



Fluidos não newtonianos na indústria: aplicação prática e desenvolvimento de interface de cálculo de perda de carga

João Ricardo dos Santos Gonçalves

Vinicius Calvo Pose Santos Neves

Yuri Guimarães Parovszky

Projeto de final de curso

Orientadora:

Prof. Verônica Maria de A. Calado, D.Sc.

Co-orientador: Felipe Souto da Silva, M.Sc.

Fluidos não newtonianos na indústria: aplicação prática e desenvolvimento de interface de cálculo de perda de carga

João Ricardo dos Santos Gonçalves

Vinicius Calvo Pose Santos Neves

Yuri Guimarães Parovszky

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química,
como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Bacharel em
Engenharia Química.

Aprovado por:

Daniel Weingart Barreto

Marcelo Barros da Silva

Diego Cavaliere Ribas

Orientado por:

Verônica Maria de A. Calado, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Julho de 2017

Gonçalves, João Ricardo dos Santos.

Fluidos não newtonianos na indústria: aplicação prática e desenvolvimento de interface de cálculo de perda de carga/João Ricardo dos Santos Gonçalves, Vinicius Calvo Pose Santos Neves, Yuri Guimarães Parovszky. Rio de Janeiro, UFRJ/EQ, 2017
vii, 80 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2017.

Orientadora: Verônica Maria de A. Calado

1.Fluidos não newtonianos. 2. Perda de carga. 3. Aplicação Industrial. 4. Monografia. (Graduação – UFRJ/EQ).5. Verônica Maria de A. Calado. I. Título.

Agradecimentos

Ao longo da graduação, percorremos uma árdua caminhada, de forma que não podemos esquecer daqueles que mais nos apoiam nesses momentos: nossas famílias e nossos amigos. Entretanto, não é possível citar todos individualmente nesta singela folha, além da possibilidade de esquecermos de alguém. Entretanto, estes sabem que somos gratos, de forma que não se faz necessário se estender muito mais.

Apesar disso, há pessoas que talvez não saibam da importância exercida em nossa jornada, de forma que devem ser enaltecidas:

- Agradecemos profundamente à Verônica Calado, profissional ímpar e de profundo conhecimento acadêmico, ela foi essencial ao desenvolvimento deste trabalho;
- Agradecemos também imensamente ao Marcelo Barros, profissional de enorme conhecimento técnico e vivência industrial, que também se demonstrou exímio líder e visionário, acreditando no potencial humano e do assunto.

Índice

Capítulo 1 – Introdução	8
Capítulo 2 – Introdução teórica	9
2.1 – Lei de Newton da Viscosidade	9
2.2 – Definição de fluido não newtoniano	11
2.2.1 – Fluidos dependentes do tempo	12
2.2.2 – Fluidos independentes do tempo	13
2.3 – Perda de carga em fluidos newtonianos	16
2.3.1 – Perda de carga distribuída	17
2.3.2 – Perda de carga localizada	19
2.3.3 – Altura manométrica de bombas	20
Capítulo 3 – Estudos de caso	21
3.1 – Motivação	21
3.2 – Estudo de caso 1 – Descarregamento de caminhão	22
3.3 – Estudo de caso 2 – Presença de mais de um comportamento não newtoniano	26
3.3.1 – Redesenho do processo de produção	31
3.4 – Estudo de caso 3 – Trocador de calor	36
3.5 – Reflexão	44
Capítulo 4 – Sobre o programa	45
4.1 – Introdução	45
4.2 – Visão geral da interface com o usuário	47
Capítulo 5 – Ajuste de modelos reológicos	49
5.1 – Caracterização dos modelos	49
5.1.1 – Lineares	50
5.1.2 – Linearizáveis	50
5.1.3 – Não – lineares	51

5.2 – Técnicas utilizadas na otimização dos parâmetros	52
5.2.1 – Regressão linear	52
5.2.2 – Formulações úteis na regressão linear	53
5.2.3 – Gauss – Newton	54
5.2.4 – Seção áurea unidimensional	55
5.2.5 – Notas quanto aos modelos não – lineares	56
5.2.5.1 – Herschel – Bulkley	57
5.2.5.2 – Ellis	58
5.3 – Ordenamento dos modelos	59
5.3.1 – Critério do menor erro	59
5.3.2 – Testes de hipótese	60
5.3.2.1 – Dados ajustados contra observados	61
5.3.2.2 – Análise de resíduos	61
5.4 – Resultados do ajuste	63
5.4.1 – Valores dos parâmetros	63
5.4.1.1 – Herschel – Bulkley (Chhabra)	63
5.4.1.2 – Ellis (Chhabra)	64
5.4.1.3 – Herschel – Bulkley (Industrial)	65
5.4.1.4 – Ostwald – de Waele (Industrial)	65
5.4.2 – Ordenamento dos modelos	66
5.4.2.1 – Herschel – Bulkley (Chhabra)	66
5.4.2.2 – Ellis (Chhabra)	67
5.4.2.3 – Herschel – Bulkley (Industrial)	67
5.4.2.4 – Ostwald – de Waele (Industrial)	68
Capítulo 6 – Escoamento de fluidos não newtonianos	69
6.1 – Escoamento de fluidos não newtonianos em regime laminar	69

6.2 – Discussão sobre o Reynolds de transição e introdução do Reynolds de Metzner-Reed	73
6.3 – escoamento de fluidos não newtonianos em regime turbulento	73
6.4 – Resultados	76
Capítulo 7 – Discussão e conclusão	79
7.1 – Estudos de caso	79
7.2 – Resultados do programa	79
7.3 – Conclusão	80
Referências bibliográficas	81
Apêndice A	812
Apêndice B	815

1. INTRODUÇÃO

Na produção da grande maioria das indústrias, existe a necessidade do escoamento de fluidos, o que é normalmente feito por meio de tubos circulares e por um sistema de bombeamento. Grande parte dos fluidos que são escoados são fluidos não newtonianos. E lidar com fluidos não newtonianos requer uma atenção especial. São características, comportamentos, problemas e soluções bem mais complexas quando comparados a fluidos newtonianos.

Durante a graduação, perpassamos superficialmente na vastidão de conhecimento que esses fluidos englobam, e talvez por isso, algumas indústrias ainda não tenham tido vislumbre do impacto que um estudo específico e voltado para esses fluidos pode causar, tanto positivamente, no caso da utilização correta das características desses fluidos, como negativamente, para o caso contrário. Uma série de projetos poderia ter sido viabilizada, equipamentos poderiam ter sido comprados de forma personalizada, poderia existir aumento em velocidades de produção e em geral menos problemas “insolúveis” teriam aparecido.

Essa questão merece uma discussão sobre o ponto de equilíbrio que devemos enxergar entre a teoria e a realidade de uma indústria. É um equilíbrio entre o melhor resultado possível e o máximo que podemos efetivamente otimizar naquelas condições e naquele prazo. Assim, a abordagem deste projeto busca mostrar os dois lados de uma mesma moeda, mas tenderá mais para a realidade da indústria, que foi a verdadeira motivação para o início deste estudo.

Uma vez que os assuntos relacionados aos projetos são complexos e pouco abordados mesmo em cursos de graduação, teremos um capítulo dedicado à introdução teórica sobre temas relevantes no desenvolvimento dos trabalhos. Em seguida, teremos um capítulo contendo estudos de caso da indústria que mostram o potencial de um tratamento adequado do escoamento de fluidos não newtonianos. E por fim, teremos dois capítulos explicitando a construção do programa para cálculo da perda de carga em escoamento de fluidos não newtonianos.

2. INTRODUÇÃO TEÓRICA

Para o desenvolvimento dos trabalhos aqui relatados, uma grande gama de conhecimentos foi utilizada. Porém, alguns itens se destacam e são imprescindíveis para o entendimento dos trabalhos aqui executados. Assim, esses temas serão brevemente revistos neste capítulo.

2.1. Lei de Newton da Viscosidade

Para explicar a diferença entre fluidos newtonianos e não newtonianos, o primeiro passo é discutir brevemente sobre o experimento de escoamento de fluido entre duas placas planas, conforme visto na Figura 1.

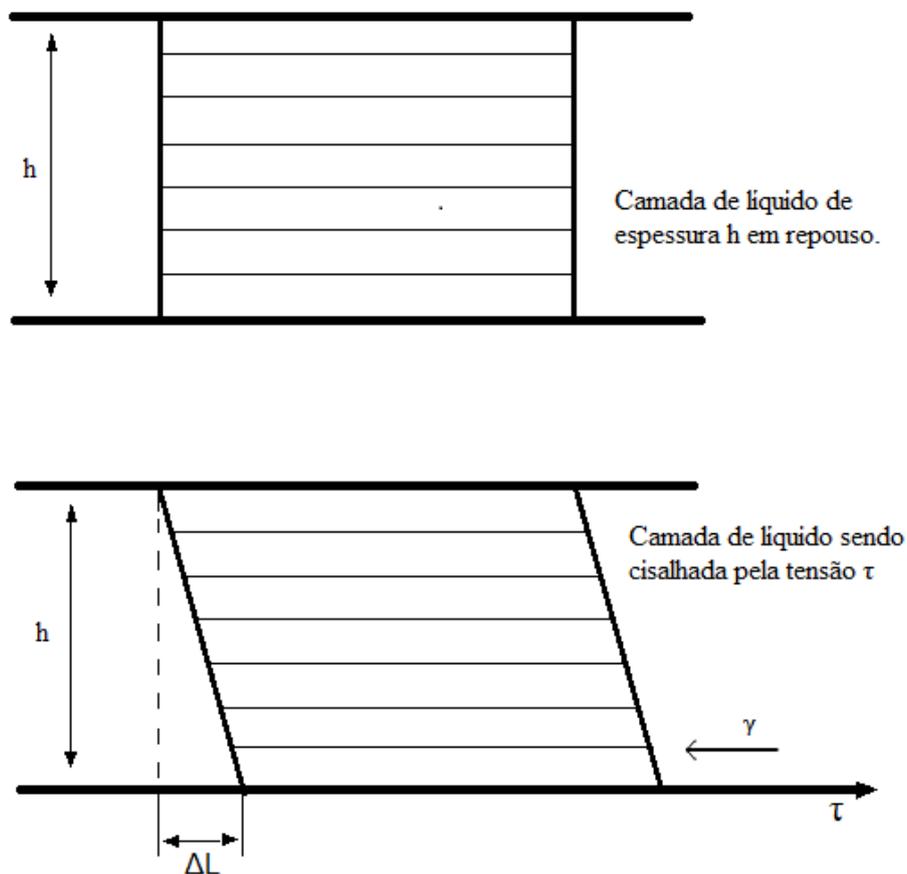


Figura 1 - Experimento de cisalhamento de elemento líquido em placas.

Intuitivamente, podem-se verificar algumas relações:

- Quanto maior a área das placas, maior a resistência da placa inferior ao movimento. A força (F) aplicada deveria ser maior sempre quanto maior fosse a área (A) das placas. Infere-se que F seja proporcional à área:

$$F \propto A$$

- Quanto maior a velocidade que a placa deva se deslocar, maior será a força necessária a ser aplicada. Então, F é proporcional à velocidade no eixo x:

$$F \propto V_x$$

- A velocidade do fluido se deslocando será tão maior quanto mais baixo o elemento de fluido estiver, ou seja, quanto mais próximo à placa inferior. E quão mais "alto" o fluido estiver, ou seja, quão mais longe da placa de baixo, menor o efeito da velocidade sobre o fluido. Então, a força varia inversamente com essa "altura":

$$F \propto \frac{1}{y} \quad (2.1)$$

Então:

$$F \propto A * \frac{V_x}{y} \quad (2.2)$$

Entretanto, quando se sabe da existência de uma proporcionalidade e deseja-se equacionar, introduz-se uma constante para tornar as unidades dimensionalmente coerentes. Logo:

$$F = C * A * \frac{V_x}{y} \quad \rightarrow \quad \frac{F}{A} = C * \frac{V_x}{y} \quad (2.3)$$

Considerando que a razão F/A pode ser vista como a tensão de cisalhamento(τ) aplicada em toda a área da placa superior e lembrando que a velocidade no eixo x varia, (tomemos a derivada) de acordo com a distancia(y) do fluido, tem-se:

$$\tau = C \frac{dV_x}{dy} \quad (2.4)$$

Deve-se lembrar que a velocidade em x é a variação de distância percorrida por um corpo (no caso, um elemento de fluido) no espaço em um determinado tempo, ou seja, variação da posição de x no tempo. E neste exemplo, a variação em x significaria a deformação causada no elemento de fluido provocado por alguma tensão de cisalhamento. Além disso, a constante C, que representa a resistência de um fluido a uma tensão aplicada no mesmo, pode ser claramente chamada de μ , ou viscosidade. Assim, chegamos à formulação final da Lei de Newton da Viscosidade:

$$\tau = \mu \frac{dV_x}{dy} \quad \text{ou} \quad \tau = \mu \gamma \quad (2.5)$$

Em que:

τ = Tensão de cisalhamento no elemento de fluido

μ = Viscosidade do fluido

dV_x/dy = Taxa de deformação no elemento fluido.

2.2. Definição de Fluido não Newtoniano

A equação 2.5 mostra uma relação direta e linear entre a tensão cisalhante aplicada em um elemento fluido e a taxa de deformação sofrida pelo mesmo. Os fluidos que obedecem a essa relação são os fluidos denominados fluidos newtonianos. Assim, qualquer fluido cuja relação entre a taxa de deformação (ou taxa de cisalhamento) e a tensão de cisalhamento não obedeça à equação 2.5 é denominado fluido não newtoniano. Essa denominação vale tanto para os casos em que a relação entre τ e γ não é linear quanto para os casos em que é necessária uma tensão inicial τ_0 para que o escoamento ocorra. Assim, imediatamente surgem diversas classificações e tipos diferentes de fluidos não newtonianos.

Uma vez que a definição de fluido não newtoniano se torna clara, é necessário então discorrer sobre os diferentes comportamentos apresentados por esses fluidos. A Figura 2 mostra de uma maneira geral as diferentes classificações. Os fluidos viscoelásticos, também mostrados na figura, são fluidos que apresentam comportamentos semelhantes aos comportamentos de sólidos em determinadas situações. Esses fluidos não serão abordados no presente trabalho.

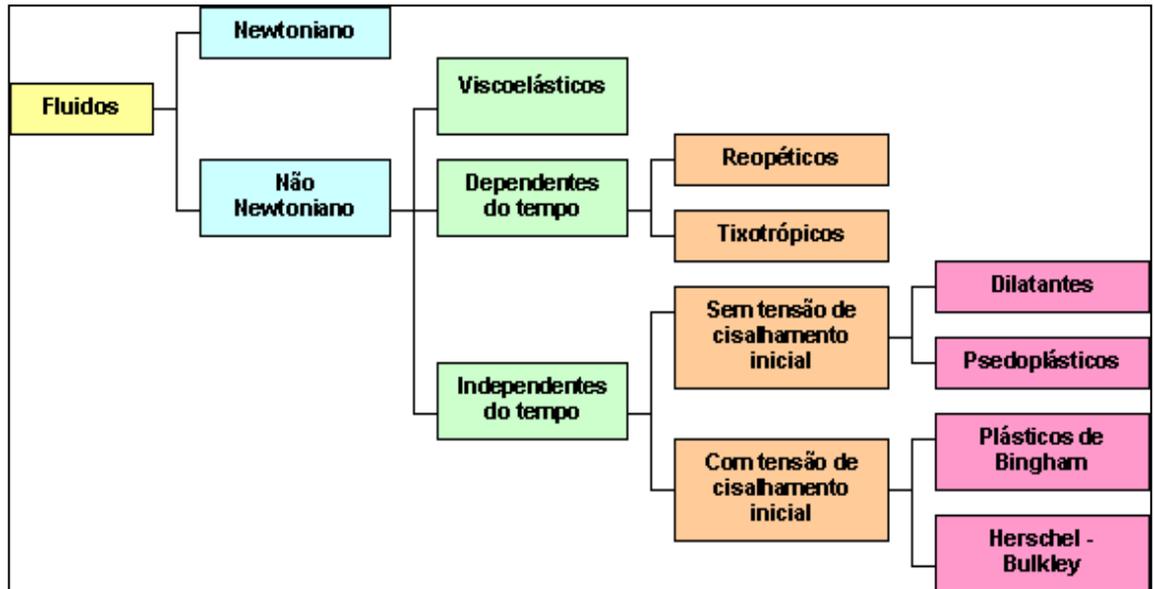


Figura 2 - Divisão entre tipos de fluidos de acordo com seu comportamento [1]

Como pode ser visto pela figura, existem diversas características diferentes entre os fluidos e é conveniente explicar cada um dos vários tipos de maneira breve.

2.2.1. Fluidos dependentes do tempo

Existem fluidos que ao sofrer a ação de tensões tem o seu perfil de deformação alterado em função do tempo de ação da força e do histórico de cisalhamento sofrida anteriormente (histerese). Esses fluidos são divididos em duas categorias:

- Fluidos tixotrópicos (afinantes): fluidos que possuem uma estrutura que é quebrada em função do tempo e da taxa de deformação^[1].

Apresentam um decréscimo reversível no tempo da força tangencial necessária para manter uma taxa de deformação constante, a uma temperatura constante. Se o tempo de aplicação for mantido, a deformação será cada vez maior e o fluido vai "afinando".

- Fluidos reopéticos (espessantes): Inclui poucos materiais que são capazes de desenvolver ou rearranjar uma estrutura enquanto são submetidos a uma tensão de cisalhamento^[1]. Apresentam um acréscimo reversível no tempo da força tangencial necessária para manter uma taxa de deformação constante, a uma temperatura constante. Se mantiver o tempo de aplicação, a deformação será cada vez menor, e o fluido torna-se mais espesso.

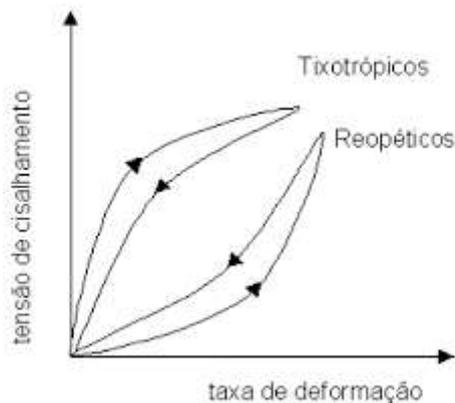


Figura 3 - Curvas de histerese de fluidos dependentes do tempo.

2.2.2. Fluidos independentes do tempo

São os fluidos em que o tempo não influencia o comportamento do fluido. São posteriormente divididos entre os fluidos que exigem uma tensão inicial para que o escoamento se inicie e aqueles que escoam com qualquer tensão aplicada. Os fluidos que exigem tensão inicial (ou yield stress, na literatura em inglês), também chamados de viscoplásticos, são descritos por diversos modelos, como os modelos de Bingham e de Herschel-Bulkley, enquanto os que não necessitam de tensões limite para o início do escoamento são denominados pseudoplásticos ou dilatantes, e são normalmente bem descritos por modelos do tipo Power Law. A Figura 4 mostra graficamente a relação entre tensão aplicada e a deformação nesses fluidos.

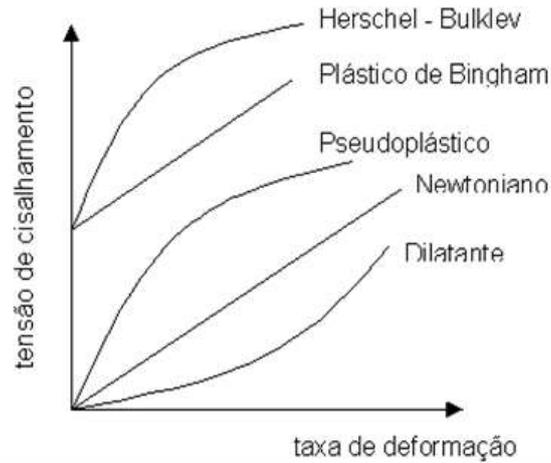


Figura 4 - Fluidos independentes do tempo.

Segue-se então uma breve explicação sobre cada um dos modelos utilizados neste trabalho, seja nos estudos de caso ou na construção do programa:

- Modelo de Ostwald de Waele ou Power Law: Modelo utilizado para os casos em que a curva de tensão x deformação pode ser aproximada por um modelo power law. É um modelo extremamente útil e é regido pela equação:

$$\tau_{yx} = m(\dot{\gamma}_{yx})^n \quad (2.6)$$

Em que:

τ_{yx} = Tensão cisalhante aplicada

m = Coeficiente de consistência do fluido

n = Índice de comportamento do fluido

$\dot{\gamma}_{yx}$ = Taxa de deformação

Uma simples observação indica claramente que o valor de n , ao ser modificado, representa diferentes comportamentos de fluidos. Quando assume o valor da unidade, o comportamento da curva é newtoniano. Valores maiores que a unidade, fazem com que o modelo represente fluidos dilatantes e menores que a unidade, fluidos pseudoplásticos.

- Modelo de Ellis: Modelo implícito para a tensão, recomendado para casos em que existem desvios para o modelo de Ostwald em baixos valores de taxa de cisalhamento. O modelo apresenta três parâmetros e é regido pela seguinte equação:

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \left(\frac{\tau_{yx}}{\tau_{1/2}}\right)^{\alpha-1}} \quad (2.7)$$

Em que:

μ = Viscosidade

τ_{yx} = Tensão cisalhante aplicada

$\tau_{1/2}$ = Valor de tensão em que a viscosidade aparente se reduziu à metade do valor de μ_0

μ_0 = Viscosidade em condição de ausência de cisalhamento

α = Medida do grau de comportamento dilatante do fluido

- Modelo de Bingham: É um modelo utilizado para fluidos que precisam de um determinado valor de tensão para que o escoamento ocorra; porém, uma vez que essa tensão seja alcançada, apresentam comportamento linear, de maneira análoga a um fluido newtoniano. Considerando tensão unidimensional e estacionária, são governados pela equação:

$$\tau_{yx} = \tau_B + \mu_B \gamma_{yx} \quad (\tau_{yx} > \tau_B) \quad (2.8)$$

Em que:

τ_{yx} = Tensão cisalhante aplicada

τ_B = Tensão inicial de Bingham

μ_B = Viscosidade aparente

γ_{yx} = Taxa de deformação

- Modelo de Casson: Mais um dos modelos para escoamento com tensão inicial. Esse modelo descreve bem muitos materiais alimentícios e biológicos. É descrito pela equação:

$$|\tau_{yx}|^{1/2} = |\tau_C|^{1/2} + (\mu_C |\gamma_{yx}|)^{1/2} \quad (\tau_{yx} > \tau_C) \quad (2.9)$$

Em que:

τ_{yx} = Tensão cisalhante aplicada

τ_B = Tensão inicial de Casson

μ_B = Viscosidade aparente

γ_{yx} = Taxa de deformação

- Modelo de Herschel-Bulkley: Modelo extremamente robusto, para fluidos que possuem yield stress e também apresentam comportamento não linear da taxa de deformação em relação à tensão. Apresenta três parâmetros e é descrito pela equação:

$$\tau_{yx} = \tau_{HB} + m(\gamma_{yx})^n \quad (2.10)$$

Em que:

τ_{yx} = Tensão cisalhante aplicada

τ_{HB} = Tensão inicial de Herschel-Bulkley

m = Coeficiente de consistência do fluido

n = Índice de comportamento do fluido

γ_{yx} = Taxa de deformação

2.3. Perda de Carga em fluidos newtonianos

Em todo escoamento de fluido, ocorre uma perda irreversível de energia devido ao choque entre as partículas, à turbulência do escoamento, à viscosidade e atrito interno do fluido. Essa energia dissipada, majoritariamente na forma de calor, é denominada perda de carga de um escoamento.

A perda de carga total (h_t) é obtida pela soma da perda de carga distribuída (h_d), que é a perda de carga dos trechos retos da tubulação utilizada e da perda de carga localizada (h_L), que é a perda de carga gerada por curvas, acidentes e outros itens que gerariam perda de energia do escoamento.

$$h_t = h_d + h_L \quad (2.11)$$

Em que:

h_t – Perda de carga total;

h_d – Perda de carga distribuída;

h_L – Perda de carga localizada;

2.3.1. Perda de carga distribuída

A equação de Darcy-Weisbach, também conhecida como equação universal de perda de carga localizada, é a equação mais utilizada para o cálculo da perda de carga distribuída em escoamentos. A equação foi obtida a partir da análise dimensional das variáveis associadas a perda de carga e do ajuste de parâmetro empíricos. A denominação de equação universal se deve ao fato da equação poder ser utilizada tanto em regime laminar quanto em regime turbulento, visto que na sua formulação o regime de escoamento não foi condicionado.

A equação é dada por:

$$h_d = \frac{fL}{D} \frac{V^2}{2g} \quad (2.12)$$

Em que:

h_L = Perda de carga localizada;

f = Fator de atrito de Darcy;

L = Comprimento do duto de escoamento;

D = Diâmetro do duto de escoamento;

V = Velocidade do escoamento;

g = Aceleração gravitacional;

O fator de atrito de Darcy utilizado na equação (2.12) varia dependendo do regime do escoamento. Para o escoamento em regime laminar, o fator de atrito é dado por:

$$f = \frac{64}{Re} \quad (2.13)$$

O fator de atrito de Fanning é definido de maneira similar:

$$f_F = \frac{16}{Re} \quad (2.14)$$

Em que:

Re = Número de Reynolds;

Normalmente, ambos os fatores de atrito nunca são usados concomitantemente, de modo que o de Darcy foi convencionado, neste trabalho, sem índice para não sobrecarregar as fórmulas.

Já para o escoamento em regime turbulento, existem inúmeras equações empíricas que calculam com razoável acurácia o valor do fator de atrito. Dentre essas equações, a mais eficiente e normalmente mais utilizada devido à sua robustez é a equação de Colebrook, mostrada a seguir:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left[\frac{e}{3,7D} + \frac{2,51}{Re\sqrt{f}} \right] \quad (2.15)$$

Em que:

f = Fator de atrito;

e = Rugosidade;

D = Diâmetro do tubo;

Re = Número de Reynolds;

Também podem ser utilizados métodos numéricos para encontrar o valor do fator de atrito, como no caso de um dos estudos de caso do próximo capítulo. Existem métodos gerais, como o método apresentado por Dodge e Metzner(1959), que será posteriormente melhor explicado e métodos específicos para um modelo, como Bingham ou Herschel.

Para fluidos que seguem o modelo de Herschel, o fator de atrito de Fanning, para escoamento laminar é dado pela equação:

$$f_F = \frac{16}{\Psi Re_{MR}} \quad (2.16)$$

Em que:

$$\Psi = (1 + 3n)^n (1 - c)^{1+n} \left[\frac{(1 - c)^2}{(1 + 3n)} + \frac{2c(1 - c)}{(1 + 2n)} + \frac{c^2}{(1 + n)} \right]^n \quad (2.17)$$

$$Re_{MR} = \frac{\rho V^{2-n} D^n}{8^{n-1} m} \left(\frac{4n}{3n + 1} \right)^n \quad (2.18)$$

O Re_{MR} , que será abordado de maneira mais profunda no capítulo que trata do escoamento de fluidos não newtonianos, é um número de Reynolds universal, que também trata de escoamentos não newtonianos. O adimensional Ψ é uma função implícita do Re_{MR} e do número de Hedstrom (He) por meio da variável intermediária c . A seguir, está a definição do número de Hedstrom e a equação que relaciona o c ao Re_{MR} e a He :

$$He = \frac{D^2 \rho}{m} \left(\frac{\tau_{HB}}{m} \right)^{\frac{2-n}{n}} \quad (2.19)$$

$$Re_{MR} = 2He \left(\frac{n}{3n + 1} \right)^2 \left(\frac{\Psi}{c} \right)^{\frac{2-n}{n}} \quad (2.20)$$

Em que:

m = Parâmetro m do modelo Herschel-Bulkley;

n = Parâmetro n do modelo Herschel-Bulkley;

D = Diâmetro da tubulação;

ρ = Densidade do fluido

τ_{HB} = Parâmetro τ_{HB} no modelo de Herschel-Bulkley;

2.3.2. Perda de carga localizada

A perda de carga dos acidentes da tubulação ou perda localizada (h_L), tais como curvas, por exemplo, é calculada utilizando um comprimento equivalente de tubulação reta, que substitui o termo L/D na equação de Darcy:

$$h_a = fK \frac{v^2}{2g} \quad (2.21)$$

Em que:

h_L – Perda de carga nos acessórios;

f – Fator de atrito [adimensional];

K – Coeficiente de resistência [adimensional]

v – Velocidade do fluido [m/s];

g – Aceleração da gravidade;

O coeficiente de resistência (K) pode ser determinado a partir da equação abaixo

$$K = \sum \left(\frac{L}{D} \right) \text{ dos acidentes} + \sum K \text{ da entrada e saída} \quad (2.22)$$

2.3.3. Altura Manométrica de bombas

Para o projeto efetivo de bombeamento em escoamentos em dutos, é necessário o cálculo correto da altura manométrica das bombas que exercerão o trabalho no fluido a ser bombeado, o que conseqüentemente exige o cálculo das pressões na sucção e na descarga da bomba.

Para o cálculo da pressão na sucção, deve ser considerado o pior cenário, ou seja, o nível mínimo do reservatório do qual o líquido é descarregado. Dessa forma, tem-se o seguinte:

$$\frac{P_{suc}}{\rho g} = \frac{P_{res}}{\rho g} + LL - h_{ts} \quad (2.23)$$

Em que:

P_{suc} – Pressão na sucção;

P_{res} – Pressão no reservatório de sucção;

LL – Diferença de altura entre o nível de líquido no reservatório e a sucção da bomba;

h_{ts} – Perda de carga total no trecho de sucção;

ρ – densidade do fluido;

g – aceleração da gravidade

De forma análoga, a pressão na descarga da bomba deverá compensar toda a perda de carga no trecho de descarga, além de vencer a altura estática do ponto que o fluido irá atingir:

$$\frac{P_{des}}{\rho g} = \frac{P_{res}}{\rho g} + HL + h_{td} \quad (2.24)$$

Em que:

P_{des} – Pressão na descarga;

P_{res} – Pressão no reservatório de descarga ;

HL – Nível máximo do reservatório de descarga;

h_{ts} – Perda de carga total no trecho de descarga;

ρ – densidade do fluido;

g – aceleração da gravidade;

A altura manométrica total (AMT) é obtida conforme apresentado na equação a seguir:

$$AMT = P_{des} - P_{suc} \quad (2.25)$$

3. ESTUDOS DE CASO

3.1. Motivação

A empresa Z começou a ter problema com os cálculos de perda de carga padrão que são largamente utilizados na indústria. Esses cálculos, por vezes, não faziam jus à realidade: calculava-se sempre perdas de carga bastante superiores ao que era constatado com o uso de um manômetro, por exemplo. Já haviam tido tentativas de solucionar essa grande imprecisão no cálculo, mas sem muito sucesso. Isso gerava uma série de problemas:

- Superdimensionamento das instalações, gerando maior gasto com tubulações e maiores dificuldades de limpeza;
- Subdimensionamento de vazão (e perda de produção em decorrer disso) como medida de segurança.

Então, houve a desconfiança e confirmação de que a causa disso era o comportamento não newtoniano de alguns fluidos. Um fator agravante da situação foi que esses fluidos se mostraram mais comuns do que o esperado, tornando-se urgente um cálculo mais preciso, de modo a economizar nos projetos e ganhar volume de produção.

Foram separados alguns estudos de caso que aconteceram na empresa que demonstram o impacto que um maior conhecimento sobre fluidos não newtonianos pode trazer.

3.2. Estudo de Caso 1: Descarregamento de Caminhão

O descarregamento de um caminhão com determinada matéria-prima demorava 9h para acontecer. Era um produto extremamente viscoso e desconfiava-se de que pudesse se tratar de um fluido não newtoniano. Então, foi necessário descobrir algumas informações reológicas com o fabricante. A partir disso, levantou-se as curvas reológicas dispostas a seguir:

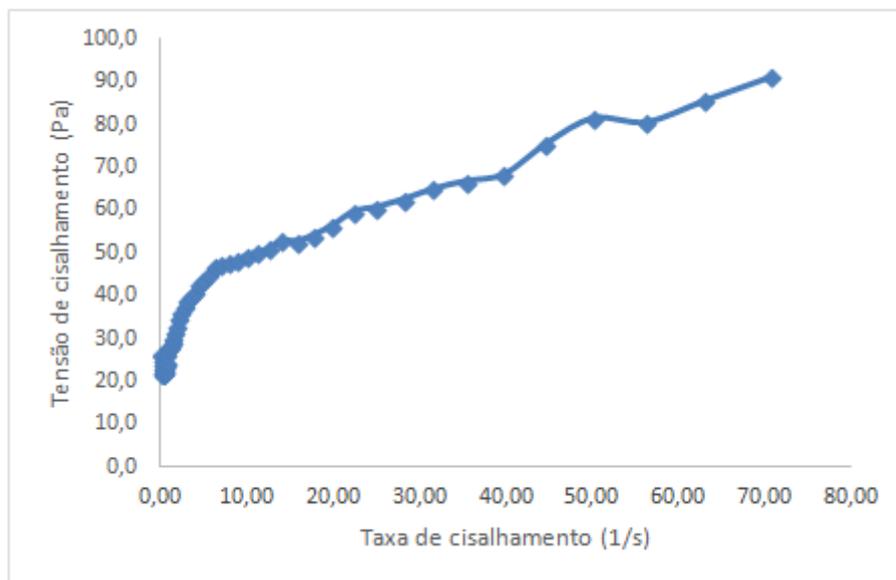


Figura 5 –Plot dos Dados de tensão vs taxa de cisalhamento

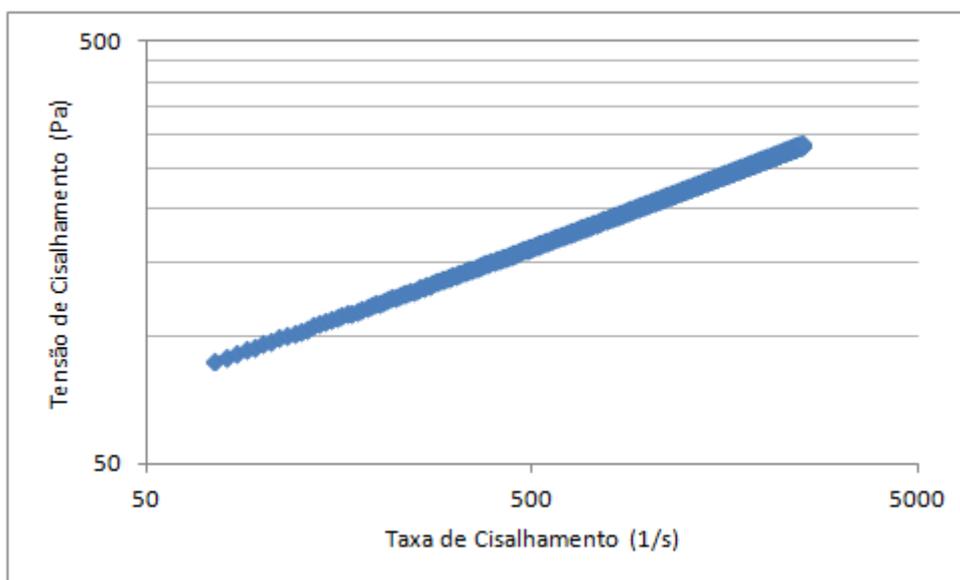


Figura 6 – Gráfico log-log da tensão vs taxa de cisalhamento

Utilizou-se os dados reológicos dispostos no apêndice A, figura A.1, no programa Statistica, determinando os valores dos parâmetros, o desvio padrão dos mesmos, a função objetivo e o coeficiente de determinação para cada um dos modelos. Os resultados estão dispostos a seguir:

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
T_{HB}	12,989	2,1078
M	15,337	1,9757
N	0,3678	0,02618
Função Objetivo	289,52	-
R^2	0,9840	-

Tabela 1 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo de Herschel-Bulkley.

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
T_B	30,939	1,139
M	0,9903	0,052
Função Objetivo	2248,16	-
R^2	0,8764	-

Tabela 2 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo de Bingham.

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
M	27,931	0,499
N	0,2564	0,005
Função Objetivo	401,94	-
R^2	0,9779	-

Tabela 3 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo Power Law.

. Desta forma, vemos que o modelo de Herschel-Bulkley seria o mais adequado para os cálculos.

Portanto, era necessário descobrir o fator de atrito para fluidos do tipo Herschel-Bulkley. Conforme explicado anteriormente no capítulo 2, esse valor poderia ser calculado pela equação^[1](2.16), em conjunto com as equações (2.17) e (2.18), já discutidas anteriormente e novamente dispostas a seguir:

$$f_F = \frac{16}{\Psi Re_{LP}} \quad (2.16)$$

em que^[1]:

$$\Psi = (1 + 3n)^n (1 - c)^{1+n} \left[\frac{(1 - c)^2}{(1 + 3n)} + \frac{2c(1 - c)}{(1 + 2n)} + \frac{c^2}{(1 + n)} \right]^n \quad (2.17)$$

$$Re_{LP} = \frac{D^n v^{2-n} \rho}{8^{n-1} m} \left(\frac{4n}{3n + 1} \right)^n \quad (2.18)$$

Como *c* é uma variável intermediária, seu cálculo é feito utilizando as equações (2.19) e (2.20). Para descobri-lo, utiliza-se a outra forma de calcular o número de Reynolds^[1]:

$$Re_{LP} = 2He_M \left(\frac{n}{3n + 1} \right)^2 \left(\frac{\Psi}{c} \right)^{\frac{2-n}{n}} \quad (2.20)$$

em que^[1]:

$$He_M = \frac{D^2 \rho}{m} \left(\frac{\tau_0}{m} \right)^{\frac{2-n}{n}} \quad (2.19)$$

De forma mais clara, o número de Reynolds poderia ser calculado de duas maneiras. Uma diretamente pelos dados da situação (explicitados na Tabela 8), conforme a equação (2.18), e outra em que havia um parâmetro intermediário desconhecido “*c*”, conforme a equação (2.20).

Diâmetro interno (metros) (DN 80 - 10HD02)	0,0828
Vazão (m³/hora)	5
Velocidade (m/s)	0,25793895444451
Densidade (kg/m³)	1100
T ₀	12,9898541903906
M	15,3371597220869
N	0,367840863
Re (calculado diretamente)	10,2554
He	0,24

Tabela 4 – Dados para cálculo dos números de Reynolds e Headstrom

Além disso, o valor do parâmetro “c” também era necessário para o cálculo do fator de atrito, conforme as equações (2.17) e (2.18). Diante dessa situação, a solução foi utilizar o valor de Reynolds calculado diretamente pela equação (2.18) como valor objetivo utilizando o recurso do MS Excel conhecido como Atingir Meta. Para tanto, estimou-se um valor de “c”, e calculou-se, a partir da equação (2.20), um segundo valor de Reynolds, hipotético. Entretanto, esse valor hipotético de Reynolds deveria ser igual àquele calculado diretamente pela equação (2.18). Logo, o recurso Atingir Meta variou o parâmetro “c” até que a equação (2.20) atingisse 10,26, mesmo valor da equação (2.18). Essa estratégia resultou no valor de “c” de aproximadamente 0,17, e do fator de atrito, de 2,09. A Tabela 9 demonstra essa estratégia.

c estimado	0,5
Re (função de c)	0,0066
f estimado	3,72
Re (calculado diretamente - referência)	10,2554
Valor do c correto (após atingir Meta)	0,1788
f correto	1,99

Tabela 5 – Dados para cálculo do fator de atrito

Com o valor do fator de atrito, seguiu-se para o cálculo da perda de carga e da pressão de descarga resultante comparando-se esse valor com a pressão decorrente do cálculo de f para fluidos Newtonianos e com o valor verificado no manômetro. Esses dados são mostrados na tabela a seguir.

Vazão (m³/h)	5
Diâmetro interno (metros) (DN 80 - 10HD02)	0,0828
Velocidade (m/s)	0,2579
Densidade (kg/m³)	1100
T ₀	12,9898541903906
M	15,3371597220869
N	0,367840863
Número de Reynolds (Herschel-Bulkley)	10,2554
Valor do C correto (após atingir Meta)	0,1788
f (Herschel-Bulkley)	1,99
Comprimento Total (m)	46,4
Altura Estática (mcl)	6,4
Pressão no Tanque (mcl. Abs)	9,3874
Perda de carga em tubulação (mcl)	15,09
Pressão de descarga (mcl.abs)	30,88
Pressão de descarga (bar g)	2,3
Pressão de descarga no manômetro (bar g)	1
Valores calculados pelo método padrão:	
Número de Reynolds Newtoniano	3,99
F Newtoniano	16,03
Perda de carga em tubulação f Newton.	30,46

(mcl)	
Pressão de descarga (mcl.abs)	46,25
Pressão de descarga com f Newtoniano	4,0

Tabela 6 – Dados comparando pressão de descarga com diferentes fatores de atrito

Com os cálculos melhorados, foi possível comprar uma bomba de 20 m³/h para o descarregamento do caminhão (pelo menos o dobro da vazão que seria possível utilizando o cálculo newtoniano, com razoável margem de segurança), de forma que o tempo de descarregamento foi reduzido de 9 horas para 1 hora e meia.

A compra da bomba, apesar de ter custado R\$ 120 mil reais (bomba de engrenagens viking), justificou o custo pelo volume de produto e consequente a quantidade de caminhões envolvidos, porque além de custos com hora-homem e hora-máquina, prejudicava muito a logística de caminhões no pátio de tanques da fábrica.

3.3. Estudo de caso 2: Presença de mais de um comportamento não-newtoniano

O produto X vinha sofrendo um aumento de demanda tal que justificava um investimento de R\$ 500 mil reais em um projeto de ampliação dessa produção. Apesar de sua crescente importância, o comportamento reológico desse produto era muito pouco conhecido. O processo de produção consistia na preparação de uma fase orgânica e de uma fase aquosa e a posterior mistura dessas duas partes. Esse processo era complicado de se lidar já que, após a mistura das fases, percebia-se um brusco aumento de viscosidade, aparentemente acarretado pelo alto cisalhamento causado ao produto. Dessa forma, toda a produção era conduzida de forma a diminuir o cisalhamento. Um exemplo que constatava isso era a bomba utilizada para a transferência desse produto para os tanques de pré-envase (tanques “pulmão”), a qual foi projetada para trabalhar com uma vazão baixa e que por isso demorava cerca de 2,5 horas para acontecer.

Considerando que os estudos sobre os fluidos não-newtonianos estavam “abrindo novas portas” na empresa; que havia um projeto para a expansão da produção desse fluido; e de que certamente se tratava de um fluido com comportamento fora do padrão, tornou-se mister aprofundar os conhecimentos sobre esse produto.

Para isso, foram retiradas amostras do fluido durante o processo de produção e enviadas ao laboratório com a maior rapidez possível para que fossem analisadas. Vale salientar que, por diversas vezes, o laboratório se prontificou a deixar o analista que realizava as análises no reômetro à disposição para efetuar os trabalhos.

Foi utilizado o reômetro Haake Rheostress 1, com uma varredura de 50 pontos, de 0 a 2000s⁻¹, e levantada a curva reológica a seguir. Os dados reológicos estão dispostos no apêndice A, na tabela A.2.

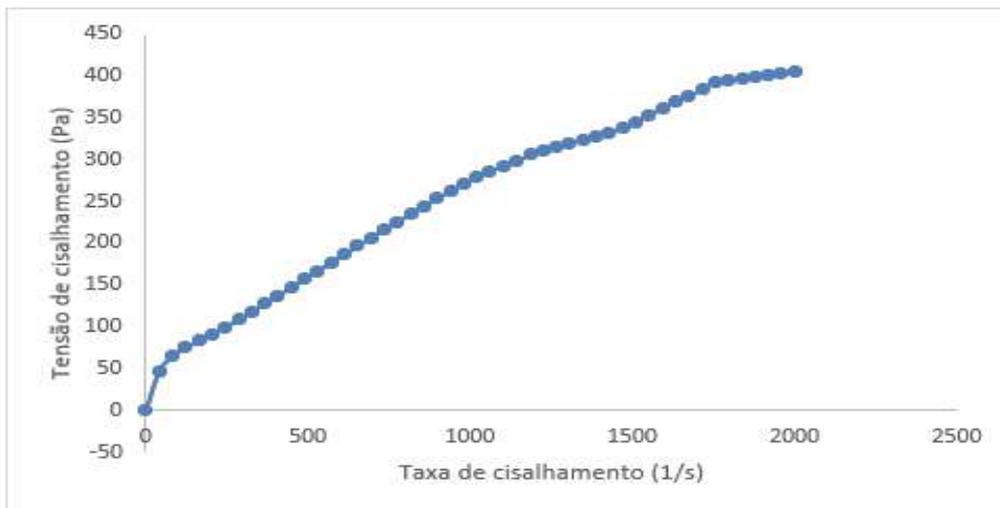


Figura 7 –Plot dos Dados de tensão vs taxa de cisalhamento

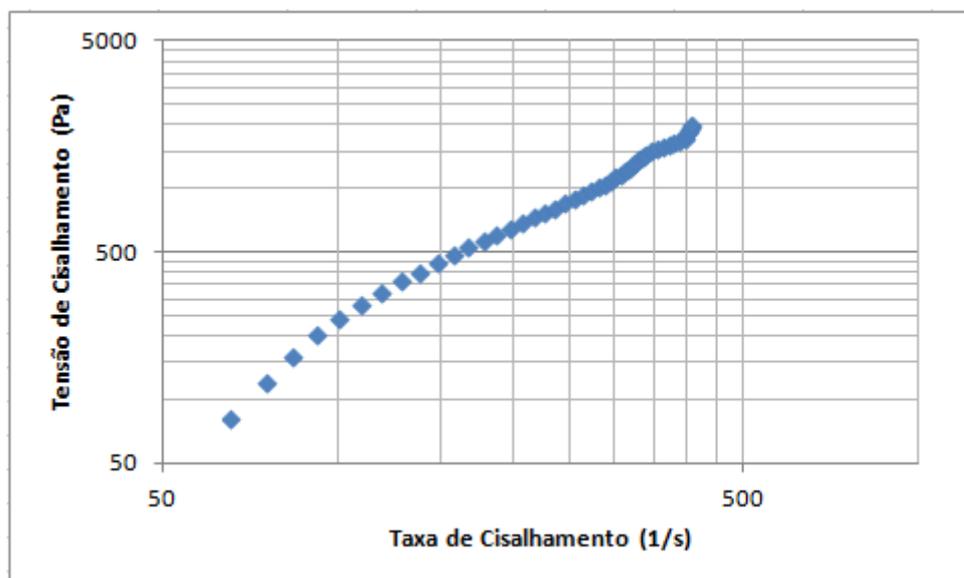


Figura 8 – Gráfico log-log da tensão vs taxa de cisalhamento

Havia um indicativo que se tratavam de fluidos do tipo Power Law, mas neste caso, a viscosidade diminuiria com o aumento do cisalhamento, e isso contrariava o senso comum. Precisava-se confirmar quais seriam os parâmetros (utilizou-se novamente o método dos mínimos quadrados, como no estudo de caso do trocador de calor para os modelos Power Law, Bingham e Herschel-Bulkley) e testar se o cálculo realizado estaria de acordo com o verificado pelo manômetro em um teste. Os parâmetros encontrados estão dispostos nas tabelas a seguir:

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
T_{HB}	-3,18121	9,387872
M	2,99754	0,692479
N	0,65116	0,028080
Função Objetivo	2269,425	-
R^2	0,995675	-

Tabela 7 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo de Herschel-Bulkley.

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
T _B	71,14615	4,324396
M	0,18327	0,003651
Função Objetivo	9409,206	-
R ²	0,98207	-

Tabela 8 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo de Bingham.

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
M	2,778361	0,168683
N	0,660279	0,008440
Função Objetivo	2275,792	-
R ²	0,995663	-

Tabela 9 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo Power Law.

A partir dos parâmetros encontrados, é possível perceber que o maior coeficiente de determinação (R²) é para o modelo de Herschel-Bulkley. Porém, também é possível observar que o parâmetro THB é negativo, resultado que não é fisicamente possível. Assim sendo, conforme o esperado, o modelo que melhor representava os dados era um modelo do tipo Power Law. Assim, o próximo passo foi o cálculo das grandezas físicas necessárias para o cálculo da perda de carga. Foram utilizadas as equações 3.1 e 3.2, descritas a seguir para tal. Os resultados podem ser vistos na tabela a seguir:

Vazão (m ³ /h)	4,6
Diâmetro interno (metros) (DN 50 - 10HD02)	0,05476
Velocidade (m/s)	0,54
Densidade (kg/m ³)	1050
M	2,778361
N	0,660279
Número de Reynolds (Lei da Potência)	45,8
Número de Reynolds Crítico (Lei da Potência)	2304
f (Lei da Potência)	0,349
Comprimento Total (m)	86,8
Altura Estática (mcl)	12,7
Pressão no Tanque (mcl. Abs)	9,8
Perda de carga em tubulação (mcl)	34,1
Pressão de descarga (mcl.abs)	56,6
Pressão de descarga (bar g)	4,8
Pressão de descarga no manômetro (bar g)	2,1
Valores calculados pelo método padrão:	
Número de Reynolds Newtoniano	19,5
F Newtoniano	3,28
Perda de carga em tubulação f Newton. (mcl)	78,0
Pressão de descarga com f Newtoniano	9,4

Tabela 10 – Dados comparando pressão de descarga com diferentes fatores de atrito

$$Re_{LP} = \frac{D^n v^{2-n} \rho}{8^{n-1} m} \left(\frac{4n}{3n+1} \right)^n \quad (3.1)$$

$$f_F = \frac{16}{Re_{LP}} \quad (3.2)$$

O resultado calculado[1] não foi muito próximo ao identificado pelo manômetro, mas essa diferença pode ser justificada pelas possibilidades levantadas na Seção 7.1 (Discussão e Conclusão dos Estudos de Caso), além do fato de terem sido feitas alterações estruturais na linha para adaptação de uma bomba para o teste que não foram contempladas na Mémoria de Cálculo. Ainda assim, o valor encontrado confirmava que a pressão de descarga seria bem menor que a calculada considerando o fluido newtoniano. Isso já passou a permitir testes com maiores vazões, e conseqüentemente, maiores valores de tensão de cisalhamento para o fluido, visto que a viscosidade deste diminuiria com o aumento da tensão.

A partir do teste, a bomba que havia sido utilizada continuou rodando na linha e o tempo de transferência do produto viscoso foi reduzido de 2,5 horas para menos da metade (de 2 horas e 30 minutos para 1 hora e 10 minutos).

Porém, um questionamento passou a ser ainda mais intrigante: se os cálculos confirmavam a hipótese de que a viscosidade diminuiria com o aumento do cisalhamento, como explicar o aumento de viscosidade, facilmente constatado visualmente ao acompanhar o processo de mistura ao longo do tempo?

A única opção que parecia razoável era desconfiar do comportamento dependente do tempo de cisalhamento a que o fluido vinha sendo submetido.

Novamente, retiraram-se amostras durante o processo de produção, sendo as mesmas levadas ao laboratório para que se pudesse constatar uma possível curva de histerese.

A curva de histerese é obtida no Reômetro, o qual submete o fluido a crescentes taxas de cisalhamento até determinado valor, e depois submete-o a taxas decrescentes até voltar ao ponto inicial. Por meio dessa curva, podemos verificar a viscosidade em cada um dos valores escolhidos de taxa, e se o fluido apresentar viscosidades diferentes para o mesmo valor de taxa de cisalhamento, será confirmada a dependência do fluido em relação ao tempo de cisalhamento submetido.

A metodologia usada foi elevar gradualmente o cisalhamento provocado ao fluido de 0 a 1000 s⁻¹, manter o cisalhamento de 1000 s⁻¹ durante 5 minutos, e retornar novamente ao zero. Esse intervalo foi escolhido já que os dados de viscosidade pré-existentes desse produto consideravam o mesmo com 1600 cP, de forma que a faixa de 0 a 1000 s⁻¹ da varredura do tempo (*time sweep*) já englobava esse resultado de viscosidade, ou seja, englobava a faixa de taxa de cisalhamento teórica em que o fluido era realmente bombeado. Caso houvesse uma dependência temporal do fluido com a tensão cisalhante, a viscosidade apresentaria valores diferentes na ida e volta para uma mesma taxa de cisalhamento, o que foi confirmado como mostra a figura a seguir.

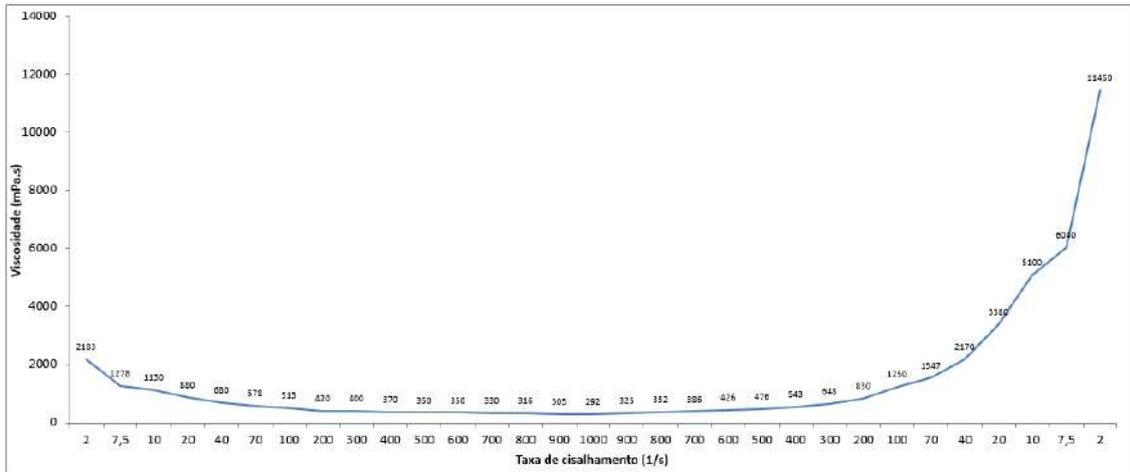


Figura 9 – Variação de Viscosidade vs Taxa de cisalhamento (0 a 1000 s⁻¹ - 1000 a 0 s⁻¹)

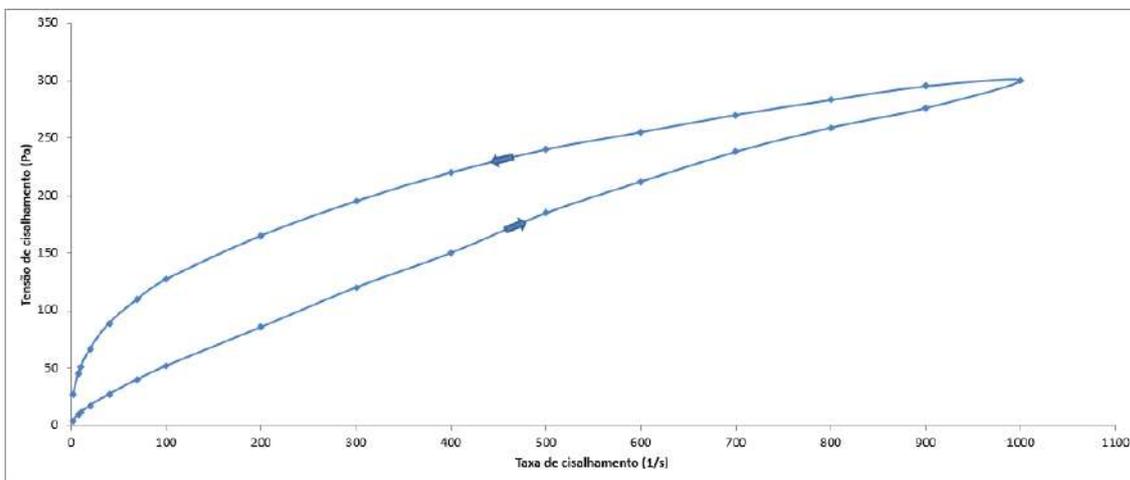


Figura 10 – Curva de Histerese do produto X –Tensão de cisalhamento vs Taxa de cisalhamento (0 a 1000 s⁻¹ e 1000 a 0 s⁻¹)

Ida			Volta				
Tensao (Pa)	Taxa (1/s)	η (mPa.s)	Tensao (Pa)	Taxa (1/s)	η (mPa.s)	Taxa (1/s)	Diferença de η (mPa.s)
4,3	2	2183	295	900	325	2	9267
9,5	7,5	1278	283	800	352	7,5	4762
11,3	10	1130	270	700	386	10	3970
17,4	20	880	255	600	426	20	2500
27,2	40	680	240	500	476	40	1490
40,3	70	578	220	400	543	70	969
51,8	100	513	195	300	648	100	737
85,5	200	420	165	200	830	200	410
120	300	400	127	100	1250	300	248
150	400	370	110	70	1547	400	173
184,7	500	350	89	40	2170	500	126
212	600	350	67	20	3380	600	76
238	700	330	51	10	5100	700	56
259	800	316	45	7,5	6040	800	36
276	900	305	27	2	11450	900	20
300	1000	292					

Tabela 11 – Dados experimentais obtidos no *time sweep* para montagem da curva de histerese (tensão, taxa de cisalhamento e viscosidade)

Com a curva de histerese, pode-se entender o fenômeno que acontecia.

Havia, de fato, uma diminuição da viscosidade ao aumentar a taxa de cisalhamento, confirmando o comportamento de fluido tipo Lei de Potência. Entretanto, essa diminuição da viscosidade tornava-se praticamente irrisória em relação ao aumento de viscosidade causado pela influência do tempo de cisalhamento. Esse aumento de viscosidade pode ter acontecido pela formação de *clusters*, característica comum em emulsões concentradas, como é o caso do produto X (sua aplicação é de, no máximo, 1 litro por hectare).

Então, constatou-se que o produto em questão possuía dois comportamentos não newtonianos: para pequenos tempos de cisalhamento, como em um bombeamento com vazões maiores, poderíamos considerar que a viscosidade seria menor do que aquela constatada com o fluido estático, e conseqüentemente, a perda de carga seria menor. Portanto, com o fluido estático, havia certa dificuldade para iniciar o processo de mistura, o qual logo depois se tornava bem mais fácil. Caso essa mesma intensidade de mistura se mantivesse, haveria um súbito aumento de viscosidade com o tempo. Essa hipótese foi confirmada em bancada de laboratório.

3.3.1. Redesenho do processo de produção

Com todo esse conhecimento sobre a reologia do produto, o processo de produção se tornaria completamente obsoleto, e houve a sugestão de redesenhar esse processo, utilizando os novos conhecimentos.

Para tanto, seria necessário realizar um estudo de ciclos daquele processo de produção. Por questões de segurança da informação, o estudo de ciclos antigo e o criado, utilizando novas estratégias, não pode ser evidenciado neste trabalho. Entretanto, podem-se salientar algumas sugestões feitas:

- Seleção de equipamentos mais assertiva: em que seria possível chegar nas condições esperadas para o processo de uma forma mais rápida e mais eficiente, como é o caso do impelidor abaixo:

PARAVISC coaxial

For alternating low to high viscosity products with demanding requirements for homogeneity

- Use of wall and central impellers operated independently of one another in both rotational directions
- PARAVISC ensures short mixing times and efficient heat transfer
- Central impeller enables high local power input with dissolver and extremely good surface motion and a further reduction in the blend time with Viscoprop
- Products with extreme non-Newton characteristics
- Ideal for multi-product plants

Applications

- » Specialty chemicals
- » Formulated consumer products
- » Pharmaceutical products and cosmetics



For more information:
» [Contact Search](#)

Products of EKATO RMT

Figura 11– Sugestão de agitador para o processo de produção.

- Envio separado das fases orgânica e aquosa para os tanques pulmão: o principal ganho de tempo do processo poderia ocorrer pelo envio direto das fases orgânica e aquosa, separadamente, para os tanques pré-ensase, bombeando ambas as fases antes de se misturarem, e, portanto, com uma viscosidade bem menor do que se já estivessem misturadas. Essa nova estratégia contribuiria, inclusive, para diminuir o tempo em que o fluido estaria submetido a cisalhamento, que era o grande responsável pelo brusco aumento de viscosidade.

As seis possibilidades estão destacadas a seguir:

- Inserir agitadores/dispersores nos tanques-pulmão e continuar envasando por gravidade:

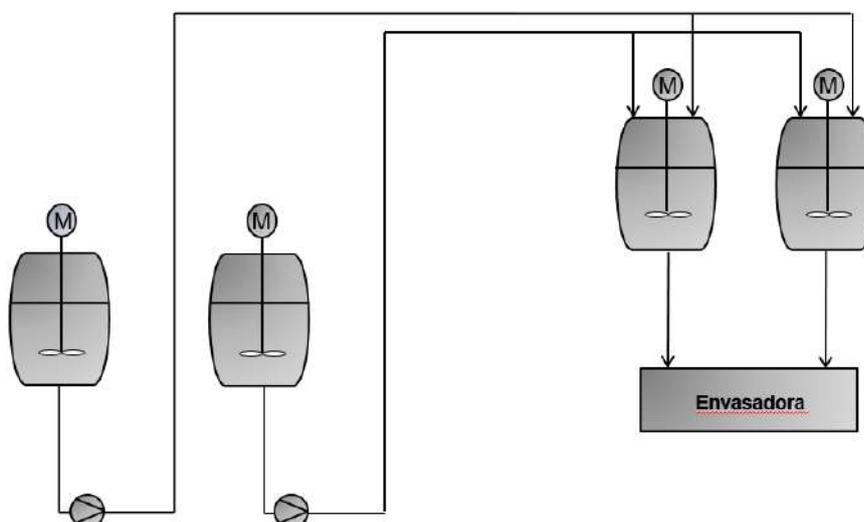


Figura 12– Primeira sugestão para redesenho do processo produtivo.

- Inserir agitadores/dispersores nos tanques-pulmão e adicionar bombas de alto cisalhamento para o caso de precisar diminuir a viscosidade antes do envase (com tempo de cisalhamento controlado).

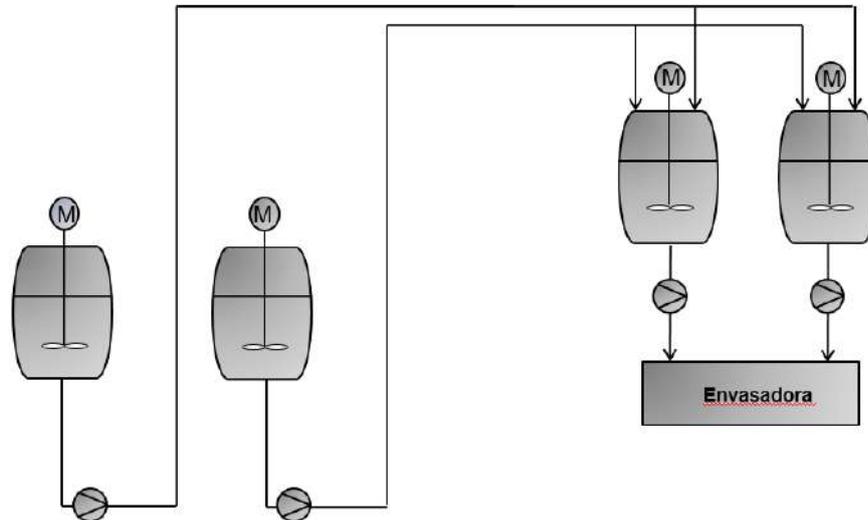


Figura 13 – Segunda sugestão para redesenho do processo produtivo.

- Instalar um dispersor em linha, que é um equipamento que promove uma mistura adequada dentro dele, e continuar envasando por gravidade, como exemplificado pelas figuras a seguir:

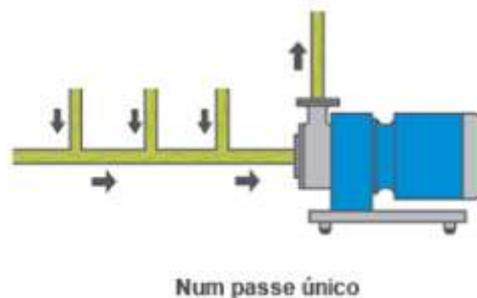


Figura 14 – Funcionamento de um dispersor em linha.

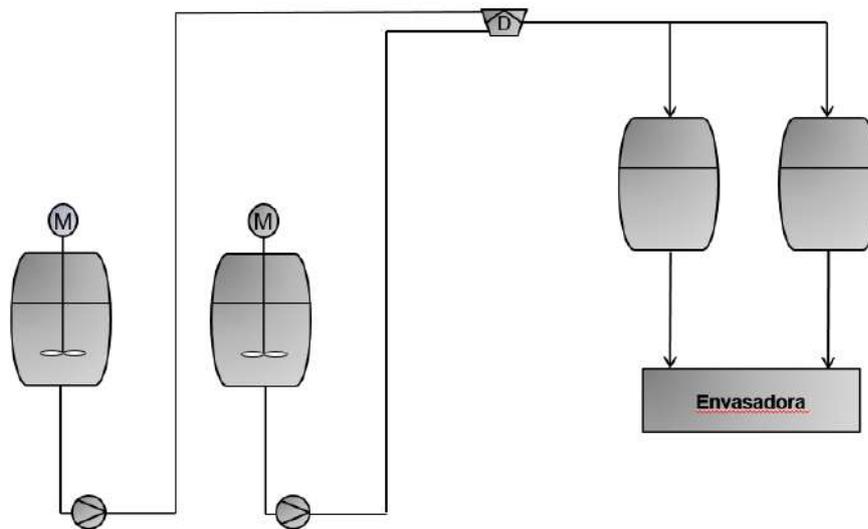


Figura 15 – Terceira sugestão para redesenho do processo produtivo

- Inserir um dispersor em linha e bombas de alto cisalhamento para diminuir a viscosidade, em caso de necessidade.

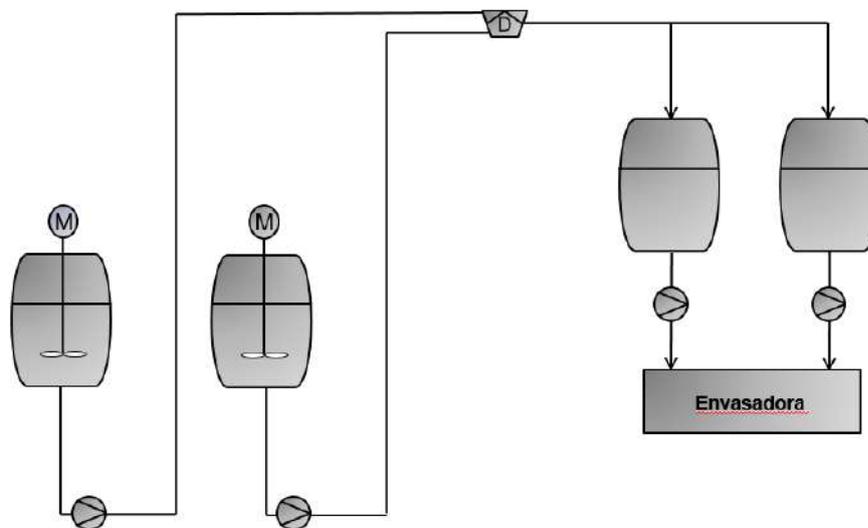


Figura 16 – Quarta sugestão para redesenho do processo produtivo

- Inserir agitadores/dispersores nos tanques pulmão, e também o dispersor em linha, e continuar envasando por gravidade:

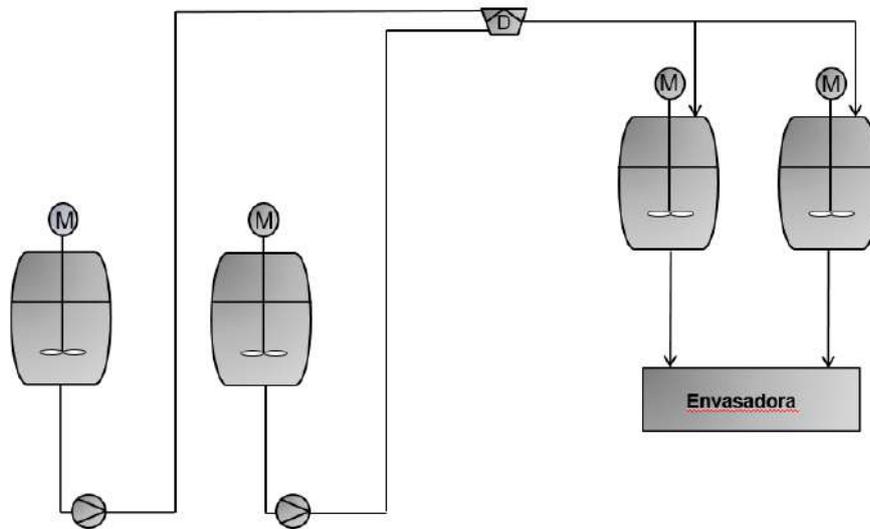


Figura 17 – Quinta sugestão para redesenho do processo produtivo.

- - Inserir agitadores/dispersores nos tanques pulmão e o dispersor em linha, além de colocar bombas de alto cisalhamento, para diminuir a viscosidade caso fosse necessário.

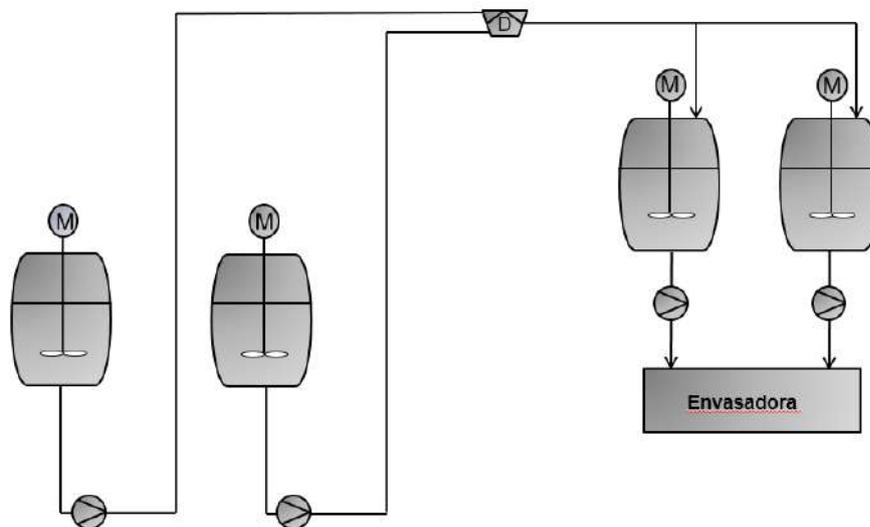


Figura 18 – Sexta sugestão para redesenho do processo produtivo

Como resultado, o impacto econômico foi gigantesco: havia um projeto de ampliação de produção do produto X, em que seriam investidos R\$ 500 mil reais (Reatores, tubulações, etc), que pôde ser cancelado graças a essa melhoria nos cálculos de perda de carga e abertura de sugestões para otimização processos.

Além disso, levando em consideração o mês em que mais haveria a produção de X no ano (270 mil toneladas), haveria a possibilidade de um ganho de 165 h, o equivalente a aproximadamente 1 semana de fábrica

rodando em 3 turnos. Nessa 1 semana, haveria economia em Hora-Homem, Hora-Máquina e aumento de flexibilidade da fábrica, já que alguns tanques envolvidos nessa produção também eram utilizados em outros processos de produção.

3.4. Estudo de caso 3: Trocador de Calor

Com o tempo, foi-se percebendo que muitos fornecedores de equipamentos não sabiam como calcular perda de carga considerando fluidos não newtonianos, e mesmo assim, era necessário testar a viabilidade de uma série de novos projetos, e superar a falta de know-how dos fornecedores de equipamentos.

Em determinada parte do processo de produção, trabalhavam dois moinhos de esferas em série. A vazão do moinho era o gargalo da produção, em função de existir uma temperatura máxima de operação para cada fluido em questão. Ou seja, não se podia aumentar a vazão inadvertidamente já que, para isso, seria necessário aumentar a rotação do moinho. Esse aumento de rotação geraria problemas de desarme dos mesmos por temperatura alta, graças a um sistema de controle instalado para garantir a integridade do produto.

Após o estudo de fluidos não newtonianos, havia a possibilidade de que os cálculos permitissem a instalação de um trocador de calor entre os moinhos, possibilitando o aumento da vazão de moagem. Entretanto, algumas dificuldades foram enfrentadas:

- O trocador de calor ideal para o processo de produção era em formato espiral;
- Ao entrar em contato com o fornecedor, ele não disponibilizou a memória de cálculo da perda de carga para seu equipamento e também não foram achadas metodologias de cálculo para trocadores em espiral na literatura;
- O software usado pela empresa também não possuía metodologia de cálculo para fluidos não newtonianos;
- A única ajuda que o fornecedor poderia prover seria receber amostras dos produtos que passariam no trocador de calor, verificando a perda de carga com uma simulação das condições de escoamento que o fluido enfrentaria;

A forma de resolver esse desafio seria deduzir a perda de carga efetiva do trocador de calor a partir dos dados de uma simulação feita pelo fornecedor, realizando uma espécie de cálculo reverso. Ou seja, utilizar os dados da simulação, sabendo que a perda de carga calculada pelo software do trocador seria para um fluido newtoniano; achar o comprimento equivalente do trocador

de calor naquelas condições de escoamento; e aplicar esse comprimento equivalente no cálculo, finalmente podendo considerar seu comportamento não newtoniano.

Os dados da simulação foram:

Área transversal retangular (0,4 x 0,008) m ²	0,0032
Diâmetro equivalente à Área Transv. (m)	0,0638
Vazão mássica (kg/h)	1885
Densidade (kg/m ³)	1177
Viscosidade (cP)	760
Altura Estática (mcl)	0,6
Pressão no moinho (mcl abs.)	8,7
ΔP (bar g)	0,954

Tabela 12 – Dados da simulação feita pelo fornecedor

Utilizando-se a equação (2.12), calcula-se o fator de atrito de Darcy, considerado pelo software do trocador, usando os dados da Tabela 2:

Diâmetro equivalente à Área Transv. (m)	0,0638
Densidade (kg/m ³)	1177
Viscosidade (cP)	760
Vazão (m ³ /h)	1,60
Velocidade (m/s)	0,139
Número de Reynolds	13,7
Fator de atrito de Darcy	4,66

Tabela 13 – Dados para cálculo do fator de atrito de Darcy

Com o valor do fator de atrito de Darcy, é possível estimar uma perda de carga para o trocador e fazer cálculos iterativos para descobrir qual seria a pressão de descarga necessária para bombear esse fluido, vencendo a altura estática da situação e também a perda de carga do trocador.

Então, para chegar no valor correto de perda de carga, utilizou-se o recurso “atingir meta” do Excel, utilizado quando se sabe o resultado desejado de uma fórmula, mas não se sabe de qual entrada-valor a fórmula precisa para obter esse resultado. Desta forma, tínhamos como valor objetivo a pressão de descarga da bomba, que deveria ser o mais próximo possível de 0,954 (bar g), o qual era o valor da simulação feita pela empresa do trocador de calor, e este valor seria alterado por estimativas diferentes do comprimento equivalente do trocador de calor.

A tabela 14 demonstra de maneira mais claramente como o comprimento equivalente do trocador foi calculado: primeiramente, estimou-se o valor de 50m de comprimento equivalente, e calculou-se qual seria a pressão de descarga estimada para a bomba a partir dos dados da simulação que foram utilizados pelo fornecedor do trocador, mas o valor de pressão de

descarga para esse comprimento equivalente ainda estava longe de 0,954 (bar g). Desta forma, utilizou-se o recurso “atingir meta”, que calculou que 86,2 metros de comprimento equivalente gerariam o valor de 0,953 (bar g), resultado considerado satisfatório.

f	4,66
Comprimento equivalente estimado para o trocador (m)	50
Fator de correção para tubo velho	1,15
Velocidade (m/s)	0,139
Diâmetro Interno (m)	0,0638
Perda de carga estimada para o Trocador (mcl)	4,1
Altura Estática (mcl)	0,6
Pressão no local da saída (mcl.abs)	8,7
Margem de Segurança estimada (mcl)	0,41
Pressão de descarga da bomba estimada (mcl abs.)	13,8
Pressão de descarga da bomba estimada (bar g)	0,57
Ltotal correto (m)	86,2
Perda de carga estimada para o Trocador (mcl)	7,1
Margem de Segurança correta (mcl)	0,71
Pressão de descarga da bomba correta (mcl abs.)	17,0
Pressão de descarga da bomba correta (bar g)	0,953
Meta Pressão de descarga da bomba correta (bar g)	0,954

Tabela 14 – Dados para cálculo da perda de carga no trocador de calor

OBS: $P \text{ (bar g)} = (P \text{ (mcl abs.)} * \mu / 10,2) - 1,013$

Após descobrir qual seria o comprimento equivalente do trocador de calor, o próximo passo seria a caracterização reológica do produto. Para tanto, amostras do mesmo foram analisadas em um reômetro Haake Rheostress 1, disponível no laboratório da empresa, com uma varredura de 0 a 2000 s⁻¹, distribuídos em 50 pontos.

A primeira análise deveria ser a visual, a partir das curvas de tensão de cisalhamento x taxa de cisalhamento e o gráfico log-log dessas métricas, conforme é demonstrado a seguir.

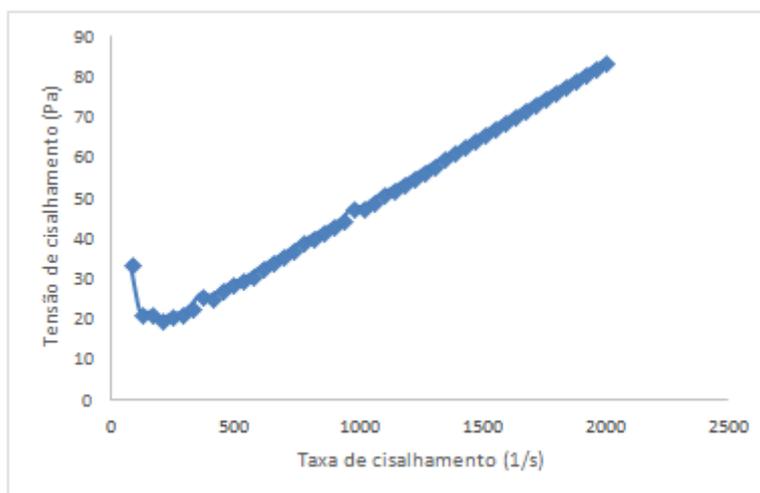


Figura 19 –Plot dos Dados de tensão vs taxa de cisalhamento

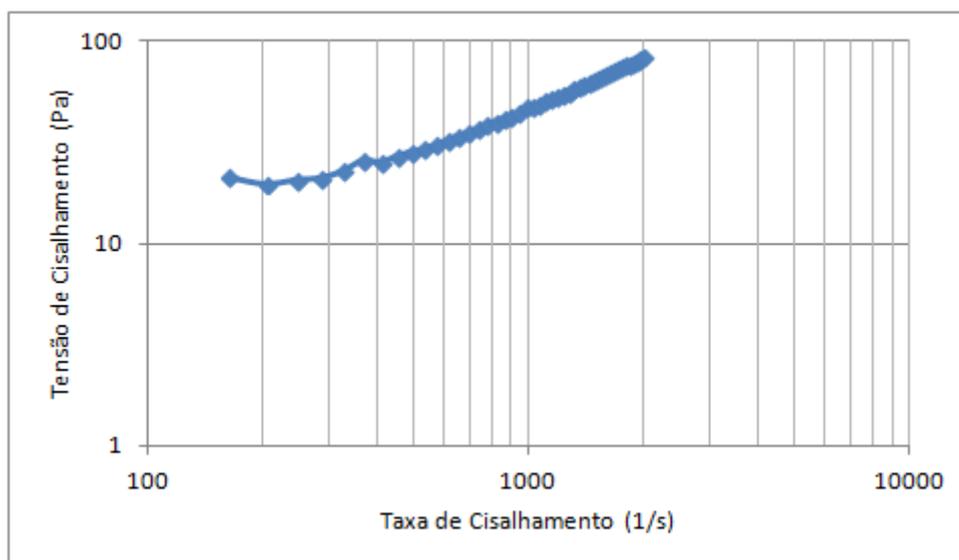


Figura 20 – Gráfico log-log da tensão vs taxa de cisalhamento.

Com base nos dados reológicos dispostos no apêndice A, figura A.2 foi feita a análise no programa Statistica, determinando os valores dos parâmetros, o desvio padrão dos mesmos, a função objetivo e o coeficiente de determinação para cada modelo. Os resultados estão dispostos a seguir:

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
T _{HB}	19,32236	1,223843
M	0,00362	0,001854
N	1,29095	0,066563
Função Objetivo	246,7418	-
R ²	0,986719	-

Tabela 15 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo de Herschel-Bulkley.

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
T _B	13,57897	0,873706
M	0,03444	0,000738
Função Objetivo	384,0617	-
R ²	0,979328	-

Tabela 16 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo de Bingham.

Parâmetro	Estimativa	Desvio Padrão
M	0,387749	0,084744
N	0,701733	0,030317
Função Objetivo	971,5465	-
R ²	0,947707	-

Tabela 17 – Parâmetros encontrados com o ajuste de dados para o modelo Power Law.

Percebe-se que o modelo de Herschel-Bulkley seria o mais adequado para os cálculos, já que este modelo é o que possui menor valor da função

objetivo. Portanto, era necessário descobrir o fator de atrito para fluidos do tipo Herschel-Bulkley.

Assim como o estudo de caso 1, o número de Reynolds poderia ser calculado de duas maneiras. Uma das formas é calcular diretamente pelos dados da situação, explicitados na Tabela 9 a seguir:

Diâmetro interno (metros) (DN 50 - 10HA01)	0,0478
Vazão (m ³ /hora)	1,2
Velocidade (m/s)	0,186
Densidade (kg/m ³)	1177
T ₀	19,32236
M	0,00362
N	1,29095
Re (calculado diretamente)	1146
He	82810

Tabela 18 – Dados para cálculo dos números de Reynolds e Hedstrom

Além disso, o valor do parâmetro “c” também era necessário para o cálculo do fator de atrito, conforme as equações (2.16) e (2.17). Diante dessa situação, a solução foi utilizar o valor de Reynolds calculado diretamente pela equação (2.18) como valor objetivo utilizando o recurso do MS Excel conhecido como Atingir Meta. Para tanto, estimou-se o valor de “c”, e calculou-se, a partir da equação (2.20), um segundo valor de Reynolds, hipotético. Entretanto, esse valor hipotético de Reynolds deveria ser igual àquele calculado diretamente pela equação (2.18). Logo, o recurso Atingir Meta variou o parâmetro “c” até que a equação (2.20) atingisse 1146, mesmo valor da equação (2.18). Essa estratégia resultou no valor de “c” de aproximadamente 0,90, e do fator de atrito, de 1,06. A Tabela 19 demonstra essa estratégia.

C estimado	0,5
Re (função de C)	9308
f estimado	3,2511
Re (calculado diretamente - referência)	1146
Valor do C correto (após atingir Meta)	0,8969
f correto	1,0568

Tabela 19 – Dados para cálculo do fator de atrito

Com o valor do fator de atrito, seguiu-se para o cálculo da perda de carga e da pressão de descarga resultante comparando-se esse valor com a pressão decorrente do cálculo de f para fluidos Newtonianos para checar a diferença.

Vazão (m ³ /h)	1,2
---------------------------	-----

Diâmetro interno (metros) (DN 50 - 10HA01)	0,0478
Velocidade (m/s)	0,186
Densidade (kg/m ³)	1177
Tau 0	19,32236
M	0,00362
N	1,29095
Número de Reynolds (Herschel-Bulkley)	1146
Valor do C correto (após atingir Meta)	0,8969
f (Herschel-Bulkley)	1,0568
Comprimento Total (m)	230,9
Altura Estática (mcl)	5,24
Pressão no Tanque (mcl. Abs)	8,7733
Perda de carga em tubulação (mcl)	36,09
Pressão de descarga (mcl.abs)	50,10
Pressão de descarga (bar g)	4,8
Valores calculados pelo método padrão:	
Número de Reynolds Newtoniano	13,75
F Newtoniano	4,6543
Perda de carga em tubulação f Newton. (mcl)	39,54
Pressão de descarga (mcl.abs)	53,55
Pressão de descarga com f Newtoniano	5,3

Tabela 20 – Dados comparando pressão de descarga com diferentes fatores de atrito

Considerando que o valor de perda de carga considerando o fluido como Herschel-Bulkley foi muito parecido com o Newtoniano, e que o valor da função objetivo considerando o fluido como Plástico de Bingham era bem próximo, resolveu-se checar qual seria a perda de carga para este último caso. Para realizar tal teste, era necessário saber quais equações seriam utilizadas para calcular o fator de atrito para fluidos de Bingham. A seguir, está disposta uma breve explicação sobre como tal valor é encontrado.

Para descobrir o fator de atrito para plásticos de Bingham, deve-se usar a equação^[1] abaixo:

$$\frac{1}{Re_B} = \frac{f_F}{16} - \frac{He}{6(Re_B)^2} + \frac{He^4}{3f_F^3(Re_B)^8} \quad (3.3)$$

Entretanto, essa equação só funcionará se o Reynolds calculado for menor ou igual ao Reynolds crítico, ou seja, se respeitar a seguinte inequação^[1]:

$$Re_B \leq \frac{He}{8c_c} \left(1 - \frac{4}{3}c_c + \frac{1}{3}c_c^4 \right) = Re_{B\text{ crítico}} \quad (3.4)$$

em que

$Re = \frac{\rho \bar{V} D}{m}$ <p>(3.5)</p>	$He = \frac{D^2 \tau_0 \rho}{m^2}$ <p>(3.6)</p>	$\frac{c_c}{(1 - c_c)^3} = \frac{He}{16800}$ <p>(3.7)</p>
--	---	---

Os números de Reynolds^[1] e Headstrom^[1] são calculados diretamente pelos dados da situação da fábrica, evidenciados na tabela a seguir.

Diâmetro interno (metros) (DN 50 - 10HA01)	0,0478
Vazão (m³/hora)	1,2
Velocidade (m/s)	0,186
Densidade (kg/m³)	1177
m	0,0344
τ_0	13,579
Re	303,48
He	30795

Tabela 21 – Dados para cálculo dos números de Reynolds e Headstrom

É possível observar que as equações utilizam uma variável intermediária, c_c . Para seu cálculo, estima-se um valor qualquer. Depois, cria-se uma célula em que calcula-se a diferença entre os lados esquerdo e direito da equação (3.7). Para chegar ao valor correto de c_c , utiliza-se o recurso “atingir meta” do excel, fazendo com que a célula que calcula a diferença entre os dois lados da equação (3.7) busque atingir o valor de zero a partir da variação de c_c .

c_c estimado	0,9
$c_c / (1 - c_c)^3$	900
$He/16800$	1,833
Diferença entre os dois dados acima	898,17
Valor da diferença após atingir meta (~0)	0,000881
c_c correto	0,3987

Tabela 22 – Dados para cálculo de C_c

Com o valor de c_c , é possível calcular o Reynolds crítico e confirmar que o Reynolds da situação era menor, possibilitando a utilização da equação (3.3). Já para achar o fator de atrito adequado, estima-se um valor de fator de atrito, calculam-se os dois lados da equação (3.3), cria-se uma célula com a diferença entre os dois lados, e utiliza-se novamente o recurso “atingir meta”, com o intuito de reduzir essa diferença pra zero, e achar o valor correto do fator de atrito (mesmo método utilizado para calcular c_c).

f estimado	0,2
$1/Re$ (Lado esquerdo da equação)	0,003295

f/16	0,0125
$He/(6*(Re)^2)$	0,055728
$He^4/(3* f^3 *(Re)^8)$	0,520817
Lado direito da equação	0,477589
Valor da diferença após atingir meta (~0)	0,000686
f correto	0,54617

Tabela 23 – Dados para cálculo do fator de atrito

A partir desse momento, têm-se todos os dados para cálculo da perda de carga. Entrou-se em contato com a empresa e pediu-se que enviasse um trocador de calor para um teste que seria efetuado na parada de fábrica. Aplicou-se a metodologia de cálculo do fator de atrito para fluidos do tipo Plástico de Bingham, resultando uma perda de carga calculada (2,9 bar g) maior que a constatada pelo manômetro (1,4 bar g), mas ainda foi muito melhor do que a perda de carga para fluidos Newtonianos, que seria de (5,3 bar g), conforme tabela a seguir.

Vazão (m³/h)	1,2
Diâmetro interno (metros) (DN 50 - 10HA01)	0,0478
Velocidade (m/s)	0,1858
Densidade (kg/m³)	1177
m	0,0344
τ_0	13,579
Número de Reynolds (Bingham)	303,48
Número de Reynolds Crítico (Bingham)	4605,45
f (Bingham)	0,5461
Comprimento Total (m)	230,9
Altura Estática (mcl)	5,24
Pressão no Tanque (mcl. Abs)	8,77
Perda de carga em tubulação (mcl)	18,56
Pressão de descarga (mcl.abs)	32,57
Pressão de descarga (bar g)	2,9
Pressão de descarga no manômetro (bar g)	1,4
Valores calculados pelo método padrão:	
Número de Reynolds Newtoniano	13,75
F Newtoniano	4,6543
Perda de carga em tubulação f Newton. (mcl)	53,55
Pressão de descarga com f Newtoniano	5,3

Tabela 24 – Dados comparando pressão de descarga com diferentes fatores de atrito

Comprova-se um trocador de calor em formato espiral (marca e modelo não podem ser evidenciados por questões de segurança de informação) para a linha instalada, sendo possível duplicar a vazão de moagem.

3.5. Reflexão

Imagina-se todo o potencial demonstrado neste trabalho realizado nessa empresa em nível mundial. Enxergando esse potencial, pensou-se em como otimizar o tempo dispendido com os cálculos apresentados, torná-los mais simples e precisos do que o que foi feito a priori utilizando o MS Excel e apresentar uma interface mais amigável para o usuário. Para tanto, será feita uma apresentação do programa desenvolvido para sanar tais demandas.

4. SOBRE O PROGRAMA

4.1. Introdução

O programa consiste de uma interface de cálculo executada por meio do software Scilab. O Scilab é uma variedade open – source do Matlab, possuindo uma estrutura de programas e sintaxe extremamente semelhante. Há nele a combinação de dois fatores interessantes: a possibilidade de construir uma interface, bem como o cálculo simplificado com vetores e matrizes, muito utilizado em diferentes momentos. Além disso, pesou a facilidade de uso, pela prévia familiaridade com o Matlab.

A rotina de cálculo é separada em duas partes fundamentais e parcialmente independentes: a parametrização dos modelos a partir dos dados e a previsão do escoamento (vazão ou queda de pressão) ditado pela reologia ajustada.

Existe uma série de condições que guiaram a construção do procedimento de cálculo, listadas a seguir. Algumas surgiram a partir de condições anteriores de projeto e outras foram arbitradas para guiar o programa em determinada direção desejada.

- O programa parte de dados de tensão de cisalhamento e de taxa de cisalhamento, ou seja, a leitura de um viscosímetro rotacional. Seria possível trabalhar diretamente com queda de pressão e vazão de um viscosímetro de tubo, por exemplo, mas isso levaria a uma metodologia paralela, o que foi descartado no início do projeto.

- Partindo desses dados, trabalhar com os modelos reológicos é um segundo passo natural, já que são definidos exatamente em termos dessas variáveis. Naturalmente, todo modelo precisa ser previsto a priori no programa.

- Existem, naturalmente, condições que determinam se o modelo é adequado para a metodologia utilizada. O cálculo laminar exige a resolução da integral apresentada a seguir:

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_0}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 f(\tau) d\tau \quad (4.1)$$

Isso implica que o termo da taxa de cisalhamento precisa necessariamente ser separável para que ocorra a resolução da equação

diferencial por integração. Um número razoável de modelos não atende essa condição, como Cross, Carreau, Sisko, etc.

- Para o cálculo turbulento, embora seja uma condição extremamente provável, é necessário que a relação laminar $Q(\tau_w)$ seja contínua e diferenciável, com derivada também contínua, ao menos na região da função de interesse para determinado escoamento.

- A metodologia considera que o escoamento seja unidirecional, plenamente desenvolvido, incompressível, em um tubo circular de seção reta constante. Isso permite eliminar os termos de velocidade e de correção de energia cinética do balanço de energia, simplificando tremendamente os cálculos. Na prática, restam apenas os termos de pressão de coluna líquida e de perda de carga. Considera-se que o caráter não newtoniano afeta apenas a perda de carga distribuída, com a perda de carga localizada sendo uma adaptação do método newtoniano com o fator de atrito relevante. Essa é de certa maneira a recomendação da literatura.

Essas são as limitações dadas pela maneira como foi construída a rotina de cálculo. É possível sequer trabalhar com funções de vazão, lançando por terra boa parte dessas condições, seguindo outra estratégia baseada em medidas experimentais de vazão e de queda de pressão. De maneira semelhante, existem metodologias de cálculo para o fator de correção da energia cinética do balanço, permitindo o projeto com variações de velocidade, bem como correlações para acidentes levando em conta a não idealidade do fluido. Restrições adicionais inerentes aos métodos utilizados, como no cálculo turbulento pela metodologia de Dodge – Metzner, não estão listados aqui.

4.2. Visão geral da interface com o usuário

The interface is divided into four main sections:

- Rheological data:** Shear Stress (Pa · s) with values 58.07, 70, 71.6, 73.85; Shear Rate (s⁻¹) with values .582, 1.77, 2.17, 2.43.
- Flow data:** Flow Rate (m³ · s⁻¹), Diameter (m) = 0.2, Length (m) = 100, Density (kg · m⁻³) = 850, Static Pressure (m) = 10, Pipe Roughness (m) = 1e-5, Pressure Drop (bar) = 2.5. Includes **Run** and **Reset** buttons.
- Fluid model fit:** Best Fit = Herschel; TauH = 31.61 +- 8.1109; m = 31.186 +- 8.3991; n = 0.3374 +- 0.0952. Includes **Previous** and **Next** buttons.
- Expected flow data:** Pressure Drop (bar) = 2.5; Flow Rate (m³ · s⁻¹) = 0.0119.

Figura 21 - Interface do programa.

Após preencher os dados reológicos, há a decisão quanto a calcular a queda de pressão ou a vazão; caso ambos sejam marcados; a queda de pressão é desconsiderada e recalculada pelo programa.

Com os dados reológicos devidamente preenchidos, o botão *Run* inicia os cálculos indicados anteriormente, gerando os parâmetros dos modelos e os demais cálculos reológicos, como vazão calculada(Q) ou perda de carga. O botão *Clear* limpa todas as janelas.

Plot abre a segunda janela, em que os gráficos de ajuste estatístico podem ser avaliados para cada modelo.

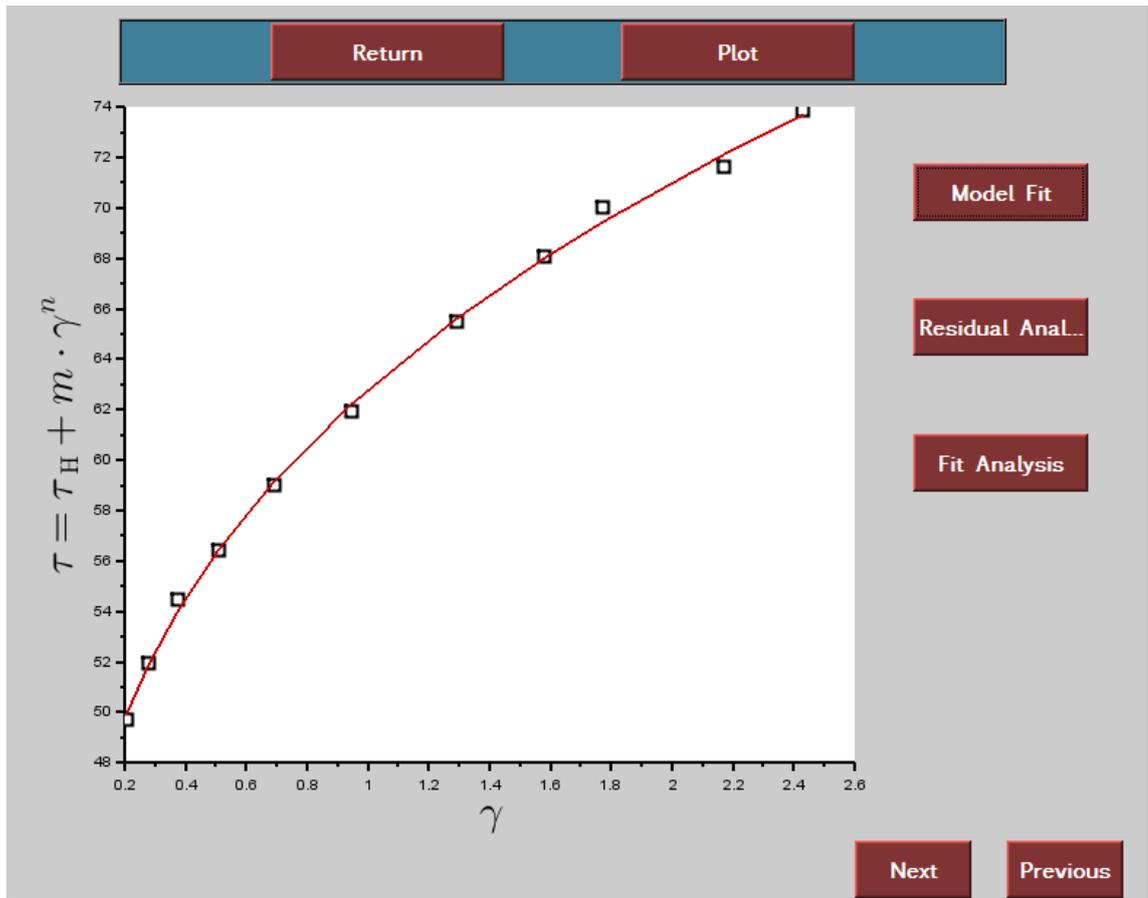


Figura 22 – Segunda tela da interface.

5. AJUSTE DE MODELOS REOLÓGICOS

5.1. Caracterização dos modelos

A primeira parte do programa é responsável por determinar o modelo reológico que melhor se ajusta aos dados experimentais fornecidos pelo usuário. Especificamente, o programa deve receber uma curva de tensão de cisalhamento contra taxa de cisalhamento, obtida por um viscosímetro. Esses dados caracterizam o comportamento reológico do fluido dentro da faixa de taxas mensuradas, permitindo avaliar a natureza do desvio em relação ao comportamento newtoniano, bem como de maneira prática estimar a pressão de bombeamento necessária para o seu escoamento.

Como notado anteriormente, a metodologia empregada no programa precisa partir de um modelo reológico previamente especificado. Com esse objetivo e buscando capturar uma série de comportamentos possíveis, foram implementados seis modelos, cabendo ao algoritmo determinar os parâmetros que minimizam, pelo método dos mínimos quadrados, o erro de previsão de cada um. Além dos modelos vistos nos estudos de caso, foram incluídas as relações de Casson e de Ellis.

Após a parametrização, o algoritmo utiliza uma série de critérios, como a razão relativa entre os menores erros e testes estatísticos de validade e qualidade do ajuste, para selecionar por um sistema de pontuação a função que melhor se adequa aos dados. Isso permite obter uma comparação rápida entre modelos, o que aliado aos resultados e gráficos permite uma decisão flexível e melhor embasada do usuário.

Os modelos reológicos possuem diversas peculiaridades, sendo de modo geral modificações empíricas da equação da viscosidade usual, com algumas exceções. Por vezes argumentos físicos sustentam uma forma particular, como ocorre com o modelo de Ellis, que é visto como uma versão mais refinada do de Ostwald–de Waele^[2]. No entanto, ele perde flexibilidade, não sendo capaz de ajustar os raros fluidos dilatantes, além de possuir uma parametrização muito mais complexa. Desse modo, fica clara a vantagem de um teste que compreenda diversos modelos, ainda que o espectro de análise já esteja limitado aos fluidos inelásticos e independentes do tempo.

Quanto ao ajuste, a característica mais relevante da função é a sua linearidade, já que a regressão linear possui solução analítica, ao passo que modelos não lineares exigem métodos numéricos. Uma descrição sucinta é feita a seguir, sem se preocupar com a definição rigorosa das expressões.

5.1.1. Lineares

Newtoniano

$$\tau = m\gamma \quad (5.1)$$

O parâmetro único pode ser obtido por uma regressão linear simples modificada para fixar o parâmetro do intercepto em zero.

Bingham

$$\tau = \tau_B + m\gamma \quad (5.2)$$

Ambos os parâmetros podem ser obtidos por regressão linear simples. Naturalmente, Bingham tende ao modelo newtoniano quando o intercepto tende a zero. Na prática, a média da distribuição do parâmetro do intercepto dificilmente será zero, havendo uma pequena diferença entre os parâmetros m de ambos os modelos. Dado que ambos são facilmente implementáveis, é mais simples em termos de implementação construí-los separadamente do que inserir um critério de decisão.

5.1.2. Linearizáveis

Por vezes modelos não lineares podem ser linearizados por uma transformação simples. Por exemplo, o modelo de Ostwald-de Waele pode ser linearizado da seguinte forma:

$$\tau = m\gamma^n \leftrightarrow \ln(\tau) = \ln(m) + n \cdot \ln(\gamma) \quad (5.3)$$

Claramente, a segunda equação é a de uma reta, obtida pela aplicação de logaritmos em ambos os lados da primeira expressão.

Nesse caso, a regressão linear é resolvida para n e $\ln(m)$, de onde pode-se calcular $m = e^{\ln(m)}$. No entanto, essa técnica não garante a

determinação do mínimo da função objetivo, não sendo a regressão linear de dados log – log nem mesmo a opção mais recomendada^[4]. Buscando minimizar a função objetivo, os parâmetros obtidos servem como ponto inicial para o método de Gauss-Newton, superando uma das dificuldades do mesmo, o que simplifica sua implementação comparado aos modelos de fato não lineares. Naturalmente, o método de Gauss-Newton é aplicado à relação não linear original.

Algo semelhante ocorre na formulação linearizável do modelo de Casson (existe uma formulação em que o expoente é um parâmetro ajustável):

$$\tau = (\sqrt{\tau_C} + \sqrt{m \cdot \gamma})^2 \leftrightarrow \sqrt{\tau} = \sqrt{\tau_C} + \sqrt{m \cdot \gamma} \quad (5.4)$$

Os parâmetros obtidos novamente são utilizados como ponto inicial para Gauss – Newton, seguindo a estratégia aplicada para a minimização da função objetivo de Ostwald.

5.1.3. Não – lineares

Nesse caso, não é possível aplicar diretamente a regressão linear. Esses modelos tendem a ter mais de dois parâmetros e não são linearizáveis por meio de qualquer tipo de transformação.

Herschel – Bulkley

$$\tau = \tau_H + m \cdot \gamma^n \quad (5.5)$$

A combinação, em termos matemáticos, do modelo de Ostwald–de Waele com um intercepto gera uma expressão mais flexível, porém não linear.

Ellis

$$\tau = \frac{m \cdot \gamma}{\left(1 + \left(\frac{\tau}{\tau_E}\right)^n\right)} \quad (5.6)$$

Esse modelo é o mais complexo do programa, envolvendo uma expressão implícita na tensão de cisalhamento. A ideia presente em sua

formulação é a de modelar um fluido com comportamento Newtoniano sob tensões de cisalhamento elevadas, mas que apresente desvios em condições mais brandas de escoamento.

5.2. Técnicas utilizadas na otimização dos parâmetros

5.2.1. Regressão linear

É necessário mostrar a metodologia de regressão linear para melhor compreensão das equações utilizadas. Fez-se uma abordagem resumida do material presente em Kutner^[5], a fim de ilustrar os principais conceitos.

É suposto um modelo linear simples, $Y = X\beta + \varepsilon$, em que Y é uma matriz $n \times 1$ da variável resposta, β é um vetor 2×1 contendo os parâmetros da regressão e X é uma matriz relacionada à variável preditora, geralmente na forma:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}_{n \times 2}$$

Note que quando o intercepto é fixado como zero (modelo Newtoniano), a forma de X é simplificada e β se torna um escalar, permanecendo Y inalterado:

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}_{n \times 1}$$

O termo ε , vetor de dimensão idêntica à de Y , corresponde ao erro aleatório do modelo. Isso implica que Y é também uma variável aleatória. Para desenvolver o problema, as seguintes hipóteses são consideradas válidas:

- $E\{\varepsilon\} = 0$ (média nula para os erros) e $\sigma^2\{\varepsilon\} = \sigma^2$, em que a variância é considerada constante em cada termo de erro. Além disso, os elementos do vetor erro são considerados independentes. A distribuição dos erros deve ser normal.

- Disso é possível concluir que $E\{Y\} = X\beta$, ou seja, a reta dada pela regressão corresponde à média da distribuição da variável resposta.

Satisfeitas as hipóteses necessárias, a existência ou não da relação linear entre os dados pode ser examinada. Para tal, a abordagem mais comum é a minimização do erro, por mínimos quadrados, para obter uma estimativa adequada dos parâmetros. Nesse caso, é possível mostrar que o vetor de parâmetros ótimo é dado por:

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Na prática, essa escolha minimiza a distância vertical entre os dados experimentais e a reta, ao minimizar a equação $SSE = \sum(Y - X\beta)^2$.

5.2.2. Formulações úteis na regressão linear

Note que é possível ajustar m vetores Y a um mesmo conjunto X com uma única etapa de cálculo. Embora fisicamente a idéia de possuir uma série de dados de resposta gerados a partir da repetição exata da variável dependente não pareça ser algo factível, essa formulação é útil para condensar o código do Scilab em certos testes estatísticos, onde um resultado derivado de cada modelo é comparado com alguma das variáveis de regressão.

$$Y_{nxm} = X_{nx2} \beta_{2xm} + \varepsilon_{nxm}$$

Após a determinação dos parâmetros, normalmente deseja-se calcular os resíduos da regressão. Para um modelo linear, as seguintes relações são válidas:

$$\varepsilon = Y - X\beta = Y - \hat{Y} = Y - HY$$

Em que $H = X(X^T X)^{-1} X^T$ é a chamada matriz projeção ou matriz chapéu. Essa matriz é útil ao permitir a formulação de uma série de cálculos em termos dos valores da variável resposta. Em termos de H :

$$SSE = \varepsilon^T \varepsilon = Y^T (I - H)Y$$

$$MSE = \frac{SSE}{df}$$

$$s = \sqrt{MSE * diag((X^T X)^{-1})} \quad (5.6)$$

Em que I é a matriz identidade, $df - par$ corresponde ao número de graus de liberdade efetivos do modelo (descontados os parâmetros, fixados) e $diag$ é definido como um operador que extrai a diagonal principal de uma matriz e gera um vetor coluna.

Essas formulações simplificam a implementação das equações no programa, evitando expressões mais complexas e somatórios presentes em construções alternativas, feitas elemento a elemento.

5.2.3. Gauss – Newton

Para os modelos de Casson e Ostwald – de Waele, o ponto inicial obtido pela linearização dos modelos alimenta a iteração desse método. Uma modificação do método de Newton usual para problemas de mínimos quadrados, em que o vetor resíduo é geralmente pequeno, o método adota uma aproximação da Hessiana da função-objetivo usual, como descrito em Seber e Wild^[6]:

$$H = J(r(\beta))^T J(r(\beta)) + \sum_{i=1}^n r_i(\beta) \nabla^2 r_i(\beta) \approx J(r(\beta))^T J(r(\beta))$$

A variável β corresponde aos parâmetros, sendo $f(\beta)$ o vetor resíduo.

J é a matriz jacobiana de dimensão $n \times \beta$, onde n é o número de equações (número de entradas nos vetores $\tau e \gamma$) e β é o número de parâmetros do modelo. Ela é definida como a matriz das derivadas parciais da função vetorial em relação aos seus parâmetros. A iteração do método é dada por:

$$\beta_{k+1} = \beta_k + H^{-1}J^T f(\beta_k) \quad (5.7)$$

5.2.4. Seção Áurea unidimensional

O método da seção áurea consiste em um procedimento numérico de eliminação de intervalos. O método utiliza dois valores iniciais e assume por hipótese que a função seja unimodal nesse intervalo; caso contrário, o método encontrará apenas um dos vários pontos críticos.

O algoritmo faz uso da razão áurea, $\varphi \approx 1,618$, para eliminar intervalos da maneira mais eficiente possível. Como são necessárias apenas avaliações do valor da função, o método é relativamente simples se comparado com métodos tipo – Newton, com a desvantagem de exigir uma função unimodal e de que o intervalo onde se situa o mínimo seja estimado inicialmente.

Partindo do intervalo inicial, $[n_i; n_s]$, o algoritmo gera dois novos pontos em $n_i + \varphi(n_s - n_i)$ e $n_s - \varphi(n_s - n_i)$, obtendo o valor da função-objetivo em ambos os pontos. Como nesse caso há um problema de minimização, o ponto com o maior valor da função é considerado o novo limite (superior ou inferior) do intervalo, excluindo-se uma das extremidades originais. Isso se justifica pela presença de um único mínimo; a função somente cresceria naquele sentido, estando o mínimo no intervalo restante. O algoritmo avança com o cálculo de duas novas posições dentro do novo intervalo reduzido; no entanto, graças à razão áurea, um dos novos pontos será um dos mesmos do intervalo anterior, de modo que apenas uma avaliação de função é necessária em cada iteração.

Naturalmente, não há qualquer motivo para acreditar que as funções objetivo inseridas nesse método serão de fato unimodais, quando normalmente elas possuem alguns mínimos locais. No entanto, como ele é aplicado ao modelo de Ellis, cuja Jacobiana não pode ser explicitada, a única alternativa seria Gauss – Newton com cálculo numérico do gradiente, caindo no problema de estimar um valor inicial que facilite a convergência do mesmo, outra situação problemática.

Como a seção áurea pode ser montada para a variável do expoente, exigindo apenas posteriormente uma regressão linear e o cálculo de dois pontos da função por iteração, sua segurança foi preferida para implementação no programa. Além disso, a eliminação de intervalos tende a ter robustez suficiente para escapar de mínimos locais, desde que o intervalo com o mínimo global não seja eliminado prematuramente.

5.2.5. Notas quanto aos modelos não – lineares

Para um modelo não – linear, não é possível assumir uma forma particular por hipótese, restando a formulação genérica $Y = f(X, \beta) + \varepsilon$. Os parâmetros devem ser estimados numericamente, e toda a formulação matricial não se aplica.

Os resíduos podem ser calculados diretamente na forma $\varepsilon = Y - f(X, \beta) = Y - \hat{Y}$. Isso permite obter o somatório do quadrado dos erros, bem como eventualmente o coeficiente de determinação, se desejado. A variância dos parâmetros depende do cálculo da matriz Hessiana (derivadas de segunda ordem da função com relação aos parâmetros). Para computar a Hessiana, utilizou-se excepcionalmente uma função interna do Scilab, *numderivative*, que fornece uma estimativa numérica das derivadas da função.

A função objetivo é dada em nova notação por:

$$f(r(\beta)) = \frac{1}{2} r(\beta)^T r(\beta) \quad (5.7)$$

Em que r é novamente o resíduo do modelo

As derivadas seguem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \nabla f(r(\beta)) &= J(r(\beta))^T r(\beta) \\ \nabla^2 f(r(\beta)) &= H(r(\beta)) = J(r(\beta))^T J(r(\beta)) + \sum_{k=1}^m r_k(\beta) \nabla^2 r_k(\beta) \end{aligned} \quad (5.8)$$

Caso não seja prático estimar a Hessiana, uma alternativa é aproximá-la, no contexto da resolução de problemas de mínimos quadrados, pela expressão notada anteriormente em Gauss – Newton:

$$H(r(\beta)) \approx J(r(\beta))^T J(r(\beta))$$

A estimativa se torna melhor conforme diminui a magnitude do resíduo do modelo. Para os poucos exemplos testados neste trabalho, a aproximação gera resultados satisfatórios, levando em conta sua simplicidade. Em outra nota, particularmente para o caso linear, tem – se:

$$H(r(\beta)) = J(r(\beta))^T J(r(\beta)) = X^T X \quad (5.9)$$

Com X, como definido no caso linear, dado por $X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}_{n \times 2}$

A primeira relação é clara já que a derivada segunda do resíduo é zero nesse caso, eliminando o segundo termo da composição da Hessiana. A segunda surge da relação geral da Hessiana com a matriz covariância.

5.2.5.1. Herschel - Bulkley

.Para os modelos de três parâmetros, a regressão deve ser necessariamente não linear. Em vez de se proceder diretamente por um método do tipo Gauss-Newton ou equivalente, foram buscadas alternativas mais robustas, ainda que pudessem sacrificar um pouco de precisão e desempenho. Os métodos tipo Newton, embora eficientes, podem ter problemas de convergência, especialmente quando são multidimensionais e o chute inicial não é claro, como é o caso desses modelos reológicos.

Kelessidis et al^[7] citam o uso do método da seção áurea para determinação de um parâmetro do modelo de Herschel – Bulkley (τ_B) e posterior regressão linear com os parâmetros restantes. Os resultados são satisfatórios, ainda que menos precisos, e possuem maior facilidade de implementação. Já Mullineux^[8] propõe que a estrutura das equações normais

do modelo, embora não lineares, permitem a obtenção do parâmetro n que minimiza, juntamente com os demais parâmetros obtidos por regressão linear, a soma dos quadrados dos erros.

$$F(n) = \begin{vmatrix} m & \sum x^n & \sum x^n \ln x \\ \sum x^n & \sum x^{2n} & \sum x^{2n} \ln x \\ \sum y & \sum x^n y & \sum x^n y \ln x \end{vmatrix} = 0.$$

Nessa equação em especial, m é o número de linhas do vetor Y , não devendo ser confundido com um dos parâmetros.

O método se baseia na resolução de uma equação não linear, dada por um determinante construído a partir das equações normais, dependente apenas de n . Qualquer método numérico simples pode ser utilizado, sendo que o autor sugere o uso do método da bisseção. De posse do valor de n , é possível então fazer a regressão assumindo a reta com parâmetros m e τ_B :

$$\tau = \tau_B + m(\gamma^n)$$

5.2.5.2. Ellis

Embora o modelo de Ellis seja reportado regularmente na literatura, procedimentos para ajustar seus parâmetros a partir de dados reológicos são pouco frequentes. Matsuhisa e Bird^[2] propõem um método gráfico, enquanto Tien e Tsuei^[9] atribuem diversos valores ao parâmetro m , seguidos de ajuste linear, para determinar o conjunto de parâmetros ideal.

Para o programa, utilizou-se o método da seção áurea univariável combinada com a regressão linear para ajustar os dados reológicos. Como o intervalo de valores possíveis para n é relativamente limitado, ele fornece a variável ideal para ser utilizada na seção áurea. Com os valores de n dados pelo intervalo de busca desejado, os demais parâmetros são determinados por regressão linear, de modo a obter o valor da função objetivo $SSE = \sum(Y - f(X, \beta))^2$. De acordo com os critérios da seção áurea, um intervalo é

eliminado, prosseguindo até que o tamanho do intervalo atinja uma tolerância especificada.

5.3. Ordenamento dos modelos

O passo seguinte consiste em identificar a qualidade dos ajustes de cada modelo quando comparados aos dados. A análise não é muito rigorosa, mas busca evidenciar comportamentos problemáticos dos dados, bem como estabelecer conclusões óbvias sem haver necessidade do usuário comparar individualmente erros ou gerar gráficos.

Como regra geral, os resultados dessa análise são mais válidos na medida em que aumenta a amostra analisada. Embora não desqualifiquem de imediato qualquer resultado, um número pequeno de dados pode gerar interpretações equivocadas ou inconclusivas^[3].

De modo geral, todos os critérios adotados para gerar a pontuação do modelo possuem forte correlação com o erro do ajuste (em termos mais rigorosos, com a *SSE*). Embora a comparação direta dos erros possa ser um critério adequado, e utilizado na prática, a adição de mais dois testes busca acrescentar:

- Evidências mais conclusivas sobre a linearidade ou não dos dados, fator muitas vezes ambíguo em uma comparação dos modelos. Isso é feito pela análise de resíduos dos modelos, buscando tendências por meio de testes de hipótese dos parâmetros de regressão linear e quadrática.
- Clara evidência gráfica do ajuste, evitando a necessidade de comparar diferentes curvas e retas, bem como refinando modelos passáveis daqueles que, estatisticamente, são provavelmente inadequados. Isso é feito por um teste de hipótese dos dados ajustados contra a variável resposta.

5.3.1. Critério do menor erro

O programa identifica os dois menores erros, levando em conta apenas entradas válidas e únicas. A seguir, é calculada a razão entre eles, de modo que essa seja maior que 1. Aplica-se um logaritmo com base arbitrada pelo usuário e arredonda-se o valor, de modo a obter um número inteiro. Esse valor final é somado à pontuação. Na prática, se for escolhida uma base k , são acrescentados n pontos se a razão dos erros valer k^n . Há uma exceção para evitar singularidades no cálculo envolvendo resíduos nulos, embora na prática isso só ocorra com dados gerados proceduralmente (a partir de uma fórmula).

5.3.2. Testes de hipótese

Conhecida a estimativa de variância dos parâmetros de uma regressão linear, torna-se possível a aplicação de testes de hipótese referentes ao valor do parâmetro ajustado. Isso é feito por uma suposição, conhecida como hipótese nula, nada mais que uma afirmação sobre o valor do parâmetro em questão. A hipótese nula pode ser admitida como correta, ou abandonada em favor da hipótese alternativa, essencialmente sua negação.

Como explicado em Kutner^[5], os parâmetros seguem a distribuição t de Student, com variável de teste dada por:

$$t^* = \frac{b_i - \beta_i}{s\{b_i\}} \quad (5.10)$$

Em que b_i é o valor do parâmetro obtido em uma determinada regressão e β_i é o valor contra o qual se deseja compará-lo. Na prática, embora seja possível testar os parâmetros contra uma expectativa prévia de valor para o intercepto ou inclinação, o teste mais útil é dado por $\beta_i = 0$. O teste é dado então por:

$$H_0: \beta_i = 0$$

$$H_a: \beta_i \neq 0$$

O teste possui um nível de significância, que é a probabilidade de rejeitar a hipótese nula quando esta é verdadeira. Dada a distribuição em torno da média b_i , existe uma gama de valores possíveis de serem mensurados em um novo teste. É possível determinar a probabilidade do valor β_i ser obtido, e rejeitar sua validade caso ocorra uma discrepância grande em relação à média. Para um nível de significância de 5%, como usado no programa, o valor de β_i seria considerado significativo caso a probabilidade de mensurá-lo na distribuição seja menos de 5%.

O teste para os parâmetros nulos é extremamente relevante, pois indica se aquele parâmetro deve ser considerado no modelo ou não. Uma inclinação de reta estatisticamente indistinguível de zero, pelo teste, indica que não há relação linear, por exemplo, ainda que o parâmetro em si possua um valor não nulo.

5.3.2.1. Dados ajustados contra observados

Consiste simplesmente na análise da regressão de Y e \hat{Y} . A expectativa, em um bom modelo, é que ocorra a tendência a $\beta_0 = 0$ e $\beta_1 = 1$, ou seja, que ambos os vetores sejam muito semelhantes. Isso indica boa precisão do modelo, e pode ser aplicado tanto a modelos lineares como não lineares.

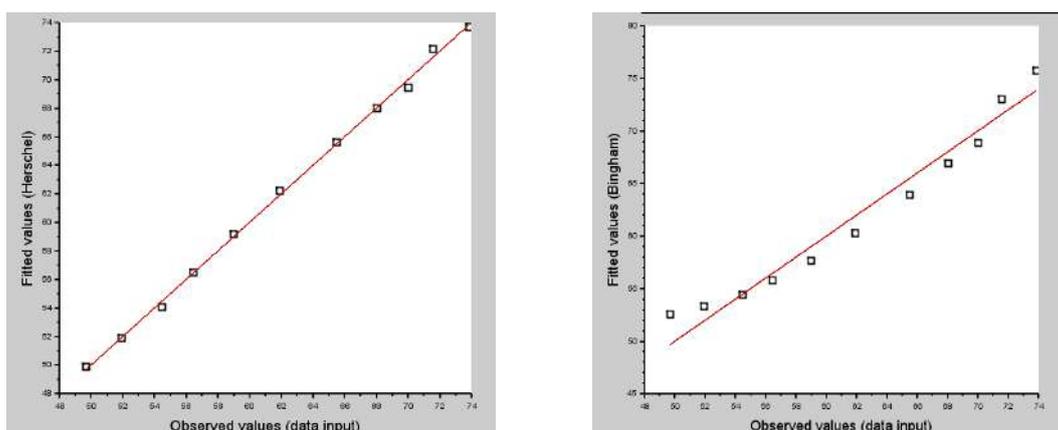


Figura 23 – Análise dos dados ajustados

5.3.2.2. Análise de resíduos

Espera-se normalmente que o gráfico dos resíduos contra a variável independente se distribua em uma faixa horizontal estreita ao redor do zero (sua média, por hipótese). Isso indica que a variância observada é puramente aleatória, não correspondendo a erros de modelagem ou medida.

Por exemplo, se os resíduos tendem a ser positivos em uma região e negativos em outra, há um claro indício de que o modelo não é adequado, ora subestimando, ora superestimando a resposta observada. Caso o resíduo seja de um modelo linear, isso indica, possivelmente, uma não linearidade dos dados.

Se os resíduos tendem a se dispersar ou se afunilar, a variância não é de fato constante como proposto inicialmente, e os resultados podem não corresponder de fato aos valores preditos pela regressão.

Para detectar essas perturbações, é feita uma regressão linear e uma (polinomial) quadrática dos resíduos contra a taxa de cisalhamento. Os parâmetros calculados são testados quanto a sua significância em relação ao zero, isso é, se a modelagem dos resíduos por uma reta ou parábola é adequada. Para cada parâmetro não significativo, indica-se a maior viabilidade do modelo pelo aumento da pontuação associada a ele. Esse critério em particular foi adotado para evitar pontuações negativas, sendo equivalente o decréscimo da pontuação de modelos cujos parâmetros de regressão dos resíduos são significativos.

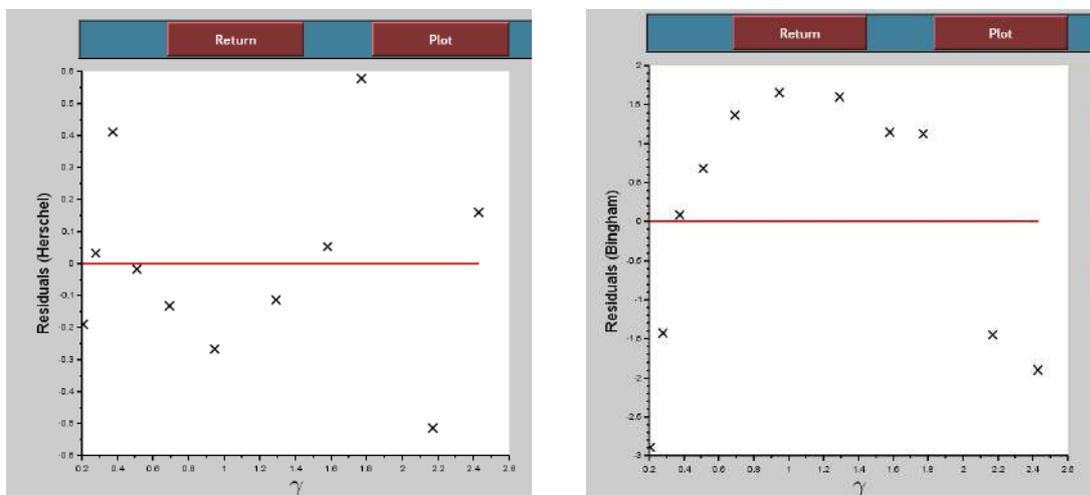


Figura 24 - Diferentes comportamentos dos resíduos.

5.4. Resultados do ajuste

5.4.1. Valores dos parâmetros

Como os exemplos do livro não levam em conta o desvio-padrão em seus valores, além do objetivo ser puramente ajustar o mesmo experimento, sem comparações entre diferentes mensurações e/ou fluidos, o intervalo de confiança calculado foi omitido, por não ser à princípio relevante.

5.4.1.1. Herschel – Bulkley (Chhabra)

O primeiro teste foi feito utilizando um exemplo de Chhabra[10], exemplo 1.2, pág. 23:

tau	49,69	51,94	54,46	56,44	59,02	61,93	65,48	68,07	70	71,6	73,85
gama	0,205	0,28	0,377	0,51	0,692	0,944	1,29	1,582	1,77	2,17	2,43

Parâmetro	Chhabra	Programa (Mullineux)
τ_B (Pa)	32	31,61
m (Pa·s ⁿ)	30,79	31,19
N	0,34	0,337
SSE (Pa²)	0,955	0,933

Tabela 13 – Resultados – Herschel-Bulkley (Chhabra)

Os valores obtidos são semelhantes, ainda que haja alguma diferença no somatório do quadrado dos erros obtido. Essa diferença provavelmente é causada ao menos em parte pelo arredondamento de parâmetros em Chhabra. Desse modo, o resultado é na prática similar ao de um obtido por métodos de gradiente, como informa o texto sobre a origem desses parâmetros.

Verificando os demais ajustes do exemplo:

Ostwald

Parâmetro	Chhabra	Programa (Linearização + GN)
m (Pa·s ⁿ)	63,34	63,33
n	0,16	0,16
SSE (Pa²)	3,21	3,12

Tabela 25 – Resultados – Ostwald (Chhabra)

Casson

Parâmetro	Chhabra	Programa (Linearização + GN)
τ_C (Pa)	42,58	42,55
m (Pa·s)	1,83	1,83

SSE (Pa²)	4,78	4,78
-----------------------------	------	------

Tabela 26 – Resultados – Casson (Chhabra)

*O valor do livro (4,67 Pa²) não corresponde ao resultado do cálculo com os parâmetros informados, sendo a diferença causada possivelmente por um arredondamento ou erro de digitação.

O modelo de Bingham é determinado analiticamente, logo o resultado é idêntico ao do livro, sendo aqui omitido.

5.4.1.2. Ellis (Chhabra)

O seguinte conjunto de dados está no exemplo 1.1, pág. 16 do Chhabra:

$\dot{\gamma}_{yx}(s^{-1})$	$\tau_{yx}(Pa)$	$\dot{\gamma}_{yx}(s^{-1})$	$\tau_{yx}(Pa)$
0.14	0.12	4.43	3.08
0.176	0.14	5.57	3.79
0.222	0.17	7.02	4.68
0.28	0.21	8.83	5.41
0.352	0.28	11.12	6.53
0.443	0.35	14	8.11
0.557	0.446	17.62	9.46
0.702	0.563	22.2	11.50
0.883	0.69	27.9	13.5
1.11	0.85	35.2	16.22
1.4	1.08	44.3	18.92
1.76	1.31	55.7	22.10
2.22	1.63	70.2	26.13
2.8	2.01	88.3	30
3.52	2.53	111.2	34.8

Figura 29 – Dados de cisalhamento (Chhabra)

Parâmetro	Chhabra	Programa (Seção áurea)
τ_E (Pa)	21,55	22,52
m (Pa·s)	0,79	0,79
n	1,03	1,003
SSE (Pa²)	5,10	0,697

Tabela 27 – Resultados – Ellis (Chhabra)

Novamente, o programa produz resultados satisfatórios.

5.4.1.3. Herschel – Bulkley (Industrial)

Tau	Gama	Tau	Gama
26,36	0,1996	40,9	3,981
24,77	0,2238	42,51	4,467
23,94	0,2512	43,88	5,012
23,08	0,2817	45,22	5,623
22,36	0,3162	47,02	6,31
22,09	0,3549	47,39	7,079
21,91	0,398	47,78	7,944
22,02	0,4467	48,24	8,913
22,27	0,5012	49,38	10
22,86	0,5623	50,01	11,22
23,33	0,6311	51,01	12,59
23,95	0,7081	52,79	14,13
24,63	0,7944	52,74	15,85
26,46	0,8912	54,17	17,78
27,67	1	56,42	19,95
28,42	1,122	59,63	22,39
28,1	1,259	60,71	25,12
28,99	1,413	62,5	28,19
30,15	1,585	64,93	31,62
31,5	1,778	66,75	35,48
33,08	1,995	68,34	39,81
34,87	2,239	75,52	44,67
36,32	2,512	81,38	50,12
37,51	2,819	80,45	56,23
39,17	3,162	85,55	63,1
39,84	3,548	91,07	70,78

Tabela 28 – Dados – Herschel-Bulkley (Industrial)

Resultados:

Parâmetro	Solver Excel	Programa (Mullineux)
TauH	13,08	12,99
M	15,28	15,34
N	0,369	0,368
SSE	289,6	289,5

Tabela 29 – Resultados – Herschel-Bulkley (Industrial)

5.4.1.4. Ostwald – de Waele (Industrial)

Tau	Gama	Tau	Gama
196,7	653	320	1306
206,4	693,8	324,1	1347
216,2	734,7	328	1388

225,8	775,5	332,5	1428
235,3	816,3	337,4	1469
244,6	857,1	345,1	1510
253,7	897,9	352,8	1551
262,5	938,7	362,1	1592
270,9	979,5	369,7	1633
279,1	1020	376,4	1673
286,5	1061	383,7	1714
292,9	1102	392,8	1755
299	1143	394,3	1796
305,7	1184	397	1837
311,4	1224	399	1877
315,9	1265		

Tabela 30 – Dados – Ostwald de Waele (Industrial)

Resultados:

Parâmetro	Solver Excel	Programa (GN)
M	3,202	3,201
N	0,641	0,642
SSE	649,251	649,247

Tabela 31 – Resultados – Ostwald de Waele (Industrial)

5.4.2. Escolha dos modelos

5.4.2.1. Dados do fluido de Herschel – Bulkley (Chhabra)

O teste de dados ajustados contra observados acrescenta até dois pontos, caso tanto a inclinação seja igual, ou mais apropriadamente, estatisticamente indiferenciável de 1, dada a variância calculada e o nível de confiança de 5%, quanto o intercepto seja 0, de maneira análoga pelo outro teste de hipótese.

O teste de análise de resíduos pode também dar até dois pontos, caso a regressão linear dos resíduos não seja significativa, ou seja, pelo teste de hipótese indistinguível de 0 dentro das condições de variância e intervalo de confiança. A outra análise é a significância do parâmetro de segunda ordem de uma regressão quadrática dos resíduos; caso não haja relevância, os resíduos não indicam uma falta de qualidade de predição do modelo muito aparente.

O teste de erro relativo compara os dois melhores modelos, e quão díspares são, pela fórmula citada anteriormente. Esse critério busca uma visão mais realista de comparação direta, pois é possível que modelos sejam

considerados semelhantes até esse ponto, mas um deles possui um somatório dos quadrados dos erros muito mais significativo que outro. Teoricamente não há limite de pontuação, mas dependendo da base do logaritmo, a tendência é que essa varie de 0 a 2.

Modelo	Ajuste ao observado	Análise de resíduos	Erro relativo	Resultado final	SSE (Pa ²)
Newtoniano	0	0	0	0	8738
Ostwald	2	2	0	4	3,1
Bingham	2	1	0	3	26,3
Herschel/Bulkley	2	2	1	5	0,9
Casson	2	1	0	3	4,78
Ellis*	0	0	0	0	-

Tabela 32 – Pontuação e escolha de modelos – Herschel-Bulkley (Chhabra)

*Como os parâmetros ajustados foram negativos, o modelo é desconsiderado na análise.

O programa claramente pune modelos sem *yield stress*, exceto Ostwald que é flexível o suficiente nesse caso para gerar bons resultados. Há claramente uma tendência comparado com a soma dos quadrados dos erros, como esperado.

5.4.2.2. Dados de fluido de Ellis (Chhabra)

Modelo	Ajuste ao observado	Análise de resíduos	Erro relativo	Resultado final	SSE (Pa ²)
Newtoniano	1	0	0	1	126,3
Ostwald	0	0	0	0	4,8
Bingham	2	1	0	3	80,4
Herschel/Bulkley*	0	0	0	0	-
Casson	2	1	0	3	33,3
Ellis	2	2	1	5	0,7

Tabela 33 – Pontuação e escolha de modelos – Ellis (Chhabra)

*Como os parâmetros ajustados foram negativos, o modelo é desconsiderado na análise.

O resultado do modelo de Ostwald contradiz a correlação com o erro do modelo, mas de fato ele falha em todos os testes com alguma margem. Herschel provavelmente teria desempenho semelhante à Bingham/Casson, mas como havia parâmetros negativos ele foi excluído prematuramente da análise.

5.4.2.3. Dados de fluido de Herschel – Bulkley (Industrial)

Modelo	Ajuste ao	Análise de	Erro	Resultado	SSE
--------	-----------	------------	------	-----------	-----

	observado	resíduos	relativo	final	(Pa ²)
Newtoniano	0	0	0	0	35461
Ostwald	0	2	0	2	471
Bingham	0	1	0	1	2248
Herschel/Bulkley	2	2	1	5	290
Casson	2	2	0	4	747
Ellis*	0	0	0	0	-

Tabela 34 – Pontuação e escolha de modelos – Herschel-Bulkley (Industrial)

*Modelo excluído do cálculo

Embora siga de certo modo a correlação com SSE, o programa prioriza o modelo de Casson em detrimento de Ostwald. Aparentemente, embora o comportamento qualitativo de Ostwald seja adequado (pela análise de resíduos), os valores preditos simplesmente não se aproximam o bastante dos observados.

5.4.2.4. Dados de fluido de Ostwald – de Waele (Industrial)

Modelo	Ajuste ao observado	Análise de resíduos	Erro relativo	Resultado final	SSE (Pa ²)
Newtoniano	0	0	0	0	28100
Ostwald	2	2	1	5	675
Bingham	2	1	0	3	1257
Herschel/Bulkley*	0	0	0	0	-
Casson	2	1	0	3	887
Ellis	2	2	0	4	1406

Tabela 35 – Pontuação e escolha de modelos – Ostwald de Waele (Industrial)

*Modelo excluído do cálculo

6. ESCOAMENTO DE FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS

O objetivo majoritário do programa é o cálculo da perda de carga em sistemas com fluidos não newtonianos, mais especificamente, em escoamentos em tubos circulares. Assim sendo, era necessário encontrar uma abordagem que permitisse a predição da perda de carga a partir de parâmetros disponíveis para o operador. Nesse âmbito, uma abordagem que conectasse a perda de carga e a vazão do escoamento foi a mais adequada. Nos próximos itens, teremos uma breve explicação do equacionamento que permite essa conexão.

6.1. Escoamento de fluidos não newtonianos em regime laminar

Para chegar à expressão matemática que liga vazão à tensão de cisalhamento, será evidenciado a seguir um desenvolvimento físico e matemático resumido integralmente de Chhabra e Richardson(2008).

A Figura 25 representa um escoamento completamente desenvolvido em regime estacionário.

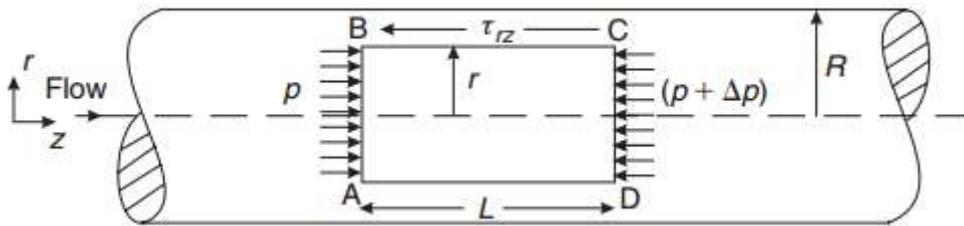


Figura 25 – Representação de escoamento em tubo circular.

O balanço de momento feito na região mostrada nos mostra que:

$$\tau_{rz} = \left(\frac{r}{2} \frac{\Delta p}{L} \right) \quad (6.1)$$

A equação acima é válida tanto para escoamento laminar quanto para escoamento turbulento, visto que o balanço de momento feito não considera limitações de regime.

Aplicando essa equação na parede do tubo, temos:

$$\tau_w = \left(\frac{R}{2} \frac{\Delta p}{L} \right) \quad (6.2)$$

O balanço de massa no trecho dado pela figura (26) entre as regiões r e $r+dr$, nos dá que:

$$dQ = 2\pi r V_z(r) dr \quad (6.3)$$

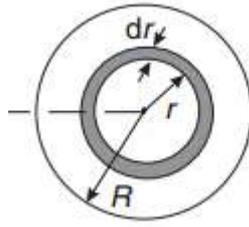


Figura 26 – Representação de elemento circular dr no tubo.

Integrando a equação por todo o raio do tubo de escoamento, temos:

$$Q = \int_0^R 2\pi r V_z(r) dr \quad (6.4)$$

Considerando condição de não deslizamento e resolvendo a integral acima por partes, temos:

$$Q = \pi \int_0^R r^2 \frac{dV_z}{dr} dr \quad (6.5)$$

Da equação da viscosidade, temos que:

$$\tau_{rz} = -\mu \frac{dV_z}{dr} \quad (6.6)$$

Rearranjando:

$$-\frac{dV_z}{dr} = f(\tau_{rz}) \quad (6.7)$$

Considerando ainda que:

$$\frac{\tau_{rz}}{\tau_w} = \frac{r}{R}; \quad dr = \left(\frac{R}{\tau_w}\right) d\tau_{rz}; \quad 6.8(a) e (b)$$

A equação se torna então:

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_0}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 f(\tau) d\tau \quad (6.9)$$

É possível perceber que pra diferentes modelos, serão obtidas diferentes relações entre Q e τ , gerando diferentes equações de associação entre Q e τ para cada modelo utilizado.

Com a obtenção de equações que relacionam Q e τ , é possível, uma vez que Q é um dado de fácil obtenção em campo, resolver tais equações, mesmo quando não lineares, de modo a encontrar τ e conseqüentemente encontrar Δp a partir da equação (6.1).

A seguir, encontra-se um breve sumário das equações que relacionam Q e τ para diferentes modelos de fluidos. A resolução da equação (6.9) para cada um dos modelos se encontra no apêndice X e os parâmetros e significados dos mesmos se encontram no Capítulo 2.

Modelo	Equação regente (Q x τ_w)
Newtoniano	$Q = \frac{\pi R^3}{\mu} \frac{\tau_w}{4}$
Ostwald	$Q = \frac{\pi R^3}{m^{\frac{1}{n}}} \left(\frac{n}{3n+1} \right) \tau_w^{\frac{1}{n}}$
Bingham	$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_B} \frac{\tau_w}{4} \left(1 - \frac{4\phi}{3} + \frac{\phi^4}{3} \right)$
Ellis	$Q = \frac{\pi R^3}{4\mu_0} \tau_w \left[1 + \left(\frac{\tau_w^{\alpha-1}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}} \right) \left(\frac{4}{\alpha+3} \right) \right]$
Casson	$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0} \frac{\tau_w}{4} \left[1 - \frac{16\phi^{1/2}}{7} + \frac{4\phi}{3} - \frac{\phi^4}{21} \right]$
Herschel-Bulkley	$Q = \pi R^3 n \left(\frac{\tau_w - \tau_{H0}}{m} \right)^{1/n} \left[\frac{(1-\phi)^3}{3n+1} + \frac{2\phi(1-\phi)^2}{2n+1} + \frac{\phi^2(1-\phi)}{n+1} \right]$
Onde:	Q = Vazão; R = Raio da tubulação; τ_w = Tensão na parede; μ = Viscosidade; Os demais itens são parâmetros dos modelos e podem ser encontrados no cap.2.

Tabela 36: Equações de Q para cada um dos modelos utilizados no programa.

É importante observar que cada uma das equações apresenta em sua constituição os parâmetros de seus respectivos modelos. Esses parâmetros são encontrados a partir dos ajustes e da metodologia explicitada no Capítulo 4. Já o termo ϕ , está relacionado a formação de um *plug*, uma região em que o perfil de velocidade do escoamento é achatado, o que dá a impressão de que o escoamento não se desenvolve. Esse fenômeno ocorre em fluidos de alguns dos modelos utilizados.

$$\phi = \frac{\tau_{modelo}}{\tau_w} = \frac{R_p}{R} \quad (6.10)$$

Uma vez de posse de todos os parâmetros necessários, é possível resolver as equações para τ_w . Para a resolução das equações explicitadas acima, visto que são equações não lineares, o método mais recomendado e doravante utilizado no programa foi o método numérico de Newton-Raphson. Esse método numérico muito bem estabelecido consiste na aproximação numérica da raiz de uma equação não linear por meio do cálculo da interseção da derivada da curva em um dado ponto e do eixo das abscissas. A cada iteração, o procedimento é refeito por meio da seguinte equação recursiva:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (6.11)$$

Como pode ser visto na equação 6.11, para exercer o cálculo em cada iteração, a derivada das equações utilizadas precisa ser obtida. A seguir, a Tabela 6.2 mostra as formulações das derivadas para todos os modelos utilizados:

Modelo	Derivada da função Q(τ_w)
Newtoniano	$\frac{dQ}{d\tau_w} = \frac{\pi R^3}{4\mu}$
Ostwald	$\frac{dQ}{d\tau_w} = \frac{\pi R^3}{m^{1/n}} \tau_w^{\frac{1}{n}-1} \left(\frac{1}{3n+1} \right)$
Bingham	$\frac{dQ}{d\tau_w} = \frac{\pi R^3}{4\mu_B} \left(1 - \frac{\tau_{B0}^4}{\tau_w^4} \right)$
Ellis	$\frac{dQ}{d\tau_w} = \frac{\pi R^3}{4\mu} \left[1 + \left(\frac{\tau_w^{\alpha-1}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}} \right) \left(\frac{4\alpha}{\alpha+3} \right) \right]$
Casson	$\frac{dQ}{d\tau_w} = \frac{\pi R^3}{4\mu} \left[1 - \frac{8\varphi^{1/2}}{7} + \frac{\varphi^4}{7} \right]$
Herschel-Bulkley	$\frac{dQ}{d\tau_w} = \pi R^3 \frac{\left(\frac{\tau_w - \tau_{HB}}{m} \right)^{\frac{1}{n}} (6\varphi^3 n^3 + 6\varphi^2 n^2 + 3\varphi n^2 + 3\varphi n + 2n^2 + 3n + 1)}{\tau_w (6n^3 + 11n^2 + 6n + 1)}$
Onde:	Q = Vazão; R = Raio da tubulação; τ_w = Tensão na parede; μ = Viscosidade; Os demais itens são parâmetros dos modelos e podem ser encontrados no cap.2.

Tabela 37 – Derivadas das funções Q(τ_w) para os modelos utilizados.

Com a obtenção dos valores de τ_w para cada um dos modelos, o simples uso da equação (2.12) permite o cálculo direto da perda de carga distribuída no escoamento não newtoniano laminar.

6.2. Discussão sobre o Reynolds de transição e introdução do Reynolds de Metzner-Reed.

Para o tratamento dos casos de escoamento de fluido não newtoniano em regimes de transição e turbulento, Metzner e Reed (1955) propuseram a construção de um número de Reynolds genérico, que suprisse as condições de regime turbulento mas pudesse ser reduzido ao número de Reynolds já conhecido na literatura em caso de escoamento laminar e newtoniano.

Esse número de Reynolds é dado por:

$$Re_{MR} = \frac{\rho V^{2-n'} D^{n'}}{8^{n'-1} K'} \quad (6.12)$$

Onde:

P = Densidade

V = Velocidade

D = Diâmetro da tubulação

Metzner e Reed (1955) definem n' como um parâmetro capaz de medir o quanto um fluido se afasta do comportamento newtoniano. Já o parâmetro K' , está associado à consistência do fluido não newtoniano. O significado desses parâmetros está diretamente associado ao de n e K , do modelo Power Law. Isso se dá justamente por K' e n' serem aproximações de qualquer modelo a um modelo Power Law, conforme sugerido em Dodge e Metzner (1959).

Dodge e Metzner (1959) fizeram estudos de escoamento tanto em regime laminar quanto em regime turbulento e concluíram que n' e K' são constantes em amplas faixas de velocidade, mais especificamente $8V/D$. O cálculo de ambos será explicitado no próximo item.

Enquanto os artigos são inconclusivos a respeito de um valor exato para o início do regime turbulento de escoamento, a faixa de Re_{MR} igual a 2100 é um consenso quanto ao início da região de transição entre regimes de escoamento. Uma vez que o cálculo para a região de transição é semelhante ao cálculo para regime turbulento, esse valor pode ser tomado como valor limite para a mudança na metodologia de cálculo da perda de carga.

6.3. Escoamento de fluidos não newtonianos em regime turbulento

Para o cálculo da perda de carga de fluidos não newtonianos em regime turbulento, a equação universal da perda de carga pode ser utilizada, visto que a equação não é restringida ao tipo de fluido nem ao regime de escoamento. Porém, para a sua utilização, é necessário encontrar o fator de atrito para os

fluidos de diversos modelos em regime turbulento. Esse problema pode ser resolvido a partir do método publicado por Dodge e Metzner (1959).

Por meio de um modelo semiempírico, foi possível encontrar uma equação, explicitada a seguir, dependente apenas dos parâmetros do fluido para o fator de atrito. A equação encontrada por Dodge e Metzner para o fator de atrito é dada por:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = \frac{4}{(n')^{0,75}} \log \left[Re_{MR} f^{\frac{2-n'}{2}} \right] - \frac{0,4}{(n')^{1,2}} \quad (6.13)$$

Em que:

f = fator de atrito

Re_{MR} = Número de Reynolds generalizado

n' = Inclinação da curva τ_w x 8V/D

É possível perceber que a equação pode ser resolvida facilmente pelo método numérico da substituição sucessiva. Porém, antes da resolução, é necessário encontrar os valores de n' e de Re_{MR} adequados.

A equação que define o valor de n' é dada por:

$$n' = \frac{d \log(\tau_w)}{d \log\left(\frac{8V}{D}\right)} \quad (6.14)$$

Conforme pode ser visto na equação, o valor de n' é dependente do valor de τ_w, conseqüentemente, para cada um dos modelos, teremos um diferente valor de n'. A seguir, encontram-se os valores calculados para os n' dos modelos utilizados no presente trabalho:

Modelo	Derivada da função Q(τ _w)
Newtoniano	n' = 1
Ostwald	n' = n
Bingham	$n' = \frac{\left(1 - \frac{4\varphi}{3} + \frac{\varphi^4}{3}\right)}{(1 - \varphi^4)}$

Ellis	$n' = \frac{1 + \left(\frac{\tau^{\alpha-1}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}}\right) \left(\frac{4}{\alpha+3}\right)}{1 + \left(\frac{\tau^{\alpha-1}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}}\right) \left(\frac{4\alpha}{\alpha+3}\right)}$
Casson	$n' = \frac{1 - \frac{16\varphi^{1/2}}{7} + \frac{4\varphi}{3} - \frac{\varphi^4}{21}}{1 - \frac{8\varphi^{1/2}}{7} + \frac{\varphi^4}{7}}$
Herschel-Bulkley	$n' = \frac{n(1-\varphi)(2\varphi^2n^2 + 2\varphi n^2 + 2\varphi n + 2n^2 + 3n + 1)}{6\varphi^3n^3 + 6\varphi^2n^2 + 3\varphi n^2 + 3\varphi n + 2n^2 + 3n + 1}$
Em que:	Q = Vazão; R = Raio da tubulação; τ_w = Tensão na parede; μ = Viscosidade; Os demais itens são parâmetros dos modelos e podem ser encontrados no Cap.2.

Tabela 38 - Valores de n' para os modelos utilizados no programa

De posse dos valores numéricos de n' , os valores de K' e Re_{MR} são encontrados a partir das seguintes equações:

$$K' = \frac{\tau_w}{\left(\frac{8V}{D}\right)^{n'}} \quad (6.15)$$

$$Re_{MR} = \frac{\rho V^{2-n'} D^{n'}}{8^{n'-1} K'} \quad (6.16)$$

Com os valores de Re_{MR} e n' , basta utilizar a equação (6.13) e obter o fator de atrito para o escoamento não newtoniano turbulento. Com o fator de atrito em mãos, basta então utilizar a equação de Darcy-Weisbach(2.12) e será assim obtido o valor da perda de carga. De posse desse valor de perda de carga, é feita então uma iteração numérica de modo a encontrar o valor de τ e iniciar esse cálculo iterativo até que o valor de Re_{MR} e τ_w se tornem constantes, confirmando assim o valor final de τ_w e conseqüentemente da perda de carga distribuída calculada.

Ao aplicar toda essa metodologia explicada acima, foi possível a construção da parte do programa que efetivamente calcula as perdas de carga no escoamento. Com toda a explicação teórica dada, é possível montar um diagrama de blocos, explicitando passo a passo o funcionamento lógico do programa construído:

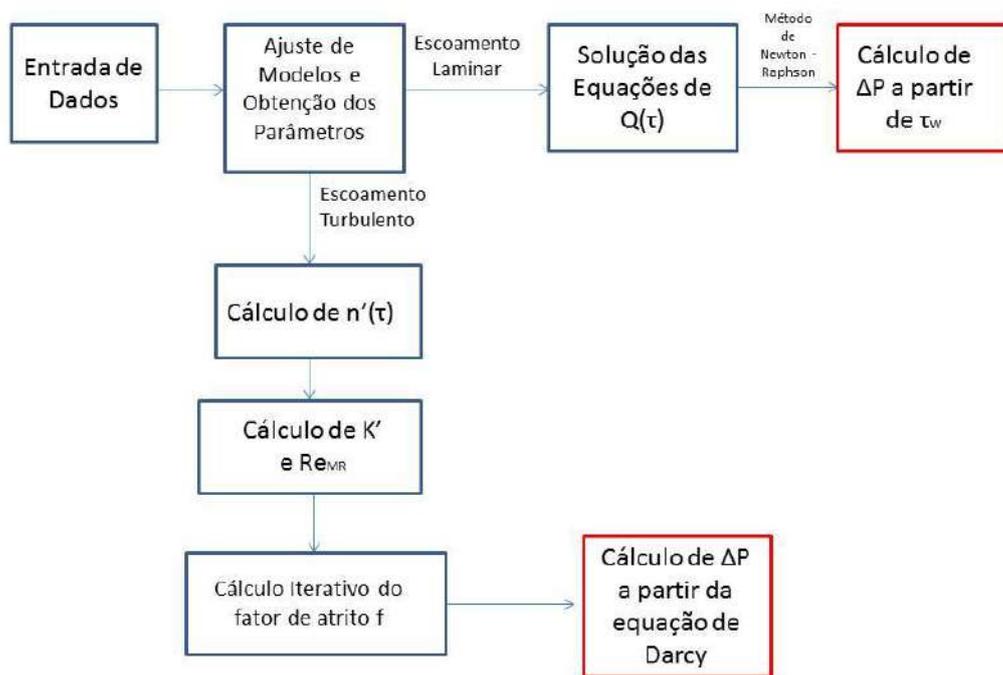


Figura 27 – Diagrama de blocos mostrando sequenciamento de ações do programa.

6.4. Resultados

Para ratificar e checar o funcionamento do programa, foram utilizados os exemplos de Chhabra e Richardson (2008). Os exemplos utilizados são os 3.3 e 3.4 e descrevem a perda de carga de fluidos que seguem os modelos de Herschel e Ellis, respectivamente.

- Exemplo 6.6.1: Nesse exemplo, os dados utilizados são os mesmos do exemplo 3.3 do capítulo 3 de Chhabra e Richardson. O exemplo informa os seguintes parâmetros e dados para o modelo de Herschel-Bulkley:

Parâmetro	Programa
T_{HB}	17
M	0.83
N	0.5

Tabela 39 – Parâmetros do exemplo para Herschel-Bulkley – Chhabra

Velocidade (m/s)	0.5
Comprimento da tubulação (m)	500
Densidade (kg/m ³)	1500
Diâmetro interno da tubulação (m)	0,04

Tabela 40 – Dados do exemplo para Herschel-Bulkley - Chhabra

Utilizando toda a metodologia explicada nos itens anteriores, foi possível encontrar o seguinte valor de τ_w e conseqüentemente de perda de carga, mostrados na tabela a seguir, que também mostra o valor encontrado no livro:

Valor de τ_w (Referência)	Valor de τ_w (Programa)
29.34	29.33
Perda de Carga (Referência)	Perda de Carga (Programa)
1.46 MPa	1.46 MPa

Tabela 41 – Resultados do exemplo para Herschel-Bulkley - Chhabra

Como pode ser visto, os valores de τ_w são quase idênticos e conseqüentemente os valores de perda também o são, o que confirma a coerência da metodologia utilizada no programa. O resultado informado na referência é dado com poucas casas decimais, mas a proximidade dos valores torna os resultados animadores ainda assim.

- Exemplo 6.6.2: Nesse exemplo, os dados utilizados são os mesmos do exemplo 3.1 do capítulo 3 do livro de Chhabra e Richardson. O exemplo informa os seguintes parâmetros no ajuste para o modelo de Ostwald:

Parâmetro	Programa
M	3
N	0,5

Tabela 42 – Parâmetros do exemplo para Bingham - Chhabra

Os dados do escoamento são os seguintes:

Vazão (m ³ /s)	0.000646
Comprimento equivalente da tubulação (m)	10
Densidade (kg/m ³)	1075
Diâmetro interno da tubulação (m)	0.0250

Tabela 43 – Dados do exemplo para Bingham - Chhabra

Utilizando toda a metodologia explicada nos itens anteriores, foi possível encontrar o seguinte valor de τ_w e conseqüentemente de perda de carga, mostrados na tabela a seguir, que também mostra o valor encontrado no livro (somente a perda de carga, nesse exemplo):

Valor de τ_w (Referência)	Valor de τ_w (Programa)
-	68.83
Perda de Carga (Referência)	Perda de Carga (Programa)
110 kPa	110 kPa

Tabela 44 – Resultados do exemplo para Herschel-Bulkley - Chhabra

Novamente, o programa foi capaz de efetuar o cálculo de perda de carga de maneira acurada, nesse caso para um fluido que segue o modelo de Ostwald. Observando o funcionamento efetivo do programa nesses e em outros diversos casos, é possível inferir que a metodologia utilizada é eficiente e pode ser usada em diversos casos, com fluidos de diversos tipos.

7. DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

7.1. Estudos de caso

Durante os estudos de caso, foram obtidos valores bem melhores de perda de carga e de fator de atrito. Isso aconteceu pelo fato de os fluidos possuírem comportamento não newtoniano e antigamente serem tratados como newtonianos.

Ainda assim, os resultados obtidos não foram exatamente os esperados ao utilizar os diversos modelos existentes na literatura. Logo, serão listados a seguir os possíveis motivos que levaram à diferença encontrada:

- Os recursos “atingir meta” e “solver” do MS Excel não serem tão precisos quanto um método numérico como Newton-Raphson, utilizado no programa que foi desenvolvido posteriormente;
- Os modelos reológicos aplicados não serem totalmente adequados para os fluidos em questão;
- Algumas alterações terem sido feitas na fábrica e o desenho (isométrico) utilizado não ter contemplado;
- Precisão insuficiente dos dados coletados no manômetro

Dessa forma, percebe-se o potencial de um olhar mais detalhado sobre a reologia dos fluidos utilizados na indústria. Além de uma série de novas possibilidades, como foi demonstrado nos casos específicos dos estudos de caso, esse novo olhar sustenta a importância do programa desenvolvido. Isso é evidenciado já que nele estão embutidos os resultados otimizados, os quais aliados a um maior conhecimento sobre fluidos não newtonianos, podem alavancar ganhos de produção e retornos financeiros para seus detentores.

7.2. Resultados do programa

O programa foi capaz de ajustar os parâmetros de todos os exemplos levantados com precisão aceitável. Seu desempenho é equivalente ao *solver* não linear do *Excel*, exigindo menos esforço do usuário. Além disso, os módulos gráficos permitem obter imediatamente um diagnóstico visual dos dados, o que exigiria maior esforço do usuário normalmente.

O critério de escolha do modelo funciona muito bem, tendo concordado de modo geral com o que um operador consideraria a melhor opção. Vale notar que, como explicado anteriormente, tal escolha é influenciada profundamente pela magnitude da soma dos quadrados dos erros em todas as suas análises, sendo um critério mais simples baseado somente nesse aspecto perfeitamente viável dentro dos casos estudados.

Quanto aos dados de escoamento, só foi possível testar casos laminares, que são na maioria das vezes a realidade da indústria em termos de fluidos não newtonianos. O programa ajusta razoavelmente bem os exemplos do livro, além de concordar com os estudos de caso, mostrando a equivalência dos métodos de substituição sucessiva e da solução direta por Newton-Raphson, ainda que com alguma pequena diferença de precisão.

O programa, no entanto, corre sempre o risco de falhar, especialmente por ter sido (relativamente) pouco testado dentro de um universo possível de valores e comportamentos do usuário. Uma série de medidas foi tomada para evitar tais problemas, mas decerto o resultado é aquém de um *software* como o *Excel* nesse sentido.

Além disso, a adição de um novo modelo exige uma série de dados trabalhosos que provavelmente não estarão disponíveis na literatura, como as derivadas da equação de vazão; bem como a implementação no mínimo de algum algoritmo adaptado de ajuste, já que optou – se por não se utilizar funções internas do *Scilab*, que seriam capazes de aceitar uma simples definição de fórmula reológica como *input*, ao custo de ceder o controle desses cálculos intermediários.

7.3. Conclusão

Os métodos aplicados obtiveram resultados melhores que a prática usual e simplificada de tratamento como fluido newtoniano. Eventuais discrepâncias de resultados exigem estudos mais aprofundados para determinação real de sua causa, devido à complexidade dos fatores envolvidos, mas a tendência geral da qualidade das previsões é satisfatória, dentro dos fatores de erro citados anteriormente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ORTEGA; Reologia e fator de atrito. Disponível em: www.unicamp.br/fea/ortega/aulas/aula04_reologia.ppt e www.unicamp.br/fea/ortega/aulas/aula05_fator_atrito.ppt
- [2] MATSUHISA, S.; BIRD, R. B. Analytical and Numerical Solutions for Flow of the Non – Newtonian Ellis Fluid. *A.I.Ch.E. Journal*, Vol. 11, Nº 4, p. 588 – 594, 1965
- [3] KOK, M.V; Determination of Rheological Models for Drilling Fluids (A Statistical Approach). *Energy Sources*, 26, p. 153 – 165, 2004
- [4] CLAUSET, A.; SHALIZI, C.R.; NEWMAN, M.E.J. Power – Law Distributions in Empirical Data. *SIAM Reviews* 51 (4), p. 661 – 703, 2009
- [5] KUTNER, M.H.; NACHTSHEIM, J. C.; NETER, J.; LI, W. Applied Linear Statistical Models. Fifth edition. New York: McGraw – Hill – Irwin, 2005.
- [6] SEBER, G.A.F.; WILD, C.J. Nonlinear Regression. Hoboken, N.J.: John Wiley and Sons Inc., 2003
- [7] KELESSIDIS, V.C. et al. Optimal Determination of Rheological Parameters for Herschel – Bulkley Drilling Fluids and Impacts on Pressure Drop, Velocity Profiles and Penetration Rates During Drilling. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 53 p. 203 – 224, 2006
- [8] MULLINEUX, G. Non – Linear Least Squares Fitting of Coefficients in the Herschel – Bulkley Model, *Applied Mathematical Modeling*, 32, p. 2538 – 2551, 2008
- [9] TIEN, C.; TSUEI, H – S.; Laminar Natural Convection Heat Transfer in Ellis Fluids. *Applied Scientific Research*, 20, p. 131 – 147, 1969
- [10] CHHABRA, R.P.; RICHARDSON, J.F. (1999). Non – Newtonian Flow and Applied Rheology: Engineering Applications. Second edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008.
- [11] DODGE, D. W.; METZNER, A. B. Turbulent flow of non-Newtonian systems. *AIChE Journal*, v. 5, n. 2, p. 189-204, 1959.
- [12] METZNER, A. B.; REED, J. C. Flow of non-Newtonian fluids—correlation of the laminar, transition, and turbulent-flow regions. *AIChE journal*, v. 1, n. 4, p. 434-440, 1955.

APÊNDICE A: DADOS REOLÓGICOS UTILIZADOS NOS ESTUDOS DE CASO.

Ponto	Taxa (1/s)	Tensão (Pa)	Ponto	Taxa (1/s)	Tensão (Pa)
1	0,20	26,36	27	3,981	40,9
2	0,2238	24,77	28	4,467	42,51
3	0,2512	23,94	29	5,012	43,88
4	0,2817	23,08	30	5,623	45,22
5	0,3162	22,36	31	6,31	47,02
6	0,3549	22,09	32	7,079	47,39
7	0,398	21,91	33	7,944	47,78
8	0,4467	22,02	34	8,913	48,24
9	0,5012	22,27	35	10	49,38
10	0,5623	22,86	36	11,22	50,01
11	0,6311	23,33	37	12,59	51,01
12	0,7081	23,95	38	14,13	52,79
13	0,7944	24,63	39	15,85	52,74
14	0,8912	26,46	40	17,78	54,17
15	1	27,67	41	19,95	56,42
16	1,122	28,42	42	22,39	59,63
17	1,259	28,1	43	25,12	60,71
18	1,413	28,99	44	28,19	62,5
19	1,585	30,15	45	31,62	64,93
20	1,778	31,5	46	35,48	66,75
21	1,995	33,08	47	39,81	68,34
22	2,239	34,87	48	44,67	75,52
23	2,512	36,32	49	50,12	81,38
24	2,819	37,51	50	56,23	80,45
25	3,162	39,17	51	63,1	85,55
26	3,548	39,84	52	70,78	91,07

Tabela A.1 – Dados de tensão e taxa de cisalhamento da análise do reômetro para o Estudo de Caso 1.

Ponto	Taxa (1/s)	Tensão (Pa)	Ponto	Taxa (1/s)	Tensão (Pa)
1	81,67	65,22	25	1061	286,5
2	122,5	75,28	26	1102	292,9
3	163,3	83,48	27	1143	299
4	204,1	91,52	28	1184	305,7
5	244,9	99,88	29	1224	311,4
6	285,7	108,9	30	1265	315,9
7	326,5	118,2	31	1306	320
8	367,3	127,9	32	1347	324,1
9	408,1	137,7	33	1388	328
10	449	147,5	34	1428	332,5
11	489,8	157,3	35	1469	337,4
12	530,6	167,1	36	1510	345,1
13	571,4	177,1	37	1551	352,8
14	612,2	186,9	38	1592	362,1
15	653	196,7	39	1633	369,7
16	693,8	206,4	40	1673	376,4
17	734,7	216,2	41	1714	383,7
18	775,5	225,8	42	1755	392,8
19	816,3	235,3	43	1796	394,3
20	857,1	244,6	44	1837	397
21	897,9	253,7	45	1877	399
22	938,7	262,5	46	1918	401,3
23	979,5	270,9	47	1959	402,6
24	1020	279,1	48	2000	404,9

Tabela A.2 – Dados de tensão e taxa de cisalhamento da análise do reômetro para o Estudo de Caso 2.

Ponto	Taxa (1/s)	Tensão (Pa)	Ponto	Taxa (1/s)	Tensão (Pa)
1	82,1	33,66	25	1061	49,25
2	122,3	21,62	26	1102	51,02
3	163,4	21,53	27	1143	52,22
4	204	19,91	28	1184	53,7
5	245	20,87	29	1224	55,17
6	285,7	21,36	30	1265	56,71
7	326,5	23,12	31	1306	58,24
8	367,6	26	32	1347	59,78
9	408,1	25,55	33	1388	61,31
10	449,1	27,16	34	1429	62,85
11	489,7	28,68	35	1469	64,35
12	530,6	29,61	36	1510	65,89
13	571,4	31,01	37	1551	67,41
14	612,2	32,75	38	1592	68,94
15	653,1	34,29	39	1633	70,44
16	693,9	35,68	40	1673	71,92
17	734,7	37,22	41	1714	73,43
18	775,5	39,03	42	1755	74,96
19	816,3	40,34	43	1796	76,46
20	857,1	41,7	44	1837	77,88
21	897,9	43,2	45	1877	79,32
22	938,7	44,61	46	1918	80,81
23	979,4	47,44	47	1959	82,29
24	1020	47,67	48	2000	83,74

Tabela A.3 – Dados de tensão e taxa de cisalhamento da análise do reômetro para o Estudo de Caso 3.

APÊNDICE B: RESOLUÇÃO DA INTEGRAL 6.9 PARA DIFERENTES MODELOS REOLÓGICOS:

A seguir encontram-se as resoluções da integral encontrada no capítulo 6, que contém a relação entre vazão(Q) e tensão de cisalhamento(τ_w). Os parâmetros e variáveis seguem a mesma simbologia demonstrada nos capítulos anteriores.

B.1 – Modelo de Bingham:

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_{C0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 f(\tau) d\tau$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = f(\tau)$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = \frac{\tau_{rz} - \tau_{B0}}{\mu_B} \quad (R_p < r < R)$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_{B0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 \frac{\tau_{rz} - \tau_{B0}}{\mu_B} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_B \tau_w^3} \int_{\tau_{B0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^3 - \tau_{rz}^2 \tau_{B0} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_B \tau_w^3} \int_{\tau_{B0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^3 - \tau_{rz}^2 \tau_{B0} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_B \tau_w^3} \left(\frac{\tau_w^4 - \tau_{B0}^4}{4} - \frac{\tau_w^3 \tau_{B0} - \tau_{B0}^4}{3} \right)$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_B} \left(\frac{\tau_w}{4} - \frac{\tau_{B0}^4}{4\tau_w^3} - \frac{\tau_{B0}}{3} + \frac{\tau_{B0}^4}{3\tau_w^3} \right)$$

$$Q = \frac{\pi R^3 \tau_w}{\mu_B} \frac{1}{4} \left(1 - \varphi^4 - \frac{4\varphi}{3} + \frac{4\varphi^4}{3} \right)$$

$$Q = \frac{\pi R^3 \tau_w}{\mu_B} \frac{1}{4} \left(1 - \frac{4\varphi}{3} + \frac{\varphi^4}{3} \right)$$

$$\varphi = \frac{\tau_{B0}}{\tau_w} = \frac{R_p}{R}$$

B.2 - Modelo de Casson:

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_{C0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 f(\tau) d\tau$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = f(\tau)$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = \frac{[\tau_{rz}^{1/2} - \tau_{C0}^{1/2}]^2}{\mu_0} \quad (R_p < r < R)$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_{C0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 \frac{[\tau_{rz}^{1/2} - \tau_{C0}^{1/2}]^2}{\mu_0} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0 \tau_w^3} \int_{\tau_{C0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 [\tau_{rz} - 2\tau_{rz}^{1/2} \tau_{C0}^{1/2} + \tau_{C0}] d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0 \tau_w^3} \int_{\tau_{C0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^3 - 2\tau_{rz}^{5/2} \tau_{C0}^{1/2} + \tau_{rz}^2 \tau_{C0} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0 \tau_w^3} \left[\frac{\tau_w^4}{4} - \frac{\tau_{C0}^4}{4} - \frac{4\tau_w^{7/2} \tau_{C0}^{1/2}}{7} + \frac{4\tau_{C0}^4}{7} + \frac{\tau_w^3 \tau_{C0}}{3} - \frac{\tau_{C0}^4}{3} \right]$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0} \left[\frac{\tau_w}{4} - \frac{\tau_{C0}^4}{4\tau_w^3} - \frac{4\tau_w^{1/2} \tau_{C0}^{1/2}}{7} + \frac{4\tau_{C0}^4}{7\tau_w^3} + \frac{\tau_{C0}}{3} - \frac{\tau_{C0}^4}{3\tau_w^3} \right]$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0} \frac{\tau_w}{4} \left[1 - \varphi^4 - \frac{16\varphi^{1/2}}{7} + \frac{16\varphi^4}{7} + \frac{4\varphi}{3} - \frac{4\varphi^4}{3} \right]$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0} \frac{\tau_w}{4} \left[1 - \frac{16\varphi^{1/2}}{7} + \frac{4\varphi}{3} - \frac{\varphi^4}{21} \right]$$

$$\varphi = \frac{\tau_{C0}}{\tau_w} = \frac{R_p}{R}$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_{c0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 f(\tau) d\tau$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = f(\tau)$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = \frac{\tau_{rz}}{\mu_0} \left(1 + \left(\frac{\tau_{rz}}{\tau_{1/2}} \right)^{\alpha-1} \right)$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_0^{\tau_w} \tau_{rz}^2 \frac{\tau_{rz}}{\mu_0} \left(1 + \left(\frac{\tau_{rz}}{\tau_{1/2}} \right)^{\alpha-1} \right) d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0 \tau_w^3} \int_0^{\tau_w} \tau_{rz}^3 \left(1 + \left(\frac{\tau_{rz}}{\tau_{1/2}} \right)^{\alpha-1} \right) d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0 \tau_w^3} \int_0^{\tau_w} \tau_{rz}^3 + \frac{\tau_{rz}^{\alpha+2}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0 \tau_w^3} \left[\frac{\tau_w^4}{4} + \left(\frac{\tau_w^{\alpha+3}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}} \right) \left(\frac{1}{\alpha+3} \right) \right]$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\mu_0} \left[\frac{\tau_w}{4} + \left(\frac{\tau_w^{\alpha-1}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}} \right) \tau_w \left(\frac{1}{\alpha+3} \right) \right]$$

$$Q = \pi R^4 \left(\frac{\Delta p}{8L\mu_0} \right) \left[1 + \left(\frac{\tau_w^{\alpha-1}}{\tau_{1/2}^{\alpha-1}} \right) \left(\frac{4}{\alpha+3} \right) \right]$$

B.4 – Power Law (Ostwald):

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_{\tau_{c0}}^{\tau_w} \tau_{rz}^2 f(\tau) d\tau$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = f(\tau)$$

$$-\frac{dV_z}{dr} = \left(\frac{\tau_{rz}}{m} \right)^{1/n}$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \int_0^{\tau_w} \tau_{rz}^2 \left(\frac{\tau_{rz}}{m} \right)^{1/n} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \frac{1}{m^{1/n}} \int_0^{\tau_w} \tau_{rz}^{(2n+1)/n} d\tau$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{\tau_w^3} \frac{1}{m^{1/n}} \tau_w^{(3n+1)/n} \left(\frac{n}{3n+1} \right)$$

$$Q = \frac{\pi R^3}{m^{1/n}} \tau_w^{1/n} \left(\frac{n}{3n+1} \right)$$

$$Q = \pi R^3 \left(\frac{\Delta p}{2Lm} R \right)^{1/n} \left(\frac{n}{3n+1} \right)$$