

Universidade Federal do Ceará



Apiano Ferreira de Moraes Neto

**Escoamento de fluidos complexos e transporte
de partículas em geometrias irregulares**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da
Matéria Condensada do Departamento de Física da UFC como
requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física da
Matéria Condensada

Orientador: Prof. José Soares de Andrade Junior

Fortaleza
Abril de 2011

Universidade Federal do Ceará



Apiano Ferreira de Moraes Neto

**Escoamento de fluidos complexos e transporte
de partículas em geometrias irregulares**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Matéria Condensada do Departamento de Física do Centro de Ciências da UFC como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Física da Matéria Condensada. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. José Soares de Andrade Junior

Orientador

Departamento de Física — UFC

Prof. Josué Mendes Filho

Chefe do Departamento de Física — UFC

Fortaleza, 14 de Abril de 2011

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Apiano Ferreira de Morais Neto

Graduou-se em Física na Universidade Federal do Ceará (UFC). Obteve o grau de mestre em ciências pela UFC em 2006. Trabalhou como professor substituto no Departamento de Física da UFC entre 2005-2007 e no departamento de física da Universidade Estadual do Ceará (UECE) entre 2009-2010. Durante parte do seu período de doutoramento, esteve no Instituto de Tecnologia de Zurique (ETH) na Suíça sob a supervisão do prof. Dr. Hans J. Herrmann a fim de desenvolver parte do trabalho apresentado nesta tese. Atualmente é professor assistente do departamento de física da Universidade Regional do Cariri (URCA).

Ficha Catalográfica

Morais, Apiano F.

M825e Escoamento de fluidos complexos e transporte de partículas em geometrias irregulares / Apiano Ferreira de Morais Neto— Fortaleza2011.

xv, 131 f: il. color; 29,7 cm, enc.

Orientador: José Soares de Andrade Junior.

Tese (doutorado) - Universidade Federal do Ceará, Fortaleza , 2011.

1. Física – Tese. 2. Fenômenos de Transporte. 3. Dinâmica de Fluidos. 4. Fluidos não-Newtonianos. I. Andrade Jr., José S.. II. Universidade Federal do Ceará. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 530.475

Agradecimentos

Agradeço à minha mãe, meu amor e meus amigos que sem eles nada teria sentido.

Agradeço ao meu orientador o Professor José Soares de Andrade Junior pela paciência e os ensinamentos neste longo período de quatro anos.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq pelo suporte financeiro através da concessão da bolsa de doutoramento.

Resumo

Morais, Apiano F.; Andrade Jr., José S.. **Escoamento de fluidos complexos e transporte de partículas em geometrias irregulares**. Fortaleza, 2011. 131p. Tese de Doutorado — Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará.

Neste trabalho, foram estudados vários tipos de escoamentos laminares de fluidos incompressíveis Newtonianos e não-Newtonianos. Isto foi feito através do estudo da interação destes escoamentos com geometrias complexas através de modelagem computacional e da solução numérica das equações de conservação do momento e continuidade de massa. Numa primeira etapa, a modelagem computacional de uma rede de poros foi usada para a gerar padrões de agregados granulares resultando de mecanismos de erosão-deposição de grãos leves. A geometria da rede de poros foi alterada dinamicamente de acordo com a transferência de momento do escoamento para as partículas localizadas em cada vértice da rede de poros. Os resultados mostraram que, para esse processo irreversível, o modelo foi capaz de reproduzir padrões típicos de processos de erosão bem-conhecidos. Numa segunda etapa, um separador de partículas semelhante à estrutura pulmonar foi proposto com base nas propriedades de escoamento em uma estrutura ramificada e nas propriedades de transporte inercial das partículas, quantificadas através do número de Stokes. Os resultados indicaram que a variação dos parâmetros de construção da estrutura ramificada leva a um regime eficiente do processo de separação em um amplo espectro de valores do número de Stokes. Por último, o escoamento de vários fluidos não-Newtonianos através de meios porosos desordenados em três-dimensões foi estudado. Os resultados mostraram, para fluidos do tipo lei-de-potência, que o escoamento pode ser descrito como uma curva universal se o número de Reynolds e a permeabilidade hidráulica forem redefinidos de maneira apropriada. Fluidos de Bingham também foram estudados através do modelo de Herschel-Bulkley. Neste caso, as simulações revelaram que as interações entre a geometria complexa do espaço poroso, as propriedades reológicas do fluido e os efeitos inerciais do escoamento são responsáveis por uma melhora substancial da permeabilidade hidráulica do sistema em valores intermediários do número de Reynolds.

Palavras-chave

Fenômenos de Transporte. Dinâmica de Fluidos. Fluidos não-Newtonianos.

Abstract

Morais, Apiano F.; Andrade Jr., José S.. **Complex fluid flows and particle transport in irregular geometries.** Fortaleza, 2011. 131p. PhD Thesis — Department of Física, Universidade Federal do Ceará.

In this work many types of incompressible laminar Newtonian and Non-Newtonian flows are studied. The interplay of these flows with complex geometries was investigated using computational modeling and numerical solution of the conservation of momentum and mass continuity equations. As a first step, the computational modeling of a network of pores was adopted to reveal the formation patterns caused by the mechanism of erosion-deposition of light grains. The geometry of the pore network was changed dynamically according to the flow momentum transfer for particles located on each vertex of the pore network. The results showed that, for this irreversible processes, the model is capable of reproducing patterns of formation of well-known erosion processes. In a second step, a particle separator inspired on the lung structure was proposed based on the flow properties in a branched structure and transport of inertial particles, quantified in terms of the Stokes number. The results indicated that the variation of construction parameters of the branched structure leads to an efficient design of the separation process in a wide range of values of the Stokes number. Finally, the flow of non-Newtonian fluids through three-dimensional disordered porous media has been studied. The results showed, for power-law fluids that the flow can be described as a universal curve if the Reynolds number and the hydraulic permeability are redefined properly. The flow of Bingham fluids was also studied using the model of Herschel-Bulkley. In this case, the simulations showed that the interaction between the complex geometry of the pore space, the rheological properties of the fluid and the inertial effects of the flow is responsible for a substantial improvement of the hydraulic permeability of the system at intermediate values of the Reynolds number.

Keywords

Transport Phenomena. Fluid Dynamics. Non-Newtonian Fluids.

Sumário

1	Introdução	1
2	Teoria	10
2.1	Equações básicas da dinâmica de fluidos	10
2.2	Forças num elemento de fluido	13
2.3	Equações de Navier-Stokes	19
2.4	Escoamento Capilar	25
2.5	Fluidos não-Newtonianos	28
2.6	Métodos Numéricos para Problemas de Dinâmica de Fluidos	39
3	Transporte de Partículas em Fluidos	49
3.1	Transporte de partículas em Fluidos Newtonianos	49
3.2	Transporte de Partículas numa Estrutura Ramificada	56
3.3	Modelo matemático para o transporte de partículas	69
4	Escoamento através de Meios Porosos	77
4.1	Contexto	77
4.2	Caracterização de meios porosos	77
4.3	Modelos para representação do espaço poroso	79
4.4	Lei de Darcy	83
4.5	Fluidos não-Newtonianos	86
5	Conclusões e Perspectivas	94
	Referências Bibliográficas	96
A	Equações Constitutivas	106
B	Tensor de Permeabilidade	109
C	Lista de Símbolos Utilizados	111
D	Artigos Publicados	114

Lista de figuras

- 1.1 Micrografia eletrônica colorida mostra células ósseas aderindo ao cimento de fosfato de cálcio (CPC). *In:* (Bur05) 6
- 2.1 Partícula de fluido localizada em \vec{r} movendo-se com velocidade \vec{u} no espaço \mathcal{D} . 11
- 2.2 Simulação computacional obtida com o software FLUENT de um corpo de forma arbitrária movendo-se num fluido Newtoniano incompressível com $Re \ll 1$. As condições de contorno na direção do escoamento são velocidade constante na zona mais à esquerda, pressão zero na zona mais à direita e periódicas nas zonas perpendiculares ao escoamento. Em (a), pormenor das linhas de corrente do fluido em torno do corpo; em (b), pormenor dos vetores do campo de velocidades. 17
- 2.3 Dois elementos de fluido movendo-se rente a uma superfície S . 19
- 2.4 Experimento clássico de Osborne Reynolds para classificação dos escoamentos. Neste experimento, um tubo de vidro é preenchido com um fluido Newtoniano onde um gradiente de pressão faz com que haja um escoamento. Uma fina agulha injeta no eixo central do tubo um outro líquido de propriedades físicas semelhantes ao outro fluido, apenas para visualização da trajetória das partículas do fluido injetado (e). Através deste experimento, Reynolds caracteriza (a) o escoamento laminar estacionário ($Re \ll 1$), (b) o escoamento ainda laminar mas transiente ($Re \sim 1$), (c) o escoamento turbulento próximo ao número de Reynolds crítico ($Re \sim Re_C$) e (d) o escoamento puramente turbulento ($Re \gg Re_C$). 23
- 2.5 Um força constante F é aplicada tangencialmente à área de superfície A ocasionando um deslocamento δx da lâmina a uma velocidade U relativa a uma lâmina paralela estacionária distante h , em $y = 0$. Se o fluido for dito Newtoniano, uma grandeza chamada de viscosidade poderá ser definida através da equação 2-57. 25
- 2.6 Estrutura molecular de duas substâncias formadas pelos mesmos elementos: Em (a), estrutura cristalina e em (b) uma estrutura amorfa ou vítrea. Sólidos vítreos apresentam propriedades de escoamentos em escalas de tempo geológicas. 29
- 2.7 Curvas de τ contra $\dot{\gamma}$ (a) para um plástico de Bingham ideal, (b) para um fluido de Herschel-Bulkley, (c) para um pseudo-plástico ideal e (d) para um pseudo-plástico de Ostwald. 33
- 2.8 Curva de τ contra $\dot{\gamma}$ para um material do tipo *shear thickening* 34
- 2.9 Viscosidade aparente de uma solução aquosa polimérica (poliacrilamida) em função da taxa de deformação. A viscosidade aparente foi obtida com diferentes tipos de viscosímetros: Brookfield, Cone e Placa e viscosímetro capilar. Adaptado de (Chh07). 35
- 2.10 Magnitude da velocidade u_z normalizada por u_0 no escoamento de Poiseuille contra r/r_0 para vários fluidos do tipo lei-de-potência, onde r_0 é o raio do tubo. 38

- 2.11 Diagrama de escoamento capilar para o plástico de Bingham ideal. 39
- 2.12 Várias discretizações de uma mesma geometria. Em (a), a geometria é discretizada usando uma rede retangular estruturada de comprimento Δx fixo nas fronteiras; em (b), a discretização é retangular, porém o comprimento nas fronteiras não é o mesmo; em (c), a geometria é discretizada através de uma rede não estruturada de comprimento variável nas fronteiras; em (d), a discretização é não estruturada e uma adaptação nas fronteiras é feita de tal modo a dar ênfase de qualidade naquela região. Em (c) e (d) a geometria é discretizada através de redes retangulares e triangulares. Estas discretizações foram obtidas usando o programa de computador GAMBIT. 42
- 2.13 Em (a) são apresentados exemplos de elementos básicos que discretizam um sistema em duas (triângulo e retângulo) e três dimensões. Na figura (b) o elemento triangular é apresentado num sistema de coordenadas cartesiano. As áreas A_1 , A_2 e A_3 são utilizadas para o cálculo através das coordenadas naturais. A localização dos pontos 1, 2 e 3 são (x_1, y_1) , (x_2, y_2) e (x_3, y_3) , respectivamente. 45
- 2.14 Discretização quadrada do problema para o cálculo da função χ através da técnica de diferenças finitas. Em (b), a borda é irregular tal que o valor de $\chi_{i,j}^{k+1}$ deve ser calculado com o valor de $\chi_{i,j}^k$ e dos quatro vizinhos mais próximos: $\chi_{i-1,j}^k$, $\chi_{i+\alpha,j}^k$, $\chi_{i,j-\beta}^k$ e $\chi_{i,j+1}^k$ através das equações . 46
- 3.1 Um corpo de forma arbitrária movendo-se num fluido Newtoniano incompressível com $Re \ll 1$. As condições de contorno na direção do escoamento são velocidade constante na zona de cima, pressão zero na zona de baixo e periódicas nas zonas perpendiculares ao escoamento. Em (a), o campo de pressão do escoamento, onde a pressão cresce do azul para o vermelho e em (b), um pormenor das iso-linhas de tensão de cisalhamento, τ , no corpo, que também crescem do azul para o vermelho. A diferença de pressão no corpo leva ao arrasto de forma e ao somatório das tensões no corpo leva ao arrasto de atrito. 51
- 3.2 Vetores do campo de velocidades de um fluido Newtoniano incompressível em torno de um objeto de forma arbitrária movendo-se nele (ver figura 3.1) com $Re = 100$. Note os vórtices formados atrás do corpo, os quais dão origem ao arrasto induzido. 52
- 3.3 Comportamento do fluido ao passar por um cilindro liso. (a) Escoamento laminar ($Re < 1$), (b) escoamento laminar, mas com surgimento de vórtices próximos ao cilindro ($1 < Re < 10^3$), (c) escoamento com esteira de vórtices atrás do corpo ($10^3 < Re < 10^5$) e (d) escoamento puramente turbulento ($Re > 10^5$). 53
- 3.4 Coeficiente de arrasto, C_D , contra o número de Reynolds, Re , para uma esfera movendo-se num fluido Newtoniano. O comportamento de cada regime do escoamento é descrito na figura 3.3. 54

- 3.5 O separador de partículas consiste de uma cascata de cilindros formando uma estrutura ramificada em três dimensões. Um estrutura de árvore dicotômica com quatro gerações é mostrada na figura. Tanto o ângulo de bifurcação, $\alpha = 60^\circ$, quanto o ângulo azimutal, $\phi = 90^\circ$, são os mesmos em todas as bifurcações posteriores. O fator de crescimento dos comprimentos e raios subsequentes é dado por h . No pormenor, é mostrada a discretização não-estruturada do separador 58
- 3.6 Esboço esquemático da probabilidade de uma partícula impingindo numa parede sólida num ângulo θ_- e deixando a fronteira a um ângulo θ_+ dentro de um ângulo sólido $d\Omega$. 61
- 3.7 Representação da reflexão não especular de uma partícula impingindo numa superfície rugosa. α_- é o ângulo de incidência, que numa reflexão especular seria igual ao ângulo de reflexão. Entretanto α_+ é o ângulo de reflexão aparente, devido às imperfeições da superfície. 62
- 3.8 (a) Estrutura ramificada com quatro gerações e suas oito saídas. (b) Histograma da percentagem de partículas deixando a estrutura por cada uma das saídas da figura em (a) para diferentes valores do número de Stokes. (c) Distribuição de partículas deixando a estrutura ramificada em duas saídas (uma mais central, a saída 3, e, a outra periférica, a saída 1) como função do número de Stokes, para $\alpha = 90^\circ$ e $Re = 50$. 63
- 3.9 Trajetória de dez partículas projetadas na seção transversal de uma estrutura ramificada com paredes lisas com $\alpha = 60^\circ$ e $\phi = 0^\circ$ para diferentes valores do número de Stokes da injeção: (a) $St = 5.9 \times 10^{-6}$, (b) $St = 0.24$ e (c) $St = 3.78$. 65
- 3.10 Em (a), é mostrado o número percentual de partículas, n_c , retiradas da estrutura pelas quatro saídas mais centrais em função do número de Stokes, St , para diferentes valores do ângulo azimutal ϕ . Aqui, $\alpha = 60^\circ$ e $h \approx 0.79$. Em (b), o valor máximo do percentual para cada curva na figura (a) em função de ϕ . Na figura interior, é mostrada a dependência do $\log St_C$ em função de ϕ . 66
- 3.11 Geometria das estruturas ramificadas propostas com quatro gerações: em (a), $\phi = 0^\circ$, e, em (b), $\phi = 90^\circ$. Aqui $\alpha = 60^\circ$ e $h \approx 0.79$. As quatro saídas centrais são assinaladas nas duas figuras. 67
- 3.12 Em (a), é mostrado número percentual de partículas retiradas da estrutura pelas quatro saídas mais centrais em função do número de Stokes, St , para diferentes valores do ângulo α . Aqui, $\phi = 90^\circ$ e $h \approx 0.79$. Em (b), o valor máximo do percentual para cada curva na figura (a) em função de α . Na figura interior, é mostrada a dependência do $\log St_C$ em função de α . 67

- 3.13 Em (a), é apresentado o número percentual de partículas retiradas da estrutura pelas quatro saídas mais centrais em função do número de Stokes, St , para diferentes valores de h . Aqui, $\alpha = 60^\circ$ e $\phi = 90^\circ$. Em (b), o valor máximo do percentual para cada curva na figura (a) em função de h . Na figura interior, é mostrada a dependência do $\log St_C$ em função de h . 68
- 3.14 (a) Configuração inicial típica da posição dos grãos de uma rede aleatória triangularizada com 64 partículas. (b) O mosaico de Voronoi correspondente. 70
- 3.15 Canal capilar empregado no modelo entre duas partículas de diâmetro d e separação ℓ_i no mosaico de Voronoi, em (a), e, em (b), a seção reta correspondente do canal caracterizada pelo raio hidráulico R_H . 71
- 3.16 Permeabilidade hidráulica κ normalizada por κ_0 em função da razão $L_{i,j}/d$ para a configuração da figura 3.15-(a). Aqui, κ_0 é a permeabilidade de um canal com $L_{i,j}/d = 1$. A linha sólida é uma interpolação de uma polinomial cúbica dos dados obtidos da solução numérica das equações de Navier-Stokes. Esta função cúbica é utilizada modelo de rede de poros. 73
- 3.17 Configuração final do sistema para porosidades $\phi = 0.57$, em (a), $\phi = 0.71$, em (b) e $\phi = 0.80$, em (c), após 15000 passos de interação. O arranjo dos grãos em determinadas posições dão origem a padrões característicos que dependem fortemente de ϕ . 74
- 3.18 Histograma do ângulo de contato, α , entre os grãos em contato para sistemas com porosidades $\phi = 0.57$, em (a), $\phi = 0.71$, em (b) e $\phi = 0.80$, em (c). Foram feitas cinco realizações para cada sistema. 75
- 3.19 Permeabilidade hidráulica global, κ , normalizada pelo valor da permeabilidade global para $\phi = 0.48$, κ_0 , em função da porosidade da amostra ϕ . A linha sólida representa o ajuste a uma função do tipo $\frac{\kappa}{\kappa_0} = a\phi^b$, com $a = 21.5 \pm 0.5$ e $b = 4.0 \pm 0.5$. 76
- 4.1 Diagrama esquemático de uma configuração do espaço poroso construído com o Modelo do Queijo Suíço para um meio onde $\varepsilon = 0.5$. As zonas auxiliares no início e fim do meio poroso facilitam a obtenção da solução numérica com custo computacional menor. Na superfície de entrada a condição de contorno é de fluxo constante com velocidade u_0 , na superfície de saída a pressão é nula e as condições de contorno para as superfícies laterais é de periodicidade. A condição de contorno no meio poroso é de não deslizamento. As cores nas superfícies laterais representam a magnitude de velocidades crescendo do azul para o vermelho. 82
- 4.2 Plano de corte longitudinal da discretização do meio poroso confeccionado com o Modelo do Queijo Suíço para uma porosidade $\varepsilon = 0.5$. O pormenor mostra a qualidade do *grid* em regiões próximas das bordas. O número de vértices utilizados na discretização desta amostra é em torno de 6×10^6 . 83

- 4.3 Experimento realizado por Henry Darcy para determinação da permeabilidade hidráulica. A água contida no reservatório superior é acelerada para baixo devido a diferença de pressão ocasionada pela gravidade. Ao passar pelo filtro de areia de área de seção reta A e comprimento L , a água sofre uma resistência a sua passagem devido às confluências e divergências do espaço de poros do filtro. A taxa com que a massa d'água deixa o filtro, Q , é medida no reservatório inferior e relacionada com a queda de pressão ao longo do filtro, sua área transversal e a viscosidade da água. 84
- 4.4 Fator de fricção em função do número de Reynolds para escoamentos através de meios porosos com ε igual a 0.7, 0.8 e 0.9. Foram realizadas mais de cinco realizações para cada curva de escoamento, onde os parâmetros α e β da equação de Forchheimer foram estimados. As barras de erro são menores que os símbolos. A linha tracejada mostra o comportamento da lei de Darcy: $fRe = C$. Figura retirada de (And99). 86
- 4.5 Simulação do escoamento de um fluido do tipo lei-de-potência através de uma realização do espaço poroso construído com o Modelo de Queijo Suíço ($\varepsilon = 0.7$). As linhas sólidas com setas correspondem às linhas de correntes no escoamento e os planos com linhas de contorno representam a magnitude da velocidade em cada seção reta do meio poroso. A velocidade cresce do azul para o vermelho. 87
- 4.6 Permeabilidade hidráulica clássica ($Ku_0L/\Delta p$) contra o valor da velocidade média na entrada do meio poroso para simulação numérica do escoamento de vários fluidos do tipo de lei-de-potência ($\frac{1}{2} \leq n \leq 2$) num meio construído com o Modelo de Queijo Suíço ($\varepsilon = 0.7$). 88
- 4.7 Ajuste dos dados do escoamento de fluidos do tipo lei-de-potência através da equação de permeabilidade de Bird, Stewart e Lightfoot, para dois meios com porosidades $\varepsilon = 0.5$ e $\varepsilon = 0.7$. Os parâmetros de ajuste para cada meio poroso foram $D/d_p = 0.35$ ($\varepsilon = 0.5$) e $D/d_p = 1.58$ ($\varepsilon = 0.7$), respectivamente. 89
- 4.8 Variação da permeabilidade hidráulica normalizada pelo valor da permeabilidade para baixo Reynolds em função do número de Reynolds baseado no coeficiente de fricção para diversos escoamentos de fluidos do tipo de lei-de-potência ($\frac{1}{2} \leq n \leq 2$) através de meios porosos tridimensionais desordenados ($\varepsilon = 0.5$ e $\varepsilon = 0.7$). Na figura interior, a função de permeabilidade de Darcy em função do número de Reynolds usual para um meio de porosidade $\varepsilon = 0.7$. 90

4.9	Permeabilidade hidráulica em função do número de Reynolds, em (a), e, em função do número de Bingham, em (b), para a simulação numérica do escoamento de três fluidos de Bingham diferentes ($\tau_0 = 0.01$, $\tau_0 = 0.1$ e $\tau_0 = 1$). Para a curva do fluido em que $\tau_0 = 0.1$, em (b), são apontados três pontos: I ($B \approx 10^{-2}$), II ($B \approx 0.56$) e III ($B \approx 10$). Os pontos (I) e (III) apresentam aproximadamente a mesma permeabilidade hidráulica e o ponto (II) é um ponto cuja permeabilidade é máxima. As figuras (I), (II) e (III) do lado direito dos gráficos (a) e (b) mostram a magnitude da <i>permeabilidade local</i> ($\kappa_\ell \equiv K_{HB}u/ \nabla p $) em cada ponto de um corte no plano x-z (κ_ℓ cresce do azul para o vermelho). Aqui $L/d_p = 20$, $\varepsilon = 0.7$ e $\mu_0/K_{HB} = 10^2$.	92
B.1	Magnitude de velocidade do fluido num meio poroso anisotrópico planar em três direções de propagação. Dados obtidos por simulação computacional com $Re \sim 10^{-03}$, $\epsilon_e = \sqrt{3/4}$ e $\epsilon = 0.75$. (A velocidade aumenta do azul para o vermelho.)	110
D.1	Página 1 do artigo (Mai08)	115
D.2	Página 2 do artigo (Mai08)	116
D.3	Página 3 do artigo (Mai08)	117
D.4	Página 4 do artigo (Mai08)	118
D.5	Página 5 do artigo (Mai08)	119
D.6	Página 6 do artigo (Mai08)	120
D.7	Página 1 do artigo (Vas10)	121
D.8	Página 2 do artigo (Vas10)	122
D.9	Página 3 do artigo (Vas10)	123
D.10	Página 4 do artigo (Vas10)	124
D.11	Página 5 do artigo (Vas10)	125
D.12	Página 6 do artigo (Vas10)	126
D.13	Página 7 do artigo (Vas10)	127
D.14	Página 1 do artigo (Mor09)	128
D.15	Página 2 do artigo (Mor09)	129
D.16	Página 3 do artigo (Mor09)	130
D.17	Página 4 do artigo (Mor09)	131

Lista de tabelas

2.1	Classificação dos Fluidos não-Newtonianos (Tabela adaptada de (Gra07)).	31
C.1	Símbolos Utilizados - Capítulos 2 e 3.	112
C.2	Símbolos Utilizados - Capítulo 4.	113

There is a time when the operation of the Machine becomes so odious - makes you so sick at heart - that you can not take part. You can not even passively take part. And you have to put your bodies upon the gears and upon the wheels, upon the levers, upon all the apparatus, and you have got to make it stop. And you have got you indicate to the people who run it, to the people who own it that unless you are free, the Machine will be prevented from working at all.

Mario Savio, *Discurso realizado na Universidade da Califórnia em Berkeley, em 2 de dezembro de 1964.*

1

Introdução

O escoamento de fluidos incompressíveis através de estruturas complexas ainda é tema de diversos estudos devido a sua importância em vários ramos do conhecimento humano: Física, Medicina, Engenharias Mecânica e Química, Biologia e Geologia (Dul92, Sah95, DiM70, Chh07). Esta importância se deve principalmente às aplicações práticas com alto grau de interesse econômico tais como extração de petróleo (Jad95), reatores químicos (Ald92), cromatografia líquida (Gid68), saneamento urbano (Leg96), etc.

Muitos fluidos presentes em escoamentos são misturas dispersas de partículas sólidas, o que torna a descrição microscópica do movimento das partículas inerentemente complicada. Do ponto de vista tecnológico, muitas operações na química e processos industriais envolvem sistemas de fluidos e partículas. A tecnologia de fluidização baseia-se somente nas interações de fluidos e partículas (Jae96). Os transportes hidráulico e pneumático de material particular envolvem interações hidrodinâmicas entre o meio de transporte e o material a ser transportado. Outros exemplos são a filtração de misturas (Ara06), erosão e sedimentação naturais e eliminação de resíduos provenientes da indústria de minério. O movimento das células vermelhas do sangue num escoamento capilar, separações em cromatografia e separação de macromoléculas também são processos onde há a interação entre fluido e partículas.

Existe, então, uma diversidade de áreas de pesquisa envolvendo o escoamento de fluidos através de geometrias complexas e a interação fluido-partícula, tal que neste trabalho de doutorado são investigados três tipos de escoamentos distintos através de geometrias complexas. Foram investigados os processos de separação de partículas em estruturas semelhantes àsquelas encontradas em pulmões humanos, a fim de obter uma estrutura simples e com alto grau de eficiência de separação (Vas10). Ainda, foi desenvolvido um modelo matemático para estudar numericamente a erosão e a deposição de grãos movidos por um escoamento laminar com o intuito de explicar padrões de formação naturais e experimentais (Mai08) e, por último, foi realizado um estudo dos escoamentos de fluidos não-Newtonianos através de meios porosos desordenados em três dimensões, que levaram à possíveis aplicações para controle de fluxo

(Mor09). Cada trabalho tem sua própria contextualização que será exposta no decorrer do texto.

Todos os trabalhos nesta tese são baseados na investigação em um ramo do conhecimento na fronteira da Física com as engenharias chamada de **Mecânica dos Fluidos**. Para este ramo do conhecimento, algumas poucas leis básicas são fundamentais para a descrição pormenorizada da dinâmica de um escoamento. Mas o que é um fluido? A resposta para esta pergunta não é trivial. É comum classificar a matéria em três estados físicos: sólido, líquido e gasoso. Um material sólido é aquele que possui a propriedade de **rigidez**. Isto quer dizer que, embora eles sejam quebrados quando submetidos à tensões relativamente elevadas, eles podem suportar tensões moderadas sem se deformar continuamente por um período indefinido¹. Quando a tensão é inicialmente aplicada num material sólido, este é pouco deformado, mas esta deformação não é permanente. Ele relaxa para o tamanho original assim que a tensão aplicada deixa de existir. Materiais plásticos, como massa de modelar, também possuem certa rigidez. A tensão que eles suportam sem deformação é relativamente alta, todavia uma vez que o limite de tensão crítico, τ_0 , (limite de elasticidade) é ultrapassado, um material plástico é deformado continuamente e de forma irreversível. Uma definição mais precisa do que são os sólidos é obtida das reflexões de Bragg finas em experimentos de difração, o que demonstra que há um arranjo ordenado de átomos e moléculas (Bar76).

Um **fluido real** é, por definição, um material sem rigidez alguma. Este material, quando sujeito à tensão, não importa o quão pequena ela seja, irá escoar. Além disso, ao contrário dos materiais sólidos, fluidos não apresentam uma difração de Bragg estreita em experimentos de difração, mas anéis difusos. Estas são distinções precisas entre sólidos e **fluidos reais**. Por outro lado, não há uma clara distinção entre gases e líquidos. Van der Waals mostrou a continuidade entre os estados líquidos e gasosos. Em temperaturas abaixo da temperatura crítica, dois fluidos do mesmo material podem existir em equilíbrio; a fase mais densa é chamada de líquido e a fase menos densa é chamada de gás. É possível passar do estado líquido para o gasoso, simplesmente aquecendo ou descomprimindo o material acima da temperatura crítica. A diferença entre líquido e gás é essencialmente uma diferença na densidade de massa. Para fluidos acima da temperatura crítica, pequenas variações na pressão podem levar o fluido ao estado mais denso ou menos denso, sendo este material nestes condições chamado de **fluido supercrítico** (Par87).

Fluidos reais são chamados de **fluidos viscosos Newtonianos**. O

¹Esta definição de sólido é fenomenológica.

escoamento de fluidos Newtonianos é bastante conhecido, visto que o ar e água são os fluidos mais familiares ao ser humano e são Newtonianos. Os trabalhos referidos anteriormente sobre os processos de erosão e deposição (Mai08) e o transporte de partículas em estruturas ramificadas (Vas10) são obtidos através do escoamento de fluidos viscosos Newtonianos. Existem muitas classes de líquidos que não são deformados continuamente com uma tensão externa aplicada ao escoamento. Este tipo de substância recebe o nome de **fluido não-Newtoniano** (Bro67). As aplicações destes fluidos no cotidiano são amplas, vão desde a indústria alimentícia à Medicina e Orthodontia, passando pela indústria bélica, desportiva e petrolífera.

No terceiro trabalho desta tese (Mor09), o estudo do escoamento de dois tipos de fluidos não-Newtonianos através de meios porosos é apresentado. Um meio poroso é basicamente um sólido permeado por uma rede de poros. Estes poros são espaços vazios no material sólido. Muitos materiais na natureza são porosos, tais como rochas, esponjas, ossos e solo. O conceito de meio poroso é um termo emprestado da Mecânica dos Solos², bem como o conceito de **porosidade**. A literatura de meios porosos é ampla (Dul92, Bea72, Sah95), mas uma vez que o estudo de meios porosos é tema central de vários ramos do conhecimento, cada texto reflete os interesses de suas áreas. Assim, alguns especialistas de uma área não entendem os princípios básicos de outras áreas. Por exemplo, um engenheiro ou hidrologista não está interessado no entendimento dos padrões de morfologia dos solos, enquanto um físico de solos não compreende os conceitos do transporte em sistemas desordenados. Durante a década de 1980 físicos e geofísicos devotaram bastante esforço no entendimento das propriedades físicas de arenitos. Estas investigações foram impulsionadas pela curiosidade de novos materiais, tais como meios fractais, e, pela perspectiva de encontrar novos comportamentos. Grande parte da pesquisa em Física nesta área foi impulsionada pelas necessidades da indústria do petróleo e o desejo de entender a dinâmica de escoamentos multifásicos. Mas uma grande parte da pesquisa se deve aos físicos de solos. Uma vez que eles estavam focados demais nos aspectos morfológicos e estruturais, a literatura da ciência de solos é inadequada a quem procura informações a respeito do transporte e escoamento. Muitos modelos se preocupam em descrever detalhadamente os poros para depois se preocupar com a distribuição do tamanho deles sem considerar os efeitos de conectividade entre eles. Quando uma medida de algumas propriedades de um meio poroso é realizada, a conjectura de uma conectividade perfeita é assumida. Entretanto, uma fenomenologia inconsistente internamente pode produzir quaisquer resultados, inclusive resultados errados. Mas a comunidade

²Em particular, do trabalho de Karl von Terzaghi.

científica tem valorizado bastante formulações que sejam flexíveis para modelar o escoamento e características de transporte acima das previsões: qualquer combinação de parâmetros pode existir tal que faça com que as previsões se tornem corretas. De fato, com formulações mais flexíveis, pode haver um número grande de tais combinações, assim, hoje em dia, um interesse comum da comunidade é requerer a unicidade das determinações dos parâmetros. Uma outra vantagem das formulações flexíveis é que o erro experimental, que geralmente é considerável, pode ser facilmente acomodado nos parâmetros. Frequentemente, as relações resultantes são reconhecidas na ciência dos solos e Hidrologia como sendo apenas fenomenológicas. **Todavia, o tratamento físico deve ser: derivar relações que sejam tanto previsíveis como também tenham significado físico, mesmo frente à complexidade.** Nesta tese, o Modelo de Queijo Suíço foi utilizado para modelar a morfologia dos meios porosos.

Os aspectos mais interessantes de um meio poroso natural são sua complexidade e variabilidade. A principal dificuldade em se estimar as propriedades de transporte de meios porosos geológicos é obter uma descrição útil do espaço de poros em três dimensões. A dimensionalidade da descrição é crucial por muitas razões. De fato, erros sistemáticos resultam de meios fractais quando imagens em duas dimensões são usadas para se estimar a porosidade de um meio. Porém, é difícil obter imagens em três dimensões de um volume de grande complexidade envolto num meio opaco. Tentativas de isolar uma amostra de um meio natural geralmente causam algum rearranjo das partículas constituintes do meio; isto também muda o espaço de poros, tal que descrições precisas dos meios em suas condições naturais raramente estão disponíveis através de medidas diretas. Novos métodos de imagem têm sido propostos e bem aceitos pela comunidade científica, mas existe o perigo de estes novos métodos produzirem principalmente dados supérfluos. Se um meio poroso for fractal, então a informação requerida para modelos pode ser destilada em poucos parâmetros. A comunidade de ciências de solos geralmente distingue entre as propriedades físicas dos solos, as propriedades hidráulicas e as propriedades de transporte (difusão, condutividades térmica e elétrica, dispersão, etc). Tal distinção entre as propriedades de escoamento e transporte tende a nublar o fato de que todas as condutividades, sejam térmicas, elétricas ou hidráulicas, são coeficientes de proporcionalidade na mesma equação, na qual o fluxo é proporcional ao valor negativo do gradiente de potencial. Enquanto que os problemas gerais do escoamento de fluidos em meios porosos é descrito pelas equações de Navier-Stokes³. Em geral, em regime de número de Reynolds baixo a equação usada para des-

³As equações de Navier-Stokes servem para descrever apenas o escoamento de fluidos Newtonianos, como será visto no capítulo 2. Para fluidos não-Newtonianos, uma equação mais geral da conservação do momento linear toma lugar.

crever o escoamento é uma relação proporcional entre a velocidade do fluido na entrada e o negativo do gradiente de pressão ao longo do meio poroso, sendo a constante de proporcionalidade a **permeabilidade hidráulica**. O principal sucesso desta relação é prever as propriedades hidráulicas das propriedades físicas, e então prever as propriedades de transporte das propriedades físicas e hidráulicas. Um físico precisa compreender claramente esta distinção. Muitos tratamentos têm sido baseados em tratamentos empíricos ou em simulações numéricas separadamente. Um intrincamento destes dois tipos de tratamento se faz necessário na construção de uma teoria de transporte mais abrangente.

As aplicações do escoamento de fluidos complexos em meios porosos está presente em diversas áreas do conhecimento. Na Medicina, é possível considerar que o meio no qual o fluxo sanguíneo toma lugar no corpo humano é um substrato extremamente interconectado (sistema vascular) (Mer69). O sangue se comporta como um fluido não-Newtoniano para baixos valores da taxa de deformação ($\sim 100s^{-1}$) (San07). Este comportamento não-Newtoniano é devido às partículas em suspensão no plasma sanguíneo. Outras regiões do corpo humano apresentam estrutura de poros.

Os ossos são órgãos importantes que formam parte do endoesqueleto-esqueleto dos animais vertebrados. As funções deles são de locomoção, suporte e proteção para vários outros órgãos. Além disso, eles produzem células brancas e vermelhas e armazenam nutrientes. Os ossos são compostos de diferentes estruturas a fim de garantir a especialização daquele órgão. Ele não é um material uniforme, mas apresenta espaços entre seus elementos mais duros. Pode-se separar dois tipos de estruturas, o osso cortical, que é mais denso e responde por 80% da massa total óssea, e o osso trabecular, que é uma estrutura porosa, também chamado de osso esponjoso. A estrutura cortical é, em geral, a parte mais externa do osso. Nela há bem mais células ósseas que sangue, já na estrutura trabecular, a área da superfície óssea é cerca de 20 vezes maior que no osso cortical (Kin05). O conhecimento de como a medula óssea e o sangue escoam nestas estruturas é de interesse fundamental para o entendimento da proliferação das células e nutrientes no sistema esquelético de cobaias (Egr92) e humanos.

Outra aplicação importante é a injeção de cimento⁴ para próteses dentárias e ósseas (Lew97). Quando um osso está gravemente quebrado ou um dente é implantado, os especialistas tendem a construir ou reparar esses defeitos através da injeção de um cimento feito de fosfato de cálcio (CPC⁵)

⁴São materiais baseados em resinas ou ácido-base. Basicamente são materiais formados pela mistura de pó e líquidos.

⁵Acrônimo das palavras inglesas *Calcium Phosphate Cement*, ou cimento de fosfato de cálcio.

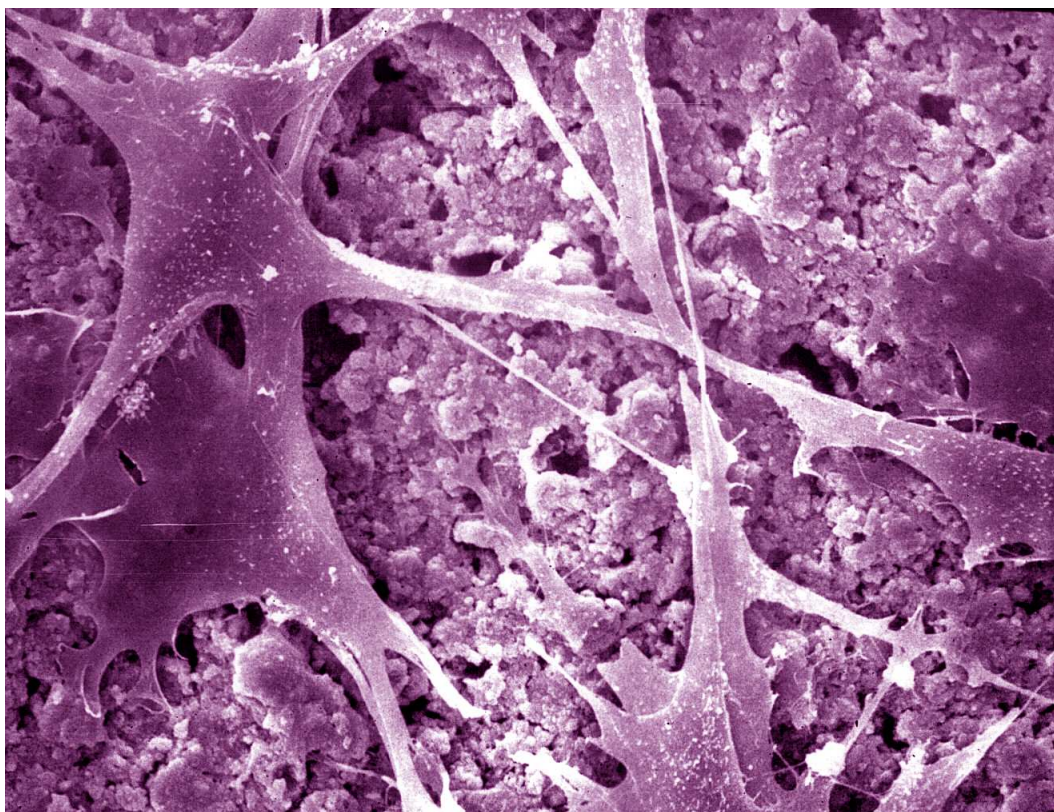


Figura 1.1: Micrografia eletrônica colorida mostra células ósseas aderindo ao cimento de fosfato de cálcio (CPC). *In:* (Bur05)

(Bur05) ou compostos de polímeros naturais (Lew97). Os CPCs são materiais feitos com o uso de matéria óssea, de tal forma que as células não rejeitam o cimento e não há transmissão de doenças, proporcionando uma aderência natural à parte restaurada ou construída. A injeção de cimento ósseo garante alta fixação das próteses depois que o cimento endurece (ver figura 1.1). A maioria destas restaurações é feita em pacientes que sofreram traumas severos ou pacientes mais idosos. A população mundial está se tornando mais idosa, fazendo necessário o aperfeiçoamento das técnicas de injeção e da fabricação destes materiais para uma melhora da saúde e bem-estar dos pacientes.

Muitos fluidos encontrados na indústria de alimentos possuem propriedades reológicas não-Newtonianas (Rao07). A textura destes alimentos está intimamente relacionada com a sua reologia⁶. O chocolate derretido, por exemplo, apresenta uma reologia muito complexa, principalmente por ser composto de manteiga de cacau e gordura láctea com as partículas de cacau dispersas nesta mistura (Lue97). Esta dispersão de partículas deve ser controlada nesta

⁶A palavra reologia vem do grego *rheo*= escoamento *logos*= estudo, sendo sugerido pela primeira vez por Bingham e Crawford, para descrever o escoamento, no caso de materiais líquidos, e, a deformação, no caso de materiais sólidos.

emulsão a um determinado ponto, tal que o produto final tenha a aceitação do consumidor. O mesmo acontece com vários outros produtos da indústria alimentícia (Gia97, Ver08).

No âmbito da Biologia marinha existe um animal peculiar que forma colônias que são essencialmente meios porosos. Charles Darwin descreveu os recifes de corais tropicais como oásis no deserto do oceano. Os recifes de corais cobrem apenas 1% da superfície oceânica da Terra, e, ainda assim, mais de 25% de todas as espécies marinhas os habitam em alguma fase de sua vida. Este número gigantesco de espécies resulta numa rede complexa na cadeia alimentar. Em geral, as cadeias alimentares têm as plantas como produtoras primárias, mas a base da cadeia alimentar nos recifes são animais: os corais. A produção primária num recife de coral é muito alta⁷ (Sor93). Os recifes de corais são estruturas porosas submarinas feitas do carbonato de cálcio excretado pelos corais. Recifes de corais suportam serviços de ecoturismo, pescaria e proteção costeira. O valor econômico dos recifes de corais é estimado em US\$ 30 bilhões (WWF00). Os corais nos recifes no mundo todo estão morrendo devido à ação humana. O entendimento do transporte de sedimentos e poluentes fora e através dos recifes é de importância fundamental para se determinar a sobrevivência destes ecossistemas.

O estudo do escoamento de petróleo através de meios porosos é inerentemente importante na sociedade moderna devido principalmente a utilização do motor de combustão interna e aviação comercial. Hoje em dia, 2011, 90% do combustível veicular é derivado do petróleo. E em muitos países, o consumo de petróleo para a produção energética chega a 50% da energia consumida total. O petróleo bruto é uma mistura viscosa de produtos leves e pesados; ele possui vários tipos de hidrocarbonetos diferentes misturados; onde as moléculas mais comuns são alcanos, cicloalcanos, hidrocarbonos aromáticos ou quimicamente mais complexas como o asfalteno. Estes diferentes hidrocarbonetos dão origem a uma gama enorme de produtos conhecidos da sociedade moderna

Para se extrair o petróleo bruto de um reservatório existem várias técnicas disponíveis. Um delas consiste em perfurar o poço onde o petróleo foi localizado e bombear o petróleo através de um tubo de aço colocado no buraco perfurado. Quando o petróleo bruto é muito viscoso e difícil de ser bombeado⁸, uma outra perfuração é adicionada, de tal forma a se injetar vapor d'água no intuito de diminuir a viscosidade do petróleo bruto e aumentar a pressão naquele ponto de perfuração. O gradiente de pressão entre as duas perfurações faz com que o fluido escoe por entre as lacunas da rocha, levando

⁷Em média, a biomassa produzida num recife de coral é da ordem de $10gC/(m^2\text{dia})$. Biomassa é a quantidade total de matéria viva existente num ecossistema.

⁸Em geral, isto acontece quando o petróleo bruto está na forma de betume.

consigo sedimentos da rocha ou partículas sólidas de betume. Para o processo de refino acontecer é preciso, primeiro, eliminar as impurezas sólidas presentes no petróleo bruto, de tal forma que várias técnicas têm sido desenvolvidas e aperfeiçoadas no processo de purificação. Uma destas técnicas é fazer o petróleo passar por uma torre empacotada, onde as partículas maiores serão filtradas (Jad95).

A drenagem de dejetos urbanos através dos dutos da rede de esgoto pode ser classificada como escoamento através de meios porosos. Todo esgoto sanitário se compõe basicamente de 99,9% de água e 0,1% sólidos. Sólidos orgânicos 70% (proteínas, carboidratos, gorduras) e sólidos inorgânicos 30% (areia, sais e metais). A água em si nada mais é que um meio de transporte das inúmeras substâncias orgânicas e inorgânicas e microorganismos eliminados pelo homem diariamente. Os sólidos são responsáveis pela deterioração da qualidade do corpo da água. Como muita matéria orgânica está presente nos esgotos, a água do esgoto freqüentemente torna-se uma solução polimérica.

Um tipo de líquido não-Newtoniano bastante referenciado atualmente é aquele usado nas novíssimas vestimentas à prova de balas (Dec07). Decker *et al.* desenvolveram um líquido referido como STF⁹ que é colocado entre as fibras de um tipo de colete à prova de balas, um material inerentemente poroso. Sob um regime de baixa tensão apresenta um comportamento tal que com um leve aumento da tensão aplicada ele se torna menos viscoso, o que deixa a vestimenta bastante maleável. Mas existe outro regime, o de alta tensão, em que o aumento da tensão é acompanhado por um aumento brusco na viscosidade, deixando a vestimenta extremamente enrijecida no local onde a tensão aumentou. Assim, quando o usuário da vestimenta sofre um forte impacto de um projétil, a vestimenta enrijece, mas o impacto se distribui por uma área bem maior do que no caso de coletes à prova de balas convencionais. O mesmo tipo de fluido tem sido proposto e testado para aplicações em esportes de alto risco, como *skate*, *snowboarding* e esqui. Novas patentes de como se fabricar materiais esportivos usando fluidos não-Newtonianos têm sido criadas (Lam09). Levando em conta as aplicações do escoamento de fluidos não-Newtonianos na sociedade moderna, a motivação para esta tese se torna evidente.

A distribuição dos capítulos nesta tese se dá da seguinte maneira: No capítulo 2 é apresentado ao leitor o formalismo Euleriano da dinâmica de fluidos. A exposição matemática das equações da continuidade, conservação da energia e momento linear é feita de modo a possibilitar o leitor compreender

⁹Do acrônimo em inglês *Shear-Thickening Fluid*, cuja tradução livre é fluido enrijecedor. Este líquido é uma mistura de nano-partículas de quartzo imersas em etileno glicol (fluido Newtoniano). A concentração destas partículas no etileno glicol afeta a sua reologia.

as definições subseqüentes, como **viscosidade**, o **número de Reynolds** e o princípio de similaridade mecânica. Alguns escoamentos viscométricos são apresentados uma vez que serão a base para várias análises no decorrer dos capítulos. Ainda, algumas técnicas de solução numérica de equações diferenciais parciais utilizadas nesta tese são apresentadas.

No capítulo 3 é exposta a teoria sobre o Transporte de Partículas em escoamentos. São definidos o número de Stokes e o coeficiente de arrasto. Uma estrutura ramificada é proposta para atuar como um separador de partículas. Através de simulações numéricas para a obtenção de soluções das equações de Navier-Stokes através de métodos de diferenças finitas foi possível estudar detalhadamente o escoamento dentro desta estrutura ramificada e o transporte de partículas nela. Ainda, um modelo de erosão-deposição foi desenvolvido para simular os padrões de formação de sistemas granulares saturados baseado numa rede de poros, onde as partículas granulares são transportadas pelo fluido segundo a **Lei de Stokes**.

No capítulo 4, uma breve descrição da caracterização de meios porosos e sua relação com as propriedades de transporte hidráulico (**Lei de Darcy**) são apresentadas. Neste capítulo, é exposta a análise dos resultados de simulações numéricas das equações de momento e continuidade para o escoamento de fluidos não-Newtonianos através de meios porosos desordenados em três dimensões. O número de Reynolds é redefinido para fluidos do tipo lei-de-potência e uma nova permeabilidade hidráulica é proposta, resultando num colapso universal dos resultados para o escoamento deste tipo de fluido. Para o plástico de Bingham, um regime de permeabilidade máxima é discutido, indicando possíveis aplicações para o escoamento deste material através de meios porosos.

Por fim, no capítulo 5, as conclusões gerais dos trabalhos apresentados nos capítulos 3 e 4 são delineadas.

2 Teoria

Neste capítulo é exposta a descrição física e o formalismo matemático da dinâmica que governa o transporte de momento, energia e massa em um fluido contínuo. Para o leitor interessado nos resultados desta tese, convém suprimir este capítulo em uma primeira leitura.

2.1 Equações básicas da dinâmica de fluidos

Como toda teoria física, a **Mecânica dos Fluidos** faz uso de um formalismo matemático para descrever o comportamento dos campos de velocidade de cada elemento de volume do fluido e da pressão correspondente a este elemento. As equações que são descritas nesta tese partem da conjectura de que o fluido é um *continuum* e obedece as leis de Newton, sem o interesse em descrever as interações entre as moléculas do fluido. Esta formulação da Mecânica dos Fluidos, que obedece a hipótese de *continuum*, leva a uma descrição da distribuição das quantidades mensuráveis do fluido definidas em função da posição \vec{r} no espaço e no tempo t . Esta formulação é chamada de **Euleriana**¹.

Uma outra formulação possível é a chamada **Lagrangeana**², que faz uso do fato de que em Mecânica de Partículas algumas quantidades dinâmicas ou físicas referem-se não apenas a determinadas posições no espaço, mas também a quantidades distinguíveis de matéria. Nesta formulação, as quantidades de escoamento são definidas em função do tempo e são relacionadas a um elemento material do fluido. Estas quantidades descrevem a história deste elemento do fluido. Desde que elementos materiais do fluido mudam sua forma quando se movem, é necessário identificar o elemento de fluido selecionado, em geral, pela posição do centro de massa desse elemento num determinado instante. Quando se está interessado nas propriedades de uma única molécula pertencente a um fluido, pode-se notar que a velocidade tem uma distribuição extremamente não-uniforme, de tal forma que um grande número de partículas é necessário para se chegar a condição de *continuum*. Embora o uso da formulação Lagrangeana

¹Em homenagem ao Físico e Matemático suíço Leonhard Paul Euler (1707-1783).

²Em homenagem ao Físico e Matemático franco-italiano Joseph Louis Lagrange (1736-1813).

seja útil em certos contextos especiais, tal como a descrição pormenorizada da interação de corpos imersos no fluido com as partículas do fluido, ela leva a análise difícil e, em geral, é uma desvantagem não poder obter diretamente os gradientes de velocidade e pressão no fluido. Em geral, a Mecânica dos Fluidos está interessada nas quantidades em escala macroscópica; em comparação com a separação entre as moléculas do fluido. Por esta razão, a formulação usada nesta tese é a Euleriana.

Ainda, na formulação Euleriana, um elemento do fluido não é uma partícula física como uma molécula do fluido. Como dito, a distribuição das velocidades das moléculas num fluido é extremamente não-uniforme. Assim, um elemento do fluido, que chamaremos de partícula, é uma região muito pequena no espaço contendo uma quantidade suficientemente grande de moléculas, tal que a natureza molecular do fluido possa ser uniformizada.

2.1.1

Equações de Euler

Seja \mathcal{D} uma região do espaço em duas ou três dimensões, \mathfrak{R}^2 ou \mathfrak{R}^3 , preenchido com um fluido. Seja $\vec{r} \in \mathcal{D}$ um ponto no domínio \mathcal{D} e considere a partícula do fluido movendo-se em \vec{r} no tempo t . $\vec{r} = (x, y, z)$ é escrito em relação ao sistema padrão Euclidiano de coordenadas cartesianas espaciais. Imagine uma partícula num fluido; esta partícula atravessa uma trajetória bem-definida. Seja $\vec{u}(\vec{r}, t)$ a velocidade da partícula de fluido que está se movendo através de \vec{r} no tempo t . Então, para cada tempo fixo, \vec{u} é um campo vetorial em \mathcal{D} , como mostrado na figura 2.1.1. \vec{u} será chamado de campo vetorial de velocidades do fluido.

Para cada tempo t , é assumido que o fluido tem uma densidade de massa bem-definida $\rho(\vec{r}, t)$. Então, se \mathcal{W} é qualquer sub-região de \mathcal{D} , a massa do fluido em \mathcal{W} no tempo t é dada por

$$m(\mathcal{W}, t) = \int_{\mathcal{W}} \rho(\vec{r}, t) dV, \quad (2-1)$$

onde dV é o elemento de volume no espaço. Segue que deve ser assumido que as funções \vec{u} e ρ são suaves suficiente, tais que as operações padrão do Cálculo possam realizadas sobre elas. Esta conjectura é aberta à críticas e obviamente voltaremos a ela mais tarde, no decorrer deste capítulo.

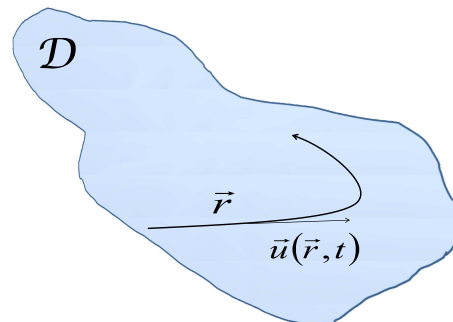


Figura 2.1: Partícula de fluido localizada em \vec{r} movendo-se com velocidade \vec{u} no espaço \mathcal{D} .

A conjectura de que ρ existe é uma conjectura de continuidade. Claramente, ela não vale quando a estrutura molecular da matéria é levada em conta. Para a maioria dos fenômenos macroscópicos que ocorrem na natureza, é aceito que esta conjectura é correta.

A derivação das equações governantes da dinâmica de um elemento de fluido é baseada em três princípios básicos:

1. a massa não é criada, nem destruída;
2. a taxa de mudança do momento de uma porção do fluido iguala-se à força aplicada nele (segunda lei de Newton);
3. a energia não é criada, nem destruída.

1. Conservação da massa

Seja \mathcal{W} uma região fixa de \mathcal{D} (\mathcal{W} é constante no tempo). A taxa de mudança de massa em \mathcal{W} é

$$\frac{d}{dt}m(\mathcal{W}, t) = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{W}} \rho(\vec{r}, t) dV = \int_{\mathcal{W}} \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} dV. \quad (2-2)$$

Seja $\partial\mathcal{W}$ o contorno de \mathcal{W} , suposto ser suave; seja \hat{n} o vetor unitário dirigido para fora definido em pontos de $\partial\mathcal{W}$; e seja dA o elemento de área em $\partial\mathcal{W}$. A taxa do fluxo de volume através de $\partial\mathcal{W}$ por unidade de área é $\vec{u} \cdot \hat{n}$ e a taxa de fluxo de massa por unidade de área é $\rho\vec{u} \cdot \hat{n}$.

O princípio de conservação de massa pode ser melhor descrito como: a taxa de aumento de massa em \mathcal{W} iguala-se à taxa com a qual a massa atravessa $\partial\mathcal{W}$ no sentido de fora-para-dentro de $\partial\mathcal{W}$, *i. e.*,

$$\boxed{\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{W}} \rho dV = - \int_{\partial\mathcal{W}} \rho\vec{u} \cdot \hat{n} dA.} \quad (2-3)$$

Esta é a forma integral da lei de conservação de massa. Pelo teorema da divergência, esta equação é equivalente a

$$\int_{\mathcal{W}} \left[\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}) \right] dV = 0. \quad (2-4)$$

Como esta equação vale para todo \mathcal{W} , é equivalente a

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}) = 0.} \quad (2-5)$$

A última equação é a forma diferencial do teorema de conservação de massa, também conhecido como **equação de continuidade**.

Se ρ e \vec{u} não são suaves o suficiente para justificar os passos que levaram à forma diferencial do teorema de conservação de massa, então a forma integral deve ser usada.

2. Conservação do momento ³

Seja $\vec{r}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ um caminho seguido por uma partícula do fluido, tal que o campo de velocidades é dado por

$$\vec{u}(x(t), y(t), z(t)) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t)), \quad (2-6)$$

isto é,

$$\vec{u}(\vec{r}(t), t) = \frac{d}{dt}\vec{r}(t). \quad (2-7)$$

A aceleração de uma partícula do fluido é dada por

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{r}(t) = \frac{d}{dt}\vec{u}(\vec{r}(t), t). \quad (2-8)$$

Pela regra da cadeia, a equação acima torna-se

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{r}(t) = \frac{\partial \vec{u}}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial \vec{u}}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial \vec{u}}{\partial z}\dot{z} + \frac{\partial \vec{u}}{\partial t}. \quad (2-9)$$

que é o mesmo que escrever

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{r}(t) = \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u}, \quad (2-10)$$

onde $\vec{u} \cdot \nabla = u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z}$ é um operador.

Chamaremos

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla$$

de **derivada material**; ela leva em conta o fato do fluido estar se movendo e que as posições das partículas mudam com o tempo. De fato, se $f(x, y, z, t)$ for qualquer função de posição e tempo, então, pela regra da cadeia,

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla f.}$$

2.2

Forças num elemento de fluido

Para qualquer *continuum*, as forças atuando numa parcela \mathcal{W} do material são de dois tipos. O primeiro tipo corresponde às forças de tensão, onde uma parte do material é acionada pelo resto do *continuum* por meio de forças através de suas superfícies. Estas forças são costumeiramente chamadas de forças de superfície. Elas têm origem molecular, diminuindo rapidamente com o aumento da distância entre os elementos interagentes, de tal forma que estas interações são apreciáveis somente quando as distâncias são da ordem da separação entre as moléculas do fluido. Ou seja, elas só são apreciavelmente experimentadas se existir o contato mecânico direto entre os elementos inte-

³A teoria desenvolvida aqui leva em conta o sistema Euclidiano de coordenadas, mas pode ser estendida para outros sistemas de coordenadas.

ragentes. As forças de contato exercidas entre dois elementos de massa de um fluido em contato direto na fronteira entre eles são devidas ao transporte de momento por moléculas em movimento oscilatório em torno de uma posição de equilíbrio estacionária e das forças entre as moléculas nos dois lados da borda. Se um elemento de massa de um fluido é acionado por forças de contato originadas das reações com a matéria fora deste elemento, estas forças de contato podem apenas atuar numa fina camada adjacente à fronteira do elemento de fluido. A força total de contato num elemento do fluido é determinada pela área da superfície deste elemento. As diferentes partes de uma superfície fechada envolvendo um elemento de volume do fluido têm diferentes orientações. Ao invés de considerar a fronteira do elemento finito do fluido constituído pelas moléculas, um elemento de superfície plano $d\vec{A}$ é considerado. Isto é possível devido ao comprimento de penetração das forças de contato ser pequeno quando comparado com as dimensões lineares do elemento de superfície.

O segundo tipo de forças surge através de campos externos, tais como o gravitacional ou o eletromagnético, que exercem uma força por unidade volume no *continuum*. Este tipo de força é também chamado de força de volume ou de corpo.

Um **fluido ideal**, ou **fluido de Euler**, é definido como aquele em que para qualquer movimento existe uma função $p(\vec{r}, t)$ chamada de pressão, tal que se S é uma superfície no fluido com vetor normal unitário \hat{n} , a força de tensão exercida através da superfície $\partial\mathcal{W}$ por unidade de área em $\vec{r} \in \partial\mathcal{W}$ no tempo t é $-p(\vec{r}, t)\hat{n}$. Note que a força atua na direção de \hat{n} , sendo perpendicular à superfície S .

Intuitivamente, a ausência de forças tangenciais implica que não há como rotações iniciarem-se neste fluido, ou uma vez que elas estejam presentes, permanecerão *ad infinitum*. Obviamente, um fluido ideal não pode descrever simples fenômenos físicos presentes na dinâmica de fluidos. Não obstante, o fluido ideal de Euler pode dar idéia de um classe restrita de outros fenômenos.

Se \mathcal{W} é uma região no fluido num instante particular t , a força total exercida no fluido dentro de \mathcal{W} pela tensão na sua borda é

$$\vec{F}_{\partial\mathcal{W}} = - \int_{\partial\mathcal{W}} p\hat{n}dA \quad (2-11)$$

Seja \vec{e} qualquer vetor constante no espaço, o Teorema da Divergência diz que

$$\vec{F}_{\partial\mathcal{W}} \cdot \vec{e} = - \int_{\partial\mathcal{W}} p\vec{e} \cdot d\vec{A} = - \int_{\mathcal{W}} \nabla \cdot (p\vec{e}) dV = - \int_{\mathcal{W}} (\nabla p) \cdot \vec{e} dV. \quad (2-12)$$

Tal que

$$\vec{F}_{\partial\mathcal{W}} = - \int_{\mathcal{W}} (\nabla p) dV. \quad (2-13)$$

Se $\vec{f}(\vec{r}, t)$ for uma dada força de campo por unidade de massa, a força total é

$$\vec{F} = \int_{\mathcal{W}} \rho \vec{f} dV. \quad (2-14)$$

Então, para qualquer elemento de fluido a força por unidade de volume é $-\nabla p + \rho \vec{f}$. Mas, pela segunda lei de Newton, a força atuando num elemento de fluido tem de ser igual à variação do momento linear em relação ao tempo desse elemento:

$$\boxed{\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \rho \vec{f}.} \quad (2-15)$$

3. Conservação da energia

Para um fluido movendo-se num domínio \mathcal{D} , com campo de velocidades \vec{u} , a energia cinética contida numa região $\mathcal{W} \subset \mathcal{D}$ é

$$E_{cin} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{W}} \rho |\vec{u}|^2 dV. \quad (2-16)$$

É suposto que a energia total é a soma da energia interna com a energia cinética. Se trabalho é realizado sobre ou pelo fluido, a energia total do sistema muda. A taxa de mudança da energia cinética de uma porção móvel \mathcal{W}_t de fluido é calculada usando o teorema de transporte (Fox85):

$$\frac{dE_{cin}}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{W}} \rho |\vec{u}|^2 dV = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{W}} \rho \frac{D|\vec{u}|^2}{Dt} dV = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{W}} \rho \left[\vec{u} \cdot \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) \right] dV \quad (2-17)$$

Escoamentos incompressíveis

Num escoamento incompressível a variação da densidade de massa do fluido pode ser desprezada. É conjecturado, nesta seção, que a taxa da mudança da energia cinética numa porção do fluido é igual à taxa com que as forças no fluido exercem trabalho:

$$\frac{dE_{cin}}{dt} = \int_{\mathcal{W}} \rho \vec{u} \cdot \vec{f} dV - \int_{\mathcal{W}} \vec{u} \cdot (\nabla p) dV, \quad (2-18)$$

onde é suposto que se a energia cinética é suposta ser a energia total do fluido o fluido é incompressível (a não ser que $p = 0$), e:

$$\rho \left[\vec{u} \cdot \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) \right] = \rho \vec{u} \cdot \vec{f} - \vec{u} \cdot (\nabla p). \quad (2-19)$$

No caso incompressível⁴, as equações de Euler são

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{f}, \quad (2-20)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0, \quad (2-21)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (2-22)$$

$$(2-23)$$

com as condições de contorno $\vec{u} \cdot \hat{n} = 0$ em $\partial\mathcal{D}$.

Escoamentos Isentrópicos

Um escoamento compressível é dito isentrópico se existir uma função w , chamada de entalpia, tal que

$$\nabla w = \frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (2-24)$$

Sabendo que a energia interna por unidade de massa pode ser escrita, via termodinâmica, como $e_{int} = w - p/\rho$. A Primeira Lei da Termodinâmica diz que

$$dw = T ds + \frac{1}{\rho} dp, \quad (2-25)$$

onde s é a entropia.

Se a pressão é função apenas de ρ , então o fluido é claramente isentrópico com s constante. Assim

$$p = \rho^2 \frac{\partial e_{int}}{\partial \rho}. \quad (2-26)$$

Seja a variação da energia total do fluido escrita como

$$\frac{dE_{total}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_t} \left(\frac{1}{2} \rho |\vec{u}|^2 + \rho e_{int} \right) dV \quad (2-27)$$

Assim, as equações de Euler para um escoamento isentrópico são

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla w + \rho \vec{f}, \quad (2-28)$$

$$\nabla (\rho \vec{u}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (2-29)$$

$$(2-30)$$

com as condições de contorno $\vec{u} \cdot \hat{n} = 0$ em $\partial\mathcal{D}$ (ou $\vec{u} \cdot \hat{n} = \vec{U} \cdot \hat{n}$, se a parede se move com velocidade \vec{U}).

⁴Um escoamento incompressível não necessita que o fluido em questão seja incompressível, mas que nas determinadas condições do escoamento o número de Mach seja inferior a 0.3.

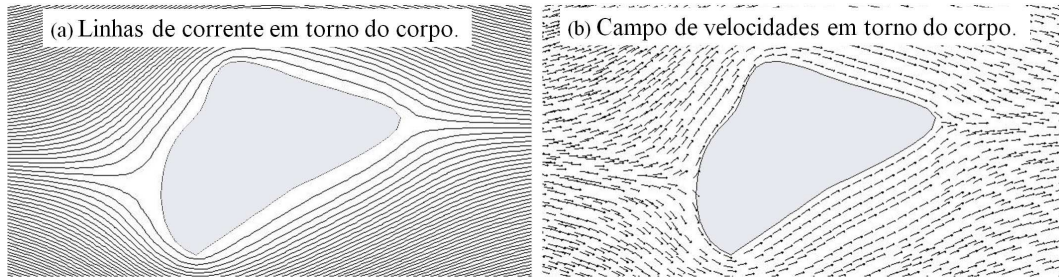


Figura 2.2: Simulação computacional obtida com o software FLUENT de um corpo de forma arbitrária movendo-se num fluido Newtoniano incompressível com $Re \ll 1$. As condições de contorno na direção do escoamento são velocidade constante na zona mais à esquerda, pressão zero na zona mais à direita e periódicas nas zonas perpendiculares ao escoamento. Em (a), pormenor das linhas de corrente do fluido em torno do corpo; em (b), pormenor dos vetores do campo de velocidades.

2.2.1

Linhas de corrente ou Streamlines

Dado um escoamento com campo de velocidades $\vec{u}(\vec{r}, t)$, uma **linha de corrente**, ou *streamline*⁵, no tempo t é definida como a integral de caminho de \vec{u} ; *i. e.*, se $\vec{r}(s)$ é uma linha de corrente no instante t , a curva é parametrizada pela variável s que satisfaz

$$\frac{d\vec{r}}{ds} = \vec{u}(\vec{r}(s), t), \quad (2-31)$$

onde uma *trajetória* fixa pode ser a curva traçada assim que o tempo evolui. Assim, uma trajetória é uma solução da equação diferencial

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{u}(\vec{r}(t), t), \quad (2-32)$$

com as condições iniciais do problema em questão. Se $\partial\vec{u}/\partial t = \vec{0}$, as linhas de corrente e as trajetórias coincidem. Este caso é denominado de **escoamento estacionário** (ver figura 2.2-(a)).

Teorema de Bernoulli

Num escoamento estacionário isentrópico e na ausência de forças externas não-conservativas, a quantidade $\frac{p}{\rho} + V + \frac{1}{2} |\vec{u}|^2$ é constante ao longo das linhas de corrente. O mesmo vale para escoamentos incompressíveis com densidade constante. Este resultado é válido apenas para fluidos ideais, mas para fluidos reais é uma ferramenta útil para se entender o comportamento de alguns sistemas físicos onde as forças não-conservativas são conhecidas.

⁵Termo em língua inglesa para linhas de corrente.

Vorticidade

A vorticidade é definida como $\vec{\omega} \equiv \nabla \times \vec{u}$. Para um dado elemento de fluido, \vec{u} é composto de translação, deformação e rotação, com velocidade de rotação igual à $\frac{1}{2}\vec{\omega}$:

$$\vec{u}(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \vec{u}(\vec{r}) + \dot{\epsilon}(\vec{r}) \cdot \delta\vec{r} + \frac{1}{2}\vec{\omega} \times \delta\vec{r} + \mathcal{O}(\delta\vec{r} \cdot \delta\vec{r}), \quad (2-33)$$

onde $\delta\vec{r}$ é um pequeno deslocamento da posição \vec{r} e $\dot{\epsilon}$ é um tensor de segunda ordem. Então, seja a expansão em séries de Taylor de $\vec{u}(\vec{r} + \delta\vec{r})$ em torno de \vec{r} igual a

$$\vec{u}(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \vec{u}(\vec{r}) + \nabla\vec{u} \cdot \delta\vec{r} + \mathcal{O}(\delta\vec{r} \cdot \delta\vec{r}). \quad (2-34)$$

Assim, pode-se escrever o tensor $\dot{\epsilon}$ como

$$\dot{\epsilon} \equiv \frac{1}{2} \left[\nabla\vec{u} + (\nabla\vec{u})^T \right], \quad (2-35)$$

onde T é a transposta da matriz representando o tensor de segunda ordem, e

$$\mathcal{S} \equiv \frac{1}{2} \left[\nabla\vec{u} - (\nabla\vec{u})^T \right]. \quad (2-36)$$

Então $\nabla\vec{u} = \dot{\epsilon} + \mathcal{S}$. Assim, \mathcal{S} pode ser expressa como

$$\mathcal{S} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{bmatrix}, \quad (2-37)$$

tal que

$$\mathcal{S} \cdot \delta\vec{r} = \frac{1}{2}\vec{\omega} \times \delta\vec{r}, \quad (2-38)$$

onde $\vec{\omega} = \omega_x \hat{i} + \omega_y \hat{j} + \omega_z \hat{k}$ quando escrito no sistema cartesiano de coordenadas.

O tensor $\dot{\epsilon}$ é chamado de **tensor da taxa de deformação**. Como $\dot{\epsilon}$ é simétrico, existe uma base ortonormal (cujos vetores são \hat{e}_1 , \hat{e}_2 e \hat{e}_3) na qual $\dot{\epsilon}$ é diagonal:

$$\dot{\epsilon} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 \end{bmatrix}. \quad (2-39)$$

O significado físico de $\dot{\epsilon}$ pode ser melhor entendido se todos os termos em 2-33 forem ignorados, excetuando-se $\dot{\epsilon} \cdot \delta\vec{r}$. Como $\vec{u} = \frac{d\delta\vec{r}}{dt} = \dot{\epsilon} \cdot \delta\vec{r}$, quando \vec{r} é mantido fixo na equação 2-33, uma nova equação vetorial tem componentes

$$\frac{d\delta r_i}{dt} = d_i \delta r_i. \quad (2-40)$$

A taxa de mudança de um comprimento unitário ao longo de um eixo- i em $t = 0$ é d_i . O campo vetorial $\dot{\epsilon} \cdot \delta\vec{r}$ está se contraindo, ou se expandindo ao longo de cada eixo- \hat{e}_i - por isso o nome de deformação. A taxa na qual o volume varia dentro de uma caixa de lados δr_1 , δr_2 e δr_3 , paralelos aos eixos \hat{e}_1 , \hat{e}_2 e \hat{e}_3 , é

$$\frac{d}{dt}(\delta r_1 \delta r_2 \delta r_3) = \frac{d\delta r_3}{dt} \delta r_1 \delta r_2 + \frac{d\delta r_2}{dt} \delta r_3 \delta r_1 + \frac{d\delta r_1}{dt} \delta r_2 \delta r_3 = (d_1 + d_2 + d_3) \delta r_1 \delta r_2 \delta r_3. \quad (2-41)$$

Todavia, o traço da matriz representando o tensor $\dot{\epsilon}$ é invariante sob transformações ortogonais, implicando em

$$\boxed{d_1 + d_2 + d_3 = \nabla \cdot \vec{u}.} \quad (2-42)$$

Então, o volume do elemento de fluido muda com a divergência do campo de velocidades. Os outros termos em 2-33 podem ser interpretados da seguinte maneira: O primeiro termo induz um movimento translacional constante e o último termo, pode ser escrito, se \vec{r} for mantido fixo, como

$$\frac{d\delta \vec{r}}{dt} = \frac{1}{2} \vec{\omega} \times \delta \vec{r}. \quad (2-43)$$

A solução desta equação diferencial linear é direta e resulta em

$$\delta \vec{r}(t) = \mathcal{R}(t, \vec{\omega}) \delta \vec{r}(0), \quad (2-44)$$

onde \mathcal{R} é uma matriz de rotação. Como o movimento de corpo rígido deixa o volume invariante, a divergência de $\vec{\omega} \times \delta \vec{r}$ é zero.

2.3

Equações de Navier-Stokes

Ao contrário do fluido ideal de Euler, onde todas as tensões eram tidas como normais à superfície de um elemento de fluido, um fluido real apresenta tensões não necessariamente normais. A figura 2.3 mostra dois elementos de fluidos adjacentes separados por uma fronteira comum S , onde a velocidade \vec{u} é paralela à superfície S , mas o campo de velocidades tem uma diferença em magnitude assim que a fronteira S é ultrapassada. Se as forças na fronteira do elemento de fluido forem somente normais à superfície S , não existirá transferência de momento entre os elementos de volumes A e A' . Todavia, a Teoria Cinética implica que isto não faz sentido! As moléculas mais rápidas

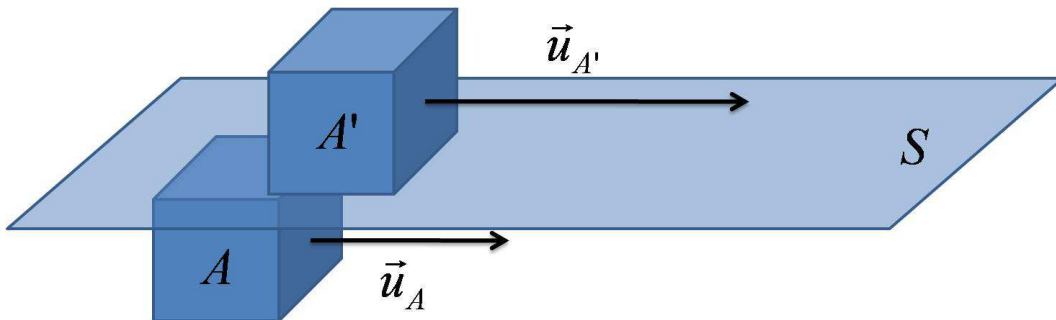


Figura 2.3: Dois elementos de fluido movendo-se rente a uma superfície S .

provenientes da parte superior da superfície S irão se difundir através de S e impelir momento no fluido abaixo e as moléculas mais lentas na parte de baixo irão desacelerar as partículas de cima.

Supondo, agora, que as forças de contato são escritas como

$$\vec{F} = \oint_S [-p(\vec{r}, t) + \mathcal{T}(\vec{r}, t)] \cdot d\vec{A}, \quad (2-45)$$

onde \mathcal{T} é o **tensor de tensão de cisalhamento**. Aqui, o produto $\mathcal{T} \cdot d\vec{A}$ não é necessariamente paralelo ao vetor normal $d\vec{A}$. A segunda lei de Newton afirma que a taxa de mudança de qualquer porção \mathcal{W} do fluido que se move é igual à força atuando nela:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{W}} \rho \vec{u} dV = - \oint_{\partial \mathcal{W}} (p - \mathcal{T}) \cdot d\vec{A} \quad (2-46)$$

\mathcal{T} modifica o transporte de momento através da fronteira de \mathcal{W} . O tensor de tensão, \mathcal{T} , é escolhido de tal forma que reflita o transporte de momento em nível molecular. Ainda, \mathcal{T} deve ser simétrico, o que pode ser deduzido da conservação do momento angular. Neste ponto, é conjecturado que \mathcal{T} tem uma dependência linear do gradiente de velocidade $\nabla \vec{u}$. Também é suposto que \mathcal{T} é invariante sob rotações de corpo rígido, desde que não há difusão de momento quando o fluido sofre uma rotação de corpo rígido: $\mathcal{T}(\mathcal{U} \cdot \nabla \vec{u} \cdot \mathcal{U}^{-1}) = \mathcal{U} \cdot \mathcal{T}(\nabla \vec{u}) \cdot \mathcal{U}^{-1}$, com \mathcal{U} sendo uma matriz ortogonal.

Como \mathcal{T} é simétrico, segue das propriedades de rotação de corpo rígido e da dependência de $\nabla \vec{u}$ em \mathcal{T} , que \mathcal{T} depende somente da parte simétrica de $\nabla \vec{u}$, isto é, da taxa de deformação, $\dot{\epsilon}$. Como \mathcal{T} é uma função linear de $\dot{\epsilon}$, e, ainda, $\dot{\epsilon}$ e \mathcal{T} comutam, eles podem ser simultaneamente diagonalizados. Assim, os auto-valores de \mathcal{T} são funções lineares dos auto-valores de $\dot{\epsilon}$. Ainda, eles devem ser simétricos por conta de \mathcal{U} poder permutar com dois auto-valores de $\dot{\epsilon}$. As únicas funções lineares que são simétricas neste sentido são da forma

$$\tau_i = \lambda(d_1 + d_2 + d_3) + 2\mu d_i, \quad (2-47)$$

onde τ_i são os auto-valores de \mathcal{T} e d_i são os de $\dot{\epsilon}$. As constantes λ e μ são definidas desta maneira. É possível escrever o tensor de tensão como

$$\boxed{\mathcal{T} = \lambda(\nabla \vec{u}) \mathcal{I} + 2\mu \dot{\epsilon}}, \quad (2-48)$$

onde \mathcal{I} é a identidade. Ainda, escrevendo separadamente o traço num só termo, tem-se

$$\mathcal{T} = 2\mu \left[\dot{\epsilon} - \frac{1}{3}(\nabla \vec{u}) \mathcal{I} \right] + \zeta(\nabla \vec{u}) \mathcal{I}, \quad (2-49)$$

onde μ é o **primeiro coeficiente da viscosidade** e $\zeta = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ é o **segundo coeficiente da viscosidade**.

Aplicando o Teorema do Transporte e o Teorema da Divergência, a Segunda Lei de Newton leva às **equações de Navier-Stokes**:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \vec{u}) + \mu \nabla^2 \vec{u} + \rho \vec{f}. \quad (2-50)$$

Junto da equação da continuidade 2-5 e da conservação da energia 2-17, esta equação descreve completamente o escoamento de um fluido Newtoniano compressível.

Para escoamentos incompressíveis, $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, em condições isotérmicas, o conjunto completo de equações formam as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \rho \vec{f}, \quad (2-51)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (2-52)$$

Estas equações são solucionadas utilizando-se as condições de contornos apropriadas. Numa fronteira sólida em repouso a velocidade normal é zero, $\vec{u} \cdot \hat{n}$; visto que o fluido não atravessa a fronteira do sólido. É comum, ainda, utilizar-se da condição da velocidade tangencial à fronteira sólida como sendo também zero⁶. Assim, $\vec{u} = \vec{0}$ em $\partial\mathcal{W}$. A necessidade matemática para mais condições de contorno aparece da necessidade de unicidade das soluções para uma dada condição inicial.

2.3.1

Similaridade Mecânica e o número de Reynolds

A existência de dois tipos de escoamentos viscosos é um fenômeno universalmente aceito. Um tipo de escoamento bem ordenado ocorre quando camadas adjacentes do fluido deslizam suavemente sobre as outras sem mistura entre as camadas (ou lâminas), onde uma mistura das partículas do fluido ocorre apenas no nível molecular. Foi deste tipo de escoamento que a relação de viscosidade de Newton foi derivada, e de modo que para medir a viscosidade μ este **escoamento laminar** deve existir. O outro tipo de escoamento, no qual pequenos pacotes das partículas do fluido são transferidas entre as camadas, levando a uma natureza flutuante na distribuição de velocidades, é chamado de regime de **escoamento turbulento**.

A existência de escoamentos laminares e turbulentos, embora reconhecida anteriormente (os primeiros resultados nas condições para transição para turbulência foram obtidos por Hagen, em 1839 (Mon07)), foi primeira descoberta

⁶Esta condição é chamada de **não-deslizamento nas paredes**.

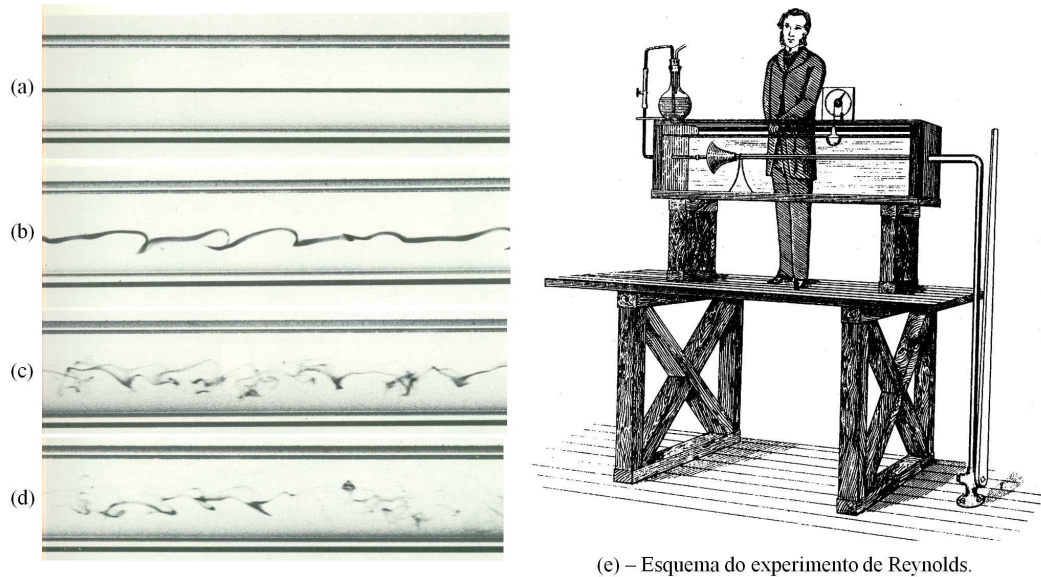
quantitativamente por Osborne Reynolds, em 1883 (Rey83). Seu experimento clássico foi realizado com o escoamento de fluidos em tubos, ilustrado na figura 2.4. O movimento principal do escoamento aparece na direção do eixo do tubo. Por conta das flutuações do escoamento, uma mistura eficiente ocorre no escoamento turbulento, levando a um movimento transverso perpendicular ao movimento principal (figuras 2.4-(c) e 2.4-(d)). Por esta razão, a distribuição de velocidades através do diâmetro do tubo é muito mais uniforme para o escoamento turbulento do que para o escoamento laminar no tubo. Neste experimento, Reynolds descobriu que a transição do escoamento laminar para o turbulento sempre acontece aproximadamente no mesmo valor de um parâmetro hoje conhecido como número de Reynolds, Re . O valor numérico do número de Reynolds crítico no qual a transição ocorre é $Re_C = 2300$. Então, escoamentos em tubos cujos números de Reynolds são menores que o número de Reynolds crítico são laminares, e, para aqueles em que $Re > Re_C$ o padrão é turbulento. O número de Reynolds crítico depende fortemente do escoamento de entrada no tubo. Reynolds já suspeitava que o número de Reynolds crítico seria maior se as perturbações no escoamento de entrada fossem menores. Isto foi confirmado experimentalmente. Escoamentos com valores de Re_C até 40000 são capazes de serem medidos. Por outro lado, um limite menor para Re_C em torno de 2000 foi medido. Abaixo deste valor, o escoamento permanece laminar, mesmo para perturbações muito fortes. Hoje, é sabido dos resultados da Teoria de Estabilidade, que a transição laminar-turbulenta é causada por perturbações tridimensionais. O escoamento de tubo é estável com respeito às perturbações bidimensionais.

A mudança na **lei de arrasto**⁷ do tubo está associada com a transição laminar-turbulenta. Considerando que para o escoamento laminar, a queda de pressão é proporcional à primeira potência da velocidade média do escoamento u_0 , para escoamentos turbulentos esta queda de pressão é quase proporcional ao quadrado da velocidade média do escoamento. Este arrasto grande é devido ao movimento turbulento de mistura.

A transição do escoamento laminar para o turbulento em canais é, então, uma função da velocidade do fluido. Na verdade, Reynolds descobriu que a velocidade do fluido era apenas uma variável determinando a natureza do escoamento no canal, sendo as outras o diâmetro do canal, a densidade e a viscosidade do fluido. Estas quatro variáveis se combinam num único parâmetro adimensional, o **número de Reynolds**:

$$\boxed{Re \equiv \frac{\rho}{\mu} u_0 L.} \quad (2-53)$$

⁷A lei de arrasto é discutida, em detalhes, no próximo capítulo.



(e) – Esquema do experimento de Reynolds.

Figura 2.4: Experimento clássico de Osborne Reynolds para classificação dos escoamentos. Neste experimento, um tubo de vidro é preenchido com um fluido Newtoniano onde um gradiente de pressão faz com que haja um escoamento. Uma fina agulha injeta no eixo central do tubo um outro líquido de propriedades físicas semelhantes ao outro fluido, apenas para visualização da trajetória das partículas do fluido injetado (e). Através deste experimento, Reynolds caracteriza (a) o escoamento laminar estacionário ($Re \ll 1$), (b) o escoamento ainda laminar mas transiente ($Re \sim 1$), (c) o escoamento turbulento próximo ao número de Reynolds crítico ($Re \sim Re_C$) e (d) o escoamento puramente turbulento ($Re \gg Re_C$).

O número de Reynolds significa a razão entre os valores característicos das forças inerciais e viscosas. As forças de inércia têm a forma $\vec{u}\nabla\vec{u}$ enquanto que as forças viscosas de atrito são da forma de $\frac{\mu}{\rho}\nabla^2\vec{u}$. Então, se u_0 é a velocidade do escoamento e L é o comprimento característico do sistema, as forças inerciais são da ordem de u_0^2/L e as forças viscosas são da ordem de $\frac{\mu}{\rho}u_0/L^2$. Assim

$$\frac{\frac{u_0^2}{L}}{\frac{\mu}{\rho} \frac{u_0}{L^2}} = \frac{\rho}{\mu} u_0 L = Re. \quad (2-54)$$

No caso dos pequenos valores de Reynolds, a viscosidade tem um efeito considerável no escoamento inteiro homogeneizando todas as inhomogeneidades existentes em menor escala; assim variações espaciais dos campos devem ser suaves. No caso de valores altos do Reynolds, o papel dominante é das forças inerciais, a ação que leva a transferência de energia de componentes de alta escala do fluido para componentes em menor escala e conseqüentemente a formação de irregularidades locais. Assim, acima do número de Reynolds crítico, Re_C , pequenas perturbações causarão uma transição para um escoamento turbu-

lento, enquanto que abaixo deste valor, perturbações serão amortecidas e o escoamento laminar prevalece, como dito anteriormente (Mon07). Os escoamentos estudados nesta tese ocorrem todos abaixo do Re_C , de tal forma que a turbulência não é um efeito considerado aqui.

As equações de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos incompressíveis (equação. 2-51) podem ser modificadas para incluir uma dependência explícita do número de Reynolds. Sejam $\vec{u}' = \frac{\vec{u}}{u_0}$, $p' = \frac{p}{\rho u_0^2}$, $\vec{f}' = \frac{L_0}{\rho u_0^2} \vec{f}$, $\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{L_0}{u_0} \frac{\partial}{\partial t}$ e $\nabla' = L_0 \nabla^8$ - com L_0 sendo um comprimento característico do sistema e u_0 uma velocidade característica - as equações de Navier-Stokes tornam-se

$$\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + \vec{u}' \cdot \nabla' \vec{u}' = -\nabla' p' + \frac{\mu}{\rho U_0 L_0} \nabla'^2 \vec{u}' + \vec{f}', \quad (2-55)$$

ou

$$\boxed{\frac{\partial \vec{u}'}{\partial t'} + \vec{u}' \cdot \nabla' \vec{u}' = -\nabla' p' + \frac{1}{Re} \nabla'^2 \vec{u}' + \vec{f}'}, \quad \text{com} \quad Re \equiv \frac{\rho}{\mu} u_0 L_0. \quad (2-56)$$

Assim, para escoamentos com mesmo número de Reynolds, a equação que descreve o comportamento do fluido é invariante.

Viscosidade

Para escoamentos em que o número de Reynolds é baixo ($Re \ll 1$), experimentos podem ser realizados a fim de determinar a viscosidade de uma substância. A **viscosidade aparente real**, μ_a , de uma substância é definida através de

$$\tau_{yx} = -\mu_a \frac{du_x}{dy}, \quad (2-57)$$

onde τ_{ij} é a tensão de cisalhamento na superfície de área A nas coordenadas i e j . A viscosidade, por estes termos, é uma medida de quanto uma tensão de cisalhamento aplicada deforma continuamente um fluido. Se μ_a é uma constante por toda uma faixa de valores de τ , escreve-se simplesmente μ para designar a **viscosidade Newtoniana** e seu recíproco é conhecido como *fluididez*. Considerando que a força tensionando a superfície é $\vec{F} = \mathcal{T} \cdot \hat{n}A$, a viscosidade então fica definida neste caso simples como

$$\mu = -\tau \frac{h}{\Delta u} = -\frac{hF}{A\Delta u}. \quad (2-58)$$

Na equação 2-57, a viscosidade é a constante de proporcionalidade entre a tensão aplicada e a taxa de deformação sofrida pelo fluido. Ela pode ser pensada como uma resistência à deformação do fluido dada uma tensão aplicada.

⁸Onde as operações vetoriais usuais, agora, são realizadas nas coordenadas do espaço de $\vec{r}' = \vec{r}/L_0$.

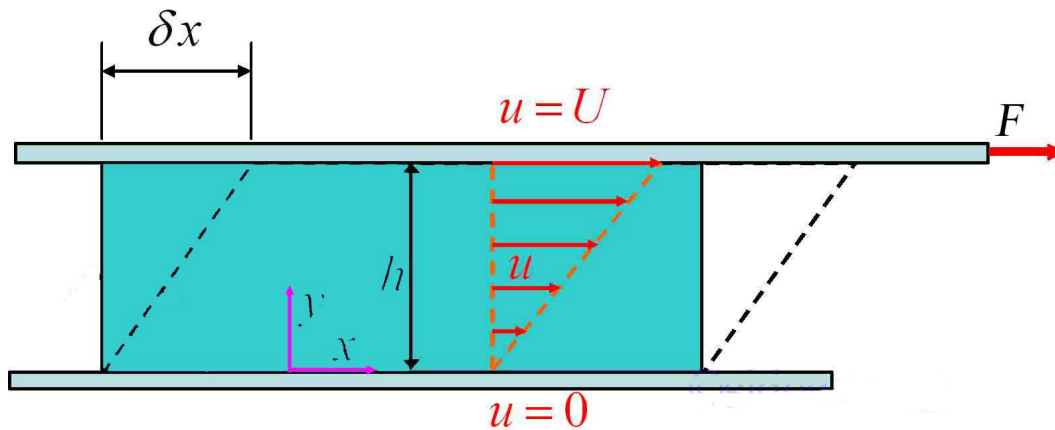


Figura 2.5: Um força constante F é aplicada tangencialmente à área de superfície A ocasionando um deslocamento δx da lâmina a uma velocidade U relativa a uma lâmina paralela estacionária distante h , em $y = 0$. Se o fluido for dito Newtoniano, uma grandeza chamada de viscosidade poderá ser definida através da equação 2-57.

2.4

Escoamento Capilar

Como comentando ao final da seção anterior, Osborne Reynolds realizou suas investigações a respeito da transição para escoamentos turbulentos em um tubo. Este tipo de escoamento tem suas próprias características, que são obtidas quando as condições de contorno deste escoamento são empregadas às equações de Navier-Stokes e da continuidade.

Escoamentos laminares que ocorrem em geometrias suficientemente simples, tais que as soluções exatas podem ser encontradas, são de importância primordial para a compreensão da reologia. Tais escoamentos podem servir como experimentos de referência para a determinação de algumas propriedades do fluido.

Hagen, em 1839, e Poiseuille, em 1840, estudaram o escoamento de um tubo longo de seção circular sob a ação de um gradiente de pressão imposto nas duas saídas do tubo (Hag39, Poi40). É suposto que o escoamento ocorra somente na direção longitudinal do tubo (veja figura 2.4-(a)). Para esta descrição, é comum fazer uso do sistema de coordenadas cilíndricas (r, θ, z) cuja velocidade neste sistema é estacionária e propõe-se ocorrer somente na coordenada z , isto é, $(0, 0, u_z)$. O tensor de tensão deviatórico, que leva em conta o tensor de tensão de cisalhamento (equação. 2-48) mais a tensão normal da pressão, toma a forma

$$\mathfrak{T} = p\mathcal{I} + \mathcal{T} = \begin{bmatrix} p + \tau_{rr} & 0 & \tau_{rz} \\ 0 & p + \tau_{\theta\theta} & 0 \\ \tau_{rz} & 0 & p + \tau_{zz} \end{bmatrix}, \quad (2-59)$$

onde $\tau_{\theta\theta}$ deve ser zero, se não houver escoamento helicoidal. A taxa de deformação, $\frac{du_z}{dr}$, é negativa, desde que r é medido a partir do eixo central e a tensão τ_{rz} é sempre positiva. Assim,

$$\tau_{rz} = -\mu_a \frac{du_z}{dr}, \quad (2-60)$$

e, as equações de movimento reduzem-se a

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{rr}), \quad (2-61)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{rz}). \quad (2-62)$$

Da segunda equação, tem-se

$$\frac{dp}{dz} = \frac{\mu}{r} \frac{du_z}{dr} + \mu \frac{d^2u_z}{dr^2}. \quad (2-63)$$

Como dp/dz é uma constante, diga-se $dp/dz = G$, então, chega-se a uma equação diferencial de segunda ordem para a componente da velocidade na direção perpendicular ao escoamento, com condições de contorno $u_z = 0$ em $\partial\Omega$ ($r = \pm R$). A solução desta equação se dá através do *método da variação dos parâmetros*:

$$u_z = -\frac{G}{4\mu} (r_0^2 - r^2). \quad (2-64)$$

A equação 2-61 leva à velocidade constante na direção do escoamento, desde que $\frac{dp}{dr} = 0$. A quantidade de massa de fluido que passa na seção reta é facilmente calculada através de

$$Q = \int_0^{r_0} 2\pi r u_z dr = \frac{\pi G r_0^4}{8\mu} = \frac{\pi r_0^4 \Delta p}{8\mu L}. \quad (2-65)$$

A equação 2-65, chamada de **equação de Hagen-Poiseuille**, relaciona a queda de pressão e o raio do tubo elevado a quarta potência com o fluxo de massa. A equação 2-65 foi validada através de vários experimentos realizados ao longo dos anos, o que ratifica a condição de não-deslizamento nas bordas do canal. Ainda, conhecendo-se o raio do canal, a queda de pressão ao longo dele e o fluxo de massa, a viscosidade do líquido pode ser determinada.

É notório que a força devido a tensão cortante (equação. 2-60) é

$$F = \tau_{rz} \cdot \hat{r} 2\pi r_0 L = -\mu \left(\frac{du_z}{dr} \right)_{r=r_0} 2\pi r_0 L = 2\pi \mu r_0 L \frac{r_0}{2\mu} \frac{\Delta p}{L} = \pi r_0^2 \Delta p. \quad (2-66)$$

Esta equação mostra que a força de atrito devido a fricção é justamente a força

resultante aplicada nas bordas do canal de área de seção reta πr_0^2 .

No caso de tubos não circulares, relações semelhantes a equação 2-65 podem ser encontradas, embora apenas em alguns casos especiais soluções analíticas podem ser obtidas (Bat00). Uma relação semi-empírica importante utilizada na Engenharia Hidráulica é utilizar um parâmetro chamado de **raio hidráulico**, R_H , de tal forma que ele sirva como um raio de um tubo circular, que sob as mesmas condições de descarga para um mesmo fluido, apresente a mesma queda de pressão do canal não circular. Matematicamente, o raio hidráulico é definido através de

$$R_H \equiv 2 \frac{A_H}{P_H}, \quad (2-67)$$

onde A_H é a área da seção reta do canal e P_H é o **perímetro molhado** do canal, ou seja, P_H é o comprimento da seção reta do canal que está em contato com o fluido. De uma forma geral, esta definição do raio hidráulico é utilizada para canais abertos, como em rios, canais e vertedouros.

A velocidade média do escoamento neste canal de raio R_H é calculada pela equação de Hagen-Poiseuille (equação. 2-65) fazendo

$$u_0 = \frac{\int u_z dA}{\int dA}, \quad (2-68)$$

onde as integrais são realizadas na seção reta de um tubo circular de raio R_H e a velocidade é dada pela equação 2-64. Assim

$$u_0 = \frac{Q}{\pi R_H^2} = -\frac{R_H^2}{8\mu} \frac{\Delta p}{L}. \quad (2-69)$$

A equação 2-69 mostra que a velocidade média num canal capilar é proporcional ao gradiente de pressão. É comum definir uma constante κ chamada de **permeabilidade hidráulica** a fim de contabilizar a dificuldade de um fluido escoar dado um gradiente de pressão.

Quando o fluido sai ou entra num canal capilar, é observada uma queda de pressão associada com o rearranjo do perfil de velocidade. Se a queda de pressão for considerável devido aos efeitos de saída, a medição da tensão de cisalhamento nas paredes do capilar poderá ser incorreta. Existem diversos fatores contribuindo para a perda de pressão, o que leva a uma tarefa difícil a identificação de cada um destes fatores. As medidas de pressão, em geral, são feitas entre dois reservatórios, de tal forma que os efeitos da corrente de entrada e saída podem afetar a precisão da medição. Aí, existem a perda de energia por atrito e as mudanças na energia cinética devido ao rearranjo do perfil de velocidades. Entretanto, nesta tese os efeitos de saída e de entrada dos escoamentos serão ignorados.

2.5

Fluidos não-Newtonianos

A definição comum do que vem a ser um fluido é aquela que determina uma substância que é deformada continuamente sob a aplicação de uma tensão de cisalhamento (Fox85). De tal maneira, todos os gases conhecidos são fluidos. Entretanto, existem muitas classes de substâncias líquidas que não são deformadas continuamente sob tensão, tais como certos óleos, graxas, vidro, gel para cabelo, clara de ovo, leite, chocolate derretido, lama de perfuração e algumas suspensões.

2.5.1

Tipos de Materiais

Muitos sólidos, tais como o aço, têm uma relação de tensão-deformação que é linear, embora relações não-lineares para sólidos também sejam possíveis. Além do mais, se a tensão aplicada é mantida abaixo de certos limites, a mesma curva pode ser redesenhada assim que a deformação diminui gradativamente, tal que quando a tensão torna-se ausente, não há deformação permanente. As tensões são mantidas constantes de tal forma que as complicações associadas com grandes deformações não são introduzidas. Existem dois tipos de deformação a serem consideradas: a deformação extensional, na qual uma mudança no tamanho, mas não na forma, causa uma mudança na densidade do corpo; e a deformação de cisalhamento, na qual há mudança na forma, mas não na densidade e tamanho. As deformações fracionais serão chamadas simplesmente de deformações⁹ e são respectivamente: deformação dilatacional ($e_v = \Delta\rho/\rho_{medio}$), deformação extensional ($e_l = \Delta l/l_{medio}$, onde l é o comprimento) e deformação de cisalhamento ($e_\tau = \gamma \cong \Delta x/\Delta y$). A lei de Hooke é uma definição clássica de elasticidade linear e pode ser expressa como as relações lineares entre as deformações acima mencionadas e as tensões correspondentes:

$$p = k_e e_v, \quad (2-70)$$

onde k_e é o módulo de elasticidade do volume.

$$T = Y e_l, \quad (2-71)$$

onde T é a tensão de tração e Y é o módulo de Young.

$$\tau = -G e_\tau, \quad (2-72)$$

onde G é o módulo de cisalhamento ou a rigidez do material. Existe um número grande de relações deste tipo, sendo que elas se relacionam entre si (Zer02). Mas

⁹ *Strain* em língua inglesa.

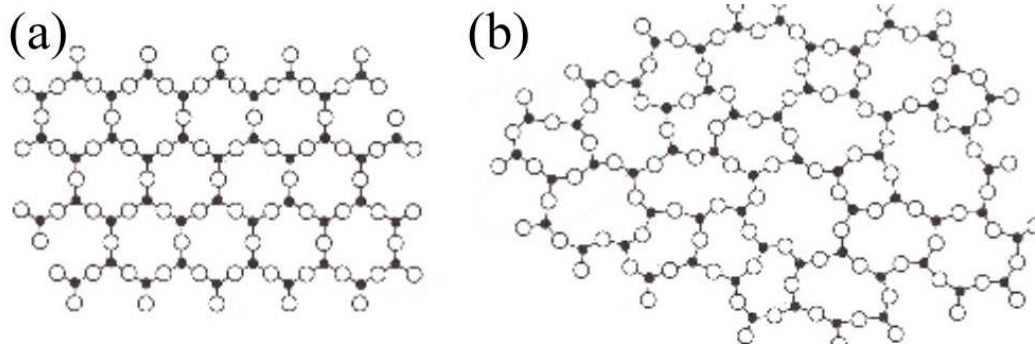


Figura 2.6: Estrutura molecular de duas substâncias formadas pelos mesmos elementos: Em (a), estrutura cristalina e em (b) uma estrutura amorfa ou vítrea. Sólidos vítreos apresentam propriedades de escoamentos em escalas de tempo geológicas.

basta conhecer apenas duas destas relações para uma descrição completa do material. Obviamente, esta descrição simplificada de um material é um modelo do mesmo modo que o fluido de Euler é uma idealização de um fluido. Um outro material ideal é o corpo de Saint Venant, o qual deforma-se elasticamente com alguma tensão aplicada, porém quando a tensão desaparece, a fração elástica da deformação total é retomada. Um fluido Newtoniano é definido através da definição da viscosidade (equação 2-57).

2.5.2

Materiais não-Newtonianos

A distinção entre líquidos e sólidos pode não ser evidente, para alguns casos, como em substâncias plásticas. A discussão a esse respeito vem da reologia da substância em questão, mas pode também ser oriunda da estrutura molecular do sólido. Em geral, sólidos são definidos como sendo aquelas substâncias que possuem uma estrutura cristalina, enquanto que sólidos que têm estrutura vítrea são chamados de fluidos super-resfriados (ver figura 2.6). A reologia tem como principal tema de estudo a viscosidade de um material. Da equação 2-57 para um fluido Newtoniano, a viscosidade é definida como a razão entre a tensão aplicada, τ , e o gradiente de velocidade na direção do escoamento, $\frac{du}{dy}$. Este caso particular do gradiente de velocidade pode não ser útil para uma descrição geral, de tal forma que é comum definir a taxa de deformação efetiva como

$$\dot{\gamma} \equiv \sqrt{\frac{1}{2} \dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}}, \quad (2-73)$$

onde na equação 2-73

$$\dot{\epsilon}_{ij} \equiv \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (2-74)$$

são as componentes que definem o tensor da taxa de deformação $\dot{\epsilon}$. Assim, é comum representar as propriedades reológicas de uma substância através das curvas de τ versus $\dot{\gamma}$ de escoamentos possíveis de serem realizados. Existe um grande número de equações que são usadas para ajustar as curvas de τ - $\dot{\gamma}$. A maioria destas equações é utilizada para descrever o diagrama básico de τ versus $\dot{\gamma}$ e, para tal, a maior parte é empírica ou semi-empírica. Poucas equações são baseadas em teoria; elas são geralmente baseadas em considerações moleculares e em conjecturas em torno do mecanismo no qual aparece o comportamento não-Newtoniano observado (Bro67).

Aparentemente, sob condições extremas (tais como tensão de cisalhamento muito alta), todos os fluidos, mesmo aqueles normalmente considerados Newtonianos, desviam-se da lei de Newton de viscosidade (equação 2-57). Mesmo em líquidos tão simples como a água, a estrutura molecular apresenta a tendência a se tornar anisotrópica durante a ação de cisalhamento; embora o grau de anisotropia possa ser pequeno e insuficiente para afetar a viscosidade medida. A tabela 2.5.2 apresenta a classificação de diversos materiais (sólidos e fluidos) em termos da viscosidade aparente a ser definida através de 2-75.

A **viscosidade aparente** (não-constante) é definida como a de um fluido Newtoniano através da razão entre a tensão aplicada num fluido e o gradiente de velocidade na direção perpendicular:

$$\tau_{yx} = -\mu_a \frac{du_x}{dy}. \quad (2-75)$$

Aqui a tensão de cisalhamento e taxa de deformação são derivadas do diagrama básico de τ contra $\dot{\gamma}$ e μ_a é a chamada **viscosidade aparente real**. A viscosidade molecular é definida também através da curva de τ - $\dot{\gamma}$ como

$$\boxed{\mu = \frac{d\tau}{d\dot{\gamma}}} \quad (2-76)$$

Uma vez que a viscosidade definida através da equação 2-76 representa melhor a relação entre τ e $\dot{\gamma}$ num determinado ponto, ela é preferível em relação a μ_a (equação. 2-75). Nas figuras 2.7 as viscosidades aparente e molecular são apresentadas para várias curvas de τ - $\dot{\gamma}$.

Tabela 2.1: Classificação dos Fluidos não-Newtonianos (Tabela adaptada de (Gra07)).

Tipo de Fluido	Classificação	Comportamento $\tau/\dot{\gamma}$	Exemplos
Sólidos Elásticos	Hookiano	Relação linear entre a deformação e a tensão	A maioria dos sólidos abaixo de limiar de tensão
Sólidos Plásticos	Perfeitamente Plástico	A deformação continua sem tensão adicional	Metais dúcteis tensionados acima do limiar de tensão
	Plástico de Bingham	Comporta-se como um fluido Newtoniano quando o limiar é excedido	Suspensões de óxido de ferro
	Visco-plástico	Como o plástico de Bingham, mas a relação entre tensão e a taxa de deformação é não-linear	lama de perfuração, refugo de fluido nuclear, maionese, pasta de dente, sangue
	Dilatante concedido	Dilatante quando o limiar de tensão é excedido	
	Visco-elástico	Exibe tanto efeitos elásticos quanto viscosos	Clara de ovo, polímeros derretidos e suas soluções
Lei de potência	Pseudo-plástico	A viscosidade aparente diminui com o aumento da tensão de cisalhamento	Alguns colóides, barro, leite, gelatina, sangue, cimento líquido, poliestireno derretido, óxido de polietileno na água
	Dilatante	A viscosidade aparente aumenta com o aumento da tensão de cisalhamento	Soluções concentradas de açúcar em água, suspensões de arroz ou amido de milho, soluções de certos tipos de surfactantes
Transitório	Rheopético	A viscosidade aparente aumenta com o tempo da tensão de cisalhamento aplicada	Alguns lubrificantes
	Thixotrópico	A viscosidade aparente diminui com o tempo da tensão de cisalhamento aplicada	Tintas que não pingam, catchup
Eletromagnético	Eletroreológico	Torna-se dilatante quando um campo elétrico é aplicado	Chocolate derretido, suspensões policristalinas em fluids isolantes
	Magnetoreológico	Torna-se dilatante quando um campo magnético é aplicado	Colóide com nano-partículas de sílica suspensas em glycol polietileno
Newtoniano		Relação linear	Água, ar

2.5.3

Materiais pseudo-plásticos

A figura 2.7-(a) mostra a curva de tensão de cisalhamento contra a taxa de deformação para um **plástico de Bingham ideal** (Bin22). A viscosidade aparente real, como definida em 2-75, diminui com o aumento da tensão de cisalhamento. Então, este material é uma subclasse do grupo mais geral de materiais pseudo-plásticos¹⁰. A curva de escoamento é caracterizada pela taxa de deformação ser linearmente dependente da tensão de cisalhamento acima de um valor dado de tensão τ_0 . Se a tensão é subtraída de τ_0 , a viscosidade definida na lei de Newton é chamada de **viscosidade plástica**. Seu recíproco é chamado de *mobilidade*. A equação reológica de estado deste material ideal é então

$$\tau = \mu\dot{\gamma} - \tau_0, \quad \tau > \tau_0. \quad (2-77)$$

A maioria dos materiais encontrados na natureza não são ideais, mas alguns poucos podem ser aproximados por esta equação. Entretanto a mudança de viscosidade do material no ponto em que $\tau = \tau_0$ é descontínua, o que não é encontrado com facilidade na natureza. Ainda, materiais que têm viscosidade infinita, i. e., sólidos, não sofrem uma transição abrupta no limiar de tensão τ_0 . Por esta razão, vários modelos têm sido propostos a fim de melhor modelar as curvas reológicas de um plástico de Bingham. Um modelo freqüentemente utilizado para aproximar sua reologia é o Modelo de Herschel-Bulkley (Her26), que combina os efeitos do plástico de Bingham e o comportamento de fluidos do tipo lei-de-potência (que são discutidos mais adiante). Para baixas taxas de deformação, $\dot{\gamma} < \tau_0/\mu_0$, o material atua como um fluido muito viscoso com viscosidade μ_0 . Assim que a tensão aplicada aumenta e o limiar de tensão, τ_0 , é excedido, o comportamento da viscosidade do fluido pode ser descrito como

$$\tau = \left[\frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + \frac{K_{HB}}{\dot{\gamma}} \left(\dot{\gamma}^n - \frac{\tau_0^n}{\mu_0^n} \right) \right] \dot{\gamma}. \quad (2-78)$$

Aqui K_{HB} é o índice de consistência e n é o índice da lei de potência que para um fluido de Bingham, deve possuir valor unitário. O índice de consistência é o valor da viscosidade do material longe da região onde o limiar de tensão τ_0 foi excedido, ver figura 2.7-(b).

Bingham descobriu que alguns materiais pseudo-plásticos claramente não possuem um valor de limiar de tensão para fluir. Exemplos de tais materiais são soluções poliméricas de alto peso molecular e emulsões (Mar55). O tipo de curva de escoamento observada de tais materiais é mostrada na figura 2.7-(c). Williamson (Wil29) introduziu o termo *pseudo-plástico* para descrever tais

¹⁰Muitos autores e pesquisadores preferem o termo *Shear Thinning*, em língua inglesa, ao termo pseudo-plástico (*pseudo-plastic*, em língua inglesa).

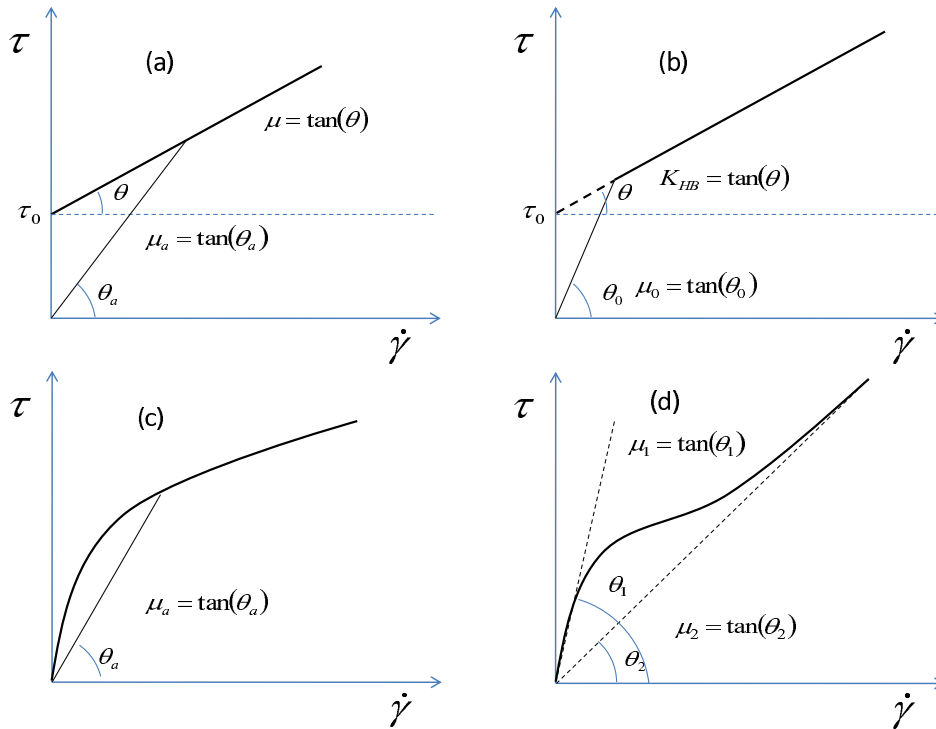


Figura 2.7: Curvas de τ contra $\dot{\gamma}$ (a) para um plástico de Bingham ideal, (b) para um fluido de Herschel-Bulkley, (c) para um pseudo-plástico ideal e (d) para um pseudo-plástico de Ostwald.

materiais, já que estes não apresentam limiar de plasticidade como num sólido. Ostwald (Ost24) sugeriu que se o escoamento laminar para a curva da figura 2.7-(c) pudesse ser mantido, a curva deveria se parecer com aquela na figura 2.7-(d) (hoje em dia, conhecida como *curva de Ostwald*). Na literatura anterior aos anos de 1970 era comum os dados serem reportados apenas considerando o regime da figura 2.7-(c), principalmente, devido às limitações dos instrumentos usados para medição. Fluidos de Bingham também podem apresentar esse limite de corte, onde a viscosidade aparente do fluido chega a um valor limite constante dado pela relação de Newton.

2.5.4

Materiais Dilatantes e do tipo Shear Thickening

Um material dilatante é caracterizado pelo diagrama de τ contra $\dot{\gamma}$ dado pela figura 2.8, onde um aumento da tensão é acompanhado por um aumento da viscosidade. Materiais que exibem *dilatância*¹¹ são considerados pertencentes a alguma subclasse específica. **Dilatância** é um termo introduzido por Reynolds

¹¹Tradução livre de *dilatancy* como em (Bro67).

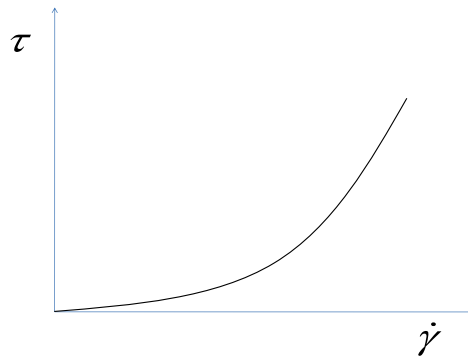


Figura 2.8: Curva de τ contra $\dot{\gamma}$ para um material do tipo *shear thickening*

(Rey85) e é usado para descrever o aumento da rigidez que aparece em materiais quando eles estão fortemente empacotados. O aumento é associado com um aumento no volume, ou seja, um efeito dilatante. Então, dilatância é associada apenas com suspensões altamente concentradas.

Reynolds descobriu o fenômeno da dilatância durante uma pesquisa cujo propósito era chegar a uma teoria mecânica para o éter. No experimento, ele usou sacos flexíveis preenchidos com esferas de vidro ou areia de quartzo. Ele descobriu que se um saco fosse preenchido com água, ele seria rígido. A mudança no volume pode ser vista se o saco estiver conectado a um tubo de vidro. Na distorção o nível de líquido cai, ao contrário de aumentar como era esperado. Reynolds concluiu que qualquer distorção necessita de uma mudança no volume. Ele apresentou, como exemplo comum, a dilatância da areia. Quando a razão água-para-areia é tal que não haja água suficiente para preencher todos os vazios e quando o volume da areia é mínimo, qualquer tensão aplicada força o material a fluir, perturbando a posição das partículas e causando dilatação dos vazios. Isto leva a uma situação na qual o volume total dos vazios é maior que o volume da água presente. Como resultado, há um aparente secagem que aumenta a resistência do material à tensão aplicada. A secagem é um resultado do tempo necessário para as forças capilares proverem a água adicional requerida para a saturação completa. Quando a pressão é removida, a areia torna-se novamente molhada. Uma vez que os vazios se contraem, a água que preenchia o excesso de vazio escapa para a superfície.

Já materiais que apresentam um aumento na viscosidade com o aumento da tensão de cisalhamento aplicada, mas não apresentam dilatância, recebem, puramente, a classificação de *shear thickening*.

2.5.5

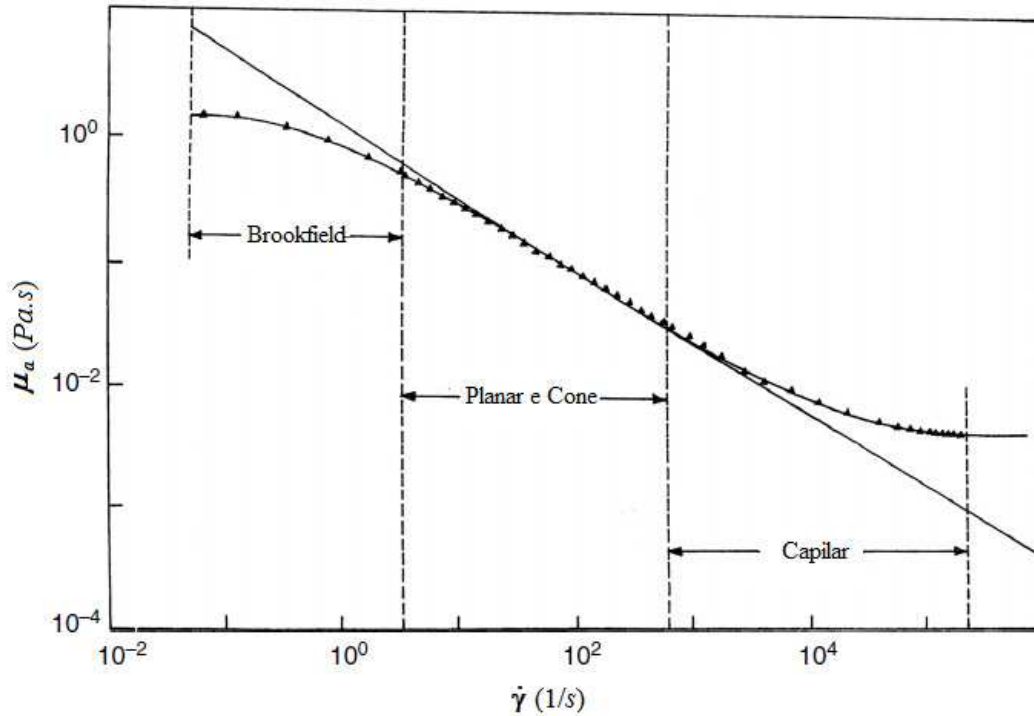


Figura 2.9: Viscosidade aparente de uma solução aquosa polimérica (poliacrilamida) em função da taxa de deformação. A viscosidade aparente foi obtida com diferentes tipos de viscosímetros: Brookfield, Cone e Placa e viscosímetro capilar. Adaptado de (Chh07).

Fluidos do tipo lei-de-potência ou Fluidos de Ostwald

Fluidos do tipo *shear thinning* ou *shear thickening* podem ser representados por um modelo conhecido como **Modelo de Lei-de-potência** da viscosidade. É bastante aceito que a maioria dos fluidos não-Newtonianos cuja viscosidade é independente do tempo é do tipo *shear thinning*. A figura 2.9 mostra a viscosidade aparente de uma solução aquosa de poliacrilamida contra a taxa de deformação, mostrando que tal solução apresenta uma dependência de lei de potência da taxa de deformação na viscosidade para uma gama de valores de $\dot{\gamma}$. É possível notar uma queda da viscosidade aparente de 1400 Pa.s para 0.004 Pa.s . A relação constitutiva para um fluido do tipo lei-de-potência pode ser escrita como

$$\mu = K\dot{\gamma}^{n-1}, \quad \mu_1 < \mu < \mu_2, \quad (2-79)$$

onde as constantes μ_1 e μ_2 são os limites de corte inferior e superior da viscosidade aparente, respectivamente, K é o índice de consistência, neste caso, a viscosidade média do material, os limites μ_1 e μ_2 são uma imposição experimental (ver figura 2.9) localizada no nível molecular do fluido. Para uma

descrição mais rigorosa das relações constitutivas para fluidos não-Newtonianos ler apêndice A.

2.5.6

Escoamentos Viscométricos

Escoamentos laminares que ocorrem em geometrias simples suficientes, tais que soluções exatas podem ser encontradas, são de importância fundamental no campo da reologia. O escoamento capilar, descrito anteriormente para um fluido Newtoniano, é baseado em coordenadas cilíndricas (r, θ, z) cujas velocidades $(0, 0, u_z)$ são estacionárias. O tensor de tensão tem a forma

$$\mathcal{P} = p\mathcal{I} + \mathcal{T} = \begin{pmatrix} p + \tau_{rr} & 0 & \tau_{rz} \\ 0 & p + \tau_{\theta\theta} & 0 \\ \tau_{rz} & 0 & p + \tau_{zz} \end{pmatrix}.$$

onde $\tau_{\theta\theta}$ deve ser zero se não houver nenhum escoamento helicoidal. A taxa de deformação $\frac{du_z}{dr}$ é sempre negativa, desde que r é medida da linha central e τ_{rz} é sempre positiva. A equação 2-75 torna-se

$$\tau_{rz} = -\mu_a \frac{du_z}{dr}, \quad (2-80)$$

e as equações de movimento reduzem-se a

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{rr}) - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r}, \quad (2-81)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{rz}). \quad (2-82)$$

Da segunda equação tem-se

$$\tau_{rz} = -\frac{r}{2} \frac{dp}{dz} = \frac{r}{r_0} \tau_p, \quad (2-83)$$

onde r_0 é o raio do tubo e $\tau_p = -\frac{r_0}{2} \frac{dp}{dz}$ é a tensão de cisalhamento na parede do tubo. A condição de contorno na parede é de não deslizamento $u_z = 0$. Assim, a taxa de fluxo de volume é

$$Q = \int_0^{r_0} 2\pi r u_z dr = 2\pi \frac{r_0^2}{\tau_p^2} \int_0^{\tau_p} \tau_{rz} u_z d\tau_{rz}. \quad (2-84)$$

A componente longitudinal da velocidade seria

$$u_z = \int_r^{r_0} \left(-\frac{du_z}{dr} \right) dr = \frac{r_0}{\tau_p} \int_{\tau_{rz}}^{\tau_p} \left(-\frac{du_z}{dr} \right) d\tau_{rz}. \quad (2-85)$$

Combinando as equações 2-85 e 2-84, tem-se

$$\frac{4Q}{\pi r_0^3} = \frac{8}{\tau_p^3} \int_0^{\tau_p} \tau_{rz} \int_{\tau_{rz}}^{\tau_p} \left(-\frac{du_z}{dr} \right) d\tau_{rz} d\tau_{rz}, \quad (2-86)$$

Usando integração por partes, tem-se

$$\frac{4Q}{\pi r_0^3} = \frac{4}{\tau_p^3} \int_0^{\tau_p} \tau_{rz}^2 \left(-\frac{du_z}{dr} \right) d\tau_{rz}. \quad (2-87)$$

Para fluidos Newtonianos $\mu \frac{du_z}{dr} = -\tau_{rz}$ as equações 2-85 e 2-84 resultam em

$$u_z = -\frac{r_0^2}{4\mu} \left(1 - \frac{r^2}{r_0^2} \right) \frac{dp}{dz} \quad (2-88)$$

$$\frac{4Q}{\pi r_0^3} = \frac{\tau_p}{\mu} = -\frac{r_0}{2\mu} \frac{dp}{dz} \quad (2-89)$$

Para fluidos não-Newtonianos estas equações definem a viscosidade aparente

$$\mu = \frac{\pi R^3 \tau_p}{4Q} = \frac{\tau_p^4}{4 \int_0^{\tau_p} \tau_{rz}^2 \left(-\frac{du_z}{dr} \right) d\tau_{rz}}. \quad (2-90)$$

O termo $\frac{4Q}{\pi R^3}$ é chamado de *pseudo taxa de deformação*. Note que $\tau_p = -\mu_a \left(\frac{du_z}{dr} \right)_p = \mu \frac{4Q\tau_p^3}{r_0^3}$.

A relação entre as equações 2-80 e 2-90 pode ser obtida da derivada de 2-87 em r_0 :

$$\frac{d}{d\tau_p} \frac{4Q\tau_p^3}{r_0^3} = -4\tau_p^2 \left(\frac{du_z}{dr} \right)_p. \quad (2-91)$$

assim

$$-\left(\frac{du_z}{dr} \right)_p = \frac{3Q}{\pi r_0^3} + \tau_p \frac{d}{d\tau_p} \left(\frac{Q}{\pi r_0^3} \right). \quad (2-92)$$

Esta equação foi descoberta por vários estudiosos ao mesmo tempo, sendo atribuída mais fortemente a Weissenberg, Rabinowitsch e Mooney (Dol97).

Fluidos do tipo lei-de-potência

Tomando a definição do fluido de lei de potência para um modelo capilar, tem-se

$$\tau_p = -\frac{r_0}{2} \frac{dp}{dz} = K \left(\frac{4Q}{\pi r_0^3} \right)^n \quad (2-93)$$

Aplicando esta relação em 2-92, tem-se

$$-\left(\frac{du_z}{dr} \right)_p = \frac{3n+1}{n} \frac{Q}{\pi r_0^3}. \quad (2-94)$$

É importante notar que o experimento de escoamento capilar não pode dar o diagrama de tensão diretamente, mas pode ser corrigido exatamente. A equação 2-94 pode ser usada para esta conversão. A figura 2.10 mostra os perfis da magnitude da velocidade para o escoamento de diferentes líquidos do tipo lei-de-potência. Note que para fluidos do tipo *shear thinning* a velocidade em pontos próximos da parede é mais alta se comparado com fluidos do tipo *shear thickening*. Estes perfis da velocidade foram obtidos combinando 2-85 e 2-80:

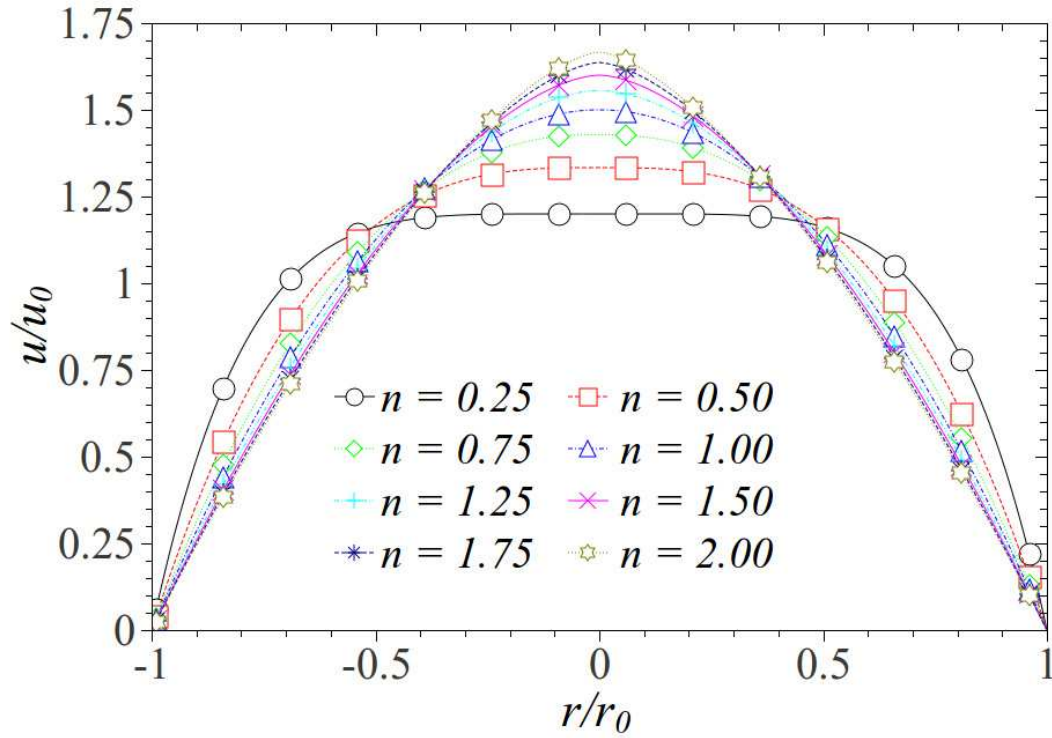


Figura 2.10: Magnitude da velocidade u_z normalizada por u_0 no escoamento de Poiseuille contra r/r_0 para vários fluidos do tipo lei-de-potência, onde r_0 é o raio do tubo.

$$u_z(r) = \frac{3n+1}{n+1} \left[1 - \left(\frac{|r|}{r_0} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right] u_0, \quad (2-95)$$

onde $u_0 = Q/2r_0$ é a velocidade média de entrada. Para $n = 1$ o fluido é Newtoniano e o perfil é parabólico como mostra a equação 2-64.

Fluido ideal de Bingham

A equação 2-90 pode ser integrada para o plástico ideal de Bingham, desde que é sabido que

$$-\frac{du_z}{dr} = 0, \quad 0 \leq \tau_{rz} \leq \tau_0; \quad (2-96)$$

$$-\frac{du_z}{dr} = \frac{1}{K_{HB}} (\tau_{rz} - \tau_0), \quad \tau_{rz} > \tau_0. \quad (2-97)$$

A integração deve ser feita em duas partes, de 0 até τ_0 e de τ_0 até τ_p . Para a viscosidade aparente, o resultado de 2-90 é

$$\mu_a = K_{HB} \left[1 - \frac{4\tau_0}{3\tau_p} + \frac{1}{3} \frac{\tau_0^4}{\tau_p^4} \right]^{-1}, \quad \tau_{rz} > \tau_0; \quad (2-98)$$

$$\mu_a = \infty, \quad \tau_{rz} < \tau_0. \quad (2-99)$$

Em termos do fluxo (equação 2-87):

$$Q = -\frac{\pi r_0^4}{8K_{HB}} \left[1 - \frac{4}{3} \frac{\tau_0}{\tau_p} + \frac{1}{3} \frac{\tau_0^4}{\tau_p^4} \right] \frac{dp}{dz}. \quad (2-100)$$

A equação 2-100 é chamada de equação de Buckingham-Reiner (a figura 2.11 mostra o diagrama de escoamento capilar desta equação). Note que o fluxo cresce lentamente com $\tau_{r=0}$ após exceder τ_0 . Isto ocorre pois, na região central $r = 0$ a tensão de cisalhamento é zero, então, quando $\tau_{r=0} < \tau_0$ sempre existirá um *tarugo* próximo ao centro. A figura 2.11 (similar a figura 2.7-(b)) mostra um fluido de Bingham ideal que só se aproxima assintoticamente do valor de K_{HB} quando τ_p tende ao infinito.

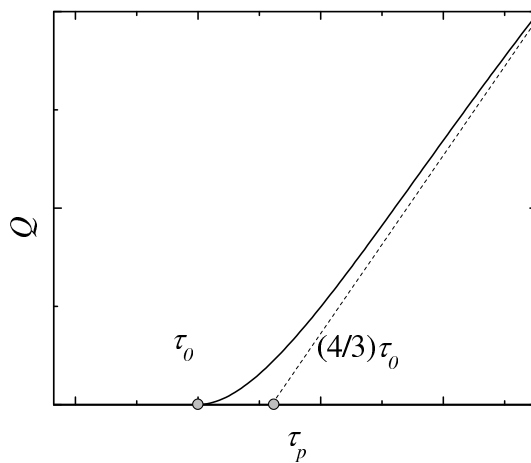


Figura 2.11: Diagrama de escoamento capilar para o plástico de Bingham ideal.

2.6

Métodos Numéricos para Problemas de Dinâmica de Fluidos

Em geral, as equações de Navier-Stokes e da continuidade apresentam soluções muito trabalhosas (quando existem!), se o problema considerado envolver uma geometria complexa. Na maioria dos tratamentos, simplificações das equações que governam o escoamento são usadas. Estas simplificações são baseadas numa combinação de aproximações e análise dimensional; quase sempre, um ajustamento fenomenológico é imposto. Entretanto, alguns problemas na Mecânica dos Fluidos não podem ser generalizados apenas pelo número de Reynolds. Para alguns escoamentos outros parâmetros adimensionais são importantes, tal como o número de Mach quando o escoamento atinge velocidades próximas a da propagação do som naquele fluido, ou como o número de Stokes, quando partículas se movimentam num fluido. Assim, o número de parâmetros nas equações e suas relações levam a problemas extremamente complicados de se resolver e analisar.

Um bom método para superar esta dificuldade matemática é realizar experimentos para a determinação das características de interesse do escoamento. Assim, túneis de vento e tanques são utilizados para realizar experimentos em escala menor a fim de estender os resultados à análises pela similaridade mecânica. Por outro lado, nem sempre é possível obter informação relevante de um escoamento. Razões para isto são a inacessibilidade do fluido para a medida durante o escoamento, a imprecisão do equipamento usado para medir o escoamento ou mesmo o equipamento de medida afetar o escoamento significativamente. Entretanto, mesmo que estas limitações sejam superadas, ainda há a possibilidade de não ser viável financeiramente realizar tal experimento. A dinâmica de fluidos computacional é uma alternativa, ou método complementar.

Desde o fim do século XIX, os métodos de solução numérica para equações diferenciais parciais já estavam validados, mas só foram efetivamente utilizados depois do surgimento do computador, na década de 1950. Com a diminuição gradual do valor pago pela capacidade de processamento e armazenamento de um computador, a aplicação da computação em problemas de solução numérica para problemas físicos cresceu dramaticamente, de tal forma que hoje estima-se que um terço dos pesquisadores envolvidos na dinâmica dos fluidos utilizem métodos computacionais para o estudo da Mecânica dos Fluidos. Este campo é conhecido como **Dinâmica dos Fluidos Computacional** (DFC). A grande vantagem da DFC é a capacidade de modelar fenômenos onde os experimentos são inviáveis.

Para se obter soluções aproximadas das equações de conservação do momento e da continuidade é necessário usar um método de discretização que aproxime as equações diferenciais por um sistema de equações algébricas. As aproximações são aplicadas à regiões pequenas do espaço e do tempo, tal que a solução numérica resulte em pontos no espaço e tempo. A precisão do método numérico depende muito fortemente da qualidade da discretização utilizada. Discretizações regulares são preferíveis a discretizações não-estruturadas devido ao erro ser menor (Fer99, For03), embora discretizações não-estruturadas podem ser melhor aplicadas em geometrias curvas. Na figura 2.12 várias discretizações possíveis são mostradas para uma mesma geometria. Na figura 2.12-(a), a geometria é discretizada usando uma rede retangular estruturada de comprimento Δx fixo nas fronteiras do problema. Já na figura 2.12-(b), a discretização é retangular, porém o comprimento nas fronteiras não é o mesmo. Na figura 2.12-(c), a geometria é discretizada através de uma rede não-estruturada de comprimento variável nas fronteiras de tal forma a permitir uma maior precisão nas regiões próximas à fronteira circular. Na figura

2.12-(d), a discretização é não-estruturada e uma adaptação nas fronteiras é feita de tal modo a dar ênfase de qualidade naquela região. Uma discretização local pormenorizada pode também ser feita numa determinada região, a fim de melhorar a qualidade da malha de simulação. Esta adaptação da malha pode ser realizada, a fim de melhorar a solução dos campos físicos naquela região. Por exemplo, a taxa de deformação em regiões próximas às fronteiras sólidas varia em valores muito maiores que nas regiões mais afastadas, por esta razão uma adaptação nas regiões próximas às fronteiras se faz necessária. Isto pode aproximar o custo-benefício (entre o tempo de simulação e a qualidade da discretização) ao valor ótimo.

Assim como os métodos experimentais, a DFC também apresenta limitações. A primeira limitação é que as soluções numéricas são sempre aproximadas. Erros de discretização podem ser minimizados usando interpolações mais precisas ou aplicando as aproximações em regiões menores, entretanto isto leva a um aumento no tempo e custo para se obter a solução. Solucionadores diretos obtêm soluções mais precisas, mas eles são muito pouco usados pelo seu custo excessivo¹². Métodos iterativos são mais comuns, porém erros devido a parada do processo de iteração necessitam ser levados em conta. Nesta tese foi utilizada a técnica iterativa.

Os métodos de visualização dos problemas de escoamento e transferência de calor estão bastante desenvolvidos e para DFC são diretos, uma vez que os campos são obtidos diretamente das simulações. O mesmo não acontece com a parte experimental, onde a possibilidade de visualização do escoamento é restrita.

Existem um infinidade de métodos para resolver equações diferenciais parciais. O método de solução iterativa das equações de Navier-Stokes usando o esquema de diferenças finitas é apresentado a seguir. Ainda, existem técnicas específicas para a solução das equações de Navier-Stokes descritas na literatura especializada, por exemplo na referência (Fer99).

2.6.1

Método dos Elementos Finitos

A idéia envolvida na técnica de elementos finitos é trocar as equações diferenciais parciais por equações diferenciais ordinárias, facilmente solúveis por métodos tradicionais como o Método de Euler ou um dos métodos de Rung-Kutta (Boy06). No Método dos Elementos Finitos, o sistema todo pode

¹²Solucionadores diretos requerem que o número de pontos na malha $N^{dim} \geq Re^{9/4}$, onde dim é a dimensão física do problema. Assim, quando o número de Reynolds aumenta, o tamanho da malha de discretização aumenta mais que quadraticamente. Dessa forma, o custo computacional de processamento e armazenamento devem ser levados em conta.

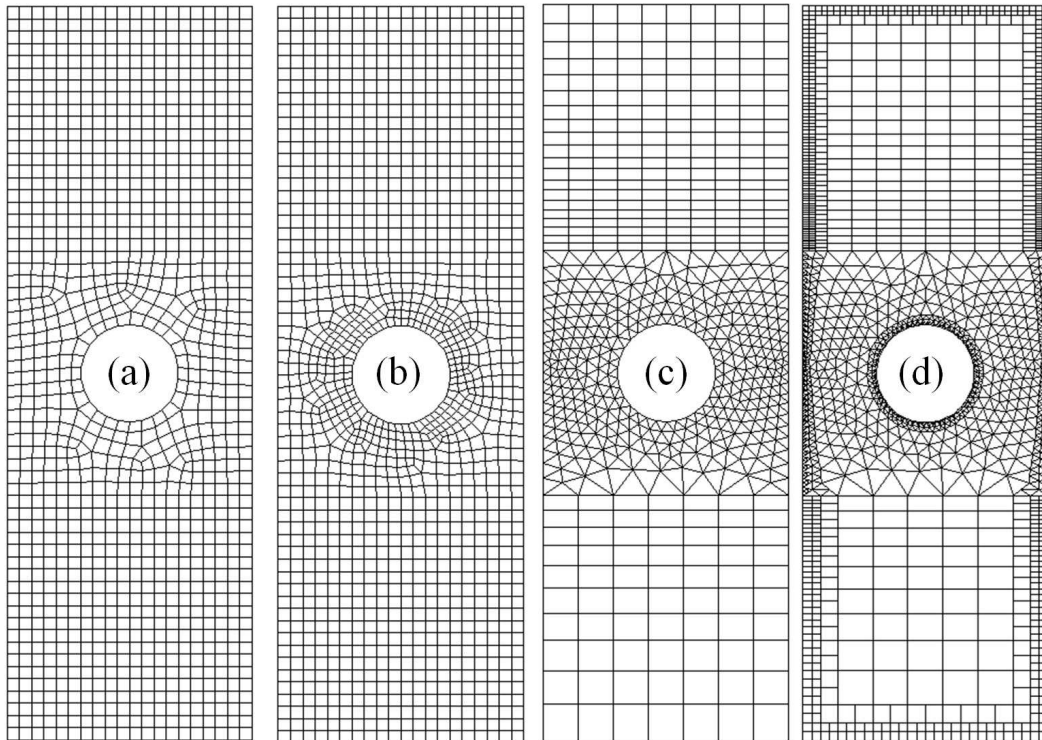


Figura 2.12: Várias discretizações de uma mesma geometria. Em (a), a geometria é discretizada usando uma rede retangular estruturada de comprimento Δx fixo nas fronteiras; em (b), a discretização é retangular, porém o comprimento nas fronteiras não é o mesmo; em (c), a geometria é discretizada através de uma rede não estruturada de comprimento variável nas fronteiras; em (d), a discretização é não estruturada e uma adaptação nas fronteiras é feita de tal modo a dar ênfase de qualidade naquela região. Em (c) e (d) a geometria é discretizada através de redes retangulares e triangulares. Estas discretizações foram obtidas usando o programa de computador GAMBIT.

ter uma forma complexa e irregular, mas os elementos individuais são fáceis de analisar. A divisão em elementos podem parcialmente corresponder à divisões naturais da estrutura. Por exemplo, alguns elementos podem estar associados com propriedades físicas variáveis no sistema todo. Assim, o sistema pode ser dividido em grupos de elementos que possuem a mesma viscosidade, por exemplo. Em geral, um modelo de elementos finitos possui relativamente poucos parâmetros livres, cujos valores necessitam ser ajustados aos dados. É assumido então que os parâmetros são conhecidos, *a priori*, de outras medidas.

Os elementos podem ser em uma dimensão, em duas dimensões (elementos triangulares ou quadriláteros - veja figuras 2.12 e 2.13) ou em três dimensões (elementos tetraédricos, hexaédricos, etc.). Estes elementos podem servir para modelar uma infinidade de sistemas físicos que envolvam equações diferenciais parciais. O comportamento de um tipo particular de elemento é analisado em

termos das respostas em nós discretos. Esta análise é freqüentemente baseada no procedimento de Ritz-Rayleigh. Este procedimento foi introduzido por Ritz, em 1908, como uma generalização da técnica descrita por Rayleigh, em 1877. Este é o procedimento mais comum usado na formulação de aproximações de elementos finitos. O procedimento é baseado num teorema de energia potencial mínima: *seja um funcional dado a energia potencial do sistema, então a função admissível que minimiza o funcional é uma solução do sistema.*

Na prática, é difícil, ou às vezes impossível, encontrar, entre todas as funções admissíveis, aquela que minimiza o funcional. Assim, o sistema deve ser limitado a um conjunto de funções sobre as quais deve ser tentado minimizar o funcional. O procedimento consiste em restringir a busca a um subconjunto particularmente simples de funções admissíveis, de fato, o espaço das combinações lineares das n funções de base admissíveis independentes $\chi_i(\vec{r})$, onde χ_i representa, por exemplo, campos de deslocamento para um problema mecânico e são funções das coordenadas espaciais \vec{r} . O valor de n é escolhido para ser tão pequeno quanto for consistente com a precisão requerida pela resposta. O conjunto particular de funções de base usado é arbitrário, como tanto que sejam independentes e admissíveis.

O exemplo a seguir ilustra como esta técnica é aplicada, tal que uma extrapolação pode ser feita para outros problemas. Seja o seguinte problema: uma membrana plana vibrando. A equação diferencial governante deste movimento foi idealizada por Rayleigh, em 1877.

$$T\nabla^2\chi + \varsigma\varpi^2\chi = p, \quad (2-101)$$

onde T é a tensão aplicada nas bordas da membrana, χ é o deslocamento da membrana, ς é a densidade superficial, ϖ é a freqüência angular e p é a pressão aplicada. A condição de contorno é que $\chi = 0$ em $\partial\Omega$. É possível definir $\varpi' \equiv \varpi\sqrt{\varsigma/T}$ e $p' = p/T$ e mostrar que o funcional de energia para este sistema é (For60):

$$f(\chi) = \frac{1}{2} \int |\nabla\chi|^2 dS + \frac{1}{2} \int \varpi'^2 \chi^2 dS - \int \chi p' dS, \quad (2-102)$$

onde as integrais são realizadas nas regiões de interesse. Os três termos no lado direito da equação 2-102 representam a energia devido a tensão da membrana, inércia e pressão aplicada, respectivamente. O funcional é aquele a ser minimizado pelo procedimento de Ritz. A escolha mais simples da base a ser usada é um conjunto que permite o campo de deslocamento sobre o elemento ser uma função linear geral de \vec{r} . Para tal, três funções de base são necessárias. Existem dois meios de formulá-las: um é baseado no sistema de coordenadas Cartesiano e o outro nas **coordenadas naturais** do sistema. O resultado

final é o mesmo, mas, em algumas circunstâncias, uma das formulações pode se mostrar ser melhor.

O método das coordenadas Cartesianas envolve escolher como funções de base o conjunto $[1, x, y]$. O deslocamento em qualquer ponto (x, y) no elemento é dada pela combinação linear destas três funções de base:

$$\chi(x, y) = c_1 + c_2x + c_3y. \quad (2-103)$$

Aplicando isto nos três vértices de elemento triangular, tem-se

$$\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \chi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}.$$

Escrevendo na forma matricial

$$\vec{\chi} = \mathcal{X}\vec{c}. \quad (2-104)$$

Seguindo o procedimento de Ritz-Rayleigh, substitui-se o valor de χ da equação 2-103 na equação 2-102. Depois de fazer as integrações, deriva-se em função de c_i . Fazendo as derivadas iguais a zero o resultado é um conjunto de equações para c_i que são facilmente solúveis por vários métodos.

$$\mathcal{A}\vec{c} = \mathcal{B}\vec{p}', \quad (2-105)$$

onde o vetor \vec{p}' representa o valor do campo de pressão p' . Os componentes das matrizes \mathcal{A} e \mathcal{B} são funções de ϖ' e das coordenadas do vértice de cada elemento triangular. Esta equação resolve o valor da variáveis num único elemento, para o sistema todo, a equação 2-105 deve ser modificada tal que possa ser combinada com equações similares representando os outros elementos:

$$\mathcal{A}\mathcal{X}^{-1}\vec{\chi} = \mathcal{B}\vec{p}', \quad (2-106)$$

ou, numa forma mais compacta

$$\mathcal{S}\vec{\chi} = \vec{f}, \quad (2-107)$$

onde \mathcal{S} é a matriz de rigidez e \vec{f} é o vetor das forças nodais aplicadas. Para um triângulo com um grau de liberdade em cada nó, a matriz de rigidez será 3×3 . Cada elemento da matriz representa a rigidez entre um nó e outro; a relação de rigidez entre os dois nós é simétrica.

Já no método das coordenadas naturais expressa-se a localização de cada ponto num elemento triangular pelas coordenadas da área $(A_1/A, A_2/A, A_3/A)$, onde $A = A_1 + A_2 + A_3$ é a área total do elemento mostrada na figura 2.13-(b). É possível usar A_i/A como o conjunto das funções de base. É possível

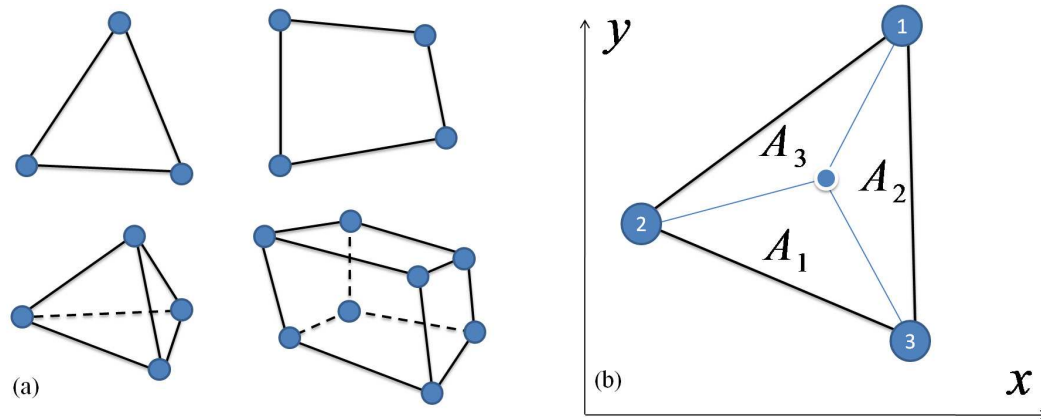


Figura 2.13: Em (a) são apresentados exemplos de elementos básicos que discretizam um sistema em duas (triângulo e retângulo) e três dimensões. Na figura (b) o elemento triangular é apresentado num sistema de coordenadas cartesiano. As áreas A_1, A_2 e A_3 são utilizadas para o cálculo através das coordenadas naturais. A localização dos pontos 1, 2 e 3 são $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ e (x_3, y_3) , respectivamente.

mostrar, então, que os coeficientes c_i são os deslocamentos nodais χ_i . Seguindo o procedimento de Ritz-Rayleigh, o resultado é o mesmo das coordenadas Cartesianas.

2.6.2 Método das diferenças finitas

Seja a função $\chi(x_0 + \Delta x)$ derivável, tal que a expansão em séries de Taylor em torno de x_0 é:

$$\chi(x_0 + \Delta x) \approx \chi(x_0) + \Delta x \frac{d\chi}{dx} \Big|_{x=x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2\chi}{dx^2} \Big|_{x=x_0} + \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{d^3\chi}{dx^3} \Big|_{x=x_0} + \dots \quad (2-108)$$

Tal que se $\Delta x = -\Delta x$, têm-se

$$\chi(x_0 - \Delta x) \approx \chi(x_0) - \Delta x \frac{d\chi}{dx} \Big|_{x=x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{d^2\chi}{dx^2} \Big|_{x=x_0} - \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{d^3\chi}{dx^3} \Big|_{x=x_0} + \dots \quad (2-109)$$

De tal forma que as equações acima podem ser manipuladas para se obter as derivadas primeira e segunda em função dos pontos adjacentes a x_0 :

$$\frac{d\chi}{dx} = \frac{\chi(x_0 + \Delta x) - \chi(x_0)}{\Delta x}, \quad (2-110)$$

$$\frac{d\chi}{dx} = -\frac{\chi(x_0) - \chi(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}, \quad (2-111)$$

$$\frac{d\chi}{dx} = \frac{\chi(x_0 + \Delta x) - \chi(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}, \quad (2-112)$$

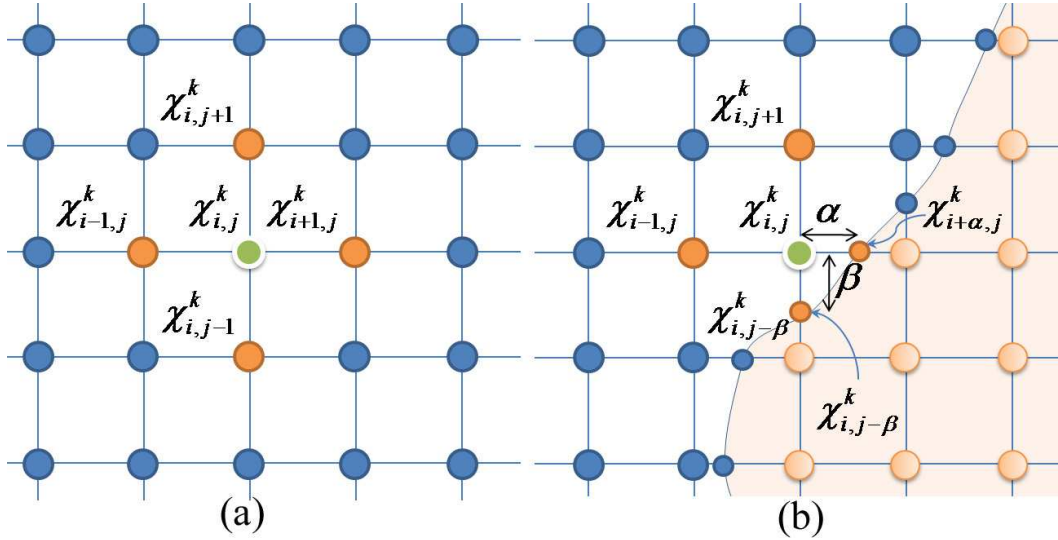


Figura 2.14: Discretização quadrada do problema para o cálculo da função χ através da técnica de diferenças finitas. Em (b), a borda é irregular tal que o valor de $\chi_{i,j}^{k+1}$ deve ser calculado com o valor de $\chi_{i,j}^k$ e dos quatro vizinhos mais próximos: $\chi_{i-1,j}^k$, $\chi_{i+\alpha,j}^k$, $\chi_{i,j-\beta}^k$ e $\chi_{i,j+1}^k$ através das equações .

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi(x_0 + \Delta x) + \chi(x_0 - \Delta x) - 2\chi(x_0)}{(\Delta x)^2}, \quad (2-113)$$

onde a aproximação na equação 2-110 é chamada de aproximação por diferença progressiva, por utilizar um ponto adiante do ponto x_0 ; a equação 2-111 é chamada de aproximação por diferença regressiva; a equação 2-112 é chamada de aproximação por diferença central e, por último, a equação 2-113 é a aproximação por diferenças centrais para a segunda derivada da função. Estas equações podem ser aplicadas diretamente numa rede quadrada regular com espaçamento constante Δx , como na figura 2.14-(a).

Suponha que o problema bi-dimensional da membrana tensionada vibrante proposto na seção anterior para a explicar a técnica dos Elementos Finitos seja proposto. A equação 2-101 pode ser escrita como:

$$T \frac{\chi_{i+1,j}^k + \chi_{i-1,j}^k + \chi_{i,j+1}^k + \chi_{i,j-1}^k - 4\chi_{i,j}^k}{(\Delta x)^2} + \varsigma \varpi^2 \chi_{i,j}^k - p = 0, \quad (2-114)$$

onde $\chi_{i,j}^k$ é a forma discretizada abreviada para $\chi(x, y, t)$, com os índices i para a coordenada x , j para a coordenada y e k para a coordenada t . Se alguém quiser resolver esta equação estacionária, pode se utilizar de uma técnica pseudo-spectral igualando a equação 2-114 por $\partial\chi/\partial t$, tal que

$$T\nabla^2\chi + \varsigma\varpi^2\chi - p = \frac{\partial\chi}{\partial t} = 0. \quad (2-115)$$

Uma vez que, por diferenças progressivas, $\partial\chi/\partial t = \frac{\chi_{i,j}^{k+1} - \chi_{i,j}^k}{\Delta t}$, tem-se a equação

de diferenças governante do problema

$$\chi_{i,j}^{k+1} = \Delta t T \frac{\chi_{i+1,j}^k + \chi_{i-1,j}^k + \chi_{i,j+1}^k + \chi_{i,j-1}^k - 4\chi_{i,j}^k}{(\Delta x)^2} + (\Delta t \zeta \varpi^2 + 1) \chi_{i,j}^k - p \Delta t. \quad (2-116)$$

A medida que o tempo evolui, a solução de χ se aproxima de um valor estacionário, tal que $\chi_{i,j}^{k+1} - \chi_{i,j}^k \rightarrow 0$, então $\partial\chi/\partial t \rightarrow 0$ como requerido. O valor de Δt deve ser escolhido tal que o erro seja minimizado (For03), mas levando sempre em conta que Δt muito pequeno leva a custo computacional alto. Ainda, mesmo que o **parâmetro de relaxação** Δt seja grande o suficiente para um resposta aceitável do problema, a solução deve ser truncada devido ao lento caminho até a solução estabilizar.

Assim, deve ser escolhido um **critério de convergência** para a solução do problema. É comum escolher o critério de convergência em função da norma Euclidiana

$$\|\chi\|_2 = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N \chi_i^2}. \quad (2-117)$$

Tal que se entre dois passos consecutivos de iteração $\|\chi^{k+1}\|_2 - \|\chi^k\|_2 < C_C$, a simulação assume o valor do campo χ como solução para o problema. Aqui, C_C é um número menor que a unidade. Em geral, para um problema onde certa precisão é desejada, C_C deve ser menor que 10^{-5} . Ainda, a condição de estabilidade impõe que o **número de Courant** $N_C = c\Delta t/\Delta x < 1$, onde c é a velocidade física da propagação no problema.

Mas nem todo problema admite uma discretização regular quadrada como na figura 2.14-(a). Quando a borda é um tanto complicada, a discretização pode ser realizada como nas figuras 2.12 ou na figura 2.14-(b). A expansão de χ em séries de Taylor próximo do ponto assinalado na figura 2.14-(b) pode ser expressa como

$$\chi(x_0 + \alpha) \approx \chi(x_0) + \alpha \frac{d\chi}{dx} \Big|_{x=x_0} + \frac{\alpha^2}{2} \frac{d^2\chi}{dx^2} \Big|_{x=x_0} + \frac{\alpha^3}{6} \frac{d^3\chi}{dx^3} \Big|_{x=x_0} + \dots \quad (2-118)$$

de tal form que as derivadas no ponto $x = x_0$ podem ser encontradas em função da fração α :

$$\frac{d\chi}{dx} = \frac{\chi(x_0 + \alpha) - \chi(x_0)}{\alpha}, \quad (2-119)$$

$$\frac{d\chi}{dx} = - \frac{\chi(x_0) - \chi(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}, \quad (2-120)$$

$$\frac{d\chi}{dx} = \frac{\chi(x_0 + \alpha) - \chi(x_0 - \Delta x)}{\alpha + \Delta x}, \quad (2-121)$$

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = 2 \frac{\Delta x \chi(x_0 + \alpha) + \alpha \chi(x_0 - \Delta x) - (\alpha + \Delta x) \chi(x_0)}{\alpha \Delta x (\Delta x + \alpha)}, \quad (2-122)$$

Seja α uma fração de Δx , e, utilizando a forma reduzida as equações acima podem ser escritas na forma:

$$\frac{d\chi}{dx} = \frac{\chi_{i+\alpha} - \chi_i}{\alpha \Delta x}, \quad (2-123)$$

$$\frac{d\chi}{dx} = -\frac{\chi_i - \chi_{i-1}}{\Delta x} \quad (2-124)$$

$$\frac{d\chi}{dx} = \frac{\chi_{i+\alpha} - \chi_{i-1}}{(\alpha + 1) \Delta x} \quad (2-125)$$

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = 2 \frac{\chi_{i+\alpha} + \alpha \chi_{i-1} - (\alpha + 1) \chi_i}{\alpha (\Delta x)^2 (1 + \alpha)} \quad (2-126)$$

Estas derivadas podem ser aplicadas no ponto enfatizado na figura 2.14-(b) para o problema da membrana vibrante levando à seguinte equação de diferenças para o laplaciano de χ :

$$\nabla^2 \chi = 2 \frac{\chi_{i+\alpha, j} + \alpha \chi_{i-1, j} - (\alpha + 1) \chi_{i, j}}{\alpha (\Delta x)^2 (1 + \alpha)} + 2 \frac{\beta \chi_{i, j+1} + \chi_{i, j-\beta} - (\beta + 1) \chi_{i, j}}{\beta (\Delta x)^2 (1 + \beta)}. \quad (2-127)$$

Para problemas onde a discretização triangular é necessária, o procedimento para esquematizar a equação de diferenças apropriada é semelhante.

3

Transporte de Partículas em Fluidos

3.1

Transporte de partículas em Fluidos Newtonianos

Quando um corpo move-se de modo estacionário relativo a um fluido Newtoniano, no qual ele está imerso, há uma combinação de fatores que levam ao surgimento de uma interação macroscópica neste corpo. Esta interação pode ser dividida em dois grupos principais dependendo da orientação dela. A força resultante na direção paralela ao movimento relativo do corpo é chamada de **força de arrasto**, enquanto que a força perpendicular ao movimento é chamada de **força de elevação** ou força de *lift*¹.

No caso de escoamentos estacionários, o momento linear total do fluido numa região fixa no espaço não varia no tempo, i.e., a perda de momento devido ao atrito de corpos rígidos imersos no fluido é balanceada pelo ganho de momento das forças atuando para manter o escoamento, por exemplo o peso da partícula. A equação expressando esta igualdade que permite estabelecer uma relação entre a velocidade característica do escoamento e a queda de pressão é freqüentemente chamada de **Lei de arrasto**. A força \vec{F} exercida pelo escoamento no corpo é igual à integral do fluxo de momento sobre a superfície do corpo Σ ao longo do vetor normal a esta superfície. O fluxo da i -ésima componente do momento por unidade de área perpendicular ao eixo j tem a forma $\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ij}$. Desde de que a velocidade do fluido na superfície de um corpo rígido em relação a vizinhança dele é zero, a força \vec{F} é

$$\vec{F} = - \int_{\Sigma} (p - \mathcal{T}) \cdot d\vec{A}. \quad (3-1)$$

O primeiro termo no lado direito da equação 3-1 descreve a transferência de momento para o corpo através da pressão e é, portanto, independente da viscosidade do fluido. Esta forma de arrasto é chamado de **arrasto de forma**² e depende fortemente da forma do corpo e da orientação em relação

¹A tradução livre para a palavra de língua inglesa *lift* é levantar, elevar, suspender, etc. Nesta tese foi utilizado o termo *lift* simplesmente para designar esta força, em detrimento do termo em língua portuguesa.

²Em língua inglesa o termo é *form drag*.

ao escoamento. Por esta razão, o arrasto de forma pode ser minimizado em problemas onde esta redução é desejável, por exemplo: ao se projetar um carro ou um avião, onde deseja-se um arrasto tanto menor quanto possível a fim de reduzir a perda de potência útil destes equipamentos. Em alguns casos esta componente é igual a zero, como no escoamento de um tubo reto, onde a superfície é sempre paralela ao escoamento. A segunda componente representa o **arrasto de atrito**³, o qual num fluido viscoso é sempre diferente de zero. No caso de corpos geometricamente similares, a expressão $\frac{1}{2}\rho u_r^2 A_\Sigma$ pode ser tomada como uma característica da força \vec{F}_D , onde u_r é a velocidade relativa do corpo ao fluido e A_Σ é uma área característica, em geral é tomada como a área da superfície do corpo ou a área projetada na direção do escoamento⁴. A quantidade adimensional

$$C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2}\rho u_r^2 A_\Sigma} \quad (3-2)$$

é chamada de **coeficiente de arrasto** do corpo. Se o arrasto é devido somente ao atrito, o coeficiente de arrasto é denotado por f e é chamado de **coeficiente de atrito** ou **fator de fricção**.

A figura 3.1 mostra um corpo de forma arbitrária movendo-se num fluido em regime de baixo número Reynolds. Na figura 3.1-(a), o campo de pressão do escoamento é mostrado, de tal forma que ele cresce do azul para o vermelho. Assim, cada componente da face do corpo experimenta um valor da pressão diferente e a pressão resultante $-\int p \cdot d\vec{A}$ é responsável pelo arrasto de forma. Na figura 3.1-(b), as iso-linhas da tensão de cisalhamento são mostradas evidenciando que onde a superfície é paralela ao escoamento, maior é a tensão de cisalhamento. A soma das tensões de cisalhamento $\int \mathcal{T} \cdot d\vec{A}$ é a origem do arrasto de atrito.

Quando o número de Reynolds é suficientemente alto, existe um **arrasto induzido** devido ao trem de vórtices formados atrás do corpo (ver figura 3.2). Este arrasto induzido depende fortemente da forma do corpo e da direção de movimento deste corpo num fluido; é o que Theodore von Kármán denominou de *wake drag*⁵. Este tipo de arrasto é amplamente estudado em aerodinâmica. Os aerodinamicistas estudam maneiras de reduzir esta força, redesenhando continuamente as asas de aviões. De fato, esta preocupação deu origem a uma sub-disciplina chamada de **Teoria de Asa** (Jon90).

³Geralmente referenciado como *skin friction drag* em textos clássicos de língua inglesa.

⁴Este termo característico foi obtido por Isaac Newton no seu livro *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* e foi origem de muita controvérsia como explica von Kármán em (Kar04).

⁵Uma tradução livre seria *arrasto de esteira*. De fato, o que se chama de *wake* é toda uma região com vorticidade diferente de zero na parte de trás do corpo.

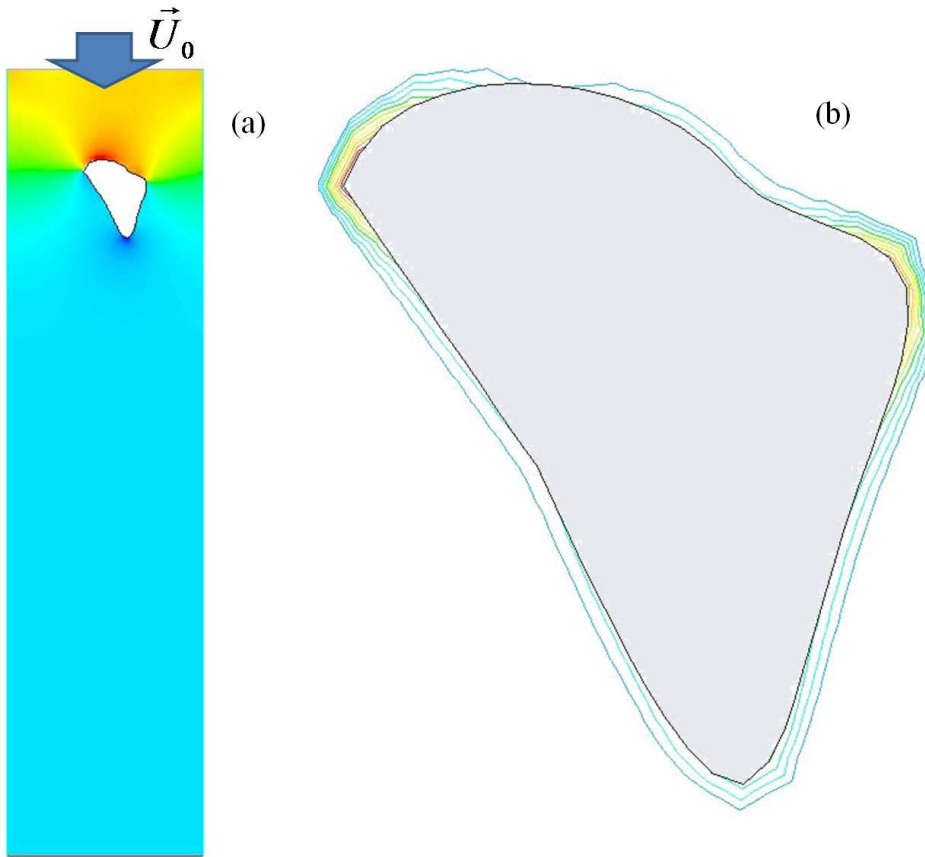


Figura 3.1: Um corpo de forma arbitrária movendo-se num fluido Newtoniano incompressível com $Re \ll 1$. As condições de contorno na direção do escoamento são velocidade constante na zona de cima, pressão zero na zona de baixo e periódicas nas zonas perpendiculares ao escoamento. Em (a), o campo de pressão do escoamento, onde a pressão cresce do azul para o vermelho e em (b), um pormenor das iso-linhas de tensão de cisalhamento, τ , no corpo, que também crescem do azul para o vermelho. A diferença de pressão no corpo leva ao arrasto de forma e ao somatório das tensões no corpo leva ao arrasto de atrito.

Stokes foi o primeiro a determinar a força de arrasto, em regimes do número de Reynolds muito baixo, para uma partícula esférica movendo-se translacionalmente num escoamento Newtoniano isotrópico, incompressível e isotérmico (Sto51). Ele propôs que a aceleração convectiva poderia ser desprezada, uma vez que a velocidade u é muito pequena, e, trocou as equações de Navier-Stokes por

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u}, \quad (3-3)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (3-4)$$

Ele supôs, ainda, que a dependência temporal da velocidade tinha uma

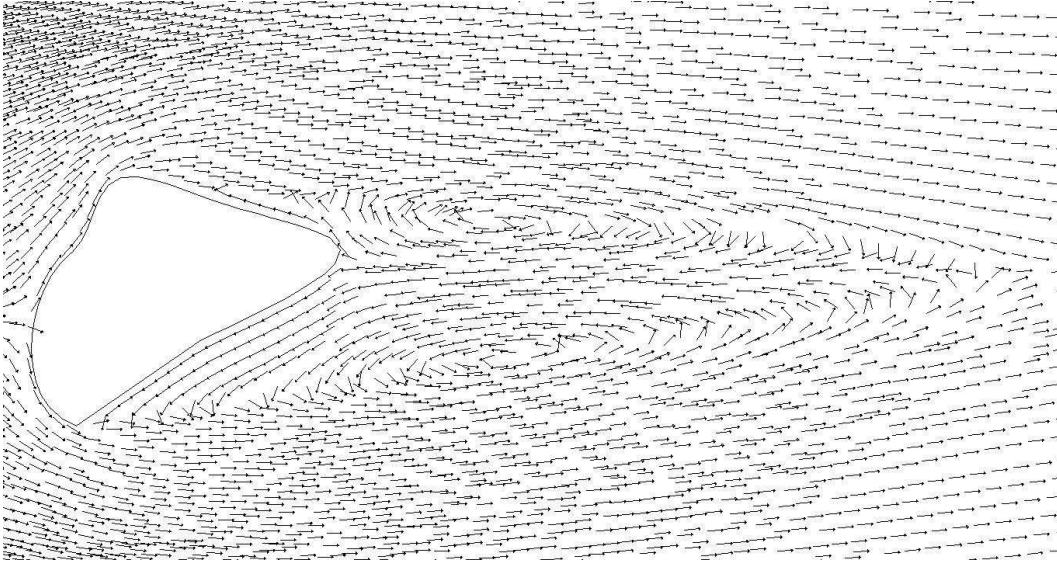


Figura 3.2: Vetores do campo de velocidades de um fluido Newtoniano incompressível em torno de um objeto de forma arbitrária movendo-se nele (ver figura 3.1) com $Re = 100$. Note os vórtices formados atrás do corpo, os quais dão origem ao arrasto induzido.

forma de decaimento exponencial, $e^{-\lambda t}$, levando a seguinte equação simples

$$\nabla p = \mu \nabla^2 \vec{u} - \lambda \rho \vec{u}. \quad (3-5)$$

Desde que a pressão satisfaz a equação de Laplace, uma solução particular de 3-5 é portanto

$$\vec{u}_{part} = -\frac{\nabla p}{\lambda \rho}. \quad (3-6)$$

Esta equação é bastante útil, quando se conhece a solução para o campo de pressão. A solução de Stokes foi obtida por ele através da *função de corrente*, mas Lamb apresentou uma solução mais geral para o campo de pressão em termos de uma expansão em séries de Taylor (Gra07). Lamb, também, apresentou uma solução geral do campo de velocidades na forma de **dubleto**, **stokesleto** e **rotleto**, que para o escoamento estacionário podem ser expressos como:

$$\vec{u} = \frac{1}{r^3} \vec{A} \times \vec{r}, \quad \text{dubleto}, \quad (3-7)$$

$$\vec{u} = \frac{\vec{B}}{r} + \frac{\vec{r}}{r^3} (\vec{B} \cdot \vec{r}), \quad \text{stokesleto}, \quad (3-8)$$

$$\vec{u} = \vec{r} \times \nabla \left(\frac{\vec{C} \cdot \vec{r}}{r^3} \right), \quad \text{rotleto}, \quad (3-9)$$

onde \vec{A} , \vec{B} e \vec{C} , aqui, são vetores constantes. Para a situação onde o escoamento não é estacionário outras soluções similares, mas dependentes do

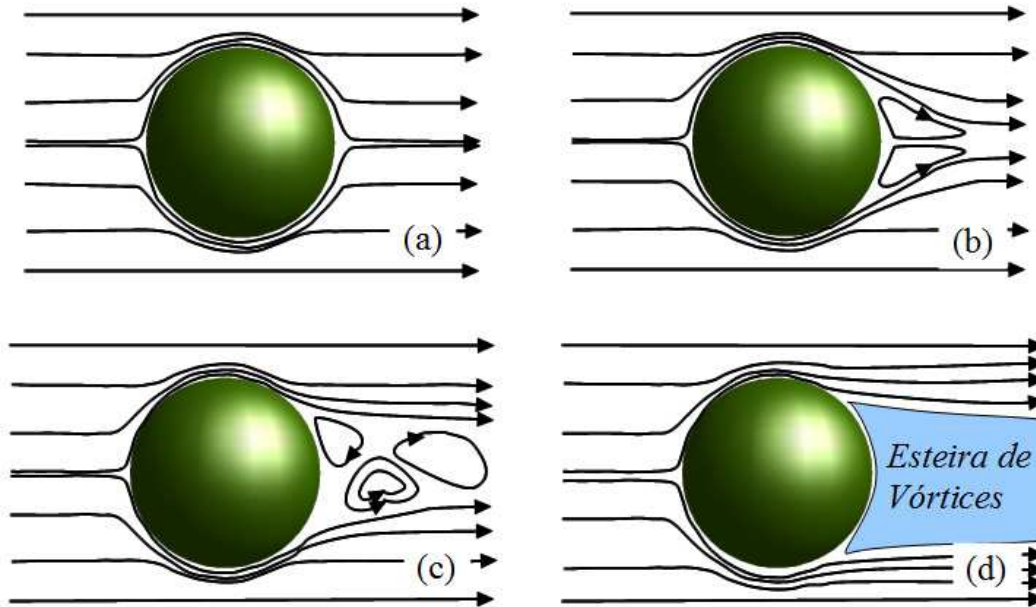


Figura 3.3: Comportamento do fluido ao passar por um cilindro liso. (a) Escoamento laminar ($Re < 1$), (b) escoamento laminar, mas com surgimento de vórtices próximos ao cilindro ($1 < Re < 10^3$), (c) escoamento com esteira de vórtices atrás do corpo ($10^3 < Re < 10^5$) e (d) escoamento puramente turbulento ($Re > 10^5$).

tempo, são encontradas (Gra07).

A derivação da relação da força de arrasto para uma partícula sólida movendo-se no fluido é simples e diretamente obtida das equações de Stokes quando a aproximação de baixíssima velocidade relativa entre a esfera e o fluido, u_r , é assumida (Bat00, Mon07, Sto51, Cho00, Fox85, Bro67). Para uma esfera de raio R , Stokes sobrepôs a solução de dubleto (3-7) e stokesleto (3-8), orientadas na direção do escoamento, eixo- z . Para uma esfera sob estas condições o coeficiente de arrasto é escrito através de uma relação simples como

$$C_D = \frac{12\mu}{\rho R u_r} = \frac{12}{Re}, \quad (3-10)$$

com o número de Reynolds definido em função da partícula como $Re_p = \frac{\rho}{\mu} R u_r$.

Entretanto nesta solução teórica, as forças viscosas são dominantes em relação aos termos de aceleração convectiva, embora estes sejam mais importantes em distâncias grandes da esfera. Alfred N. Whitehead notou que qualquer tentativa de solução das equações de Navier-Stokes para grandes valores do número de Reynolds que tivessem como ponto de partida a solução de Stokes levaria a dificuldades imensas⁶. Oseen (Ose10) sugeriu um tratamento alternativo, ao invés de aproximar as equações de Navier-Stokes como em 3-5,

⁶Esta dificuldade teórica é chamada de paradoxo de Whitehead.

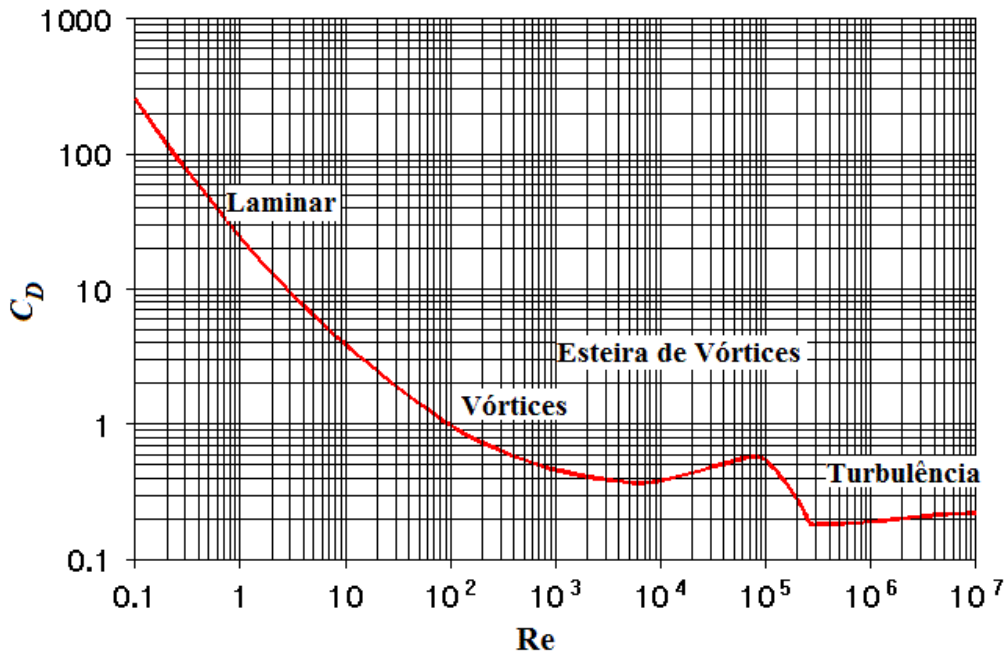


Figura 3.4: Coeficiente de arrasto, C_D , contra o número de Reynolds, Re , para uma esfera movendo-se num fluido Newtoniano. O comportamento de cada regime do escoamento é descrito na figura 3.3.

ele usou a aproximação

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + u_0 \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u}, \quad (3-11)$$

sendo u_0 ao longo do eixo $-z$. Oseen obteve uma solução para o escoamento em torno da esfera, tal que o coeficiente de arrasto é

$$C_D = \left(\frac{9}{2} + \frac{12}{Re} \right). \quad (3-12)$$

A solução de Stokes (equação. 3-10) é um caso limitante da equação 3-12, quando Re se aproxima de zero.

Outras soluções foram derivadas para a determinação de C_D para uma esfera. Goldstein encontrou uma solução através de uma expansão em séries do número de Reynolds (Gol29):

$$C_D = \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{3}{8}Re - \frac{19}{320}Re^2 + \frac{71}{2560}Re^3 - \frac{30179}{2150400}Re^4 + \frac{122519}{17203200}Re^5 - \dots \right). \quad (3-13)$$

A solução de Stokes revelou-se válida somente para o escoamento próximo da superfície do sólido e a solução de Oseen válida somente para regiões dis-

tantes da fronteira. Proudman e Pearson (Pro57) e Kaplun (Kap57) chegaram independentemente a um resultado intermediário entre as soluções de Stokes e Oseen, através de métodos assintóticos. A equação para o coeficiente de arrasto devido a Proudman e Pearson é

$$C_D = \frac{6\pi}{\text{Re}} \left[1 + \frac{3}{8}\text{Re} + \frac{9}{40}\text{Re}^2 \ln \text{Re} + \mathcal{O}(\text{Re}^2) \right]. \quad (3-14)$$

O termo logarítmico é imposto a este problema (Gra07). A equação 3-13, ou qualquer outra solução contendo somente potências de Re , é inválida. Soluções empíricas para o coeficiente de arrasto têm sido desenvolvidas e uma das mais utilizadas é àquela devida a Morsi e Alexander (Mor72):

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{\text{Re}} + \frac{a_3}{\text{Re}^2}, \quad (3-15)$$

onde a_1 , a_2 e a_3 são constantes.

Velocidade terminal

Quando a partícula esférica está em estado de decantação, as únicas forças atuando na partícula são a força de arrasto e o peso da partícula. Se o número de Reynolds for pequeno o suficiente para a aproximação de Stokes, o balanço das forças na partícula leva à

$$6\pi\mu R u_T = \frac{4}{3}\pi\rho_p R^3 g \implies u_T = \frac{2}{9} \frac{\rho_p}{\mu} R^2 g. \quad (3-16)$$

A velocidade u_T é a velocidade terminal da partícula decantada, ela é comumente chamada de **velocidade de queda**.

3.1.1

Arrasto em escoamentos turbulentos

Para números de Reynolds maiores que 10^3 o arrasto sobre a partícula não pode ser determinado simplesmente pelas equações devido a Stokes (equação. 3-10), Oseen (equação. 3-12) ou mesmo àquela devido à Kaplun (equação. 3-14). De tal forma que o valor do coeficiente de arrasto em escoamentos turbulentos toma o valor experimental ~ 0.4 para $\text{Re} > 10^5$ (ver figura 3.4). Para grãos naturais Fredse *et al.* (Fre92) chegaram à relação empírica

$$C_D = 1.4 + \frac{36}{\text{Re}}. \quad (3-17)$$

Geralmente, grãos são modelados como elipsóides de diâmetros d_1, d_2 e d_l ; d_l é o maior dos três diâmetros do elipsóide (Sch54). O **fator de forma de Corey**, f_C , é o mais representativo meio de se quantificar uma dimensão para uma partícula não-esférica:

$$f_C = \frac{d_l}{\sqrt{d_1 d_2}}. \quad (3-18)$$

Para grãos naturais, o fator de forma de Corey fica em torno de 0.7. Embora este seja o método mais utilizado para descrever a forma de uma partícula não-esférica, outros métodos são também utilizados. Como exemplos têm-se, o **diâmetro nominal**, que é o diâmetro de uma partícula esférica tendo a mesma massa e volume da partícula não-esférica; o **diâmetro de queda**, que é o diâmetro de uma partícula esférica lisa caindo em água parada a uma temperatura de 24°C na mesma velocidade média da queda da partícula não-esférica nas mesmas condições (o diâmetro de queda é a melhor descrição por levar em conta a forma da partícula, embora seja o mais trabalhoso).

Haider e Levenspiel (Hai89) encontraram a seguinte relação para partículas não-esféricas:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} (1 + b_1 \text{Re}^{b_2}) + \frac{b_3 \text{Re}}{b_4 + \text{Re}}, \quad (3-19)$$

onde $b_1 = e^{2.3288 - 6.4581 f_C + 2.4486 f_C^2}$, $b_2 = 0.0964 + 0.5565 f_C$, $b_3 = e^{4.905 - 13.8944 f_C + 18.4222 f_C^2 - 10.2599 f_C^3}$ e $b_4 = e^{1.4681 + 12.2584 f_C - 20.7322 f_C^2 + 15.8855 f_C^3}$ e o número de Reynolds é baseado numa partícula esférica de mesmo volume e massa da partícula não-esférica.

Número de Stokes

Na advecção, em um sistema diluído, partículas suficientemente pequenas seguem as linhas de corrente do escoamento, como é o caso de partículas de poeira no ar, enquanto que partículas grandes atravessam as linhas de corrente devido à sua inércia, como o caso de pedrinha de granizo. A quantificação desta característica do transporte de partículas em fluidos é melhor descrita através de um parâmetro adimensional chamado de **número de Stokes** exposto na seguinte relação:

$$\text{St} \equiv \frac{t_P}{L_S} u_r, \quad (3-20)$$

onde t_P é o tempo de relaxação característico da partícula e L_S é um comprimento característico do sistema. Em geral, este tempo de relaxação é tomado como $t_P = \frac{9}{2} \frac{\rho_p R_p^2}{\mu}$. Para $\text{St} \ll 1$, a partícula segue as linhas de corrente. Para $\text{St} \gg 1$, as partículas não percebem o arrasto do fluido seguem trajetórias balísticas.

3.2

Transporte de Partículas numa Estrutura Ramificada

A separação de partículas em função do seu tamanho é um problema interessante encontrado em muitas áreas da indústria e pesquisa ambiental

e biológica (Gim03, Fra04). Muitas técnicas complexas têm sido propostas para este fim. Entre elas a cromatografia hidrodinâmica e o fracionamento fino de separação em escoamento⁷ têm sido propostos para a separação e filtragem de diversos tipos de partículas, abrangendo desde micróbios a drogas e emulsões farmacêuticas (Sah95, DiM70). Embora estas técnicas sejam precisas, elas apresentam uma desvantagem intrínseca: necessitam da geração de campos externos, os quais aumentam significativamente a complexidade, custo econômico e tempo de processamento.

Todavia, como mostrado recentemente, a separação de partículas de diferentes tamanhos pode ser alcançada explorando somente as capacidades de um escoamento advectivo laminar (DiC08). Partículas de tamanho semelhante apresentam as mesmas trajetórias, num escoamento advectivo. Esta característica serve para uma descrição teórica determinística do comportamento das partículas neste escoamento (Hua04). Assim, é possível ter um entendimento do que acontece em experimentos em que o escoamento advectivo através de obstáculos está presente ou do fracionamento do escoamento. Porém, não fica claro como os pormenores geométricos do equipamento utilizado nestes experimentos afeta a eficiência de separação.

Trabalhos anteriores têm se interessado no desenvolvimento de novos dispositivos tecnológicos inspirados no comportamento e geometria de sistemas naturais (Cop03). A estrutura ramificada do tipo pulmão é proposta no presente trabalho para a separação de partículas num escoamento advectivo através desta estrutura (Vas10). As partículas são injetadas no escoamento através de uma entrada principal, como mostrado na figura 3.5, e são coletadas numa das saídas da estrutura ramificada. A intenção é estudar como os parâmetros da estrutura afetam o processo de separação.

O dispositivo usado nos cálculos consiste de cascatas de cilindros formando um estrutura tipo-pulmão como mostrado na figura 3.5. Em cada bifurcação, os raios dos cilindros diminuem por um fator de h e o ângulo de bifurcação $\alpha = 60$. Tanto os braços menores quanto o cilindro gerador estão no mesmo plano, onde ϕ é o ângulo azimutal entre dois planos sucessivos de bifurcação. A geometria da bifurcação é modelada de tal forma a não permitir descontinuidades (Mau03). O diâmetro do primeiro tubo é igual a 2 cm, o que corresponde aproximadamente ao diâmetro da traquéia humana, onde a estrutura bifurcada é construída até a quarta geração. A razão entre o comprimento L e o diâmetro D dos cilindros em cada geração é tida como $L/D = 3$.

É imposto um fluxo constante de massa através da entrada e as condições de contorno para a saída são de pressão zero naquelas fronteiras. A condição

⁷Termo do inglês: *split-flow thin fractionation*.

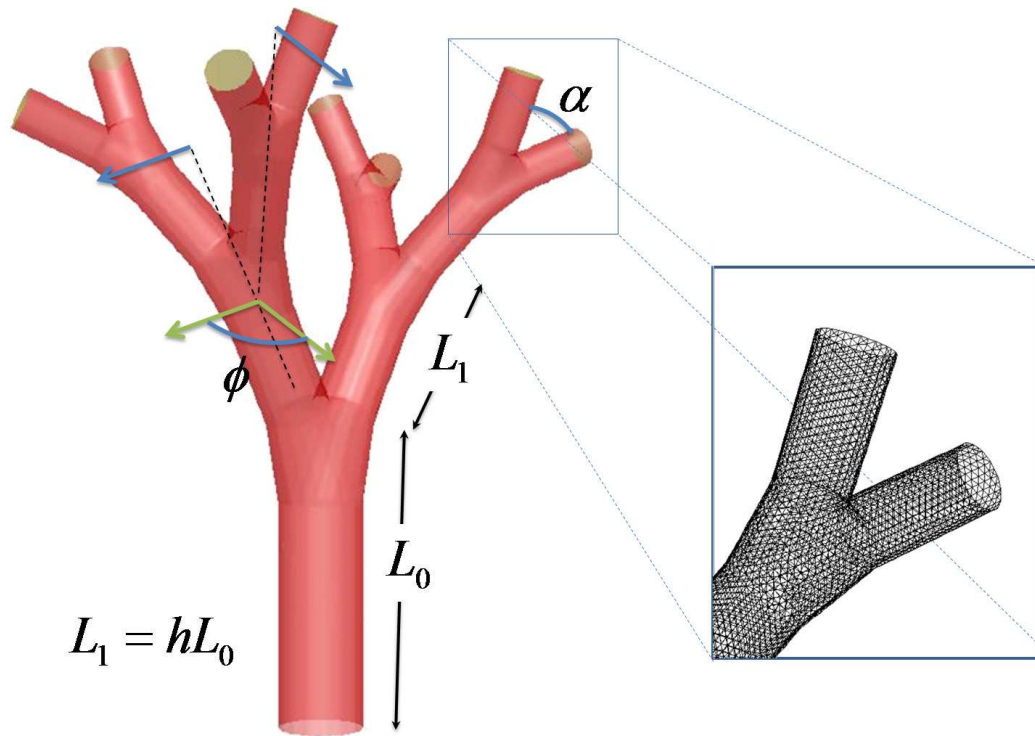


Figura 3.5: O separador de partículas consiste de uma cascata de cilindros formando uma estrutura ramificada em três dimensões. Um estrutura de árvore dicotômica com quatro gerações é mostrada na figura. Tanto o ângulo de bifurcação, $\alpha = 60^\circ$, quanto o ângulo azimutal, $\phi = 90^\circ$, são os mesmos em todas as bifurcações posteriores. O fator de crescimento dos comprimentos e raios subsequentes é dado por h . No pormenor, é mostrada a discretização não-estruturada do separador

de não deslizamento nas paredes é adotada e a o escoamento através do estrutura ramificada é obtido solucionando-se as equações de Navier-Stokes para um fluido incompressível em condições isotérmicas (equação. 2-51) no estado estacionário:

$$\rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u}, \quad (3-21)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (3-22)$$

O número de Reynolds é

$$\text{Re} \equiv \frac{\rho}{\mu} u_0 D_0, \quad (3-23)$$

onde D_0 é o diâmetro do cilindro principal. As simulações foram restritas ao regime onde o escoamento apresenta $\text{Re} \sim 50$. O escoamento é resolvido por técnicas de diferenças finitas com volume de controle usando o FLUENT. O critério de convergência para a conservação do momento linear e a massa foi de que o resíduo fosse menor que 10^{-6} .

Uma vez que as equações para o escoamento foram resolvidas, o cálculo da trajetória das partículas é executado. As partículas são injetadas na borda de entrada com velocidade $v_0 = u_0$ normal à superfície de entrada e com distribuição uniforme por toda a superfície. Por simplicidade, a densidade das partículas é da ordem da densidade do fluido ($\rho_p \approx \rho$), de tal forma que a força de empuxo iguala-se ao peso da partícula. Assim, desde que as dimensões das partículas são diminutas, a única força relevante ao problema é o arrasto e a equação de movimento pode ser escrita como

$$\frac{d^2 \vec{r}_p}{dt^2} = \frac{C_D}{m_p} \frac{1}{2} \rho \pi R_p^2 u^* \vec{u}^* \approx \frac{3}{8} C_D \frac{u^*}{R_p} \vec{u}^*, \quad (3-24)$$

onde C_D é obtido através da expressão 3-15 com o número de Reynolds baseado na partícula, $Re_p \equiv \frac{\rho u^* R_p}{\mu}$; $m_p \equiv \frac{4}{3} \rho_p \pi R_p^3$ é a massa da partícula esférica e u^* é a velocidade relativa entre o fluido e a partícula. As condições de contorno nas regiões de saída do escoamento são de descarga de massa e nas paredes da estrutura as partículas sofrem reflexões.

3.2.1

Condições de contorno para partículas

Existem três condições de contorno possíveis para a interação entre uma partícula e a parede sólida: **captura**, **saída** e **reflexão**. A condição de captura impõe que quando a posição do centro de massa da partícula, \vec{r}_p , está na fronteira da parede sólida, $\partial\Omega$, sua posição posterior não muda. Assim, a trajetória de uma partícula imersa no fluido termina na fronteira, $\partial\Omega$. Esta condição é útil quando se quer modelar o aprisionamento das partículas em processos de adsorção ou filtração. A condição de saída faz com que a trajetória das partículas acabem na fronteira em que esta condição é imposta, mas, ao contrário da condição de captura, esta condição é aplicada em fronteiras fluido-fluido, e não fluido-sólido. A condição de reflexão é imposta entre fronteiras fluido-sólido. Esta condição física é modelada para partículas saindo da região de interesse do problema.

Quando uma partícula esférica encontra uma fronteira sólida estacionária reflexiva, a conservação do momento linear do sistema partícula-parede impõe que o momento justo antes da colisão, \vec{P} , é igual ao momento logo após a colisão, \vec{P}' . Entretanto, a colisão pode ser perfeitamente elástica, ou não. Se a colisão for tomada como elástica, a energia cinética da partícula justo antes do choque, $\frac{1}{2} m_p v^2$ é igual a sua energia cinética logo após o choque, $\frac{1}{2} m_p v'^2$; se o momento linear do sistema é conservado, $m_p \vec{v} = m_p \vec{v}'$. Se a velocidade da partícula for representada numa base em que os vetores ortonormais são o vetor normal, \hat{n} , à superfície e um vetor tangencial, \hat{t} , tem-se $\vec{v} = v_n \hat{n} + v_t \hat{t}$. O

conjunto de equações formado pelos princípios de conservação da energia e do momento linear pode ser resolvido facilmente para mostrar que a velocidade na direção normal é alterada para $v'_n = v_n$ e a velocidade na componente tangencial continua inalterada.

É comum definir um coeficiente de restituição, na direção normal ao choque,

$$e_n = \frac{v'_n}{v_n}, \quad (3-25)$$

onde v_n e v'_n são as velocidades na direção normal à superfície antes e após a colisão, respectivamente. O coeficiente de restituição tangencial é definido de maneira similar:

$$e_t = \frac{v'_t}{v_t}, \quad (3-26)$$

onde v_t e v'_t são as velocidades na direção tangencial à superfície antes e após a colisão, respectivamente. Se $e_n = 1$ e $e_t = 1$, a colisão é perfeitamente elástica. Entretanto, se $e_n = 0$ e $e_t = 0$, a colisão é perfeitamente inelástica e a partícula é aprisionada na parede.

Paredes rugosas

Se alguém tomar uma imagem microscópica de uma seção de uma parede lisa de um material qualquer, poderá perceber as imperfeições nas paredes da amostra. Embora, para contextualizações macroscópicas, a fronteira possa ser tomada como lisa, de tal forma que para um choque perfeitamente elástico o ângulo de incidência da partícula, θ_- , seja igual ao ângulo de reflexão, θ_+ , a estrutura microscópica é de importância para o problema a ser estudado, o espalhamento pode ser não-especular.

Mas a conservação do momento linear é um dos pilares da Mecânica e alguma característica do sistema parece impedir a aplicação direta da conservação do momento linear. Esta característica é a **rugosidade**. Em geral, uma caracterização da rugosidade da parede pode ser tomada como uma medida do ruído da profundidade dos sulcos.

Uma conhecida relação, chamada de **lei dos cossenos de Knudsen**⁸ (Knu52), mostra que a distribuição dos ângulos de reflexão para uma molécula que deixa a superfície no ângulo sólido $d\Omega$ formando um ângulo θ_+ com a normal à superfície, é dada por,

$$f_{prob}(\theta_+) = \frac{d\Omega}{2\pi} \cos \theta_+. \quad (3-27)$$

Esta relação mostra que a velocidade da partícula espalhada não depende do ângulo de incidência θ_- . Knudsen mostrou que esta conjectura, baseada em

⁸Knudsen estudou experimentalmente o escoamento de gases rarefeitos através de tubos, em 1907.

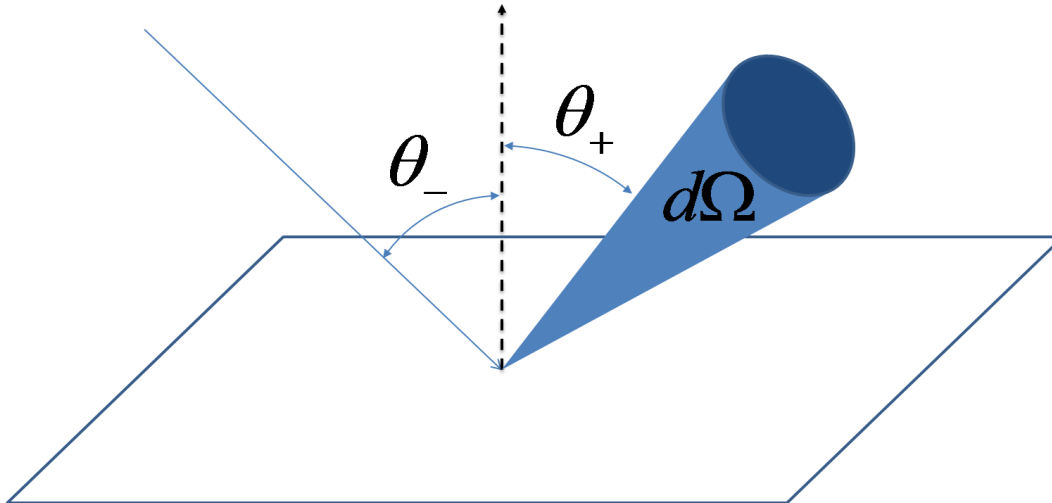


Figura 3.6: Esboço esquemático da probabilidade de uma partícula impingindo numa parede sólida num ângulo θ_- e deixando a fronteira a um ângulo θ_+ dentro de um ângulo sólido $d\Omega$.

considerações da teoria cinética dos gases, está em concordância com dados experimentais. Embora Knudsen não estivesse convencido de suas próprias explicações, a lei dos cossenos mostrou-se válida e James C. Maxwell apresentou mais refinamentos à lei dos cossenos.

É comum também, definir uma orientação da superfície, de tal forma que o ângulo θ_p é medido entre a inclinação da rugosidade e esta direção de orientação da superfície. Sommerfeld e Hubber (Som99) notaram que θ_p obedece uma função de distribuição de probabilidade (FDP) normal:

$$\text{FDP}(\theta_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\delta\theta_p)^2}} e^{-\frac{\theta_p^2}{2(\delta\theta_p)^2}}. \quad (3-28)$$

Esta distribuição é caracterizada pelo desvio padrão da distribuição gaussiana através do parâmetro $\delta\theta_p$. A média desta distribuição dos ângulos é aproximadamente zero.

Sommerfeld e Hubber (Som99) estudaram extensivamente e em detalhes o processo de colisão de partículas impingindo em superfícies rugosas através de aparatos experimentais. Eles descobriram que o ângulo de reflexão, α_+ , obedece uma distribuição que depende de $\delta\theta_{\text{parede}}$ e do ângulo de incidência, α_- (ver figura 3.7). A função de distribuição (equação. 3-28) depende da distância tomada entre cada um dos pontos da amostra, de tal forma que, existe um ângulo médio de rugosidade, $\langle\theta_p\rangle$, que depende do tamanho da partícula e do ângulo de impacto. Este desvio está, de algum modo, relacionado com o tamanho da partícula. Quanto menor for a partícula, maiores são os efeitos

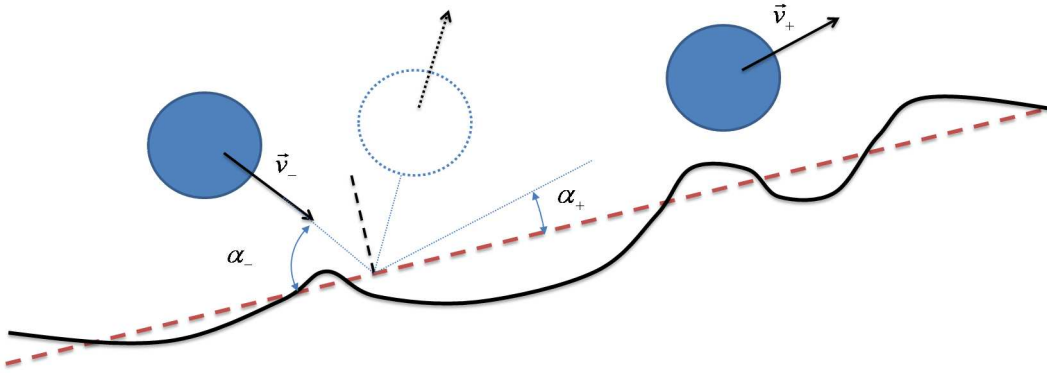


Figura 3.7: Representação da reflexão não especular de uma partícula impingindo numa superfície rugosa. α_- é o ângulo de incidência, que numa reflexão especular seria igual ao ângulo de reflexão. Entretanto α_+ é o ângulo de reflexão aparente, devido às imperfeições da superfície.

da rugosidade nela (Sch98). A distribuição de probabilidade de um ângulo de saída efetivo, α_+ , em relação à superfície para colisões perfeitamente elásticas é encontrada ser (Kon09)

$$\text{FDP}_{ef}(\alpha_-, \alpha_+, \delta\theta_p) = \tanh\left(\frac{3}{2} \frac{\alpha_+}{\delta\theta_p}\right) \sin\left(\frac{\alpha_- + \alpha_+}{2}\right) e^{-\frac{(\alpha_+ - \alpha_-)^2}{8(\delta\theta_p)^2}}. \quad (3-29)$$

Este resultado é válido somente para uma partícula efetuando apenas uma colisão com a parede rugosa. Se, por ventura, a partícula sofre mais de um ricocheteio na parede, a equação 3-29 necessita de uma correção. Se $\delta\theta_p$ for suficientemente pequeno, ou seja, a parede for efetivamente lisa, a função de probabilidade na equação 3-29 torna-se uma linha estreita e as colisões voltam a ser especulares.

A vista superior da geometria da estrutura ramificada de quarta geração na figura é apresentada na 3.8-(a), evidenciando as saídas numeradas de 1 a 8. Para cada valor do número de Stokes, 10^4 partículas são injetadas na entrada da estrutura com velocidade relativa ao fluido nula ($\vec{u}^* = \vec{0}$). As trajetórias das partículas no escoamento são obtidas através de integração numérica via método de Runge-Kutta de quarta ordem das equações 3-24. Na figura 3.8-(b), o histograma do percentual de partículas é mostrado para uma estrutura com $\alpha = 90^\circ$ e nas condições de escoamento para $Re = 50$ em função do número de Stokes, St . No limite em que o número de Stokes é muito pequeno, tal que as partículas seguem as linhas de corrente, a percentagem de partículas em cada saída é aproximadamente igual a 12.5%. A medida que o número de Stokes aumenta, a concentração de partículas em cada saída pode variar para mais de três vezes o valor para baixos números de Stokes(ver figura 3.8-(b)). Para $St \sim 0.24$, quase 70% das partículas saem pelos braços centrais. Entretanto,

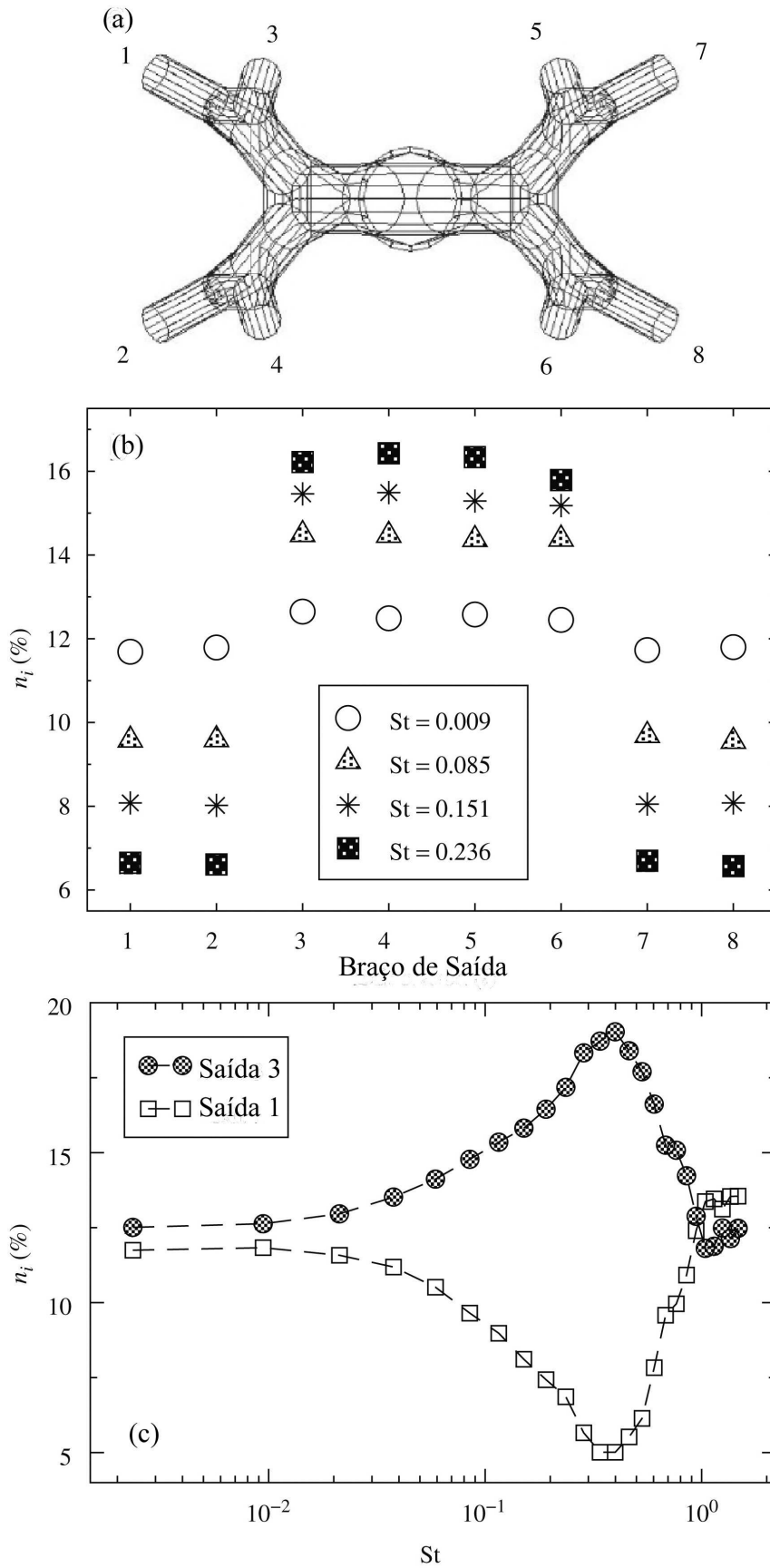


Figura 3.8: (a) Estrutura ramificada com quatro gerações e suas oito saídas. (b) Histograma da porcentagem de partículas deixando a estrutura por cada uma das saídas da figura em (a) para diferentes valores do número de Stokes. (c) Distribuição de partículas deixando a estrutura ramificada em duas saídas (uma mais central, a saída 3, e, a outra periférica, a saída 1) como função do número de Stokes, para $\alpha = 90^\circ$ e $Re = 50$.

esta tendência do aumento da concentração de partículas nas saídas centrais da estrutura com o aumento do número de Stokes atinge um valor crítico, St_C , próximo de 0.4 (veja figura 3.8-(c)). Após ultrapassado este valor, a concentração de partículas nas saídas centrais tende a diminuir rapidamente com o aumento de St , tal que para $St \sim 1$ a concentração nas saídas periféricas e centrais é praticamente a mesma. O comportamento apresentado na figura 3.8-(c) pode ser melhor entendido quando as figuras 3.9 são visualizadas. Desde que, como mostra a figura 3.9-(a), o número de Stokes é muito baixo, a trajetória das partículas coincide com as linhas de corrente. Já na figura 3.9-(b), a inércia das partículas é suficiente para provocar colisões com as paredes, mas não é suficiente para vencer a força de arrasto. Na figura 3.9-(c), como o número de Stokes é razoavelmente alto, as partículas apresentam um comportamento balístico fracamente amortecido. Com o aumento de St é de se esperar que a natureza estatística da balística tome lugar e a concentração de partículas em cada saída se aproxime de uma distribuição uniforme sobre todas as saídas.

A equação 3-29 foi usada para simular a reflexão não-especular das partículas de tamanho fixo nas paredes da estrutura ramificada. O valor de $\delta\theta_p$ foi feito variar entre 2.5° e 20° , mostrando que apenas mudanças quantitativas foram encontradas no valor das concentrações em cada saída ($< 10\%$). Estatisticamente os resultados encontrados se confirmaram mesmo para grandes ângulos médios de rugosidades ($\delta\theta_p \sim 20^\circ$). Isto mostra que a estrutura ramificada pode ser usada na prática para o processo de separação de partículas em suspensão.

Os resultados apresentados nas figuras 3.8-(b) e 3.8-(c) sugerem que a estrutura apresentada pode ser empregada como um separador de partículas eficiente, desde que a mistura seja diluída. Partículas que apresentam número de Stokes menor que o valor de St_C são retiradas principalmente pelas saídas centrais, onde o número de partículas com $St \gg St_C$ ou $St \ll St_C$ que deixam a estrutura através das saídas centrais é aproximadamente o mesmo.

Os resultados apresentados nas figuras 3.8 foram obtidos para uma estrutura com valores fixos de ϕ e α , entretanto é possível melhorar a eficiência de separação da estrutura mudando os parâmetros ϕ e α . A figura 3.10-(a) mostra o percentual de partículas deixando a estrutura através das saídas centrais em função do número de Stokes para diferentes valores de ϕ . A figura 3.10-(b) mostra o decréscimo monotônico do percentual máximo em função de ϕ , cujo pormenor apresenta a variação de $\log St_C$ com ϕ . O percentual de partículas máximo é conseguido para uma estrutura com ângulo $\phi = 90^\circ$, onde as saídas centrais estão à uma mesma distância da entrada (ver figuras 3.11).

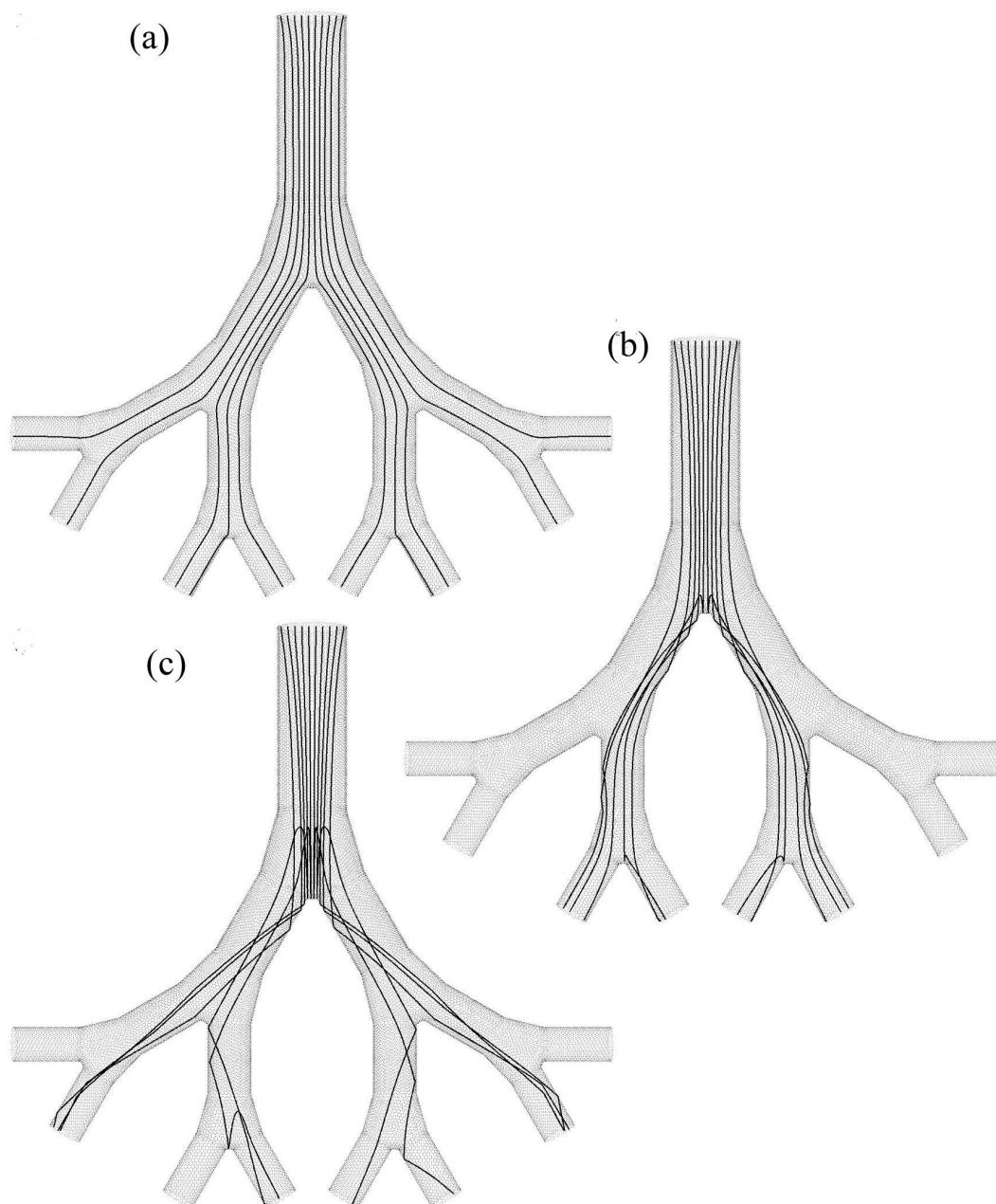


Figura 3.9: Trajetória de dez partículas projetadas na seção transversal de uma estrutura ramificada com paredes lisas com $\alpha = 60^\circ$ e $\phi = 0^\circ$ para diferentes valores do número de Stokes da injeção: (a) $St = 5.9 \times 10^{-6}$, (b) $St = 0.24$ e (c) $St = 3.78$.

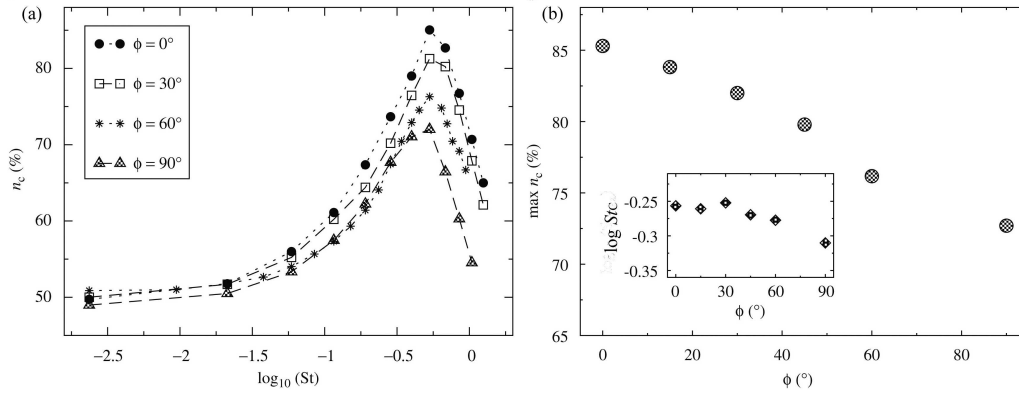


Figura 3.10: Em (a), é mostrado o número percentual de partículas, n_c , retiradas da estrutura pelas quatro saídas mais centrais em função do número de Stokes, St , para diferentes valores do ângulo azimutal ϕ . Aqui, $\alpha = 60^\circ$ e $h \approx 0.79$. Em (b), o valor máximo do percentual para cada curva na figura (a) em função de ϕ . Na figura interior, é mostrada a dependência do $\log St_C$ em função de ϕ .

Esta geometria em que $\phi = 90^\circ$ é essencialmente tridimensional, ao contrário da estrutura em que $\alpha = 0^\circ$, que é planar. O pormenor da figura 3.10-(b) mostra que St_C é efetivamente invariante em relação a $\phi < 30^\circ$ e à medida que ϕ aumenta após $\phi = 30^\circ$, o valor de St_C decresce, fazendo com que partículas com valores cada vez menores de St escapem pelas saídas centrais.

Outro parâmetro a ser variado é o ângulo α . A figura 3.12-(a) mostra o percentual de partículas deixando a estrutura pelas quatro saídas centrais em função do número de Stokes, em estruturas onde $\phi = 90^\circ$ e $h \approx 0.79$. Para cada curva do percentual de partículas retiradas nas saídas centrais contra o $\log St$ existe um ponto de máximo. Para baixos valores do número de Stokes, o percentual de partículas que saem pelas saídas centrais e periféricas é efetivamente o mesmo. A medida que o número de Stokes aumenta até o valor crítico para α , St_C , o percentual de partículas que saem pelas saídas centrais chega a ser seis vezes maior que nas saídas periféricas ($\alpha = 60^\circ$ ou $\alpha = 90^\circ$). Assim que St_C é transposto, o percentual de partículas nas saídas centrais cai abruptamente, chegando a ser menor que 40% do total de partículas. Esta região deve ser evitada por ter uma variação muito brusca. Na figura 3.12-(b) a dependência do máximo das curvas na figura 3.12-(a) contra α são mostradas, o que corrobora a discussão a respeito de α maiores produzirem uma maior eficiência de separação próximos de St_C . O pormenor da figura 3.12-(b), mostra como o número de Stokes crítico St_C varia com α . Para valores de α pequenos, St_C é alto, tal que para valores de α maiores que 50° , os valores de St_C têm a mesma ordem de grandeza ($St_C \approx 0.34$).

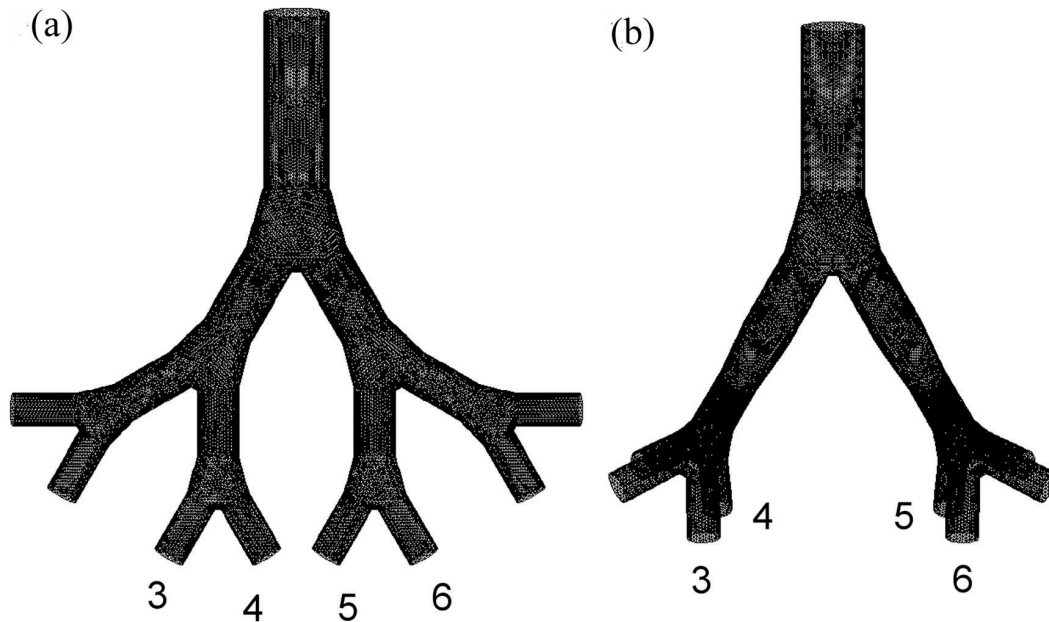


Figura 3.11: Geometria das estruturas ramificadas propostas com quatro gerações: em (a), $\phi = 0^\circ$, e, em (b), $\phi = 90^\circ$. Aqui $\alpha = 60^\circ$ e $h \approx 0.79$. As quatro saídas centrais são assinaladas nas duas figuras.

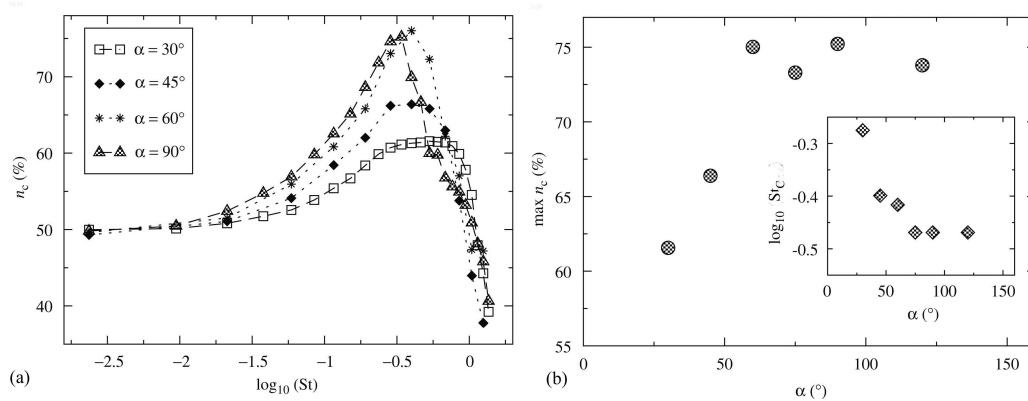


Figura 3.12: Em (a), é mostrado número percentual de partículas retiradas da estrutura pelas quatro saídas mais centrais em função do número de Stokes, St , para diferentes valores do ângulo α . Aqui, $\phi = 90^\circ$ e $h \approx 0.79$. Em (b), o valor máximo do percentual para cada curva na figura (a) em função de α . Na figura interior, é mostrada a dependência do $\log St_C$ em função de α .

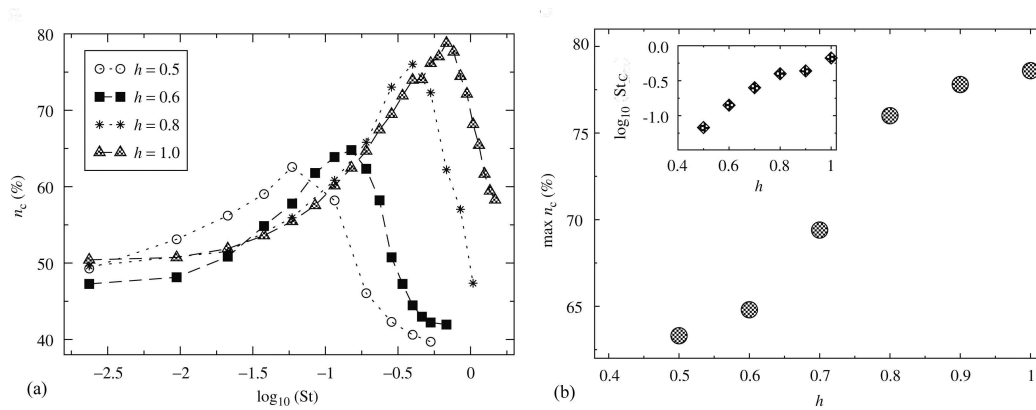


Figura 3.13: Em (a), é apresentado o número percentual de partículas retiradas da estrutura pelas quatro saídas mais centrais em função do número de Stokes, St , para diferentes valores de h . Aqui, $\alpha = 60^\circ$ e $\phi = 90^\circ$. Em (b), o valor máximo do percentual para cada curva na figura (a) em função de h . Na figura interior, é mostrada a dependência do $\log St_C$ em função de h .

Na figura 3.13-(a) a variação do percentual de partículas retiradas nas saídas centrais com $\log St$ é mostrada quando diferentes estruturas para diferentes valores de h . Todas as curvas apresentam um valor máximo para o número de Stokes, tal que para estruturas com h grande o suficiente, pode existir um máximo de eficiência de até 80% para $h = 1$. A figura 3.13-(b) mostra como o percentual de partículas retiradas nas saídas centrais varia com h . Há um crescimento suave do Stokes de eficiência máxima quando h aumenta. O pormenor da figura 3.13-(b) mostra a variação do $\log St_C$ contra h , revelando um crescimento monotônico a medida que h aumenta, ou seja, para estruturas com h maiores, maior será o número de Stokes crítico.

O comportamento descrito nas figuras 3.10, 3.12 e 3.13 é útil para a confecção da estrutura separadora de partículas, tal que um ajuste fino pode ser conseguido para cada conjunto de partículas com St conhecido. Ainda, é de se conjecturar que com o aumento das gerações na formação da estrutura, a eficiência de separação aumente. De fato, é esperado que uma cascata de separadores resulte em eficiências efetivas de quase 100%.

Em relação a outros separadores de partículas com campos externos aplicados (Pam07), o separador proposto tem a vantagem de necessitar apenas de um escoamento advectivo constante para o seu funcionamento. De fato, estudos experimentais de separadores que usam apenas as propriedades hidráulicas e a geometria da estrutura de separação têm sido propostos na última década (Hua04, Yam04). Uma vez que os processos físico de separação não dependem da natureza do fluido empregado, tal tipo de dispositivo pode ser aplicado tanto na análise de tamanho quanto para a separação de tamanho de diferentes tipos

de partículas numa mistura diluída.

3.3

Modelo matemático para o transporte de partículas

3.3.1

Contexto

A preservação da natureza e a proteção ambiental são questões importantes nas agendas de organizações governamentais e não-governamentais. Conseqüentemente, estas questões têm sido objeto de estudo intenso, onde a principal preocupação é entender como as ações humanas afetam o meio-ambiente. Por exemplo, deflorestamento e emissões de poluentes são relacionados a mudanças no clima resultando em enchentes e erosão (Elg01, Rus96, Bog74). Em particular, erosão pode ser responsável por diminuir a qualidade de vida, causando um efeito negativo na economia. O problema de erosão também atrai o interesse de geólogos e físicos. Na Geologia, esta é uma área extremamente rica com muitos dos padrões observados na natureza oriundos dos processos de erosão e deposição. Na Física, a formação de tais padrões varre uma gama imensa de escalas espaciais e temporais. Estes processos de formação de padrões estão diretamente relacionados ao transporte de partículas sólidas granulares por um escoamento e apresentam uma rica fenomenologia com uma variedade de aplicações. Aplicações particulares são bacias de rios fractais, meandros de rios, campos de dunas, avalanches granulares ou plataformas continentais costeiras.

Grande parte do conhecimento de processos de erosão são leis empíricas derivadas de medições de campo, o que levou a um interesse de teóricos para a descrição do fenômeno (Kro02, Ert02). Várias tentativas para entender a dinâmica do transporte de barras de areia no praia (Elg01) ou em rios (Leo95) do ponto de vista estatístico têm sido feitas, mas muitas questões fundamentais aparecem devido aos padrões macroscópicos formados devido a instabilidades (Sey07). Muitos experimentos têm sido desenvolvidos para responder a questão fundamental: como objetos granulares respondem a ação de fatores externos? (Pou99, Bor05). A descrição de escoamentos de soluções não-diluídas é bastante difícil. Em geral, o tratamento de soluções concentradas é realizado com modelos de duas fases ou misturas.

3.3.2

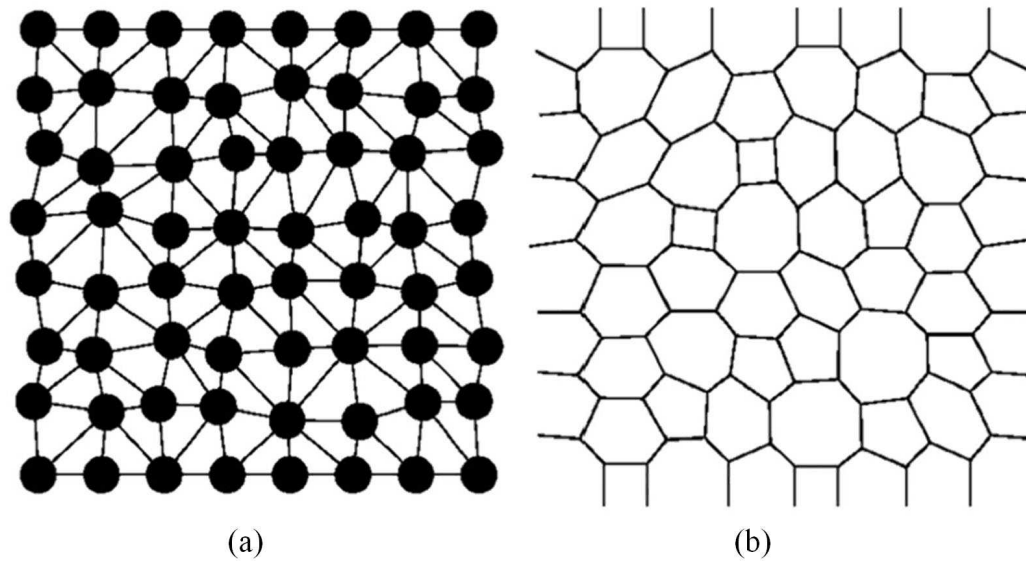


Figura 3.14: (a) Configuração inicial típica da posição dos grãos de uma rede aleatória triangularizada com 64 partículas. (b) O mosaico de Voronoi correspondente.

Formulação do Modelo

O sistema a ser modelado é uma solução concentrada de partículas esféricas num fluido Newtoniano incompressível em duas dimensões. O meio granular é considerado como uma rede aleatória regularizada de tamanho $N \times N$ num plano, onde os sítios são os centros de massa dos grãos com diâmetro d . A condição inicial para o problema é que as partículas estejam arranjadas numa rede regular quadrada, onde a distância entre os vizinhos mais próximos é l_R . Os grãos são movidos aleatoriamente ao longo de vetores com direção arbitrária e magnitude menor que a distância de separação inicial dos grãos. Assim, os grãos são distribuídos aleatoriamente, mas com uma separação característica entre eles. Desde que não há sobreposição de partículas, a magnitude de um vetor aleatório não pode exceder $\frac{1}{2}(l_R - d)$. Embora a rede seja construída em duas dimensões, a idéia é simular fenômenos tridimensionais que acontecem num plano, para tal, as esferas são supostas completamente submersas no fluido.

Dado um instante de tempo t , o sistema inteiro de grãos é triangularizado considerando cada partícula como o vértice de um mosaico de Voronoi (ver figura 3.14). A geometria local de poros entre dois grãos vizinhos (sítios i e j) é considerada como um canal capilar com permeabilidade hidráulica, $\kappa_{i,j}$. Esta associação gera uma rede de capilares representando a geometria complexa do espaço de poros. Um gradiente constante de pressão é imposto entre a zona de entrada e a zona de saída. Condições de contorno periódica são assumidas na

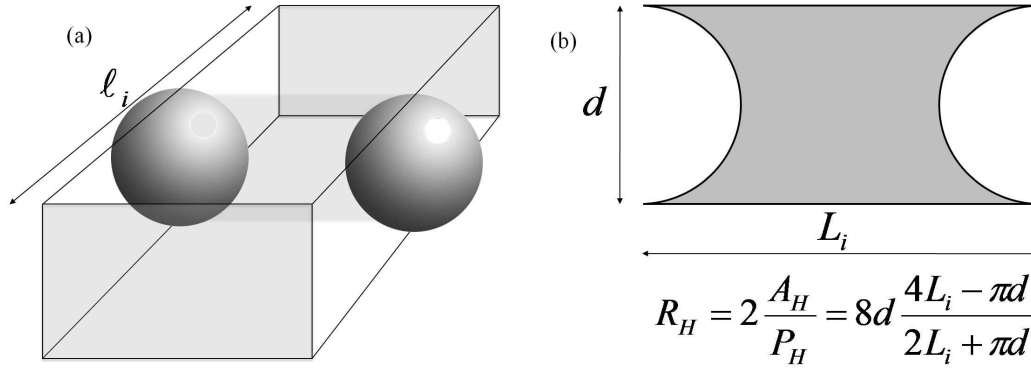


Figura 3.15: Canal capilar empregado no modelo entre duas partículas de diâmetro d e separação ℓ_i no mosaico de Voronoi, em (a), e, em (b), a seção reta correspondente do canal caracterizada pelo raio hidráulico R_H .

região perpendicular ao gradiente de pressão aplicado. Ainda, a conservação da massa é requerida no sistema, de tal forma que

$$\sum_j \kappa_{i,j} (p_i - p_j) = 0, \quad (3-30)$$

onde o índice j refere-se aos sítios vizinhos do sítio i no mosaico de Voronoi, $\kappa_{i,j}$ é a permeabilidade hidráulica do canal capilar, p_i e p_j são os valores da pressão local nos sítios i e vizinho de i , respectivamente. As N equações 3-30 algebricamente acopladas são resolvidas em termos do campo de pressão nodal através de métodos padrão para solução de matrizes esparsas. Assim, através da equação 2-65, a velocidade do fluido em cada ponto da rede pode ser calculada, conhecendo-se a viscosidade do fluido e o tamanho dos capilares do mosaico de Voronoi.

A largura do canal capilar de comprimento $\ell_{i,j}$ é limitada pela separação, $L_{i,j}$, entre as duas esferas de diâmetro d . Assim o escoamento capilar é obtido utilizando-se o raio hidráulico (equação. 2-67) para a estimativa de um canal de seção circular. A área da seção reta do canal é tomada como a área da seção reta no plano em que o segmento de reta que une o centro das duas partículas é mínimo (ver figura 3.15). O raio hidráulico (equação. 2-67) para este canal é

$$R_H = 2 \frac{A_H}{P_H} = 2 \frac{L_{i,j}d - \pi d^2/4}{2L_{i,j} + \pi d}. \quad (3-31)$$

A utilização do raio hidráulico, mostra que a relação da permeabilidade hidráulica tem a forma:

$$\mu u_{0,i,j} \frac{\ell_{i,j}}{\Delta p_{i,j}} = -\frac{R_H^2}{8} = -8d^2 \frac{(4L_{i,j} - \pi d)^2}{(2L_{i,j} + \pi d)^2}. \quad (3-32)$$

Esta equação é uma modelagem supondo que o canal entre as duas esferas

é prismático de seção reta, tal como apresentado na figura 3.15-(b). Entretanto, esta permeabilidade não representa a solução numérica exata das equações de Navier-Stokes por não levar em consideração a interação entre o fluido e a geometria. A solução das equações de Navier-Stokes no estado estacionário para um fluido incompressível, mais a equação da continuidade, foi obtida com o auxílio do FLUENT[®] considerando condições de contorno periódicas na direção transversal ao escoamento, velocidade constante, u_0 , na face de entrada do canal de largura L_i , altura d e comprimento ℓ_i (ver figura 3.15-(a)) e condição de pressão zero na face de saída. Na face inferior e nas esferas a condição de não-deslizamento foi imposta. Na face superior a condição imposta foi de tensão de cisalhamento nula. A solução obtida com o FLUENT[®] foi conseguida com um método de discretização tetragonal da geometria imposta e as equações de momento e continuidade foram resolvidas usando um método de diferenças finitas de segunda-ordem para o momento com parâmetro de relaxação igual à 0.7. A solução foi considerada válida quando o resíduo do momento linear e da continuidade foi menor que 10^{-7} .

A permeabilidade hidráulica em função da razão $L_{i,j}/d$ é mostrada na figura 3.16. É assumido que as partículas se movam sem transferir momento linear para as partículas do fluido, mas as partículas do fluido transferem momento para os grãos, ou seja, há acoplamento unidirecional. O regime de escoamento é considerado *quasi-estático*, ou seja, o escoamento se adapta instantaneamente a qualquer mudança na geometria dos grãos. Estas mudanças na geometria ocorrem porque o fluido exerce uma força de arrasto nos grãos. Este arrasto é obtido através do fator C_D dado pela equação 3-10. A velocidade do escoamento $u_{0;i,j}$ através do grão é obtida da equação da conservação da massa para os grãos (equação. 3-30) fazendo a condutividade hidráulica do capilar $\kappa_{i,j} \equiv \kappa(L_{i,j})$. Assim, a velocidade média do escoamento capilar é

$$u_{0;i,j} = -\frac{\kappa_{i,j}}{\mu} \frac{p_i - p_j}{\ell_{i,j}}. \quad (3-33)$$

A força que age no grão será então

$$\vec{F}_i = 3\pi\mu d \sum_j (\vec{u}_{0;i,j} - \vec{v}_i), \quad (3-34)$$

onde \vec{v}_i é a velocidade do grão. Usando a segunda lei de Newton na equação 3-34 e integrando diretamente, obtém-se a velocidade e o deslocamento da partícula, dado um instante de tempo Δt , num sistema de coordenadas que se

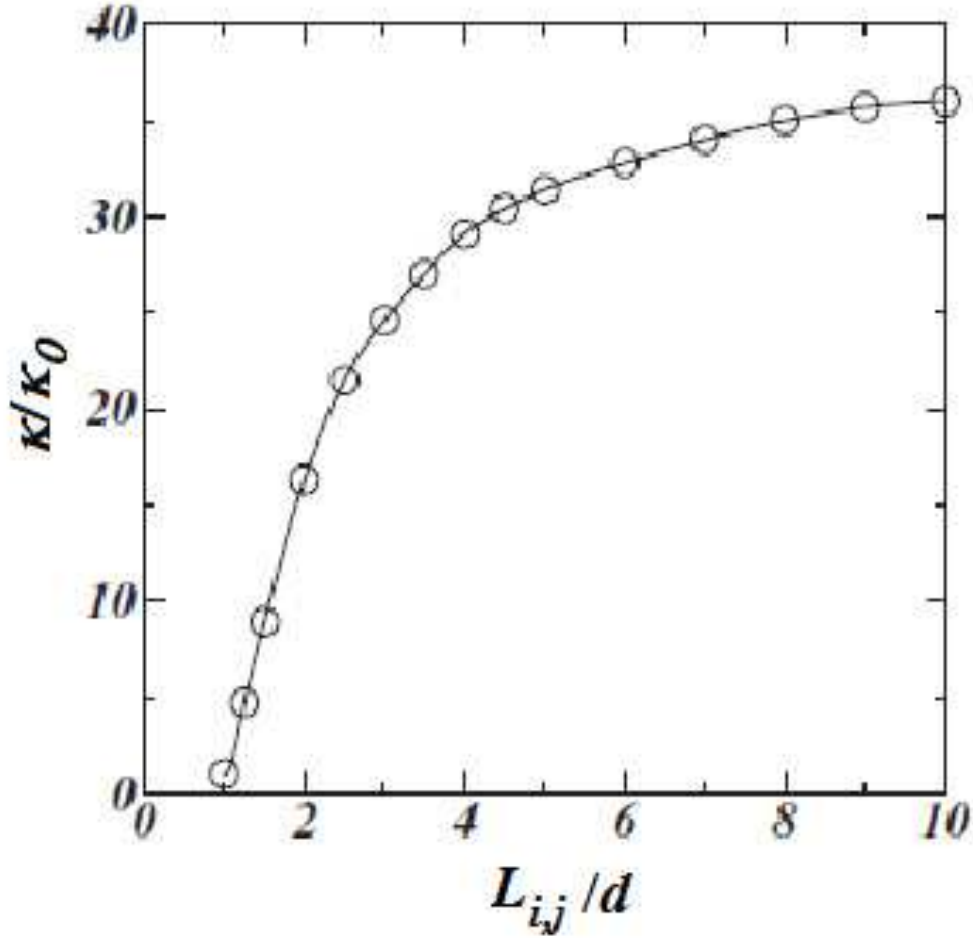


Figura 3.16: Permeabilidade hidráulica κ normalizada por κ_0 em função da razão $L_{i,j}/d$ para a configuração da figura 3.15-(a). Aqui, κ_0 é a permeabilidade de um canal com $L_{i,j}/d = 1$. A linha sólida é uma interpolação de uma polinomial cúbica dos dados obtidos da solução numérica das equações de Navier-Stokes. Esta função cúbica é utilizada modelo de rede de poros.

move com velocidade $\langle \vec{v} \rangle$:

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \langle \vec{v} \rangle - [\langle \vec{v} \rangle - \vec{v}_i(t)] e^{-NC\Delta t}, \quad (3-35)$$

$$\Delta \vec{r}_i(t + \Delta t) = \langle \vec{v} \rangle \Delta t + \frac{[\langle \vec{v} \rangle - \vec{v}_i(t)]}{NC} (1 - e^{-NC\Delta t}), \quad (3-36)$$

onde $C \equiv \frac{18\mu}{\rho_g d^2}$, com ρ_g sendo a densidade volumétrica de massa dos grãos e a velocidade $\langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \vec{v}_i$ é a velocidade média com que o sistema se move. O deslocamento $\Delta \vec{r}_i$ a que cada partícula é submetida no tempo $t + \Delta t$ é obtido levando-se em conta que as partículas não podem ocupar o mesmo lugar de outra naquele tempo. Assim, Δt deve ser escolhido pequeno suficiente para não permitir esta super-posição. O critério de convergência para o movimento dos grãos é caracterizado para que estes não movam significativamente, de tal

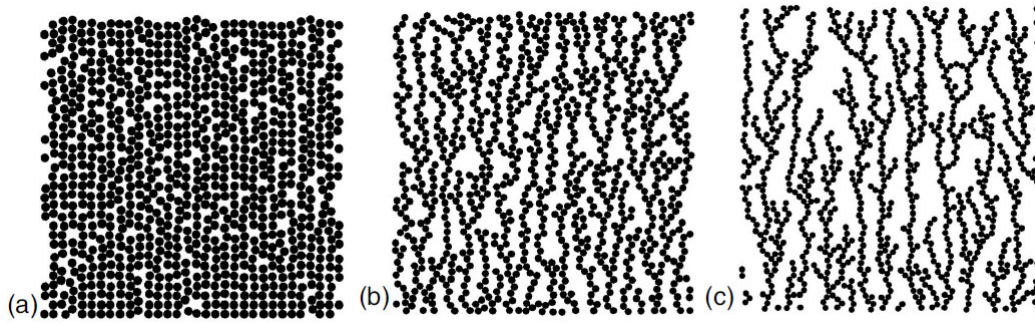


Figura 3.17: Configuração final do sistema para porosidades $\phi = 0.57$, em (a), $\phi = 0.71$, em (b) e $\phi = 0.80$, em (c), após 15000 passos de interação. O arranjo dos grãos em determinadas posições dão origem a padrões característicos que dependem fortemente de ϕ .

forma que a solução atinja o desejado estado estacionário.

Resultados

Simulações foram realizadas numa rede com $N = 32 \times 32$ grãos de diâmetro $d = 30\mu\text{m}$ e densidade $\rho_g = 2.75\text{kg/m}^3$. As partículas estão imersas em água líquida, cuja viscosidade é $\mu = 10^{-3}$ Pa.s, que escoia em condições de baixo número de Reynolds, $\text{Re} \ll 1$, através dos grãos cujo espaço preenchido por água, ou seja a porosidade ϕ , varia de 0.48 a 0.80. Para cada valor de ϕ , foram obtidos resultados para cinco realizações diferentes, a fim de garantir plausibilidade estatística.

Nas figuras 3.17-(a),(b) e (c), são mostradas três configurações finais do modelo para diferentes valores de ϕ . Como se pode observar os padrões formados dependem fortemente da porosidade dos grãos. Para valores grandes de ϕ , ocorre agregação de partículas em forma de dendritos refletindo o acoplamento forte dos grãos com o escoamento. Para valores pequenos de ϕ , não existe padrão observado, o que reflete a baixa mobilidade dos grãos em sistemas compactos. A tendência a formar padrões do tipo *dendrito* nos quais os grãos alinham-se em direções preferenciais, pode ser estatisticamente quantificada atribui-se a cada par de grãos em contato um ângulo α entre os segmentos de retas conectando o centro de massa dos grãos e a direção ortogonal ao escoamento. Nas figuras 3.18-(a), (b) e (c), são mostrados os histogramas para cinco realizações de cada sistema com porosidades $\phi = 0.57$, 0.71 e 0.80, respectivamente. para o sistema com baixa porosidade, $\phi = 0.57$, a figura 3.18-(a) mostra que um número significativo dos grãos estão alinhados em $\alpha = 25^\circ$ (e na direção simétrica $\alpha = 155^\circ$), muito embora a grande maioria das partículas que estão em contato umas com as outras façam ângulos próximos a

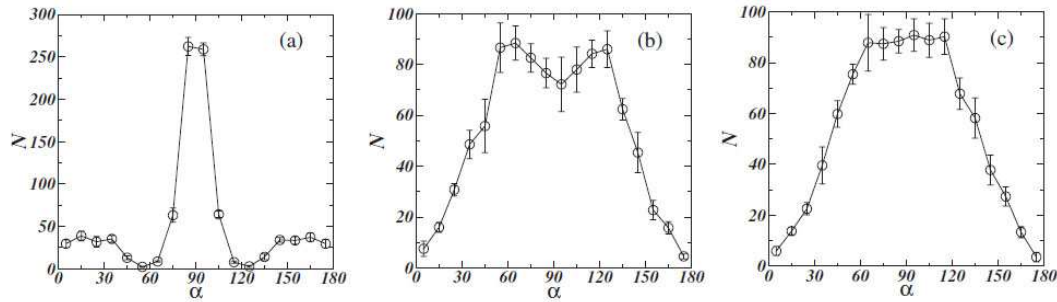


Figura 3.18: Histograma do ângulo de contato, α , entre os grãos em contato para sistemas com porosidades $\phi = 0.57$, em (a), $\phi = 0.71$, em (b) e $\phi = 0.80$, em (c). Foram feitas cinco realizações para cada sistema.

90° . É uma tendência de sistemas de pouca mobilidade de se alinhar na direção do escoamento. Em sistemas com porosidade intermediária, $0.5 < \phi < 0.71$, a moda está localizada nos ângulos $\alpha = 60^\circ$ e $\alpha = 120^\circ$. Este comportamento já foi observado experimentalmente por Daerr *et al.* (Dae03). Na figura 3.18-(c), o histograma mostra que a distribuição dos ângulos é alargada, o que indica que muitas direções de alinhamento são possíveis, excetuando-se aquelas que se aproximam de zero e 180° . Ângulos de alinhamento entre 50° e 130° têm aproximadamente a mesma probabilidade de acontecer.

Também, a partir deste modelo, pode-se mostrar que a permeabilidade hidráulica global, κ , pode ser expressa como uma lei de potência da porosidade. Este comportamento está expresso na figura 3.19. É interessante que o rearranjo contínuo leva a um sistema de poros auto-organizado encontrado neste tipo de sistema. Koponen *et al.* mostraram que a permeabilidade hidráulica pode ser expressa como uma lei de potência para um outro sistema, onde as partículas não se tocam (Kop97).

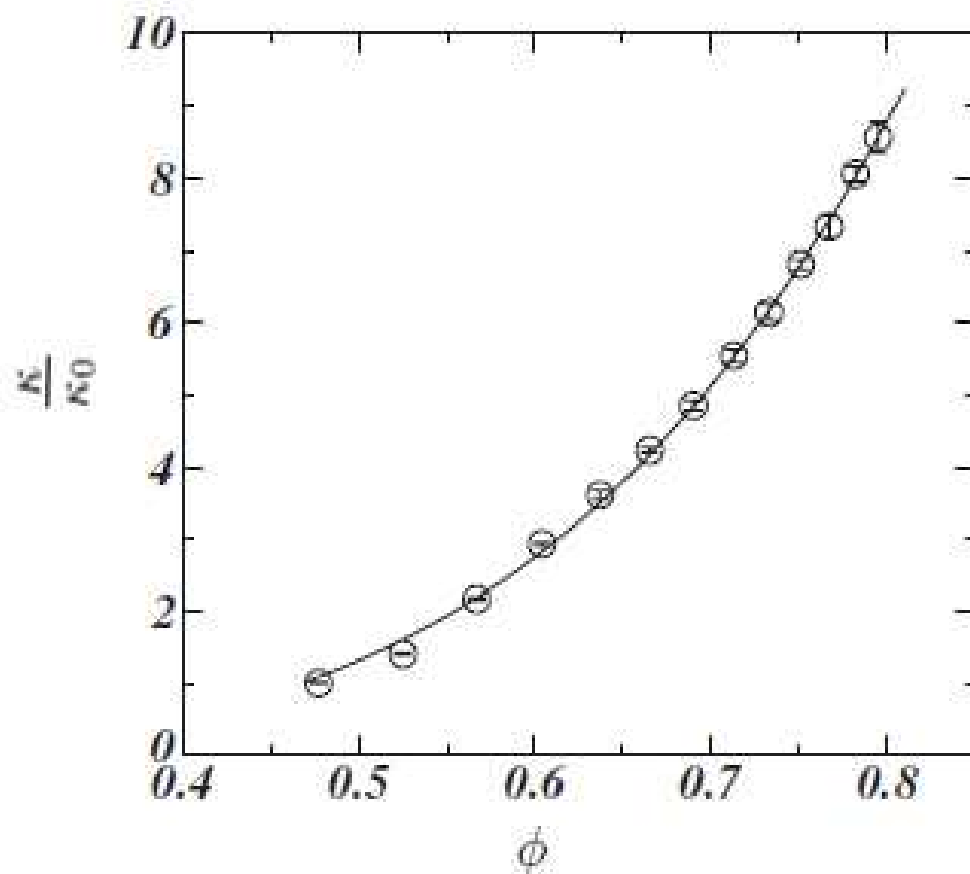


Figura 3.19: Permeabilidade hidráulica global, κ , normalizada pelo valor da permeabilidade global para $\phi = 0.48$, κ_0 , em função da porosidade da amostra ϕ . A linha sólida representa o ajuste a uma função do tipo $\frac{\kappa}{\kappa_0} = a\phi^b$, com $a = 21.5 \pm 0.5$ e $b = 4.0 \pm 0.5$.

4

Escoamento através de Meios Porosos

Neste capítulo é apresentado um estudo sobre o escoamento de fluidos não-Newtonianos através de meios porosos desordenados realizado pelo autor, orientador e colaboradores (Mor09). Uma breve introdução sobre meios porosos é feita, seguida de uma introdução sobre as propriedades de escoamento através de meios porosos até a descrição das leis de Darcy e Forchheimer. Subseqüentemente, os resultados obtidos com a simulação numérica do escoamento de fluidos do tipo de lei-de-potência e do fluido de Bingham são apresentados (estes fluidos foram introduzidos no capítulo 2).

4.1

Contexto

Na literatura de Mecânica dos Solos e Hidrologia é comum distinguir entre as propriedades de transporte, incluindo a condução de calor, e as propriedades do escoamento. Já na literatura de Física, todas essas propriedades estão na mesma categoria de transporte. Neste capítulo serão discutidas as propriedades básicas que determinam o que é um meio poroso, suas principais características e o transporte de momento de fluidos não-Newtonianos através de meios porosos desordenados em três dimensões.

4.2

Caracterização de meios porosos

A informação mais básica a respeito do espaço de poros de um meio poroso é sua porosidade, i. e., a fração volumétrica do espaço de vazios em relação ao volume total da amostra. Deste modo, esta fração é sempre menor que a unidade. Seja V_T o volume total do meio poroso, V_s o volume do material sólido compondo o meio poroso e V_v o volume dos poros (vazio), a porosidade é definida através da seguinte relação:

$$\varepsilon = \frac{V_v}{V_T} = \frac{V_T - V_s}{V_T} = 1 - \frac{V_s}{V_T}. \quad (4-1)$$

O valor da porosidade das rochas é menor que 1% em muitas rochas cristalinas (ex. granito), em torno de 5 – 15% em arenitos, e mais de 60%

em pedras pome. Por causa do solos serem mais particulados que rígidos, o requerimento para estabilidade mecânica restringe os valores da porosidade do solo para uma faixa menor que 60%. A maioria dos solos minerais apresentam porosidades entre 30% e 60%, com valores entre 40-50% na zona mais externa do solo. O espaço poroso de um meio poroso geológico é, geralmente, ocupado por completo por ar e/ou água.

O conceito de porosidade definido através da equação 4-1 é extremamente simples, e, geralmente, o meio mais confiável de se estimar a porosidade é através da medição da densidade da amostra seca. A densidade média de uma coleção de partículas não irá variar muito além de 2650 Kg/m³ (a densidade do quartzo), enquanto que a densidade de partículas de solo pode variar para mais de 15% deste valor. A densidade seca de um solo é obtida pesando-se um volume pré-determinado, mas os processos de remoção da amostra, transporte e secagem podem mudar a estrutura do material.

Solos biologicamente ativos, tendo alguns poros grandes entre torrões do solo ou agregados, são particularmente vulneráveis à compactação no processo de transporte da amostra. No entanto, a porosidade associada aos poros grandes é raramente superior a 5% da porosidade total, de modo que os erros decorrentes da mudança de re-empacotamento podem ser restringidos por esse valor. Outro meio de se obter a porosidade é medir a perda de massa de um solo inicialmente saturado durante um longo tempo num forno de secagem a uma temperatura de 105°C. Este método exige que o volume de poros não mude com a adição ou remoção de água, uma suposição não necessariamente razoável para solos com teor significativo de argila. Também, exige que o solo esteja inicialmente saturado por completo, mas é preciso que uma boa técnica experimental seja aplicada a fim de garantir exatidão em teores de água maiores que 90%. Assim, a especificação da porosidade por esta técnica de pesagem entra numa faixa de tolerância (Hun09). Métodos indiretos de se estimar a porosidade incluem atenuação de raios gama (Mar96) e picometria de gás (Dan86) com amostras secas. Estes métodos também estão sujeitos a mudanças no volume durante a amostragem e transporte. Técnicas de imagens por tomografia de raios-X podem ser usadas para determinar a porosidade do meio, tanto quanto para distinguir entre diferentes tipos de espaço poroso.

Até aqui, os métodos descritos para se estimar a porosidade de uma amostra não levam em conta fatores morfológicos, de tal forma que podem existir regiões no meio poroso que não estão interconectadas às outras regiões da amostra, isto é, não é possível a partir de uma região de vazío chegar em qualquer outra região de vazío do meio. Desta forma, as técnicas empregadas para se estimar a porosidade refletem a **porosidade real** da amostra. Nesta

tese, foi utilizada a definição de **porosidade efetiva** na qual todas as regiões de vazio da amostra estão interconectadas e no decorrer da tese ε , ou a palavra porosidade, designa simplesmente a porosidade efetiva da amostra.

Classificação do espaço poroso

Suponha que o meio poroso estudado é perfeitamente conhecido. Depois de distinguir entre o espaço de poros e o sólido, é útil classificar as porções do espaço de poros como corpo poroso (poro) ou estrangulamento poroso conectando o corpo poroso. Esta diferença é acreditada ser fundamental para a distinção entre meios porosos molhados e secos. Corpos porosos são grandes vazios, geralmente tendo um ou mais estrangulamentos levando a eles. A constrição do espaço poroso ligando espaços porosos vizinhos é denominada de estrangulamento ou gargalo. A distinção entre corpos porosos e estrangulamentos não é muito rigorosa, mas Glantz e Hilpert (Gla07) utilizaram a teoria dual de grafos para tentar melhorar esta distinção, através de uma generalização usual das técnicas de estado sólido para a construção de redes duais.

4.3

Modelos para representação do espaço poroso

Uma vez que a obtenção da morfologia de um meio poroso é difícil, modelos teóricos têm sido propostos para o estudo computacional das propriedades de transporte.

4.3.1

Modelos de Empacotamento de Esferas

Um **empacotamento de esferas** consiste num arranjo de esferas idênticas que se tocam, mas não se sobrepõem, a fim de preencher um espaço determinado. Este arranjo pode ser arbitrário, mas, em geral, é feito de tal modo a maximizar a desordem do arranjo. Isto é obtido quando esferas são adicionadas ao espaço a ser preenchido e depois são comprimidas a fim de conferir ao sistema uma coesão estrutural. Um arranjo aleatório de esferas apresenta uma porosidade pouco maior que 36.6% (Son08). Para atingir porosidades variadas deve-se fazer um arranjo regular ou incluir esferas de tamanhos diferentes no arranjo (Bor94). O aspecto mais interessante do modelo de empacotamento de esferas é permitir uma conectividade total do espaço poroso.

Em duas dimensões o empacotamento de esferas torna-se um arranjo de discos, mas cada corpo poroso não está conectado na amostra, tal que a porosidade efetiva é zero. Este modelo pode ser utilizado em problemas de

Mecânica Estrutural, mas não pode ser utilizado para o escoamento de um fluido.

4.3.2

Modelos de Tubos Paralelos e de Redes

Além dos empacotamentos de esferas, também existem modelos de meios porosos baseados em tubos capilares paralelos, redes e conceitos de fractal. Enquanto que discussões a respeito do modelo de empacotamentos de esferas são usadas para se ter um *insight* dos conceitos e terminologia, elas também são úteis como descrições de meios porosos artificiais, como aqueles formados por esferas de vidro. Uma outra questão é, se tais meios artificiais revelam-se úteis para a compreensão das propriedades hidráulicas de meios naturais. Nesta tese não serão tratados modelos de tubos capilares, pois como cada um dos tubos implicitamente abrange o meio todo, os poros têm limiar de coordenação infinito e limiar de percolação zero. O feixe capilar é, portanto, um modelo fisicamente incompleto, embora tenha uma utilização no ensino de conceitos básicos. Ele também serve como um caso limite de conectividade perfeita entre os poros de um dado tamanho, mas conectividade zero entre poros de diferentes tamanhos. Uma vez que este modelo é uma simplificação exagerada para estudo do escoamento e transporte em meios naturais, não será tratado nesta tese, embora ele seja bastante popular.

Os modelos de rede começaram com Fatt (Fat63) e foram submetidos a uma evolução extraordinária nas últimas três décadas. As redes de tubos de Fatt eram tubos se conectando num ponto sem dimensão, uma configuração de bola-e-tubo logo se tornou comum, refletindo a distinção feita anteriormente entre o armazenamento em corpos de poros, e o escoamento através de estrangulamentos porosos. Modelos mais recentes de estrangulamento poroso têm uma seção reta poligonal em vez de uma seção circular (Lag01, Cam05, Lin06) e/ou uma tendência de convergência/divergência na geometria (por exemplo, em forma de estrangulamentos bi-cônicos (Hil03)) ao invés de uma seção transversal constante. As primeiras redes eram quase todas em 2D, enquanto redes recentes são quase todas em 3D, uma distinção fundamental. Isto se deve ao fato das propriedades de transporte poderem ser obtidas analiticamente de modo mais fácil em 2D. Em um meio 2D, apenas percolação de uma fase é possível. Assim, não só o escoamento simultâneo de duas fases é impossível, como todos os grãos estão em contato uns com os outros (necessário para a estabilidade mecânica). Recentemente, redes reticuladas regulares, com raios de poros distribuídos aleatoriamente para estrangulamentos e corpos, e estrangulamentos individuais eliminados aleatoriamente foram utilizadas para produ-

zir a coordenação desejada. Em contrapartida, alguns tratamentos costumam usar redes irregulares (Bak97), com raios de poros espacialmente correlacionadas (Kna01) e coordenação dos poros positivamente correlacionada com o tamanho dos poros. Os modelos de rede foram utilizados como ferramentas conceituais em engenharia de petróleo duas décadas antes de sua relação com os processos de infiltração ter sido reconhecida (Cha77).

4.3.3

Modelo de Queijo Suíço

Um dos muitos modelos contínuos que representam um meio poroso em duas ou três dimensões é conhecido como **Modelo de Queijo Suíço** (Lor01). Neste modelo um conjunto de discos ou esferas é lançado aleatoriamente numa caixa de dimensões L_x , L_y e L_z , tal que a superposição dos discos ou esferas é permitida. Neste modelo, o substrato é construído através dos espaços vazios que restaram na caixa após a alocação destes discos ou esferas. Assim, em três dimensões, o substrato poroso é contínuo de tal forma a permitir deslocamento de mais de uma fase. Ainda, é possível controlar a porosidade da amostra simplesmente escolhendo um valor exato até onde a alocação de esferas atinja um valor de ε próximo do desejado. Isto é conseguido computacionalmente realizando integração de Monte Carlo (Car98) toda vez que uma esfera for alocada na caixa. O ponto crítico para a percolação neste modelo é $\varepsilon_C = \frac{1}{2}$ (Sas87, Hal85). O Modelo de Queijo Suíço inverso é construído do mesmo modo que o Modelo de Queijo Suíço apenas considerando que o que era substrato poroso passa a ser vazio e *vice-versa*.

Um outro modelo bastante similar ao Modelo de Queijo Suíço é aquele onde o substrato poroso é construído alocando obstáculos, entretanto não permitindo a superposição de obstáculos. Se os obstáculos forem de forma convexa, não haverá zonas de estagnação¹ no meio poroso, ao contrário do que ocorre no substrato construído através do Modelo de Queijo Suíço.

Meios porosos utilizados nesta tese

O modelo de meio poroso utilizado nesta tese foi construído a partir do Modelo de Queijo Suíço utilizando esferas maciças de diâmetro d_p alocadas num espaço de dimensões $L_x = L_y = 5d_p$ e $L_z = 10d_p$, tal que o valor de ε desejado fosse obtido. Para uma solução numérica satisfatória das equações da

¹Zonas de estagnação são regiões geométricas num escoamento onde a pressão é praticamente constante de tal forma que os elementos do fluido estão essencialmente paradas nesta região.

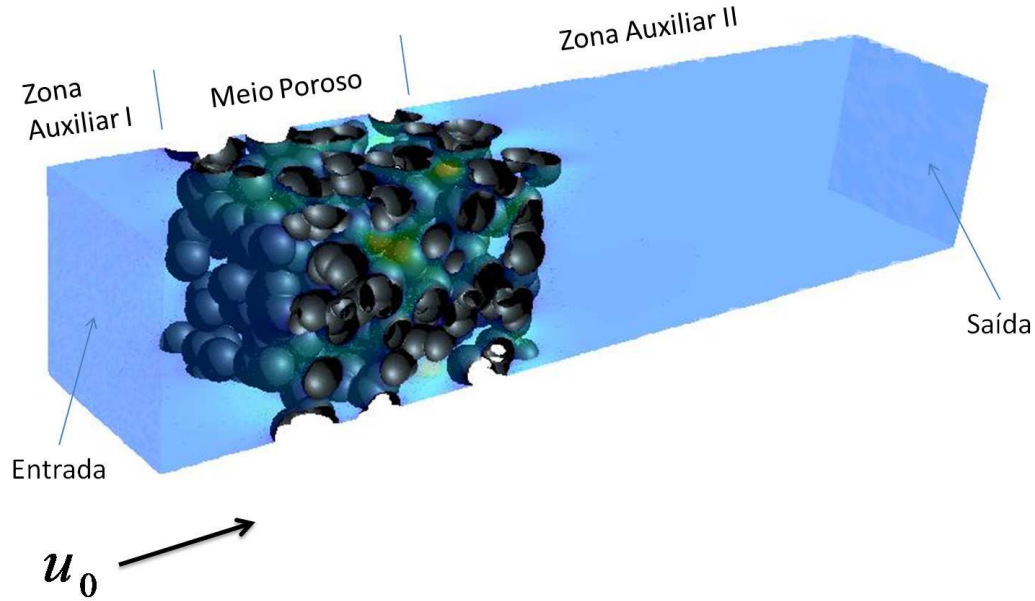


Figura 4.1: Diagrama esquemático de uma configuração do espaço poroso construído com o Modelo do Queijo Suíço para um meio onde $\varepsilon = 0.5$. As zonas auxiliares no início e fim do meio poroso facilitam a obtenção da solução numérica com custo computacional menor. Na superfície de entrada a condição de contorno é de fluxo constante com velocidade u_0 , na superfície de saída a pressão é nula e as condições de contorno para as superfícies laterais é de periodicidade. A condição de contorno no meio poroso é de não deslizamento. As cores nas superfícies laterais representam a magnitude de velocidades crescendo do azul para o vermelho.

conservação do momento e da continuidade no estado estacionário,

$$\vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \nabla \mathcal{T}, \quad (4-2)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (4-3)$$

empregando-se a técnica de diferenças finitas (utilizando o FLUENT), a geometria contínua foi discretizada de maneira não estruturada através de tetraedros de tamanho variável. A figura 4.2 mostra um corte longitudinal na discretização do meio poroso evidenciando sua estrutura irregular com um densidade de pontos maior próximo das bordas do meio. É possível notar as regiões auxiliares nos lados direito e esquerdo da figura 4.1. Tais regiões são importantes para a relaxação da solução numérica. As condições de contorno para o problema são fluxo constante na zona de entrada, pressão zero na zona de saída, bordas não-deslizantes e superfícies periódicas na região perpendicular à direção do escoamento.

Os meios porosos utilizados nesta tese foram conseguidos com uma média

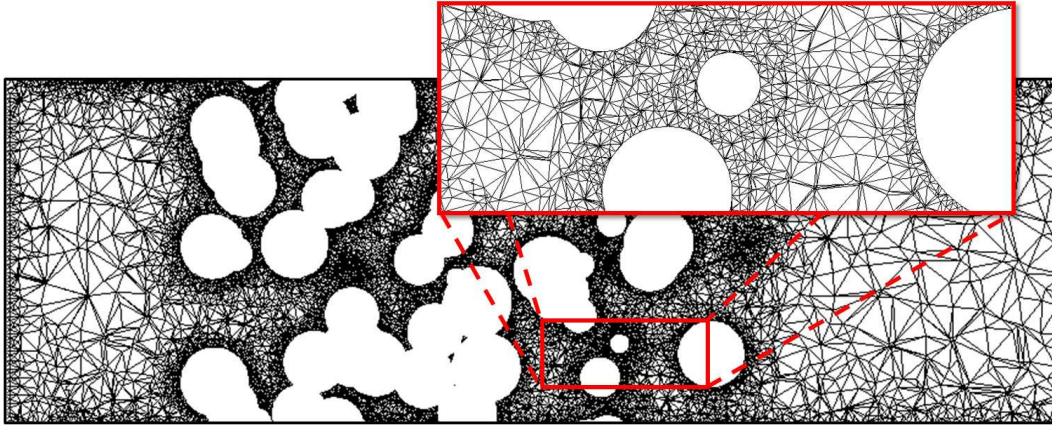


Figura 4.2: Plano de corte longitudinal da discretização do meio poroso confeccionado com o Modelo do Queijo Suíço para uma porosidade $\varepsilon = 0.5$. O pormenor mostra a qualidade do *grid* em regiões próximas das bordas. O número de vértices utilizados na discretização desta amostra é em torno de 6×10^6 .

de 3×10^6 pontos de discretização utilizando o *software* GAMBIT. Esta discretização quando inserida no FLUENT garante um critério de convergência menor que 10^{-7} utilizando uma técnica de diferenças finitas de segunda-ordem com parâmetros de relaxação para a solução das equações de momento linear e continuidade de 0.7.

4.4

Lei de Darcy

Henry Darcy, um engenheiro hidráulico francês, interessado em modos de purificação de água usando filtros de areia, conduziu experimentos para determinar a taxa de escoamento da água através dos filtros. Suas conclusões foram publicadas em 1856 (Bre93) e têm servido como base para todas as análises modernas de escoamento através de meios porosos (And95). Darcy encontrou que se ele usasse diferentes tipos de areia nas colunas, a descarga Q mudava, porém para um tipo de areia específico uma relação simples entre a queda de pressão ao longo do filtro e a descarga poderia ser obtida,

$$Q = -\frac{\kappa A \Delta p}{\mu L}. \quad (4-4)$$

Esta equação expressa a queda de pressão ao longo da coluna de areia em função da descarga. É possível expressar a queda de pressão em termos da velocidade média do fluido no meio $u_0 = \int_A \vec{u} \cdot d\vec{S} \int_A dS = Q/A$:

$$u_0 = -\frac{\kappa \Delta p}{\mu L}, \quad (4-5)$$

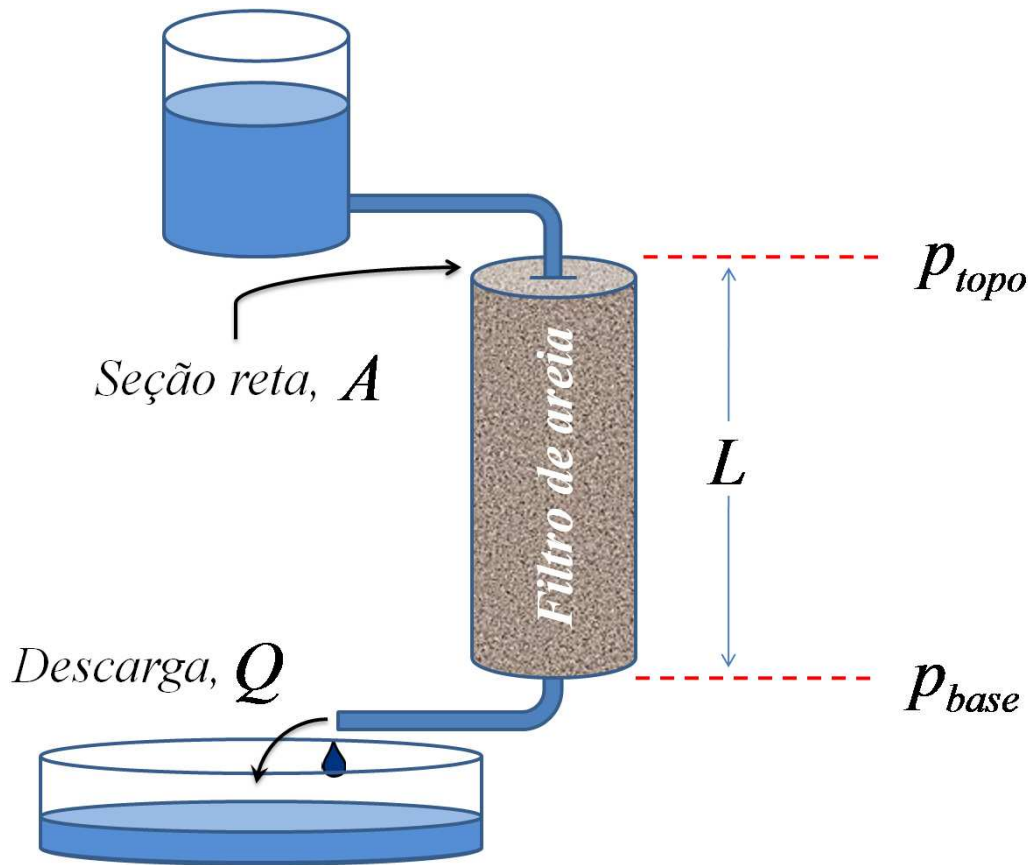


Figura 4.3: Experimento realizado por Henry Darcy para determinação da permeabilidade hidráulica. A água contida no reservatório superior é acelerada para baixo devido a diferença de pressão ocasionada pela gravidade. Ao passar pelo filtro de areia de área de seção reta A e comprimento L , a água sofre uma resistência a sua passagem devido às confluências e divergências do espaço de poros do filtro. A taxa com que a massa d'água deixa o filtro, Q , é medida no reservatório inferior e relacionada com a queda de pressão ao longo do filtro, sua área transversal e a viscosidade da água.

onde κ é a permeabilidade hidráulica. Aqui, a permeabilidade é uma grandeza escalar, isto é, as características de escoamento do fluido pelo meio são as mesmas em todas as direções. Uma vez que muitos meios porosos não são isotrópicos, como por exemplo a madeira, ossos não-trabeculares e rochas prismáticas, uma descrição tensorial da equação de Darcy é necessária para esses materiais (ver Apêndice A). Nesta tese, todos os meios são considerados isotrópicos, uma vez que foram obtidos através do Modelo de Queijo Suíço. A equação 4-5 é amplamente conhecida no meio científico como **Lei de Darcy**.

Embora Darcy tenha observado que a permeabilidade do filtro de areia muda com o tipo de areia com a qual ele foi manufaturado, ele não foi capaz de determinar a dependência da permeabilidade com a porosidade do filtro. Philip C. Carman e Josef Kozeny mostraram que, para escoamento laminares

através de meios porosos isotrópicos, a permeabilidade hidráulica depende da porosidade da seguinte maneira:

$$\kappa_0 = \frac{D_m^2 \Psi^2}{150} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2}, \quad (4-6)$$

onde D_m é o diâmetro médio dos poros da amostra e Ψ é uma quantidade adimensional chamada de **esfericidade**² da amostra. Esta relação foi obtida analiticamente através de um modelo de poros, mas é freqüentemente utilizada para ajustar dados empíricos devido aos graus de liberdade D_m e Ψ . κ_0 é uma constante que representa o valor da permeabilidade hidráulica para baixos valores do número de Reynolds. As equações 4-5 e 4-6 podem ser combinadas numa única equação chamada de **Equação de Carman-Kozeny**:

$$u_0 = - \frac{D_m^2 \Psi^2}{150\mu} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \frac{\Delta p}{L}. \quad (4-7)$$

A equação de Darcy é tão usada em hidrologia que aparenta ser verdadeira para todos os escoamentos através de meios porosos de uma única fase, mas quando os efeitos inerciais começam a ter importância na descrição do escoamento num meio poroso, a permeabilidade definida pela Lei de Darcy 4-5 passa a depender da velocidade média do fluido no meio. A permeabilidade hidráulica do meio cai a medida que os efeitos inerciais vão se tornando mais importantes (And99, Cos99, And07). A equação que descreve este comportamento foi proposta, entre outros, por Philipp Forchheimer e pode ser escrita na seguinte forma:

$$\alpha u_0 + \beta \rho u_0^2 = - \frac{\Delta p}{L}, \quad (4-8)$$

onde α e β são constantes a serem determinadas empiricamente.

A medida que o escoamento atinge números de Reynolds mais altos, a permeabilidade hidráulica assume valores cada vez menores e correções de ordem maior são necessárias à equação 4-8. De fato, quando Re aumenta acima de certo valor a permeabilidade hidráulica aproxima-se assintoticamente de zero, como esperado. Este comportamento é apresentado na figura 4.4, onde o fator de fricção é mostrado em função do número de Reynolds. Da dependência da permeabilidade com a porosidade da amostra através da relação de Carman-Kozeny, é possível incluir esta dependência na equação de Forchheimer, de tal forma que α e β dependem de ε . A partir de determinado valor do número de Reynolds, o escoamento turbulento pode ocorrer dentro do meio e a equação de Forchheimer perde sua validade.

Quando a porosidade da amostra é muito alta, i. e., $\varepsilon \cong 1$, a equação ma-

²A esfericidade é a razão entre a área superficial de uma esfera com mesmo volume da partícula e a área superficial da partícula.

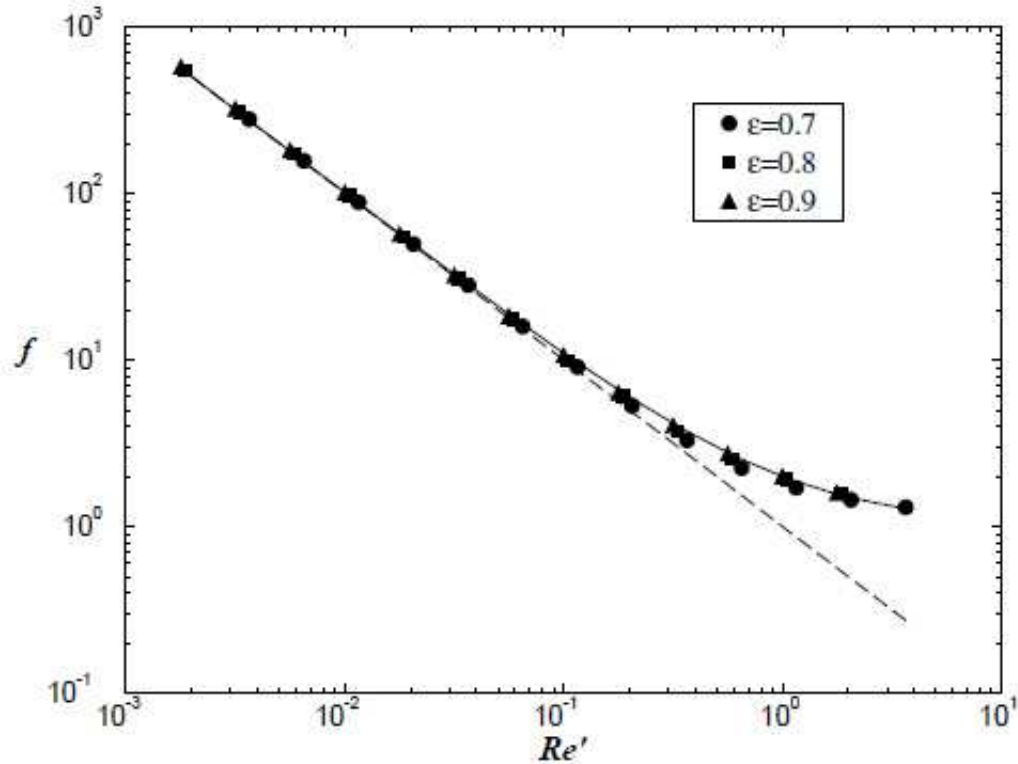


Figura 4.4: Fator de fricção em função do número de Reynolds para escoamentos através de meios porosos com ϵ igual a 0.7, 0.8 e 0.9. Foram realizadas mais de cinco realizações para cada curva de escoamento, onde os parâmetros α e β da equação de Forchheimer foram estimados. As barras de erro são menores que os símbolos. A linha tracejada mostra o comportamento da lei de Darcy: $fRe = C$. Figura retirada de (And99).

croscópica que descreve o comportamento do fluido Newtoniano incompressível é a **equação de Brinkman** (Dur87).

4.5

Fluidos não-Newtonianos

Para fluidos não-Newtonianos a interação entre a geometria do meio e as características particulares do escoamento ainda podem ser macroscopicamente quantificadas em termos da permeabilidade hidráulica, porém com κ sendo definido através de outras relações que levam em conta a reologia do fluido.

4.5.1

Fluidos de lei de potência

Para um fluido de lei de potência a Lei de Darcy modificada é escrita como (Mor09)

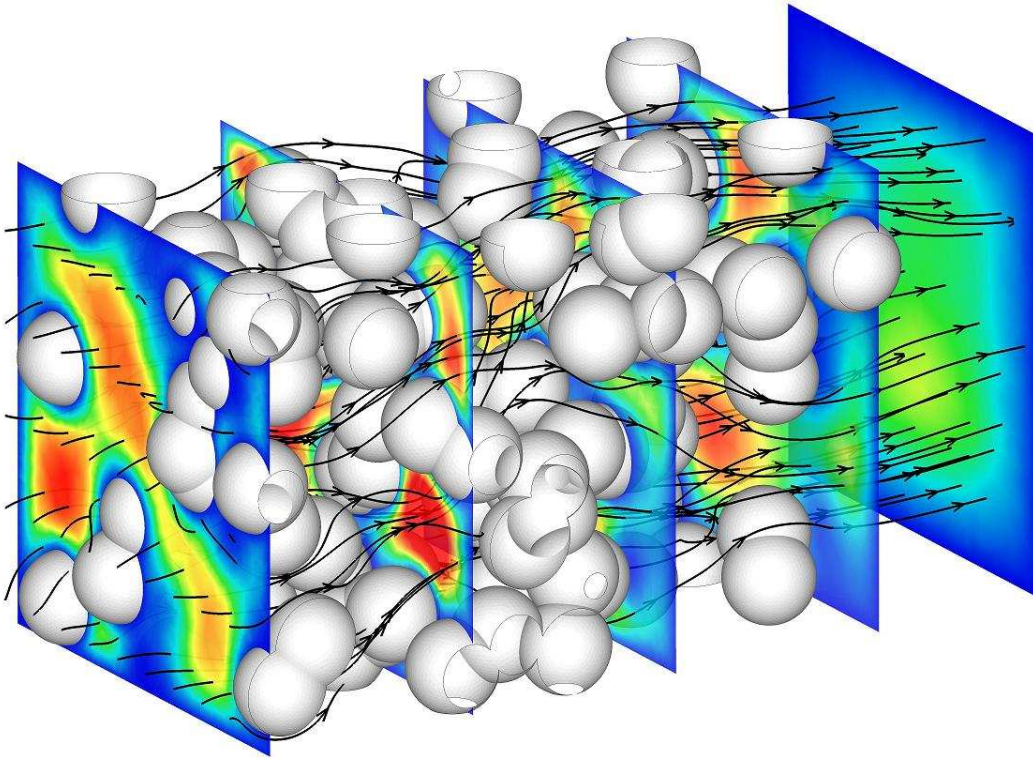


Figura 4.5: Simulação do escoamento de um fluido do tipo lei-de-potência através de uma realização do espaço poroso construído com o Modelo de Queijo Suíço ($\varepsilon = 0.7$). As linhas sólidas com setas correspondem às linhas de correntes no escoamento e os planos com linhas de contorno representam a magnitude da velocidade em cada seção reta do meio poroso. A velocidade cresce do azul para o vermelho.

$$u_0 = -\frac{\kappa}{K} \left(\frac{\Delta p}{L} \right)^{1/n}, \quad (4-9)$$

onde κ é a função de permeabilidade hidráulica e K é o índice de consistência do material. Alguns autores (Bir60, Chr65, Chh07) preferem escrever a relação entre a queda de pressão e a velocidade média do fluido no meio poroso através da equação:

$$u_0^n = -\frac{\kappa_1 \Delta p}{H L}, \quad (4-10)$$

onde H é uma função que depende das propriedades reológicas do fluido e da geometria do meio e κ_1 é a permeabilidade hidráulica deste meio dada pela lei de Darcy para um fluido Newtoniano: equação 4-5. Bird, Stewart e Lightfoot (Bir60) conjecturaram que o meio poroso pudesse ser quantitativamente aproximando por um tubo sinuoso e conseguiram chegar à seguinte expressão:

$$H = 2K \left(\frac{25}{12} \right)^n \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{3^{n+1}}{150} D^{1-n} \varepsilon^{2(n-1)}, \quad (4-11)$$

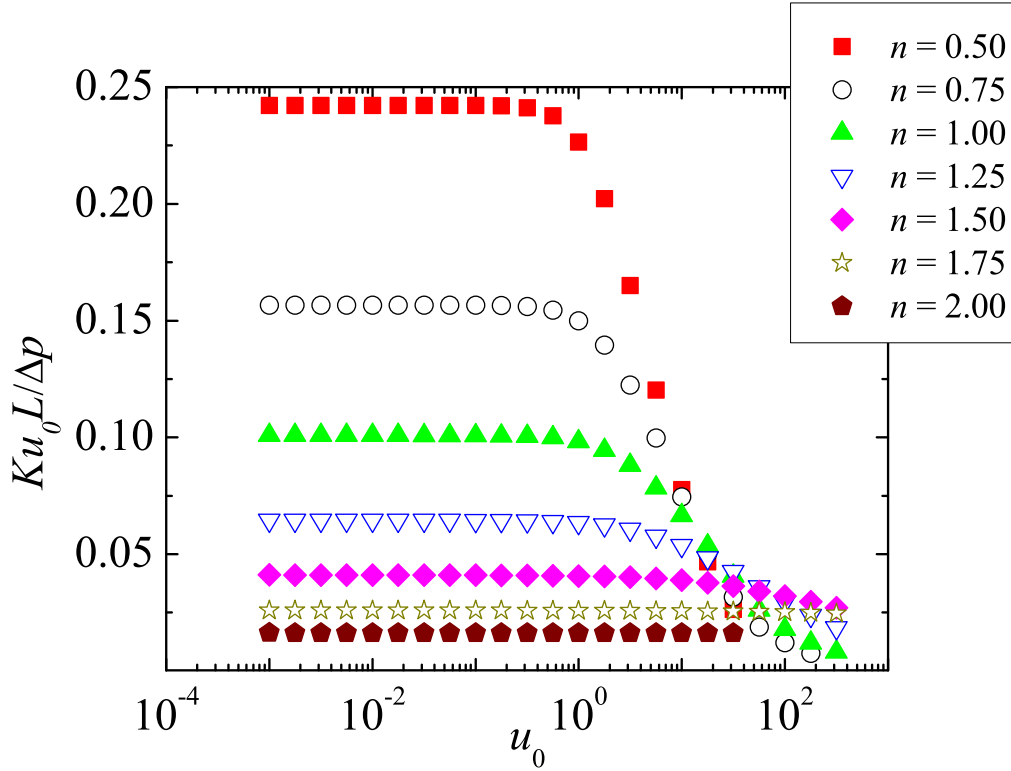


Figura 4.6: Permeabilidade hidráulica clássica ($Ku_0L/\Delta p$) contra o valor da velocidade média na entrada do meio poroso para simulação numérica do escoamento de vários fluidos do tipo de lei-de-potência ($\frac{1}{2} \leq n \leq 2$) num meio construído com o Modelo de Queijo Suíço ($\varepsilon = 0.7$).

onde D é o diâmetro médio do tubo sinuoso. Esta expressão é bastante parecida com a equação de Weissenberg-Rabinowitsch-Mooney para o escoamento capilar de um fluido de lei de potência: equação 2-94. Christopher e Middleman (Chr65) propuseram que a tortuosidade do tubo necessitava ser incluída na função H e conjecturaram que a tortuosidade do meio fosse sempre $25L/12$ para chegar à expressão

$$H = \frac{K}{12} 3^n \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n (150\kappa_1\varepsilon)^{\frac{1-n}{2}}. \quad (4-12)$$

Várias outras equações similares foram propostas para o mesmo propósito como apresentado no artigo (Sav69).

Com base na função H da referência (Bir60) e das equações 4-9 e 4-10, tem-se que o valor de κ para o regime onde a permeabilidade hidráulica é constante por vários valores de u_0 pode ser escrito da seguinte forma

$$\kappa_0(n) \equiv \frac{12}{25} \frac{n (75\kappa_1)^{1/n}}{3n+1} K^{(n-1)/n} \frac{D^{(n-1)/n}}{3^{(n+1)/n}} \varepsilon^{2(1-n)/n}. \quad (4-13)$$

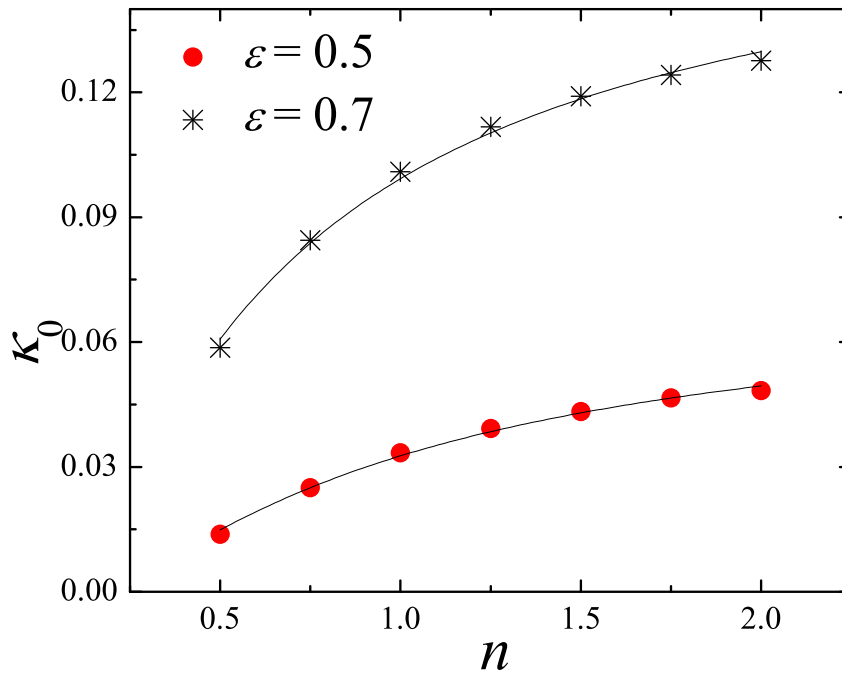


Figura 4.7: Ajuste dos dados do escoamento de fluidos do tipo lei-de-potência através da equação de permeabilidade de Bird, Stewart e Lightfoot, para dois meios com porosidades $\varepsilon = 0.5$ e $\varepsilon = 0.7$. Os parâmetros de ajuste para cada meio poroso foram $D/d_p = 0.35$ ($\varepsilon = 0.5$) e $D/d_p = 1.58$ ($\varepsilon = 0.7$), respectivamente.

A determinação da condição de validade da equação 4-13 para um fluido do tipo lei-de-potência é difícil devido a definição usual do número de Reynolds 2-53 não ser útil para este tipo de fluido, como já foi discutido. Para fluidos Newtonianos, o número de Reynolds depende linearmente da velocidade média de entrada do escoamento, mas da figura 4.6 é possível ver que o comportamento de $Ku_0L/\Delta p$ em relação a u_0 varia de fluido para fluido. A figura 4.6 mostra a existência de *plateaus* para $Ku_0L/\Delta p$ para velocidades muito baixas em cada escoamento, mostrando que há uma região do número de Reynolds em que $Ku_0L/\Delta p$ é constante, e um subsequente decaimento de $Ku_0L/\Delta p$ com o aumento da velocidade. Esta diminuição no valor de $Ku_0L/\Delta p$ é experimentado em pontos diferentes para diferentes valores de n . A redefinição do número de Reynolds pode ser baseada no coeficiente de fricção da equação de Darcy-Weisbach para a queda de pressão devido ao atrito em um tubo (Fox85):

$$\Delta p = f \frac{L}{D} \frac{1}{2} \rho u_m^2, \quad (4-14)$$

onde D é o diâmetro do tubo e L é seu comprimento. Para um meio poroso

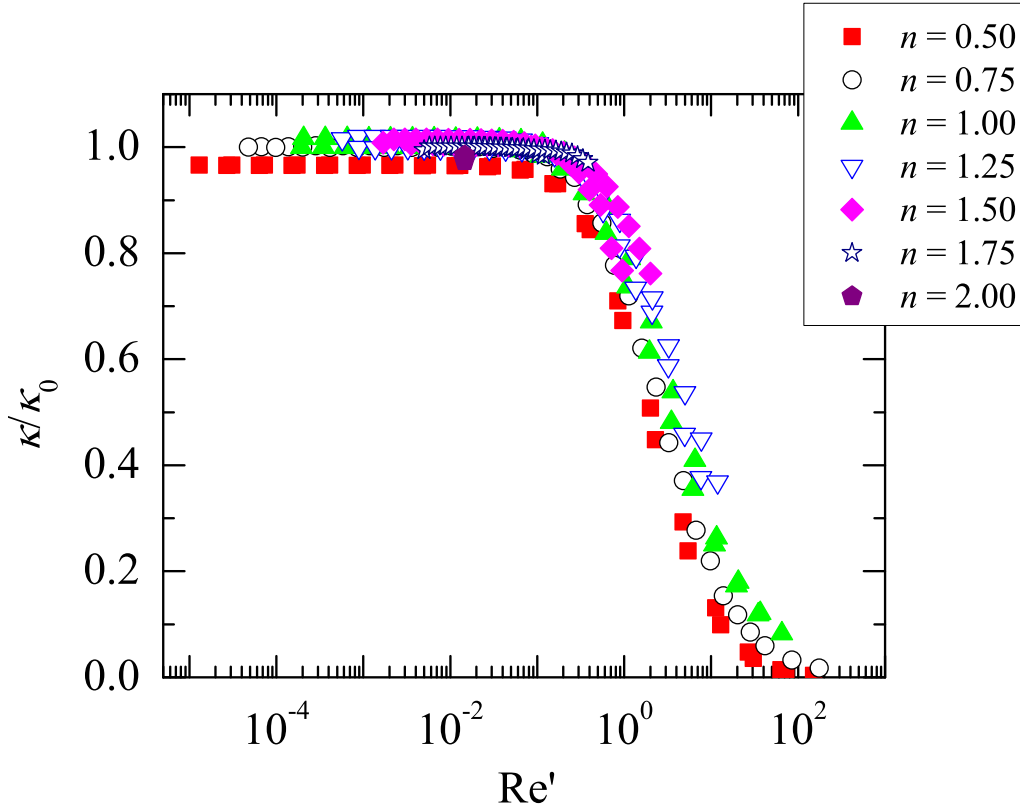


Figura 4.8: Variação da permeabilidade hidráulica normalizada pelo valor da permeabilidade para baixo Reynolds em função do número de Reynolds baseado no coeficiente de fricção para diversos escoamentos de fluidos do tipo de lei-de-potência ($\frac{1}{2} \leq n \leq 2$) através de meios porosos tridimensionais desordenados ($\varepsilon = 0.5$ e $\varepsilon = 0.7$). Na figura interior, a função de permeabilidade de Darcy em função do número de Reynolds usual para um meio de porosidade $\varepsilon = 0.7$.

é comum trocar a velocidade média u_m no tubo por u_0/ε e a razão L/D pela correção da tortuosidade média do meio poroso. Desta maneira, Christopher e Middleman (Chr65) encontraram

$$f = \frac{\Delta p}{L} \frac{D\varepsilon^2}{\frac{1}{2}\rho u_0^2}. \quad (4-15)$$

Uma vez que, para o escoamento Newtoniano viscoso, o produto entre o número de Reynolds e o fator de fricção é constante (ver equação 3-10):

$$fRe = C, \quad (4-16)$$

com C sendo uma constante que depende da morfologia do tubo sinuoso ou do meio poroso, um número de Reynolds para fluidos do tipo lei-de-potência deve apresentar a mesma relação que 3-2, tal que Re' é definido através de

$$Re' = \frac{C}{f} = \frac{\frac{1}{2}\rho u_0^2 C}{D\varepsilon^2} \frac{L}{\Delta p}. \quad (4-17)$$

Porém a relação entre o gradiente de pressão e a velocidade do fluido é encontrada na equação 4-9, tal que o número de Reynolds modificado pode ser escrito explicitamente como

$$\text{Re}' = \frac{C\rho u_0^2 k^n}{2D\varepsilon^2 u_0^n K^n} = \frac{C\rho u_0^{2-n} k^n}{2D\varepsilon^2 K^n} \quad (4-18)$$

Na figura 4.8 são mostradas as curvas da simulação numérica de vários fluidos do tipo lei-de-potência ($\frac{1}{2} \leq n \leq 2$) na forma da permeabilidade hidráulica modificada (equação 4-9) normalizada pela equação 4-13 *versus* o número de Reynolds modificado (equação 4-18) para dois meios porosos construídos com o Modelo de Queijo Suíço com porosidades $\varepsilon = 0.5$ e $\varepsilon = 0.7$. A forma das curvas na figura 4.8 são semelhantes àquela da figura 4.4, evidenciando que a equação 4-9 normalizada pelo valor da permeabilidade hidráulica de escoamentos de fluidos do tipo lei-de-potência para um tubo sinuoso (equação 4-13) serve para descrever a permeabilidade hidráulica de tais fluidos num meio poroso, e, a redefinição do número de Reynolds 4-18 descreve o comportamento de κ eficientemente. Os efeitos inerciais parecem tomar importância com a diminuição da permeabilidade hidráulica na descrição destes escoamentos quando Re' se aproxima da unidade, assim como no caso Newtoniano. A equação 4-13 pode ser utilizada para modelar um escoamento de lei de potência através de um meio poroso tão complexo e irregular quanto o construído com o Modelo de Queijo Suíço (ver figura 4.5).

4.5.2

Fluidos de Herschel-Bulkley

O fluido de Bingham pode ter sua reologia aproximada pelo Modelo de Herschel-Bulkley com índice de lei de potência unitário, como já discutido no capítulo 2. A maneira usual de contabilizar a contribuição das forças viscosas e inerciais é utilizar a definição do número de Reynolds usual, apenas substituindo a viscosidade molecular constante, μ , pelo valor de K_{HB} : $\text{Re} = \rho u_0 L / K_{HB}$. Um outro número importante para este tipo de escoamento é aquele que mede a relação entre a tensão cortante no fluido e o limiar de tensão: $B \equiv K_{HB} u_0 / \tau_0 D$, onde D é o diâmetro médio do meio poroso. Na figura 4.9 é mostrada a permeabilidade hidráulica, $\kappa_{HB} \equiv K_{HB} u_0 L / \Delta p$, em função de Re (a) e em função de B (b) para três fluidos de Bingham com limiares de tensão diferentes. Da figura 4.9, é possível perceber que κ_{HB} permanece constante até um determinado ponto crítico onde a permeabilidade apresenta uma mudança de comportamento. Antes deste ponto, o fluido inteiro apresenta viscosidade μ_0 e é semelhante a qualquer outro fluido Newtoniano com mesma viscosidade. O aumento da permeabilidade ocorre quando a tensão de cisalhamento em

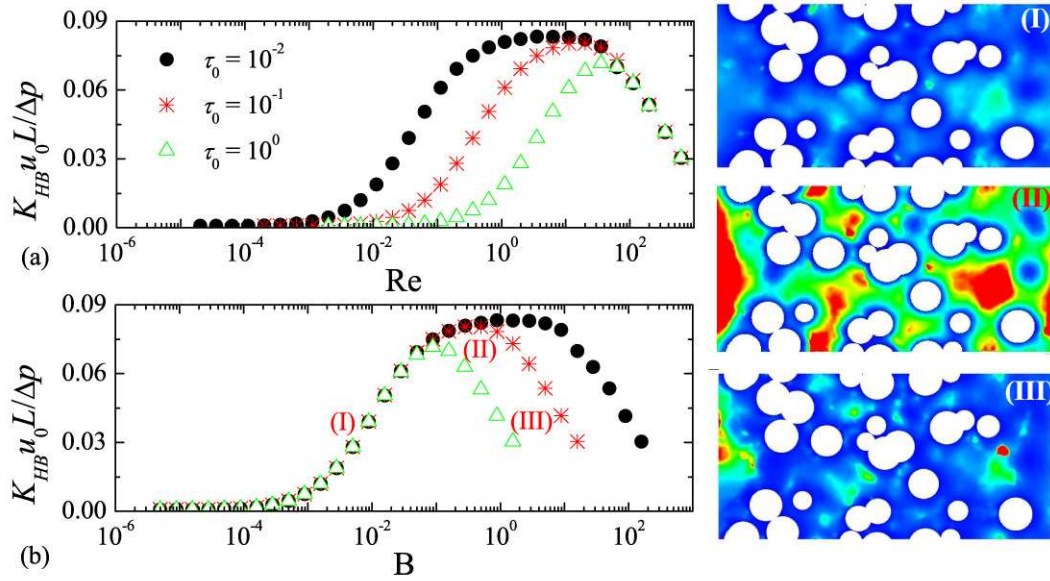


Figura 4.9: Permeabilidade hidráulica em função do número de Reynolds, em (a), e, em função do número de Bingham, em (b), para a simulação numérica do escoamento de três fluidos de Bingham diferentes ($\tau_0 = 0.01$, $\tau_0 = 0.1$ e $\tau_0 = 1$). Para a curva do fluido em que $\tau_0 = 0.1$, em (b), são apontados três pontos: I ($B \approx 10^{-2}$), II ($B \approx 0.56$) e III ($B \approx 10$). Os pontos (I) e (III) apresentam aproximadamente a mesma permeabilidade hidráulica e o ponto (II) é um ponto cuja permeabilidade é máxima. As figuras (I), (II) e (III) do lado direito dos gráficos (a) e (b) mostram a magnitude da *permeabilidade local* ($\kappa_\ell \equiv K_{HB}u/|\nabla p|$) em cada ponto de um corte no plano x-z (κ_ℓ cresce do azul para o vermelho). Aqui $L/d_p = 20$, $\varepsilon = 0.7$ e $\mu_0/K_{HB} = 10^2$.

algumas paredes do meio poroso, τ , é maior que o limiar de tensão, τ_0 , tal que a viscosidade do fluido nas proximidades destas paredes passa a ser menor que μ_0 . Um escoamento misto toma lugar no meio poroso e o limiar para este regime não é bem delimitado devido a variabilidade de diâmetro dos poros do meio. Este comportamento pode ser aproximado pela equação 2-100. Quando B se aproxima da unidade, a maior parcela do fluido no meio poroso apresenta viscosidade K_{HB} , entretanto, nesta região de B, o número de Reynolds ($Re \sim 1$) mostra que os efeitos inerciais começam a apresentar relevância para o problema. Há, então, uma competição entre a mudança na viscosidade molecular do fluido, que tende a aumentar a permeabilidade hidráulica, e os efeitos inerciais, que tendem a diminuir a permeabilidade. De fato, os efeitos inerciais contribuem para taxas de deformação efetivas do fluido cada vez maiores, o que leva a viscosidade a diminuir.

A competição entre os efeitos inerciais e a mudança na viscosidade leva a um ponto de máxima na permeabilidade. A partir deste ponto, o aumento na viscosidade não é mais suficiente para aumentar a permeabilidade, isto

acontece, por conta da maior parcela do fluido apresentar viscosidade K_{HB} . A partir daí, todas as curvas colapsam para o mesmo valor no número de Reynolds, evidenciando que os fluidos podem ser entendidos como Newtonianos com viscosidade K_{HB} . O valor máximo de κ_{HB} em relação ao seu valor no regime em que $\tau < \tau_0$ depende dos valores de μ_0 e K_{HB} . As figuras 4.9 I, II e III, mostram a magnitude da *permeabilidade local*, $\kappa_\ell \equiv K_{HB}u/|\nabla p|$, em cada célula de simulação compondo o meio poroso numa região de um corte no plano x-z para três pontos proveniente da curva de κ_{HB} contra B (figura 4.9-(b)) para o escoamento do fluido em que $\tau_0 = 0.1$. Nos pontos I e III a permeabilidade hidráulica é aproximadamente a mesma (~ 0.04), embora a permeabilidade local seja ligeiramente diferente. Este comportamento do fluido de Bingham, pode ter aplicações potenciais em vários campos práticos como chaves de escoamento, reatores químicos, etc.

5

Conclusões e Perspectivas

Um modelo computacional foi desenvolvido para descrever processos de erosão causados pelo escoamento laminar com o arrasto sobre os grãos dado pela Lei de Stokes. Os resultados obtidos mostraram a formação de padrões típicos de erosão caracterizados por estruturas ramificadas muito semelhantes aos padrões obtidos em experimentos na literatura. Foi possível determinar as direções preferenciais destas ramificações que compõem as estruturas resultantes do modelo. Ainda, o modelo foi capaz de reproduzir os padrões reais que podem ser vistos na referência (Ert02).

Para uma ampla faixa de valores da porosidade, os padrões obtidos estão em boa concordância com os padrões de erosão naturais e aqueles realizados em experimentos. Alguns trabalhos (Bax89, Rey01, Gen01) mostraram que o tamanho e a forma dos grãos influenciam dramaticamente a propagação do fluido entre os grãos no sistema. Além do mais, já foi mostrado experimentalmente que os padrões devem depender da inclinação do plano no qual acontece o escoamento, o que no modelo foi considerada pela pressão de entrada somente. A maneira pela qual a forma dos grãos afeta o escoamento é uma questão que pode ser respondida usando a fórmula de Corey (Sch54), em uma primeira aproximação.

Uma outra questão importante diz respeito ao número de Reynolds do escoamento. Neste trabalho, foi considerado apenas o escoamento laminar e a variação de um parâmetro, a porosidade. Mudar a forma da dependência da velocidade na lei de arrasto pode reproduzir aspectos do escoamento turbulento e pode ter um comportamento tal que novos padrões possam ser observados.

Numa segunda etapa do trabalho, um novo tipo de separador de partículas inercial foi apresentado, o qual pode ser usado para separar partículas de diferentes números de Stokes sem requerer o auxílio de campos externos. O separador consiste de uma estrutura ramificada semelhante à estrutura de um pulmão humano, através da qual partículas em suspensão são transportadas por um escoamento laminar. As partículas são separadas nas bifurcações da estrutura de acordo com a sua inércia. Foi investigado, através de simulações tridimensionais, como a eficiência da separação é controlada pelos

principais parâmetros da geometria da estrutura: a razão entre os diâmetros dos tubos pais e tubos filhos, h , assim como os ângulos de ramificação α e azimutal ϕ . Com o auxílio dos resultados apresentados nas figuras 3.10, 3.12 e 3.13, é possível ajustar os parâmetros da geometria a fim de controlar o número de Stokes máximo, St_C , tanto quanto a eficiência da separação. As simulações mostraram que o valor de St_C é fortemente dependente do parâmetro h . Isto sugere que para aplicações práticas, h deve ser o primeiro parâmetro geométrico a ser ajustado.

Por último, foram realizadas simulações do escoamento de fluidos não-Newtonianos através de meios porosos desordenados em três dimensões. Para fluidos do tipo lei-de-potência ($\frac{1}{2} \leq n \leq 2$), mesmo a natureza não-linear da reologia do fluido e a geometria complexa do volume de poros intersticiais (ver figura 4.5), foi possível mostrar o fato notável de que o comportamento do escoamento ainda pode ser quantificado em termos de uma única curva universal, que se estende por um amplo espectro de valores do número de Reynolds e dos valores dos expoentes n .

Os resultados para os fluidos de Bingham são ainda mais impressionantes. Neste caso, a geometria do espaço de poros, a reologia do fluido e os efeitos inerciais podem ser combinados para gerar uma condição particular de *transporte facilitado*, o que pode ser encontrado em experimentos. As aplicações potenciais desta condição de escoamento seriam dispositivos como chaves de escoamento puramente mecânicas, controladores de fluxo e reatores químicos.

Referências Bibliográficas

- [Ald92] ADLER, P.. **Porous media: geometry and transports.** Butterworth-Heinemann, London, 1992. 1
- [And95] ANDRADE, J. S.; STREET, D. A.; SHINOHARA, T.; SHIBUSA, Y. ; ARAI, Y.. **Percolation disorder in viscous and nonviscous flow through porous media.** Phys. Rev. E, 51(6):5725–5731, Jun 1995. 4.4
- [And99] ANDRADE, J. S.; COSTA, U. M. S.; ALMEIDA, M. P.; MAKSE, H. A. ; STANLEY, H. E.. **Inertial effects on fluid flow through disordered porous media.** Phys. Rev. Lett., 82(26):5249–5252, Jun 1999. (document), 4.4, 4.4
- [And07] ANDRADE, J. S.; ARAÚJO, A. D.; FILOCHE, M. ; SAPOVAL, B.. **Screening effects in flow through rough channels.** Phys. Rev. Lett., 98(19):194101, May 2007. 4.4
- [Ara06] ARAÚJO, A. D.; ANDRADE, J. S. ; HERRMANN, H. J.. **Critical role of gravity in filters.** Phys. Rev. Lett., 97(13):138001, Sep 2006. 1
- [Bak97] S. BAKKE, P.-E. R.. **3-d pore-scale modelling of sandstones and flow simulations in the pore networks.** SPE J., 16(1):136–149, 1997. 4.3.2
- [Bar76] BARKER, J. A.; HENDERSON, D.. **What is "liquid"? understanding the states of matter.** Rev. Mod. Phys., 48(4):587–671, Oct 1976. 1
- [Bat00] BATCHELOR, G. K.. **An introduction to Fluid Dynamics.** Cambridge University Press, Cambridge, 2000. 2.4, 3.1
- [Bax89] BAXTER, G. W.; BEHRINGER, R. P.; FAGERT, T. ; JOHNSON, G. A.. **Pattern formation in flowing sand.** Phys. Rev. Lett., 62(24):2825–2828, Jun 1989. 5
- [Bea72] BEAR, J.. **Dynamics of Fluids in Porous Media.** American Elsevier Publishing Co. Inc., New York, 1972. 1

- [Bin22] BINGHAM, E. C.. **Fluidity and Plasticity**. McGraw-Hill, New York, 1922. 2.5.3
- [Bir60] BIRD, R.; STEWART, W. ; LIGHTFOOT, E. N.. **Transport Phenomena**. John Wiley & Sons, New York, 1960. 4.5.1, 4.5.1, 4.5.1, A, C.2
- [Bog74] BOGARDI, J.. **Sediment transport in alluvial streams**. AKADEMIA KIADO, Budapest, 1974. 3.3.1
- [Bor94] ANDN W. DE PARIS, M. B.; PEIKERT, R.. **The fractal dimension of the apollonian sphere packing**. *Fractals*, (4):521–526, 1994. 4.3.1
- [Bor05] BÖRZSÖNYI, T.; HALSEY, T. C. ; ECKE, R. E.. **Two scenarios for avalanche dynamics in inclined granular layers**. *Phys. Rev. Lett.*, 94(20):208001, May 2005. 3.3.1
- [Boy06] BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas De Valores De Contorno**. LTC, Rio de Janeiro, 2006. 2.6.1
- [Bre93] BRENNER, H.; EDWARDS, D. A.. **Macrotransport Processes**. Butterworth-Heinemann, Boston, 1993. 4.4
- [Bro67] BRODKEY, R. S.. **The phenomena of fluid motions**. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1967. 1, 2.5.2, 11, 3.1, A
- [Bur05] BURGERA, E.; XU, H. ; WEIR, M.. **Injectable and rapid-setting calcium phosphate bone cement with dicalcium phosphate dihydrate**. *J. Biomedical Materials Research B.*, 77, 2005. (document), 1.1, 1
- [Cam05] B. CAMASSEL, N. SGHAIER, M. P. S. B.-N.. **Evaporation in a capillary tube of square cross-section: application to ion transport**. *Chem Eng Sci.*, 60(1):815–826, 2005. 4.3.2
- [Car98] CAFLISCH, R. E.. **Monte carlo and quasi-monte carlo methods**. *Acta Numerica*, 7(1):1–49, 1998. 4.3.3
- [Cha77] I. CHATZIS, F. A. L. D.. **Modelling pore structures by 2-d and 3-d networks with application to sandstones**. *Can. J. Petrol. Tech.*, 16(1):97–108, 1977. 4.3.2
- [Chh07] CHHABRA, R. P.. **Bubbles, drops and particles in non-Newtonian fluids**. Taylor, Berkeley, 2007. (document), 1, 2.9, 4.5.1

- [Cho00] A. J. CHORIN, J. E. M.. **A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics**. Springer, New York, 2000. 3.1
- [Chr65] CHRISTOPHER, R. H.; MIDDLEMAN, S.. **Power-law flow through a packed tube**. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 4(4):422–426, 1965. 4.5.1, 4.5.1, 4.5.1
- [Cop03] COPPENS, M.-O.; VAN OMMEN, J. R.. **Structuring chaotic fluidized beds**. *Chem. Eng. J.*, 96(1):117–124, 2003. 3.2
- [Cos99] COSTA, U. M. S.; ANDRADE, J. S.; MAKSE, H. A. ; STANLEY, H. E.. **The role of inertia on fluid flow through disordered porous media**. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 266(1-4):420 – 424, 1999. 4.4
- [Dae03] DAERR, A.; LEE, P.; LANUZA, J. ; CLÉMENT, E.. **Erosion patterns in a sediment layer**. *Phys. Rev. E*, 67(6):065201, Jun 2003. 3.3.2
- [Dan86] DANIELSON, R. E.; SUTHERLAND, P. L.. **Porosity**. SSSA, Madison, 1986. 4.2
- [Dec07] DECKER, M.; HALBACH, C.; NAM, C.; WAGNER, N. ; WETZEL, E.. **Stab resistance of shear thickening fluid (stf)-treated fabrics**. *Composites Science and Technology*, 67(3–4):565–578, 2007. 1
- [DiC08] CARLO, D. D.; EDD, J. F.; IRIMIA, D.; TOMPKINS, R. G. ; TONER, M.. **Equilibrium separation and filtration of particles using differential inertial focusing**. *Anal. Chem.*, 80(1):2204–2211, 2008. 3.2
- [DiM70] MARZIO, E. A. D.; GUTTMAN, C. M.. **Separation by flow**. *Macromolecules*, 3(1):131–146, 1970. 1, 3.2
- [Dol97] DOLEJ, V.; MIKULASEK, P.. **Creeping flow of generalized newtonian fluid through a fixed and a fluidized bed of spherical particles**. *Chem. Eng. Process.*, 36(2):111–117, 1997. 2.5.6
- [Dul92] DULLIEN, F. A. L.. **Porous Media, Fluid Transport and Pore Structure**. Academic, Londres, 1992. 1
- [Dur87] DURLOFSKY, L.; BRADY, J. F.. **Analysis of the brinkman equation as a model for flow in porous media**. *Phys. Fluids*, 30:3329, 1987. 4.4

- [Egr92] EGRISE, D.; MARTIN, D.; NEVE, P.; VIENNE, A.; VERHAS, M. ; SCHOUTENS, A.. **Bone blood flow and in vitro proliferation of bone marrow and trabecular bone osteoblast-like cells in ovariectomized rats.** *Calcified Tissue International*, 50(4):336–341, 1992. 1
- [Elg01] ELGAR, S.; GALLAGHER, E. L. ; GUZA, R. T.. **nearshore sandbar migration.** *J. Geophysical Res.*, 106(11):623–627, 2001. 3.3.1
- [Ert02] ERTAS, D.; HALSEY, T. C.. **Granular gravitational collapse and chute flow.** *EPL (Europhysics Letters)*, 60(6):931, 2002. 3.3.1, 5
- [Fat63] FATT, I.. **The network model of porous media.** *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 207(1):144–177, 1963. 4.3.2
- [Fer99] FERZIGER, J. H.; PERIC, M.. **Computational Methods for Fluid Dynamics.** Springer, Berlin, 1999. 2.6, 2.6
- [For60] G. E. FORSYTHE, W. R. W.. **Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations.** Dover, Boston, 1960. 2.6.1
- [For03] FORTUNA, A. O.. **Técnicas computacionais para Dinâmica dos Fluidos.** Edusp, São Paulo, 2003. 2.6, 2.6.2
- [Fox85] FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.. **Introduction to Fluid Mechanics.** Wiley & Sons, New York, 1985. 2.2, 2.5, 3.1, 4.5.1
- [Fra04] FRAUNHOFER, W.; WINTER, G.. **The use of asymmetrical flow field-flow fractionation in pharmaceutical sand biopharmaceutics.** *European J. Pharmceutics and Biopharmaceutic*, 58(1):369–383, 2004. 3.2
- [Fre92] FREDSE, J.; DEIGAARD, R.. **Mechanics of Coastal Sediment Transport.** World Scientific, Boston, 1992. 3.1.1
- [Gen01] GENG, J.; HOWELL, D.; LONGHI, E.; BEHRINGER, R. P.; REYDELLET, G.; VANEL, L.; CLÉMENT, E. ; LUDING, S.. **Footprints in sand: The response of a granular material to local perturbations.** *Phys. Rev. Lett.*, 87(3):035506, Jul 2001. 5
- [Gia97] GIASSON, S.; ISRAELACHVILI, J. ; YOSHIZAWA, H.. **Thin film morphology and tribology study of mayonnaise.** *J. Food Sci.*, 62(4):640–652, 1997. 1

- [Gid68] GIDDINGS, J. C.; KUCERA, E.; RUSSELL, C. P. ; MYERS, M. N.. **Statistical theory for the equilibrium distribution of rigid molecules in inert porous networks. exclusion chromatography.** The Journal of Physical Chemistry, 72(13):4397–4408, 1968. 1
- [Gim03] GIMBERT, L. J.; ANDREW, K. N.; HAYGARTH, P. M. ; WORSFOLD, P. J.. **Enviromental applications of flow field-flow fractionation(ffiff).** Trends Anal. Chem., 22(1):615–633, 2003. 3.2
- [Gla07] GLANTZ, R.; HILPERT, M.. **Dual models of pore spaces.** Adv. Water Resour., 30(2):227–248, 2007. 4.2
- [Gol29] GOLDSTEIN, S.. **The steady flow of viscous fluid past a fixed spherical obstacle at small reynolds numbers.** Proc. Roy. Soc. London, 123(A):1–30, 1929. 3.1
- [Gra07] GRAEBLE, W. P.. **Advanced Fluid Mechanics.** Academic Press, New York, 2007. (document), 2.1, 3.1, 3.1, 3.1
- [Hag39] HAGEN, G.. **On the motion of water in narrow cylindrical tubes.** Pogg. Ann., 46:423–440, 1839. 2.4
- [Hai89] HAIDER, A.; LEVENSPIEL, O.. **Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles.** Powder Technology, 58(10):63–70, 1989. 3.1.1
- [Hal85] HALPERIN, B. I.; FENG, S. ; SEN, P. N.. **Differences between lattice and continuum percolation transport exponents.** Phys. Rev. Lett., 54(22):2391–2394, Jun 1985. 4.3.3
- [Her26] HERSCHEL, W. H.; BULKLEY, R.. **Konsistenzmessungen von gummi benzolloesungen.** Kolloid Zeitschrift, 39(1):291–300, 1926. 2.5.3
- [Hil03] M. HILPERT, C. T. MILLER, W. G. G.. **Stability of a fluid-fluid interface in a biconical pore segment.** J. Colloid Interface Science, 267(1):397–407, 2003. 4.3.2
- [Hua04] HUANG, L. R.; COX, E. C.; AUSTIN, R. H. ; STURM, J. C.. **Continuous particle separation through deterministic lateral displacement.** Science, 304(1):987–990, 2004. 3.2, 3.2.1
- [Hun09] HUNT, A.; ERWING, R.. **Percolation theory for flow in porous media.** Springer, New York, 2009. 4.2

- [Jad95] JADHUNANDAN, P.; MORROW, N.. **Effect of wettability on waterflood recovery for crude-oil/brine/rock systems.** *J. Food Sci.*, 10(1):40–46, 1995. 1, 1
- [Jae96] JAEGER, H. M.; NAGEL, S. R. ; BEHRINGER, R. P.. **Granular solids, liquids, and gases.** *Rev. Mod. Phys.*, 68(4):1259–1273, Oct 1996. 1
- [Jon90] JONES, R. T.. **Wing Theory.** Cloth, Princeton, 1990. 3.1
- [Kap57] KAPLUN, S.. **Low reynolds number flow past a circular cylinder.** *Z. Angew. Math. Phys.*, 5:595–603, 1957. 3.1
- [Kar04] KÁRMÁN, T. V.. **Aerodynamics.** Dover, New York, 2004. 4
- [Kin05] KINNEY, J.; STÖLKEN, J.; SMITH, T.; J.RYABY ; N.LANE. **An orientation distribution function for trabecular bone.** *Bone*, 36(2):193–201, 2005. 1
- [Kna01] KNACKSTEDT, M. A.; SHEPPARD, A. P. ; SAHIMI, M.. **Pore network modelling of two-phase flow in porous rock: the effect of correlated heterogeneity.** *Adv. Water Res.*, 24(1):257–277, 1997. 4.3.2
- [Knu52] KNUDSEN, M.. **Kinetic theory of gases.** Methuen Monographs on Physical Subjects, 1, 1952. 3.2.1
- [Kon09] KONAN, N.; KANNENGIESER, O. ; SIMONIN, O.. **Stochastic modeling of the multiple rebound effects for particle-rough wall collisions.** *International Journal of Multiphase Flow*, 35(10):933 – 945, 2009. 3.2.1
- [Kop97] KOPONEN, A.; KATAJA, M. ; TIMONEN, J.. **Permeability and effective porosity of porous media.** *Phys. Rev. E*, 56(3):3319–3325, Sep 1997. 3.3.2
- [Kro02] KROY, K.; SAUERMAN, G. ; HERRMANN, H. J.. **Minimal model for sand dunes.** *Phys. Rev. Lett.*, 88(5):054301, Jan 2002. 3.3.1
- [Lag01] LAGO, M.; ARAÚJO, M.. **Threshold pressure in capillaries with polygonal crosssection.** *J. Colloid Interface Sci.*, 243(1):219–226, 2001. 4.3.2
- [Lam09] LAMMER, H.; ROSENKRANZ, H.; KOTZE, J. ; SCHWENGER, R.. **System and method of using shear thickening materials in sports products,** July 2009. 1

- [Leg96] LEGRET, M.; COLANDINI, V. ; MARC, C. L.. **Effects of a porous pavement with reservoir structure on the quality of runoff water and soil.** *Science of The Total Environment*, 189-190:335 – 340, 1996. Highway and Urban Pollution. 1
- [Leo95] LEOPOLD, L. B.; WOLMAN, M. G. ; MILLER, J. P.. **Fluvial processes in geomorphology.** Dover, New York, 1995. 3.3.1
- [Lew97] LEWIS, G.. **Properties of acrylic bone cement: State of the art review.** *J. of Applied Biomaterials*, 38(2):155–182, 1997. 1
- [Lin06] LINDQUIST, W. B.. **The geometry of primary drainage.** *J. Colloid Interface Science*, 296(1):655–668, 2006. 4.3.2
- [Lor01] LORENZ, C. D.; ZIK, R. M.. *J. Chem. Phys.*, 114(1):3659, 2001. 4.3.3
- [Lue97] LUENGO, G.; TSUCHIYA, M.; HEUBERGER, M. ; ISRAELACHVILI, J.. **Thin film rheology and tribology of chocolate.** *J. Food Sci.*, 62(4):767–812, 1997. 1
- [Mai08] MAIONCHI, D. O.; MORAIS, A. F.; COSTA FILHO, R. N.; ANDRADE, J. S. ; HERRMANN, H. J.. **Model for erosion-deposition patterns.** *Phys. Rev. E*, 77(6):061402, Jun 2008. (document), 1, D.1, D.2, D.3, D.4, D.5, D.6
- [Mar55] MARON, S. H.. *J. Colloid Sci.*, 10(1):1–18, 1955. 2.5.3
- [Mar96] MARSHALL, T. J.; HOLMES, J. W. ; ROSE, C. W.. **Soil physics.** Cambridge University Press, Boston, 1996. 4.2
- [Mau03] MAUROY, B.; FILOCHE, M.; ANDRADE, J. S. ; SAPOVAL, B.. **Interplay between geometry and flow distribution in an airway tree.** *Phys. Rev. Lett.*, 90(14):148101, Apr 2003. 3.2
- [Mer69] MERRIL, E. W.. **Rheology of blood.** *Physiological Reviews*, 49(4):863–888, 1969. 1
- [Mon07] MONIN, A. S.; YAGLOM, A. M.. **Statistical Fluid Mechanics.** Dover, Cambridge, 2007. 2.3.1, 2.3.1, 3.1
- [Mor72] MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J.. **An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems.** *J. Fluid Mech.*, 55(1):193, 1972. 3.1

- [Mor09] MORAIS, A. F.; SEYBOLD, H.; HERRMANN, H. J. ; ANDRADE, J. S.. **Non-newtonian fluid flow through three-dimensional disordered porous media**. *Phys. Rev. Lett.*, 103(19):194502, Nov 2009. (document), 1, 4, 4.5.1, D.14, D.15, D.16, D.17
- [Old58] OLDROYD, J. G.. **Non-newtonian effects in steady motion of some idealized elastico-viscous liquids**. *Proc. Roy. Soc.*, 245, 1958. A
- [Ose10] OSEEN, C. W.. **Über die stokesche formel und über eine verwandte aufgabe in der hydrodynamik**. *Ark. Mat. Astron. Fys*, 6(29), 1910. 3.1
- [Ost24] OSTWALD, W.. *Z. Physik. Chem.*, 111, 1924. 2.5.3
- [Pam07] PAMME, N.. **Continuous flow separation in microfluidic devices**. *Lab on a Chip*, 7:1644–1659, 2007. 3.2.1
- [Par87] PARK, S. J.; KWAK, T. Y. ; MANSOORI, G. A.. **Statistical mechanical description of supercritical fluid extraction and retrograde condensation**. *International Journal of Thermophysics*, 8(4):449–471, 1987. 1
- [Poi40] POISEUILLE, J. L. M.. **Recherches experimentelles tubes de tris petits diameters**. *Comptes Rendus*, 1840. 2.4
- [Pou99] POULIQUEN, O.. **Scaling laws in granular flows down rough inclined planes**. *Physics of Fluids*, 11(3):542–548, 1999. 3.3.1
- [Pro57] PROUDMAN, I.; PEARSON, J. R. A.. **Expansions at small reynolds numbers for the flow past a sphere and circular cylinder**. *J. Fluid Mech.*, 2:237–262, 1957. 3.1
- [Rao07] RAO, M. A.. **Rheology of fluid and semisolid foods: principles and applications**. Springer, London, 2007. 1
- [Rei56] REINER, M.. **Rheology**. Academic Press, New York, 1956. A
- [Rey83] REYNOLDS, O.. **An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistence in parallel channels**. *Phil. Tans. Roy. Soc. London*, 174(1):935–982, 1883. 2.3.1

- [Rey85] REYNOLDS, O.. **On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact, with experimental illustrations.** *Phil. Mag.*, 20, 1885. 2.5.4
- [Rey01] REYDELLET, G.; CLÉMENT, E.. **Green's function probe of a static granular piling.** *Phys. Rev. Lett.*, 86(15):3308–3311, Apr 2001. 5
- [Riv47] RIVLIN, R. S.. **Hydrodynamics of non-newtonian fluids.** *Nature*, 160(611), 1947. A
- [Rus96] RUST, I. C.; ILLENBERGER, W. K.. **Landscape and Urban Planning.** Elsevier, Boston, 1996. 3.3.1
- [Sah95] SAHIMI, M.. **Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock from Classical Methods to Modern Approaches.** Wiley VCH Weinheim, Alemanha, 1995. 1, 3.2
- [San07] SANKAR, D.; HEMALATHA, K.. **A non-newtonian fluid flow model for blood flow through a catheterized artery—steady flow.** *Applied Mathematical Modelling*, 31(9):1847 – 1864, 2007. 1
- [Sas87] MIYAZIMA, S.. **Percolation transport exponents in a generalized swiss-cheese model and a generalized inverted swiss-cheese model for a conductive substance.** *Journal of the Physical Society of Japan*, 56(4):1268–1270, 1987. 4.3.3
- [Sav69] SAVINS, J. G.. **Non-newtonian flow through porous media.** *Ind. Eng. Chem.*, 61(10):18–47, 1969. 4.5.1
- [Sch54] SCHULZ, E. F.; WILDE, R. H. ; ALBERTSON, M. L.. **Influence of shape on the fall velocity of sedimentary particles.** *MRD Sediment Series*, 1(5), 1954. 3.1.1, 5
- [Sch98] SCHADE, K.-P.; HAEDRICH, T.. **Investigation of influence of wall roughness on particle-wall collision.** In: *THIRD INTERNATIONAL CONFERENCE ON MULTIPHASE FLOW*, 1998. 3.2.1
- [Sey07] SEYBOLD, H.; ANDRADE, J. S. ; HERRMANN, H. J.. **Modeling river delta formation.** *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(43):16804–16809, 2007. 3.3.1
- [Som99] SOMMERFELD, M.; HUBER, N.. **Experimental analysis and modelling of particle-wall collisions.** *International Journal of Multiphase Flow*, 25(6–7):1457 – 1489, 1999. 3.2.1, 3.2.1

- [Son08] SONG, C.; WANG, P. ; MAKSE, H. A.. **A phase diagram for jammed matter**. *Nature*, 453:629–632, 2008. 4.3.1
- [Sor93] SOROKIN, Y. I.. **Coral Reef Ecology**. Springer, Berlin, 1993. 1
- [Sto51] STOKES, G. G.. **On the effect of the internal friction of fluid on the motion of pendulums**. *Trans. Camb. Phil. Soc.*, 9(8), 1851. 3.1, 3.1
- [Tru60] TRUESDELL, C.. *Trans. Soc. Rheol.*, 4(9), 1960. A
- [Tru67] TRUESDELL, C.. **The elements of continuum mechanics**. Springer Verlag, New York, 1967. A
- [Vas10] VASCONCELOS, T. F.; MORAIS, A. F.; CISNEJR, R. L. C.; PARTELI, E. J. R. ; ANDRADE, J. S.. **Particle separation in a ramified structure**. *Chem. Eng. Sci.*, 65(1):1400–1406, 2010. (document), 1, 3.2, D.7, D.8, D.9, D.10, D.11, D.12, D.13
- [Ver08] VERBOVEN, P.; KERKHOF, G.; MEBATSION, H. K.; HO, Q. T.; TEMST, K.; M.WEVERS; CLOETENS, P. ; NICOLAI, B. M.. **Three-dimensional gas exchange pathways in pome fruit characterized by synchrotron x-ray computed tomography**. *Plant Physiol.*, 147(1):518–527, 2008. 1
- [WWF00] TRIANGLE, W. C.. **The importance of coral to people**, 2000. 1
- [Whi69] WHITAKER, S.. **Advances in theory of fluid motion in porous media**. *Industrial Engineering Chemistry*, 61(12):14–28, 1969. B
- [Wil29] WILLIAMSON, M. C.. *Ind. Eng. Chem.*, 21(1):1108–1111, 1929. 2.5.3
- [Yam04] YAMADA, M.; NAKASHIMA, M. ; SEKI, M.. **Pinched flow fractionation: Continuous size separation of particles utilizing a laminar flow profile in a pinched microchannel**. *Analytical Chemistry*, 76(18):5465–5471, 2004. 3.2.1
- [Zer02] ZERNA, W.; GREEN, A. E.. **Theoretical Elasticity**. Dover, Boston, 2002. 2.5.1

A Equações Constitutivas

O princípio de indiferença material estabelece que a resposta de um material é a mesma para todos os observadores, não importando o sistema de coordenadas de referência (Tru60). Embora este princípio pareça trivial, ele restringe a forma das equações constitutivas. Quando a diferenciação parcial é realizada no tempo, a quantidade a ser diferenciada deve ser referida a este caminho (derivada convectiva). O problema é encontrar a forma que a derivada terá quando referida a um sistema de coordenadas fixo. A derivada material é uma derivada parcial com respeito ao tempo observado do referencial que está sendo transladado, mas não rotacionado ou deformado. Oldroyd (Old58) mostrou que a derivada convectiva pode ser expressa como

$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{D\vec{A}}{Dt} - \frac{1}{2}\vec{\Omega} \wedge \vec{A} \pm \frac{\dot{\epsilon} \cdot \vec{A}}{2}, \quad (\text{A-1})$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \frac{D\mathcal{T}}{Dt} - \frac{1}{2}(\vec{\Omega} \wedge \mathcal{T} - \mathcal{T} \wedge \vec{\Omega}) \pm \dot{\epsilon} \cdot \mathcal{T}, \quad (\text{A-2})$$

Claramente, a derivada material é parte da derivada convectiva. Um escalar tem o mesmo valor em qualquer sistema de coordenadas, e por isso é chamado de invariante. Uma implicação importante do princípio da indiferença material é que para uma quantidade tensorial, tal como $\dot{\epsilon}$, qualquer vorticidade ou velocidade da rede num sistema pode ser transformado; isto é, pela escolha do referencial de coordenadas que está movendo ou girando de uma maneira apropriada, pode ser observado um fluido sob condições livres de rotação e translação. No sistema de coordenadas no qual a velocidade e o movimento do sistema estão ausentes, o tensor da taxa de deformação pode ser expresso em termos de um coeficiente de extensão volumétrica:

$$\dot{\epsilon} \cdot \delta \vec{r} = d\delta \vec{r}. \quad (\text{A-3})$$

Introduzindo um vetor unitário na direção de $d\delta \vec{r} = \hat{n}d\delta r$, tem-se $\dot{\epsilon} \cdot \hat{n} = d\hat{n}$. Isto pode ser rearranjado, introduzindo um tensor unitário, para

$$(\dot{\epsilon} - d\mathcal{I}) \cdot \hat{n} = \vec{0}. \quad (\text{A-4})$$

A solução da equação acima é não-trivial, se, e somente se, o determinante dos coeficientes for igual a zero: $|\dot{\epsilon} - \lambda \mathcal{I}| = 0$. Assim, $d^3 - \Xi d^2 + \Theta d - \Upsilon = 0$, com

$\Xi = \dot{\epsilon} : \mathcal{U} = 2\nabla \cdot \vec{u}$, $\Theta = \frac{1}{2} (\Xi^2 - \dot{\epsilon} : \dot{\epsilon})$ e $\Upsilon = |\dot{\epsilon}|$. Estes são os principais invariantes do tensor da taxa de deformação. Estas funções escalares são invariantes sobre as transformações. Para um escoamento incompressível $\Xi = 0$ e para escoamentos simples, tais como através de tubos e entre cilindros concêntricos, $\Upsilon = 0$.

Para um fluido viscoso isotrópico, Reiner (Rei56) e Rivlin (Riv47) derivaram uma equação constitutiva rigorosa baseada, em parte, no argumento de Stokes: τ não deve depender da vorticidade. Truesdell demonstrou que este resultado pode ser obtido do princípio da indiferença material (Tru67). Se o tensor da tensão de cisalhamento for escrito como

$$\mathcal{T} = \mathcal{P} - p\mathcal{U} = f(\dot{\epsilon}, \vec{\Omega}, \vec{u}), \quad (\text{A-5})$$

pode-se transformar a vorticidade e as dependências da translação do sistema pelos mesmos argumentos apresentados anteriormente, tal que

$$\mathcal{T}^* = \mathcal{P}^* - p^*\mathcal{U} = f(\dot{\epsilon}), \quad (\text{A-6})$$

onde os termos estrela estão no novo sistema de coordenadas.

A forma mais simples desta equação no espaço tridimensional é

$$\mathcal{T} = \alpha\mathcal{U} + \beta\dot{\epsilon} + \vartheta(\dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}). \quad (\text{A-7})$$

Todos os termos de maior ordem em $\dot{\epsilon}$ podem ser expressos como funções dos de menor ordem. Cada um dos coeficientes escalares α , β e ϑ são funções dos três invariantes principais. A equação A-7 descreve o fluido de Reiner-Rivlin na sua forma mais geral. Para um fluido Newtoniano

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3}\mu - 2\lambda \right), \quad \beta = -\mu, \quad \vartheta = 0.$$

A equação A-7 também contém, como casos especiais, os modelos empíricos previamente citados. Por exemplo, seja um escoamento incompressível ($\Xi = 0$), e assumindo qualquer efeito de Υ ser desprezível, a lei de potência da equação 2-79 pode ser expressa como

$$\tau = -K\Theta^{\frac{n-1}{2}}\dot{\gamma}, \quad (\text{A-8})$$

onde, para este caso, $\Theta = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon} : \dot{\epsilon} = -\dot{\gamma}^2$. O modelo de Herschel-Bulkley pode ser expresso como

$$\tau = - \left[\frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + \frac{K_{HB}}{\dot{\gamma}} \left(\Theta^{\frac{n+1}{2}} - \frac{\tau_0^n}{\mu_0^n} \right) \right] \dot{\epsilon}. \quad (\text{A-9})$$

A facilidade de conversão para qualquer sistema de coordenadas é enfatizada por Bird, Lightfoot e Stewart (Bir60).

Por várias razões a equação A-7 não é adequada para descrever tensões normais. Ela é uma equação constitutiva de um fluido puramente viscoso e não permite visco-elasticidade (não há derivadas no tempo), o padrão de tensão normal

previsto é contraditório com as evidências experimentais e tem sido observado que fluidos que exibem efeitos de tensão normal também são visco-elásticos. Uma vez que a visco-elasticidade não será enfatizada nesta tese, não estará presente uma teoria a fim de explicá-la. Para um melhor entendimento ver (Bro67) páginas 402-404.

B Tensor de Permeabilidade

Quando o meio poroso é isotrópico, as características de escoamento dependem da direção do fluxo de massa no meio. A equação tensorial que relaciona o gradiente de pressão naquela direção de escoamento e o vetor velocidade é a equação de Darcy tensorial:

$$\vec{u}_0 = -\frac{\mathcal{K}}{\mu} \nabla p, \quad (\text{B-1})$$

onde \mathcal{K} é o tensor da permeabilidade. Qualquer anisotropia no escoamento é contabilizada no tensor de permeabilidade de segunda ordem, que no sistema cartesiano pode ser escrito como (Whi69):

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} \kappa_{xx} & \kappa_{xy} & \kappa_{xz} \\ \kappa_{yx} & \kappa_{yy} & \kappa_{yz} \\ \kappa_{zx} & \kappa_{zy} & \kappa_{zz} \end{pmatrix}.$$

A figura B.1 mostra a magnitude de velocidades de uma simulação numérica de um fluido que escoar através de um meio poroso anisotrópico planar em três direções diferentes de escoamento distintas. Este meio anisotrópico foi construído acrescentando elipses que não se tocam, cujo semi-eixo maior é $a_e = 0.2m$ e excentricidade $\epsilon_e = \sqrt{3/4}$ a um substrato quadrado de lado $L_e = 5m$. Os ângulos de orientação das elipses inseridas está na faixa de $\theta_e = \pm 30^\circ$ com a direção do semi-eixo maior. De acordo com a orientação do escoamento, o valor da permeabilidade muda. A orientação vertical da figura é a orientação do escoamento de cima para baixo. A permeabilidade hidráulica do meio da figura é $\kappa_{yy} = 0.107$ (a), $\kappa_{xy} = \kappa_{yx} = 0.080$ (b) e $\kappa_{xx} = 0.051$ (c). Muitos meios naturais são inerentemente anisotrópicos, como é o caso da madeira, o substrato dentício, ossos não-trabeculares, etc..

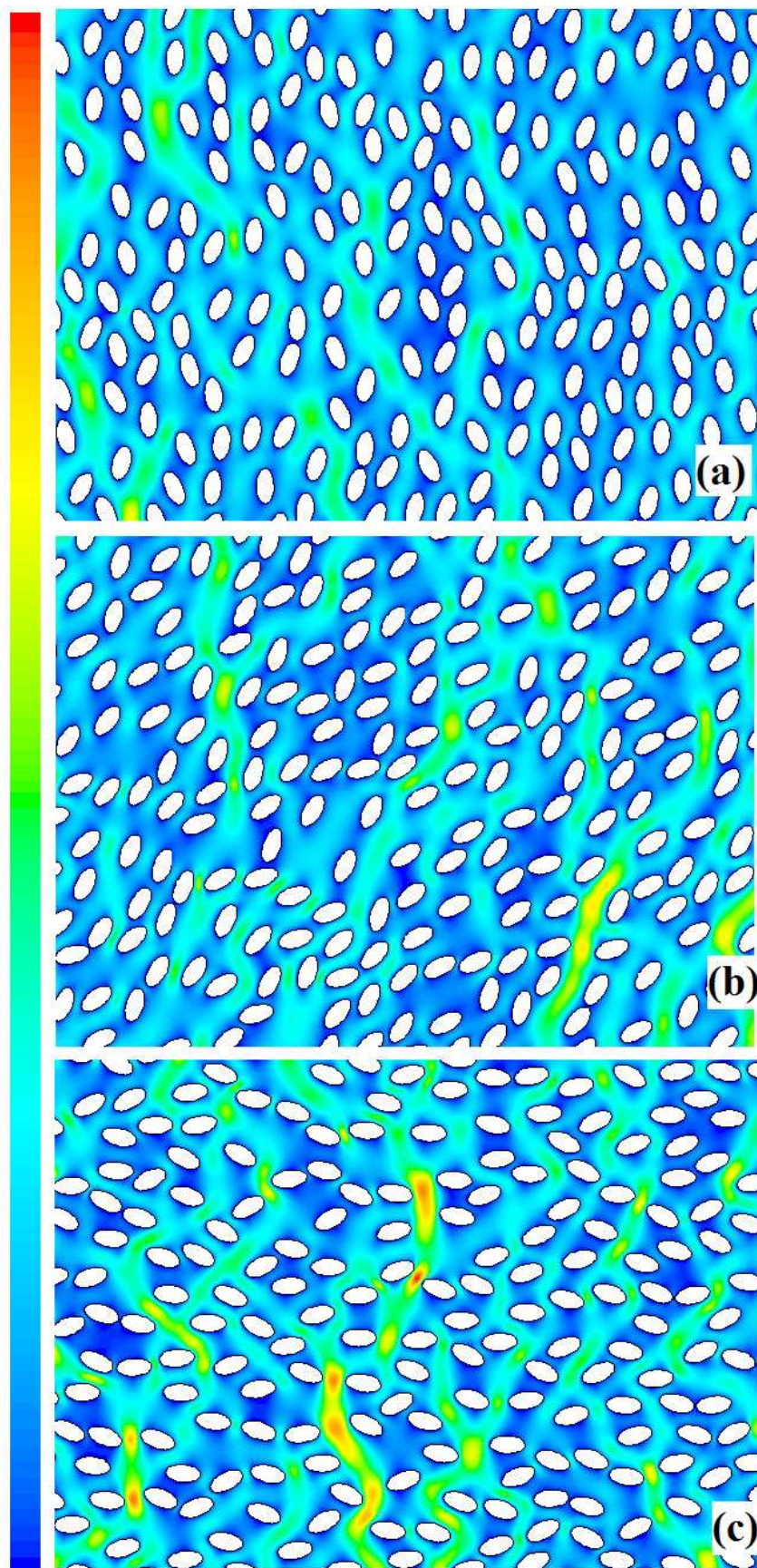


Figura B.1: Magnitude de velocidade do fluido num meio poroso anisotrópico planar em três direções de propagação. Dados obtidos por simulação computacional com $Re \sim 10^{-03}$, $\epsilon_e = \sqrt{3/4}$ e $\epsilon = 0.75$. (A velocidade aumenta do azul para o vermelho.)

C

Lista de Símbolos Utilizados

Segue a lista de símbolos utilizados nesta tese ordenados por capítulo. Uma vez que o significado não mudam dos capítulos antecedentes para os vindouros, não houve a necessidade de reescrevê-los. As unidades de medida seguem o Sistema Internacional de unidades.

Tabela C.1: Símbolos Utilizados - Capítulos 2 e 3.

Capítulo	Símbolos	Significado
2	t	tempo
	$\vec{r}, \vec{u}, \vec{a}$	vetor posição, velocidade e aceleração de um elemento de fluido
	m	massa de um elemento de fluido
	ρ	densidade de massa do fluido
	μ	viscosidade molecular do fluido
	μ_a	viscosidade aparente real do fluido
	p	campo de pressão do fluido
	$\mathcal{W}, \partial\mathcal{W}$	região do espaço e sua fronteira
	dA, dV	elementos de área e volume
	\vec{F}	força em uma região
	\vec{f}	força por unidade de área em uma região
	E_{cin}	energia cinética em uma região
	$\dot{\epsilon}$	tensor da taxa de deformação do fluido
	$\dot{\epsilon}_{ij}$	componentes do tensor da taxa de deformação do fluido
	$\dot{\gamma}$	taxa de deformação efetiva do fluido
	\mathcal{T}	tensor da tensão de cisalhamento do fluido
	τ_{ij}	componentes do tensor da tensão de cisalhamento do fluido
	Re	Número de Reynolds
	Re _C	Número de Reynolds crítico
	u_0, r_0, L	velocidade média, raio e comprimento característicos do escoamento
	Q	fluxo de massa
	R_H	raio hidráulico
	κ	permeabilidade hidráulica
τ_0, μ_0	limiar de tensão e viscosidade primordial do modelo de Herschel-Bulkley	
K_{HB}	índice de consistência do modelo de Herschel-Bulkley	
n, K	expoente e índice de consistência de um fluido do tipo lei-de-potência	
3	C_D	coeficiente de arrasto
	f	fator de fricção
	u_r, u^*	velocidade relativa entre o corpo e o fluido
	g	valor da aceleração da gravidade
	St, St _C	Números de Stokes e Stokes crítico
	h, α, ϕ	fator de crescimento, ângulos de bifurcação e crescimento
	e_t, e_n	coeficientes de restituição normal e tangencial
	FDP	função de distribuição de probabilidade
	$\langle\theta\rangle$	ângulo médio de rugosidade
	α_+, α_-	ângulos de incidência e reflexão
	α	ângulo formado entre os grãos erodidos
	$\kappa_{i,j}$	permeabilidade hidráulica do canal capilar formado pelos grãos
	ϕ	porosidade formada pela rede de grãos

Tabela C.2: Símbolos Utilizados - Capítulo 4.

Capítulo	Símbolos	Significado
4	ε	porosidade efetiva do meio poroso
	V_T, V_s, V_v	volumes total, de solo e de vazios numa amostra
	d_p	diâmetro das partículas aloáveis no modelo de Queijo Suíço
	D_m	diâmetro médio dos poros da amostra na equação de Carman-Kozeny
	D	diâmetro médio do tubo sinuoso de (Bir60)
	Ψ	esfericidade da amostra na equação de Carman-Kozeny
	κ_0	permeabilidade hidráulica para baixo número de Reynolds
	κ_1	permeabilidade hidráulica Newtoniana para $Re \ll 1$
	α, β	parâmetro da equação de Forchheimer
	Re'	Número de Reynolds para fluidos do tipo lei-de-potência

D

Artigos Publicados

Seguem abaixo os artigos publicados em periódicos internacionais integralmente provenientes desta tese de doutorado.

PHYSICAL REVIEW E 77, 061402 (2008)

Model for erosion-deposition patternsD. O. Maionchi,^{1,2} A. F. Morais,¹ R. N. Costa Filho,^{1,3} J. S. Andrade, Jr.,^{1,4} and H. J. Herrmann^{1,4}¹*Departamento de Física, Universidade Federal de Ceará, 60451-970 Fortaleza-Ceará, Brazil*²*Institut für Computerphysik, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 27, 70569 Stuttgart, Germany*³*The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics, Strada Costiera 11, 34014 Trieste, Italy*⁴*Computational Physics, IfB, ETH Hönggerberg, HIF E 12, CH-8093 Zürich, Switzerland*

(Received 5 December 2007; revised manuscript received 15 April 2008; published 10 June 2008)

We investigate through computational simulations with a pore network model the formation of patterns caused by erosion-deposition mechanisms. In this model, the geometry of the pore space changes dynamically as a consequence of the coupling between the fluid flow and the movement of particles due to local drag forces. Our results for this irreversible process show that the model is able to reproduce typical natural patterns caused by well-known erosion processes. Moreover, we observe that, within a certain range of porosity values, the grains form clusters that are tilted with respect to the horizontal with a characteristic angle. We compare our results to recent experiments for granular material in flowing water and show that they present a satisfactory agreement.

DOI: [10.1103/PhysRevE.77.061402](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.061402)

PACS number(s): 82.33.Ln, 45.70.Qj, 47.57.Gc, 47.56.+r

I. INTRODUCTION

Nature preservation and environmental protection are important issues on the agendas of governments and nongovernmental organizations. Consequently, these issues have been the subject of intense study, where the main concern is to understand how the actions of human beings affect the environment. For example, deforestation and pollutant emissions are related to climate changes resulting in floods and erosion. In particular, erosion can be responsible for diminishing the quality of life, because it affects the soil, causing a negative impact on the economy. Aside from its economic and ecological aspects, the erosion problem also attracts the interest of geologists and physicists. In geology, this is an extremely rich area as many of the patterns observed in nature stem from erosion or deposition processes. In physics, the formation of such patterns spans a huge range of spatial and temporal scales. This pattern formation process is directly related to the transport of solid granular particles via a fluid and presents a rich phenomenology along with a variety of applications [1,2]. Particular applications are fractal river basins [3], meandering rivers [4], dune fields [5,6], granular avalanches [7,8], and ripple marks [9] on sandbanks or on coastal continental platforms.

It is difficult to provide a fully consistent description of particle-laden flows from either a one- or two-phase point of view. Most of the practical knowledge of erosion comes from empirical laws often derived from field measurements. This has provoked interest in theoretical descriptions of these systems [10–12] and visualization of them in computational simulations. Several attempts to understand the dynamics of river basin formation from the statistical physics point of view have been made recently, but many questions are raised when one tries to relate basic transport properties to large-scale pattern-forming instabilities [13]. A fundamental open question is the following: How do objects made of granular materials respond to the action of external factors? Many experiments [14–21] have been performed in the last few years to answer this question. For example, in Fig. 1, we see

a laboratory-scale experiment which reproduces a rich variety of natural patterns with few control parameters [14]. These patterns are characterized by chevron alignments, which means that the paths created by the fluid present a characteristic branching angle that depends on the parameters varied in the experiment.

In this paper, we investigate through numerical simulation a physical model that is designed to represent the generic situation of flowing water on a plane composed of an erodible sediment layer. This occurs naturally when the sea retreats from the shore or when a reservoir is drained. The flow of granular materials on planes is also of interest within the context of both industrial processing of powders and geophysical instabilities such as landslides and avalanches. These flows have been found to be complex, exhibiting several different flow regimes as well as particle segregation effects and instabilities [22]. This paper is organized as follows. In Sec. II we describe the model used to simulate the erosion-deposition patterns. These patterns are presented



FIG. 1. Pattern observed in erosion experiment with commercial abrasive powder. Angles between 30° and 90° were found for different chevron alignments [14].

MAIONCHI *et al.*

PHYSICAL REVIEW E 77, 061402 (2008)

and analyzed in Sec. III, while the conclusions are left for Sec. IV.

II. MODEL FORMULATION

We model a system that takes into account the interaction of a granular medium with an incompressible Newtonian fluid flowing through the corresponding pore space. The granular medium is initially considered as a $N \times N$ regularized random network (RRN) on a horizontal plane where the sites are the centers of mass of spherical grains with diameter d that are totally submerged in a fluid (e.g., water). We initialize this network as a regular square where the distance between the closest neighbors is l_0 . The points (centers of mass of the grains) are then moved randomly along vectors with arbitrary direction and random magnitude that are smaller than the distance between the points. In this way, the points are distributed randomly, but with a characteristic distance. More precisely, in order to avoid the occurrence of overlapping grains, the maximum value adopted for the modulus of these dislocation vectors is $(l_0 - d)/2$. The fluid flows in a direction parallel to the ground. Although the lattice construction is made in two dimensions (2D), we are actually describing one layer of a three-dimensional system, since the centers of mass of the particles still lie on a 2D plane, but the grains are considered to be spheres. This association will enable us to generate a network of capillaries representing a complex geometry of the pore space. At this point, the entire system is triangulated, considering each grain as a vertex of a Delaunay tessellation where the pore space is described by a Voronoi diagram. In Fig. 2 we show a typical initial RRN configuration and its corresponding triangulation and network of capillaries.

Next, we assume that the local pore geometry between each two nearest-neighbor grains i and j in this lattice can be modeled as a capillary channel of length l (the distance between the barycenters of the corresponding adjacent triangles), height d , and width w equal to the distance between their centers. As shown in Fig. 3, if we consider periodic boundary conditions (PBCs) in the x direction, such a channel should be equivalent to a parallelepiped of fluid containing in its center a solid sphere of diameter d (grain). Both planes describing the ground and the water/air interface of the lattice of particles are orthogonal to the y direction. Here the Navier-Stokes and continuity equations in the three-dimensional channel are solved using the commercial computational fluid dynamics (CFD) software FLUENT [23]. We consider no-slip boundary conditions at the bottom and assume that the top surface is shear-stress-free. A pressure gradient Δp is imposed between the two ends of the channel in the z direction. Its magnitude is sufficiently small to ensure viscous flow conditions, i.e., a low-Reynolds-number regime of flow. We adopt a nonstructured tetrahedral mesh to discretize the channel and an upwind finite-difference scheme is set to perform the numerical simulations. The steady-state velocity and pressure fields are calculated for different channel geometries by systematically varying the ratio w/d in the range $1.0 < w/d < 10.0$.

In Figs. 4(a)–4(c) we show three contour plots of the velocity field computed for a channel with porosity w/d

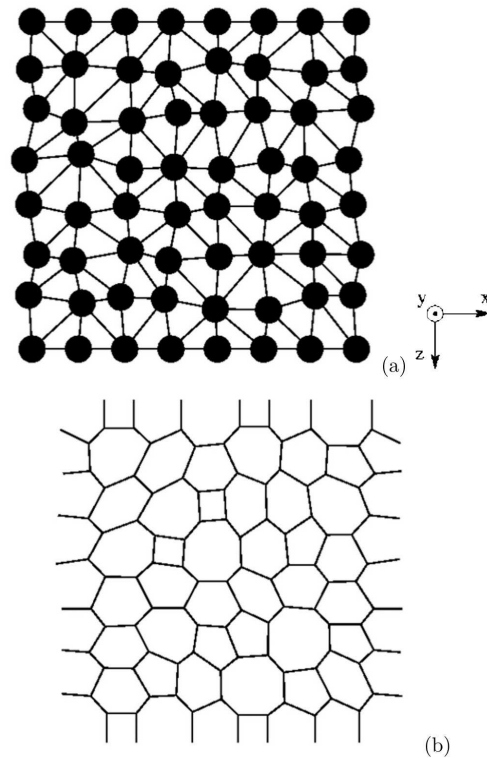


FIG. 2. Typical initial configuration of the regularized random network with 64 grains. In (a) we show its corresponding triangulation and in (b) its network of capillaries.

$= 1.05$ at heights $y/d = 1/4, 1/2,$ and $3/4$, respectively. Considering the low-Reynolds-number conditions used in the simulations, the flow in the channel can be characterized in terms of a permeability index κ through the relation

$$v_f = - \frac{\kappa \Delta p}{\mu \Delta z}, \quad (1)$$

where μ is the viscosity of the fluid and v_f is the average flow velocity. We assume that the movement of the particles does not transfer momentum to the flow field. Indeed, a more realistic approach would be to account for the momentum transfer from one phase to another, by adding the momentum change of every particle as it passes through a control volume of fluid. The exchange term would then appear as a sink in the continuous phase momentum balance [24,25]. Here a quasi-steady-state regime of flow is considered, i.e., the fluid flow adapts instantaneously to the porous medium geometry. This hypothesis should remain valid if inertial effects are not relevant. In practical terms, once the velocity and pressure fields are obtained for a channel with a given value of w/d , we can compute the mean velocity value v_f through a cross

061402-2

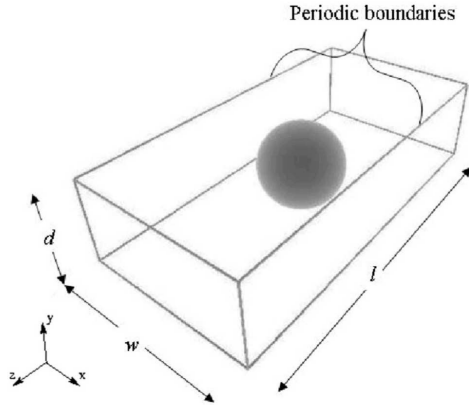


FIG. 3. Velocity field determined in a channel of length l and width w with one sphere of diameter d inside. The mean velocity of the fluid, v_f , is calculated in the rectangular cross section.

section orthogonal to the flow in the system. By repeating this procedure for different values of the overall pressure drop Δp , we first confirm the validity of the linear relationship $v_f \propto \Delta p$ as expected from Eq. (1), so that the permeability κ can be directly calculated from the slope of the corresponding straight line. As shown in Fig. 5, the dependence of κ on the ratio w/d can be fully described as $\kappa/\kappa_0 = f(w/d)$ where $f(w/d)$ is a fourth-degree polynomial of w/d and κ_0 is the permeability for a channel with unitary aspect ratio, $w/d=1$.

Once the local geometry and permeability of all capillaries in the system are determined, we proceed by applying a

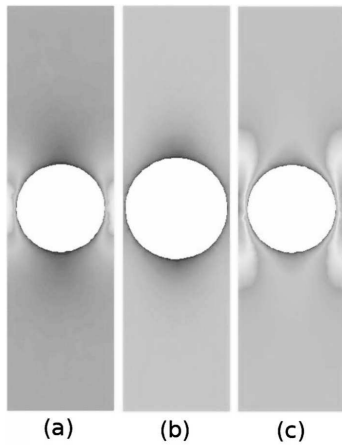


FIG. 4. Contour plots of the velocity field obtained numerically for $w/d=1.05$ at three different transverse planes of the channel, namely, $y/d=1/4$ (a), $1/2$ (b), and $3/4$ (c). The gray shades ranging from dark to light correspond to low- and high-velocity magnitudes, respectively.

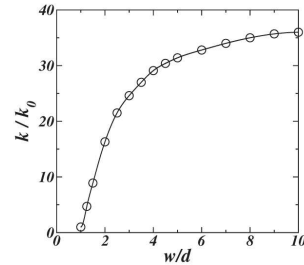


FIG. 5. Permeability κ versus the ratio w/d for the local channel configuration shown in Fig. 3. Here κ_0 is the permeability for a channel with ratio $w/d=1$. The solid line is the best cubic spline interpolation to the data used to obtain the local permeability of the channels in the pore network model.

constant pressure drop between the inlet and outlet, i.e., the top and bottom of the entire pore network. Periodic boundary conditions are assumed in the lateral direction of the network, and the following local mass conservation equations are imposed at each of their N' nodes to allow water flow throughout the entire pore space:

$$\sum_j g_{ij}(p_i - p_j) = 0 \quad \text{for } i=1, 2, \dots, N', \quad (2)$$

where the index j runs over all the neighbor nodes of node i , $g_{ij} \equiv wd\kappa/l$ is the hydraulic conductance in the capillary between the pores i and j , and p_i and p_j are the pressures at nodes i and j , respectively. Equation (2) corresponds to a set of N' coupled linear algebraic equations, where N' is the number of nodes in the system that can vary, depending on the configuration of the grains. These equations are solved in terms of the nodal pressure field by means of a standard subroutine for sparse matrices. From the pressures in the nodes, the velocity magnitude of the fluid in each capillary can be computed.

After the velocity field in the pore network is calculated, we allow each grain to move in the system. By assuming that there is no friction on the ground and drag is the only relevant force acting on the particles, we obtain

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = 3\pi\mu d \sum_i (\mathbf{v}_f^i - \mathbf{v}), \quad (3)$$

where \mathbf{v}_f^i is the fluid velocity at the channel i , \mathbf{v} is the particle velocity, and the vectorial sum on the right is taken over all n channels surrounding the particle. By straightforward integration of the equation of motion (3), the velocity and displacement caused by the fluid drag for each grain in the system during a time interval Δt can be written as

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}}_f - (\bar{\mathbf{v}}_f - \mathbf{v}_0) e^{-nC\Delta t}, \quad (4)$$

$$\Delta \mathbf{x} = \bar{\mathbf{v}}_f \Delta t + (\bar{\mathbf{v}}_f - \mathbf{v}_0) \left(\frac{e^{-nC\Delta t} - 1}{nC} \right), \quad (5)$$

where $\bar{\mathbf{v}}_f = \sum_i \mathbf{v}_f^i / n$, $C = 18\mu / \rho d^2$, $\rho = 6m / \pi d^3$ is the density of the grain, and \mathbf{v}_0 is its velocity in the previous time step.

MAIONCHI *et al.*

PHYSICAL REVIEW E 77, 061402 (2008)

In our simulations, the center of each grain is displaced by Δx using a time step Δt that is sufficiently small to numerically ensure that the pattern evolution remains invariant when compared with results performed using even smaller time steps. The distance between the top and bottom lines of the system is kept constant, and each grain that goes out of the region delimited by these lines is replaced by another grain at the top of the lattice. What is crucial for the steadiness of the pattern formation is that one grain cannot overlap with another grain. After computing the movement of all grains at each time step, the pore space is then modified, and we repeat the calculation of the velocity field to move the grains again, and so on. The simulation stops when the system reaches the steady state, i.e., when the geometry of the aggregate remains unchanged with time.

III. RESULTS

We performed simulations on a lattice with 32×32 grains with diameter $d=30 \mu\text{m}$ and density $\rho=2.75 \text{ g/cm}^3$. These particles are surrounded by water, i.e., a fluid of viscosity $\mu=10^{-3} \text{ Pa s}$ which flows at small-Reynolds-number conditions ($\text{Re} \ll 1$) through a pore space of porosity that can be varied in the range $0.48 < \phi < 0.8$. For each value of porosity we obtain results for five different realizations of the initial random pore space.

In Figs. 6(a)–6(c) we show three final stable configurations of the model for different porosity values $\phi=0.57$, 0.71, and 0.80, respectively. As can be observed, the steady-state patterns depend strongly on the porosity of the system. For sufficiently large values of ϕ , the occurrence of particle clusters in the form of dendrites reflects the strong coupling between fluid dynamics and grain movement, where the aligned preferential channels for flow leads to a high overall permeability of the porous system. For small porosities, however, no characteristic pattern is observed. This is to be expected since in compacted systems the grains do not have much mobility, while in loose systems the particles have the freedom to move in almost all directions. The tendency to form a dendritic pattern in which the particles align in preferential directions can be statistically quantified if we determine for each pair of grains the angle α between the line connecting their centers of mass and the direction orthogonal to the flow [i.e., the x direction shown in Fig. 6(a)]. In Figs. 7(a)–7(c) we show the histograms of these angles, $N(\alpha)$, for $\phi=0.57$, 0.71, and 0.80. For a low-porosity system, $\phi=0.57$, the results shown in Fig. 7(a) indicate that a significant number of grains are aligned around $\alpha=25^\circ$ (and the symmetric direction of 155°), although the most frequent angle lies in the vicinity of 90° . This means that the particles tend to be aligned in the vertical y direction (i.e., the direction of the flux), what is expected as the system cannot change much from its initial configuration. In systems with intermediate porosity values, $0.65 < \phi < 0.75$, there is a substantial change in the preferred angle of alignment, which is around $\alpha=60^\circ$ (and the symmetric direction of 120°). This behavior, as exemplified here in Fig. 7(b), resembles the chevron alignment reported in Ref. [14], where the results of the angle histograms are presented for a porosity $\phi=0.71$. In

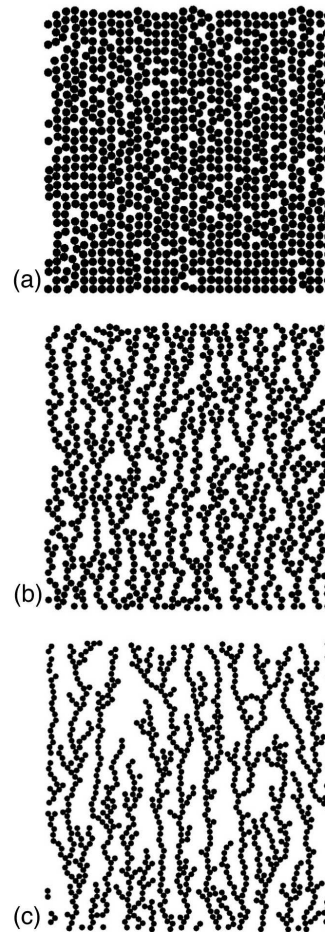


FIG. 6. Final configurations of the system for porosities $\phi=0.57$ (a), 0.71 (b), and 0.80 (c) after 15 000 time steps. The grains arrange themselves in positions that give rise to characteristic patterns.

this reference, experimentally preferred angles around the same value were also found. In Fig. 7(c) we show the histogram $N(\alpha)$ for a large-porosity system, $\phi=0.80$, where no evident preferential direction can be observed, with the particles aligning themselves at angles between 50° and 130° with approximately the same probability.

Finally, it is important to investigate the flow properties of the porous system in terms of its macroscopic permeability κ as a function of porosity. In Fig. 8 we show that the permeability increases with porosity for diluted systems (i.e., for low ϕ values) and with high values of ϕ . Interestingly, we find that this behavior can be well described by a power law function in the form $\kappa/\kappa_0=a\phi^b$, as also depicted in Fig. 8.

061402-4

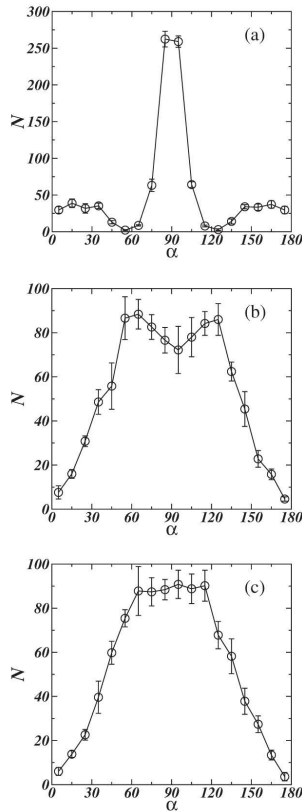


FIG. 7. Histograms of pairs of grains that are touching and for which the line joining their centers of mass forms an angle α with the axis x . These results represent the average over five realizations of different porosities, namely, $\phi =$ (a) 0.57, (b) 0.71, and (c) 0.80.

IV. CONCLUSIONS

We developed a numerical model to describe the process of erosion-deposition caused by laminar flow, with the drag force given by Stokes law. The results we obtained show the formation of a typical erosion pattern characterized by chevron alignments very similar to the experimental ones presented in Ref. [14] (a typical pattern is shown in Fig. 1). Through computational simulations performed with this model, we were able to find dendritic patterns as well as to reproduce the preferential alignment of the chevron structures observed in real experiments.

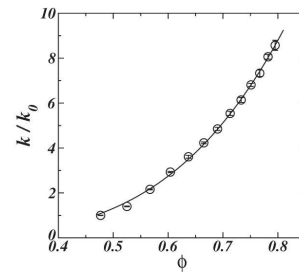


FIG. 8. Dependence of the macroscopic permeability κ at the steady state on the porosity ϕ of the erosion-deposition system. The solid line is the best fit to the data of the function $\kappa/\kappa_0 = a\phi^b$, with parameters $a = 21.5 \pm 0.5$ and $b = 4.0 \pm 0.5$.

Our results indicate that these patterns depend substantially on the porosity of the system. Previous studies [26–28] have shown that the size and shape of the particles dramatically influence the propagation of the fluid and the stress distribution in the system. In addition, it has been shown experimentally that the pattern geometry must also depend on the flow properties through the porous medium [29,30], namely, on whether or not the inertial mechanisms of momentum transport play an important role on the dynamics of pattern formation. In the present study we considered only laminar flow. By changing the exponent of the velocity in the drag law, for example, one can reproduce aspects of turbulent flow to increase the complexity in the movement of the particles. This could reveal a variety of new patterns. How the shape and the size distribution of the grains as well as the flow characteristics affect the patterns are natural questions that will be addressed in future work.

In recent works [16,18,31], many patterns were observed in experiments involving avalanches, where one of the most important parameters is the depth of the substrate. Although the system studied here is related to erosion-sedimentation processes, this suggests that a variety of different patterns may be obtained just when one attempts to simulate them in three dimensions. A simple approximation to a three-dimensional system would be to consider that, depending on the flux, a particle would not stop as it reaches another particle, but could jump over it. With this possibility, the dynamics of the particles changes, as their velocity now depends also on the height of their centers of mass.

ACKNOWLEDGMENTS

We appreciate helpful interactions with A. M. C. Souza, A. A. P. Olarte, A. A. Moreira, and S. McNamara. This work was supported by the Brazilian agencies CNPq, CAPES, and FUNCAP and Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD). H. J. Herrmann thanks the Max-Planck Foundation.

MAIONCHI *et al.*PHYSICAL REVIEW E **77**, 061402 (2008)

- [1] R. Behringer, H. Jaeger, and S. Nagel, *Chaos* **9**, 509 (1999).
- [2] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996).
- [3] P. S. Dodds and D. H. Rothman, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.* **28**, 571 (2000).
- [4] B. F. Edwards and D. H. Smith, *Phys. Rev. E* **65**, 046303 (2002).
- [5] H. J. Herrmann, G. Sauermaun, and V. Schwämmle, *Physica A* **358**, 30 (2005).
- [6] O. Durán and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 188001 (2006).
- [7] S. Krishnamurthy, V. Loreto, H. J. Herrmann, and S. Roux, *Physica A* **270**, 89 (1999).
- [8] Y. Grasselli and H. J. Herrmann, *Physica A* **246**, 301 (1997).
- [9] A. Betat, V. Frette, and I. Rehberg, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 88 (1999).
- [10] K. Kroy, G. Sauermaun, and H. J. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 054301 (2002).
- [11] H. J. Herrmann, *Physica A* **263**, 51 (1999).
- [12] D. Ertas and T. C. Halsey, *Europhys. Lett.* **60**, 931 (2002).
- [13] H. Seybold, J. S. Andrade, and H. J. Herrmann, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **104**, 16804 (2007).
- [14] A. Daerr, P. Lee, J. Lanuza, and E. Clement, *Phys. Rev. E* **67**, 065201(R) (2003).
- [15] O. Poulliquen, *Phys. Fluids* **11**, 542 (1999).
- [16] I. S. Aranson, F. Malloggi, and E. Clement, *Phys. Rev. E* **73**, 050302(R) (2006).
- [17] O. Poulliquen and J. W. Vallance, *Chaos* **9**, 621 (1999).
- [18] T. Borzsonyi, T. C. Halsey, and R. E. Ecke, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 208001 (2005).
- [19] Y. Forterre and O. Poulliquen, *J. Fluid Mech.* **486**, 21 (2003).
- [20] O. Poulliquen, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 248001 (2004).
- [21] G. D. R. Midi, *Eur. Phys. J. E* **14**, 341 (2004).
- [22] O. Poulliquen, J. Delour, and S. B. Savage, *Nature (London)* **386**, 816 (1997).
- [23] The FLUENT fluid dynamics analysis package has been used in this study; <http://www.fluent.com>
- [24] O. Johnsen, R. Toussaint, K. J. Maloy, and E. G. Flekkoy, *Phys. Rev. E* **74**, 011301 (2006).
- [25] S. McNamara, E. G. Flekkoy, and K. J. Maloy, *Phys. Rev. E* **61**, 4054 (2000).
- [26] J. Geng, D. Howell, E. Longhi, R. P. Behringer, G. Reydellet, L. Vanel, E. Clement, and S. Luding, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 035506 (2001).
- [27] G. Reydellet and E. Clement, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3308 (2001).
- [28] G. W. Baxter, R. P. Behringer, T. Fagert, and G. A. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2825 (1989).
- [29] J. S. Andrade, D. A. Street, T. Shinohara, Y. Shibusa, and Y. Arai, *Phys. Rev. E* **51**, 5725 (1995).
- [30] J. S. Andrade, U. M. S. Costa, M. P. Almeida, H. A. Makse, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5249 (1999).
- [31] F. Malloggi, J. Lanuza, B. Andreotti, and E. Clement, *Europhys. Lett.* **75**, 825 (2006).

061402-6

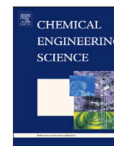
Figura D.6: Página 6 do artigo (Mai08)

Chemical Engineering Science 65 (2010) 1400–1406



Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Engineering Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ces

Particle separation in a ramified structure

Talita F. Vasconcelos^a, Apiano F. Morais^a, Roberto L.C. Cisne Jr.^a, Eric J.R. Parteli^{a,b,*}, José S. Andrade Jr.^{a,b}

^a Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60455-760, Fortaleza, CE, Brazil

^b Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Ceará, 60455-900, Fortaleza, CE, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:
Received 8 May 2009
Received in revised form
16 October 2009
Accepted 17 October 2009
Available online 25 October 2009

Keywords:
Ramified structure
Lung
Separations
Porous media
Powder technology
Granular materials

ABSTRACT

A new type of particle separator is proposed, namely a lung-like branched structure. The separation takes place as a consequence of the interplay between the flow characteristics in the branched geometry and the distinct inertial properties of the dragged particles. From the solution of the three-dimensional continuity and Navier–Stokes equations for the flow and transport equations for the particles, we can investigate how the resolution of the separation depends on the main geometrical parameters of the ramified structure, namely the angle and the homothety factor of the branchings, and the azimuthal angle between successive planes of bifurcation. Remarkably, our numerical results indicate that such a simple ramified geometry can be used as a flow device that is capable to separate particles with increased efficiency and over a broad range of Stokes numbers.

© 2009 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Size separation of particles is an important problem encountered in several areas of industrial, biological and environmental research (Gimbert et al., 2003; Fraunhofer and Winter, 2004). Many different complex techniques as hydrodynamic chromatography and split-flow thin fractionation have been developed for filtrating or selecting the most diverse kinds of particles ranging from microbes to drugs and pharmaceutical emulsions (Di Marzio and Guttman, 1970; Giddings, 1985, 1993; Sahimi, 1995; Edwards et al., 2002; Chmela and Tjsssen, 2002; Ookawara et al., 2004; Watarai et al., 2004; Vastamäki et al., 2005; Aldaeus et al., 2006; Hawkins et al., 2007; Kersaudy-Kerhoas et al., 2007; Wu et al., 2007; Chang and Cho, 2008; Weiss et al., 2008; Kang et al., 2009; Lin et al., 2009). In spite of their accuracy, most of such traditional methods suffer from a crucial disadvantage: the need of generating outer fields (e.g. thermal, electrical or centrifugal), which significantly increase the complexity, cost and processing time.

Indeed, as shown recently, separation of different sized particles can be also achieved by exploiting solely the profile of an advected laminar flow (Wickramasinghe et al., 2001; Yamada et al., 2004; Huang et al., 2004; Takagi et al., 2005; Di Carlo et al., 2008). At advection, particles that are small enough follow the streamlines of the flow, whereas large particles can cross the

streamlines due to their large inertia. Thus, particles of similar size have the same trajectories, which are chosen in a deterministic way, giving therefore a theoretical indication for a high resolution process (Huang et al., 2004). Although some insight could be gained from recent experiments using flow advection around obstacles (Huang et al., 2004) or pinched flow fractionation (Yamada et al., 2004), it is not clear how the geometric details of the device employed could affect the efficiency of the separation. Furthermore, there is no computational study of inertial particle segregation in three-dimensional branched structures.

Previous research studies have been focused on the development of new technological devices inspired by the behaviour and geometry of natural systems (Coppens and van Ommen, 2003; Kleijn van Willigen et al., 2005). In the present work, we demonstrate a new kind of inertial particle separator consisting on a lung-like ramified structure. Particles suspended in the liquid injected into the separator, which is shown in Fig. 1, follow different paths according to their inertia owing to the flow asymmetry induced by the bifurcations within the branched structure. The aim of the present study is to investigate which are the relevant parameters of the branched geometry for the efficiency of the separation under a given flow condition and particle properties.

The paper is organized as follows. In the next section, the geometry of the separator, the calculation of the laminar flow into the branched structure and the model of particle transport in the flow are demonstrated. In Section 3 we present and discuss the results of the calculations. Conclusions are presented in Section 4.

* Corresponding author at: Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60455-760, Fortaleza, CE, Brazil.
E-mail address: parteli@fisica.ufc.br (E.J.R. Parteli).

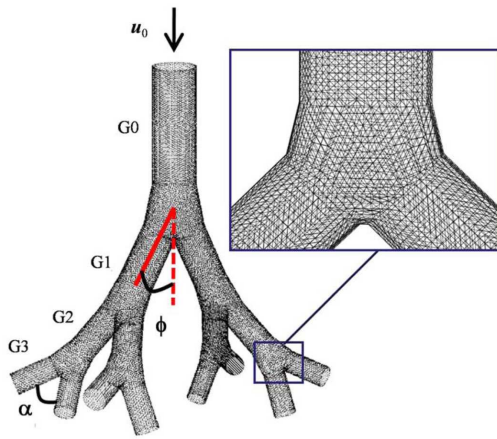


Fig. 1. The particle separator consists of a cascade of cylinders forming a three-dimensional ramified structure. A dichotomous and homothetic tree structure with four generations (G0–G3) is shown (left). Both the branching angle, α , and the azimuthal angle between successive planes of bifurcation, ϕ , are the same at all bifurcations. The arrow on top indicates the direction of the fluid flow, which has velocity u_0 , at the entrance. The inset (right) shows the detail of the bifurcation geometry with the mesh used in the calculation of the fluid flow and particle transport.

2. The model

The device used in the calculations consists of a cascade of cylinders forming a three-dimensional lung-like branched structure as shown in Fig. 1. At each bifurcation, the radii of the cylinders decrease by a factor of $(1/2)^{1/3}$ and the branching angle is set to $\alpha = 60^\circ$. Both daughter branches and the parent cylinder are on the same plane, whereas the azimuthal angle between two successive planes of branching is set to $\phi = 90^\circ$. The bifurcation geometry has been modelled in order to avoid discontinuities (Mauroy et al., 2003). The diameter of the first tube is equal to 2 cm, which corresponds approximately to the diameter of the human trachea, whereas the branched structure is constructed up to the fourth generation. The ratio length L over diameter D of the cylinders at each generation is set to $L/D = 3.0$.

The mathematical description for the fluid mechanics is based on the assumptions that we have a continuum, Newtonian and incompressible fluid of viscosity η and density ρ flowing under steady state conditions. Thus, the Navier–Stokes and continuity equations reduce to

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2)$$

where \mathbf{u} and p are the local velocity and pressure fields, respectively. We use nonslip boundary conditions (Dirichlet condition $\mathbf{u} = 0$) at the tube walls and impose a stationary uniform flow profile with velocity u_0 at the entrance of the first tube. The outlets of the branched structure are free with the same reference pressure $p = 0$ and $\partial \mathbf{u} / \partial n = 0$. The parameters controlling the flow are the aspect ratio L/D (length to diameter ratio of the tubes), the azimuthal angle ϕ between successive bifurcations, and the Reynolds number

$$\text{Re} \equiv \rho u_0 D_0 / \eta, \quad (3)$$

where D_0 and u_0 are the diameter and the mean velocity of the flow at the entrance, respectively. We restrict our simulations to viscous laminar conditions of flow, $\text{Re} \approx 50$. The flow behaviour of the system for moderately large Reynolds (nonviscous) has been investigated previously (Andrade et al., 1998; Almeida et al., 1999; Mauroy et al., 2003).

The numerical solution of Eqs. (1) and (2) for the velocity and pressure fields in the structure is obtained through discretization by means of the control volume finite-difference technique (Patankar, 1980). The governing differential equations are discretized in a computational mesh and numerically solved here using FLUENT 6 (Fluent Inc., 2003, 2005). The degree up to which the mass and momentum conservation equations are satisfied throughout the flow field is defined in terms of residuals. In all our simulations, convergence is considered to be achieved only when each of the residuals falls below 10^{-6} .

Once the equations for the fluid flow have been solved, the calculation of the particle motion is performed. Particles are injected at the inlet boundary with initial velocity $v_0 = u_0$ and with uniform distribution at the entrance. For simplicity, in the calculations of the present work, we study the transport of particles with density $\rho_p \approx \rho$, in such a manner that the buoyancy force exerted on the particle equals the particle weight. Therefore, drag is the only relevant force and the equation of motion for the particles can be written as

$$\frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \left[\frac{18\eta}{d_p^2 \rho_p} \right] (\mathbf{u} - \mathbf{v}_p) \zeta_D, \quad (4)$$

where v_p and d_p are the particle velocity and diameter, respectively, g is gravity, and ρ and η are the density and viscosity of the fluid, respectively. The term of the right-hand-side of Eq. (4) is the drag force exerted by the fluid on the particle, whereas all other external forces have been neglected. The quantity ζ_D which appears in Eq. (4) is a correction to Stokes' drag force and is defined as $\zeta_D = C_D \text{Re}_p / 24$, where $\text{Re}_p = \rho d_p |\mathbf{u} - \mathbf{v}_p| / \eta$ is the particle Reynolds number and the drag coefficient C_D is obtained from empirical relations (Morsi and Alexander, 1972). Since the drag is considered to be the dominant force, at low values of Reynolds numbers, the relevant parameter is the Stokes number, defined as

$$\text{St} \equiv \frac{\rho_p d_p^2 u_0}{18\eta D_0}, \quad (5)$$

where u_0 is the velocity at the entrance of the first tube, which has diameter D_0 . The Stokes number gives the ratio $\text{St} = t_R / t_F$, where $t_R \equiv \rho d_p^2 / 18\eta$ is the time of response of the particle to the action of the fluid and $t_F \equiv D_0 / u_0$ is the flow time. Indeed, the Stokes number is the most important parameter of the simulations. In the limit of very low Stokes number values ($\text{St} \rightarrow 0$), particles have ample time to respond to changes in the flow velocity, following, thus, the streamlines of the flow. However, in the opposite limit ($\text{St} \rightarrow \infty$), particle velocities are not affected by variations in the flow velocity and therefore particles follow ballistic trajectories.

In order to approximately model the collision of the particles with the walls of the tubes, we introduce a restitution coefficient,

$$k \equiv v_p^{\text{reb}} / v_p^{\text{imp}}, \quad (6)$$

where v_p^{reb} and v_p^{imp} are the particle velocities immediately after and before the collision, respectively. In the simulations of the present work, the collisions of the particles with the tube walls are considered to be elastic, i.e. $k = 1$. Let us also point out again that although our Stokes numbers [Eq. (5)] imply that the particles have finite diameter, the simulations treat the particles as pointlike. We assume that the particles do not interact with each other, but only with the fluid through the drag force, and with the

1402

T.F. Vasconcelos et al. / Chemical Engineering Science 65 (2010) 1400–1406

tube walls where collisions can take place. Finally, we also consider that the particles are not captured by the structure, and that the movement of the particles does not transfer momentum to the flow field (Imdakhm and Sahimi, 1987; Comer et al. 2001a, b).

3. Results and discussion

The geometry of the ramified structure with four generations is shown in Fig. 2a. For each value of Stokes number, we release 10,000 particles from the entrance of the ramified structure with an initial velocity magnitude that is set to be same and equal to the flow at the inlet ($|\mathbf{u}| = |\mathbf{v}_p| = 0$). The trajectories of the particles in the flow are obtained by numerical integration of their equations of motion, Eq. (4). In Fig. 2b, we see the percentual number n_i of particles leaving the structure through each one of the exit branches ($i = 1-8$ in Fig. 2a) as function of the Stokes number, St .

As can be seen in Fig. 2b, the values of n_i for each branch depend on the particle Stokes number, St . In the limit of very low St , $n_i \rightarrow \frac{1}{8} \forall i$ since particles follow the flow streamlines and an uniform concentration of particles is expected over the exit branches if the flow distribution is symmetric. As the Stokes number St increases, however, the relative concentration of particles leaving the structure through the central exit branches of the structure, i.e. branches 3–6 in Fig. 2a, increases gradually—for $St = 0.24$, almost 70% of the particles leave the structure through the central branches. This behaviour is illustrated in Fig. 2c, which shows the dependence of n_i on the Stokes number for one central exit branch (the number 3), and a peripheric one (the number 1).

Indeed, particle segregation reaches a maximum at a Stokes number $St_{max} \approx 0.4$, as we can see in Fig. 2c: the percentual number n_i of particles leaving the structure through the central branches starts to decrease for increasing values of $St > 0.4$. This behaviour can be explained through the collisions of the particles with the walls of the cylinders, which exert a major influence on the trajectories of particles with large Stokes number (Fig. 3). As a result of the collisions, the probability that particles of high enough value of Stokes number, i.e. for $St \gtrsim 1$ (Fig. 2c), leave the structure through each one of the exit branches is found to be essentially uniform, independent of the exit branch position.

We also tested a more complex model for particle–wall collisions which considers a probability distribution for the rebound angle θ_{reb} , namely the angle between the tube wall and the particle trajectory immediately after the collision. In other words, while in the case of specular collisions Eq. (6) θ_{reb} is equal to the impact angle θ_{imp} , in the stochastic rebound model θ_{reb} fluctuates according to the local roughness angle γ of the wall interface (Sommerfeld and Huber, 1999), which in turn follows a normal distribution with average equal to zero and a given standard deviation $\Delta\gamma$. Interestingly, the behaviour illustrated in Figs. 2 and 3 is observed regardless of the specific law of collisions as well as of the specific value of the standard deviation $\Delta\gamma$ within the range of realistic values $2.5^\circ < \Delta\gamma < 20^\circ$ (Sommerfeld and Huber, 1999). Only marginal quantitative changes (of about 5–10%) in the values of concentrations n_i are found, indeed the characteristic Stokes for maximum segregation appears robust with respect to the law of particle–wall collisions.

The results of Figs. 2b and c suggest that the branched structure considered in the present work can be employed as an efficient particle separator. Particles which have Stokes number around a value St_{max} are mainly captured at the central exit branches, whereas the number of particles with $St \gg St_{max}$ or $St \ll St_{max}$ leaving the structure through any of the peripheric or central branches is approximately the same. However, which are

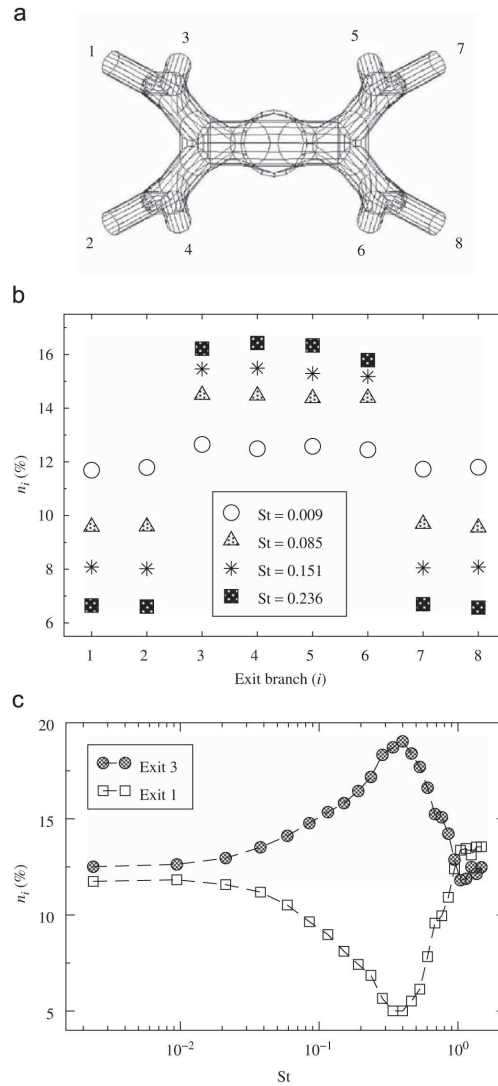


Fig. 2. (a) Branched structure with four generations and eight possible outlets. (b) Histogram of the percentage of particles, n_i , leaving the structure through each one of the branches ($i = 1-8$), for different values of the Stokes number St . (c) Distribution of particles leaving the branched structure through a peripheric exit branch (the branch number 1, cf. a) and through a central one (the branch number 3) as function of the Stokes number, for $\alpha = 90^\circ$ and $Re = 50$.

the relevant parameters responsible for a maximum in St ? Moreover, is it possible to increase the resolution of the separation by changing the geometry of the structure (Huang et al., 2004)? Here we address these questions by studying how the results of Figs. 2b and c depend on the values of the parameters of the branched structure (Fig. 1): the azimuthal angle between planes of bifurcations, ϕ , the branching angle, α , and the homothety factor,

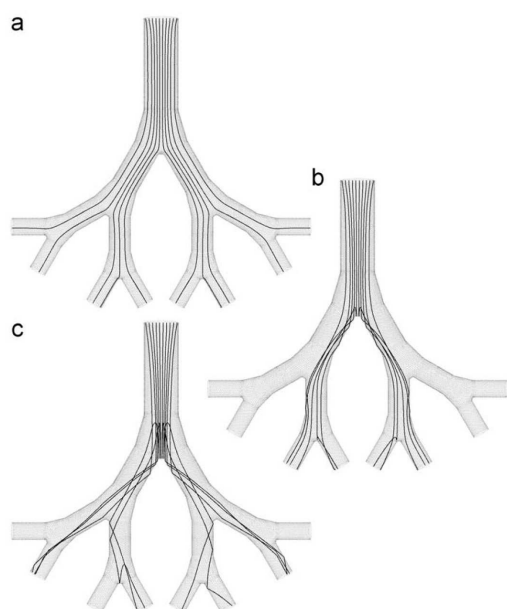


Fig. 3. Typical particle trajectories for different Stokes numbers $St = 5.9 \times 10^{-6}$ (a), $St = 0.24$ (b) and $St = 3.78$ (c) in a ramified structure with $\alpha = 60^\circ$ and $\phi = 0^\circ$. In each case, the trajectories of 10 particle streams released from initial positions equally spaced along the entrance diameter of the first tube are shown. The particles with smallest Stokes (a) behave as tracer, whereas the particles with intermediate Stokes (b) leave the structure preferentially through the central branches. For large enough Stokes (c), collisions affect particle trajectories in such a way that particle concentration is, again, more uniformly distributed over peripheral and central exit branches.

h , which defines the ratio between the diameters of daughter and parent branches at each bifurcation.

Azimuthal angle, ϕ , between successive planes of bifurcation—Particle segregation appears to be more efficient when flow asymmetry is induced in the system, e.g. by changing the azimuthal angle ϕ between successive bifurcation planes to a value different from 90° . Fig. 4a shows the percentual number, n_c , of particles leaving the structure through the central branches as function of the Stokes number, for different values of ϕ . As we can see in the main plot of Fig. 4b, the maximum value of n_c decreases monotonically with ϕ , achieving the minimum value at $\phi = 90^\circ$. This behaviour can be understood by noting that the larger the azimuthal angle ϕ , the closer the central exit branches get to the peripheral ones (cf. Fig. 5), and the more uniform, thus, the distribution of particles leaving the structure through the exit branches. The highest efficiency of the separator is obtained when $\phi = 0^\circ$, i.e. all branches are disposed on the same plane. Again, as a result of the collisions with the tube walls, particle segregation appears to be lost for particles with $St \geq 1$ (Fig. 4a).

We see in the inset of Fig. 4b that the Stokes St_{max} at which segregation achieves a maximum is essentially independent of the azimuthal angle between the planes of bifurcation for $\phi < 30^\circ$. However, as ϕ increases, St_{max} is shifted to lower values. This happens because as the azimuthal angle becomes larger, the inclination of the peripheral exit branches relative to the first tube (first generation) decreases (cf. Fig. 5). It becomes, thus, easier for particles with decreasingly low values of Stokes numbers to leave

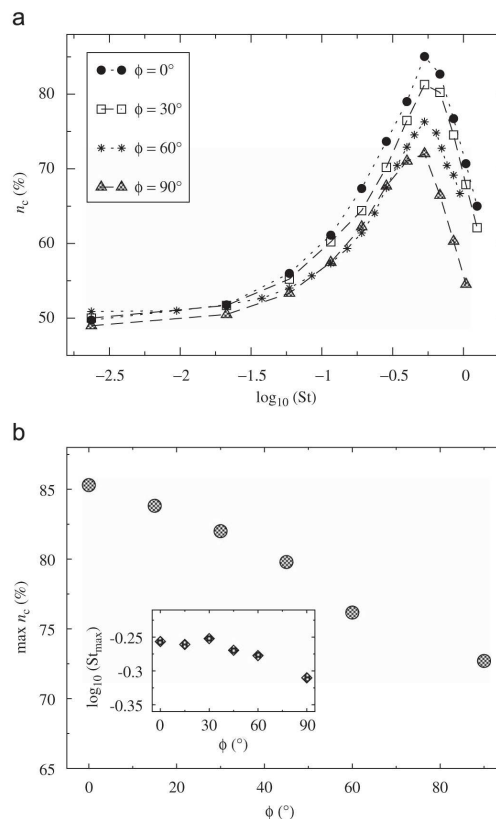


Fig. 4. (a) Percentual number, n_c , of particles leaving the structure through the four central branches, as function of the Stokes number, for different values of ϕ , the azimuthal angle between successive planes of bifurcation. In the calculations, the nominal values for the branching angle, $\alpha = 60^\circ$, and for the homothety factor, $h \approx 0.79$, were taken. (b) Main plot: the maximum value of n_c for each curve in (a) is shown as function of ϕ . The inset shows the dependence of the Stokes number St_{max} , for which n_c is maximum, on ϕ .

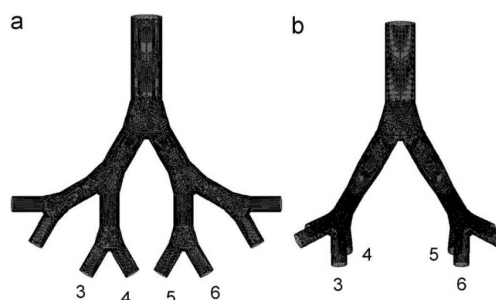


Fig. 5. Branched geometry with four generations obtained with (a) $\phi = 0^\circ$ and (b) $\phi = 90^\circ$, whereas $\alpha = 60^\circ$ and $h = 0.79$ in both cases. The four central branches 3–6 are identified for each case in the figure.

1404

T.F. Vasconcelos et al. / Chemical Engineering Science 65 (2010) 1400–1406

the structure through the peripheric branches, since particle–wall collisions compete to deviate particle trajectories from the path determined by inertia alone. At $\phi = 90^\circ$, the number of particles leaving through the peripheric branches is maximum (around 25% as seen from Fig. 4 b), but also the minimum value of St_{max} is achieved.

Branching angle, α —Fig. 6a shows the percentual number, n_c , of particles that leave the ramified structure through the four central exit branches, as function of the Stokes number, for different values of the branching angle α . For each curve n_c vs St , a maximum value of n_c is achieved at a Stokes number St_{max} , as can be seen in the figure. In the inset and in the main plot of Fig. 6 b we see the dependence of St_{max} , respectively, of the maximum value of n_c , on α . For low values of α (around 60° or less) the efficiency of the segregation increases rapidly with α since an increasing number of particles with higher inertia flow into the central branches as the inclination of the peripheric exit branches with relation to the first generation cylinder becomes larger. When α reaches a value of $\approx 60^\circ$, however, the maximum of n_c

achieves a saturation value of around 75%. Large branching angles imply particle motion into the peripheric branches be so adverse that, in spite of the collisions with the tube walls, which occur for Stokes numbers larger than St_{max} , the most segregated particles (St_{max}) leave the structure through the central branches, independently of α .

The onset for particle–wall collisions within the ramified structure is anticipated by increasing the branching angle α . For very low α values, only particles with high inertia collide with the walls of the daughter branches after having crossed the flow streamlines at the first bifurcation. However, as α increases, collisions affect the trajectories of particles with decreasingly lower values of St , which explains the decrease of St_{max} with α seen in the inset of Fig. 6 b. When α becomes large enough, St_{max} reaches a constant value around 0.34 independent of α .

Homothety factor, h —Fig. 7a shows the behaviour of n_c as function of the Stokes number for different values of the homothety factor h , i.e. the ratio between the diameters of the daughter and parent branches. Fig. 7 b shows that both the

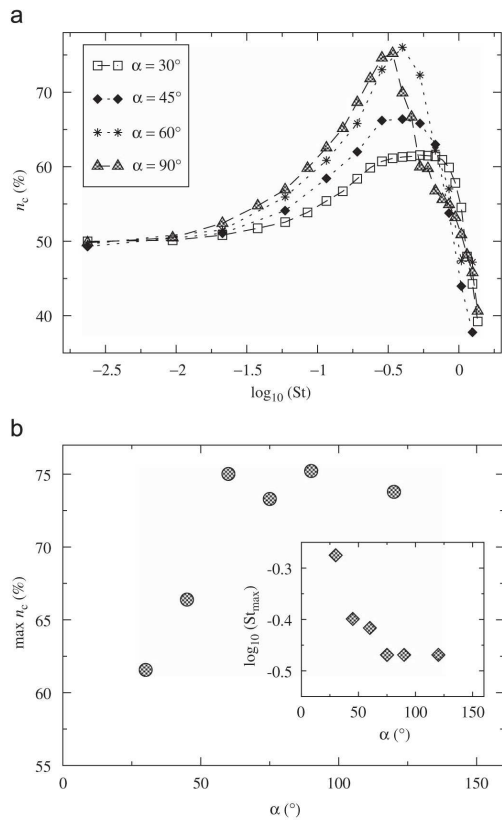


Fig. 6. (a) Percentual number, n_c , of particles leaving the structure through the four central branches, as function of the Stokes number, for different values of α , the branching angle. In the calculations, the nominal values for the azimuthal angle between successive planes of bifurcation, $\phi = 90^\circ$, and for the homothety factor, $h \approx 0.79$, were taken. (b) Main plot: the maximum value of n_c for each curve in (a) is shown as function of α . The inset shows the dependence of the Stokes number St_{max} , for which n_c is maximum, on α .

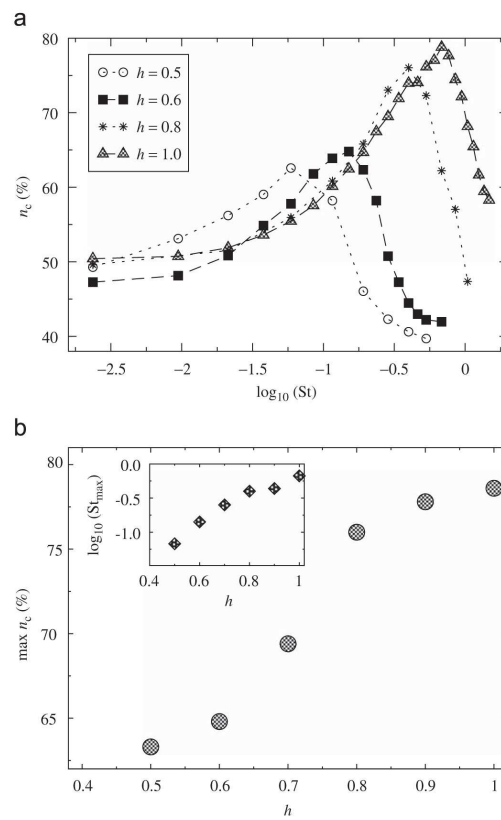


Fig. 7. (a) Percentual number, n_c , of particles leaving the structure through the four central branches, as function of the Stokes number, for different values of h , the homothety factor. In the calculations, the nominal values for the branching angle, $\alpha = 60^\circ$, and for the azimuthal angle between successive planes of bifurcation, $\phi = 90^\circ$, were taken. (b) Main plot: the maximum value of n_c for each curve in (a) is shown as function of h . The inset shows the dependence of the Stokes number St_{max} , for which n_c is maximum, on h .

maximum value of n_c and the Stokes number St_{\max} for which segregation is maximum increase monotonically with h . In fact, the longer the daughter branches, the more time particles have to, after having colliding with the walls, adjust their path to the flow streamlines. In this manner, as the length of the daughter branches increases, particle–wall collisions affect only the trajectories of particles with larger Stokes numbers, and St_{\max} , thus, increases. Further, the maximum of n_c also increases with the length of the daughter branches, since particles with low or moderate inertia have more time to cross the flow streamlines within a daughter cylinder and reach, at each subsequent bifurcation, the respective central branch.

The homothety factor appears to be the geometrical parameter of the ramified structure which is most relevant for controlling the Stokes number corresponding to the maximum segregation. As can be seen in the inset of Fig. 7 b, changing h from 0.5 to 1.0 leads to a variation of St_{\max} by a factor of 10. In comparison, by changing ϕ and α , St_{\max} can be varied only by a factor smaller than 2 (Figs. 4b and 6b). A recipe for segregating particles using the device presented in this work appears, therefore, from the results of the calculations: the first thing to do is to adjust h in order to determine the Stokes number St_{\max} of the particles for which maximum segregation is achieved (cf., inset of Fig. 7 b); next, α and ϕ can be fine tuned in order to enhance the efficiency of the segregation (maximum of n_c , cf. main plots of Figs. 4b and 6b). Finally, Fig. 4 b shows that fine adjustments in the segregation efficiency with practically no change in St_{\max} can be achieved by changing the azimuthal angle ϕ within a range of low values.

In relation to other size particle separation techniques which employ diverse kinds of external fields (Pamme, 2007), the separator proposed in the present work has one important advantage, since the separation is accomplished by exploring only the inertial characteristics of particles with different Stokes within an advected flow. In fact, the experimental feasibility of such type of conceptual approach for particle separation purely based on hydrodynamic effects has been demonstrated recently by means of successful experiments using diverse kinds of geometries (Huang et al., 2004; Yamada et al., 2004; Takagi et al., 2005). Because the physical processes involved in the separation technique do not depend on the nature of fluid and particles, such kind of technique can be applied both for the size analysis and for the size separation of different kinds of particles, such as cells, drugs, gels or biological molecules, as demonstrated experimentally (Huang et al., 2004; Yamada et al., 2004; Takagi et al., 2005).

Indeed, the validity of the results presented here is constrained to the range of small particle sizes compared to the diameters of the tubes composing the ramified structure. The model for particle transport adopts the assumption that the presence of the particles does not alter the local flow profile, a condition valid in the limit of small particles. In the future the model should be improved by also accounting for the modification of the flow velocity due to the exchange of momentum between particles and fluid, such as, for example, in the transport model by Almeida et al. (2008). Under this framework it would be interesting to consider a mixture of particles with a particle size distribution in order to model practical situations where the particle size is polydisperse. In the range of large particle sizes, the effects of particle–particle collisions play an important role for particle trajectories and must be, thus, incorporated into the model. Moreover, a further relevant mechanism for transport within biological branched systems is the capture of particles at the walls, which decreases the effective diameter of the branches modifying the flow profile locally (Comer et al., 2001a,b; Imdakm and Sahimi, 1987; Zhang

et al., 2002). Hereby, a more complex model would be required, which iteratively updates the flow profile within the separation device.

4. Conclusions

A new kind of inertial particle separator has been presented, which can be used in order to separate particles of different Stokes numbers without requiring outer fields. The separator consists of a branched geometry, which resembles the structure of the lung, through which particles in suspension are transported by a laminar flow. Particles are separated at the bifurcations of the ramified structure according to their inertia. This kind of separator offers, thus, a huge advantage since particle trajectories are chosen in a deterministic manner. We investigated, by means of three-dimensional simulations, how the efficiency of the separation is controlled by the main parameters of the geometry: the ratio between the diameters of the daughter and parent tubes (the homothety factor h), as well as the branching and the azimuthal angles, α and ϕ , respectively. With the help of the results presented in Figs. 4, 6 and 7, it is possible to adjust the parameters of the geometry in order to control the Stokes number St_{\max} of the maximum segregation as well as the efficiency of the separation. Our calculations show that the major influence on the value of St_{\max} is exerted by the value of the homothety factor h . This finding suggests that in practical applications, the homothety factor should be the first geometric parameter to be adjusted, whereas α and ϕ can be, next, fine tuned in order to control the efficiency of the segregation. It would be interesting to perform experiments using a branched structure as the one proposed in the present work in order to confirm the findings of our numerical simulations.

Acknowledgements

This research was supported in part by CAPES, CNPq, FUNCAP and FINEP (Brazilian agencies). We acknowledge M. Filoche, B. Sapoval and A.D. Araújo for fruitful discussions and helpful comments.

References

- Aldaeus, F., Lin, Y., Amberg, G., Roeraade, J., 2006. Multi-step dielectrophoresis for separation of particles. *Journal of Chromatography A* 1131, 261–266.
- Almeida, M.P., Andrade Jr., J.S., Buldyrev, S.V., Cavalcante, F.S.A., Stanley, H.E., Suki, B., 1999. Fluid flow through ramified structures. *Physical Review E* 60, 5486–5494.
- Almeida, M.P., Parteli, E.J.R., Andrade Jr., J.S., Herrmann, H.J., 2008. Giant saltation on Mars. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 105, 6222–6226.
- Andrade Jr., J.S., Alencar, A.M., Almeida, M.P., Mendes Filho, J., Buldyrev, S.V., Zapperi, S., Stanley, H.E., Suki, B., 1998. Asymmetric flow in symmetric branched structures. *Physical Review Letters* 81, 926–929.
- Chang, S., Cho, Y.-H., 2008. A continuous size-dependent particle separator using a negative dielectrophoretic virtual pillar array. *Lab on a Chip* 8, 1930–1936.
- Chmela, E., Tijssen, R., 2002. A chip system for size separation of macromolecules and particles by hydrodynamic chromatography. *Analytical Chemistry* 74, 3470–3475.
- Comer, J.K., Kleinstreuer, C., Kim, C.S., 2001a. Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. Part 1. Air flow fields. *The Journal of Fluid Mechanics* 435, 25–54.
- Comer, J.K., Kleinstreuer, C., Kim, C.S., 2001b. Flow structures and particle deposition patterns in double-bifurcation airway models. Part 2. Aerosol transport and deposition. *The Journal of Fluid Mechanics* 435, 55–80.
- Coppens, M.-O., van Ommen, J.R., 2003. Structuring chaotic fluidized beds. *Chemical Engineering Journal* 96, 117–124.
- Di Carlo, D., Edd, J.F., Irimia, D., Tompkins, R.G., Toner, M., 2008. Equilibrium separation and filtration of particles using differential inertial focusing. *Analytical Chemistry* 80, 2204–2211.
- Di Marzio, E.A., Guttman, C.M., 1970. Separation by flow. *Macromolecules* 3, 131–146.
- Edwards, T.L., Gale, B.K., Frazier, B., 2002. A microfabricated thermal field-flow fractionation system. *Analytical Chemistry* 74, 1211–1216.
- Fluent Inc., 2003, 2005. FLUENT 6.1, 6.2 User's Guide.

Figura D.12: Página 6 do artigo (Vas10)

1406

T.F. Vasconcelos et al. / Chemical Engineering Science 65 (2010) 1400–1406

- Fraunhofer, W., Winter, G., 2004. The use of asymmetrical flow field-flow fractionation in pharmaceuticals and biopharmaceuticals. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics* 58, 369–383.
- Giddings, J.C., 1985. System based on split-flow lateral-transport thin (SPLIT) separation cells for rapid and continuous particle fractionation. *Separation Science and Technology* 20, 749–768.
- Giddings, J.C., 1993. Field-flow fractionation: analysis of macromolecular, colloidal, and particulate materials. *Science* 260, 1456–1465.
- Gimbert, L.J., Andrew, K.N., Haygarth, P.M., Worsfold, P.J., 2003. Environmental applications of flow field-flow fractionation (FIFFF). *Trends in Analytical Chemistry* 22, 615–633.
- Hawkins, B.G., Ezekiel Smith, A., Syed, Y.A., Kirby, B.J., 2007. Continuous-flow particle separation by 3D insulative dielectrophoresis using coherently shaped, dc-biased, ac electric fields. *Analytical Chemistry* 79, 7291–7300.
- Huang, L.R., Cox, E.C., Austin, R.H., Sturm, J.C., 2004. Continuous particle separation through deterministic lateral displacement. *Science* 304, 987–990.
- Imdakm, A.O., Sahimi, M., 1987. Transport of large particles in flow through porous media. *Physical Review A* 36, 5304–5309.
- Kang, Y., Cetin, B., Wu, Z., Li, D., 2009. Continuous particle separation with localized AC-dielectrophoresis using embedded electrodes and an insulating hurdle. *Electrochimica Acta* 54, 1715–1720.
- Kersaudy-Kerhoas, M., Dhariwal, R., Desmulliez, M.P.Y., 2007. Recent advances in microparticle continuous separation. *IET Nanobiotechnology* 2, 1–13.
- Kleijn van Willigen, F., Christensen, D., van Ommen, J.R., Coppens, M.-O., 2005. Imposing dynamic structures on fluidised beds. *Catalysis Today* 105, 560–568.
- Lin, C.-H., Lee, C.-Y., Tsai, C.-H., Fu, L.-M., 2009. Novel continuous particle sorting in microfluidic chip utilizing cascaded squeeze effect. *Microfluid Nanofluid* 7, 499–508.
- Mauroy, B., Filoche, M., Andrade Jr., J.S., Sapoval, B., 2003. Interplay between geometry and flow distribution in an airway tree. *Physical Review Letters* 90, 148101.
- Morsi, S.A., Alexander, A.J., 1972. An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *The Journal of Fluid Mechanics* 55, 193–208.
- Ookawara, S., Higashi, R., Street, D., Ogawa, K., 2004. Feasibility study on concentration of slurry and classification of contained particles by microchannel. *Chemical Engineering Journal* 101, 171–178.
- Pamme, N., 2007. Continuous flow separations in microfluidic devices. *Lab on a Chip* 7, 1644–1659.
- Patankar, S.V., 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere, Washington, DC.
- Sahimi, M., 1995. *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock*. VCH, Weinheim.
- Sommerfeld, M., Huber, N., 1999. Experimental analysis and modelling of particle-wall collisions. *International Journal of Multiphase Flow* 25, 1457–1489.
- Takagi, J., Yamada, M., Yasuda, M., Seki, M., 2005. Continuous particle separation in a microchannel having asymmetrically arranged multiple branches. *Lab on a Chip* 5, 778–784.
- Vastamäki, P., Jussila, M., Riekkola, M.-L., 2005. Continuous two-dimensional field-flow fractionation: a novel technique for continuous separation and collection of macromolecules and particles. *Analyst* 130, 427–432.
- Watarai, H., Suwa, M., Iguni, Y., 2004. Magnetophoresis and electromagnetophoresis of microparticles in liquids. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 378, 1693–1699.
- Weiss, B., Hilber, W., Gittler, P., Jakoby, B., 2008. Particle separation in alternating-current electro-osmotic micropumps using field-flow fractionation. *Microfluid Nanofluid* 7, 191–203.
- Wickramasinghe, S.R., Lin, W.-C., Dandy, D.S., 2001. Separation of different sized particles by inertial migration. *Biotechnology Letters* 23, 1417–1422.
- Wu, Z., Liu, A.Q., Hjort, K., 2007. Microfluidic continuous particle/cell separation via electroosmotic-flow-tuned hydrodynamic spreading. *Journal of Micromechanics and Microengineering* 17, 1992–1999.
- Yamada, M., Nakashima, M., Seki, M., 2004. Pinched flow fractionation: continuous size separation of particles utilizing a laminar flow profile in a pinched microchannel. *Analytical Chemistry* 76, 5465–5471.
- Zhang, Z., Kleinstreuer, C., Kim, C.S., 2002. Micro-particle transport and deposition in a human oral airway model. *Aerosol Science* 33, 1635–1652.

Figura D.13: Página 7 do artigo (Vas10)

Non-Newtonian Fluid Flow through Three-Dimensional Disordered Porous Media

Apiano F. Morais,¹ Hansjoerg Seybold,² Hans J. Herrmann,^{1,2} and José S. Andrade, Jr.^{1,2}

¹*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil*

²*Computational Physics, IJB, Schafmattstrasse 6, IJB, ETH, 8093 Zurich, Switzerland*

(Received 25 May 2009; published 5 November 2009)

We investigate the flow of various non-Newtonian fluids through three-dimensional disordered porous media by direct numerical simulation of momentum transport and continuity equations. Remarkably, our results for power-law (PL) fluids indicate that the flow, when quantified in terms of a properly modified permeability-like index and Reynolds number, can be successfully described by a single (universal) curve over a broad range of Reynolds conditions and power-law exponents. We also study the flow behavior of Bingham fluids described in terms of the Herschel-Bulkley model. In this case, our simulations reveal that the interplay of (i) the disordered geometry of the pore space, (ii) the fluid rheological properties, and (iii) the inertial effects on the flow is responsible for a substantial enhancement of the macroscopic hydraulic conductance of the system at intermediate Reynolds conditions.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.194502

PACS numbers: 47.56.+r, 47.11.-j, 47.50.-d, 64.60.ah

The research on flow through porous media has great relevance for many problems of practical interest in several fields, including physics, medicine, biology, chemical and mechanical engineering, and geology [1–3]. The disordered aspect of most natural and artificial porous materials is directly responsible for the presence of local flow heterogeneities that can dramatically affect the behavior, for example, of the transport of heat and mass through the system. Under this framework, the standard approach to investigate single-phase flow in porous media is to apply Darcy's law [1–3], which simply assumes that a global permeability k relates the average fluid velocity u_0 in the field with the pressure drop Δp measured across the system,

$$u_0 = -\frac{k}{\mu} \frac{\Delta p}{L}, \quad (1)$$

where L is the length of the sample in flow direction and μ is the viscosity of the fluid. As a macroscopic index, the permeability reflects the relation between the complex pore space morphology and fluid flow.

In previous studies [4–10], detailed models of pore geometry have been used in combination with computational fluid dynamics simulations to predict permeability coefficients and validate classical semiempirical correlations for real porous materials. In principle, the original concept of permeability as a global index for flow in porous media, however, is only applicable in the limit of Stokesian flow (linear). Strictly speaking, the validity of Darcy's law should be restricted to (i) Newtonian fluids and (ii) flows under viscous conditions, i.e., flows at very-low-Reynolds-number conditions, defined usually as $\text{Re} \equiv \rho u_0 d_p / \mu$, where ρ is the density of the fluid and d_p is the grain diameter. The departure from Darcy's law due to the contribution of inertial forces (convection) to the flow of Newtonian fluids has been the subject of several studies in the past [10–12]. In particular, it has been experimen-

tally and numerically observed that the breakdown of condition (ii) can take place even under laminar flow conditions, i.e., before fully developed turbulence effects become relevant to momentum transport.

In order to understand the physics of important problems like blood flow through the kidney [13] or oil flow through porous rocks [14], for example, one has to overcome the restriction (i) mentioned above by explicitly considering the nonlinear behavior of these fluids under shear, namely, their specific non-Newtonian properties. Although these fluids have been known for a long time, technological applications which directly make use of their anomalous rheological behavior have come into focus only recently. For instance, shear-thinning solvents are present in dropless paints [15], and shear-thickening fluids are currently used as active dampers and components of enhanced body armors [16]. While the physical properties of Newtonian fluid flow through irregular media are theoretically well understood and have been confirmed by many experiments, non-Newtonian systems [17–19] lack a generalized description. In this Letter, we investigate the flow of non-Newtonian fluids through three-dimensional porous media by direct numerical simulation of momentum and continuity equations. To the best of our knowledge, this is the first time that nonlinear effects coming from both rheological and inertial aspects of the fluid flow are considered simultaneously in the framework of a disordered three-dimensional pore space.

The porous medium studied here is a three-dimensional realization of the Swiss-Cheese model [20]. Spherical particles (solid obstacles) of diameter d_p are sequentially and randomly placed in a box of length L in the x direction and square cross section of area A . Particle overlap is allowed and the allocation process continues up to the point in which a prescribed value for the porosity (void fraction) ε is achieved. The mathematical formulation for

the fluid mechanics in the interstitial pore space is based on the assumptions that we have a continuum and incompressible fluid flowing under steady-state and isothermal conditions. Thus, the momentum and mass conservation equations reduce to

$$\rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \nabla \mathcal{T} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (3)$$

where \vec{u} and p are the velocity and pressure fields, respectively, and \mathcal{T} is the so-called deviatoric stress tensor given by

$$\mathcal{T}_{ij} = 2\mu \dot{s}_{ij}, \quad (4)$$

where $\dot{s}_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})$ is the strain rate tensor. The variable μ is the dynamic viscosity, for which a constitutive relation must be provided in order to describe the specific non-Newtonian behavior of the fluid. Here, we investigate the flow of two different types of rheologies, namely, the cross-power-law fluid and the Bingham fluid. The constitutive relation for a PL fluid can be written as

$$\mu = K \dot{\gamma}^{n-1}, \quad \mu_1 < \mu < \mu_2, \quad (5)$$

where the constants μ_1 and μ_2 are the lower and upper cutoffs, $\dot{\gamma} \equiv \sqrt{\frac{1}{2} \dot{s}_{ij} \dot{s}_{ij}}$ is the effective strain rate, K is the consistency index, and n is the power-law exponent. For $n = 1$, we recover the behavior of a Newtonian fluid. Fluids with $n > 1$ are shear-thickening, while shear-thinning behavior corresponds to $n < 1$.

In the case of Bingham fluids, the rheology is commonly approximated by the Herschel-Bulkley model [21,22] which combines the effects of Bingham and power-law behavior for a fluid. For low strain rates, $\dot{\gamma} < \tau_0/\mu_0$, the material acts as a very viscous fluid with viscosity μ_0 . As the strain rate increases and the yield stress threshold τ_0 is surpassed, the fluid behavior is described by

$$\mu = \frac{\tau_0 + K_B[\dot{\gamma}^n - (\tau_0/\mu_0)^n]}{\dot{\gamma}}, \quad (6)$$

where K_B is the consistency factor and n is the power-law index. Here, we restrict our simulations to the case of Bingham fluids $n = 1$; i.e., the fluid is still Newtonian at large strain rates, with a viscosity $\mu = K_B$.

Nonslip boundary conditions are applied along the entire solid-fluid interface and end effects on the flow field, which become significant at high Reynolds numbers, are minimized by attaching ancillary zones at the inlet and outlet of the two opposite faces in the direction of the flow (i.e., x direction). At the inlet, a constant inflow velocity in the normal direction to the boundary is specified, whereas at the outlet, we impose gradientless boundary condition. Finally, the four remaining faces are considered to be solid walls.

For a given realization of the porous medium and a given set of flow and constitutive parameters of the fluid, the

numerical solution of the partial differential Eqs. (2) for the local velocity and pressure fields in the fluid phase of the void space, head, and recovery zones is obtained by discretization using the control volume finite-difference technique [23]. An unstructured grid with up to 3×10^6 tetrahedral cells is adapted to the geometry of the porous medium. For comparison, entirely consistent numerical solutions have also been calculated with a finite-volume scheme [24]. Finally, from the area-averaged pressures at the inlet and outlet positions, the overall pressure drop can be readily calculated.

In Fig. 1, we show a three-dimensional plot of a typical realization of the porous medium through which a power-law fluid flows. Clearly, the complex geometry of the pore space induces preferential channels on the flow whose localization and strength are significantly dependent on the rheological properties of the fluid as well as on the imposed inlet-outlet boundary conditions. For PL fluids, this intricate interplay between geometry and flow can nevertheless be macroscopically quantified in terms of an analogous to a permeability index, namely, a hydraulic conductivity, defined in terms of Darcy's law as $k_D \equiv K_1 u_0 L / \Delta p$, where K_1 is a reference viscosity taken as the consistency index for $n = 1$. As shown in the inset of Fig. 2, the general behavior of k_D is qualitatively similar for different values of the exponent n . Moreover, it follows the characteristic trend of a simple Newtonian fluid ($n = 1$), namely, that k_D remains essentially invariant for low Re values up to a crossover point Re_x where it starts to decrease due to the onset of nonlinear convective effects on the flow [7,10,25]. Quantitatively, however, we observe that both the upper limit for k_D and Re_x are strongly dependent on n .

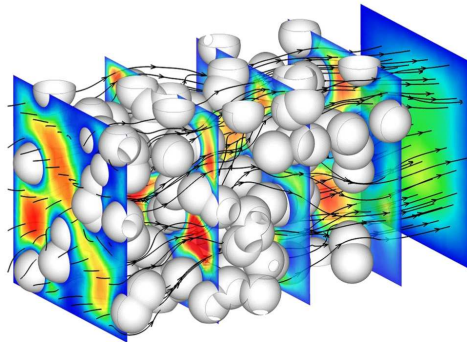


FIG. 1 (color online). Non-Newtonian (power-law) fluid flow through a typical realization of the Swiss-Cheese pore space ($\epsilon = 0.7$). The fluid is pushed from left to right. The solid lines with arrows correspond to trajectories of tracer particles released in the flow, while the contour plots give the velocity magnitude at different cross sections of the porous medium. Their colors ranging from blue (dark) to red (light) correspond to low and high velocity magnitudes, respectively.

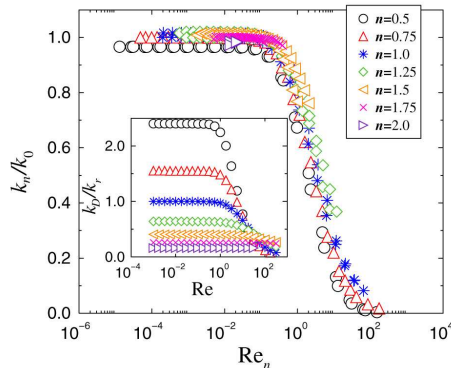


FIG. 2 (color online). Flow of power-law fluids through three-dimensional porous media. The inset shows the variation of the ratio k_D/k_r with Reynolds number $Re \equiv \rho u_0 d_p / K_1$ for different values of the power-law exponent n and $\varepsilon = 0.5$. The resulting data collapse presented in the main plot confirms the adequacy of our rescaling procedure in terms of the modified permeability index k_n/k_0 and the modified Reynolds number Re_n (see text).

Darcy’s law has been generalized to power-law fluids in previous studies [26–28]. Here, we define an hydraulic conductivity as

$$k_n \equiv u_0 K \left(\frac{\Delta p}{L} \right)^{-1/n}. \quad (7)$$

As shown in Fig. 3, this generalized index when calculated at low Reynolds numbers, namely k_0 , can be consistently correlated with intrinsic properties of the fluid and porous medium by means of the following semiempirical expression [26,28]:

$$k_0 = \frac{12}{25} \frac{n(75k_r)^{1/n}}{3n+1} \frac{d_e^{(n-1)/n}}{3^{(n+1)/n}} \varepsilon^{2(1-n)/n} K^{(n-1)/n}, \quad (8)$$

where d_e is the only fitting parameter corresponding to an average effective pore diameter, namely, the average pore size (in units of d_p) of the system calculated as if it were a packed bed consisting of identical spheres [26,29]. The parameter k_r corresponds to the value of k_D calculated for a Newtonian fluid ($n = 1$) under very-low-Reynolds-number conditions, i.e., the porous medium permeability according to Darcy’s law.

In order to substantiate the non-Newtonian aspect of the fluid, it is also necessary to redefine the Reynolds number as [29]

$$Re_n \equiv \frac{k_0^n \rho u_0^{2-n}}{2K^n d_p} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}, \quad (9)$$

where the term $(1-\varepsilon)/\varepsilon^3$ has been adapted from the classical Kozeny-Carman equation [1]. It is worth mentioning that Eq. (9) breaks down close to the critical percolation porosity [30].

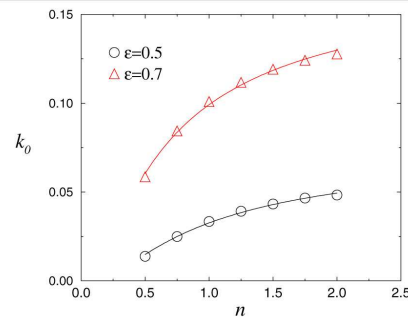


FIG. 3 (color online). Dependence of the hydraulic conductivity at very-low-Reynolds-number conditions k_0 on the power-law exponent n for two different values of porosity ε . The solid lines are the least-squares fits to the simulation data using Eq. (8) with $d_e/d_p = 0.35$ and 1.58 , for $\varepsilon = 0.5$ and 0.7 , respectively.

In the main plot of Fig. 2, we show that all data sets of k_n/k_0 against Re_n , with k_0 obtained from Eq. (8), collapse onto a single curve for the entire range of (modified) Reynolds numbers, independent of the numerical values of ε and n . Despite the details of the model porous medium geometry employed here as well as the complexity of the fluid rheology, this remarkable invariance of behavior suggests that the resulting flow properties of the system remain in the same universality class of Newtonian fluid flow in disordered porous media.

Next, we present results for flow through three-dimensional porous media of Bingham fluids with rheology given approximately by the Herschel-Bulkley model Eq. (6). The proper way to quantify inertial and viscous forces in this case is to define the Reynolds number as $Re_B \equiv \rho u_0 d_p / K_B$. In Fig. 4, we show that the linear hydraulic conductivity, defined as $k_B \equiv K_B u_0 L / \Delta p$, remains constant up to a certain crossover that is proportional to the threshold τ_0 , $Re_\times \sim \tau_0$. Below this crossover, since the fluid has Newtonian behavior with high viscosity μ_0 everywhere in the pore space, the flow can be macroscopically described by Darcy’s law. Above this crossover, the presence of low and high strain rates zones in the flow leads to a nonuniform spatial distribution of fluid viscosity, therefore increasing the overall permeability index k_B of the system. This behavior persists up to the point in which inertial forces become relevant. While the specific fluid rheology investigated here tends to enhance the flow at high Re_B , the effect of inertia is to reduce the permeability index under the same conditions [7,10]. As a result of this competition, a maximum hydraulic conductivity can be observed at an intermediate value of Re_B that is also dependent on the threshold τ_0 . As shown in Fig. 4, this effect is better illustrated when we observe contour plots of the local ratio $|\bar{u}|/|\nabla p|$ calculated at the middle cross section of the porous medium. To the best of our knowledge, this condition of “enhanced flow” through dis-

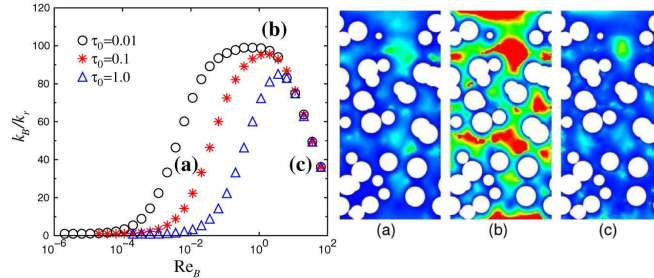


FIG. 4 (color online). Flow of Bingham fluids (Herschel-Bulkley model) through three-dimensional porous media. The plot shows the variation of the ratio k_B/k_r with Reynolds number Re_B for different values of the parameter τ_0 , as defined in Eq. (6). Here, k_r corresponds to the lower limit of k_B at very-low-Reynolds-number conditions. The presence of maxima in all cases is a distinctive result of the competition between rheology and convective nonlinearities. The contour plots in (a), (b), and (c) show the spatial variation of the magnitude of the local ratio $|\bar{u}|/|\nabla p|$ calculated on the cross section through the middle of the porous medium parallel to the flow, for $\tau = 0.1$ and $Re_B = 3.5 \times 10^{-2}$, 1.7 and 35, respectively. Their colors ranging from blue (dark) to red (light) correspond to low and high values of $|\bar{u}|/|\nabla p|$, respectively.

ordered porous media represents a novel regime of momentum transport that could have potential applications in practical problems, e.g., chemical reactors, chromatographic columns, and switches for flow. Finally, at sufficiently large values of Re_B , the viscosity of the fluid is uniform and therefore the local permeabilities become all the same, regardless of the value of Re_B and τ_0 . In this situation, all curves of k_B collapse.

Summarizing, in spite of the nonlinear nature of the fluid rheology and the complex geometry of the interstitial pore volume, in the case of power-law fluids, we have shown the remarkable fact that the flow behavior can still be quantified in terms of a universal curve extending over a broad range of Reynolds conditions and power-law exponents. Our results for Bingham fluids are even more striking. There, the pore space geometry, fluid rheology, and inertia can combine to generate a particular condition of “enhanced transport” which should be found in experiments.

We thank CNPq, CAPES, FUNCAP, FINEP, Petrobras, the National Institute of Science and Technology for Complex Systems for financial support, and the Swiss National Science Foundation (SNF) under Grant No. 116052 for financial support.

[1] F. A. L. Dullien, *Porous Media-Fluid Transport and Pore Structure* (Academic, New York, 1979).
 [2] P. M. Adler, *Porous Media: Geometry and Transport* (Butterworth-Heinemann, Stoneham, MA, 1992).
 [3] M. Sahimi, *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock* (VCH, Boston, 1995).
 [4] A. Cancelliere *et al.*, *Phys. Fluids A* **2**, 2085 (1990).
 [5] S. Kostek, L. M. Schwartz, and D. L. Johnson, *Phys. Rev. B* **45**, 186 (1992).
 [6] N. S. Martys, S. Torquato, and D. P. Bentz, *Phys. Rev. E* **50**, 403 (1994).
 [7] J. S. Andrade *et al.*, *Phys. Rev. E* **51**, 5725 (1995).

[8] A. Koponen, M. Kataja, and J. Timonen, *Phys. Rev. E* **56**, 3319 (1997).
 [9] S. Rojas and J. Koplik, *Phys. Rev. E* **58**, 4776 (1998).
 [10] J. S. Andrade *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5249 (1999).
 [11] D. A. Edwards *et al.*, *Phys. Fluids* **2**, 45 (1990).
 [12] D. R. Koch and A. J. C. Ladd, *J. Fluid Mech.* **349**, 31 (1997).
 [13] D. L. Mattson *et al.*, *Am. J. Physiol., Regul. Integr. Comp. Physiol.* **264**, 578 (1993).
 [14] W. D. McCain, *The Properties of Petroleum Fluid* (Pennwel, Tulsa, 1990).
 [15] A. Maestro, C. Gonzalez, and J. M. Gutierrez, *J. Rheol.* **46**, 1445 (2002).
 [16] M. J. Decker *et al.*, *Compos. Sci. Technol.* **67**, 565 (2007).
 [17] A. B. Metzner, *Adv. Chem. Eng.* **1**, 77 (1956).
 [18] M. Sahimi, *AIChE J.* **39**, 369 (1993).
 [19] R. P. Chhabra, J. Comiti, and I. Machac, *Chem. Eng. Sci.* **56**, 1 (2001).
 [20] C. D. Lorenz and R. M. Ziff, *J. Chem. Phys.* **114**, 3659 (2001).
 [21] W. H. Herschel and R. Bulkley, *Kolloid Z.* **39**, 291 (1926).
 [22] H. S. Tang and D. M. Kalyon, *Rheol. Acta* **43**, 80 (2004).
 [23] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* (Hemisphere, Washington DC, 1980); The FLUENT (trademark of FLUENT Inc.) fluid dynamics analysis package has been used in this study.
 [24] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby, *Comput. Phys.* **12**, 620 (1998); The OPENFOAM® (Open Field Operation and Manipulation) software has been used in this study.
 [25] J. S. Andrade *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 194101 (2007).
 [26] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena* (Wiley, New York, 2007).
 [27] R. G. Larson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **20**, 132 (1981).
 [28] C. B. Shah and Y. C. Yortsos, *AIChE J.* **41**, 1099 (1995).
 [29] R. H. Christopher and S. Middleman, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **4**, 422 (1965).
 [30] M. Sahimi, *Applications of Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, 1994).