais comuns, tais como a integral fracionária de Riemann-Liouville e a derivada fracionária de Caputo. Também serão descritas certas propriedades destes novos operadores, que, irão servir de base para o estudo e desenvolvimento de novos modelos generalizados para fluidos viscoelásticos.

1.1 Conceitos Básicos

Uma das funções básicas do cálculo fracionário é a função Gamma de Euler, a qual generaliza o *fatorial* de um número natural.

Definição 1.1.1. A função Gamma, é a função $\Gamma : \mathbb{R} - \mathbb{Z}_0^- \rightarrow \mathbb{R}$, tal que

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt. \quad (1.1)$$

A função Gamma tem as seguintes propriedades:

1. Seja $z > 0$, então

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z). \quad (1.2)$$

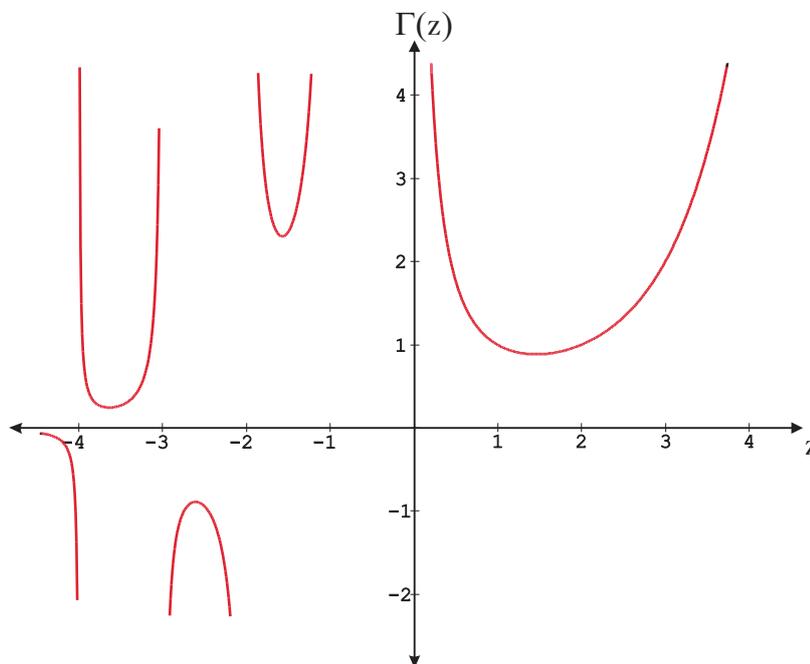
2. A função Gamma pode ser representada pelo limite

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n!n^z}{z(z+1)(z+2)\dots(z+n)}, \quad z > 0. \quad (1.3)$$

3. A função Gamma tem polos simples nos pontos $z = -n$, ($n=0,1,2,\dots$).

A representação gráfica da função Gamma é dada na Fig. 1.

Figura 1 – Função Gamma.



Fonte: Elaborada pelo autor.

1.1.1 Função Mittag - Leffler

Em 1903, Mittag–Leffler (MITTAG-LEFFLER, 1903) estudou e definiu uma função, hoje conhecida em sua homenagem por função Mittag–Leffler, sendo uma possível generalização da função exponencial. A função proposta por Mittag–Leffler depende apenas de um parâmetro.

Definição 1.1.2 (Função Mittag - Leffler de um parâmetro). A função Mittag - Leffler de um parâmetro é dada pela série

$$E_{\alpha}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(1 + \alpha k)}, \quad (1.4)$$

sendo $\alpha \in \mathbb{C}$, $Re(\alpha) > 0$. $\Gamma(x)$ é a função Gamma.

De fato, a função $E_\alpha(x)$ assim definida é uma generalização da função exponencial, pois quando consideramos $\alpha = 1$ temos,

$$E_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(1+k)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = e^x.$$

Observemos da definição acima que quando tomamos na função de Mittag-Leffler, $x = 0$ e qualquer $\alpha \in \mathbb{C}$ tal que $Re(\alpha) > 0$, ou seja, $E_\alpha(0)$, obtemos 1, pois

$$E_\alpha(0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{0^k}{\Gamma(1+\alpha k)} = \frac{1}{\Gamma(1)} + \frac{0}{\Gamma(\alpha+1)} + \frac{0}{\Gamma(2\alpha+1)} + \dots = 1$$

Podemos considerar varios casos particulares como segue na tabela 1:

$E_2(-x^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^{2k}}{\Gamma(2k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k}}{2k!} = \cos(x)$
$E_2(x^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2k}}{\Gamma(2k+1)} = \cosh(x)$
$E_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(1)} = \sum_{k=0}^{\infty} x^k = \frac{1}{1-x} \text{ se } x < 1.$

Tabela 1 – Casos particulares da função Mittag - Leffler de 1 parâmetro

Em 1905, Wiman ([WIMAN, 1905](#)) propôs e estudou uma generalização da função de Mittag-Leffler, que chamaremos de função de Mittag-Leffler com dois parâmetros

Definição 1.1.3 (Função Mittag - Leffler de dois parâmetros). A função de Mittag-Leffler de dois parâmetros é dada pela seguinte série,

$$E_{\alpha,\beta}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(\beta + \alpha k)}, \quad (1.5)$$

com $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $Re(\beta) > 0$ e $Re(\alpha) > 0$.

Observemos que quando $\beta = 1$ na equação (1.5) recuperamos a função de Mittag-Leffler de um parâmetro dada pela equação (1.4). De fato,

$$E_{\alpha,1}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(1 + \alpha k)} = E_\alpha(x).$$

Exemplo 1.1.1. Mostraremos que $E_{1,2}(x) = \frac{e^x - 1}{x}$.

De fato, a partir da definição temos

$$E_{1,2}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+2)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{(k+1)!}$$

Considerando a seguinte mudança de índices $k \rightarrow k-1$ temos

$$E_{1,2}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{k-1}}{k!} = \frac{1}{x} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \right) = \frac{1}{x} (e^x - 1) = \frac{e^x - 1}{x}. \quad \square$$

Assim podemos encontrar muitos casos especiais:

$E_{2,2}(x^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x)^{2k}}{\Gamma(2k+2)} = \frac{1}{x} \sinh(x).$
$E_{1,1}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(k+1)} = e^x$
$E_{2,1}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma(2k+1)} = \cosh(\sqrt{x}).$

Tabela 2 – Casos particulares da função Mittag - Leffler de 2 parâmetros

Teorema 1.1.1. A função Mittag–Leffler verifica as seguintes relações:

- (i) $E_{\alpha,\beta}(z) = zE_{\alpha,\alpha+\beta}(z) + \frac{1}{\Gamma(\beta)}$.
- (ii) $E_{\alpha,\beta}(z) = \beta E_{\alpha,\beta+1}(z) + \alpha z \frac{d}{dz} E_{\alpha,\beta+1}(z)$.
- (iii) $\left(\frac{d}{dz} \right)^m \left[z^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(z^\alpha) \right] = z^{\beta-m-1} E_{\alpha,\beta-m}(z^\alpha)$ com $Re(\beta - m) > 0$ e $m \in \mathbb{N}$

Prova:

(i) Temos

$$\begin{aligned} E_{\alpha,\beta}(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\beta + \alpha k)} = \sum_{k=-1}^{\infty} \frac{z^{k+1}}{\Gamma(\beta + \alpha k + \alpha)} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+1}}{\Gamma(\beta + \alpha + \alpha k)} + \frac{1}{\Gamma(\beta)} = zE_{\alpha,\alpha+\beta}(z) + \frac{1}{\Gamma(\beta)} \end{aligned}$$

(ii) Temos

$$\begin{aligned}
\beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \alpha z \frac{d}{dz} E_{\alpha, \beta+1}(z) &= \beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \alpha z \frac{d}{dz} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\beta + 1 + \alpha k)} \\
&= \beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \alpha z \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k z^{k-1}}{\Gamma(\beta + 1 + \alpha k)} \\
&= \beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha k z^k}{\Gamma(\beta + 1 + \alpha k)} \\
&= \beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha k + \beta - \beta) z^k}{\Gamma(\beta + 1 + \alpha k)} \\
&= \beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha k + \beta) z^k}{\Gamma(\beta + 1 + \alpha k)} - \beta E_{\alpha, \beta+1}(z)
\end{aligned}$$

Pela propriedade da função Gamma $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$, obtemos

$$\beta E_{\alpha, \beta+1}(z) + \alpha z \frac{d}{dz} E_{\alpha, \beta+1}(z) = E_{\alpha, \beta}(z) \quad (1.6)$$

(iii) Temos

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d}{dz}\right)^m \left[z^{\beta-1} E_{\alpha, \beta}(z^\alpha) \right] &= \left(\frac{d}{dz}\right)^m \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\alpha k + \beta - 1}}{\Gamma(\beta + \alpha k)} \right] \\
&= \left[\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{d}{dz}\right)^m \frac{z^{\alpha k + \beta - 1}}{\Gamma(\beta + \alpha k)} \right]
\end{aligned}$$

como

$$\left(\frac{d}{dz}\right)^m z^{\alpha k + \beta - 1} = \frac{\Gamma(\alpha k + \beta)}{\Gamma(\alpha k + \beta - m)} z^{\alpha k + \beta - m - 1}$$

entonces

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d}{dz}\right)^m \left[z^{\beta-1} E_{\alpha, \beta}(z^\alpha) \right] &= \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha k + \beta)}{\Gamma(\alpha k + \beta - m)} \cdot \frac{z^{\alpha k + \beta - m - 1}}{\Gamma(\beta + \alpha k)} \right] \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\alpha k + \beta - m - 1}}{\Gamma(\alpha k + \beta - m)} \\
&= z^{\beta - m - 1} \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{\alpha k}}{\Gamma(\alpha k + \beta - m)} \\
&= z^{\beta - m - 1} E_{\alpha, \beta - m}(z^\alpha)
\end{aligned}$$

1.2 Integral Fracionária de Riemann-Liouville

Definição 1.2.1. Seja $f \in L_1[a, b]$, $\alpha \in \mathbb{R}_+$. A integral fracionária de Riemann-Liouville de ordem α da função f , é denotada por J_a^α e é definida por:

$$J_a^\alpha f(x) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} f(t) dt, \quad a \leq x \leq b \quad (1.7)$$

Para $\alpha = 0$, temos que $J_a^0 := I$, operador identidade.

Observação 1.2.1. Quando $\alpha \in \mathbb{N}$, obtemos

$$J_a^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-s)^\alpha f(s) ds = \int_a^x dx_1 \int_a^{x_1} dx_2 \dots \int_a^{x_{\alpha-1}} f(s) ds \quad (x > a)$$

ou seja, obtemos a fórmula que reduz a integral inteira de ordem α de uma função real para uma única integral de convolução.

O próximo teorema estabelece condições para a existência da integral fracionária de uma função $f(x)$.

Teorema 1.2.1. Seja $f \in L_1[a, b]$ e $\alpha > 0$. Então a integral fracionária J_a^α existe para quase todo $x \in [a, b]$. Além disso a função $J_a^\alpha f$ é um elemento de $L_1[a, b]$.

Prova: Ver pág. 13, Teorema 2.1 em (DIETHELM, 2010).

Exemplo 1.2.1. Seja $f(x) = (x-a)^\mu$, para $\mu > -1$ e $\alpha > 0$.

Pela definição temos que

$$J_a^\alpha (x-a)^\mu = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} (t-a)^\mu dt$$

Fazendo a mudança de variável

$$s = \frac{t-a}{x-a} \quad \Rightarrow \quad ds = \frac{dt}{x-a}$$

temos

$$\begin{aligned} J_a^\alpha (x-a)^\mu &= \frac{(x-a)^{\alpha+\mu}}{\Gamma(\alpha)} \int_0^1 (1-s)^{\alpha-1} s^\mu ds \\ \therefore J_a^\alpha (x-a)^\mu &= \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+\alpha+1)} (x-a)^{\alpha+\mu} \quad \square \end{aligned} \quad (1.8)$$

Exemplo 1.2.2. Seja $g(x) = k$, a função constante com $k \in \mathbb{R}$.

Temos que

$$\begin{aligned} J_a^\alpha g(x) &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} k dt \\ &= \frac{k}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} dt \\ &= \frac{k}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} dt \\ &= \frac{k}{\Gamma(\alpha)} \frac{-(x-t)^\alpha}{\alpha} \Big|_a^x = \frac{k}{\Gamma(\alpha)} \frac{(x-a)^\alpha}{\alpha} \\ &= \frac{k(x-a)^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \end{aligned}$$

1.3 Derivada Fracionária de Riemann-Liouville

Para obter uma definição de derivada fracionária, define-se $n = \lceil \alpha \rceil$ o menor número inteiro maior que α , isto significa $n - 1 < \alpha \leq n$.

Definição 1.3.1. Seja $\alpha \in \mathbb{R}_+$ y $n = \lceil \alpha \rceil$. A derivada fracionária de Riemann-Liouville de ordem α de uma função f , é denotada por D_a^α , e é definida assim

$$D_a^\alpha f(x) = D^n J_a^{n-\alpha} f(x) \quad (1.9)$$

onde $a \leq x \leq b$.

Para $\alpha = 0$, definimos $D_a^0 := I$, o operador identidade.

Se considerarmos $\alpha = k \geq 1$ onde $k \in \mathbb{Z}$ e $x > a$, então

$$D_a^\alpha f(x) = D^k (I_a^0 f(x)) = D^k f(x)$$

o que quer dizer, que para $x > a$, a derivada fracionária de Riemann-Liouville (1.9) de ordem $\alpha = k$ coincide com a derivada convencional de ordem k .

Como consequência da definição 1.3.1, veremos como calcular a derivada fracionária de algumas funções elementares.

Exemplo 1.3.1. Seja $f(x) = (x - a)^\mu$ para algum $\mu > -1$ e $\alpha > 0$. Então, pelo exemplo 1.2.1 tem-se que

$$J_a^\alpha (x - a)^\mu = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\alpha + \mu + 1)} (x - a)^{\alpha + \mu}$$

então

$$\begin{aligned} D_a^\alpha (x - a)^\mu &= D^{\lceil \alpha \rceil} I_a^{\lceil \alpha \rceil - \alpha} (x - a)^\mu \\ &= \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\lceil \alpha \rceil - \alpha + \mu + 1)} D^{\lceil \alpha \rceil} (x - a)^{\lceil \alpha \rceil - \alpha + \mu} \end{aligned}$$

Agora, se $\alpha - \mu \in \mathbb{N}$, o lado direito é a $\lceil \alpha \rceil$ -ésima derivada do polinômio de grau $\lceil \alpha \rceil - (\alpha - \mu) \in \{0, 1, \dots, \lceil \alpha \rceil - 1\}$. Com isso temos que

$$D_a^\alpha (x - a)^\mu = 0, \quad \forall \alpha > 0.$$

Portanto, se $\alpha - \mu \notin \mathbb{N}$, tem-se

$$D_a^\alpha (x - a)^\mu = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - \alpha + 1)} (x - a)^{\mu - \alpha}. \quad \square \quad (1.10)$$

1.4 Derivada Fracionária de Caputo

Em 1967, M. Caputo publicou um trabalho (CAPUTO, 2008), onde uma nova definição de derivada fracionária é apresentada. Nesta seção, se estabelecerá esta definição e algumas propriedades deste novo operador, o qual hoje em dia, é chamado *derivada fracionária de Caputo*.

Definição 1.4.1. Seja $\alpha \in \mathbb{R}^+$ e $n = \lceil \alpha \rceil$. A derivada fracionária de Caputo de ordem α de uma função f , é denotada por D_{*a}^α e está definida por

$$D_{*a}^\alpha f(x) = J_a^{n-\alpha} D^n f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^x (x-t)^{n-\alpha-1} \frac{d^n}{dt^n} f(t) dt \quad (1.11)$$

para $a \leq x \leq b$. Começemos analisando o caso $\alpha \in \mathbb{N}$. Aqui temos $n = \alpha$ e assim nossa definição implica que

$$D_{*a}^\alpha f(x) = J_a^0 D^n f(x) = D^n f(x),$$

i.e, para n inteiro recuperamos o caso clássico.

Como se pode ver na definição da derivada fracionária de Caputo também deve-se conhecer a integral fracionária de Riemann-Liouville, mas ao compará-lo com a derivada fracionária de Riemann-Liouville, deve-se notar como a sequência de diferenciação de ordem inteira e integração fracionária é trocada. Devido a essa mudança aparentemente sutil, há um impacto importante na estrutura da derivada fracionária, que pode ser vista no exemplo a seguir:

Exemplo 1.4.1. Seja $\alpha \geq 0$, $n = \lceil \alpha \rceil$ e $f(x) = (x-a)^\mu$, com $\mu \geq 0$. Vamos obter $D_{*a}^\alpha f$.

Solução:

Por definição

$$D_{*a}^\alpha (x-a)^\mu = I_a^{n-\alpha} D^n (x-a)^\mu$$

Se $\mu \in \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$, então

$$D_{*a}^\alpha (x-a)^\mu = I_a^{n-\alpha} D^n (x-a)^\mu = 0$$

Por outro lado se $\mu \in \mathbb{N}$ e $\mu \geq n$ ou $\mu \notin \mathbb{N}$ e $\mu > n-1$, tem-se

$$\begin{aligned} D_{*a}^\alpha (x-a)^\mu &= I_a^{n-\alpha} D^n (x-a)^\mu \\ &= I_a^{n-\alpha} \left(\frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-n+1)} (x-a)^{\mu-n} \right) \\ &= \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-n+1)} I_a^{n-\alpha} (x-a)^{\mu-n} \end{aligned}$$

Agora considerando o resultado obtido em (1.8) podemos ver que:

$$D_{*a}^\alpha (x-a)^\mu = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)} (x-a)^{\mu-\alpha}$$

Resumindo, temos obtido o seguinte:

$$D_{*a}^{\alpha}(x-a)^{\mu} = \begin{cases} 0 & \text{se } \mu \in \{0, 1, 2, \dots, n-1\} \\ \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)}(x-a)^{\mu-\alpha} & \text{se } \mu \in \mathbb{N} \text{ e } \mu \geq n \text{ ou} \\ & \mu \notin \mathbb{N} \text{ e } \mu > n-1 \end{cases}$$

Se compararmos este resultado com (1.10), onde o operador diferencial Riemann-Liouville foi aplicado à função f , observamos, em particular, que os dois operadores têm núcleos diferentes e que o domínio dos operadores (considerando aqui o intervalo de parâmetros μ) também são diferentes. No entanto, apresentamos de seguida um primeiro resultado que estabelece uma conexão importante entre os operadores diferenciais fracionários de Riemann-Liouville e Caputo.

Lema 1. Seja $n \geq 0$ e $m = \lceil n \rceil$. Assumimos que f é tal que $D_{*a}^n f$ e $D_a^n f$ existem. Então,

$$D_{*a}^n f(x) = D_a^n f - \sum_{k=0}^{m-1} \frac{D^k f(a)}{\Gamma(k-n+1)}(x-a)^{k-n}.$$

Prova: Ver pág. 53, Lema 3.4 em (DIETHELM, 2010).

Uma consequência imediata deste lema é

Lema 2. Assuma as hipóteses do lema 1 (Seja $n \geq 0$ e $m = \lceil n \rceil$. Assumimos que f é tal que $D_{*a}^n f$ e $D_a^n f$ existem). Então,

$$D_{*a}^n f(x) = D_a^n f$$

se e somente se

$$D^k f(a) = 0 \text{ para } k = 0, 1, \dots, m-1.$$

Tendo em conta o que foi exposto neste capítulo, podemos concluir que a derivada de Caputo será aquela que mais se adequa a aplicações à Engenharia e Física. Da resolução de determinadas equações diferenciais fracionárias de Caputo, de interesse para escoamentos de fluídos viscoelásticos, surge como solução a função Mittag-Leffler. Podemos então dizer que a função exponencial está para as equações diferenciais clássicas assim como a função Mittag-Leffler está para as equações diferenciais fracionárias.

Tendo em conta as propriedades não locais deste tipo de operadores, e pelo fato de fluídos viscoelástico terem uma *memória* inerente que depende mais fortemente das deformações próximas do presente (a deformação do presente depende do conjunto de todas as deformações do passado, em todos os pontos do domínio), este tipo de operadores são uma mais valia na descrição de escoamentos viscoelásticos.

Algumas dessas boas propriedades dos operadores fracionários estão inerentes na função Mittag-Leffler. Esta função será então usada no desenvolvimento de novos modelos generalizados, que apresentam um bom compromisso entre a modelação de fluidos viscoelásticos e a sua fácil implementação numérica. Este novos modelos permitem fazer um bom/razoável ajuste a dados experimentais, mantendo as unidades físicas expectáveis dos parâmetros de ajuste, e, usando núcleos suaves em modelos integrais (o que não acontece com os modelos viscoelásticos fracionários).

FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Um fluido viscoelástico é um fluido que se comporta como viscoso e elástico ao mesmo tempo. Se tivermos um material elástico ideal, sob uma tensão, este responde com uma deformação tal que ao cessar a tensão o corpo retorna à sua forma e volume original. A diferença para um material viscoso, quando este está sob uma tensão de cisalhamento (por exemplo), é que este responde de forma irreversível às deformações sofridas. Outra diferença é que o fluido viscoso dissipa energia enquanto que, o fluido viscoelástico dissipa alguma energia e armazena o restante (dependendo do grau de elasticidade e viscosidade). Por isso temos todo o interesse em descrever tal comportamento através de modelos matemáticos, que, podem ser classificados como lineares ou não lineares.

O modelo viscoelástico linear mais popular é o modelo de Maxwell, que incorpora a ideia de um fluido que apresenta características tanto de um sólido elástico Hookeano, como de um fluido viscoso Newtoniano. Daí, entre os principais modelos viscoelásticos diferenciais podemos citar: Oldroyd-B, White-Metzner, Giesekus, Leonov, modelos do tipo FENE, PTT e derivados, Pom Pom, entre outros; e os modelos integrais: UCM, K-BKZ ([BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987](#)).

Descreveremos neste capítulo o modelo Maxwell ([BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987](#)), que irá servir de base para o desenvolvimento do novo modelo de Maxwell generalizado, designado por modelo de Maxwell-ML (onde ML significa Mittag-Leffler). Será ainda apresentado o modelo diferencial PTT ([THIEN; TANNER, 1977](#); [PHAN-THIEN, 1978](#)), o qual será estendido ao modelo generalizado PTT (gPTT).

2.1 Equações de Navier - Stokes

As equações de Navier-Stokes podem ser empregadas para modelar o escoamento de fluidos compressíveis e incompressíveis, para escoamentos turbulentos e laminares. Uma vez

que dada a sua complexidade, não existem soluções analíticas gerais (FORTUNA, 2012) (apenas para geometrias simples e muito específicas), a solução numérica é a única opção. Dependendo das características e propriedades do escoamento e do fluido considerado, simplificações podem ser realizadas nestas equações, facilitando sua solução numérica.

Aplicado a um meio contínuo, e em uma descrição Euleriana, a equação da quantidade de movimento é expressa em sua forma diferencial por:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + b \quad (2.1)$$

onde \mathbf{u} é o vetor velocidade, ρ é a massa específica do material modelado, P é a pressão, $\boldsymbol{\sigma}$ o tensor de tensões de Cauchy e b o vetor força de corpo (entre as quais se encontra a força da gravidade). De uma forma geral, todas as variáveis apresentadas podem variar com o vetor posição x e o tempo t .

Da mesma forma, o princípio da conservação da massa é expressado pela equação da continuidade (ou equação da conservação da massa):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (2.2)$$

Para fluidos incompressíveis, a massa específica ρ é constante, e a equação (2.2) resume-se na equação (2.3). A restrição física de incompressibilidade traduz-se assim na restrição matemática de divergente nulo do campo de velocidades:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.3)$$

Para completar o sistema de equações, necessita-se de uma equação constitutiva que relacione o campo de tensões ($\boldsymbol{\sigma}$) com a velocidade. Para *fluidos newtonianos incompressíveis* e para qualquer geometria este é dado por (2.4)

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta \mathbf{D}, \quad (2.4)$$

onde η é o coeficiente de viscosidade newtoniana e \mathbf{D} é o tensor taxa de deformação dado pela equação (2.5)

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + [\nabla \mathbf{u}]^t). \quad (2.5)$$

onde $\nabla \mathbf{u}$ é dado (em coordenadas cartesianas) por:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{\partial u_y}{\partial x} & \frac{\partial u_z}{\partial x} \\ \frac{\partial u_x}{\partial y} & \frac{\partial u_y}{\partial y} & \frac{\partial u_z}{\partial y} \\ \frac{\partial u_x}{\partial z} & \frac{\partial u_y}{\partial z} & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

com (u_x, u_y, u_z) o vetor velocidade.

Como esta equação constitutiva é explícita em termos de velocidade, ela pode ser substituída na equação (2.1), resultando na equação (2.7):

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \eta \nabla^2 \mathbf{u} = -\nabla P \quad (2.7)$$

Assim, a análise de escoamentos de fluidos Newtonianos se resume à resolução do sistema de equações diferenciais formado pelas equações (2.2) e (2.7), tendo como incógnitas a pressão e as componentes da velocidade.

Para o caso particular em que temos coordenadas Cartesianas, as equações são dadas por (em 2D):

$$\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \rho g_x, \quad (2.8)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} \right) + \rho g_y, \quad (2.9)$$

onde (g_x, g_y) é o vetor gravidade. A generalização para 3D é trivial.

2.1.1 Formulação do Modelo Matemático para Fluidos Poliméricos

O ponto de partida para a análise de escoamentos incompressíveis de fluidos poliméricos também é a equação da continuidade e a equação de quantidade de movimento. No entanto, quando o interesse é resolver o problema de um escoamento de fluidos não-newtoniano surgem algumas dificuldades adicionais, pois temos equações constitutivas implícitas que devem ser resolvidas simultaneamente às equações de conservação de massa e quantidade de movimento.

A equação da continuidade não tem a sua forma alterada em decorrência do tipo de equação constitutiva utilizada, de maneira que a equação (2.3) também é utilizada na modelagem de escoamento de fluidos poliméricos.

Já no caso da equação de quantidade de movimento para fluidos viscoelásticos, a equação (2.1) costuma ser reescrita dividindo o termo de tensão em duas contribuições:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_s + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_p, \quad (2.10)$$

a contribuição do solvente para o tensor das tensões dada por $\boldsymbol{\sigma}_s$ e uma contribuição polimérica $\boldsymbol{\sigma}_p$. Desta forma se considera que os polímeros podem ser vistos como uma mistura de um solvente e um soluto polimérico. O solvente possui comportamento newtoniano (ver (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987)):

$$\boldsymbol{\sigma}_s = 2\eta_s \mathbf{D} \quad (2.11)$$

onde η_s é a viscosidade do solvente. O tensor das tensões adicionais $\boldsymbol{\sigma}_p$ (tensões "elásticas" ou "poliméricas") na equação (2.10) deve ser obtido através de equações constitutivas provenientes de teorias sobre reologia de fluidos, como por exemplo, a teoria cinética, a teoria de redes de soluções concentradas e polímeros fundidos e a teoria da reptação (LARSON, 1988).

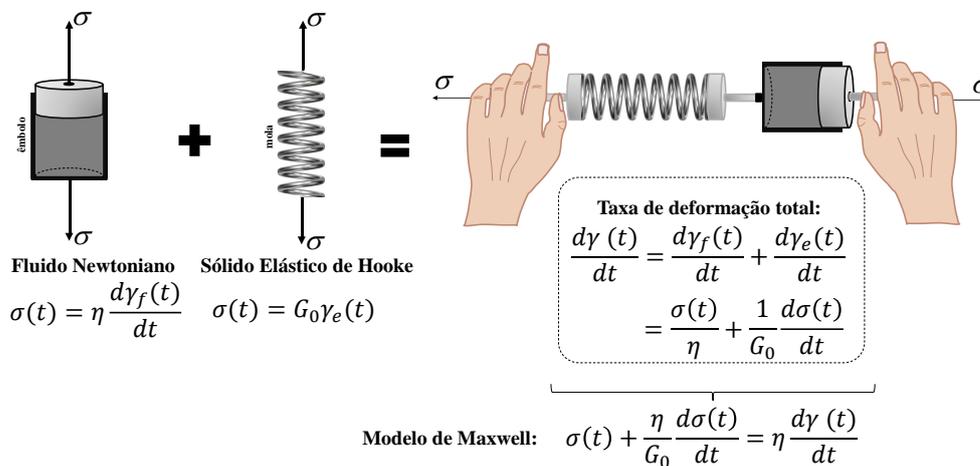
Como este tensor não pode, geralmente, ser escrito explicitamente em função do gradiente de velocidades como no caso da contribuição Newtoniana, o sistema de equações a ser analisado

passa a ser composto pelas equações (2.2) e (2.10), juntamente com outra equação diferencial (ou integral) para a definição de σ_p . Além disso, as componentes de σ_p passam também a ser incógnitas do problema, juntamente com a pressão e as componentes da velocidade.

2.2 Modelo de Maxwell

Dentro dos modelos viscoelásticos lineares, o mais simples é dado pelo modelo Maxwell, onde para representar o equivalente mecânico deste modelo, podemos assumir uma mola (elasticidade) conectada a um amortecedor (viscosidade), com ambos os objetos sujeitos à mesma tensão.

Figura 2 – Mola e amortecedor usados na representação mecânica do modelo de Maxwell.



Fonte: Adaptada de Ferrás *et al.* (2017).

Da Figura 2 vemos que pela lei de Newton, a tensão, σ , é proporcional à taxa em que o fluido se deforma $\frac{d\gamma_f(t)}{dt}$, enquanto para sólidos elásticos, seguimos a lei de Hooke (a força necessária para estender ou comprimir uma mola por alguma distância (pequena) é proporcional a essa distância), o que significa que a tensão, σ , é proporcional à deformação da mola, γ_e . Note-se que essas relações foram propostas no passado e, elas foram verificadas experimentalmente.

Supondo que a taxa total de deformação é dada pela soma das contribuições viscosa e elástica, então o modelo de Maxwell pode ser escrito como (ver também a Figura 2),

$$\sigma + \frac{\eta}{G_0} \frac{d\sigma}{dt} = \eta \frac{d\gamma}{dt} \quad (2.12)$$

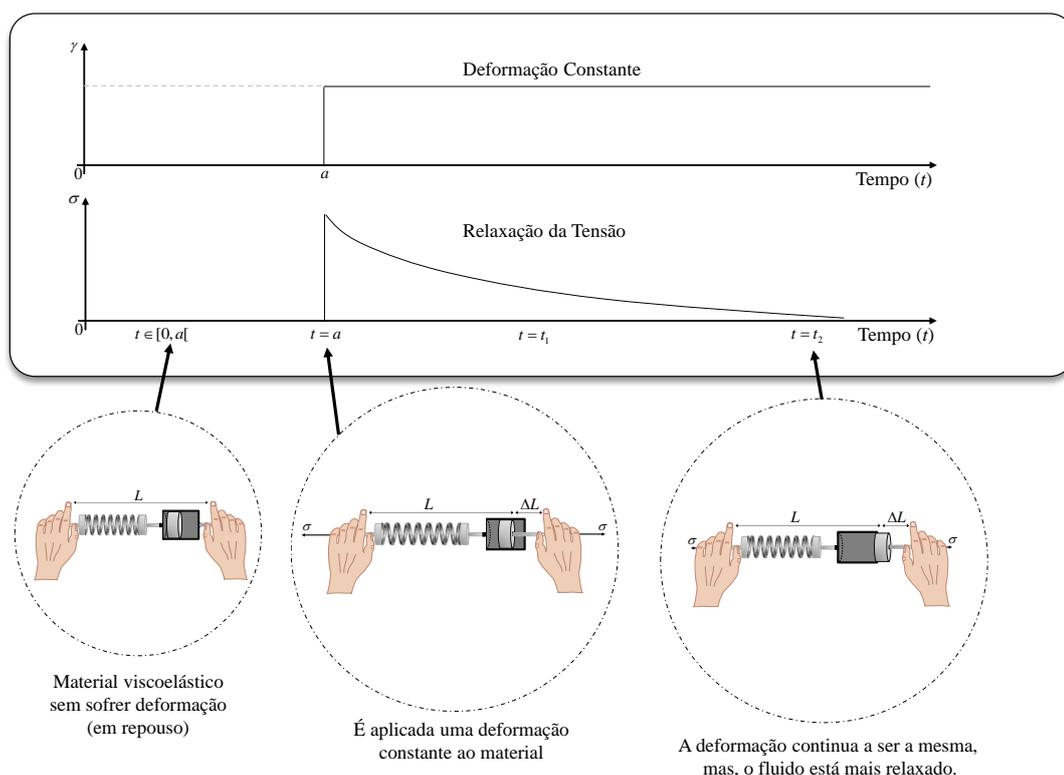
onde η representa a constante de viscosidade do fluido, G_0 é o módulo de elasticidade e $\frac{\eta}{G_0}$ é o tempo de relaxação que normalmente é denotado por λ .

Esta é uma maneira de derivar o modelo, mas, existem outras formas, isto é, usar a teoria

molecular, ou, usando o princípio de superposição de Boltzmann (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

A versão integral do modelo Maxwell será agora apresentada. Para isso, vamos observar o teste de relaxamento (Figura 3), onde é assumido que temos um material viscoelástico em repouso, e de repente (quando $t = a$), nós deformamos o material, mantendo constante a deformação γ_0 ao longo do tempo (ver Figura 3). O que acontece é que a tensão sentida pelo material é máxima quando a deformação é aplicada e, em seguida, o material viscoelástico começa a *se adaptar* e a tensão diminui (relaxa) até que o material fique em repouso novamente (mas agora com um configuração diferente quando comparada à inicial).

Figura 3 – Relaxação de um fluido viscoelástico. O fluido está em repouso, quando é aplicada uma deformação constante, que, se mantém constante ao longo do tempo.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Em 1876, Boltzmann sugeriu o seguinte: considere a função $\gamma(t)$, como causa, que irá promover algum efeito no material (a tensão, $\sigma(t)$). Com, $G(t)$ sendo uma propriedade do material e relacionando a causa e efeito (se $G = 1$, então a causa é igual ao efeito). Olhando para o experimento de relaxamento (Figura 3), e tendo em conta o fato de que uma variação na deformação (causa) no tempo t' produzirá um efeito correspondente em algum momento posterior, t , é plausível assumir $G(t)$ como uma função do tempo passado entre a causa e o efeito.

Então, pode-se dizer que,

$$\sigma(t) = G(t-t') \gamma(t') \quad (2.13)$$

com t' um tempo passado, e $G(t-t')$ representando uma memória de desvanecimento. G depende do tempo decorrido $t-t'$ entre o passado lembrado e o presente (MACOSKO, 1994).

Agora, suponha que pequenas variações da causa são realizadas, levando a pequenas variações do efeito, e que essas variações são pequenas de tal forma que G e σ não dependem de γ (por isso é chamada de viscoelasticidade linear), então, obtemos o seguinte,

$$d\sigma(t) = G(t-t') d\gamma(t'). \quad (2.14)$$

Uma relação entre tensão e deformação, que é válida apenas para pequenas deformações, acabou de ser encontrada. Agora, assumindo que o princípio de Boltzmann se aplica, podemos dizer que a tensão causada por uma deformação pode ser decomposta em contribuições independentes de deformações muito pequenas e, portanto, podemos integrar todo o histórico de tensão até o momento de interesse, t , resultando na seguinte relação,

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^{\sigma} d\sigma = \int_{-\infty}^t G(t-t') \frac{d\gamma}{dt'} dt'$$

É assumido que no intervalo de tempo $(-\infty, 0)$ o material está totalmente relaxado.

Agora, precisamos encontrar uma forma para a função especial, $G(t)$, conhecido como o módulo de relaxamento (MACOSKO, 1994). $G(t-t')$ deve ser uma função decrescente de $t-t'$, uma vez que a influência do passado muito remoto sobre a tensão atual deve ser menor que a influência do passado próximo.

Mantendo em mente o fato que (ver equação (2.13)) $G(t-t') = \frac{\sigma(t)}{\gamma(t')}$ e tendo em conta o comportamento da tensão verificado na Figura 3, esperamos que G tenha um decaimento exponencial, $G(t) = G_0 e^{-\frac{t}{\lambda}}$, levando à versão integral do modelo Maxwell,

$$\sigma(t) = \int_a^t G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma}{dt'} dt' \quad (2.15)$$

Observe que o limite inferior de integração foi alterado para a com $a \geq 0$. Isso foi feito assumindo que o experimento começa em algum momento, t ($t \geq 0$), quando o material está livre de tensões.

Lema 3. O modelo Maxwell ((YANG; LAM; ZHU, 2010)) sofre de um problema sério, não é invariante.

Prova:

Basta considerar um referencial fixo e outro movimento referencial com velocidade constante - perfil de velocidade linear (em comparação com o referencial inicial) e obter a derivada (no tempo) da tensão para ambos os casos (MORRISON *et al.*, 2001). □

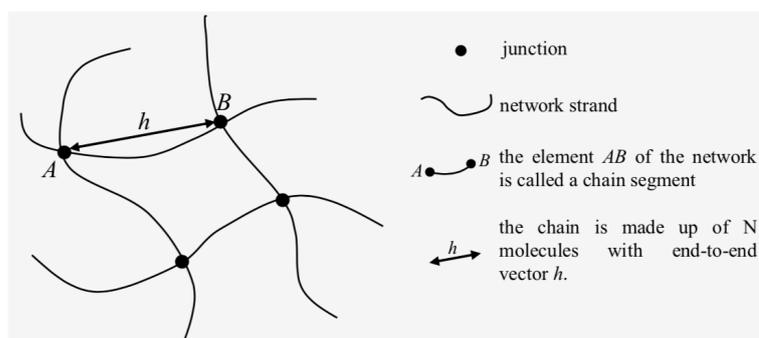
2.3 Modelos Viscoelásticos Não Lineares Diferenciais

Modelos viscoelásticos não lineares permitem descrever, ao menos qualitativamente, o comportamento reológico não linear de diferentes materiais viscoelásticos. Alguns desses modelos podem ser obtidos a partir de modelos lineares, na sua forma diferencial, e são chamados modelos quase lineares. As modificações realizadas consistem na substituição das derivadas em relação ao tempo pela derivada convectiva no tempo e/ou na inclusão de termos não-lineares e parâmetros nas equações. A seguir é apresentado um dos modelos viscoelásticos não lineares mais popular.

2.3.1 Modelo Phan-Thien-Tanner (PTT)

Em 1977 Nhan Phan-Thien e Roger I. Tanner propuseram uma nova equação constitutiva (PTT) derivada de uma teoria de rede do tipo Lodge-Yamamoto para fluidos poliméricos, veja a figura 4, na qual as junções da rede não se supõe que se movam estritamente como pontos do continuum, mas, em vez disso, é permitido um certo *escorregamento efetivo*, bem como uma taxa de destruição que depende do estado de tensão na rede (THIEN; TANNER, 1977; PHAN-THIEN, 1978).

Figura 4 – Rede Lodge-Yamamoto. O líquido polimérico consiste em segmentos poliméricos conectados por junções e muda constantemente sua topologia. Cada cadeia é feita de N moléculas com um vetor de ponta a ponta comum h .



Fonte: Ferrás *et al.* (2019).

O modelo pode então ser expresso (para o caso isotérmico) pela equação constitutiva:

$$K(\sigma_{kk})\boldsymbol{\sigma} + \lambda \dot{\boldsymbol{\sigma}} = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (2.16)$$

em que $K(\sigma_{kk})$ pode tomar as seguintes formas

$$K(\sigma_{kk}) = \begin{cases} 1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk}, & \text{PTT linear} \\ 1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} + \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right)^2, & \text{PTT quadrático} \\ \exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk}\right), & \text{PTT exponencial} \end{cases} \quad (2.17)$$

onde \mathbf{D} é o tensor de taxa de deformação, $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensão, λ é um tempo de relaxamento, η_p é a viscosidade do polímero, σ_{kk} é o traço do tensor de tensão, ε representa o parâmetro de extensibilidade e $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ representa a derivada de Gordon–Schowalter, definida como:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\sigma} - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \mathbf{u}) + \xi (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2.18)$$

onde \mathbf{u} é o vetor de velocidade, $\nabla \mathbf{u}$ é o gradiente de velocidade e o parâmetro ξ ($0 \leq \xi \leq 1$) é responsável pelo deslizamento entre a rede molecular e o meio contínuo.

2.4 Modelos Integrais Não Lineares

Os modelos integrais, permitem uma melhor modelagem do comportamento de fluidos viscoelásticos, mas, exigem um maior esforço computacional, pois, em cada momento da simulação, temos de ter acesso ao histórico de toda a deformação do fluido (desde que ele começou a ser deformado). A Integral é um operador não-local. O ideal seria termos um modelo integral que tivesse um modelo equivalente na forma diferencial, como é o caso do modelo de Maxwell. Porém, isso só é possível para certos modelos mais simples.

O seguinte lema assegura a equivalência entre o modelo diferencial (2.12) e integral (2.15) de Maxwell:

Lema 4. Supondo que o módulo de relaxamento seja dado por $G(t-t') = G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}}$, equações (2.12) e (2.15) são equivalentes. Se $G(t-t') = \eta \delta(t)$ o fluido viscoso é recuperado $\boldsymbol{\sigma} = \eta \frac{d\boldsymbol{\gamma}_f(t)}{dt}$, e, se $G(t-t') = G_0$ obtemos um sólido elástico hookeano, $\boldsymbol{\sigma} = G_0 \boldsymbol{\gamma}_e(t)$ (ver figura 2)

Prova:

Começaremos mostrando que a equação (2.15) implica a equação (2.12). De fato, se realizamos

uma derivada no tempo em todos os termos da equação (2.15) obtemos

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_a^t G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma}{dt'} dt' \quad (2.19)$$

usando a regra de Leibniz,

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(t', t) dx = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{df}{dt} dt' + \frac{db}{dt} f(b, t) - \frac{da}{dt} f(a, t)$$

temos que, assumindo $f(t', t) = G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma}{dt'}$, $a(t) = a$ and $b = t$ ($\frac{da(t)}{dt} = 0$, $\frac{db}{dt} = 1$),

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \int_a^t -\frac{1}{\lambda} G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma}{dt'} dt' + G_0 \frac{d\gamma}{dt'} = G_0 \frac{d\gamma}{dt} - \frac{1}{\lambda} \int_a^t G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma}{dt'} dt' = G_0 \frac{d\gamma}{dt} - \frac{\sigma}{\lambda} \quad (2.20)$$

Multiplicando ambos termos de $\frac{d\sigma(t)}{dt} = G_0 \frac{d\gamma}{dt} - \frac{\sigma}{\lambda}$ por λ , obtemos a equação (2.12), onde $\eta = \lambda G_0$.

Para provar o recíproco notemos que a equação (2.12) é uma equação diferencial de primeira ordem da forma $y' + P(x)y = Q(x)$, pois podemos reescrever (2.12) como,

$$\frac{d\sigma}{dt} + \frac{G_0}{\eta} \sigma = G_0 \frac{d\gamma}{dt}$$

$$\text{onde } P(t) = \frac{G_0}{\eta} \text{ e } Q(t) = G_0 \frac{d\gamma}{dt}.$$

A solução para este tipo de equações é dada pela fórmula

$$y = e^{-\int P ds} \int Q e^{\int P ds} dt' + c.$$

Assumindo que $\sigma(a) = 0$ temos

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= e^{-\int_a^t P(s) ds} \int_a^t Q(t') e^{\int_a^{t'} P(s) ds} dt' = e^{-\int_a^t \frac{G_0}{\eta} ds} \int_a^t G_0 \frac{d\gamma}{dt'} e^{\int_a^{t'} \frac{G_0}{\eta} ds} dt' \\ &= e^{-\frac{G_0}{\eta}(t-a)} \int_a^t G_0 \frac{d\gamma}{dt'} e^{\frac{G_0}{\eta}(t'-a)} dt' \\ &= \int_a^t G_0 \frac{d\gamma}{dt'} e^{\frac{G_0}{\eta}(t'-a-t+a)} dt' = \int_a^t G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma}{dt'} dt'. \end{aligned}$$

Deve-se observar que esta prova também é válida quando $a = -\infty$. \square

Como se viu no lema 3 o modelo de Maxwell não é invariante, isto é, dois observadores em locais diferentes podem obter resultados diferentes para o mesmo fenómeno. Ou seja, o modelo apresenta algumas limitações, não permitindo prever muitas das propriedades exibidas por fluidos viscoelásticos.

O modelo de Maxwell pode ser generalizado para uma versão invariante. Para tal basta substituir a derivada da tensão no tempo, por uma derivada temporal invariante, como por exemplo a derivada convectiva superior,

$$\overset{\nabla}{\sigma} = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \sigma - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \sigma - \sigma \cdot (\nabla \mathbf{u}). \quad (2.21)$$

Este modelo é designado por UCM - Upper Convected Maxwell (versão invariante do modelo de Maxwell). Porém, este modelo também apresenta limitações na modelagem de fluidos mais complexos.

Com o objetivo de melhorar a modelagem do comportamentos destes fluidos complexos, foram desenvolvidos modelos integrais, sendo mais conhecido o modelo K-BKZ.

2.4.1 Modelo K-BKZ

Esse modelo constitutivo faz parte de um grupo maior de equações chamadas equações de Rivlin-Sawyers (RIVLIN; SAWYERS, 1971), que são da forma

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t \{ \Psi_1(t-t', I_1, I_2) \mathbf{B}(t, t') + \Psi_2(t-t', I_1, I_2) \mathbf{C}(t, t') \} dt' \quad (2.22)$$

onde as funções Ψ_1 e Ψ_2 são funções escalares que dependem de t, t' , com $-\infty < t' \leq t$, e dos invariantes I_1 e I_2 , definidos por

$$I_1 = tr(\mathbf{B}), \quad (2.23)$$

$$I_2 = tr(\mathbf{C}), \quad (2.24)$$

onde \mathbf{B} e \mathbf{C} são os tensores de Finger e Cauchy-Green, respetivamente. As funções $\Psi_i(t-t', I_1, I_2)$, $i = 1, 2$ podem ser escritas como um produto entre uma função temporal e uma função que depende da deformação, ou seja,

$$\Psi_i(t-t', I_1, I_2) = M(t-t') \phi_i(I_1, I_2)$$

em que $M(t-t')$ é a **função memória** dada por

$$M(t-t') = \sum_k \frac{a_k}{\lambda_k} e^{-\frac{(t-t')}{\lambda_k}} \quad (2.25)$$

sendo λ_k constantes temporais, chamadas tempos de relaxação, e a_k são parâmetros que dependem do fluido.

Neste caso a equação de (2.22) toma a forma

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t M(t-t') \{ \phi_1(t-t', I_1, I_2) \mathbf{B}(t, t') + \phi_2(t-t', I_1, I_2) \mathbf{C}(t, t') \} dt' \quad (2.26)$$

Particularmente nesta tese, usaremos a estrutura do modelo proposto por Papanastasiou, Scriven e Macosko (PAPANASTASIOU; SCRIVEN; MACOSKO, 1983) (modelo PSM), onde

$$\begin{aligned}\phi_1(t-t', I_1, I_2) &= \frac{\alpha}{\alpha - 3 + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2}, \\ \phi_2(t-t', I_1, I_2) &= 0.\end{aligned}$$

Neste caso $I_1 = \text{tr}(\mathbf{B})$ e $I_2 = \frac{1}{2}[I_1^2 - \text{tr}(\mathbf{B}^2)]$ e os parâmetros α e β dependem do material.

Na literatura são encontradas diversas variantes da equação (2.22). O próprio modelo PSM é referido como um modelo K-BKZ, embora o modelo K-BKZ tenha a forma fatorada dada por

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t \left\{ \frac{\partial V(t-t', I_1, I_2)}{\partial I_1} \mathbf{B}(t, t') + \frac{\partial V(t-t', I_1, I_2)}{\partial I_2} \mathbf{C}(t, t') \right\} dt' \quad (2.27)$$

onde a função V também depende de t, t' , com $-\infty < t' \leq t$, e dos invariantes I_1 e I_2 . Deste modo podemos falar não de apenas um modelo, mas de toda uma classe de equações tipo K-BKZ, dentre as quais está o modelo PSM.

2.4.1.1 O Tensor de Finger:

Considere uma porção de material (por exemplo na forma de cubo) e os pontos \mathbf{P} e \mathbf{Q} nesse volume. Seja dx' o vetor que associa os pontos \mathbf{P} e \mathbf{Q} num instante t' . Após uma deformação, o vetor dx' tomará uma nova configuração em relação ao seu estado de referência. Essa nova configuração num instante $t > t'$ denotaremos por dx .

Assumindo que $\mathbf{x} = \mathbf{x}(x', t)$ é uma função diferenciável de x' e t , podemos relacionar a posição presente (no tempo t) com a posição de referência por

$$dx = \mathbf{F} dx'. \quad (2.28)$$

A quantidade $\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}'} \mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x'}$ é chamada **gradiente de deslocamento** e constitui um tensor de segunda ordem. Em coordenadas cartesianas \mathbf{F} é dado por

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x'_j}$$

onde x_i são as coordenadas de um ponto no estado deformado, no tempo presente t , e x'_j são as coordenadas no estado não deformado, num instante passado t' .

Em geral, o tensor gradiente de deslocamento não é simétrico e contém informações tanto de deformações quanto de rotações e pode ser decomposto em um produto de tensores na forma

$$\mathbf{F} = \mathbf{V}\mathbf{R}, \quad (2.29)$$

em que \mathbf{V} é simétrico e traz informações do estiramento (stretch) e \mathbf{R} , que é ortogonal e representa rotações de dx' ((TRUESDELL, 1966)). Como $\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \mathbf{I}$, podemos eliminar as rotações em (2.29) multiplicando \mathbf{F} por sua transposta:

$$\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T = \mathbf{V}\mathbf{V}^T. \quad (2.30)$$

O tensor \mathbf{B} é chamado **tensor de Finger**, que em coordenadas cartesianas é escrito como

$$\mathbf{B}_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x'_k} \frac{\partial x_j}{\partial x'_k}, \quad (2.31)$$

onde estamos usando a notação de soma sobre índices repetidos. O tensor de Finger é o inverso do **tensor de Cauchy-Green**, \mathbf{C} , que em coordenadas cartesianas é dado por

$$\mathbf{C}_{ij} = \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} \frac{\partial x'_k}{\partial x_j}.$$

Estes tensores possuem as seguintes propriedades:

- São simétricos,
- São positivos definidos,
- $\det(\mathbf{B}) = \det(\mathbf{C}) = 1$ em escoamentos incompressíveis.

Ao simular escoamentos de fluidos utilizando equações constitutivas tipo K-BKZ a maior dificuldade é a determinação do tensor de Finger. A maioria dos trabalhos existentes na literatura trata esse problema de uma forma Lagrangiana, de modo que a posição das partículas é calculada para a obtenção do tensor gradiente de deslocamento \mathbf{F} e posterior obtenção do tensor de Finger, $\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T$.

2.4.1.2 Equações Governantes:

As equações governantes para escoamentos isotérmicos incompressíveis são: a equação de conservação de massa (2.3) e a equação de conservação de quantidade de movimento (2.1), isto é,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.32)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + b \quad (2.33)$$

Lembrando que os escoamentos de fluidos viscoelásticos definidos pelos modelos constitutivos na forma integral K-BKZ, o qual na forma fatorada, é dado por

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t M(t-t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t) dt' \quad (2.34)$$

onde $M(t-t')$ é a função memória, $H(I_1, I_2)$ é a função amortecimento e $\mathbf{B}_{t'}(t)$ é o tensor de Finger, que será convectado com o fluido de acordo com a seguinte equação

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{B} = \nabla \mathbf{u}^t \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (2.35)$$

O tensor de Finger \mathbf{B} mede a deformação de um elemento de fluido que está na posição \mathbf{x} no instante presente t , com relação a sua posição num instante anterior t' . I_1 e I_2 são o primeiro e

segundo invariantes de $\mathbf{B}_{t'}(t)$, respectivamente, dados por $I_1 = \text{tr}(\mathbf{B})$ e $I_2 = \frac{1}{2}[I_1^2 - \text{tr}(\mathbf{B}^2)]$.

Além disso, lembremos que pela equação (2.25) temos que

$$M(t - t') = \sum_m \frac{a_m}{\lambda_m} e^{-\left(\frac{t-t'}{\lambda_m}\right)}$$

e $H(I_1, I_2)$ está definido (por exemplo) por

$$H(I_1, I_2) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2}. \quad (2.36)$$

As constantes α e β são parâmetros que dependem do material, dados a priori.

O modelo de Maxwell é obtido fazendo $H(I_1, I_2) \equiv 1$ na equação (2.34).

Assim o sistema de equações integro-diferenciais a resolver é dado por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + b \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{B} = \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (2.39)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \int_{-\infty}^t \sum_m \frac{a_m}{\lambda_m} e^{-\left(\frac{t-t'}{\lambda_m}\right)} H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t) dt' \quad (2.40)$$

Portanto, para simular escoamentos viscoelásticos governados pelos modelos de Maxwell invariante e K-BKZ, precisamos resolver as equações (2.37) – (2.40) sujeitas a condições iniciais e de contorno.

Esta equações serão importantes para um dos novos modelos desenvolvidos nesta tese (o modelo de Maxwell-ML). O modelo será desenvolvido inicialmente para deformações lineares e será tornado invariante usando a estrutura do modelo K-BKZ - PSM. Esta é uma técnica muito usado para transformar modelos não-invariantes em modelos invariantes, e, consiste em usar o modulo de relaxação do modelo linear para obter uma nova função memória no modelo PSM.

MODELOS VISCOELÁSTICOS FRACIONÁRIOS

Nas últimas décadas, uma classe especial de modelos viscoelásticos chamou a atenção de engenheiros e matemáticos. Esses modelos utilizam derivadas fracionárias (operadores integro-diferenciais), em vez da derivada de ordem inteira clássica e operadores integrais clássicos. A razão desse sucesso vem do fato de que esses operadores fracionários generalizam naturalmente as equações diferenciais que regem os processos físicos importantes (especialmente os processos com memória), melhorando sua amplitude de aplicabilidade na descrição quantitativa dos dados (PODLUBNY, 1999; JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014; FERRÁS *et al.*, 2019; FERRAS *et al.*, 2018; COSTA; COELHO; FERRÁS, 2021; FERRÁS; MORGADO; REBELO, 2021; BERTOCO *et al.*, 2021b; FERRÁS *et al.*, 2019).

Vimos na seção 2.2 o modelo mais simples que considera o comportamento viscoso e elástico, denominado o modelo linear de Maxwell (equação 2.12).

Notemos que no experimento mostrado na figura (3), temos que a variação da deformação ao longo do tempo é zero, porque a deformação é constante ($\frac{dy}{dt} = 0$). Portanto, a equação (2.12) pode ser escrita como $\sigma + \frac{\eta}{G} \frac{d\sigma}{dt} = 0$. Esta é uma equação diferencial homogênea, e a solução desta equação é dada por, $\sigma(t) = Ce^{-\frac{t}{\lambda_1}}$, com $\lambda_1 = \frac{\eta}{G}$. Assumindo que em $t = a$, temos $\sigma = \sigma_0$, então obtemos um exponencial negativo para a tensão,

$$\sigma(t) = \sigma_0 e^{-\frac{t}{\lambda_1}}. \quad (3.1)$$

Embora vários materiais mostrem esse tipo de comportamento, o relaxamento exponencial não é universal. Existem outros materiais que mostram diferentes tipos de decaimento, como, por exemplo, um decaimento algébrico ((KESHAVARZ *et al.*, 2017), (NG; PADMANABHAN; MCKINLEY, 2006)),

$$G(t) \propto (t)^{-\alpha}, \quad (3.2)$$

com $0 < \alpha < 1$.

Assumindo que $G(t-t') = A(t-t')^{-\alpha}$, então a equação (2.15), pode ser escrita como,

$$\sigma(t) = \int_a^t A(t-t')^{-\alpha} \frac{d\gamma}{dt'} dt' \quad (3.3)$$

Vimos no Capítulo 2 a definição da derivada fracionária de Caputo, agora esta derivada permitirá a generalização da equação de Maxwell. Lembrando a definição 1.4.1 da derivada fracionária do tipo Caputo para $0 < \alpha < 1$:

$$D_{*a}^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^t (t-t')^{-\alpha} \frac{df}{dt'} dt', \quad (3.4)$$

a equação (3.3) pode ser reescrita como $\sigma(t) = A\Gamma(1-\alpha)D_{*a}^{\alpha}\gamma(t)$. Considerando $a = 0$ e usando a notação $D_{*a}^{\alpha} \equiv \frac{d^{\alpha}}{dt^{\alpha}}$, $A\Gamma(1-\alpha) \equiv \Phi(\alpha)$ obtemos,

$$\sigma(t) = \Phi(\alpha) \frac{d^{\alpha}\gamma(t)}{dt^{\alpha}}. \quad (3.5)$$

onde Φ é uma constante para um α fixo, com dimensões $[Pa.s^{\alpha}]$. Se $\Phi(1) = \eta$ e $\Phi(0) = G_0$, obtemos uma relação geral para representar um fluido viscoso ($\sigma(t) = \Phi(1) \frac{d^1\gamma(t)}{dt^1}$), um sólido elástico ($\sigma(t) = \Phi(0) \frac{d^0\gamma(t)}{dt^0} = \Phi(0) \gamma(t)$), e uma mistura de ambos os estados ($\sigma(t) = \Phi(\alpha) \frac{d^{\alpha}\gamma(t)}{dt^{\alpha}}$, $0 < \alpha < 1$), interpolando entre uma mola e um êmbolo (3.5).

Uma interpretação mecânica em termos de molas e êmbolos foi derivada por Schiessel e Blumen em seu excelente trabalho intitulado "Hierarchical analogues to fractional relaxation equations" (SCHIESSEL; BLUMEN, 1993), ver também ((SCHIESSEL; METZLER; BLUMEN, 1995), (SCHIESSEL; ALEMANY; BLUMEN, 1994), (SCHIESSEL; BLUMEN, 1993)), onde o modelo fracionário pode ser visto como uma combinação infinita de molas e êmbolos (chamado springpot em inglês), como se mostra na figura (5)-topo.

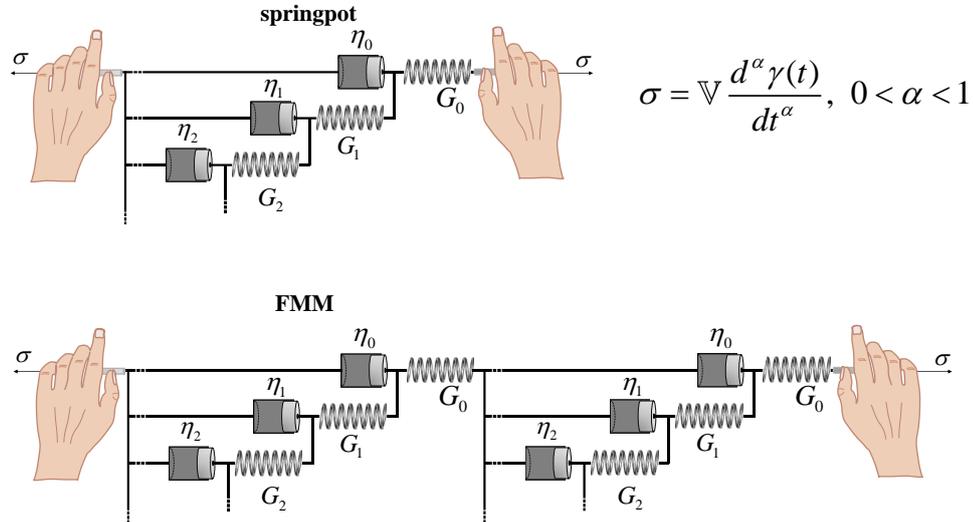
Definição 3.0.1. Fractional Maxwell model (FMM)

O FFM é dado por uma serie de representação de dois springpots como mostra a figura (5)-abaixo. Supondo que a tensão sentida em cada springpot é a mesma ($\sigma(t) = \mathbb{V}(\alpha) \frac{d^{\alpha}\gamma_1(t)}{dt^{\alpha}} = \mathbb{G}(\beta) \frac{d^{\beta}\gamma_2(t)}{dt^{\beta}}$), e que a deformação total está dada por $\gamma(t) = \gamma_1(t) + \gamma_2(t)$, então a equação diferencial fracionária representando a relação entre a tensão e a deformação é dada por (figura (5)-abaixo),

$$\sigma(t) + \frac{\mathbb{V} d^{\alpha-\beta}\sigma(t)}{\mathbb{G} dt^{\alpha-\beta}} = \mathbb{V} \frac{d^{\alpha}\gamma(t)}{dt^{\alpha}}, \quad (3.6)$$

onde foi assumido (sem perda de generalidade) que $\alpha > \beta$ e que \mathbb{V} e \mathbb{G} podem variar mediante os valores de α e β usados.

Figura 5 – (Topo) Combinação infinita de molas e êmbolos levando à formação de um springpot. (abaixo) Modelo Fracionário de Maxwell (FMM). As constantes \mathbb{V} e \mathbb{G} são usadas para substituir o símbolo Φ . Estas constantes são conhecidas como quasi-propriedades (JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014).



Fonte: Adaptada de Ferrás *et al.* (2017).

Com esta breve introdução ao FMM, e, tendo em conta o Capítulo 1 (onde desenvolvemos os conceitos e propriedades básicas do cálculo fracionário), faremos uma descrição geral sobre as propriedades e a admissibilidade do FMM viscoelástico linear. Também será apresentada uma breve discussão sobre a formulação fracionária K-BKZ invariante (JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014) adequada para deformações grandes, além disso demonstra-se a capacidade dos modelos viscoelásticos fracionários para ajustar os dados experimentais.

3.1 Algumas Propriedades do FMM

O FMM (3.6) com $\alpha \neq 1$ mostra o crescimento ilimitado da tensão na sequência de arranque de cisalhamento constante em $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 H(t)$ (sendo $H(t)$ a função Heaviside), isto é, $\eta^+(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \sigma(t) / \dot{\gamma}_0$ diverge como $t^{1-\alpha}$. Portanto, não é adequado descrever o escoamento de fluidos viscoelásticos. Por outro lado, se assumimos $\alpha = 1$ (combinando uma springpot e um êmbolo em série como mostra a figura 5-abaixo), o crescimento da tensão fica limitado e o modelo é adequado para descrever esta resposta transiente de fluidos.

De agora em diante, o FMM com $\alpha = 1$ será, portanto, referido como o modelo fracionário do fluido viscoelástico (FVF).

É importante entender como o FMM se reduz a um líquido newtoniano, um sólido elástico e ao modelo clássico de Maxwell. Esses casos limite podem ser obtidos tomando os limites $\alpha \rightarrow 1$, $\beta \rightarrow 1$ (Fluído newtoniano: dois *dashpots* em série, caso em que a viscosidade total se torna $1/\mu = 1/\mu_1 + 1/\mu_2$), $\alpha \rightarrow 1$, $\mathbb{G} \rightarrow \infty$ (Fluído newtoniano: um *dashpot* e uma mola

rígida), $\alpha \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ (sólido elástico: duas molas em série, de modo que o módulo total é $1/G = 1/G_1 + 1/G_2$) (ver figuras 6 (a) e (b)).

O modelo clássico Maxwell pode ser obtido quando $\alpha \rightarrow 1$, $\beta \rightarrow 0$ como irá mostrar em seguida. Do lado direito da equação (3.6), temos

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{d^\alpha \gamma(t)}{dt^\alpha} = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} \frac{d\gamma}{dt'} dt', \quad (3.7)$$

e usando a fórmula de integração por partes $\int_a^b u dv = uv|_a^b - \int_a^b v du$ podemos obter:

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} \frac{d\gamma}{dt'} dt' &= \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{d\gamma(t')}{dt'} d \left(\frac{-(t-t')^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right) dt' \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \left[\frac{d\gamma(0)}{dt'} (t-0)^{1-\alpha} - \int_0^t (t-t')^{1-\alpha} \frac{d^2\gamma(t')}{dt'^2} \right] \\ &= \frac{d\gamma(0)}{dt'} + \left[\frac{d\gamma(t')}{dt'} \right]_0^t = \dot{\gamma}(t) \end{aligned}$$

Para o lado esquerdo da equação (3.6), se seguirmos o mesmo procedimento anterior obtemos o seguinte:

$$\lim_{\alpha-\beta \rightarrow 1} \frac{d^{\alpha-\beta} \gamma(t)}{dt^{\alpha-\beta}} = \lim_{\beta \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^t (t-t')^{-(1-\beta)} \frac{d\sigma(t')}{dt'} dt' = \frac{d\sigma(t)}{dt}. \quad (3.8)$$

Este limite é indicado esquematicamente na figura 6 - superior. Assumindo $\alpha \rightarrow 1$, podemos recuperar um fluido newtoniano deixando $\beta \rightarrow 1$

$$\lim_{\alpha-\beta \rightarrow 1} \frac{d^{\alpha-\beta} \gamma(t)}{dt^{\alpha-\beta}} = \lim_{\beta \rightarrow 1} \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^t (t-t')^{-(1-\beta)} \frac{d\sigma(t')}{dt'} dt' = \left[\frac{d\sigma(t')}{dt'} \right]_0^t = \sigma(t) - \sigma(0) \quad (3.9)$$

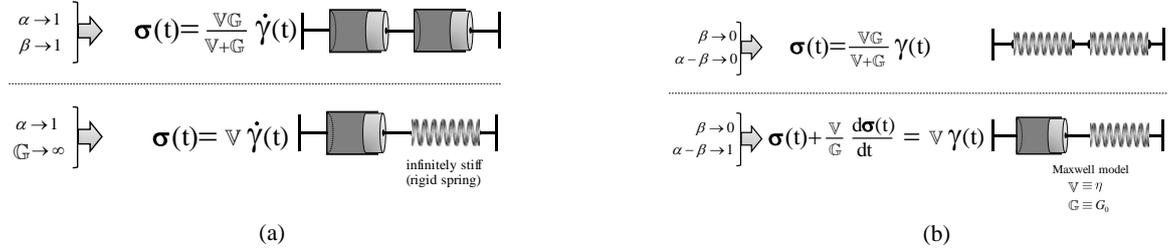
Observe que, neste caso, assumimos que o fluido está em repouso no início do experimento, com $\sigma(0)$ (ver figura 6 - superior). Todos os casos especiais que podem ser obtidos do FMM estão ilustrados nas figuras 6 (a) e (b).

3.2 Modelo K-BKZ Fracionário Invariante

O FMM é um bom modelo para descrever a resposta viscoelástica linear de muitos materiais, mas não é invariante (([BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987](#))) (como também é o caso do modelo linear de Maxwell) e, portanto, não é adequado para descrever a resposta do materiais reais sob grandes deformações. Para abordar esta questão, algumas soluções foram propostas na literatura (([JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014](#)), ([YANG; LAM; ZHU, 2010](#))), e agora exploraremos a solução proposta por Jaishankar e Mckinley (([JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014](#))).

A capacidade do FMM de se ajustar a dados experimentais lineares está estritamente relacionada à forma da função Mittag-Leffler. Portanto, Jaishankar e Mckinley (([JAISHANKAR;](#)

Figura 6 – Diferentes casos limite que podem ser obtidos do FMM. (a) O limite $\alpha \rightarrow 1$: fluido newtoniano com duas *dashpots* em série (topo - $\beta \rightarrow 1$), ou um fluido newtoniano com um *dashpot* e uma mola rígida em série (abaixo - $\mathbb{G} \rightarrow \infty$); (b) O limite $\beta \rightarrow 0$: dá um sólido Hookeano (topo) com duas molas em série, o modelo clássico Maxwell (abaixo).



Fonte: Ferrás *et al.* (2017).

MCKINLEY, 2014)) propuseram um modelo que é uma combinação da função Mittag-Leffler com a variação do modelo K-BKZ ((BERNSTEIN; KEARSLEY; ZAPAS, 1963)) proposto por Wagner, Raible e Meissner ((WAGNER, 1976), (WAGNER; RAIBLE; MEISSNER, 1979)). Uma ideia semelhante foi proposta por Freed e Diethelm ((DIETHELM, 2006)), onde um modelo viscoelástico do tipo K-BKZ é combinado com o sólido viscoelástico padrão de ordem fracionária para modelar tecido biológico.

O modelo proposto por Jaishankar e Mckinley ((JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014)) (de agora em diante referido como o K-BKZ Fracionário) está escrito na forma geral K-BKZ como:

$$\tau(t) = \int_0^t m(t-t')h(I_1, I_2)\mathbf{B}(t, t')dt', \quad (3.10)$$

onde \mathbf{B} é o tensor de Finger, ((LARSON, 1988)), I_1, I_2 são os traços de \mathbf{B} e \mathbf{B}^{-1} respetivamente e $h(I_1, I_2)$ é denominada função de amortecimento ((WAGNER, 1976)). Um grande número de funções de amortecimento podem ser encontradas na literatura (ver (JOSEPH, 1994) e também (WAGNER; RAIBLE; MEISSNER, 1979)). O termo $m(t-t')$ é conhecido como a função de memória e para o modelo Fracionário K-BKZ que foi proposto em ((JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014)) sendo da forma:

$$m(t-t') = \frac{dG(t-t')}{dt'} = -\mathbb{G}(t-t')^{-1-\beta}E_{\alpha-\beta, -\beta} \left(-\frac{\mathbb{G}}{\mathbb{V}}(t-t')^{-\alpha-\beta} \right), \quad (3.11)$$

onde $E_{a,b}(z)$ é a função generalizada Mittag-Leffler (PODLUBNY, 1999) (notar que aqui o módulo de relaxamento $G(t-t')$ é aquele obtido para o FMM). Este modelo foi aplicado por ((JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014)) para descrever o fluxo de cisalhamento constante das soluções de goma xantana e forneceu uma descrição muito precisa dos dados experimentais. Para o caso de fluxo de cisalhamento constante, o tensor de deformação de Finger pode ser simplificado para dar $\dot{\gamma}_0(t-t')$ (onde $\dot{\gamma}_0$ é a taxa de cisalhamento constante), e o modelo dado na

equação (3.10) torna-se:

$$\tau_{xy}(t) = \int_0^t m(t-t')h(\gamma)\dot{\gamma}_0(t-t')dt', \quad (3.12)$$

A função de amortecimento, $h(\gamma)$, foi obtida a partir de um ajuste ao módulo de relaxamento de teste de materiais obtidos para diferentes deformações/amplitudes. Para muitos materiais, o módulo de relaxamento mostra separabilidade tempo-deformação e, portanto, pode ser escrito na forma:

$$\frac{G(t, \gamma)}{G(t)} = \frac{G(t)h(\gamma)}{G(t)} = h(\gamma) = \frac{1}{1 + a\gamma^2}, \quad (3.13)$$

com $a = 0.3$ para soluções de goma xantana ((JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014)). Notar que $h(\gamma) = h(\sqrt{I_1 - 2})$ para um fluxo de cisalhamento constante 2D, com I_1 o primeiro invariante do tensor de Finger. Jaishankar e Mckinley ((JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014)) mostraram que este modelo poderia capturar bem a viscosidade de cisalhamento constante, a primeira diferença de tensão normal, ao longo de outras propriedades de soluções de polímero, como a goma de xantano, considerando apenas os parâmetros de fluxo \mathbb{V} , \mathbb{G} , α , β obtidos de um FMM adequados aos dados lineares (obtidos em experimentos de cisalhamento oscilatório de pequena amplitude) mais um parâmetro não linear adicional ($a = 0,3$) determinado a partir da função de amortecimento, equação (3.13).

3.3 Ajuste de Dados Experimentais

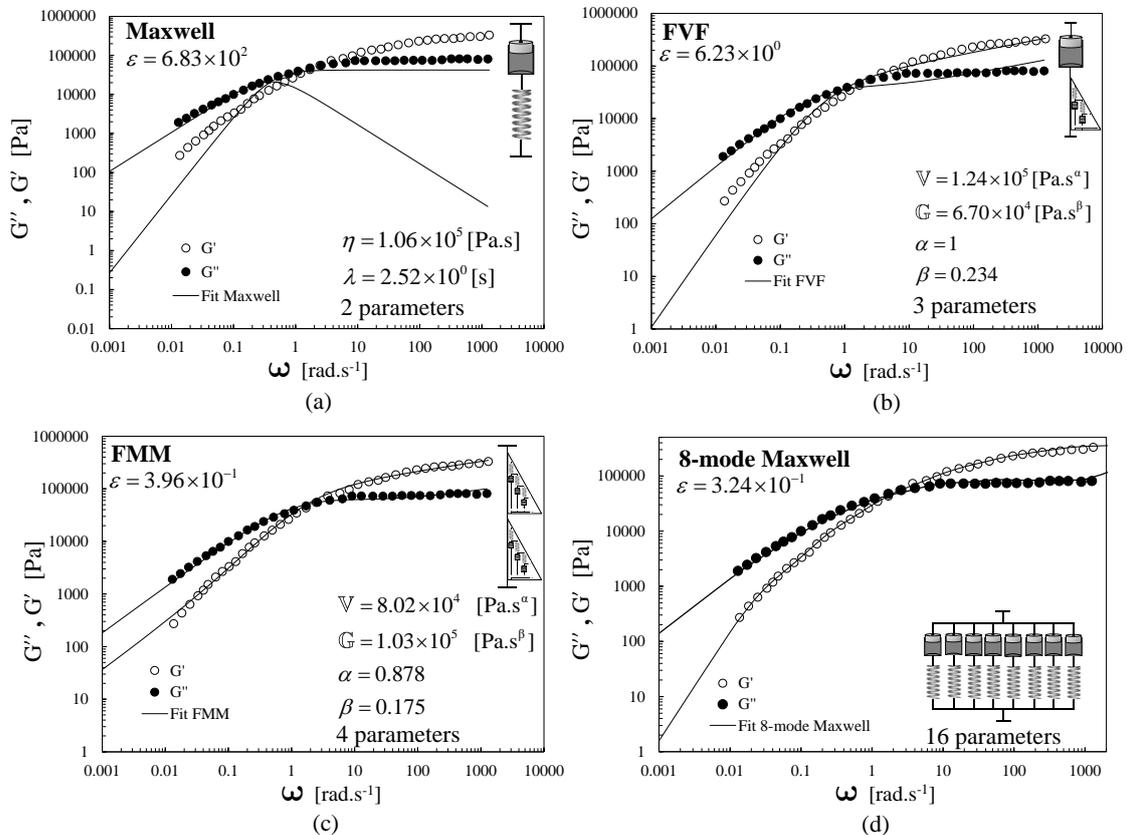
Uma vez que o FMM (equação (3.6)) pode descrever uma ampla gama de comportamentos de fluidos e também constitui a base para o K-BKZ Fracionário, testamos sua capacidade de ajustar os módulos de armazenamento e perda obtidos para um HDPE a 190°C (ANSARI; HATZIKIRIAKOS; MITSOULIS, 2012).

Conforme se mostra na figura 7, a qualidade do ajuste aumenta com a quantidade de parâmetros. Para comparar a qualidade dos diferentes ajustes, definimos o erro residual total

$$\varepsilon = \sum_i [\log G'_i - \log G'_{fit}(\omega_i)]^2 + \sum_i [\log G''_i - \log G''_{fit}(\omega_i)]^2. \quad (3.14)$$

Observe que os 3 parâmetros de FVF já oferece um ajuste de boa qualidade (o ajuste para altas frequências pode ser melhorada, mas à custa de perder alguma qualidade no ajuste para pequenas frequências), mas um ajuste melhor é obtido com o FMM e o modelo de Maxwell de 8 modos. O FMM requer apenas 4 parâmetros do modelo para descrever os dados, enquanto que o modelo de Maxwell de 8 modos requer 16. Portanto, podemos concluir que o FMM possui um desempenho mais parcimonioso nos fluxos de cisalhamento oscilatórios de pequena amplitude do que o modelo Maxwell de 8 modos (mesmo embora mostre um crescimento ilimitado da tensão após o arranque do cisalhamento constante).

Figura 7 – Ajuste de dados viscoelásticos lineares para G' e G'' obtidos para um HDPE a 190°C (ANSARI; HATZIKIRIAKOS; MITSOULIS, 2012): (a) Ajuste do modelo de Maxwell; (b) Ajuste do fluido viscoelástico fracionário; (c) Ajuste do modelo fracionário de Maxwell; (d) Ajuste em modo Maxwell de 8 modos (os parâmetros são dados em (MITSOULIS,)).



Fonte: Ferrás *et al.* (2017).

3.3.1 Limitações do Modelo K-BKZ Fracionário Invariante

O modelo K-BKZ Fracionário Invariante tem poucas limitações, mas, podemos dizer que, tem algumas características que são difíceis de lidar quando comparado com os modelos clássicos.

Essas características são:

- O modelo possui parâmetros que têm unidades *fracionárias*. Este é ainda um tema em debate, pois, isso não invalida o fato do modelo ser bom. Porém, limita a sua interpretação.
- O modelo apresenta um núcleo singular, que, resulta numa dificuldade acrescida da sua implementação numérica. Em (FERRÁS *et al.*, 2019) foi possível mostrar que o modelo integral é convergente, porém, numericamente é difícil de lidar. Já foram apresentadas algumas soluções na literatura, como por exemplo o truncamento do cálculo do integral através da adição de um *pequeno* valor para eliminar a singularidade.

No capítulo seguinte iremos apresentar uma alternativa a este modelo. Ou seja, iremos desenvolver novos modelos que permitem fazer ainda um bom ajuste, mas que, não apresentam problemas de unidades fracionárias nem problemas de convergência na sua implementação numérica. Esses modelos podem ser divididos em diferentes categorias. Modelos diferenciais que são baseados no modelo PTT apresentado anteriormente, ou seja, modelos baseados numa rede molecular e modelos integro-diferenciais baseados na estrutura do modelo K-BKZ e do modelo PSM.

NOVOS MODELOS VISCOELÁSTICOS GENERALIZADOS

O principal objetivo deste capítulo é desenvolver novos modelos viscoelásticos que permitam uma melhor modelagem de materiais complexos, sem o uso de derivadas fracionárias que podem levar a implementações numéricas mais complexas (devido à presença de núcleos singulares). Para entender melhor os novos modelos propostos, realizamos ajustes a dados experimentais, comparamos os resultados com modelos clássicos e desenvolvemos novas soluções analíticas.

Este capítulo é baseado nos seguintes trabalhos:

- R.T. Leiva, Juliana Bertoco, L.L. Ferrás, M. Luísa, M. Rebelo, A.M. Afonso, and A. Castelo. A Generalised Integral Model of the K-BKZ Type (gK-BKZ) for Viscoelastic Fluids, to be submitted (2022).
- R.T. Leiva, L.L. Ferrás, M. Luísa, M. Rebelo, A. Afonso, A. Castelo. An Improved Integro-Differential Linear Viscoelastic Model of the Maxwell type. To be Submitted (2022).
- Juliana Bertoco, R.T. Leiva, L.L. Ferrás, A.M. Afonso, and A. Castelo. Development length of fluids modelled by the gptt constitutive differential equation. *Applied Sciences*, 11(21):10352, 2021 ([BERTOCO *et al.*, 2021b](#)).
- L.L. Ferrás, M. Luísa, M. Rebelo, R.T. Leiva, A. Castelo, G.H. Mckinley, A. Afonso. Recent Advances in Complex Fluids Modeling. DOI: 10.5772/intechopen.82689. In book: *Fluid Flow Problems 2019* ([FERRÁS *et al.*, 2019](#)).
- L.L. Ferrás, M. Luísa, M. Rebelo, R.T. Leiva, A. Afonso, A. Castelo. An Improved Integro-Differential Linear Viscoelastic Model. *Conference Proceedings of the Internatio-*

nal Conference on Mathematical Analysis and Applications in Science and Engineering – ICMASC’22, 2022, Porto, Portugal (FERRÁS *et al.*, 2022).

4.1 Modelo gPTT (PTT Generalizado)

Nesta secção propomos uma nova forma generalizada do modelo Phan-Thien e Tanner (PTT) considerando uma nova forma funcional da expressão não linear que caracteriza a destruição de junções e emaranhados de redes físicas. Esta nova função do traço do tensor de tensão é dada pela função generalizada de Mittag-Leffler, e contém a forma exponencial familiar do modelo original de Phan-Thien e Tanner como um caso limite, mas oferece flexibilidade de ajuste adicional através da inclusão de uma ou duas constantes de ajuste adicionais. Realizamos ajustes a dados experimentais e mostramos que este modelo generalizado permite uma melhor descrição das respostas reológicas para uma variedade de materiais complexos, como polímeros fundidos e soluções poliméricas. São ainda obtidas novas soluções analíticas para escoamentos simples. Estas soluções analíticas são essenciais para perceber melhor o comportamento do modelo e para validação de implementações numéricas.

4.1.1 Dedução do Modelo gPTT

Em 1978, Phan-Thien propôs um modelo um pouco mais complexo que poderia se comportar de forma mais realista em escoamentos fortes em que certos componentes de deformação crescem exponencialmente no tempo (THIEN; TANNER, 1977; PHAN-THIEN, 1978; TANNER; HUILGOL, 1975). Ele propôs que uma forma de função exponencial seria bastante adequada para representar a taxa de destruição de junções, veja a figura 8(b), levando ao seguinte modelo

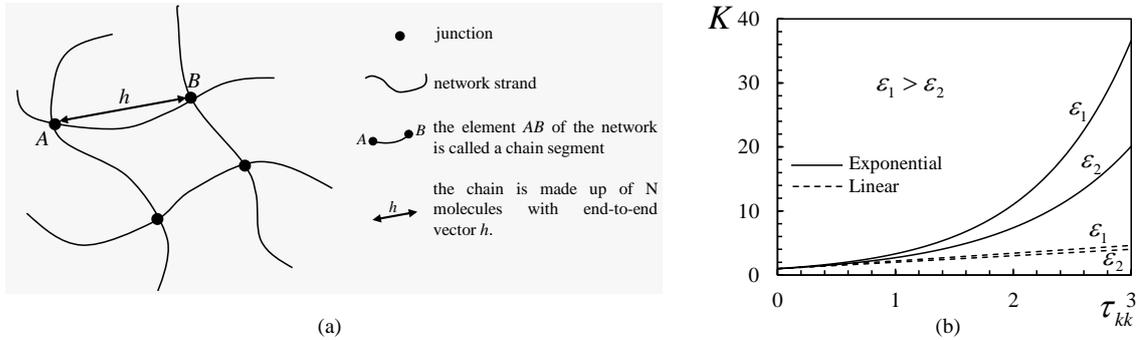
$$\exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p}\sigma_{kk}\right)\sigma + \lambda\dot{\sigma} = 2\eta_p\mathbf{D}. \quad (4.1)$$

De fato, Phan-Thien (PHAN-THIEN, 1978) mostrou que a função exponencial poderia fornecer um melhor ajuste aos dados experimentais, especialmente quando fluxos fortes estão sendo considerados (por exemplo, fluxo extensional). Ele também sugeriu que o parâmetro ε fosse de ordem 0,01.

Neste trabalho estendemos ainda mais o trabalho de Phan-Thien considerando uma função ainda mais geral para a taxa de destruição de junções. A função considerada é baseada na função generalizada de Mittag-Leffler,

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \quad (4.2)$$

Figura 8 – (a) Rede Lodge-Yamamoto. O líquido polimérico consiste em segmentos poliméricos conectados por junções e muda constantemente sua topologia. Cada cadeia é feita de N moléculas com um vetor de ponta a ponta comum h . (b) Forma exponencial da função K que foi intuitivamente sugerida por Nhan Phan-Thien (PHAN-THIEN, 1978) para descrever a taxa de destruição de junções, considerando dois valores diferentes de ε (denotados por ε_1 e ε_2). Também traçamos a forma linear de $K(\sigma_{kk})$ para comparação.



Fonte: Ferrás *et al.* (2019).

que se reduz à função exponencial quando $\alpha = \beta = 1$ (consideramos α, β reais e positivos). Quando $\beta = 1$ obtemos a função Mittag-Leffler original de um parâmetro, E_α (PODLUBNY, 1999). Aqui, Γ é a função Gamma dada por:

$$\Gamma(t) = \int_0^\infty x^{t-1} e^{-x} dx. \quad (4.3)$$

A função Mittag-Leffler dada na Eq. (4.2) surge (em função do tempo) em modelos de relaxação fracionária para líquidos viscoelásticos (FERRÁS *et al.*, 2017). Geralmente pensamos em relaxamento clássico fenômenos descritos em termos da função exponencial $\phi(t) = e^{-t/T}$ (com T uma escala de tempo característica) muitas vezes referida como relaxamento de Maxwell–Debye. Este modelo está longe de ser perfeito para materiais reais, pois em muitos sistemas, grandes desvios deste caso monoexponencial clássico são observados. Tais sistemas podem ser bem modelados, por exemplo, pela Kohlrausch–Williams–Watts ou função exponencial estendida $\phi(t) = e^{-(t/T)^b}$ ($0 < b < 1$). Em 2002 Metzler e Klafter (METZLER; KLAFTER, 2002) derivaram uma generalização desta função de relaxamento, usando cálculo fracionário que naturalmente dá origem à função de Mittag-Leffler $E_{\alpha,1}(z) = E_\alpha(z)$.

A relaxação é então dada por $\phi(t) = E_\alpha(-(t/T)^\alpha)$, e, para valores pequenos do argumento ($t/T \ll 1$) temos $E_\alpha(-(t/T)^\alpha) \approx e^{-(t/T)^\alpha}$.

Os modelos constitutivos viscoelásticos resultantes permitem um melhor ajuste aos dados reológicos e ao mesmo tempo fazem uso de um número menor de parâmetros, quando comparados, por exemplo, com abordagens multimodo (FERRÁS *et al.*, 2017).

Com base nessas considerações, a função de Mittag-Leffler parece ser um bom candidato para descrever melhor a taxa de destruição de junções e o comportamento de materiais complexos.

Portanto, propomos uma nova função descrevendo a destruição da rede que pode ser escrita como,

$$K(\sigma_{kk}) = \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(\frac{\varepsilon \lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) \quad (4.4)$$

onde a normalização $\Gamma(\beta)$ é usado para garantir que $K(0) = 1$ para todas as opções de β . No caso de α e β são reais e positivos, a série em (4.2) converge para todos os valores do argumento z . Deve-se notar que o parâmetro ε na Eq. (4.4) não pode ser comparado diretamente ao usado no modelo PTT original quando α e β são diferentes de 1. Isso pode ser facilmente visto executando uma expansão em série de e^z e $\Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta}(z)$, para $z \ll 1$ (PODLUBNY, 1999),

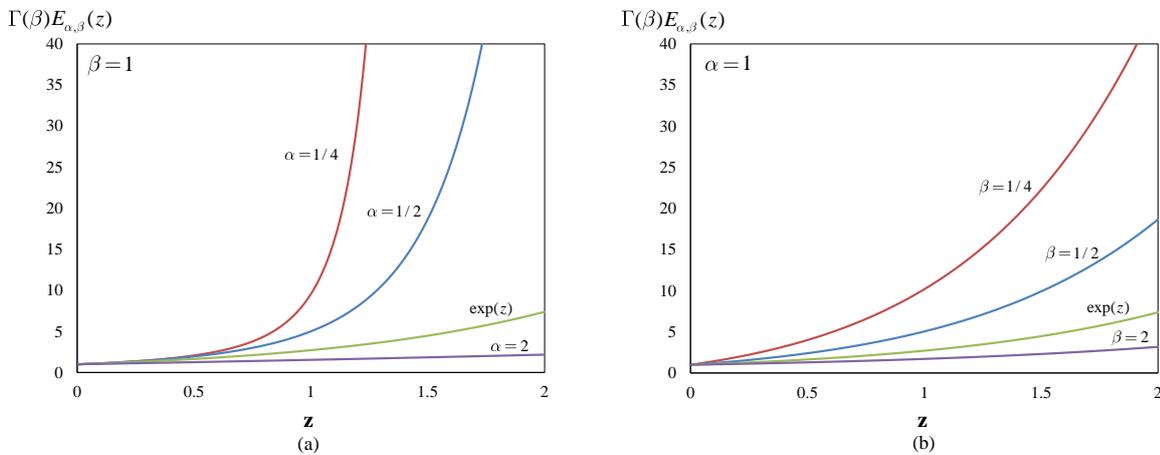
$$e^z \cong \sum_{k=1}^N \frac{z^{k-1}}{(k-1)!} + \mathcal{O}(z^N), \quad (4.5)$$

$$\Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta}(z) \cong \Gamma(\beta) \sum_{k=1}^N \frac{z^{k-1}}{\Gamma(\alpha(k-1) + \beta)} + \mathcal{O}(z^N). \quad (4.6)$$

Os parâmetros α e β influenciarão o comportamento da função Mittag-Leffler e, portanto, para o mesmo valor de ε os dois funções fornecerão valores diferentes, a menos que $\alpha = \beta = 1$, de modo que $E_{\alpha, \beta}(z) = e^z$.

A figura 9 mostra a variação de $\Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta}(z)$ para vários valores diferentes de α e β . Observamos que são obtidas diferentes taxas de aumento na taxa de destruição, com valores decrescentes de α e β . Observe a comparação com a função exponencial ($\alpha = \beta = 1$). É evidente que a função de Mittag-Leffler permite uma maior variação nas taxas de destruição de junções da rede e, portanto, mais flexibilidade no ajuste de dados experimentais.

Figura 9 – Influência de α e β na forma de $\Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta}(z)$ onde $z = \varepsilon \lambda \sigma_{kk} / \eta_p$. (a) $\beta = 1$, (b) $\alpha = 1$. (O software Mathematica foi usado para traçar esta função.)



Fonte: Ferrás *et al.* (2019).

Deve-se notar que Phan-Thien (PHAN-THIEN, 1978), ao propor o modelo PTT exponencial, afirmou intuitivamente que a função desconhecida do traço do tensor de tensão poderia ser

mais ou menos esperada seguir um comportamento exponencial, pois quanto maior a extensão de cada fio de rede, maior a taxa de destruição resultante. Assumindo a existência de uma resposta linear elástica para pequenas deformações, espera-se uma variação linear desta função para pequenas deformações, mas, à medida que a deformação aumenta, espera-se que ocorra uma variação mais abrupta da taxa de destruição, até que um comprimento crítico de segmento é alcançado. Como este é um modelo contínuo, a função exponencial traz informações das escalas microestruturais para o modelo contínuo; portanto, quanto mais realista for a descrição da escala microscópica, melhor devemos esperar que o modelo contínuo descreva dados reais. Uma generalização da função exponencial permitiria então, em princípio, um ajuste melhorado das respostas reológicas medidas. Agora a pergunta é: como relacionar os novos parâmetros α e β com a física do processo? Observe que ao propor uma nova função de traço do tensor de tensão (versões linear, exponencial e generalizada), já estamos fazendo suposições sobre a estrutura do material.

Phan-Thien (PHAN-THIEN, 1978) introduz o simples material específico ε (normalmente na ordem de 0,01). O efeito deste parâmetro na taxa de destruição é considerável, e verifica-se que a viscosidade de Trouton em estado estacionário em grandes taxas de estiramento é inversamente proporcional a ε (PHAN-THIEN, 1978). A introdução de dois parâmetros adicionais no novo modelo resultará na variação da viscosidade do Trouton com α e β .

Os parâmetros α e β alteram a forma da função de taxa de destruição e, portanto, não podemos mais dizer que ε permanecerá sempre de ordem 0,01.

Além disso, para materiais altamente ramificados, como polietileno de baixa densidade (LDPE), a função exponencial pode não ser suficiente para lidar com a complexidade microestrutural do material (sendo essa uma das razões para a criação do modelo *pom-pom*. Este modelo também leva em consideração os diferentes tempos de relaxamento para orientação e alongamento). Portanto, podemos concluir que quando alteramos os parâmetros α e β significa que estamos adotando uma função mais complexa e flexível do traço do tensor de tensão.

4.1.2 Equações Governantes

Tal como vimos nos capítulos anteriores, as equações governantes são dadas pela equação da conservação da massa,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.7)$$

a equação da quantidade de movimento,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.8)$$

e a nova equação constitutiva,

$$\Gamma(\beta)E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) \sigma + \lambda \dot{\sigma} = 2\eta_p \mathbf{D}. \quad (4.9)$$

Convém relembrar que $\dot{\sigma}$ é a derivada de Gordon–Schowalter apresentada na equação (2.18).

4.1.3 Estudo Paramétrico do Modelo gPTT

Nesta Seção, estamos interessados em mostrar que este novo modelo fornece um *me-lhor ajuste* para dados reológicos experimentais (usando uma medida estatística apropriada de qualidade de ajuste) e, portanto, o modelo PTT completo será considerado (equação (4.9) com $\xi \neq 0$).

Weak Steady Flows - escoamentos Estacionários Fracos

Nesta Subseção consideraremos escoamentos de cisalhamento simples estacionários, para os quais expressões explícitas para as funções materiais podem ser facilmente encontradas. Observe que Phan-Thien (PHAN-THIEN, 1978) concluiu que para fluxos fracos (por exemplo fluxos viscométricos) as previsões do modelo PTT exponencial são insensíveis aos valores de ε .

Seguindo o trabalho de Alves et al. (ALVES; PINHO; OLIVEIRA, 2001) e considerando um escoamento de cisalhamento plano simples alinhado com o eixo x , a equação constitutiva (4.9) se reduz a:

$$K(\sigma_{kk})\sigma_{xx} = (2 - \xi)(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{xy}, \quad (4.10)$$

$$K(\sigma_{kk})\sigma_{yy} = -\xi(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{xy}, \quad (4.11)$$

$$K(\sigma_{kk})\sigma_{xy} = \eta_p\dot{\gamma} + (1 - \xi/2)(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{yy} - \frac{\xi}{2}(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{xx}, \quad (4.12)$$

onde $\dot{\gamma}$ é a taxa de cisalhamento constante $\dot{\gamma} = |du/dy|$. A razão das equações (4.10) e (4.11) leva à relação $\sigma_{yy} = -\sigma_{xx}\xi/(2 - \xi)$, e, sua substituição na equação (4.12) juntamente com σ_{xy} obtidos da equação (4.10) e $K(\sigma_{kk}) = \Gamma(\beta)E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \right)$ leva à seguinte equação não linear para σ_{xx} ,

$$\Gamma^2(\beta)E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \left(\frac{2-2\xi}{2-\xi} \right) \sigma_{xx} \right)^2 \sigma_{xx} = (2 - \xi)(\lambda\dot{\gamma})^2 [\eta_p/\lambda - \sigma_{xx}\xi]. \quad (4.13)$$

A tensão de cisalhamento σ_{xy} em função de $\dot{\gamma}$ é obtida da equação (4.12), e é dado por:

$$\sigma_{xy}(\dot{\gamma}) = \frac{\eta_p\dot{\gamma} - \sigma_{xx}Wi\xi}{\Gamma(\beta)E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \left(\frac{2-2\xi}{2-\xi} \right) \sigma_{xx} \right)} \quad (4.14)$$

com $Wi = \lambda \dot{\gamma}$ o número de Weissenberg.

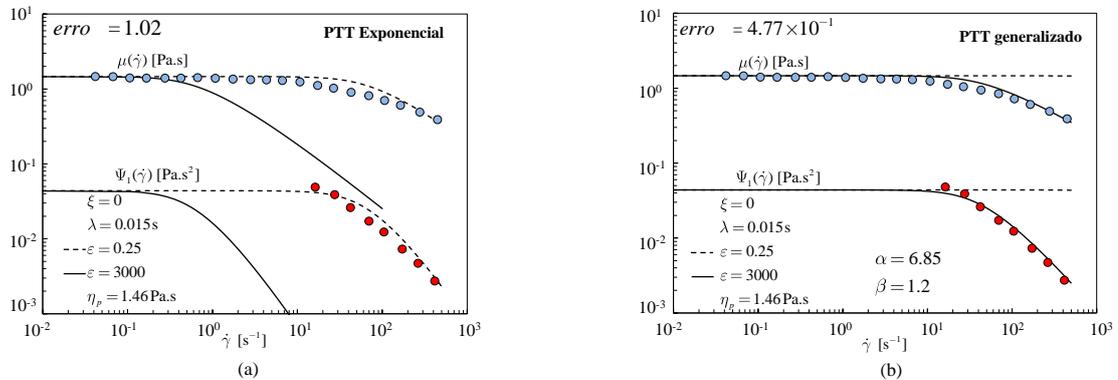
Podemos, portanto, obter as funções viscométricas do material: a viscosidade de cisalhamento, $\eta(\dot{\gamma})$, e o primeiro e segundo coeficientes de tensão normal, $\Psi_1(\dot{\gamma})$ e $\Psi_2(\dot{\gamma})$, respectivamente, que são dados por:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_{xy}(\dot{\gamma})}{\dot{\gamma}}, \quad (4.15)$$

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{\dot{\gamma}^2} = \frac{2\sigma_{xx}}{(2 - \xi)\dot{\gamma}^2}, \quad (4.16)$$

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) = \frac{-\xi\sigma_{xx}}{(2 - \xi)\dot{\gamma}^2}. \quad (4.17)$$

Figura 10 – Ajuste do modelo (FERRÁS *et al.*, 2019; FERRÁS *et al.*, 2019) aos dados de viscosidade de cisalhamento e primeira diferença de tensão normal obtidos por Quinzani et al. para uma solução de polímero concentrado (QUINZANI; ARMSTRONG; BROWN, 1994). Observe que no limite $Wi \ll 1$ temos $\lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \eta(\dot{\gamma}) \rightarrow \eta_p = G\lambda$. (a) Exponencial PTT, (b) PTT generalizado. Os símbolos representam os dados experimentais e as linhas cheias e tracejadas representam o ajuste obtido com cada modelo para $\varepsilon = 3000, 0.25$, respectivamente. O erro foi calculado apenas para o melhor ajuste (linhas tracejadas em (a) e linhas sólidas em (b)).



Fonte: Ferrás *et al.* (2019).

A equação do erro é dada por:

$$\varepsilon = \sum_i [\log A_i - \log A_{fit}(\omega_i)]^2, \quad (4.18)$$

onde A representa a propriedade ou função genérica a ajustar.

Strong Steady Flows - Escoamentos Estacionários Fortes

Nesta subsecção consideraremos escoamentos fortes, como deformações extensionais, para os quais o modelo PTT exponencial e sua generalização descrita aqui, devem ter um desempenho melhor que o linear (PHAN-THIEN, 1978). Para isso, faremos um ajuste aos dados de viscosidade

extensional para os dados de um poliestireno retirados do trabalho de Nielsen et al. (NIELSEN et al., 2006).

Para determinar a viscosidade extensional unidirecional $\eta_E = (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/\dot{\epsilon}$ consideramos um campo de velocidade dado por $\mathbf{u} = \dot{\epsilon}(x, -y/2, -z/2)$ para a seguinte tensor taxa de deformação:

$$\mathbf{D} = \dot{\epsilon} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

Aqui $\dot{\epsilon}$ é a taxa de alongamento constante imposta.

Este campo cinemático leva ao seguinte sistema de equações não lineares para σ_{xx} , σ_{yy} e σ_{zz} :

$$\sigma_{xx} \left(\Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) - 2\lambda\dot{\epsilon}(1 - \xi) \right) = 2\eta_p\dot{\epsilon}, \quad (4.20)$$

$$\sigma_{yy} \left(\Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) + \lambda\dot{\epsilon}(1 - \xi) \right) = -\eta_p\dot{\epsilon}, \quad (4.21)$$

$$\sigma_{zz} \left(\Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) + \lambda\dot{\epsilon}(1 - \xi) \right) = -\eta_p\dot{\epsilon}, \quad (4.22)$$

com $\sigma_{kk} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}$. A solução deste sistema de equações nos permite determinar η_E e a sua variação com a taxa de extensão. Uma abordagem para resolver (4.20)-(4.22) é uma abordagem iterativa (por exemplo, o método de Newton-Raphson), mas pode ser muito lento. Uma abordagem alternativa que permite obter facilmente a viscosidade extensional é agora fornecida (essa metodologia foi inicialmente desenvolvida na tese de doutorado do Professor Gareth McKinley do MIT).

Observe que as equações para σ_{yy} e σ_{zz} são idênticas e, portanto, $\sigma_{kk} = \sigma_{xx} + 2\sigma_{yy}$. Soma das Eqs. (4.20)+2×(4.21) leva a

$$\sigma_{kk} \Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) = N_1 2Wi(1 - \xi) \quad (4.23)$$

com $N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{yy}$ e $Wi = \lambda\dot{\epsilon}$. Tomando a diferença de (4.20) e (4.21) obtemos:

$$N_1 = 3\eta_p\dot{\epsilon} \left[\frac{\Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right)}{\left(\Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) - 2Wi(1 - \xi) \right) \left(\Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{\epsilon\lambda}{\eta_p} \sigma_{kk} \right) + Wi(1 - \xi) \right)} \right]. \quad (4.24)$$

Seja $G = \eta_p/\lambda$, $\tilde{T} \equiv \frac{\sigma_{kk}}{G}$ e $\tilde{K}(\tilde{T}) \equiv \Gamma(\beta)E_{\alpha,\beta}(\varepsilon\tilde{T})$. A divisão da equação (4.23) por G resulta em:

$$\frac{N_1}{G} \equiv \tilde{N} = \frac{\tilde{T}\tilde{K}(\tilde{T})}{2Wi(1-\xi)} \quad (4.25)$$

e a substituição de \tilde{N} na equação (4.24) dividido por G resulta na seguinte equação quadrática para $Wi = \lambda\dot{\varepsilon}$ (FERRÁS *et al.*, 2019):

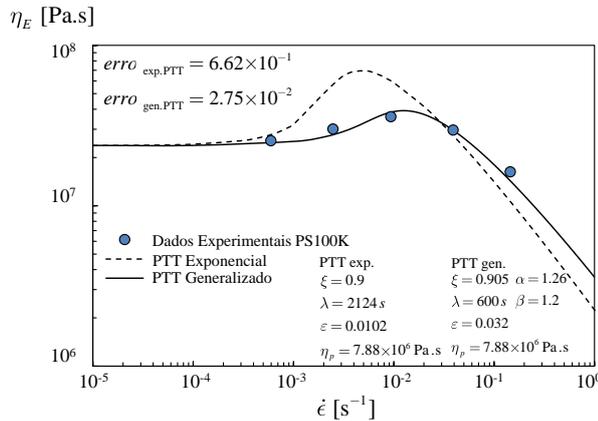
$$aWi^2 + bWi - c = 0 \quad (4.26)$$

com $a = 2(1-\xi)(3+\tilde{T}(1-\xi))$, $b = \tilde{T}\tilde{K}(1-\xi)$ e $c = \tilde{T}\tilde{K}^2$. Depois de resolver para $Wi(\tilde{T})$ obtemos a tensão extensional (escalada com G) da Eq. (4.25) e, portanto, a viscosidade extensional pode ser facilmente calculada como $\eta_E/\eta_0 = \tilde{N}/Wi = (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/(\eta_0\dot{\varepsilon})$.

A ideia é gerar um vetor de valores para \tilde{T} e posteriormente obter \tilde{K} , $Wi(\tilde{T})$, $\tilde{N}(\tilde{T})$ sem a necessidade de iteração.

A figura seguinte mostra um ajuste a dados experimentais. Mais uma vez foi possível obter um melhor ajuste com o modelo generalizado quando comparado com o modelo exponencial (FERRÁS *et al.*, 2019; FERRÁS *et al.*, 2019).

Figura 11 – Ajuste à viscosidade extensional usando os modelos PTT exponencial e generalizado. Os dados reológicos foram obtidos de Nielsen *et al.* (NIELSEN *et al.*, 2006).



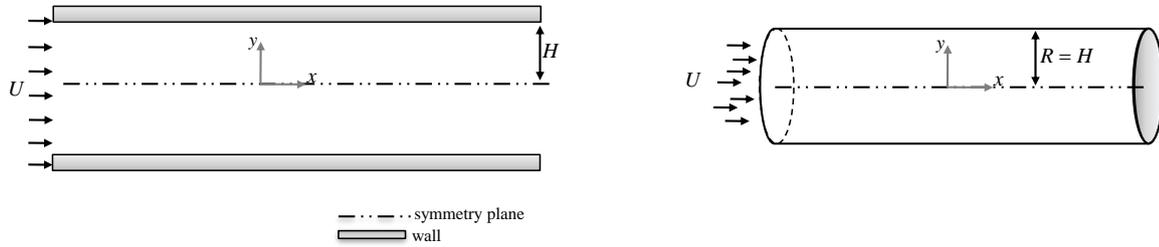
Fonte: Ferrás *et al.* (2019).

4.1.4 Solução Analítica do Modelo gPTT

Vamos agora derivar uma solução analítica para o escoamento totalmente desenvolvido do modelo PTT generalizado (com o parâmetro de escorregamento na derivada de Gordon-Showalter definido como $\xi = 0$) em escoamentos de canal e tubo. Para evitar a introdução de muitas equações, usaremos uma notação compacta para as geometrias de canal e tubo (veja

a figura 12), onde y é a direção transversal (ou radial) e $\delta = 0,1$ significa fluxo de canal ou tubulação, respectivamente (OLIVEIRA; PINHO, 1999).

Figura 12 – Geometrias de canal e tubo



Fonte: Ferrás *et al.* (2019).

As equações constitutivas para o modelo PTT generalizado que descrevem este escoamento ($\mathbf{u} = \{\dot{\gamma}y, 0, 0\}$ com $\dot{\gamma}(y) = du/dy$), pode ser ainda mais simplificadas para:

$$K(\sigma_{kk})\sigma_{xx} = (2 - \xi)(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{xy} \quad (4.27)$$

$$K(\sigma_{kk})\sigma_{yy} = -\xi(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{xy} \quad (4.28)$$

$$K(\sigma_{kk})\sigma_{xy} = \eta_p\dot{\gamma} + \left(1 - \frac{\xi}{2}\right)(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{yy} - \frac{\xi}{2}(\lambda\dot{\gamma})\sigma_{xx} \quad (4.29)$$

onde $\sigma_{kk} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy}$ é o traço do tensor de tensão no escoamento de cisalhamento. Observe que a taxa de cisalhamento não é mais constante, mas varia com y . Para o modelo PTT generalizado, se definirmos $\xi = 0$, a equação (4.28) implica $\sigma_{yy} = 0$ e assim o traço do tensor de tensão se torna $\sigma_{kk} = \sigma_{xx}$, e a função de destruição de rede torna-se uma função explícita da tensão normal $K(\sigma_{xx})$. O segundo coeficiente de tensão normal para a forma simplificada do modelo gPTT é identicamente zero. Após a divisão das expressões para os dois componentes que não desaparecem da tensão (4.27)-(4.29), $K(\sigma_{xx})$ se cancela, e uma relação explícita entre a tensão normal no sentido do escoamento e a tensão de cisalhamento é obtida,

$$\sigma_{xx} = 2\frac{\lambda}{\eta_p}\sigma_{xy}^2 \quad (4.30)$$

Observe que a tensão de cisalhamento pode ser facilmente obtida pela integração da equação da quantidade de movimento (4.8), levando a,

$$\sigma_{xy} = P_x \frac{y}{2\delta}, \quad (4.31)$$

onde $P_x = dP/dx < 0$ é o gradiente de pressão imposto e tem sinal negativo. Combinando as equações (4.29), (4.30) e (4.31) obtemos o gradiente de velocidade (para mais detalhes sobre uma derivação similar veja (OLIVEIRA; PINHO, 1999)) :

$$\dot{\gamma}(y) = \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(\frac{2\varepsilon\lambda^2}{\eta_p^2} P_x^2 \frac{y^2}{2^{2\delta}} \right) \frac{P_x y}{\eta_p 2^\delta} \quad (4.32)$$

O perfil de velocidade pode ser obtido a partir da integração do gradiente de velocidade sujeito ao não escorregamento na parede (velocidade nula),

$$u(y) = - \int_y^H \dot{\gamma}(y) dy \quad (4.33)$$

resultando no seguinte perfil de velocidade:

$$u(y) = \frac{\Gamma(\beta) P_x}{\eta_p 2^\delta} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2k+2} \left(\frac{2\varepsilon\lambda^2 P_x^2}{\eta_p^2 2^{2\delta}} \right)^k \right) \left(\frac{y^{2k+2} - H^{2k+2}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \right). \quad (4.34)$$

Observe que esse perfil de velocidade depende do gradiente de pressão imposto. Se definirmos a restrição de uma taxa de fluxo específica, podemos obter o gradiente de pressão correspondente resolvendo a seguinte equação:

$$U = \frac{1}{H^{\delta+1}} \int_0^H 2^\delta y^\delta u(y) dy \quad (4.35)$$

que resulta na seguinte equação para o canal,

$$\frac{-P_x \Gamma(\beta)}{H \eta_p} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2k+2} \left(\frac{2\varepsilon\lambda^2 P_x^2}{\eta_p^2} \right)^k \right) \left(\frac{H^{2k+3}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \right) \left(\frac{2k+2}{2k+3} \right) - U = 0, \quad (4.36)$$

sendo dada por,

$$\frac{-P_x \Gamma(\beta)}{H^2 \eta_p 2} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2k+2} \left(\frac{2\varepsilon\lambda^2 P_x^2}{\eta_p^2 4} \right)^k \right) \left(\frac{H^{2k+4}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \right) \left(\frac{k+1}{k+2} \right) - U = 0. \quad (4.37)$$

para o caso do tubo.

As equações para a velocidade e pressão também podem ser escritas em forma adimensional:

$$\bar{u}(\bar{y}) = \Gamma(\beta) \bar{P}_x \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2k+2} (2\varepsilon Wi^2 \bar{P}_x^2)^k \right) \left(\frac{1 - \bar{y}^{2k+2}}{\Gamma(\alpha k + \beta)} \right). \quad (4.38)$$

$$\frac{\Gamma(\beta)\bar{P}_x}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2k+2} \left(\frac{2\varepsilon Wi^2 \bar{P}_x^2}{4} \right)^k \right) \left(\frac{k+1}{\Gamma(\alpha k + \beta)(k+2)} \right) - 1 = 0. \quad (4.39)$$

respectivamente, onde $\bar{y} = y/H$, $\bar{u} = u/U$, $\bar{P}_x = -P_x H^2 / (\eta_p U)$ e $Wi = \lambda U / H$.

4.1.5 Conclusões

Propusemos um novo modelo PTT generalizado que permite um ajuste muito melhor aos dados reológicos obtidos para polímeros fundidos e desenvolvemos novas soluções analíticas e semi-analíticas para escoamentos estacionários totalmente desenvolvidos em canais e tubos.

Essa flexibilidade constitutiva adicional nos permite descrever escoamentos de cisalhamento estacionário e extensionais com fidelidade aprimorada usando apenas um único modo de relaxamento e 6 parâmetros totais do modelo η , λ , ε , α , β (mais ξ se uma segunda diferença de tensão normal for importante).

Este modelo será implementado numericamente no código HiG-Flow (ver secções seguintes), e será estudado o comprimento de desenvolvimento para fluidos modelados pelo gPTT.

4.2 Modelo Generalizado de Maxwell (Maxwell-ML)

Neste trabalho, apresentamos uma generalização do modelo integral de Maxwell desenvolvendo um novo módulo de relaxação baseado na função de Mittag-Leffler. O novo modelo fornece um melhor ajuste aos dados experimentais lineares em comparação, por exemplo, com um modelo clássico de Maxwell de 2 modos.

4.2.1 Dedução do Modelo Maxwell-ML

Vamos agora relembrar alguns dos conceitos vistos no capítulo sobre modelo viscoelásticos. O modelo mais elementar para uma resposta constitutiva de fluidos viscoelásticos foi proposto por Maxwell (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987) e é dado por:

$$\sigma(t) + \lambda \frac{d\sigma(t)}{dt} = \eta \dot{\gamma}(t), \quad (4.40)$$

onde,

$$\dot{\gamma}(t) = \frac{d\gamma(t)}{dt} = \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \quad (4.41)$$

é o tensor de taxa de deformação, \mathbf{u} o vetor de velocidade, λ o tempo de relaxação do fluido e η a viscosidade de cisalhamento. Tal como vimos, o modelo também pode ser escrito na forma integral como,

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t G_0 e^{-\frac{t-t'}{\lambda}} \frac{d\gamma(t')}{dt'} dt' \quad (4.42)$$

Este tipo de relaxamento de Maxwell-Debye (decaimento exponencial) é observado em vários fluidos viscoelásticos complexos, mas existem outros materiais que apresentam uma memória de desvanecimento mais complexa que segue um decaimento exponencial mais generalizado, ou seja,

$$G(t) = S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta}(-t), \quad (4.43)$$

onde $E_{\alpha, \beta}$ é a função Mittag-Leffler (uma generalização da função exponencial), Γ é a função Gamma e a normalização $\Gamma(\beta)$ é usado para garantir que $G(0) = S_0$, para todas as opções de β .

A nova equação constitutiva (modelo Maxwell-ML) é então dada por:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t-t'}{\lambda} \right) \frac{d\gamma(t')}{dt'} dt' \quad (4.44)$$

onde $G(t-t') = S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t-t'}{\lambda} \right)$ é o módulo de relaxamento. Este modelo tem um ou dois novos parâmetros de ajuste α e β , resultando em uma flexibilidade de ajuste adicional.

Deve-se notar que um decaimento monotônico é esperado. Portanto, devemos impor restrições aos parâmetros α e β , para que se obtenha uma relaxação adequada.

Teorema 4.2.1. (POLLARD, 1948) A função

$$E_{\alpha}(-z), \quad z \in \mathbb{R}^+ \quad (4.45)$$

é completamente monótona para qualquer $0 < \alpha \leq 1$.

Teorema 4.2.2. (SCHNEIDER, 1996) A função

$$E_{\alpha,\beta}(-z), \quad z \in \mathbb{R}^+ \quad (4.46)$$

é completamente monotônica para $\alpha > 0$ e $\beta > 0$ se e somente se $0 < \alpha \leq 1$ e $\beta \geq \alpha$.

Esses dois teoremas definem a restrição imposta nos parâmetros α , β , ou seja: $0 < \alpha \leq 1$ e $\beta \geq \alpha$.

O modelo de Maxwell pode ser escrito nas formas diferencial (equação 4.40) e integral (equação 4.42). A nova equação constitutiva (dada pela equação 4.44) é mais complexa e só pode ser reduzida a uma forma integro-diferencial.

Lema 5. O modelo Maxwell-ML pode ser escrito na forma integro-diferencial, como:

$$\frac{S_0 \Gamma(\beta)}{\alpha \lambda} \int_{-\infty}^t A(t-t') \dot{\gamma}(t') dt' + \frac{d\sigma(t)}{dt} = S_0 \dot{\gamma}(t), \quad (4.47)$$

em que $A(t-t') = E_{\alpha,\alpha+\beta-1}\left(\frac{t'-t}{\lambda}\right) + (1-\beta)E_{\alpha,\alpha+\beta}\left(\frac{t'-t}{\lambda}\right)$.

Prova: Diferenciando no tempo ambos os lados da Eq. (4.44) e aplicando a Regra de Leibnitz,

$$\frac{d}{dt} \int_{a(t)}^{b(t)} f(t',t) dt' = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx + \frac{db}{dt} f(b,t) - \frac{da}{dt} f(a,t), \quad (4.48)$$

ao lado direito de

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \lim_{a \rightarrow -\infty} \frac{d}{dt} \int_a^t S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(-\frac{t-t'}{\lambda} \right) \frac{d\gamma(t')}{dt'} dt', \quad (4.49)$$

o resultado segue.

4.2.2 Ajuste a Dados Experimentais

Uma vez que o Maxwell-ML tem quatro parâmetros, espera-se que forneça flexibilidade adicional no ajuste de uma ampla gama de reologia de fluidos complexos. Para testar esta teoria, realizamos um ajuste com um modelo Maxwell, um modelo Maxwell de 2 modos e o Maxwell-ML (com apenas um parâmetro α) aos dados experimentais do módulo de armazenamento e módulo de perda (G' e G'') obtidos a partir da caracterização reológica (Small Amplitude Oscillatory Shear a 230 °C) de um poliestireno, Polystyrol 158K da BASF.

O lema seguinte estabelece as expressões matemáticas de G' e G'' para o modelo Maxwell-ML. Essas expressões foram usadas para realizar um ajuste aos dados experimentais mostrados na figura 13.

Lema 6. Os módulos de armazenamento (G') e perda (G'') para o modelo viscoelástico 1D Maxwell-ML são dados por:

$$G'(\omega) = \omega S_0 \Gamma(\beta) \int_0^{\infty} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) \sin(\omega t) dt, \quad (4.50)$$

$$G''(\omega) = \omega S_0 \Gamma(\beta) \int_0^{\infty} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) \cos(\omega t) dt. \quad (4.51)$$

Prova: Seja $\mathcal{L}(\cdot; s)$ a transformada de Laplace, então temos que:

$$\mathcal{L}(\sigma(t); s) = \tilde{\sigma}(s) = s \tilde{\gamma}(s) \int_0^{\infty} S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) e^{-st} dt. \quad (4.52)$$

Logo,

$$G^*(s) = \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\tilde{\gamma}(s)} = s \int_0^{\infty} S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) e^{-st} dt. \quad (4.53)$$

Se considerarmos $s = i\omega$, temos então:

$$G^*(i\omega) = \omega S_0 \Gamma(\beta) \left(\int_0^{\infty} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) \sin(\omega t) dt + i \int_0^{\infty} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) \cos(\omega t) dt \right), \quad (4.54)$$

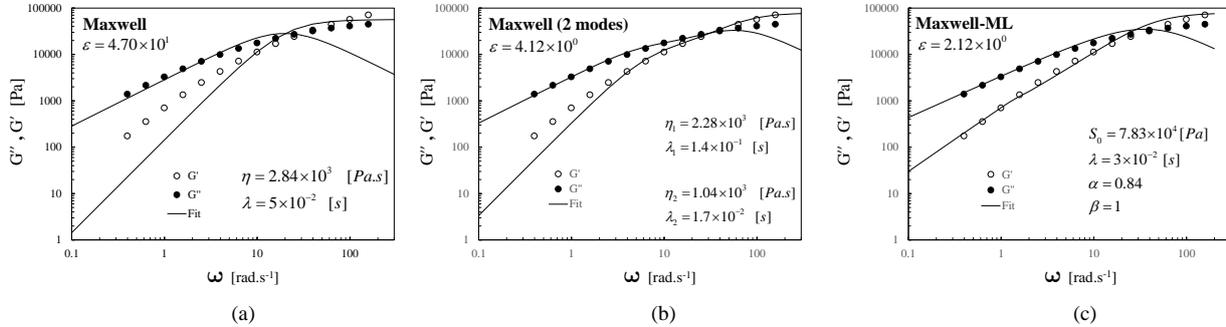
ou seja,

$$G^*(i\omega) = G'(\omega) + iG''(\omega). \quad (4.55)$$

A partir dos resultados mostrados na figura 13, pode-se observar que usando o Maxwell-ML é obtido um melhor ajuste.

Deve-se observar que o parâmetro β não foi utilizado no processo de ajuste. Isso significa que conseguimos um melhor ajuste com 3 parâmetros quando comparado o modelo Maxwell com 2 modos (quatro parâmetros).

Figura 13 – Ajuste das contribuições elásticas e viscosas G' e G'' ao módulo viscoelástico linear obtido a partir da caracterização reológica de um poliestireno, Polystyrol 158K da BASF utilizando (a) modelo Maxwell; (b) modelo Maxwell com 2 modos; (c) O modelo proposto neste trabalho, com a função ML de um parâmetro $E_{\alpha}(\cdot)$ Maxwell-ML.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Para termos uma ideia da influência dos novos parâmetros no comportamento do modelo, foi construído o seguinte mapa de valores de intersecção entre G' e G'' , designados por ϕ_c . Desta forma conseguimos saber a influência de α e β no tempo característico de relaxação do modelo (designado por λ_E para não se confundir com o parâmetro do modelo λ , que neste modelo não representa o tempo de relaxação).

Sabemos que

$$G'(\omega) = G''(\omega) \Leftrightarrow \int_0^{\infty} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{-t}{\lambda} \right) (\sin(\omega t) - \cos(\omega t)) dt = 0. \quad (4.56)$$

fazendo a mudança de variável $u = t/\lambda$ obtemos a seguinte equação,

$$\int_0^{\infty} E_{\alpha,\beta}(-u) (\sin(\omega \lambda u) - \cos(\omega \lambda u)) dt = 0. \quad (4.57)$$

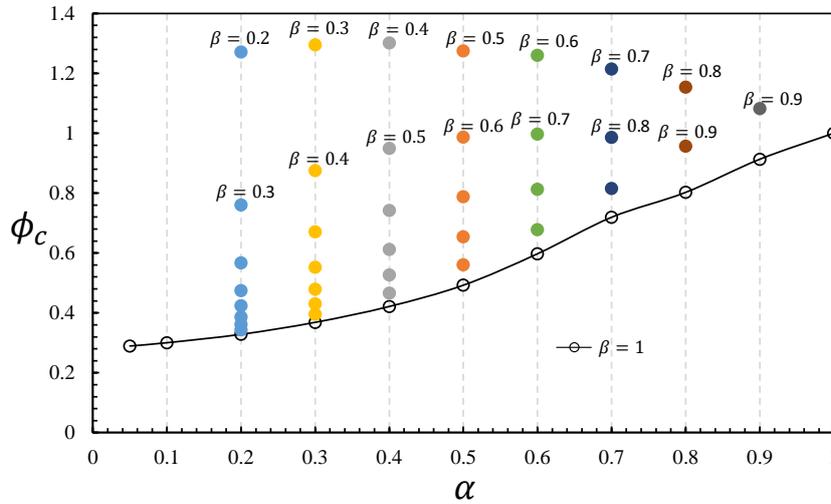
Ou seja, para α e β vamos obter um valor de $\omega \lambda$. Fixando um valor de λ , e obtendo ω_c numericamente, é possível obter posteriormente os valores de ω_c , para outros valores de λ .

Por exemplo, para construir a figura 14 foi usado $\lambda = 0.1$. O eixo dos y mostra os valores de $\phi_c = \omega_c \lambda$. Ou seja, se quisermos saber o novo valor ω_{c_1} para $\lambda = a$ só temos que fazer a conta $\omega_{c_1} = \phi_c/a$.

Através da figura 14 podemos concluir que existe uma variação não linear de $\lambda_E = 1/\phi_c$ com α e β . O tempo de relaxação diminui com o aumento de α (para um valor fixo de β) e aumenta com o aumento de β (para um valor fixo de α).

Acabamos de mostrar que o novo modelo permite um melhor ajuste aos dados experimentais, utilizando um número menor de parâmetros. Nas próximas seções derivaremos duas versões invariantes do modelo.

Figura 14 – Variação do tempo de relaxação com α e β .

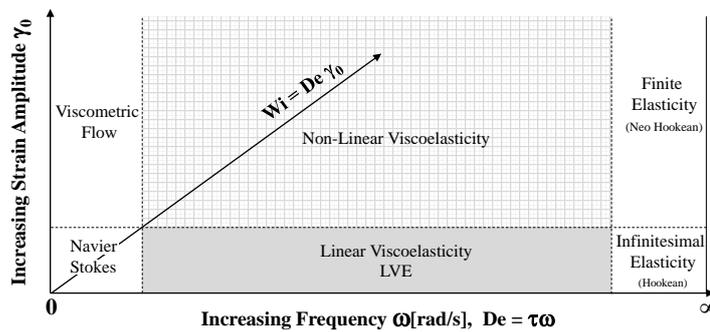


Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.3 Modelo Invariante

Os modelos viscoelásticos lineares sofrem de um sério problema, eles não são invariantes (YANG; LAM; ZHU, 2010). Isso significa que eles só podem ser usados para prever o escoamento do fluido no regime linear (ver figura 15), ou seja, podemos deformar os fluidos em baixas e altas velocidades, porém, estamos restritos a pequenas deformações.

Figura 15 – Diagrama de Pipkin que ilustra os modelos lineares e não lineares através de um escoamento oscilatório de cisalhamento.



Fonte: Ferras *et al.* (2018).

O modelo clássico de Maxwell (Eq. 4.40) pode ser melhorado para se tornar invariante. O modelo resultante é conhecido como o modelo Upper Convected Maxwell (UCM) tendo sido apresentado anteriormente. Este é dado por,

$$\sigma + \lambda \overset{\nabla}{\sigma} = \eta \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \tag{4.58}$$

onde

$$\overset{\nabla}{\sigma} = \left\{ \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \sigma - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \sigma - \sigma \cdot \nabla \mathbf{u} \right\} \quad (4.59)$$

é a derivada convectiva superior. Essa derivada permite que o modelo seja utilizado em grandes deformações. Este modelo envolvendo a derivada convectiva também pode ser obtido a partir do modelo integral (equação 2.15), substituindo o tensor taxa de deformação, por um tensor de deformação que permite a caracterização completa da deformação do material, ou seja, o tensor de Finger $B(t, t')$ (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

O novo modelo proposto neste trabalho (equação 4.44) não é invariante, e não podemos obter uma versão diferencial do modelo, como no caso clássico. Portanto, derivaremos uma nova formulação integral que é invariante e que generaliza a equação 4.44.

Lema 7. Uma forma invariante do modelo de Maxwell-ML pode ser dada por:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t -\frac{S_0 \Gamma(\beta)}{\alpha \lambda} \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) + (1-\beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) \right) (B(t, t') - I) dt' \quad (4.60)$$

onde o tensor identidade I é subtraído do tensor de Finger, $B(t, t')$, de modo que a deformação se torne zero quando o fluido está em repouso e sob nenhuma influência de forças externas.

Prova: O modelo Maxwell-ML é dado por

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t-t'}{\lambda} \right) \dot{\gamma}(t') dt' \quad (4.61)$$

onde $\dot{\gamma}(t')$ é o tensor taxa de deformação. Usaremos a integração por partes para obter uma nova variação do modelo (equação de Lodge) que faz uso do tensor de deformação infinitesimal $\gamma(t_{ref}, t)$ (uma medida da deformação no material no instante t , quando comparado com a deformação no instante de referência t'),

$$\gamma(t_{ref}, t') = \int_{t_{ref}}^{t'} \dot{\gamma}(t'') dt'' \quad (4.62)$$

Integrando por partes a equação 4.61, e considerando o estado de referência $t_{ref} = t$, obtemos,

$$S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t-t'}{\lambda} \right) \gamma(t, t') \Big|_{t'=-\infty}^{t'=t} - \int_{-\infty}^t \frac{dG(t-t')}{dt'} \gamma(t, t') dt'. \quad (4.63)$$

Tendo em conta que

$$\lim_{t' \rightarrow -\infty} S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t-t'}{\lambda} \right) = 0, \quad \gamma(t, t) = 0 \quad (4.64)$$

e $\gamma(t, t')$ é considerado finito, o primeiro termo na equação 4.63 vai para zero, e o modelo Maxwell-ML se torna:

$$\sigma(t) = - \int_{-\infty}^t m(t-t') \gamma(t, t') dt' \quad (4.65)$$

onde

$$m(t-t') = \frac{dG(t-t')}{dt'} = \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{\alpha \lambda} \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) + (1-\beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) \right) \quad (4.66)$$

é a função de memória. Como a deformação infinitesimal $\gamma(t, t')$ não é invariante, usaremos uma medida invariante de deformação. Podemos considerar o tensor de Finger $B(t, t')$ (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987), ou, podemos usar também o tensor $\gamma_{[0]} = I - B(t, t')$, onde, cada uma das suas componentes é dada por,

$$\gamma_{[0]ij} = \delta_{ij} - \sum_m \frac{\partial x_i}{\partial x'_m} \frac{\partial x_j}{\partial x'_m}. \quad (4.67)$$

onde x_i , $i = 1, \dots, m$ são as coordenadas de uma partícula no instante atual t e x'_i são as coordenadas da mesma partícula no instante passado t' .

A principal diferença entre os tensores $B(t, t')$ e $\gamma_{[0]}$ está em seus valores aquando da rotação do fluido como um corpo sólido. Quando nenhuma deformação ocorre, $B(t, t') = I$ enquanto $\gamma_{[0]} = \mathbf{0}$. Podemos então dizer que $\gamma_{[0]}$ representa a mudança relativa na forma enquanto $B(t, t')$ representa a forma diretamente. De notar que para pequenas deformações o tensor $\gamma_{[0]}$ se reduz a $\dot{\gamma}(t')$.

O modelo invariante de Maxwell-ML (ou modelo Lodge-ML) torna-se:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t - \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{\alpha \lambda} \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) + (1-\beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) \right) (B(t, t') - I) dt' \quad (4.68)$$

Assumindo $\alpha = \beta = 1$, integrando no tempo e usando a Regra de Leibnitz, o modelo invariante de Maxwell-ML torna-se o modelo UCM diferencial dado na Eq. 4.58.

4.2.4 Solução Analítica para Escoamentos Simples

4.2.4.1 Escoamento Simples de Cisalhamento

Vamos assumir o caso em que temos um campo de velocidades unidirecional dado por $u = \dot{\gamma}y$ (onde $\dot{\gamma}$ é uma constante). Temos então que o campo de velocidades e o tensor de Finger são escritos exatamente como:

$$\begin{cases} u = \dot{\gamma}y, \\ v = 0, \\ w = 0 \end{cases} \text{ e } \mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} 1 + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2 & \dot{\gamma}(t-t') & 0 \\ \dot{\gamma}(t-t') & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Os tensores de tensão são obtidos pela equação 4.68, onde surge uma integração de $-\infty$ até t . Para valores negativos de t' em $(-\infty, 0]$ o tensor de Finger assume o valor do tensor em $t'_0 = 0$. Ou seja, sempre que um tempo de referência t' é negativo, vamos assumir o campo de deformação do momento $t' = 0$ (de realçar que também poderíamos assumir um campo de deformações nulo para este intervalo).

Temos então que:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t') (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) dt' + \int_0^t m(t-t') (1 + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2) dt' \\ \sigma_{xy} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t') \dot{\gamma} t dt' + \int_0^t m(t-t') \dot{\gamma} (t-t') dt' \\ \sigma_{yy} &= \int_{-\infty}^t m(t-t') dt'\end{aligned}$$

Vamos calcular primeiro a expressão de σ_{yy} :

$$\sigma_{yy} = \int_{-\infty}^t m(t-t') dt' = \int_{-\infty}^t \frac{dG(t-t')}{dt'} dt' = G(t-t') \Big|_{-\infty}^t$$

Pelo fato descrito em (4.64) então

$$\sigma_{yy} = G(0) = S_0. \quad (4.69)$$

Com esse resultado, procedemos a simplificar σ_{xx} :

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t') (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) dt' + \int_0^t m(t-t') (1 + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2) dt' \\ &= \int_{-\infty}^0 m(t-t') (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) dt' + \int_0^t m(t-t') (1 + \dot{\gamma}^2 t^2 - 2\dot{\gamma}^2 t t' + \dot{\gamma}^2 (t')^2) dt' \\ &= (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) \int_{-\infty}^t m(t-t') dt' + \dot{\gamma}^2 \int_0^t m(t-t') (-2t t' + (t')^2) dt'\end{aligned}$$

pela equação (4.69) temos que

$$\sigma_{xx} = (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) S_0 + \dot{\gamma}^2 \int_0^t m(t-t') (-2t t' + (t')^2) dt' \quad (4.70)$$

Aplicando integração por partes na integral de (4.70) considerando $u = (t')^2 - 2t t'$ e $dv = m(t-t')dt' = \frac{dG(t-t')}{dt'}dt'$, obtemos

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) S_0 + \dot{\gamma}^2 \left[-t^2 S_0 - 2 \int_0^t (t' - t) G(t - t') dt' \right] \\ &= S_0 - 2\dot{\gamma}^2 \int_0^t (t' - t) G(t - t') dt'\end{aligned}$$

assim,

$$\sigma_{xx} = S_0 - 2S_0\Gamma(\beta)\dot{\gamma}^2 \int_0^t (t' - t) E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t' - t}{\lambda} \right) dt'. \quad (4.71)$$

De forma similar, calculamos σ_{xy} :

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t') \dot{\gamma} t dt' + \int_0^t m(t-t') \dot{\gamma} (t-t') dt' \\ &= \int_{-\infty}^0 m(t-t') \dot{\gamma} t dt' + \int_0^t m(t-t') \dot{\gamma} t dt' - \int_0^t m(t-t') \dot{\gamma} t' dt' \\ &= \dot{\gamma} t \int_{-\infty}^t m(t-t') dt' - \int_0^t m(t-t') \dot{\gamma} t' dt'\end{aligned}$$

Por (4.69) o anterior reduz-se a,

$$\sigma_{xy} = \dot{\gamma} t S_0 - \dot{\gamma} \int_0^t m(t-t') t' dt'.$$

Novamente, aplicando integração por partes na integral, usando $u = t'$ e $dv = m(t-t')dt'$ temos

$$\sigma_{xy} = \dot{\gamma} t S_0 - \dot{\gamma} \left[t S_0 - S_0 \Gamma(\beta) \int_0^t E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t' - t}{\lambda} \right) \right]$$

assim obtemos,

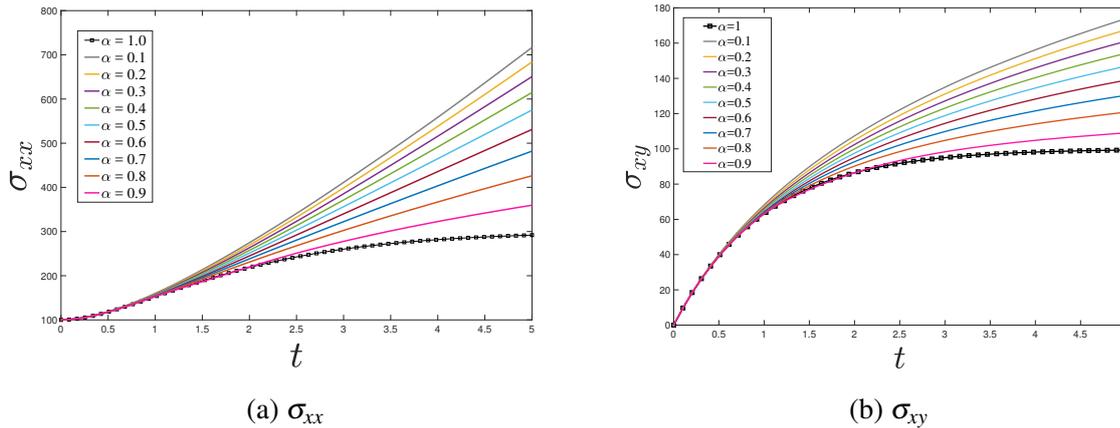
$$\sigma_{xy} = \dot{\gamma} S_0 \Gamma(\beta) \int_0^t E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t' - t}{\lambda} \right) \quad (4.72)$$

Para o caso particular em que $\alpha = \beta = 1$, recuperamos das equações (4.69), (4.71) e (4.72) a solução para o modelo UCM,

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= S_0 e^{-\frac{t}{\lambda}} (1 + \dot{\gamma}^2 t^2) + S_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{\lambda}} \right) + S_0 \dot{\gamma}^2 \left[2\lambda^2 - e^{-\frac{t}{\lambda}} (t^2 + 2\lambda t + 2\lambda^2) \right] \\ \sigma_{xy} &= S_0 \dot{\gamma} \lambda \left(1 - e^{-\frac{t}{\lambda}} \right), \\ \sigma_{yy} &= S_0\end{aligned}$$

Vamos então comparar o comportamento das tensões do modelo Maxwell-ML com o modelo clássico UCM ($\alpha = \beta = 1$). Não devemos esquecer a restrição $0 < \alpha \leq 1$ e $\beta \geq \alpha$. Os dados utilizados para gerar a figura 16 foram os seguintes: $\dot{\gamma} = 1$ 1/s, $S_0 = 100$ Pa e $\lambda = 1$ s, considerou-se ainda $t \in [0, 5]$.

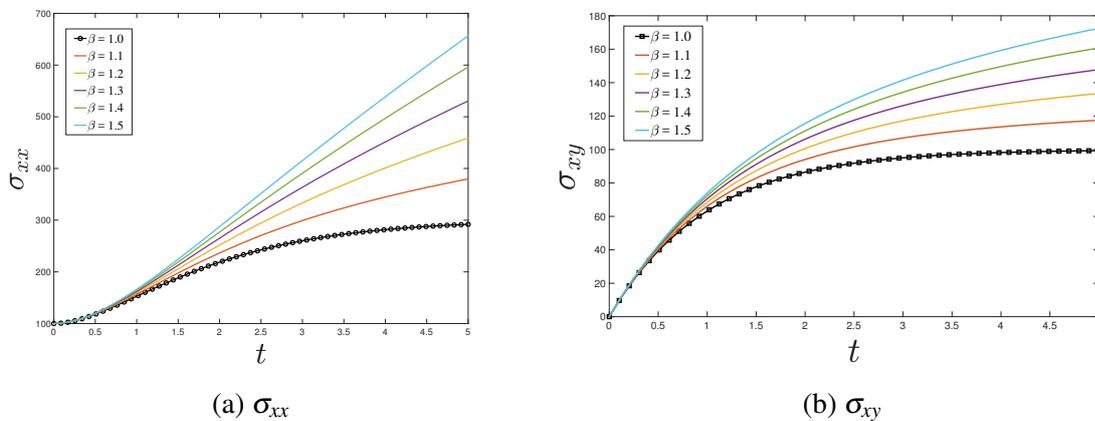
Figura 16 – Variação de α (com $\beta = 1.0$ fixo) da tensão normal σ_{xx} (eq. (4.71)) e da tensão de cisalhamento σ_{xy} (eq. (4.72)) num escoamento de cisalhamento.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Como seria de esperar, o comportamento da tensão normal σ_{xx} e da tensão de cisalhamento σ_{xy} num escoamento de cisalhamento varia para diferentes valores de α e β . Tendo em conta que o parâmetro α tem uma maior influência no comportamento do modelo, na figura 16 é apresentada a variação das tensões normais e de cisalhamento, para diferentes valores de $\alpha \in [0, 1]$ assumindo $\beta = 1$.

Figura 17 – Variação de β (com $\alpha = 1.0$ fixo) nas expressões tensão normal σ_{xx} (eq. (4.71)) e da tensão de cisalhamento σ_{xy} (eq. (4.72)) num escoamento de cisalhamento.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos ver que o crescimento mais controlado, obtido para o modelo clássico UCM,

sofre uma grande alteração à medida que o valor de α baixa. Baixos valores de α levam a uma função *super exponencial*, que resulta num crescimento mais acentuado das tensões. Este tipo de crescimento pode resultar em problemas numéricos, que serão mais acentuados para tempos de simulação elevados e para baixos valores de α .

Podemos também interpretar estes resultados, olhando para α e β como parâmetros que oferecem uma capacidade adicional de representar o comportamento de sólidos-viscoelásticos (JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014).

4.2.4.2 Escoamento Extensional Uniaxial:

Neste caso temos o seguinte perfil de velocidade e campo do tensor de Finger ($\dot{\epsilon}$ é uma constante que não varia no tempo - taxa elongacional):

$$\begin{cases} u = \dot{\epsilon}x, \\ v = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}y, \\ w = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}z \end{cases} \text{ e } \mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\dot{\epsilon}(t-t')} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\dot{\epsilon}(t-t')} \end{pmatrix}$$

Temos então que as tensões podem ser obtidas através da seguinte integração:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}t} dt' + \int_0^t m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \\ \sigma_{yy} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t')e^{-\dot{\epsilon}t} dt' + \int_0^t m(t-t')e^{-\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \end{aligned}$$

Podemos desenvolver as integrais da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}t} dt' + \int_0^t m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \\ &= e^{2\dot{\epsilon}t} \int_{-\infty}^0 m(t-t') dt' + \int_0^t m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \\ &= e^{2\dot{\epsilon}t} G(t-t') \Big|_{-\infty}^0 + \int_0^t m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \\ &= e^{2\dot{\epsilon}t} G(t) + \int_0^t m(t-t')e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} dt', \end{aligned}$$

Integrando por partes a última integral, usando $u = e^{2\dot{\epsilon}(t-t')}$ e $dv = m(t-t')dt'$ obtemos

$$\sigma_{xx} = e^{2\dot{\epsilon}t} G(t) + \left[S_0 - e^{2\dot{\epsilon}t} G(t) + 2\dot{\epsilon}S_0\Gamma(\beta) \int_0^t e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) dt' \right]$$

então

$$\sigma_{xx} = S_0 + 2\dot{\epsilon}S_0\Gamma(\beta) \int_0^t e^{2\dot{\epsilon}(t-t')} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) dt'. \quad (4.73)$$

Para o caso de σ_{yy} , faremos:

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} &= \int_{-\infty}^0 m(t-t')e^{-\dot{\epsilon}t} dt' + \int_0^t m(t-t')e^{-\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \\ &= e^{-\dot{\epsilon}t} \int_{-\infty}^0 m(t-t') dt' + \int_0^t m(t-t')e^{-\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \\ &= e^{-\dot{\epsilon}t} G(t) + \int_0^t m(t-t')e^{-\dot{\epsilon}(t-t')} dt' \end{aligned}$$

Fazendo integração por partes, $u = e^{\dot{\epsilon}(t-t')}$ e $dv = m(t-t')dt'$, obtemos

$$\sigma_{yy} = e^{-\dot{\epsilon}t} G(t) + \left[S_0 - e^{-\dot{\epsilon}t} G(t) - \dot{\epsilon}S_0\Gamma(\beta) \int_0^t e^{\dot{\epsilon}(t-t')} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) dt' \right],$$

assim,

$$\sigma_{yy} = S_0 - \dot{\epsilon}S_0\Gamma(\beta) \int_0^t e^{\dot{\epsilon}(t-t')} E_{\alpha,\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) dt' \quad (4.74)$$

Para o caso particular em que $\alpha = \beta = 1$, as equações (4.73) e (4.74) recuperam a solução para o modelo UCM,

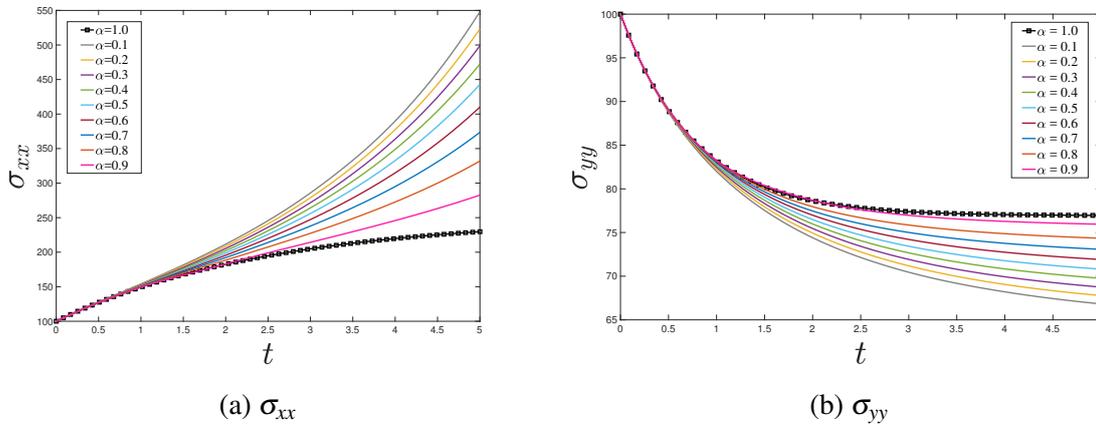
$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= S_0 e^{\left(\frac{-t(1-2\lambda\dot{\epsilon})}{\lambda}\right)} \left[1 - \frac{1}{1-2\lambda\dot{\epsilon}} \right] + \frac{S_0}{1-2\lambda\dot{\epsilon}} \\ \sigma_{yy} &= S_0 e^{\left(\frac{-t(1+\lambda\dot{\epsilon})}{\lambda}\right)} \left[1 - \frac{1}{1+\lambda\dot{\epsilon}} \right] + \frac{S_0}{1+\lambda\dot{\epsilon}} \end{aligned}$$

De realçar a singularidade obtida para $\lambda\dot{\epsilon} = \frac{1}{2}$.

Vamos então comparar o comportamento das tensões do modelo Maxwell-ML com o modelo clássico UCM ($\alpha = \beta = 1$). Não devemos esquecer a restrição $0 < \alpha \leq 1$ e $\beta \geq \alpha$. Os dados utilizados para gerar a figura 18 foram os seguintes: $\dot{\epsilon} = 0.3$ 1/s, $S_0 = 100$ Pa e $\lambda = 1$ s, considerou-se ainda $t \in [0, 5]$.

No escoamento elongacional temos mais uma vez um crescimento das tensões normais para valores de α menos que 1. No entanto, as tensões de cisalhamento diminuem com α . Isto acontece pois as tensões normais são dominantes neste tipo de escoamento levando a um decréscimo da contribuição por parte das tensões de cisalhamento devido à distribuição da tensão total existente no escoamento.

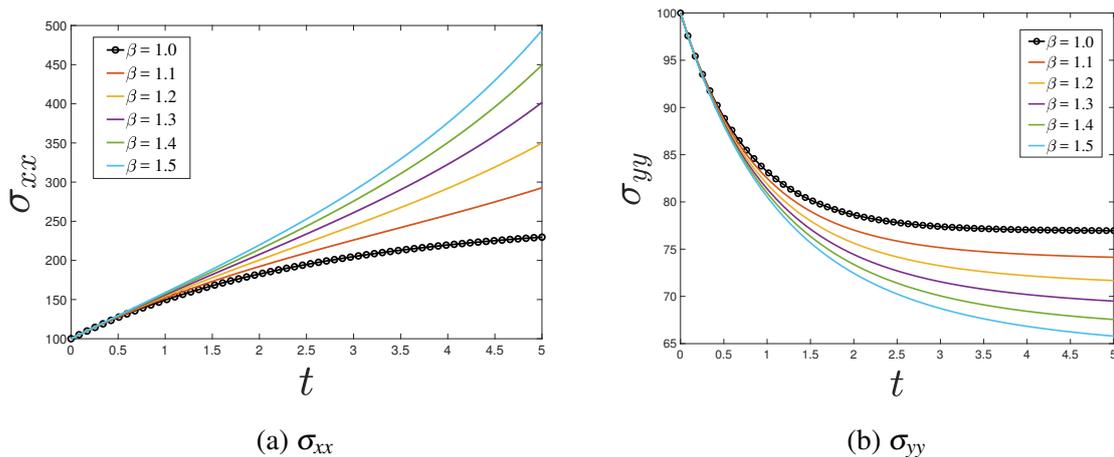
Figura 18 – Variação de α (com $\beta = 1.0$ fixo) nas expressões das tensões normais σ_{xx} (eq. (4.73)) e σ_{yy} (eq. (4.74)) num escoamento elongacional.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Relativamente à singularidade, e tendo em conta que uma expressão totalmente analítica para as tensões é impossível de obter usando a função Mittag-Leffler (a solução poderia ser obtida recorrendo a uma expansão em série da função Mittag-Leffler, mas, a sua interpretação e compreensão seria ainda mais difícil do que usando integrais), podemos dizer que o uso da nova função memória atenua a singularidade, mas, não a remove.

Figura 19 – Variação de β (com $\alpha = 1.0$ fixo) nas expressões das tensões normais σ_{xx} (eq. (4.73)) e σ_{yy} (eq. (4.74)) num escoamento elongacional.



Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.5 Conclusões

Desenvolvemos um modelo viscoelástico linear do tipo Maxwell usando a função Mittag-Leffler no módulo de relaxação. O modelo possui 4 parâmetros e permite um melhor ajuste ao

módulo de armazenamento e módulo de perda de sistemas poliméricos (mesmo utilizando apenas 3 parâmetros). O modelo é linear e foi aprimorado para se tornar invariante usando uma medida invariante de deformação como o tensor Finger $B(t, t')$ (em vez da deformação infinitesimal $\gamma(t, t')$). Foram desenvolvidas novas soluções semi-analíticas e feita uma comparação do seu comportamento com o comportamento do modelo de referência UCM, para o caso de um escoamento cisalhante e um escoamento extensional. O modelo invariante será implementado no código numérico HiG-Flow (SOUSA *et al.*, 2019; CASTELO; AFONSO; BEZERRA, 2021) no capítulo seguinte.

4.3 Modelo K-BKZ Generalizado (gK-BKZ)

Nesta secção vamos introduzir uma combinação entre o modelo Maxwell-ML apresentado na secção anterior e o modelo K-BKZ na sua versão PSM. Ou seja, vamos criar um modelo Maxwell-ML invariante usando a estrutura de suporte do modelo K-BKZ-PSM para modelos não-lineares.

4.3.1 Dedução do Modelo

O modelo Maxwell-ML apresentado na secção anterior (equação 4.68) apresenta algumas limitações.

Embora seja um modelo invariante, o modelo Lodge falha em prever um coeficiente de segunda tensão normal diferente de zero, e a viscosidade e a primeira diferença de tensão normal são ambas constantes. Não permitindo, por exemplo, prever o efeito de *shear thinning*, em que a viscosidade varia com a deformação.

Neste trabalho, considera-se o modelo constitutivo integral KBKZ-PSM. Neste modelo, o tensor de tensões é definido por

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t m(t-t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t) dt' \quad (4.75)$$

onde m é a função memória definida na secção anterior (eq. (4.66)),

$$m(t-t') = \frac{dG(t-t')}{dt'} = \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{\alpha \lambda} \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) + (1-\beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{t'-t}{\lambda} \right) \right)$$

e a expressão

$$H(I_1, I_2) = \frac{a}{a-3+bI_1+(1-b)I_2}$$

é a função de decaimento de Papanastasiou-Scriven-Macosko e $\mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t)$ é o tensor de *Finger*. Nessa função, $I_1 = \text{tr}[\mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t)]$ e $I_2 = \frac{1}{2} \left((I_1)^2 - \text{tr}[\mathbf{B}_{t'}^2(\mathbf{x}, t)] \right)$, são o primeiro e o segundo

invariantes de $\mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t)$, respectivamente. Os parâmetros S_0 , λ , a e b são definidos ajustando as propriedades reológicas específicas de cada fluido.

O tensor de Finger tem a sua própria equação de transporte, que é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}_{t'_j}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{B}_{t'_j}(\mathbf{x}, t) = [\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)]^T \cdot \mathbf{B}_{t'_j}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{B}_{t'_j}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (4.76)$$

De notar que foi usada uma notação ligeiramente diferente para representar os vectores velocidade, o tensor das tensões e o tensor de Finger. Isto deve-se ao fato de que na próxima subsecção vamos deduzir uma solução analítica onde estará bem explícita a dependência desta quantidades no espaço \mathbf{x} e no tempo t .

4.3.2 Solução Analítica para o escoamento Entre Placas Paralelas

Nesta subsecção é apresentada as equações governantes, na forma adimensional, de escoamento de fluidos viscoelásticos incompressíveis governados pelo modelo gK-BKZ.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.77)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \Phi + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}. \quad (4.78)$$

Na equação (4.78), Φ é um tensor não Newtoniano que é derivado do tensor de tensões extra σ pela seguinte equação:

$$\Phi = \sigma - \frac{1}{Re} \dot{\gamma}, \quad \text{onde } \dot{\gamma} = \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T. \quad (4.79)$$

O sistema de equações é completado pelas equações (4.75) e (4.76).

Nas equações anteriores, $Re = \frac{\rho_0 U L}{\eta_0}$ é o número de Reynolds, $Fr = \frac{U}{\sqrt{Lg}}$ é o número de Froude e $Wi = \lambda_{ref} \frac{U}{L}$ é o número de Weissenberg; U é a escala de velocidade e L é o tamanho característicos, g e ρ_0 são a aceleração da gravidade e a densidade do fluido respectivamente. A viscosidade é definida como $\eta_0 = S_0 \lambda_{ref}$ e λ_{ref} é o tempo médio de relaxamento.

A adimensionalização das equações foi feita como segue, onde as variáveis dimensionais são sobrescritas por uma barra.

$$\bar{\mathbf{x}} = L\mathbf{x}, \quad \bar{t} = \frac{L}{U}t, \quad \bar{\mathbf{u}} = U\mathbf{u}, \quad \bar{p} = \rho_0 U^2 p, \quad \bar{\sigma} = \rho_0 U^2 \sigma, \quad \bar{\lambda}_k = \lambda_{ref} \lambda_k, \quad \bar{S}_0 = \rho_0 U^2 S_0.$$

As equações (4.75)-(4.78) são resolvidas em um sistema cartesiano bidimensional onde $p = p(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{u} = (u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t))^T$ e

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \Phi_{xx} & \Phi_{xy} \\ \Phi_{xy} & \Phi_{yy} \end{bmatrix},$$

$$\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}'(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} B'_{t'_{xx}} & B'_{t'_{xy}} & 0 \\ B'_{t'_{xy}} & B'_{t'_{yy}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Note que, para calcular o tensor total em 2D, consideramos o tensor de Finger tridimensional. Esta definição leva em consideração a ausência de deformação na terceira coordenada ($B'_{t'_{zz}}$ em escoamentos tridimensionais), além de garantir a propriedade de determinante diferente de zero para o tensor de Finger.

Considerando escoamentos cartesianos bidimensionais as equações governantes (4.77)-(4.79) são discretizadas como segue (BERTOCO, 2016)

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (u^2)}{\partial x} + \frac{\partial (uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial \Phi_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi_{xy}}{\partial y} + \frac{1}{Fr^2} g_x,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial (uv)}{\partial x} + \frac{\partial (v^2)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial \Phi_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi_{yy}}{\partial y} + \frac{1}{Fr^2} g_y,$$

nas quais (ver equação (4.79))

$$\Phi_{xx} = \sigma_{xx} - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)$$

$$\Phi_{xy} = \sigma_{xy} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right),$$

$$\Phi_{yy} = \sigma_{yy} - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)$$

O tensor $\boldsymbol{\sigma}$ é escrito como

$$\sigma_{xx} = \int_{-\infty}^t m(t-t') \frac{a}{a-3+bI_1+(1-b)I_2} B'_{t'_{xx}} dt'$$

$$\sigma_{xy} = \int_{-\infty}^t m(t-t') \frac{a}{a-3+bI_1+(1-b)I_2} B'_{t'_{xy}} dt'$$

$$\sigma_{yy} = \int_{-\infty}^t m(t-t') \frac{a}{a-3+bI_1+(1-b)I_2} B'_{t'_{yy}} dt'$$

sendo

$$m(t-t') = \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{Wi \alpha} \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{t'-t}{Wi} \right) + (1-\beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{t'-t}{Wi} \right) \right)$$

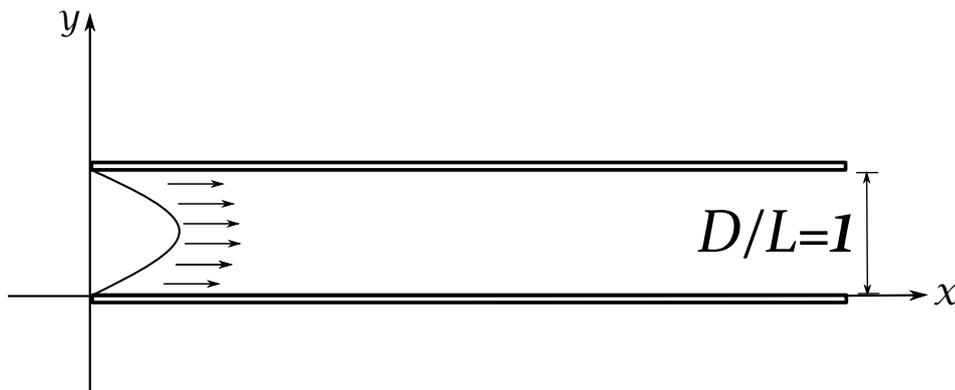
As componentes do tensor de Finger são calculadas pelas equações (ver (4.76))

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} B_{t'_{xx}} &= -\frac{\partial}{\partial x} (u B_{t'_{xx}}) - \frac{\partial}{\partial y} (v B_{t'_{xx}}) + 2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} B_{t'_{xx}} + \frac{\partial u}{\partial y} B_{t'_{xy}} \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} B_{t'_{xy}} &= -\frac{\partial}{\partial x} (u B_{t'_{xy}}) - \frac{\partial}{\partial y} (v B_{t'_{xy}}) + \frac{\partial u}{\partial y} B_{t'_{yy}} + \frac{\partial v}{\partial x} B_{t'_{xx}} \\ \frac{\partial}{\partial t} B_{t'_{yy}} &= -\frac{\partial}{\partial x} (u B_{t'_{yy}}) - \frac{\partial}{\partial y} (v B_{t'_{yy}}) + 2 \left[\frac{\partial v}{\partial x} B_{t'_{xy}} + \frac{\partial v}{\partial y} B_{t'_{yy}} \right]\end{aligned}$$

4.3.3 Solução Semi-Analítica

A continuação apresenta-se a dedução da solução semi-analítica onde considera-se um escoamento desenvolvido em um canal com diâmetro $D/L = 1$ de um fluido KBKZ com 1-módulo de relaxamento. A origem do sistema de coordenadas é localizada na entrada inferior do canal.

Figura 20 – Geometria do canal usado para a dedução.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Procura-se soluções para as velocidades, pressão, e tensores da forma $u = u(y)$, $v(y) = 0$, $p = p(x, y)$, $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}(y)$, $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(y)$, $\sigma_{yy} = \sigma_{yy}(y)$, para $y \in [0, 1]$.

As componentes do tensor de Finger são definidas para escoamentos totalmente cisalhantes, por isso pode ser usada a seguinte expressão:

$$\mathbf{B}_{t'}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} 1 + \dot{\gamma}^2(t - t')^2 & \dot{\gamma}(t - t') & 0 \\ \dot{\gamma}(t - t') & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

resultando nos seguintes invariantes I_1 and I_2 necessários para o cálculo da função de decaimento $H(I_1, I_2)$ definida na equação de Papanastasiou.

$$I_1 = I_2 = 3 + \dot{\gamma}^2 (t - t')^2$$

em que $\dot{\gamma} = \frac{du}{dy}$.

A equação de conservação de quantidade de movimento reduz-se a:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0 \quad (4.80)$$

$$-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0 \quad (4.81)$$

e as componentes do tensor de tensões extra são definidas como

$$\sigma_{xy} = \int_{-\infty}^t m(t-t') \frac{\dot{\gamma}(t-t')}{a + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2} dt' \quad (4.82)$$

$$\sigma_{xx} = \int_{-\infty}^t m(t-t') \frac{[1 + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2]}{a + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2} dt', \quad (4.83)$$

$$\sigma_{yy} = \int_{-\infty}^t m(t-t') \frac{1}{a + \dot{\gamma}^2 (t-t')^2} dt' \quad (4.84)$$

com

$$m(t-t') = \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{Wi \alpha} \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{t'-t}{Wi} \right) + (1-\beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{t'-t}{Wi} \right) \right)$$

A equação (4.81) mostra que

$$p(x, y) = \sigma_{yy}(y) + F(x). \quad (4.85)$$

e nesse caso, a equação (4.80) pode ser escrita como

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = F'(x) \quad (4.86)$$

e pode-se argumentar que o lado esquerdo da equação (4.86) é função apenas de y . Consequentemente, F' deve ser uma constante que denota-se por

$$C = \frac{\partial p}{\partial x}$$

Assim,

$$\sigma_{xy}(y) = Cy + h(x)$$

e notando que $\sigma_{xy}(1/2) = 0$, por simetria, tem-se $h(x) = -\frac{1}{2}C$ e consequentemente

$$\sigma_{xy}(y) = (y - 1/2)C. \quad (4.87)$$

Caso em que $\alpha = \beta = 1$:

Daqui em diante trabalharemos com o caso particular $\alpha = 1$ e $\beta = 1$, onde seguimos o exposto em (TOMÉ *et al.*, 2016). O caso mais geral será também descrito mais à frente. Porém, para uma descrição mais didática do desenvolvimento da solução semi-analítica, o caso particular será apresentado primeiro.

Para o caso em que $\alpha = \beta = 1$ a função memória é dada por:

$$m(t-t') = \frac{S_0}{Wi} E_{1,1} \left(\frac{t'-t}{Wi} \right) = \frac{S_0}{Wi} e^{-(t-t')/Wi}$$

Logo, a equação (4.82) pode ser escrita como

$$(y - 1/2)C = \frac{S_0 a}{Wi} \int_{-\infty}^t e^{-(t-t')/Wi} \frac{\dot{\gamma}(t-t')}{a + \dot{\gamma}^2(t-t')^2} dt'$$

Fazendo a mudança de variáveis $s = t - t'$, obtém-se

$$(y - 1/2)C = \frac{S_0 a}{Wi} \int_0^{\infty} e^{-s/Wi} \frac{\dot{\gamma}s}{a + \dot{\gamma}^2 s^2} ds \quad (4.88)$$

Agora, definindo $s = (a^{1/2}/\dot{\gamma}) \mathcal{T}$ segue que

$$(y - 1/2)C = K \int_0^{\infty} e^{-\phi \mathcal{T}} \frac{\mathcal{T}}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} \quad (4.89)$$

onde

$$\phi = \frac{a^{1/2}}{\dot{\gamma}Wi}, \quad K = \frac{S_0 a}{\dot{\gamma}Wi} \quad (4.90)$$

A integral na equação (4.89) pode ser resolvida, por exemplo, pelo software Mathematica, que fornece

$$\int_0^{\mathcal{T}_{\infty}} e^{-\phi \mathcal{T}} \frac{\mathcal{T}}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} = \frac{1}{2} e^{-i\phi} \left(-\text{Ei}[i\phi] + \text{Ei} \left[i\phi - \frac{\mathcal{T}_{\infty}}{Wi} \right] \right) + e^{2i\phi} \left(-\text{Ei}[-i\phi] + \text{Ei} \left[-i\phi - \frac{\mathcal{T}_{\infty}}{Wi} \right] \right) \quad (4.91)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, e $Ei(z)$ denota a integral exponencial dada por

$$Ei(z) = \int_1^{\infty} s^{-1} e^{-sz} ds$$

Nesse caso, \mathcal{T}_{∞} é definido suficientemente grande, para ser assumido como infinito. Nota-se que $Ei(i\phi)$ é o complexo conjugado de $Ei(-i\phi)$, assim o resultado em (4.91) será real, o que é um valor esperado (ver eq. (4.88)). Essa integral pode ser resolvida por um método de quadratura de alta ordem.

Tomando as condições de contorno na entrada do canal, onde a velocidade $u^{in}(y)$ é definida por

$$u^{in}(y) = 1 - 4 \left(y - \frac{1}{2} \right)^2, \quad 0 \leq y \leq 1$$

obtemos

$$\int_0^1 u^{in}(y) dy = \frac{2}{3}$$

e por conservação de massa, a solução $u(y)$, deve também satisfazer

$$\int_0^1 u(y) dy = \frac{2}{3} \quad (4.92)$$

Integrando por partes a equação (4.92) obtém-se

$$\int_0^1 y \dot{\gamma}(y) dy + \frac{2}{3} = 0 \quad (4.93)$$

Para obter as soluções $u(y)$, $p(x, y)$, $\sigma_{xy}(y)$, $\sigma_{xx}(y)$ e $\sigma_{yy}(y)$, primeiramente, calcula-se $\dot{\gamma}$ e C pelo seguinte procedimento:

P1 - Estime um valor para C ; que pode ser tomado inicialmente como sendo o correspondente valor Newtoniano;

P2 - Discretize o intervalo $(\frac{1}{2}, 1]$, correspondente à metade do canal, em N pontos, $y_j = \frac{1}{2} + j * \frac{1}{2N}$, $j = 1, 2, \dots, N$.

P3 - Calcule o perfil em escoamento totalmente cisalhante, $\dot{\gamma}_j$, encontrando os zeros da função (4.88), $j = 1, 2, \dots, N$;

P4 - Verifique se $\dot{\gamma}_j$ satisfaz a equação (4.93);

P5 - Não sendo satisfeita a equação (4.93), forneça outro valor para C e refaça os passos P3 e P4 Após obter os valores para C e $\dot{\gamma}(y_j)$ usando os passos **P1** – **P5**, o valor de $\sigma_{xy}(y_j)$ é

obtido pela equação (4.87). Os valores de $\sigma_{xx}(y_j)$ e $\sigma_{yy}(y_j)$ podem ser obtidos pelas equações (4.83) e (4.84), assumindo a mudança de variáveis $s = t - t'$

$$\sigma_{xx}(y_j) = \frac{S_0 a}{Wi} \int_0^\infty e^{-s/Wi} \frac{1 + \dot{\gamma}(y_j)^2 s^2}{a + \dot{\gamma}(y_j)^2 s^2} ds$$

$$\sigma_{yy}(y_j) = \frac{S_0 a}{Wi} \int_0^\infty e^{-s/Wi} \frac{1}{a + \dot{\gamma}(y_j)^2 s^2} ds$$

e tomando $s = a^{1/2} \mathcal{T} / \dot{\gamma}(y_j)$, essas integrais se simplificam como

$$\sigma_{xx}(y_j) = K \int_0^\infty e^{-\phi \mathcal{T}} \frac{1 + a \mathcal{T}^2}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} \quad (4.94)$$

$$\sigma_{yy}(y_j) = K \int_0^\infty e^{-\phi \mathcal{T}} \frac{1}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} \quad (4.95)$$

onde K e ϕ são dados pela equação (4.98). As integrais em (4.94) e (4.95) podem ser resolvidas, resultando em

$$\int_0^{\mathcal{T}_\infty} e^{-\phi \mathcal{T}} \frac{1 + a \mathcal{T}^2}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} = -\frac{1}{2} e^{-i\phi - \frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi}} \left(-\frac{2e^{i\phi} \left(-1 + e^{\frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi}} \right) a}{\phi} + ie^{\frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi}} (-1 + a) \right. \\ \left. \left(\text{Ei}[i\phi] - \text{Ei} \left[i\phi - \frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi} \right] + e^{2i\phi} \left(-\text{Ei}[-i\phi] + \text{Ei} \left[-i\phi - \frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi} \right] \right) \right) \right) \\ \int_0^{\mathcal{T}_\infty} e^{-\phi \mathcal{T}} \frac{1}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} = -\frac{1}{2} ie^{-i\phi} \left(\text{Ei}[i\phi] - \text{Ei} \left[i\phi - \frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi} \right] \right. \\ \left. + e^{2i\phi} \left(-\text{Ei}[-i\phi] + \text{Ei} \left[-i\phi - \frac{\mathcal{T}_\infty}{Wi} \right] \right) \right).$$

Caso em que $\alpha \neq 1$ ou $\beta \neq 1$:

Para este caso, a função memória é mais geral, logo, iremos envolver mais ferramentas numéricas quando comparado com o caso particular apresentado previamente.

A função memória é dada por:

$$m(t - t') = \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{Wi \alpha} \left(E_{\alpha, \alpha + \beta - 1} \left(\frac{t' - t}{Wi} \right) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha + \beta} \left(\frac{t' - t}{Wi} \right) \right).$$

Logo, a equação (4.82) pode ser escrita como

$$(y - 1/2)C = \frac{S_0 \Gamma(\beta) a}{\alpha Wi} \int_{-\infty}^t \left(E_{\alpha, \alpha + \beta - 1} \left(\frac{t' - t}{Wi} \right) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha + \beta} \left(\frac{t' - t}{Wi} \right) \right) \frac{\dot{\gamma}(t - t')}{a + \dot{\gamma}^2(t - t')^2} dt'$$

Fazendo a mudança de variáveis $s = t - t'$, obtém-se

$$(y - 1/2)C = \frac{S_0\Gamma(\beta)a}{\alpha Wi} \int_0^\infty \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{-s}{Wi} \right) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{-s}{Wi} \right) \right) \frac{\dot{\gamma}s}{a + \dot{\gamma}^2 s^2} ds \quad (4.96)$$

Agora, definindo $s = (a^{1/2}/\dot{\gamma}) \mathcal{T}$ segue que

$$(y - 1/2)C = K \int_0^\infty (E_{\alpha, \alpha+\beta-1}(-\phi \mathcal{T}) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha+\beta}(-\phi \mathcal{T})) \frac{\mathcal{T}}{1 + \mathcal{T}^2} d\mathcal{T} \quad (4.97)$$

onde

$$\phi = \frac{a^{1/2}}{\dot{\gamma}Wi}, \quad K = \frac{S_0\Gamma(\beta)a}{\dot{\gamma}\alpha Wi}. \quad (4.98)$$

A integral na equação (4.97) pode ser resolvida numericamente por um método de quadratura de alta ordem.

Tomando as condições de contorno na entrada do canal, onde a velocidade $u^{in}(y)$ é definida por

$$u^{in}(y) = 1 - 4 \left(y - \frac{1}{2} \right)^2, \quad 0 \leq y \leq 1$$

obtemos

$$\int_0^1 u^{in}(y) dy = \frac{2}{3}$$

e por conservação de massa, a solução $u(y)$, deve também satisfazer

$$\int_0^1 u(y) dy = \frac{2}{3} \quad (4.99)$$

Integrando por partes a equação (4.99) obtém-se

$$\int_0^1 y \dot{\gamma}(y) dy + \frac{2}{3} = 0 \quad (4.100)$$

Para obter as soluções $u(y)$, $p(x, y)$, $\sigma_{xy}(y)$, $\sigma_{xx}(y)$ e $\sigma_{yy}(y)$, primeiramente, calcula-se $\dot{\gamma}$ e C pelo seguinte procedimento:

P1 - Estime um valor para C ; que pode ser tomado inicialmente como sendo o correspondente valor Newtoniano;

P2 - Discretize o intervalo $(\frac{1}{2}, 1]$, correspondente à metade do canal, em N pontos, $y_j = \frac{1}{2} + j * \frac{1}{2N}$, $j = 1, 2, \dots, N$.

P3 - Calcule o perfil em escoamento totalmente cisalhante, $\dot{\gamma}_j$, encontrando os zeros da função (4.96), $j = 1, 2, \dots, N$;

P4 - Verifique se $\dot{\gamma}_j$ satisfaz a equação (4.100);

P5 - Não sendo satisfeita a equação (4.100), forneça outro valor para C e refaça os passos P3 e P4 Após obter os valores para C e $\dot{\gamma}(y_j)$ usando os passos **P1** – **P5**, o valor de $\sigma_{xy}(y_j)$ é obtido pela equação (4.87). Os valores de $\sigma_{xx}(y_j)$ e $\sigma_{yy}(y_j)$ podem ser obtidos pelas equações (4.83) e (4.84), assumindo a mudança de variáveis $s = t - t'$ e tomando $s = a^{1/2} \mathcal{T} / \dot{\gamma}(y_j)$, essas integrais se simplificam como

$$\sigma_{xx}(y_j) = K \int_0^\infty \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{-s}{\bar{w}_i} \right) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{-s}{\bar{w}_i} \right) \right) \frac{1+a\mathcal{T}^2}{1+\mathcal{T}^2} d\mathcal{T} \quad (4.101)$$

$$\sigma_{yy}(y_j) = K \int_0^\infty \left(E_{\alpha, \alpha+\beta-1} \left(\frac{-s}{\bar{w}_i} \right) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha+\beta} \left(\frac{-s}{\bar{w}_i} \right) \right) \frac{1}{1+\mathcal{T}^2} d\mathcal{T} \quad (4.102)$$

onde K e ϕ são dados pela equação (4.98). As integrais em (4.101) e (4.102) podem ser resolvidas numericamente.

4.3.4 Conclusões

Desenvolvemos um modelo viscoelástico integral não-linear usando a função Mittag-Leffler no módulo de relaxação. O modelo é baseado na formulação do modelo K-BKZ-PSM, sendo designado por gK-BKZ.

O modelo é invariante, e faz uso do tensor Finger $B(t, t')$ juntamente com a função de decaimento de Papanastasiou-Scriven-Macosko.

Foram desenvolvidas novas soluções semi-analíticas para o escoamento entre placas paralelas.

O modelo invariante será implementado no código numérico HiG-Flow (SOUSA *et al.*, 2019; CASTELO; AFONSO; BEZERRA, 2021) e essa implementação será descrita no capítulo seguinte.

IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DOS MODELOS GPTT E GK-BKZ

No presente capítulo explicaremos a implementação dos modelos gPTT e gK-BKZ no sistema HiG-Flow. Para isso é conveniente começar com uma breve apresentação do sistema HiG-Flow.

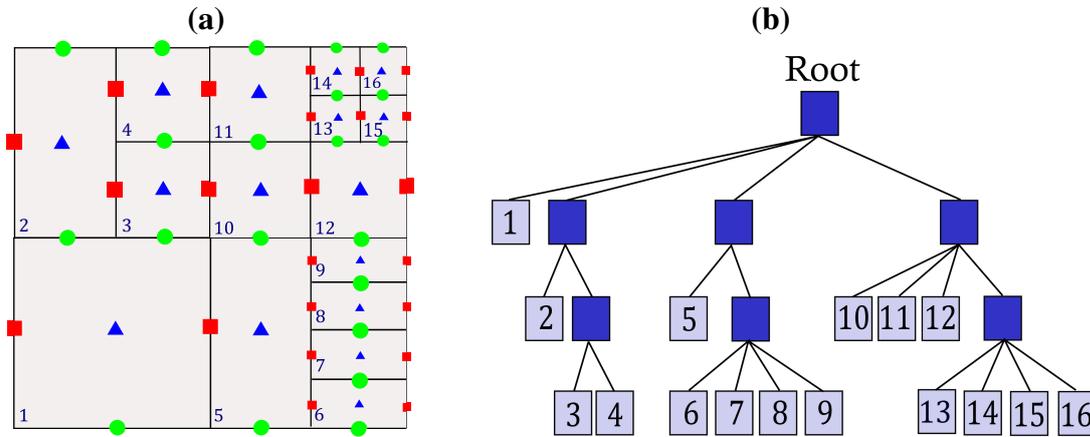
O HiG-Flow é um sistema para a simulação numérica de escoamento de fluidos monofásico e multifásicos para problemas de grande porte. Para isto, uma arquitetura do software foi desenvolvida para respeitar as características do problema (grande quantidade de informações e tempo elevado para a simulação) de forma a distribuir o processamento onde o custo é elevado e compartimentar o software em módulos responsáveis por diferentes partes da simulação, os quais se comunicam por meio de interfaces bem definidas, sem influência direta da representação interna utilizada por cada módulo.

O HiG-Flow trabalha junto com o sistema HiG-Tree, o qual é responsável pela estrutura de dados, domínios, resolvedores de sistemas lineares e não-lineares, aproximações e interpolações. As bibliotecas utilizadas são PETSc e HYPRE, que já foram otimizadas e testadas em diversos códigos de simulação de escoamentos de fluidos; do mesmo modo, a biblioteca ZOLTAN-TRILINOS é utilizada para particionar os domínios do problema, o qual permite uma boa distribuição de carga entre os processos durante a execução.

As equações a tratar são aproximadas usando diferenças finitas em malhas cartesianas hierárquicas. Para entender melhor isso, uma representação ilustrativa da malha é dada na Figura 21-(a) e sua estrutura de dependências é ilustrado na Figura 21-(b). Nesta estrutura de dados, cada célula pode ser particionada em formas geométricas distintas. Tal generalização impõe dificuldades na aproximação numérica em diferenças finitas.

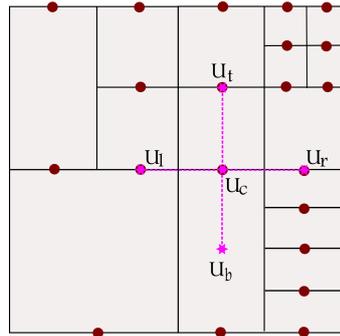
Por exemplo, considerando a Figura 22, suponha que estamos interessados em aproximar a segunda derivada na direção y centrada em U_c . Usando diferenças finitas de segunda ordem,

Figura 21 – HiGTree estrutura de dados: (a) Representação de uma malha hierárquica, (b) Árvore que representa a estrutura do domínio (a).



Fonte: Bertoco *et al.* (2021a).

Figura 22 – Stencil de diferenças finitas de 2da. ordem sobre U_c



Fonte: Bertoco *et al.* (2021a).

temos:

$$\frac{\partial^2 U_c}{\partial y^2} \approx \frac{1}{\delta y^2} (U_t - 2U_c + U_b); \quad (5.1)$$

Note que, neste caso, U_b não coincide com valores conhecidos e será definida através da interpolação de valores das células vizinhas. Assim,

$$U_b = \sum_{k=1}^{V_b} w_k^b U_k; \quad (5.2)$$

A quantidade de vizinhos V_b é definida de acordo com a precisão imposta. Por exemplo, em uma aproximação de segunda ordem, como dada na equação (5.1), $V_b = 6$ garante um erro de 3ª ordem na aproximação. Os pesos $w_k^b = w_k(\mathbf{x})$ são calculados utilizando o método de mínimos quadrados móveis (MQM) (SOUSA *et al.*, 2019; CASTELO; AFONSO; BEZERRA, 2021). O procedimento para o cálculo de $w_k(\mathbf{x})$ deve ser realizado para cada aproximação $U(\mathbf{x})$, porém é feita uma única vez, visto que a malha é estática.

5.1 O Sistema HiG-Flow

Os objetivos específicos do sistema HiG-Flow é trabalhar com a simulação numérica de escoamentos de fluidos que tem a características específicas, tipo:

- Equações de Navier-Stokes para escoamentos monofásicos em quaisquer dimensão (SOUSA *et al.*, 2019).
- Escoamentos newtonianos e newtonianos generalizados (SOUSA *et al.*, 2019).
- Escoamentos viscoelásticos diferenciais com técnicas de estabilização numérica (CASTELO; AFONSO; BEZERRA, 2021; BEZERRA; CASTELO; AFONSO, 2019).
- Escoamentos multifásicos utilizando a forma de representação “VOF” (MIZIARA, 2020; SILVA, 2020).

Este sistema também está sendo desenvolvido de forma modular permitindo que novas técnicas e métodos possam ser testados e incluídos ao sistema de forma fácil. O código HiG-Flow foi implementado com as seguintes características:

- O usuário escolhe a dimensão em tempo de compilação.
- O usuário escolhe os módulos a serem utilizados em seu programa em tempo de compilação, tais como: monofásico, newtoniano, newtoniano generalizado, viscoelástico, multifásico (ainda em fase de implementação).
- O usuário escolhe as técnicas numéricas por arquivo de entrada de dados, tais como: método da projeção, esquema numérico para o termo convectivo, modelo da equação constitutiva para escoamentos viscoelásticos, além dos vários parâmetros para simulação.

As técnicas e métodos numéricos implementados são descritos nas seguintes subseções:

5.1.1 Discretização Espaço-Temporal

Foram implementados os mais tradicionais métodos para avanço espaço-temporal utilizando diferenças finitas em qualquer dimensão. Os métodos explícitos implementados são:

- Método de Euler explícito.
- Método de Runge-Kutta TVD de segunda ordem ou método de Euler modificado.
- Método de Runge-Kutta TVD de terceira ordem.

Entre os métodos implícitos, foram implementados os seguintes métodos:

- Método de Euler implícito.
- Método de Crank-Nicolson.
- Método BDF de segunda ordem.

5.1.2 Discretização do Termo Convectivo

Quanto aos métodos para discretização do termo convectivo, foram implementados até o momento 4 esquemas clássicos:

- Esquema central.
- Esquema *Upwind* de primeira ordem
- Esquema *Quick* de segunda ordem.
- Método Cubista de segunda ordem.

5.1.3 Discretização do Termo Difusivo

Quanto aos métodos para discretização do termo difusivo, foram implementados até o momento esquemas de diferenças finitas clássicas. Pretende-se ainda implementar um método de diferenças finitas compactos de quarta ordem em qualquer dimensão.

5.1.4 Discretização do Termo Fonte

O código permite termos fontes mais variados para resolver problemas diversos como:

- Eletrosmose
- Problemas com solução manufaturada, entre outros que necessitam de termos fontes específicos

5.1.5 Acoplamento Velocidade-Pressão

Para calcular os campos de velocidade $\mathbf{u}^{(n+1)}$ e pressão $p^{(n+1)}$, usamos o método de projeção incremental de Chorin (CHORIN, 1968), que desacopla as equações de conservação de massa e quantidade de movimento, dadas pelas equações (4.7) e (4.8), respectivamente. Este método permite obter um campo de velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ da equação (4.8). Na metodologia HiG-Flow, esta equação (4.8) pode ser aproximada usando um método de Euler explícito, Runge-Kutta RK-2 ou RK-4, ou, os métodos de Euler semi-implícitos, Cranck-Nicolson e BDF2. Pode-se também escolher ordens de discretização espacial de 2^a ou 4^a . Pode-se usar

os esquemas centrais convectivos ou Upwind (ordem 1^a), ou, esquemas de ordem 2^a como o Cubista (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003) e Quick (LEONARD, 1979).

Neste trabalho foi usado um esquema de Euler Semi-ímplicito juntamente com uma aproximação espacial de ordem 2^a e um esquema Cubista para os termos convectivos:

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)} - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n = -\nabla p^n + \frac{1}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)} + \nabla \cdot \mathbf{S}^n + \mathbf{F}^n \quad (5.3)$$

aqui, δt é o passo de tempo, n representa os valores conhecidos de velocidade, tensão e pressão no instante n , $n + 1$ representa os novos valores do campo de velocidade (desconhecidos) a serem obtidos do solução da equação.

Usando o método de projeção, sabe-se que o campo de velocidade $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ obtido da equação 5.3 pode não satisfazer a equação de conservação de massa. Portanto, para resolver este problema, a equação para o potencial $\psi^{(n+1)} = \delta t(p^n - p^{(n+1)})$ é resolvida,

$$\nabla^2 \psi^{(n+1)} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)}, \quad (5.4)$$

e a decomposição de Helmholtz-Hodge é usada para corrigir o campo de velocidade não conservativo $\tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)}$ (ver (GUERMOND; QUARTAPELLE, 1998; CASTELO; AFONSO; BEZERRA, 2021; SOUSA *et al.*, 2019) para mais detalhes),

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)} - \nabla \psi^{(n+1)}. \quad (5.5)$$

O novo campo de velocidade $\mathbf{u}^{(n+1)}$ satisfaz a equação de conservação de massa. Finalmente, a pressão é atualizada $p^{(n+1)} = p^n + \frac{\psi^{(n+1)}}{\delta t}$.

Neste trabalho considerou-se para o caso de gPTT se considerou na entrada do canal um perfil de velocidade constante, $u(y) = 1$ e para o caso de gK-BKZ, considerou-se o perfil de velocidade parabólico $u(y) = -4y(y - 1)$. Para os dois métodos é considerado inicialmente os componentes de tensão são definidos para 0, na saída, se definiram condições de contorno totalmente desenvolvidas (condições de contorno de Neumann) para a velocidade e tensão (a pressão é imposta). Finalmente, nas paredes ($y = 0$ e $y = 1$), temos a condição de contorno empírica de não deslizamento ($u = 0$).

5.1.6 Métodos Numéricos para a Equação Constitutiva

Nesta parte serão descritas os métodos numéricos que para a equação constitutiva tanto para o caso do gPTT como para o caso do gK-BKZ.

5.1.6.1 Método Numérico para o Modelo gPTT

Começaremos descrevendo o método PTT exponencial e depois se verá qual foi a modificação feita para ser generalizado como gPTT, para isso é bom lembrar como foi implementado o método PTT exponencial no HiG-Flow. Assim, da equação (2.16),

$$K(\sigma_{kk})\sigma + \lambda \dot{\sigma} = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (5.6)$$

com $K(\sigma_{kk})$ tendo a forma exponencial, $K(\sigma_{kk}) = \exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} tr(\sigma)\right)$, e sendo $\dot{\sigma} = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\sigma - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \sigma - \sigma \cdot (\nabla \mathbf{u}) + \xi(\sigma \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \sigma)$,

Da equação (5.6) pode se derivar a seguinte forma compacta

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\sigma - [(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \sigma + \sigma \cdot \nabla \mathbf{u}] = \frac{1}{De} \mathbf{M}(\sigma). \quad (5.7)$$

onde De é o número de Deborah e $\mathbf{M}(\sigma)$ é definido pelo modelo viscoelástico PTT exponencial, com a qual é implementada no sistema HiG-Flow

$$\mathbf{M}(\sigma) = \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D} - \left[\exp\left(\frac{\varepsilon Re Wi tr(\sigma)}{(1-\zeta)}\right) \right] \sigma - \xi Wi(\sigma \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \sigma), \quad (5.8)$$

Desde a equação (5.8) pode-se fazer a modificação para o modelo gPTT pois somente é substituída a parte exponencial pela expressão do gPTT dada na equação (4.4), assim obteve-se uma forma compacta mas já para o modelo gPTT,

$$\mathbf{M}_1(\sigma) = \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D} - \left[\Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(\frac{\varepsilon Re Wi tr(\sigma)}{(1-\zeta)} \right) \right] \sigma - \xi Wi(\sigma \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \sigma). \quad (5.9)$$

A implementação numérica da função Mittag-Leffler em C++ seguiu as ideias apresentadas no código de Podlubny (Igor Podlubny (2012). *Mittag-Leffler function* (<https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/8738-mittag-leffler-function>), *MATLAB Central File Exchange*.), onde é desenvolvida uma rotina em MATLAB para avaliar a função Mittag-Leffler com dois parâmetros. Foi feita uma adaptação do código MATLAB para C++. Os detalhes técnicos podem ser encontrados no trabalho de Gorenflo et al. (GORENFLO; LOUTCHKO; LUCHKO, 2002). Foram feitos diversos testes envolvendo a precisão da função Mittag-Leffler para diferentes valores de α e β , tendo em conta o modelo constitutivo usado. Dado o extenso estudo realizado, optou-se por omitir esse trabalho desta dissertação. Será apenas necessário dizer que o código usado permite obter resultados com 6 a 10 algarismos significativos (mediante a necessidade, e, o modelo usado).

5.1.6.2 Método Numérico para o Modelo gK-BKZ

Para descrever a metodologia usada nesta parte do trabalho se seguirá o trabalho de Tomé et al. (TOMÉ *et al.*, 2016) e também a tese de Juliana Bertoco (BERTOCO, 2016). Para calcular o tensor $\sigma(\mathbf{x}, t_{n+1})$ escreve-se a equação constitutiva (4.75) como segue:

$$\begin{aligned} \sigma(t_{n+1}) = & \int_{-\infty}^0 m(t_{n+1} - t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t_{n+1}) dt' \\ & + \int_0^t m(t_{n+1} - t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t_{n+1}) dt', \end{aligned} \quad (5.10)$$

lembrando que $m(t_{n+1} - t')$ é como está definida a equação (4.66),

$$m(t_{n+1} - t') = \frac{dG(t_{n+1} - t')}{dt'} = \frac{S_0 \Gamma(\beta)}{\alpha \lambda} \left(E_{\alpha, \alpha + \beta - 1} \left(\frac{t' - t_{n+1}}{\lambda} \right) + (1 - \beta) E_{\alpha, \alpha + \beta} \left(\frac{t' - t_{n+1}}{\lambda} \right) \right)$$

Discretizaremos o intervalo $[0, t]$ tomado $N + 1$ pontos $t'_j, j = 0, 1, \dots, N$

$$\begin{aligned} \sigma(t_{n+1}) = & \int_{-\infty}^0 m(t_{n+1} - t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t_{n+1}) dt' \\ & + \sum_{j=0}^{\frac{N-2}{2}} \int_{t'_{2j}}^{t'_{2j+2}} m(t_{n+1} - t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t_{n+1}) dt', \end{aligned} \quad (5.11)$$

em que $t'_0 = 0$. Se considera também que $\mathbf{B}_{t'}(t_{n+1}) = \mathbf{B}_0(t_{n+1})$ para $t' < 0$ e por tanto a primeira integral de (5.11) se torna em:

$$\int_{-\infty}^0 m(t_{n+1} - t') H(I_1(\mathbf{B}_0(t_{n+1})), I_2(\mathbf{B}_0(t_{n+1}))) \mathbf{B}_0(t_{n+1}) dt' \quad (5.12)$$

que pode ser resolvido analiticamente pois os termos $H(I_1(\mathbf{B}_0(t_{n+1})), I_2(\mathbf{B}_0(t_{n+1})))$ e $\mathbf{B}_0(t_{n+1})$ ficam constantes na integral e somente fica a ser resolvido a integral

$$\int_{-\infty}^0 m(t_{n+1} - t') dt' = \int_{-\infty}^0 \frac{dG(t_{n+1} - t')}{dt'} dt' = G(t_{n+1} - t') \Big|_{-\infty}^0$$

Sabendo que $G(t_{n+1} - t') = S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t_{n+1} - t'}{\lambda} \right)$ levando em conta o descrito na expressão (4.64)

$$\lim_{t' \rightarrow -\infty} G(t_{n+1} - t') = \lim_{t' \rightarrow -\infty} S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t_{n+1} - t'}{\lambda} \right) = 0,$$

então

$$\int_{-\infty}^0 m(t_{n+1} - t') dt' = G(t_{n+1}) = S_0 \Gamma(\beta) E_{\alpha, \beta} \left(-\frac{t_{n+1}}{\lambda} \right).$$

Em relação às integrais dentro do somatório na equação (5.11), usamos o método de coeficientes indeterminados (com uma fórmula de quadratura de segunda ordem) para seu cálculo (para detalhes, ver Tomé et al. (TOMÉ *et al.*, 2016)). Nas seções a seguir, descrevemos o método usado para calcular o tensor $\mathbf{B}_{t'}(t_{n+1})$ e como os pontos $t'_j(t_{n+1})$ são calculados.

- Discretização do intervalo $[0, t_{n+1}]$

Neste trabalho, os nós de integração são calculados usando uma *progressão geométrica* no tempo t_{n+1} da seguinte forma:

1. Seja $t'_0 = 0$ and $t'_N = t_{n+1}$;
2. Fazemos $t'_{N-j} = t'_N - \delta t q^j$, $j = 1, 2, \dots, N-1$, onde $q = (t_{n+1}/\delta t)^{1/N}$, δt é o passo de tempo.

- Cálculo do Tensor de Finger $\mathbf{B}_{t'(t_{n+1})}(\mathbf{x}, t_{n+1})$

Segue-se neste trabalho as ideias do método de campos de deformação (HULSEN; PETERS; BRULE, 2001), em que o tensor Finger é obtido resolvendo um equação de convecção, onde $\mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t)$ é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t) = [\nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)]^T \cdot \mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}, t), \quad (5.13)$$

com a condição $\mathbf{B}_{t'=t_{n+1}}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \mathbf{I}$.

O tensor Finger $\mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é calculado usando o método de Euler, e o esquema de alta ordem CUBISTA (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003) é usado para discretizar os termos convectivos. Ressaltamos que o tensor Finger $\mathbf{B}_{t'(t)}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é calculado nos tempos passados $t'(t)$. O tensor Finger atualizado $\mathbf{B}_{t'(t_{n+1})}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é avaliado usando um método de interpolação de segunda ordem que é discutido em detalhes por Tomé et al. (TOMÉ *et al.*, 2008).

5.2 Conclusões

No presente capítulo foi explicada a implementação dos modelos gPTT e gK-BKZ no sistema HiG-Flow, um sistema para a simulação numérica de escoamento de fluidos monofásico e multifásicos para problemas de grande porte. Foram dados todos os detalhes da implementação e das discretizações usadas nos modelos gPTT e do modelo gK-BKZ (que engloba o modelo de Lodge com a função memória dada por uma Mittag-Leffler).

RESULTADOS NUMÉRICOS

6.1 Comprimento de Desenvolvimento: gPTT

Nesta secção, apresentamos um estudo numérico sobre o comprimento de desenvolvimento (o comprimento da entrada do canal necessário para que a velocidade atinja 99% do seu valor totalmente desenvolvido) de um escoamento de fluido viscoelástico acionado por pressão (entre placas paralelas) modelado pela equação constitutiva generalizada de Phan-Thien e Tanner (gPTT). As equações governantes são resolvidas pelo método das diferenças finitas, e é apresentada uma análise minuciosa do efeito dos parâmetros do modelo α e β . Os resultados numéricos mostraram que quando Re tende a zero, o comprimento de desenvolvimento para a velocidade apresenta um comportamento não monotônico. O comprimento de desenvolvimento aumenta com Wi . Para valores baixos de Wi , o maior valor do comprimento de desenvolvimento é obtido para $\alpha = \beta = 0.5$; para valores altos de Wi , o maior valor do comprimento de desenvolvimento é obtido para $\alpha = \beta = 1.5$.

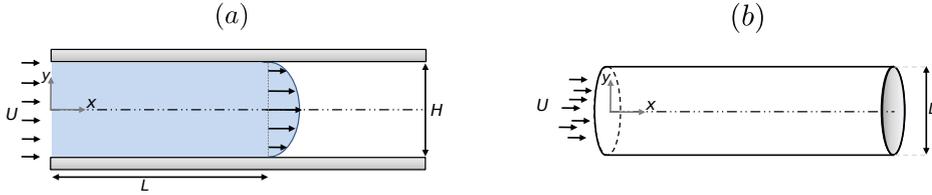
6.1.1 Introdução

Uma variedade de aplicações funcionais são baseadas na premissa de que o escoamento está totalmente desenvolvido. Supõe-se que após um certo tempo o fluido percorreu um certo comprimento (comprimento de desenvolvimento L) ao longo do canal, após o qual o escoamento não muda mais na direção do fluxo. Isto é usado, por exemplo, em matrizes de extrusão, *lab-on-a-ship*, etc.

O comprimento de desenvolvimento de escoamentos Newtonianos em canais e tubos (veja a Figura 23) é bem compreendido (DURST *et al.*, 2005).

Durst *et al.* (DURST *et al.*, 2005) desenvolveram duas correlações entre L (a distância que o fluido percorre para se tornar totalmente desenvolvido) e o número de Reynolds, $Re = \frac{\rho U H}{\eta}$, onde U é a velocidade de média de entrada imposta, ρ é a densidade do fluido, H é a largura do

Figura 23 – Geometria dos canais e tubos usados para o cálculo do comprimento de desenvolvimento. (a) Escoamento em canal. (b) Escoamento em tubo.



Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

canal (para tubos, deve-se substituir H por D -diâmetro) e η é a viscosidade newtoniana. Essas correlações são dadas por,

$$\frac{L}{H} = [(0.631)^{1.6} + (0.0442Re)^{1.6}]^{1/1.6}, \quad (6.1)$$

$$\frac{L}{D} = [(0.619)^{1.6} + (0.0567Re)^{1.6}]^{1/1.6}, \quad (6.2)$$

e permitem prever bem o comprimento de desenvolvimento para escoamentos em canal e tubos, respectivamente.

Para fluidos Newtonianos generalizados (com viscosidade variável), vários trabalhos têm sido propostos na literatura. Gostaríamos de destacar os trabalhos de Fernandes *et al.* (FERNANDES *et al.*, 2018) e Poole e Ridley (POOLE; RIDLEY, 2007), nos quais apresentaram duas correlações para o comprimento de desenvolvimento em escoamentos em canal e tubos de fluidos power-law (a viscosidade é uma função do segundo invariante do tensor de deformação, $\dot{\gamma}$ (para escoamentos simples, $\dot{\gamma}$ é simplesmente a taxa de cisalhamento). A viscosidade é então dada por $\eta = k\dot{\gamma}^{n-1}$). As correlações são dadas por,

$$\frac{L}{H} = [(f(n) - \exp(15.706 - 4.002))^{1.6} + (0.0444Re_{gen})^{-0.209n^2 + 0.645n + 1.225}]^{1/1.6}, \quad (6.3)$$

$$\frac{L}{D} = [(0.246n^2 - 0.675n + 1.03)^{1.6} + (0.0567Re_{MR})^{1.6}]^{1/1.6}, \quad (6.4)$$

para canal e tubo, respectivamente.

Temos, $Re_{gen} = \frac{6\rho U^{2-n}H^n}{k} \left(\frac{n}{4n+2}\right)^n$, $Re_{MR} = \frac{8\rho U^{2-n}D^n}{k} \left(\frac{n}{6n+2}\right)^n$, and $f(n) = \frac{-0.355}{1 + 2\exp(0.553 - 4.273n)}$. Observe a complexidade crescente nas correlações ao passar de um fluido newtoniano para um fluido de lei de potência.

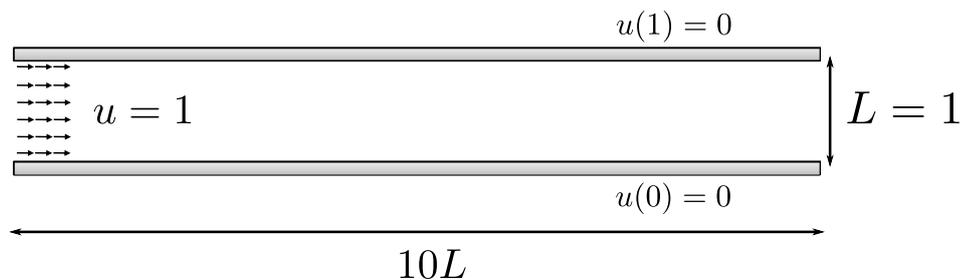
No caso de fluidos viscoelásticos, o número de trabalhos sobre este tema é menor. Isso se deve à complexidade dos escoamentos viscoelásticos, como a presença de singularidades na entrada do canal, *overshoots* no perfil de velocidade e o problema do alto número de Weissenberg.

6.1.2 Condições de Contorno, Geometria e Malhas

Na entrada, (veja a figura 24) consideramos um perfil de velocidade constante, $u(y) = 1$ (os componentes de tensão são definidos como zero) e na saída, assumimos condições de contorno totalmente desenvolvidas (condições de contorno de Neumann) para a velocidade e tensão (a pressão é imposta). Finalmente, nas paredes ($y = 0$ e $y = 1$), temos a condição de contorno empírica de não deslizamento ($u = 0$).

Devido aos baixos valores de Re considerados neste trabalho, e com base nos poucos resultados da literatura sobre o comprimento de desenvolvimento de fluidos viscoelásticos, consideramos uma geometria onde o comprimento do canal é fixado em 10 vezes a sua largura (figura 24).

Figura 24 – Representação adimensional da geometria.



Fonte: Adaptada de Bertoco *et al.* (2021b).

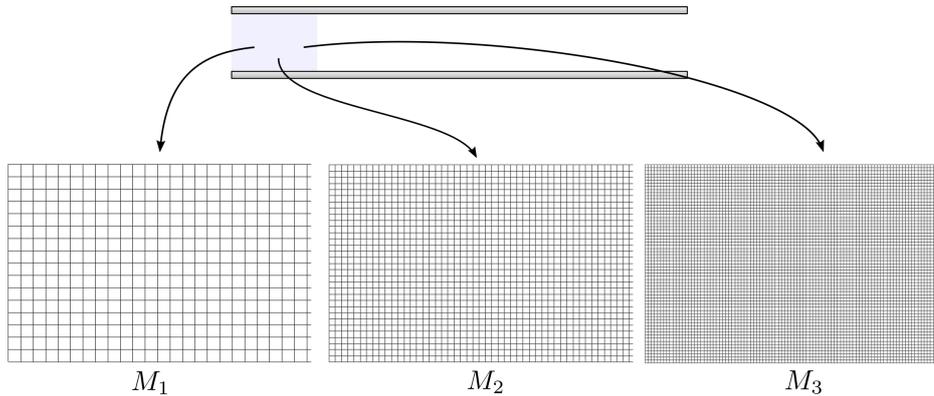
Realizamos simulações considerando mais de 8 níveis de refinamento de malha. Após alguns experimentos numéricos, as seguintes malhas foram consideradas:

- M_1 —malha uniforme com 160×16 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,0625;
- M_2 —malha uniforme com 320×32 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,03125;
- M_3 —malha uniforme com 640×64 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,015625.

As malhas são mostradas na Figura 25.

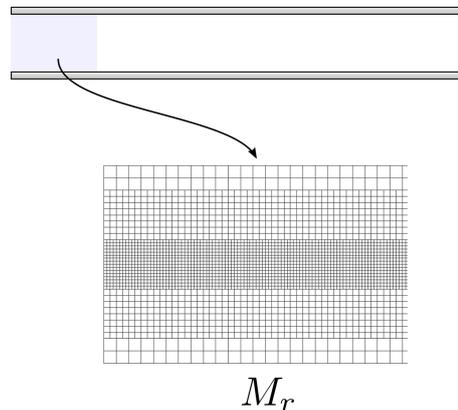
Também foram realizadas simulações numéricas considerando uma malha com refinamento adicional na linha central do canal, conforme mostrado na figura 26. Um número total de 16.000 células foi usado.

Figura 25 – Três níveis de refinamento de malha.



Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

Figura 26 – Malha com refinamento na linha central.



Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

6.1.3 Validação do Método Numérico

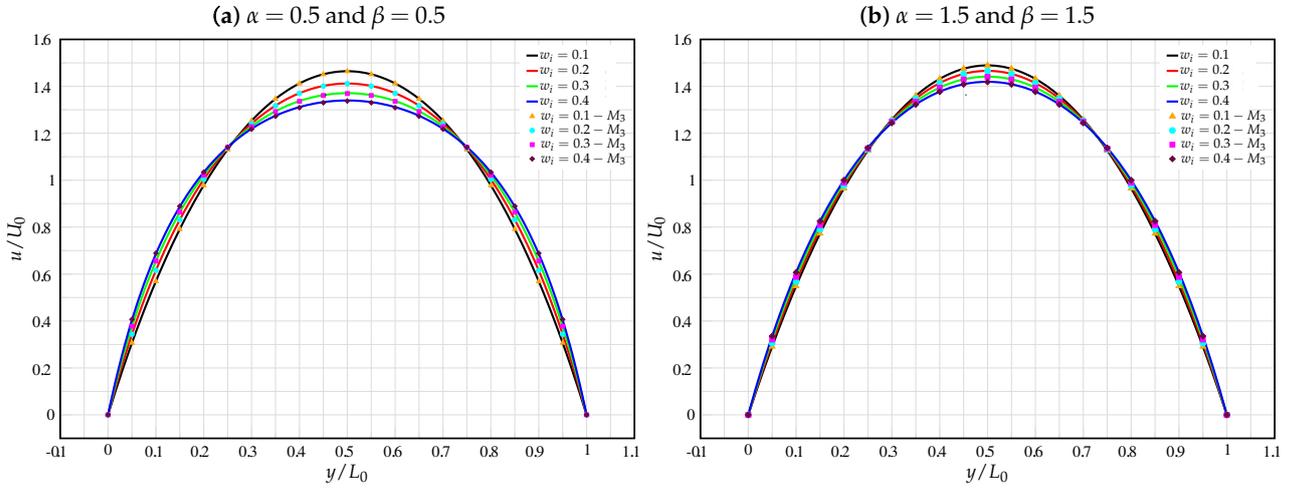
A validação do método numérico é realizada em duas etapas. Primeiro, as velocidades totalmente desenvolvidas numericamente determinadas são comparadas com a solução analítica desenvolvida no capítulo anterior. Em seguida, o comprimento de desenvolvimento obtido para o modelo gPTT com $Wi = 0,001$ (fluido quase Newtoniano) é comparado com os resultados de benchmark de Durst *et al.* (DURST *et al.*, 2005).

6.1.3.1 Comparação com a Solução Analítica:

A figura 27 mostra uma comparação entre a solução analítica (linha sólida) e a solução numérica (símbolos) para a malha M_3 com $Re = 10^{-3}$, $Wi = 0.1, 0.2, \dots, 1.0$ e $\varepsilon = 0.25$ (ξ foi definido como 0). Na Figura 27a temos $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.5$ e na Figura 27b $\alpha = 1.5$ e $\beta = 1.5$.

Pode-se observar que se obtém uma excelente concordância entre as soluções analíticas e numéricas para todos os valores considerados de Wi , o que reforça a robustez do método numérico e das malhas.

Figura 27 – Comparação entre a solução analítica (linha sólida) (FERRÁS *et al.*, 2019) e a solução numérica (símbolos) para a malha M_3 com $Re = 10^{-3}$, $Wi = 0.1, 0.2, 0.3$ e 0.4 com $\varepsilon = 0.25$ (ξ foi definido como 0). (a) $\alpha = 0.5$ e $\beta = 0.5$. (b) $\alpha = 1.5$ e $\beta = 1.5$.



Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

Para valores menores de α e β , obtemos uma maior taxa de destruição das junções no modelo gPTT. Observe que o perfil de velocidade viscoelástico típico é mais achatado para valores mais baixos de α e β . Neste caso, os diferentes valores de Wi têm um impacto mais forte no comportamento do modelo. Este resultado é semelhante aos encontrados na literatura comparando funções lineares e exponenciais do traço do tensor de tensão.

6.1.3.2 Comparação com o Comprimento de Desenvolvimento de um Fluido Newtoniano:

No caso limite de $Wi \rightarrow 0$ obtemos um fluido newtoniano. Portanto, consideramos $Wi = 0,001$ e realizamos simulações para o comprimento de desenvolvimento de um fluido gPTT, usando a geometria mostrada na Figura 25. Consideramos um número de Reynolds na faixa $[0, 100]$, onde a variação não linear do comprimento de desenvolvimento com Re é mais pronunciada. Os demais parâmetros do modelo foram definidos da seguinte forma: $\alpha = 0.1$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.25$, $\xi = 0$.

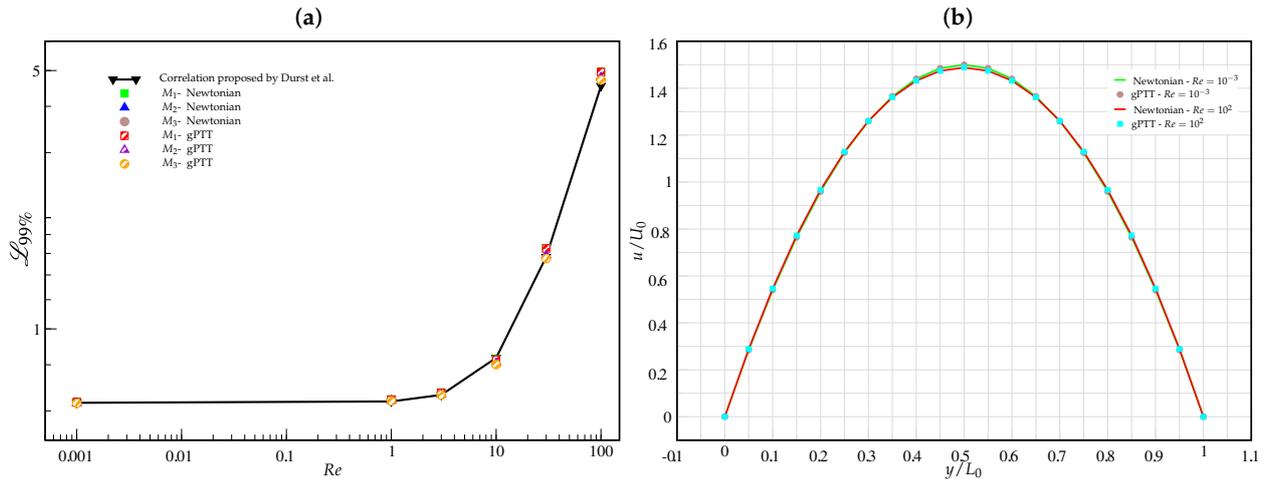
A Figura 28a mostra uma comparação entre o comprimento de desenvolvimento obtido com o modelo gPTT, um fluido Newtoniano, e aquele obtido pela correlação de Durst *et al.* (DURST *et al.*, 2005) para a variação do comprimento de desenvolvimento com Re (veja a equação (6.1)). Os três resultados praticamente se sobrepõem, comprovando mais uma vez a robustez do método numérico.

À medida que Re aumenta, os resultados para o modelo gPTT na malha grossa são ligeiramente superiores aos obtidos para o fluido newtoniano e para a correlação. No entanto, no domínio não linear os resultados são bastante precisos.

A Figura 28b mostra os perfis de velocidade obtidos na região totalmente desenvolvida do

canal (malha M_3) considerando os modelos gPTT e Newtonianos para $Re = 0,001$ e $Re = 100$.

Figura 28 – (a) Comparação entre o comprimento de desenvolvimento obtido com o modelo gPTT (com $Wi = 0,001$), um fluido Newtoniano, e a correlação proposta por Durst et al. (DURST *et al.*, 2005), para três malhas diferentes M_1 , M_2 e M_3 . (b) Perfis de velocidade na região totalmente desenvolvida para a malha M_3 , considerando os modelos gPTT e Newtoniano, para $Re = 0,001$ e $Re = 100$.



Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

Novamente, há uma excelente concordância entre as duas soluções para os dois valores diferentes de Re . Isso mostra que o valor de $Wi = 0,001$ é uma boa aproximação para o fluido newtoniano.

Com base nesses resultados, o código numérico agora é capaz de prever o comprimento de desenvolvimento do fluido modelado pelo modelo gPTT considerando uma faixa mais ampla de números Wi .

6.1.4 Comprimento de Desenvolvimento de um Fluido gPTT

6.1.4.1 Simulações:

Realizamos um grande número de simulações considerando $Wi = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, 1$, para *creeping flow* ($Re = 0,001$) e a seguinte combinação de parâmetros α e β :

- $(\alpha, \beta) = (0,5; 0,5)$ - Malhas M_1, M_2, M_3, M_r - $Wi = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4$
- $(\alpha, \beta) = (0,5; 1,5)$ - Malhas M_1, M_2, M_3, M_r - $Wi = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4$
- $(\alpha, \beta) = (1,5; 0,5)$ - Malhas M_1, M_2, M_3, M_r - $Wi = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4$
- $(\alpha, \beta) = (1,5; 1,5)$ - Malhas M_1, M_2, M_3, M_r - $Wi = 0,1, 0,2, 0,3, 0,4$

- $(\alpha, \beta) = (1.0; 1.0)$ - Malhas M_2, M_r - $Wi = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$
- $(\alpha, \beta) = (0.5; 0.5)$ - Malhas M_2, M_r - $Wi = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1$
- $(\alpha, \beta) = (0.5; 1.5)$ - Malhas M_2, M_r - $Wi = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1$
- $(\alpha, \beta) = (1.5; 0.5)$ - Malhas M_2, M_r - $Wi = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1$
- $(\alpha, \beta) = (1.5; 1.5)$ - Malhas M_2, M_r - $Wi = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1$
- $(\alpha, \beta) = (1.0; 1.0)$ - Malhas M_2, M_r - $Wi = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1$

Isso dá um número total de 132 simulações. As simulações com a malha mais fina levaram cerca de 15 h cada.

O primeiro conjunto de 72 simulações permitiu tirar conclusões sobre a convergência do método numérico e o erro no cálculo do comprimento de desenvolvimento usando a técnica de extrapolação de Richardson. Com base nos resultados dessas simulações, um segundo conjunto de simulações foi realizado para valores mais altos de Wi usando as malhas M_2 (veja a figura 25) e M_r (veja a figura 26). Essas malhas foram escolhidas com base em um *trade-off* entre precisão e tempo computacional.

6.1.5 Creeping Flow

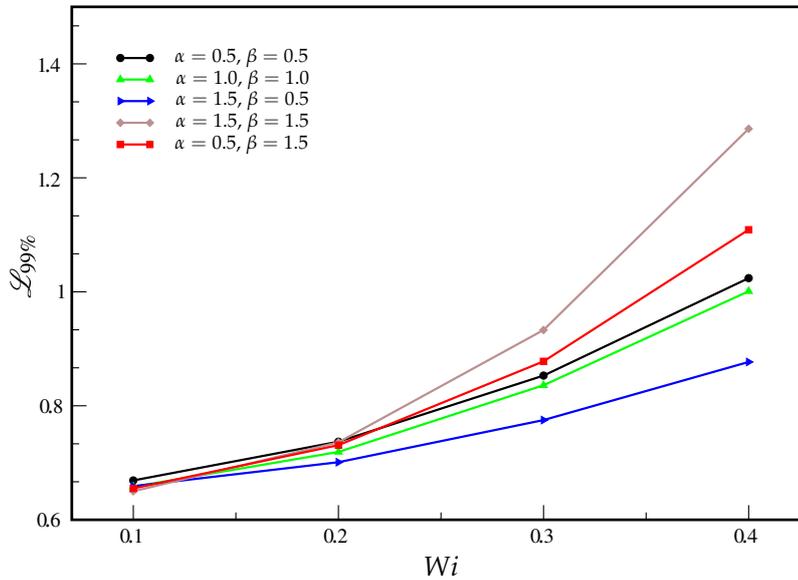
O comprimento de desenvolvimento, determinado como o comprimento da entrada do canal necessário para que a velocidade atinja 99% de seu valor totalmente desenvolvido, e denotado aqui como $\mathcal{L}_{99\%}$, é mostrado na Tabela 3.

Os resultados são mostrados apenas para Wi até 0,4, pois problemas de convergência para malhas mais finas são observados para valores maiores de Wi . O principal problema surge da singularidade no canto de entrada do canal, que gera um erro que se propaga ao longo do canal.

Observe que o erro é maior nos valores mais baixo e mais alto de α e β , sendo mais pronunciado quando α e β são baixos. O erro máximo foi de 3,6% e foi obtido, como esperado, para $Wi = 0,4$ e $\alpha = \beta = 0,5$. Deve-se notar que os erros são bastante baixos e, portanto, essas soluções podem ser usadas como *benchmark*.

A Figura 29 mostra os comprimentos de desenvolvimento para a malha M_2 apresentados na Tabela 3. Observa-se uma variação não linear do comprimento de desenvolvimento com α , β e Wi .

Figura 29 – Comprimento de desenvolvimento em função de Wi considerando 99% U_{max} ($\mathcal{L}_{99\%}$) e a malha M_2 .



Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

6.1.6 Conclusões

O comprimento de desenvolvimento aumenta com Wi , com efeitos viscoelásticos retardando a difusão e convecção da informação das paredes para o centro do canal. Essa difusão e convecção também são fortemente influenciadas pelos parâmetros da função Mittag-Leffler. Para valores baixos de Wi , o maior valor do comprimento de desenvolvimento é obtido para $\alpha = \beta = 0.5$; para valores altos de Wi , o maior valor do comprimento de desenvolvimento é obtido para $\alpha = \beta = 1.5$. Uma explicação do *continuum* molecular desse fenômeno não é uma tarefa fácil. Em valores altos de α e β , a taxa de destruição das junções é menor do que em valores baixos de α e β . Isso significa que quando os valores de Wi são baixos e a taxa de destruição da junção é alta, a informação viaja lentamente da parede para o centro do canal (em comparação com quando a taxa de destruição da junção é baixa). O oposto era esperado. Observe que neste caso os comprimentos de desenvolvimento são muito semelhantes para todos os valores testados de α e β e, portanto, a influência desses parâmetros no comprimento de desenvolvimento é pequena. Esses resultados podem ser justificados pelo baixo valor de Wi .

À medida que Wi aumenta, o maior valor de comprimento de desenvolvimento é alcançado com uma baixa taxa de destruição de junções. Esse resultado pode ser justificado pelo fato de que à medida que a taxa de destruição das junções diminui, a informação é transmitida mais lentamente devido ao pequeno número de novos contatos entre as ligações que representam as moléculas.

Relativamente ao método numérico, podemos concluir que é robusto e permitiu fazer simulações em geometrias que possuem singularidades.

Tabela 3 – Valores de comprimento de desenvolvimento de referência para a velocidade ($\mathcal{L}_{99\%}$).

Wi	α	β	M_1	M_2	M_3	M_r	\mathcal{L}_{ext}	% Error
0.1	0.5	0.5	0.701	0.669	0.660	0.661	0.657	0.48
	0.5	1.5	0.675	0.655	0.649	0.642	0.647	0.29
	1.5	0.5	0.689	0.659	0.652	0.650	0.651	0.24
	1.5	1.5	0.653	0.650	0.648	0.632	0.644	0.68
	1.0	1.0	—	0.658	—	0.641		
0.2	0.5	0.5	0.844	0.737	0.711	0.736	0.703	1.202
	0.5	1.5	0.806	0.731	0.713	0.721	0.707	0.844
	1.5	0.5	0.788	0.701	0.682	0.692	0.677	0.781
	1.5	1.5	0.803	0.736	0.712	0.747	0.699	1.851
	1.0	1.0	—	0.719	—	0.709		
0.3	0.5	0.5	0.984	0.853	0.805	0.865	0.777	3.578
	0.5	1.5	0.980	0.878	0.852	0.822	0.843	1.073
	1.5	0.5	0.883	0.775	0.750	0.784	0.742	1.015
	1.5	1.5	1.033	0.933	0.928	1.012	0.928	0.022
	1.0	1.0	—	0.836	—	0.852		
0.4	0.5	0.5	1.104	1.024	0.949	1.102	-	-
	0.5	1.5	1.175	1.109	1.082	1.165	1.065	1.600
	1.5	0.5	0.984	0.877	0.862	0.931	0.860	0.276
	1.5	1.5	1.307	1.286	1.273	1.365	1.246	2.155
	1.0	1.0	—	1.001	—	1.079		

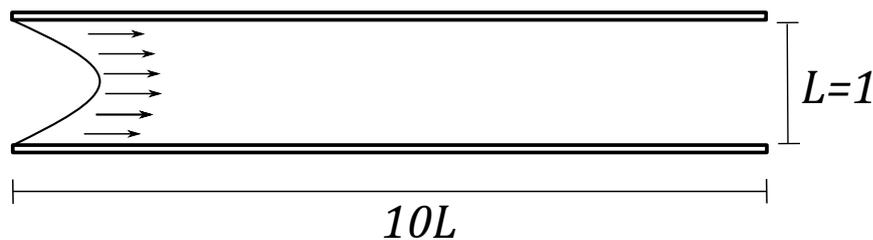
Fonte: Bertoco *et al.* (2021b).

6.2 Escoamento em Canal: gK-BKZ

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos da simulação do escoamento de um fluido viscoelástico num canal (entre placas paralelas) usando o modelo gK-BKZ descrito na seção 5.1.6.2.

Para a geometria do canal usada para as simulações considerou-se o comprimento do canal como sendo dez vezes a sua largura, tal como é mostrado na figura 30.

Figura 30 – Representação adimensional da geometria usada nas simulações do modelo gK-BKZ.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Além disso, considerou-se o perfil de velocidade parabólico $u(y) = -4y(y-1)$ na entrada

do canal. Tal como no caso onde foi testado o modelo gPTT, as componentes de tensão são definidos como 0 no instante inicial. Na saída se definiram condições de contorno totalmente desenvolvidas (condições de contorno de Neumann) para a velocidade e tensão (a pressão é imposta). Nas paredes ($y = 0$ e $y = 1$), temos a condição de contorno $u = 0$. De notar que devido ao tipo de equação constitutiva usada, não é necessário fornecer as condições de contorno para a tensão.

As simulações foram realizadas para cinco diferentes malhas uniformes (ver figura 25), como também para cinco malhas com diferentes níveis de refinamento, tal como especificaremos de seguida:

- M_0 —malha uniforme com 80×8 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,125;
- M_1 —malha uniforme com 160×16 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,0625;
- M_2 —malha uniforme com 320×32 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,03125;
- M_3 —malha uniforme com 640×64 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,015625;
- M_4 —malha uniforme com 1280×128 células computacionais e um espaçamento mínimo $\Delta x/H$ e $\Delta y/H$ de 0,0078125;
- R_1 —malha com três níveis de refinamento, o mais perto das paredes M_2 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,03125$, o segundo nível M_1 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,0625$ e o nível central M_0 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,125$, conforme figura 31(a);
- R_2 —malha com três níveis de refinamento, o mais perto das paredes M_3 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,015625$, o segundo nível M_2 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,03125$ e o nível central M_1 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,0625$, conforme figura 31(b);
- R_3 —malha com dois níveis de refinamento, o mais perto das paredes M_1 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,0625$, e o nível central M_0 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,125$, conforme figura 31(c);
- R_4 —malha com dois níveis de refinamento, o mais perto das paredes M_2 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,03125$, e o nível central M_1 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,0625$, conforme figura 31(d);
- R_5 —malha com dois níveis de refinamento, o mais perto das paredes M_3 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,015625$, e o nível central M_2 com $\Delta x/H = \Delta y/H = 0,03125$, conforme figura 31(e);

Para simular o escoamento de um fluido viscoelástico com o modelo gK-BKZ de 1-modo de relaxamento utilizaram-se os seguintes dados de referência:

1. $\lambda_{ref} = \lambda_1 = 0.1396$
2. $S_0 = 1.6648$ Pa
3. $\rho_0 = 801.5$ Kg.m³
4. $\eta_0 = 0.2324$ Pa.s
5. $U = 0.025$ m.s⁻¹
6. $L = 1$ cm
7. $Re = 0.8621$
8. $Wi = 0.3490$
9. $\alpha = \beta = 1$

Nas figuras 32 e 33 mostra-se os resultados obtidos para o perfil de velocidade $u(y)$, σ_{xx} , σ_{xy} e σ_{yy} ; tais resultados foram avaliados no meio do canal e são comparados com a solução semi-analítica descrita na seção 4.3.3. Especificamente, na figura 32(a) é apresentada a comparação da solução numérica nas malhas M_0 , M_1 , M_2 , M_3 e M_4 com a semi-analítica do perfil da velocidade $u(y)$. Na parte (b) é a comparação da velocidade $u(y)$ com a solução numérica nas malhas R_1 , R_2 , R_3 , R_4 e R_5 .

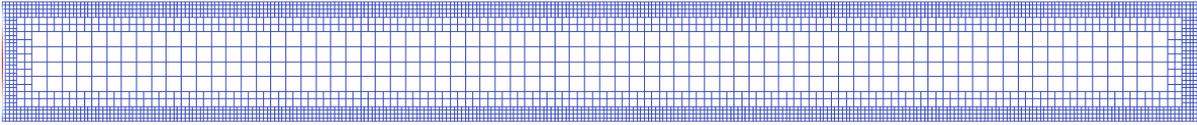
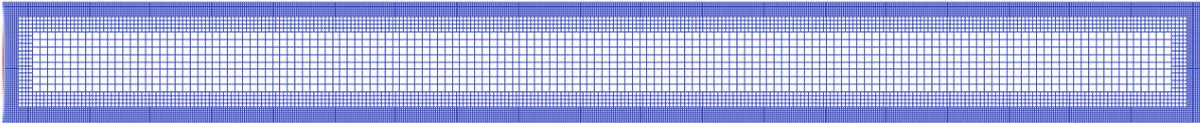
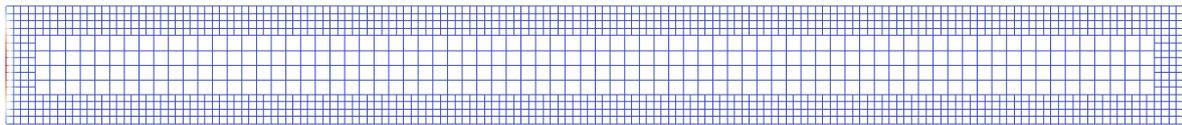
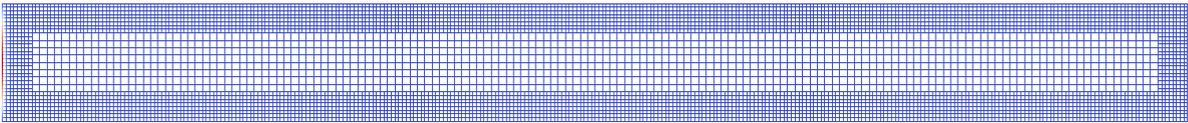
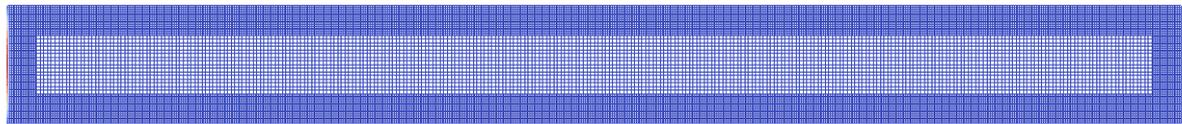
Como podemos ver, em ambos os casos, à medida que a malha é finada, a solução numérica converge para a solução analítica. No caso em que temos malhas com diferentes graus de refinamento, podemos observar que as soluções numéricas são bastantes melhores. Isto acontece pois os gradientes de velocidade não são iguais ao atravessar o canal na transversal. Temos gradientes de velocidade mais elevados junto à parede e gradientes nulos no centro do canal, então, uma malha que consiga captar este comportamento (como é o caso das malhas com diferentes graus de refinamento - figura 32(b)), são mais vantajosas e resultam em resultados mais precisos.

Da mesma forma, nas figuras 33(a) e 33(b) é comparada a solução semi-analítica σ_{xx} com as soluções numéricas obtidas com as malhas M_0 , M_1 , M_2 , M_3 e M_4 e com as malhas R_1 , R_2 , R_3 , R_4 e R_5 , respectivamente.

Nas figuras 33(c) e 33(d) são comparados os perfis σ_{xy} (numérico e analítico) nas malhas M_0 , M_1 , M_2 , M_3 e M_4 e com as malhas R_1 , R_2 , R_3 , R_4 e R_5 , respectivamente.

Por último, na figuras 33(e) e 33(f) é apresentada a comparação do perfil σ_{yy} com as soluções numéricas obtidas com as malhas M_0 , M_1 , M_2 , M_3 e M_4 e com as malhas R_1 , R_2 , R_3 , R_4 e R_5 , respectivamente.

Figura 31 – Malhas com diferentes níveis de refinamento usadas na simulação do fluido gK-BKZ

(a) Malha R_1 (b) Malha R_2 (c) Malha R_3 (d) Malha R_4 (e) Malha R_5

Fonte: Elaborada pelo autor.

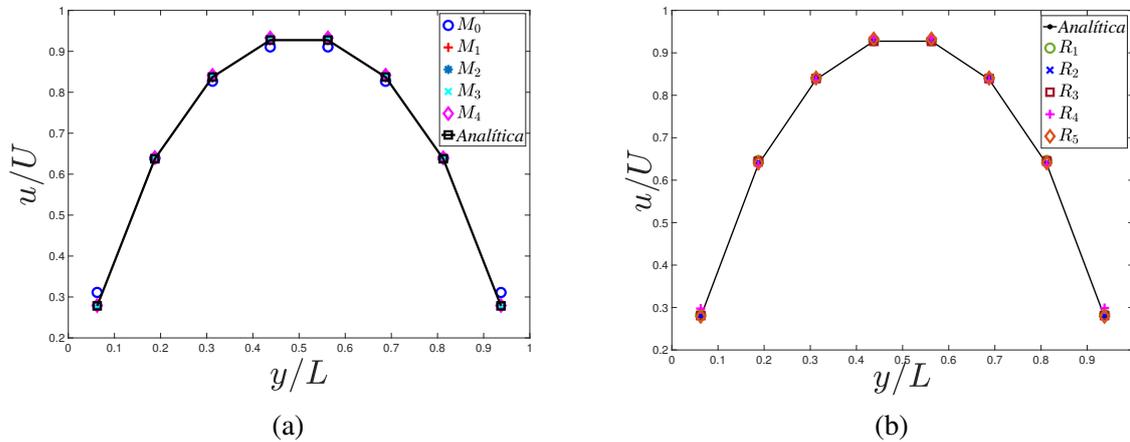
A tabela 4 mostra os erros obtidos nas diferentes malhas para a velocidade $u(y)$, $\sigma_{xx}(y)$ e $\sigma_{yy}(y)$, onde foi usada a seguinte norma:

$$E(M_l) = \sqrt{H_l \sum_{j=1}^{J_l} \left[Sol_{an}(M_l)_j - Sol_{num}(M_l)_j \right]^2} \quad (6.5)$$

onde J_l denota o valor j_{max} na malha M_l (ou R_l) e H_l é o espaçamento de malha dy .

Como podemos ver, os erros vão diminuindo à medida que refinamos a malha. Porém, os erros não seguem um padrão que permita obter uma ordem de convergência de segunda ordem. Isto acontece devido ao tipo de malhas usadas no espaço e no tempo e a presença de uma singularidade na quina da geometria. O fato desta simulações terem um custo computacional elevado levou a fazer escolhas ponderadas sobre o grau de refinamento a usar. No futuro serão

Figura 32 – Comparação do perfil de velocidade $u(y)$ com a solução numérica em diferentes tipos de malhas. (a) $u(y)$ comparado com a solução numérica nas malhas M_0, M_1, M_2, M_3 e M_4 . (b) $u(y)$ comparado com a solução numérica nas malhas R_1, R_2, R_3, R_4 e R_5 . Nota: a linha é apenas usada para se perceber melhor o perfil obtido e não representa a solução analítica nos locais onde não aparecem símbolos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 4 – Erro numérico obtido para a velocidade $u(y)$, $\sigma_{xx}(y)$ e $\sigma_{yy}(y)$ nas diferentes malhas.

	$u(y)$	$\sigma_{xx}(y)$	$\sigma_{yy}(y)$
M_0	0.082187496212297	0.047230046616999	0.157716277279427
M_1	0.016844947685585	0.026206138125274	0.050235577623870
M_2	0.017258891109645	0.018329045877478	0.033557533901576
M_3	0.012615976982841	0.012885412095961	0.020112240319476
M_4	0.009189562601604	0.011713413988821	0.026719377211811
R_1	0.015157439562797	0.019843435288380	0.134480468852418
R_2	0.010419791038308	0.011927603933944	0.049341649503668
R_3	0.011932478368113	0.012360638838972	0.104181243618444
R_4	0.030890909064890	0.019547870253903	0.083923701514019
R_5	0.010278227880657	0.010087248576162	0.027921882140636

Fonte: Elaborada pelo autor.

feitos testes mais aprimorados tendo em conta todos os parâmetros que influenciam o erro: aproximação da função Mittag-Leffler, tempo de corte usado no cálculo dos tensores de Finger, e, o refinamento e discretizações espaciais e temporais.

Pode-se apreciar na figura 33 que, para os dois grupos de malhas descritas, existe uma boa concordância entre os resultados numéricos e as soluções semi-analíticas descritas na seção 4.3.3.

No caso das tensões, a diferença entre os resultados obtidos em malhas uniformes e malhas com diferentes graus de refinamento não é tão pronunciada, especialmente para a tensão de corte, onde os gradientes estão distribuídos de forma uniforme ao longo da transversal do

canal.

Para as tensões normais, podemos ver que junto à parede, os resultados são mais precisos com a malha que apresenta diferentes graus de refinamento.

Iremos agora mostrar os resultados obtidos para o caso em que $\alpha = 0.9$ e $\beta = 1$. Os restantes parâmetros usados nas simulações anteriores serão mantidos.

A figura 34 mostra os resultados obtidos para a velocidade e as tensões usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.9$ e $\beta = 1$. Foram consideradas quatro malhas distintas com diferentes graus de refinamento, de modo a verificar a convergência dos resultados. Como seria de esperar, os resultados são semelhantes aos resultados obtidos para o caso em que $\alpha = 1$ e $\beta = 1$. Porém, a influência do do parâmetro α é perceptível, principalmente nas tensões. Podemos observar uma redução das tensões, principalmente no centro do canal, provavelmente resultante de um perfil menos parabólico, esperado para um modelo com esta função de memória. De salientar o fato de que os erros obtidos no centro do canal são mais baixos nas tensões, o que pode mais uma vez ser justificado pelo perfil de velocidade com gradientes mais baixos nesta região do canal.

Junto à parede, já é possível ver que para diferentes malhas temos resultados ligeiramente diferentes, devido aos altos gradientes observados nesta região. O fato de usarmos um valor de $\alpha = 0.9$ contribui para o aumento do erro e uma maior dificuldade do modelo captar grandes variações.

As figuras 35 mostram os resultados obtidos para a velocidade e as tensões usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.5$ e $\beta = 1$. Foram consideradas quatro malhas distintas com diferentes graus de refinamento, de modo a verificar mais uma vez a convergência dos resultados.

Podemos observar uma redução acentuada das tensões e ainda uma ligeira redução da velocidade máxima no centro do canal.

Como seria de esperar, para o caso em que $\alpha = 0.75$ e $\beta = 1$ obtemos um resultado intermédio (ver figura 36)

A influência do parâmetro β no perfil de velocidades e tensões foi abordado nas figuras 37 e 38. São considerados dois casos: $\alpha = 0.75$ e $\beta = 1.25$; $\alpha = 1.0$ e $\beta = 1.25$.

Comparando as figuras 36 e 37 podemos ver que a influência de β é qualitativamente semelhante a α , porém, resulta em alterações menos profundas dos perfis (ver também a figura 38).

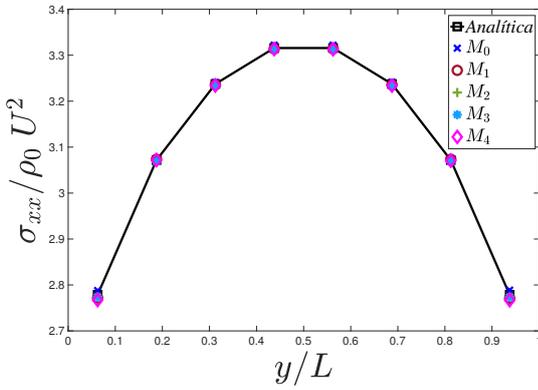
A convergência dos perfis de velocidade e tensão pode ser observada para todos os valores de α e β testados. Esses resultados podem ser observados nas pequenas figuras (dentro de cada uma das figuras maiores) que mostram uma ampliação de determinadas regiões dos perfis. A solução analítica é omitida para evitar confusão na sobreposição de dados. Porém, a solução analítica sobrepõe exatamente os resultados obtidos para a malha mais refinada.

Todos estes resultados estão de certa forma resumidos na figura 39, onde são mostrados os perfis de velocidade e tensão obtidos para as malhas mais refinadas e para diferentes valores de α (fixando $\beta = 1$). Aqui é claro que a redução de α leva a um perfil de velocidade mais achatado no centro do canal e a uma redução das tensões normais e de corte.

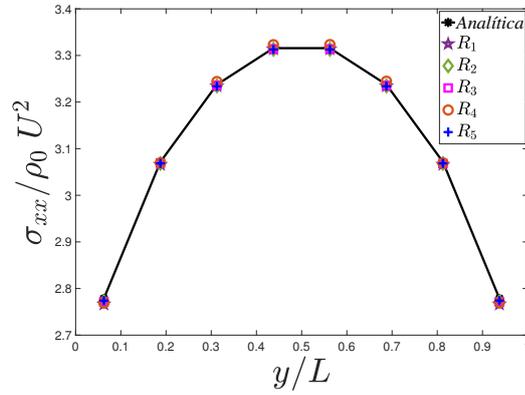
6.2.1 Conclusões

Podemos concluir que a implementação numérica se mostrou robusta. Permitindo obter resultados numéricos que convergem para a respectiva solução analítica. No entanto, esta implementação deve ser alvo de um estudo e validação mais aprofundados. O tempo computacional é muito elevado, resultando em simulações morosas, que, estão neste momento ainda a ser corridas.

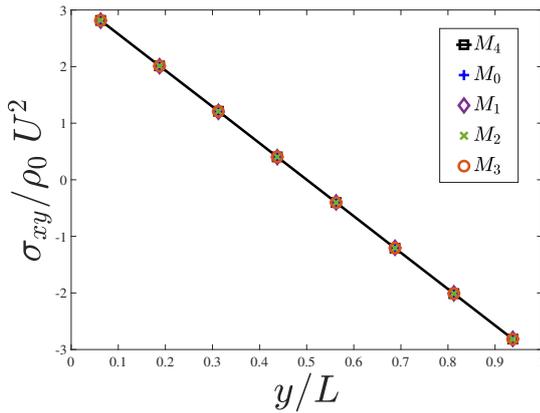
Figura 33 – Perfis de tensão obtidos numericamente com diferentes malhas e sua comparação com a solução analítica. As figuras (a), (c) e (e) mostram os resultados obtidos para malhas uniformes. As figuras (b), (d) e (f) mostram os resultados obtidos para malhas com diferentes graus de refinamento.



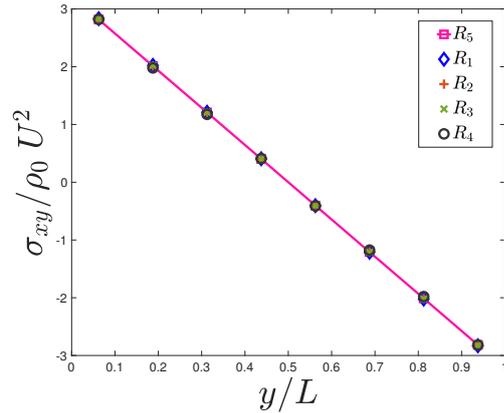
(a) σ_{xx} - malha uniforme



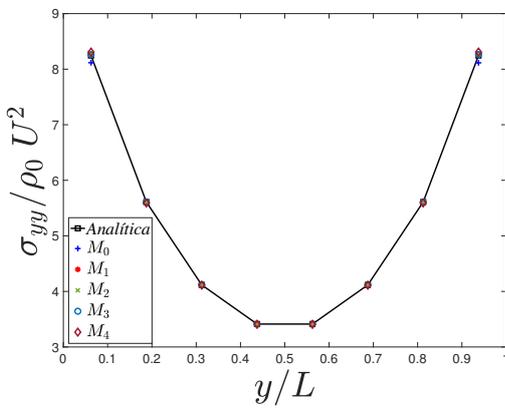
(b) σ_{xx} - malha não uniforme



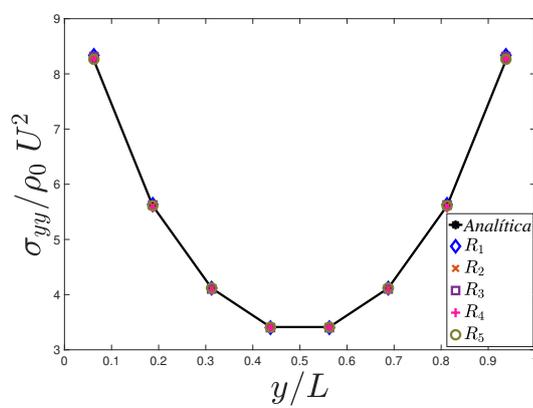
(c) σ_{xy} - malha uniforme



(d) σ_{xy} - malha não uniforme



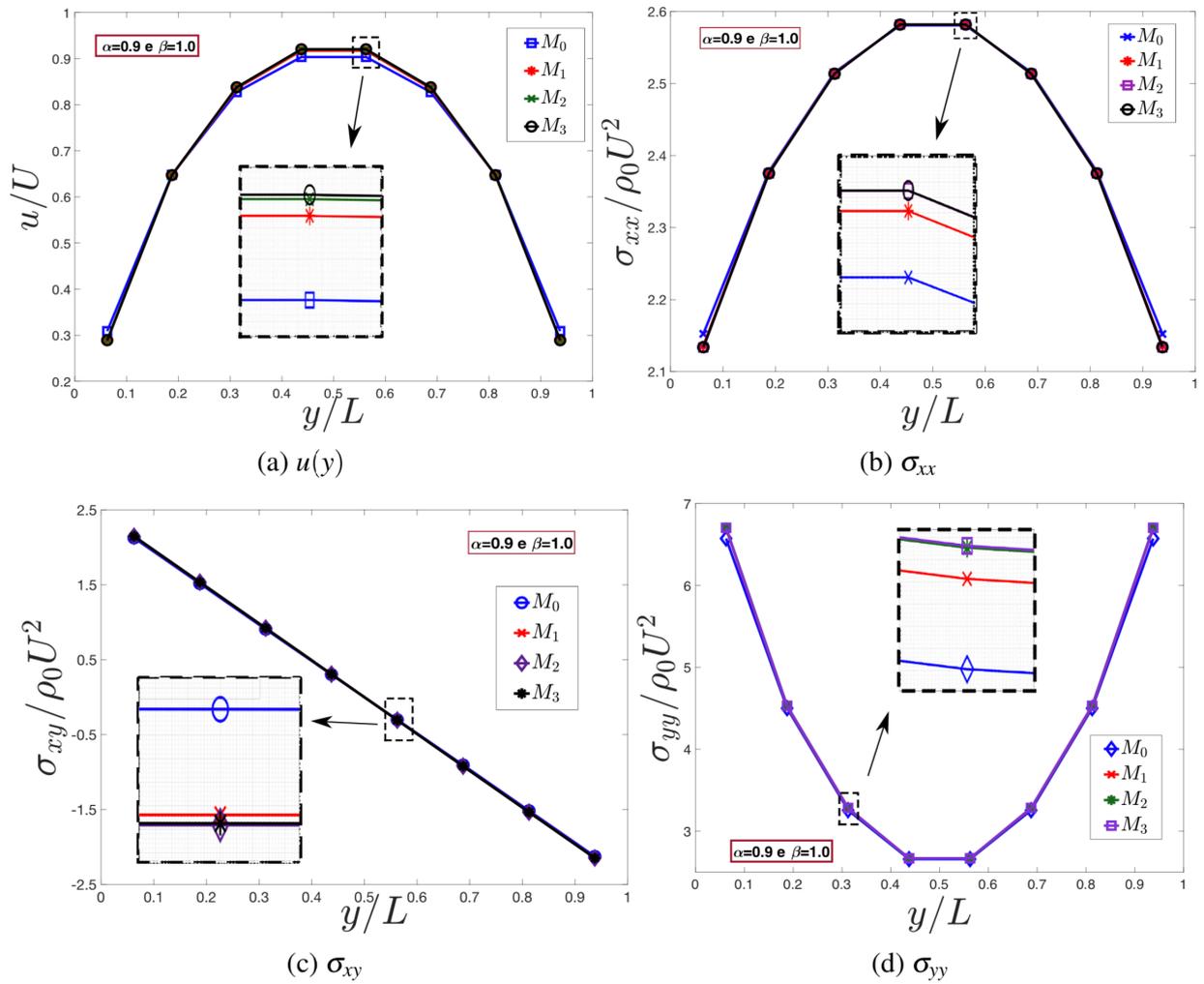
(e) σ_{yy} - malha uniforme



(f) σ_{yy} - malha não uniforme

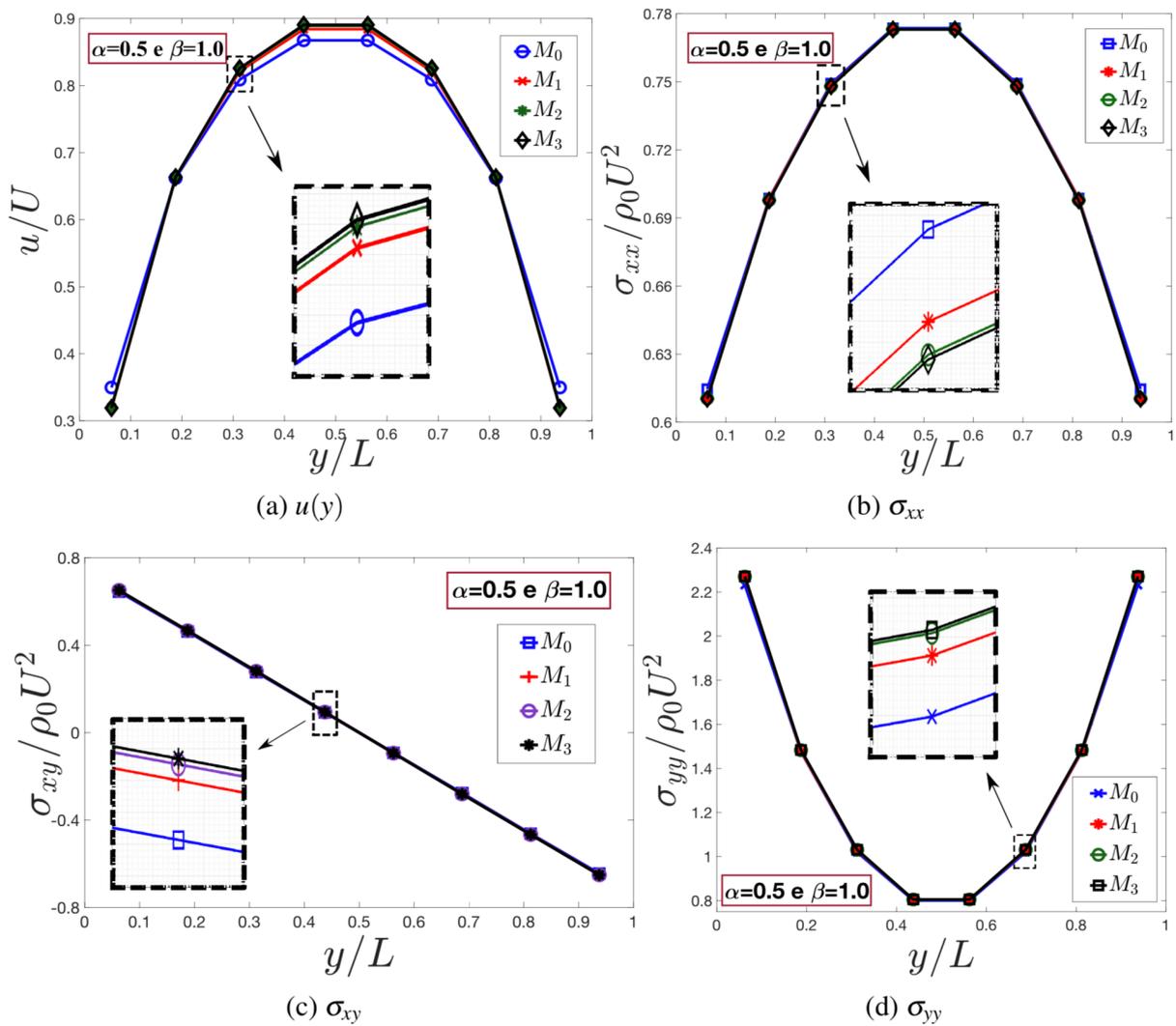
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 34 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.9$ e $\beta = 1$.



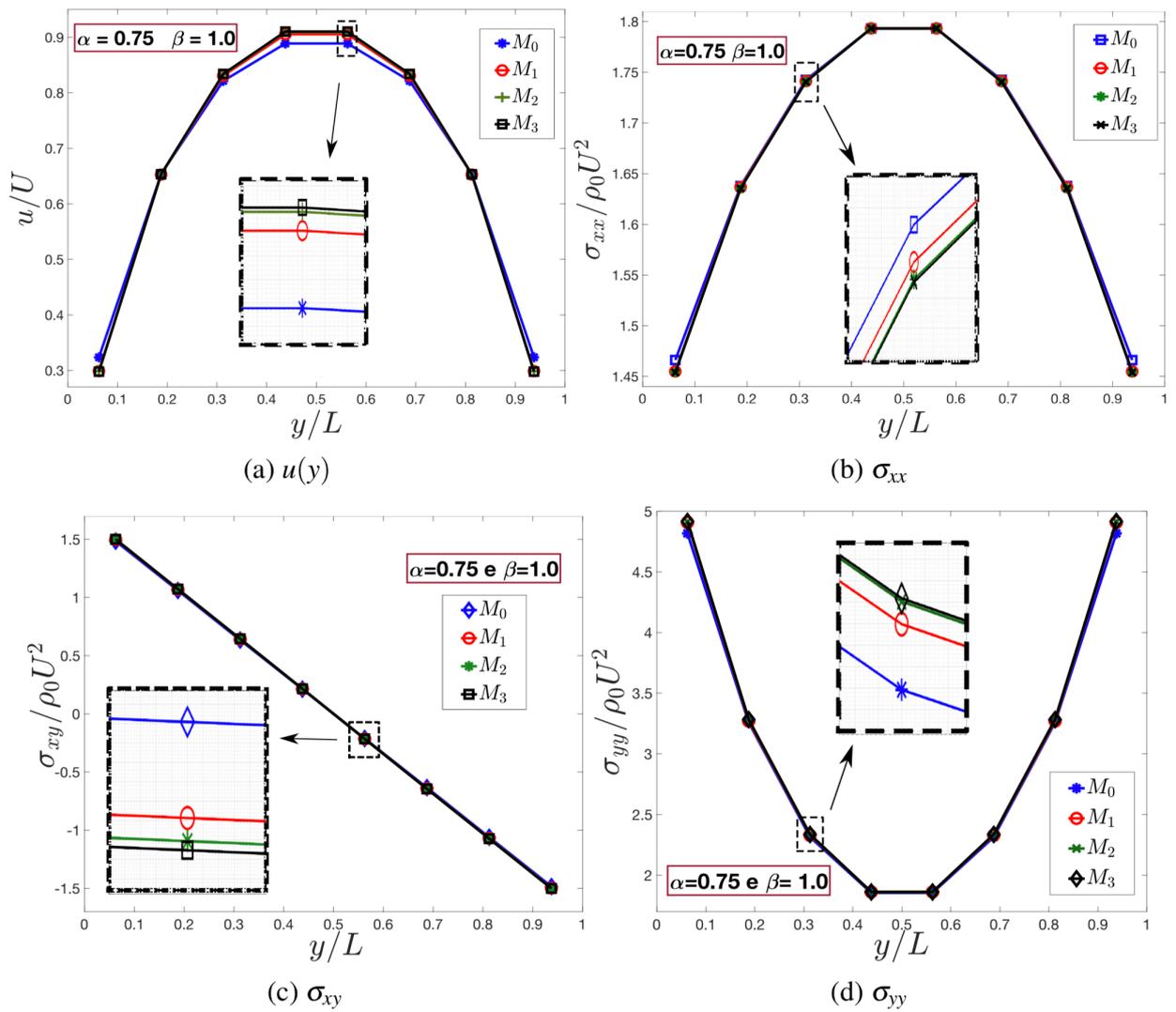
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 35 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.5$ e $\beta = 1$.



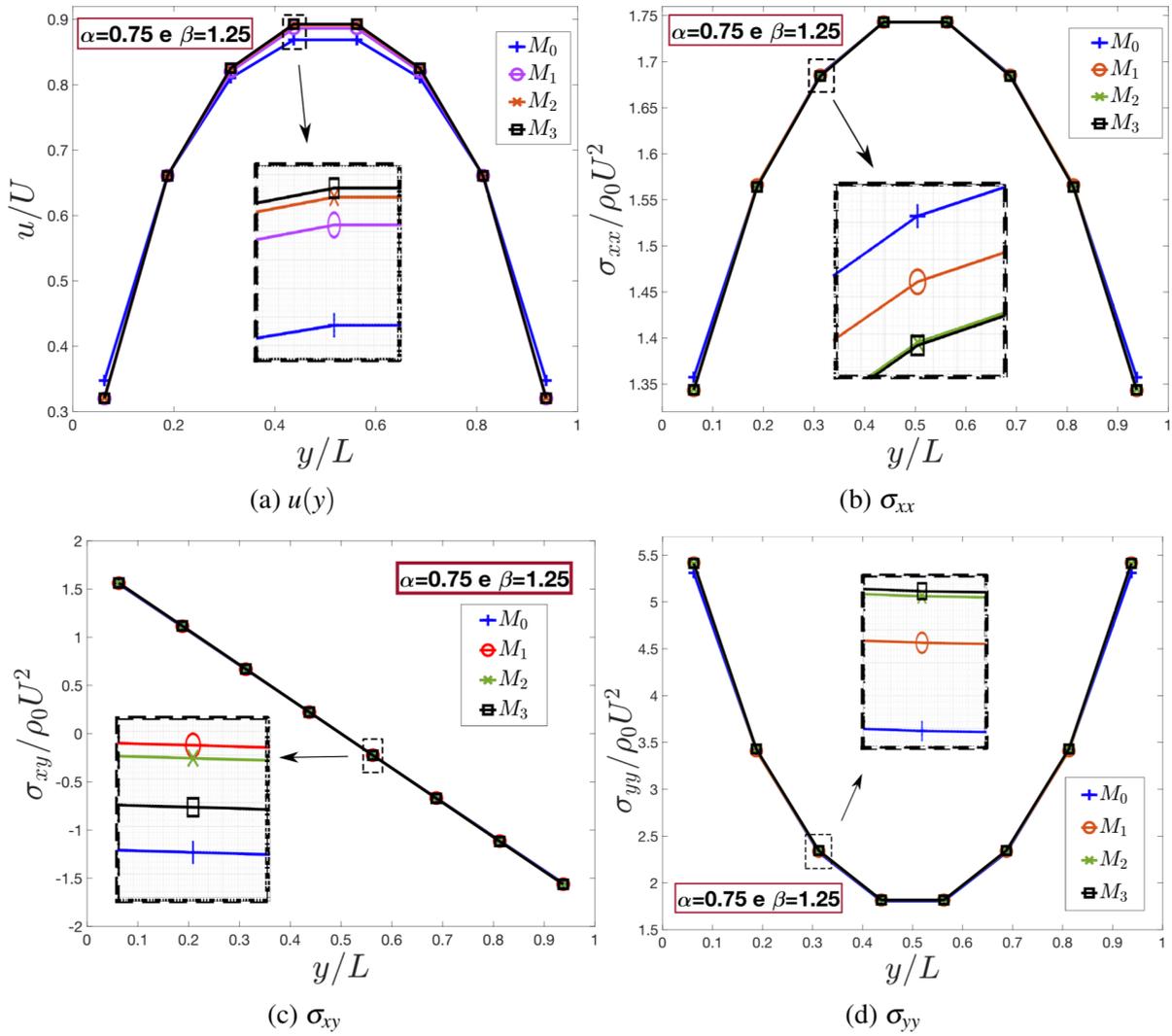
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 36 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.75$ e $\beta = 1$.



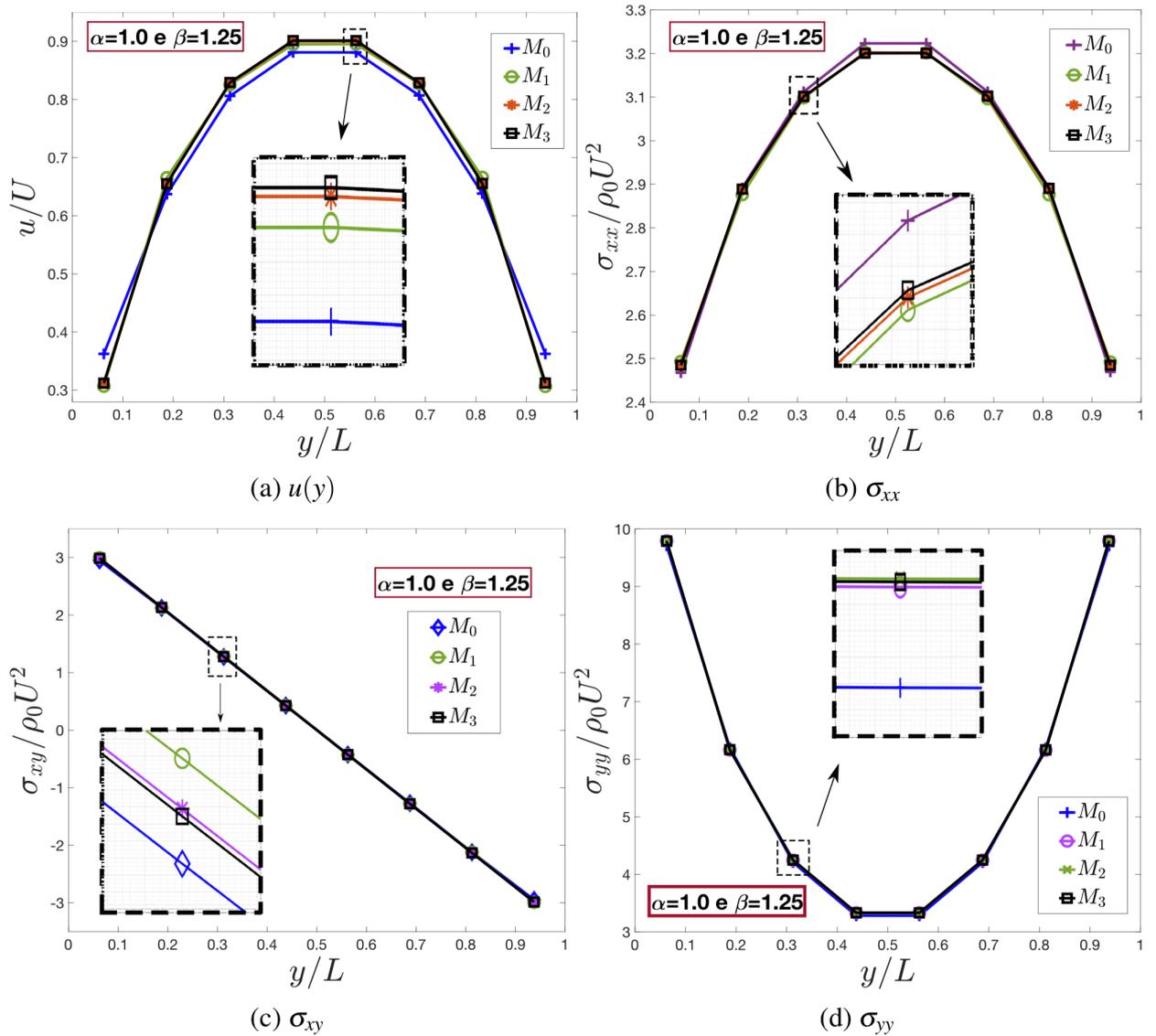
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 37 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 0.75$ e $\beta = 1.25$.



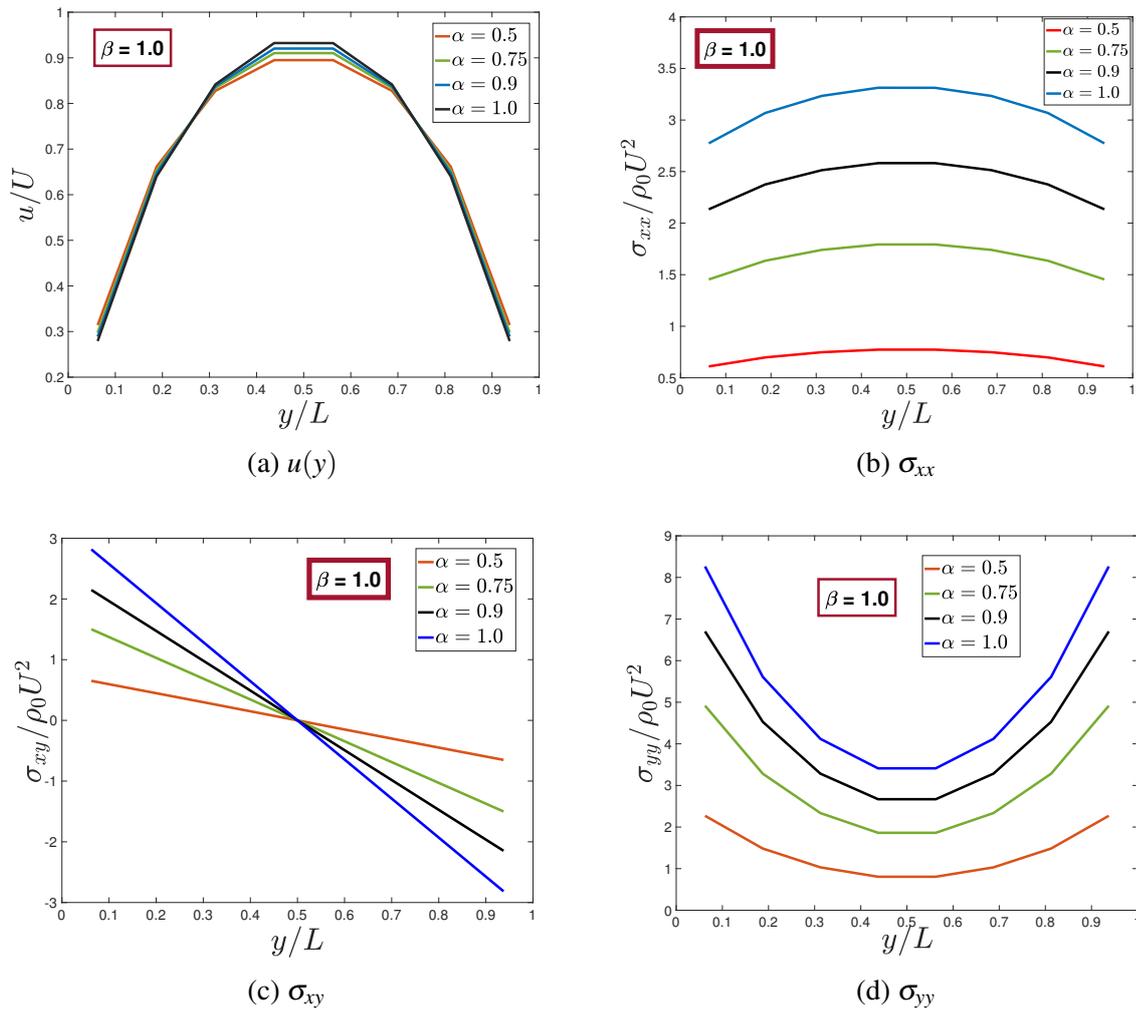
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 38 – Resultados numéricos obtidos para um escoamento entre placas paralelas usando o modelo gK-BKZ com $\alpha = 1.0$ e $\beta = 1.25$.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 39 – Comparação de resultados numéricos obtidos com o modelo gK-BKZ (num escoamento entre placas paralelas) fixando $\beta = 1.0$ e variando $\alpha \in \{0.5, 0.75, 0.9, 1.0\}$.



Fonte: Elaborada pelo autor.

CONCLUSÕES FINAIS E TRABALHO FUTURO

Nos últimos 30 anos, foram apresentados na literatura alguns modelos viscoelásticos que substituem as derivadas clássicas dos modelos tradicionais, por, derivadas fracionárias.

Estes novos modelos apresentam propriedades muito boas no que diz respeito ao ajuste a dados experimentais, mas, a grande generalidade dos modelos fracionários sofre de um problema grave: não são invariantes. Ou seja, o resultado físico obtido com esses modelos pode ser diferente para diferentes observadores. Este problema ainda não está totalmente resolvido, porém, já podemos encontrar na literatura escassos trabalhos que resolvem este problema, para modelos particulares (YANG; LAM; ZHU, 2010), ou que usam estruturas matemáticas de modelos conhecidos, para criar modelos híbridos (JAISHANKAR; MCKINLEY, 2014). Outras possíveis limitações dos modelos fracionários são: o fato de apresentarem integrais com núcleos singulares (que podem trazer problemas numéricos na sua implementação); os parâmetros/propriedades do modelo terem unidades fracionárias, resultando numa dificuldade acrescida da sua interpretação física. Este último ponto, não é visto por muitos como um problema, sendo dado o nome de *quasi-propriedade* aos novos parâmetros.

Existe ainda espaço na literatura para modelos que não usam derivadas fracionárias, mas que, possuem algumas das boas propriedades desses modelos. Isto levou à proposta de desenvolvimento desta tese, que tem os seguintes objetivos:

- o desenvolvimento de novos modelos generalizados, diferenciais e integrais, que usam as funções geradas nos modelos fracionários, mas que, não apresentam núcleos singulares, e que todos os parâmetros tenham unidades inteiras. Estes novos modelos deverão permitir obter um bom ajuste a dados experimentais;
- a implementação numérica, dos novos modelos desenvolvidos, num código numérico de

diferenças finitas e o estudo do escoamento de fluidos complexos.

A pergunta que devemos fazer é a seguinte:

Os objetivos propostos nesta tese foram atingidos?

A resposta a esta questão é ***Sim***. Iremos de seguida justificar a resposta

Nesta tese foi proposto um novo modelo PTT generalizado (gPTT) que permite um bom ajuste aos dados reológicos obtidos para polímeros fundidos e foram desenvolvidas novas soluções analíticas e semi-analíticas para escoamentos estacionários totalmente desenvolvidos em canais e tubos. Este modelo é baseado na teoria de redes moleculares, tal como o modelo PTT clássico. O novo modelo oferece uma flexibilidade constitutiva adicional que nos permite descrever escoamentos de cisalhamento estacionário e extensionais com fidelidade aprimorada usando apenas um único modo de relaxamento e 6 parâmetros totais do modelo $\eta, \lambda, \varepsilon, \alpha, \beta$ (mais ξ se uma segunda diferença de tensão normal for importante). Com modelos clássicos seriam necessários 4 ou 5 modos para obter resultados com uma precisão de ajuste semelhantes.

Baseados na teoria de Boltzmann, desenvolvemos um novo modelo viscoelástico linear do tipo Maxwell, usando a função Mittag-Leffler no módulo de relaxação. O modelo possui 4 parâmetros e permite um melhor ajuste ao módulo de armazenamento e módulo de perda de sistemas poliméricos (mesmo utilizando apenas 3 parâmetros).

Como o modelo proposto é linear, este foi aprimorado para se tornar invariante usando uma medida invariante de deformação como o tensor Finger $B(t, t')$ (em vez da deformação infinitesimal $\gamma(t, t')$). Foram desenvolvidas novas soluções semi-analíticas e feita uma comparação do seu comportamento com o comportamento do modelo de referência Upper-Convected-Maxwell, para o caso de um escoamento cisalhante e um escoamento extensional. O modelo final obtido, pode ser visto como um modelo de Lodge que usa como função memória uma combinação de funções de Mittag-Leffler. Como o modelo segue a estrutura de um modelo de Lodge, apresenta também algumas limitações que também são características do modelo de Lodge. Então, resolvemos generalizar ainda mais o modelo e usar uma nova formulação/estrutura.

O novo modelo viscoelástico não-linear é então baseado na formulação/estrutura do modelo K-BKZ-PSM, sendo designado por gK-BKZ. Neste modelo continua a ser usada uma combinação de funções Mittag-Leffler na função memória. O modelo é invariante, e faz uso do tensor Finger $B(t, t')$ juntamente com a função de decaimento de Papanastasiou-Scriven-Macosko. Foram também desenvolvidas novas soluções semi-analíticas para o escoamento entre placas paralelas.

Podemos concluir que esta primeira parte da tese permite responder de forma muito positiva ao primeiro objetivo proposto.

A segunda parte desta tese consistiu na implementação numérica dos modelos acima mencionados (modelos gPTT e gK-BKZ). A sua implementação foi feita no sistema HiG-Flow, um sistema para a simulação numérica de escoamento de fluidos monofásico e multifásicos para problemas de grande porte. Foram dados todos os detalhes da implementação e das discretizações usadas nos modelos gPTT e do modelo gK-BKZ (que engloba o modelo de Lodge com a função memória dada por uma Mittag-Leffler). De notar que a função Mittag-Leffler foi também desenvolvida e implementada no código numérico.

Por último foi feita uma validação das implementações numéricas efetuadas e foram estudados alguns casos de aplicação. Foi feito o estudo do comprimento de desenvolvimento de um fluido gPTT e foi estudado o escoamento entre placas paralelas de um fluido gK-BKZ.

Relativamente ao método numérico, podemos concluir que é robusto e permitiu fazer simulações em geometrias complexas com singularidades. Podemos então concluir que o segundo objetivo proposta nesta tese também foi atingido de uma forma bastante positiva.

Devemos no entanto realçar que, devido a tempos computacionais elevados, não foi possível fazer estudos mais complexos com o modelo gK-BKZ. Este modelo é integral, não linear, usa a metodologia dos campos de deformação, e, em cada instante de tempo tem de avaliar uma combinação de funções Mittag-Leffler, levando a tempos de computacionais elevados.

Trabalho futuro:

Como trabalho futuro iremos fazer um estudo numérico mais aprofundado do modelo gK-BKZ. Devemos começar com geometrias de *benchmark*, e, posteriormente, geometrias complexas em duas e três dimensões.

Os modelos desenvolvidos nesta tese irão ser adaptados numericamente para lidar com escoamentos bifásicos.

REFERÊNCIAS

ALVES, M.; OLIVEIRA, P.; PINHO, F. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. **International journal for numerical methods in fluids**, Wiley Online Library, v. 41, n. 1, p. 47–75, 2003. Citado nas páginas [101](#) e [104](#).

ALVES, M. A.; PINHO, F. T.; OLIVEIRA, P. J. Study of steady pipe and channel flows of a single-mode phan-thien–tanner fluid. **Journal of non-newtonian fluid mechanics**, Elsevier, v. 101, n. 1-3, p. 55–76, 2001. Citado na página [66](#).

ANSARI, M.; HATZIKIRIAKOS, S.; MITSOULIS, E. Slip effect in hdpe flows. **J. Non-Newtonian Fluid Mech.**, **167-168**, **18–29**, 2012. Citado nas páginas [15](#), [58](#) e [59](#).

BERNSTEIN, B.; KEARSLEY, E. A.; ZAPAS, L. J. A study of stress relaxation with finites strain. **Transactions of the Society of Rheology**, **Vol.7**, **pp. 391-410**, 1963. Citado na página [57](#).

BERTOCCO, J. **Solução numérica do modelo constitutivo KBKZ-PSM para escoamentos com superfícies livres**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2016. Citado nas páginas [88](#) e [103](#).

BERTOCCO, J.; ARAÚJO, M. S. de; LEIVA, R. T.; SÁNCHEZ, H. A.; CASTELO, A. Numerical simulation of kbkz integral constitutive equations in hierarchical grids. **Applied Sciences**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 11, n. 11, p. 4875, 2021. Citado na página [98](#).

BERTOCCO, J.; LEIVA, R. T.; FERRÁS, L. L.; AFONSO, A. M.; CASTELO, A. Development length of fluids modelled by the gptt constitutive differential equation. **Applied Sciences**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 11, n. 21, p. 10352, 2021. Citado nas páginas [53](#), [61](#), [106](#), [107](#), [108](#), [109](#), [110](#), [112](#) e [113](#).

BEZERRA, W. D. S.; CASTELO, A.; AFONSO, A. M. Numerical study of electro-osmotic fluid flow and vortex formation. **Micromachines**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 10, n. 12, p. 796, 2019. Citado na página [99](#).

BIRD, R.; ARMSTRONG, R.; HASSAGER, O. Dynamics of polymeric liquids. fluid mechanics, second ed., vol. i. **Wiley**, 1987. Citado nas páginas [39](#), [41](#), [43](#), [56](#), [73](#), [78](#) e [79](#).

CAPUTO, M. Linear models of dissipation whose q is almost frequency independent. **II. Geophys. J. Roy. Astron. Soc.** **13**, **529–539** (1967), reprinted in **Fract. Calc. Appl. Anal.** **11**, **4–14**, 2008. Citado na página [36](#).

CASTELO, A.; AFONSO, A. M.; BEZERRA, W. D. S. A hierarchical grid solver for simulation of flows of complex fluids. **Polymers**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 13, n. 18, p. 3168, 2021. Citado nas páginas [86](#), [95](#), [98](#), [99](#) e [101](#).

CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. **Mathematics of computation**, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968. Citado na página [100](#).

- COSTA, M. F. P.; COELHO, C.; FERRÁS, L. Optimisation approach for parameter estimation of the generalised ptt viscoelastic model. In: SPRINGER. **International Conference on Computational Science and Its Applications**. [S.l.], 2021. p. 481–494. Citado na página 53.
- DIETHELM, A. D. F. e K. Fractional calculus in biomechanics: a 3d viscoelastic model using regularized fractional derivative kernels with application to the human calcaneal fat pad. **Biomechan Model Mechanobiol**, 5, 203–215, 2006. Citado na página 57.
- DIETHELM, K. **The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition using differential operators of Caputo type**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010. Citado nas páginas 34 e 37.
- DURST, F.; RAY, S.; ÜNSAL, B.; BAYOUMI, O. The development lengths of laminar pipe and channel flows. 2005. Citado nas páginas 17, 105, 108, 109 e 110.
- FERNANDES, C.; FERRÁS, L.; ARAUJO, M.; NÓBREGA, J. Development length in planar channel flows of inelastic non-newtonian fluids. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 255, p. 13–18, 2018. Citado na página 106.
- FERRÁS, L.; MORGADO, M.; REBELO, M.; MCKINLEY, G. H.; AFONSO, A. A generalised phan–thien—tanner model. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 269, p. 88–99, 2019. Citado nas páginas 16, 17, 45, 53, 63, 64, 67, 69, 70 e 109.
- FERRÁS, L. L.; FORD, N. J.; MORGADO, M. L.; REBELO, M.; MCKINLEY, G. H.; NÓBREGA, J. M. A primer on experimental and computational rheology with fractional viscoelastic constitutive models. In: AIP PUBLISHING LLC. **AIP Conference Proceedings**. [S.l.], 2017. v. 1843, n. 1, p. 020002. Citado nas páginas 42, 55, 57, 59 e 63.
- FERRAS, L. L.; FORD, N. J.; MORGADO, M. L.; REBELO, M.; MCKINLEY, G. H.; NOBREGA, J. M. Theoretical and numerical analysis of unsteady fractional viscoelastic flows in simple geometries. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 174, p. 14–33, 2018. Citado nas páginas 53 e 77.
- FERRÁS, L. L.; MORGADO, M.; REBELO, M. A numerical method for the transient couette flow of a distributed-order viscoelastic fluid. In: SPRINGER. **International Conference on Computational Science and Its Applications**. [S.l.], 2021. p. 411–421. Citado na página 53.
- FERRÁS, L. L.; MORGADO, M.; REBELO, M.; LEIVA, R.; BERTOCO, J.; AFONSO, A.; ANTÓNIO, A. An improved integro-differential linear viscoelastic model. In: **Proceedings of the International Conference on Mathematical Analysis and Applications in Science and Engineering - ICMASC'22, 2022**. [S.l.: s.n.], 2022. Citado na página 62.
- FERRÁS, L. L.; MORGADO, M. L.; REBELO, M.; LEIVA, R. T.; CASTELO, A.; MCKINLEY, G. H.; AFONSO, A. M. Recent advances in complex fluids modeling. In: **Fluid Flow Problems**. IntechOpen, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.5772/intechopen.82689>>. Citado nas páginas 16, 53, 59, 61, 67 e 69.
- FORTUNA, A. de O. Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos. **Edusp**, 1a. ed., 2012. Citado na página 40.
- GORENFLO, R.; LOUTCHKO, J.; LUCHKO, Y. Computation of the mittag-leffler function $e_{\alpha,\beta}(z)$ and its derivative. **FRACT. CALC. APPL. ANAL**, 2002. Citado na página 102.

GUERMOND, J.-L.; QUARTAPELLE, L. On stability and convergence of projection methods based on pressure poisson equation. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, Wiley Online Library, v. 26, n. 9, p. 1039–1053, 1998. Citado na página 101.

HULSEN, M.; PETERS, E.; BRULE, B. V. D. A new approach to the deformation fields method for solving complex flows using integral constitutive equations. **Journal of non-newtonian fluid mechanics**, Elsevier, v. 98, n. 2-3, p. 201–221, 2001. Citado na página 104.

JAISHANKAR, A.; MCKINLEY, G. A fractional k-bkz constitutive formulation for describing the nonlinear rheology of multiscale complex fluids. **Journal of Rheology**, **58**, 1751-1788, 2014. Citado nas páginas 15, 53, 55, 56, 57, 58, 83 e 127.

JOSEPH, D. D. International symposium on viscoelastic fluids. **Tobago, West Indies**, 1994. Citado na página 57.

KESHAVARZ, B.; DIVOUX, T.; MANNEVILLE, S.; MCKINLEY, G. Nonlinear viscoelasticity and generalized failure criterion for polymer gels. **ACS Macro Lett.**, **6(7)**, pp 663–667, 2017. Citado na página 53.

LARSON, R. G. Constitutive equations for polymer melts and solutions. **BUTTERWORTHS SERIES IN CHEMICAL ENGINEERING**, 1988. Citado nas páginas 41 e 57.

LEONARD, B. P. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 19, n. 1, p. 59–98, 1979. Citado na página 101.

MACOSKO, C. Rheology: Principles, measurements, and application. **VCH: New York**, 1994. Citado na página 44.

METZLER, R.; KLAFTER, J. From stretched exponential to inverse power-law: fractional dynamics, cole–cole relaxation processes, and beyond. **Journal of Non-Crystalline Solids**, Elsevier, v. 305, n. 1-3, p. 81–87, 2002. Citado na página 63.

MILLER, K.; ROSS, B. An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations. **Wiley and Sons, New York**, 1993. Citado na página 29.

MITSOULIS, E. 50 years of the k-bkz constitutive relation for polymers. **International Scholarly Research Notices - Polymer Science** **2013**. Citado nas páginas 15 e 59.

MITTAG-LEFFLER, G. Sur la nouvelle fonction $e\alpha(x)$. **CR Acad. Sci. Paris**, v. 137, n. 2, p. 554–558, 1903. Citado na página 30.

MIZIARA, G. A. S. Aplicação do método vof para simulação dos escoamentos bifásicos com viscoelasticidade. **Universidade de São Paulo**, Dissertação de mestrado, 2020. Citado na página 99.

MORRISON, F. A. *et al.* **Understanding rheology**. [S.l.]: Oxford university press New York, 2001. v. 1. Citado na página 45.

NG, T. S. K.; PADMANABHAN, M.; MCKINLEY, G. H. Linear to non-linear rheology of wheat flour-water doughs,. **Appl Rheol**, **16**, 265-274, 2006. Citado na página 53.

NIELSEN, J. K.; RASMUSSEN, H. K.; HASSAGER, O.; MCKINLEY, G. H. Elongational viscosity of monodisperse and bidisperse polystyrene melts. **Journal of Rheology**, The Society of Rheology, v. 50, n. 4, p. 453–476, 2006. Citado nas páginas 16, 68 e 69.

- OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T. Analytical solution for fully developed channel and pipe flow of Phan-Thien–Tanner fluids. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 387, p. 271–280, 1999. Citado nas páginas 70 e 71.
- PAPANASTASIOU, A. C.; SCRIVEN, L.; MACOSKO, C. An integral constitutive equation for mixed flows: Viscoelastic characterization. **Journal of Rheology**, 27, pp. 387–410, 1983. Citado na página 49.
- PHAN-THIEN, N. A nonlinear network viscoelastic model. **Journal of Rheology**, SOR, v. 22, n. 3, p. 259–283, 1978. Citado nas páginas 15, 39, 45, 62, 63, 64, 65, 66 e 67.
- PODLUBNY, I. **Fractional Differential Equations**. [S.l.: s.n.], 1999. Citado nas páginas 29, 53, 57, 63 e 64.
- POLLARD, H. The completely monotonic character of the Mittag-Leffler function $e_{\alpha}(-x)$. **Bulletin of the American Mathematical Society**, American Mathematical Society, v. 54, n. 12, p. 1115–1116, 1948. Citado na página 74.
- POOLE, R. J.; RIDLEY, B. S. Development-length requirements for fully developed laminar pipe flow of inelastic non-Newtonian liquids. **Journal of Fluids Engineering**, ASME International, v. 129, n. 10, p. 1281–1287, abr. 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1115/1.2776969>>. Citado na página 106.
- QUINZANI, L. M.; ARMSTRONG, R. C.; BROWN, R. A. Birefringence and laser-doppler velocimetry (ldv) studies of viscoelastic flow through a planar contraction. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 52, n. 1, p. 1–36, 1994. Citado nas páginas 16 e 67.
- RIVLIN, R. S.; SAWYERS, K. N. Nonlinear continuum mechanics of viscoelastic fluids. **Ann. Rev. Fluid Mech.**, 3, p. 117, 1971. Citado na página 48.
- SAMKO, S.; KILBAS, A.; MARICHEV, I. Fractional integrals and derivatives: Theory and applications. **Gordon and Breach, Yverdon**, 1993. Citado na página 29.
- SCHIESSEL, H.; ALEMANY, P.; BLUMEN, A. Dynamics in disordered systems. **Progr. Colloid. Polym. Sci.** 96, 16-21, 1994. Citado na página 54.
- SCHIESSEL, H.; BLUMEN, A. Hierarchical analogues to fractional relaxation equations. **Journal of Physics A: Mathematical and General** 26, 5057-5069, 1993. Citado na página 54.
- SCHIESSEL, H.; METZLER, R.; BLUMEN, A. T.f. nonnenmacher, generalized viscoelastic models: their fractional equations with solutions. **Journal of physics A: Mathematical and General** 28, 6567-6584, 1995. Citado na página 54.
- SCHNEIDER, W. R. Completely monotone generalized Mittag-Leffler functions. **Expositiones Mathematicae**, SPEKTRUM AKADEMISCHER VERLAG, v. 14, p. 3–24, 1996. Citado na página 74.
- SILVA, A. T. G. d. Desenvolvimento da técnica plic-vof no sistema hig-flow para simulação de escoamentos bifásicos. **Universidade de São Paulo**, Dissertação de mestrado, 2020. Citado na página 99.

- SOUSA, F. S.; LAGES, C.; ANSONI, J. L.; CASTELO, A.; SIMAO, A. A finite difference method with meshless interpolation for incompressible flows in non-graded tree-based grids. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 396, p. 848–866, 2019. Citado nas páginas 86, 95, 98, 99 e 101.
- TANNER, R.; HUILGOL, R. On a classification scheme for flow fields. **Rheologica Acta**, Springer, v. 14, n. 11, p. 959–962, 1975. Citado na página 62.
- THIEN, N. P.; TANNER, R. I. A new constitutive equation derived from network theory. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 2, n. 4, p. 353–365, 1977. Citado nas páginas 39, 45 e 62.
- TOMÉ, M. F.; ARAUJO, M. S. B. de; ALVES, M. A.; PINHO, F. Numerical simulation of viscoelastic flows using integral constitutive equations: A finite difference approach. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 227, n. 8, p. 4207–4243, 2008. Citado na página 104.
- TOMÉ, M. F.; BERTOCO, J.; OISHI, C. M.; ARAUJO, M.; CRUZ, D.; PINHO, F.; VYNNYCKY, M. A finite difference technique for solving a time strain separable k-bkz constitutive equation for two-dimensional moving free surface flows. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 311, p. 114–141, 2016. Citado nas páginas 91 e 103.
- TRUESDELL, C. The elements of continuum mechanics. **Springer-Verlag**, 1966. Citado na página 49.
- WAGNER, M. H. Analysis of time-dependent non-linear stress-growth data for shear and elongational flow of a low-density branched polyethylene melt. **Rheologica Acta**, 15, 136–142, 1976. Citado na página 57.
- WAGNER, M. H.; RAIBLE, T.; MEISSNER, J. Tensile stress overshoot in uniaxial extension of a ldpe melt. **Rheologica Acta** 18 427–428, 1979. Citado na página 57.
- WIMAN, A. Über den fundamentalsatz in der theorie der funktionene a (x). **Acta Mathematica**, Springer, v. 29, n. 1, p. 191–201, 1905. Citado na página 31.
- YANG, P.; LAM, Y. C.; ZHU, K.-Q. Constitutive equation with fractional derivatives for the generalized UCM model. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier BV, v. 165, n. 3-4, p. 88–97, fev. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2009.10.002>>. Citado nas páginas 26, 45, 56, 77 e 127.

