Análise do módulo de cisalhamento de modelo constitutivo de materiais tixotrópicos

Thales Augusto Barbosa Pinto Silva e Hilbeth Parente Azikri de Deus
Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Núcleo de Mecânica Aplicada e Teórica
Curitiba, Brasil
thales.augusto29@gmail.com e azikri@utfpr.edu.br

***Resumo*—Materiais tixotrópicos possuem elevada importância industrial, tendo em vista a vasta gama de aplicações em diferentes setores (químico, biomédico, alimentício, entre outros). A modelagem destes materiais apresenta desafios, devido ao seu comportamento reológico incomum: possuem dependência temporal de sua microestrutura e mudança da viscosidade reversível. De maneira geral, os modelos são constituídos por um sistema acoplado de duas equações diferenciais: a equação constitutiva (associada a modelos viscoelásticos) e a equação de taxa (que quantifica a evolução microestrutural do material). Dentre modelos discutidos na literatura cujas propriedades são dependentes da microestrutura, um modelo considerou, no princípio dinâmico que origina a equação constitutiva, a dependência temporal do módulo de cisalhamento e do coeficiente de viscosidade. O modelo foi fundamentado a partir do modelo viscoelástico de Jeffreys e na teoria de coagulação de Smoluchowski. Objetiva-se, no presente trabalho, determinar qual é a função que defini o módulo de cisalhamento e contabilizar sua dependência microestrutural. Para cumprir tal objetivo, utiliza-se de métodos de solução de problemas diretos e inversos.**

***Palavras-chave*—Substância tixotrópica, Modelo constitutivo, Problema inverso.**

I. INTRODUÇÃO

Os materiais tixotrópicos possuem comportamento associado com seu nível de estruturação, que é dependente do tempo. Explicações qualitativas referente aos fenômenos de quebra e de construção da microestrutura foram apresentadas em diversos trabalhos [1], [2]. Foi proposto em [3] um novo modelo, consistente com a teoria da termodinâmica dos meios contínuos, cuja a evolução estrutural foi contabilizada considerando teorias clássicas como o modelo de reptação [4] e a termodinâmica estatística associada com movimento browniano [5]. A classe de modelos constitutivos na qual o modelo se insere é descrita, de maneira geral, em termos de um sistema de duas equações acopladas: a equação constitutiva e a equação de taxa [1], [2], [6]. A equação constitutiva pode ser apresentada na forma $\tau = \tau(\lambda, \dot{\gamma})$, onde a tensão τ é função da taxa de deformação $\dot{\gamma}$ e do parâmetro estrutural λ, que contabiliza o grau de estruturação do material. No trabalho [3], o modelo viscoelástico de Jeffreys [7] modificado foi adotado. A equação constitutiva formulada é

$$\frac{\eta_\nu}{G}\dot{\tau}+\left(1-\frac{\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right)\tau=\left[\eta_\nu+\left(1-\frac{\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right)\eta_\mu+\frac{\eta_\nu \dot{\eta_\mu}}{G}\right]\dot{\gamma}+\frac{\eta_\nu\eta_\mu}{G}\ddot{\gamma}, \tag{1}$$

onde G é o módulo de cisalhamento e η_ν e η_μ são coeficientes de viscosidade. Considerando que G, η_ν e η_μ são propriedades dependentes da microestrutura, então suas taxas temporais $\dot{(\cdot)}$ devem ser consideradas. Esta abordagem diferencia este trabalho de outros.

A equação de taxa, geralmente descrita como $\frac{d\lambda}{dt} = \dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma})$, quantifica a evolução estrutural do material. Esta equação foi deduzida, no trabalho [3], considerando o modelo de reptação e a equação da coagulação de Smoluchowski resultando na expressão

$$\frac{d\lambda}{dt}=\frac{1}{\varsigma}\left[\kappa(1-\lambda)^\beta-(K_\psi^*\lambda\ddot{\gamma}+\tau)\lambda\dot{\gamma}\right], \tag{2}$$

em que κ, β, ς e K_ψ^* são constantes positivas.

Definidas as equações do modelo, as funções $G(\lambda)$, $\eta_\nu(\lambda)$ e $\eta_\mu(\lambda)$ são definidas. O formato de $G(\lambda)$, consistente com o comportamento viscoelástico de materiais estruturados, foi imposta como

$$G = G_0\exp(m\lambda^{-1}), \tag{3}$$

onde G_0 e m são parâmetros positivos. Os coeficientes $\eta_\nu(\lambda)$ e $\eta_\mu(\lambda)$, consistentes com restrições estudadas em trabalhos especializados [8], [9], foram descritas como

$$\eta_\mu = \eta_0\exp(\alpha_2\lambda), \tag{4}$$

$$\eta_\nu = \eta_0\exp[(\alpha_1+\alpha_2)\lambda]-\eta_\mu, \tag{5}$$

onde novamente α_1, α_2 e η_0 são parâmetros positivos. Embora satisfaçam as restrições físicas, estas funções não são as únicas possíveis. A equação constitutiva e a equação de taxa sejam consistentes com leis físicas estabelecidas. No entanto, a resposta do modelo pode possuir grandes discrepâncias ao se comparar com dados experimentais devido indefinição das funções $G(\lambda)$, $\eta_\nu(\lambda)$ e $\eta_\mu(\lambda)$. Portanto, objetiva-se neste trabalho avaliar a função que define $G(\lambda)$, de modo a contabilizar a dependência desta propriedade em relação a microestrutura. Espera-se que métodos de solução para problemas diretos

Projeto patrocinado pela PETROBRAS e CNPq.

e inversos devam ser empregados. Ambos possuem embasamento teórico bem estabelecidos [10]. A seguir, uma discussão referente a estes métodos é feita. Em seguida, a metodologia a ser utilizada no trabalho é definida.

A. Problemas diretos e inversos

O problema direto, de maneira geral, pode ser descrito como: determinar os L valores de saída da variável *Y*, $Y_i(W_1, W_2..., W_N, X_1, X_2, ..., X_M)$ $i = 1, 2, ..., L$,, satisfazendo as condições de contorno do sistema, a partir do valor de seus parâmetros W_j ($j = 1, 2, ...N$) e variáveis de entrada X_k ($k = 1, 2, ...M$), e de um modelo que relaciona *Y*, *X* e *W*. Analogamente, o problema inverso pode ser visto como: determinar os N valores dos parâmetros *W*,$W_j(Y_1, Y_2..., Y_L, X_1, X_2, ..., X_M)$, $j = 1, 2, ..., N$,, a partir dos valores das variáveis de saída Y_i ($i = 1, 2, ...N$), dos valores das variáveis de entrada X_k ($k = 1, 2, ...M$) e de um modelo que relaciona *Y*, *X* e *W*. O problema direto é utilizado quando há uma definição bem estabelecida dos parâmetros *W* associados. No entanto, há casos em que as variáveis de saída *Y*, possuem valores precisos, porém os parâmetros *W* ainda não são conhecidos: utiliza-se, portanto, a solução de problemas inversos. Dentre os métodos possíveis para a solução de problemas inversos, destacam-se o de mínimos quadrados, Levemberg-Marquad e Tikhonov [10]. Estes serão considerados a priori para a execução do trabalho.

II. Metodologia

Os dados utilizados no trabalho serão obtidos a partir de testes reológicos aplicados ao óleo cru. Serão obtidos dados em regime permanente e transiente. No regime permanente dados da tensão de equilíbrio τ_{eq} em função da taxa de deformação no equilíbrio $\dot{\gamma_{eq}}$ são obtidos. No regime transiente, sob um teste de patamar de taxa de deformação $\dot{\gamma_{ap}}$, dados da tensão ao longo do tempo são obtidos, onde $\dot{\gamma}(t) = H(t)\dot{\gamma}_{ap}$ e $H(\cdot)$ é a função degrau unitário.

Considera-se, como uma pré abordagem ao problema de levantamento da função $G(\lambda)$, o cálculo dos parâmetros do modelo para um material específico, considerando $G = G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$, o que constitui um problema inverso: determinar η_0, α_1, α_2, κ, β, G_0, m, K_ψ^* e ς que minimizem a diferença entre a tensão calculada $\tau(t)$ a partir das equações (1) a (5) e a tensão experimental, para um carregamento de taxa de deformação $\dot{\gamma}(t)$. Os métodos de problema inverso descritos na seção anterior serão utilizados.

Supõe-se que o comportamento da função a ser determinada para G e aquela definida em (3) não sejam diferentes o suficiente para que os parâmetros do modelo (com exceção de G_0 e m) se modifiquem de uma abordagem em relação a outra. Define-se, portanto, o problema direto: dados os parâmetros η_0, α_1, α_2, κ, β, K_ψ^* e ς e dados de tensão e taxa de deformação em um determinado intervalo de tempo, determinar $G(t)$ e $\lambda(t)$, a partir das equações (1), (4),5 e 2. Para este problema, um método de solução de equações diferenciais como método de Euler ou outro clássico pode ser utilizado. Sua solução permite a obtenção de uma curva G vs λ, possibilitando estipular uma função $G = G(\lambda)$. Após estipulada uma função para o módulo de cisalhamento $G = G(\lambda, U)$, onde U é um possível vetor contendo parâmetros dependentes do material, define-se, finalmente, outro problema inverso: determinar U que minimize a diferença entre a tensão calculada $\tau(t)$ a partir das equações (1), (4),5, 2 e $G = G(\lambda, U)$ e a tensão experimental, para um carregamento de taxa de deformação $\dot{\gamma}(t)$.

O algoritmo pode ser resumido da seguinte forma: determinar os nove parâmetros do modelo, a partir de dados experimentais, das equações do modelo e considerando $G = G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$; calcular $G(t)$ e $\lambda(t)$, considerando os parâmetros obtidos anteriormente (com exceção de G_0 e m), os dados experimentais do mesmo material e as equações do modelo, com exceção da equação (3); determinar os parâmetros da função estipulada para $G = G(\lambda)$, a partir dos mesmos dados e equações anteriores, considerando a nova função estipulada; simular a resposta do modelo, com o intuito de averiguar a consistência da proposta, considerando a função estipulada e os parâmetros destas obtidas nos passos anteriores, utilizando a mesma função obtida para G.

Tal algoritmo será programado no software Matlab, devido a facilidade no tratamento de matrizes. Alguns exemplos da literatura podem ser utilizados como referência na execução e organização do algoritmo [10].

Agradecimentos

Este trabalho tem o apoio financeiro da PETROBRAS e do CNPq.

Referências

[1] J. Mewis and N. J. Wagner, "Thixotropy." *Advances in Colloid and Interface Science*, vol. 147, no. 1, pp. 214–227, 2009.

[2] J. Mewis, "Thixotropy - a general review," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, vol. 6, no. 1, pp. 1–20, 1979.

[3] H. P. A. de Deus, C. O. Negrão, and A. T. Franco, "The modified jeffreys model approach for elasto-viscoplastic thixotropic substances," *Physics Letters A*, vol. 380, no. 4, pp. 585–595, 2016.

[4] P.-G. de Gennes *et al.*, "Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles," *The journal of chemical physics*, vol. 55, no. 2, p. 572, 1971.

[5] R. M. Mazo, *Brownian motion: fluctuations, dynamics, and applications*. OUP Oxford, 2008, vol. 112.

[6] P. R. de Souza Mendes and R. L. Thompson, "A unified approach to model elasto-viscoplastic thixotropic yield-stress materials and apparent yield-stress fluids." *Rheologica Acta*, vol. 52, no. 7, pp. 673–694, 2013.

[7] R. B. Bird, R. C. Armstrong, O. Hassager, and C. F. Curtiss, *Dynamics of polymeric liquids*. Wiley New York, 1977, vol. 1.

[8] H. P. A. de Deus and G. S. P. Dupim, "On behavior of the thixotropic fluids." *Physics Letters A.*, vol. 377, no. 6, pp. 478–485, 2013.

[9] ——, "Over structural nature of the thixotropic fluid behavior," *Physics Letters A.*, vol. 6, no. 138, pp. 6871–6889, 2012.

[10] Y. Wang, A. G. Yagola, and C. Yang, *Optimization and regularization for computational inverse problems and applications*. Springer, 2010.