

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA E DE MATERIAIS**

THALES AUGUSTO BARBOSA PINTO SILVA

**ANÁLISE DO MÓDULO DE CISALHAMENTO ASSOCIADO A MODELO
DE JEFFREYS MODIFICADO**

DISSERTAÇÃO

**CURITIBA
2017**

THALES AUGUSTO BARBOSA PINTO SILVA

**ANÁLISE DO MÓDULO DE CISALHAMENTO ASSOCIADO A MODELO
DE JEFFREYS MODIFICADO**

Dissertação de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, como requisito parcial para a obtenção do título de "Mestre em Engenharia-Área de Concentração: Mecânica dos sólidos.

Orientador: Prof. Ph.D Hil-
beth Parente Azikri de Deus

**CURITIBA
2017**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

S586ad
2017 Silva, Thales Augusto Barbosa Pinto
Análise do módulo de cisalhamento associado a modelo de Jeffreys
modificado / Thales Augusto Barbosa Pinto Silva-- 2017.
108 f. : il. ; 30 cm.

Disponível também via World Wide Web.

Texto em português, com resumo em inglês.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, Curitiba, 2017.

Bibliografia: f. 85-89.

1. Deformações (Mecânica). 2. Reologia. 3. Tixotropia. 4. Viscoelasticidade. 5. Cisalhamento. 6. Problemas inversos (Equações diferenciais). 7. Engenharia Mecânica – Dissertações. I. Deus, Hilbeth Parente Azikri de orient. II. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais. IV. Título.

CDD: Ed. 22 – 620.1

Biblioteca Central da UTFPR, Câmpus Curitiba
Bibliotecária: Anna T. R. Caruso CRB9/935



Ministério da Educação
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Diretoria de Pesquisa e Pós-Graduação

TERMO DE APROVAÇÃO DE DISSERTAÇÃO Nº 309

A Dissertação de Mestrado intitulada: **Análise do Módulo de Cisalhamento Associado a Modelo de Jeffreys modificado**, defendida em sessão pública pelo Candidato **Thales Augusto Barbosa Pinto Silva**, no dia 17 de novembro de 2017, foi julgada para a obtenção do título de Mestre em Engenharia, área de concentração: Mecânica dos Sólidos, e aprovada em sua forma final, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais – PPGEM.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Hilbeth Parente Azikri de Deus - Presidente - UTFPR

Prof. Dr. Roy Wilhelm Probst - UTFPR

Prof. Dr. Cesar Otaviano Ribeiro Negrão - UTFPR

Prof. Dr. André Krindges - UFMT

A via original deste documento encontra-se arquivada na Secretaria do Programa, contendo a assinatura da Coordenação após a entrega da versão corrigida do trabalho.

Curitiba, ____ de _____ de 20 ____.

Carimbo e assinatura do Coordenador do Programa

Agradecimentos

Agradeço aos professores e funcionários do PPGEM pelo esforço e dedicação para o desenvolvimento e organização da estrutura da pós graduação. Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

Gostaria de agradecer aos colaboradores do CERNN Nézia, Rubens, Diogo, Gabriel e Tainan pelas discussões e esclarecimentos que possibilitaram a construção da minha intuição física sobre alguns temas abordados neste trabalho.

Agradeço aos professores Roy Probst, André Krindges, Cláudio Ávila e César Negrão por se disponibilizarem para revisar e avaliar este trabalho.

Agradeço ao meu orientador, professor e mestre Hilbeth Parente Azikri de Deus, pelos conselhos, explicações e orientações ao longo de quase toda a minha formação acadêmica, culminando na realização deste trabalho.

Agradeço ao professor Adonai Sant'anna pelas conversas sobre matemática, que contribuíram para um aumento da minha admiração por esta área do conhecimento humano tão bela.

Agradeço aos meus amigos físicos Roberto, Matheus, Aron, César, Bruno, Miguel e Marco pelo companheirismo e pelas discussões aleatórias durante as refeições e os cafezinhos.

Agradeço aos meus grandes amigos brasilienses Pedro Paulo, Pedro Nobre, Gustavo, Lucas, Jorge, Yuri, Bárbara, Elisa e Luciana, por sempre me acolherem na minha cidade natal e me apoiarem nesta etapa da minha vida e aos meus padrinhos Ramsés e Regina e minha avó Astrogilda por sempre torcerem por mim.

Meus agradecimentos aos amigos Pedro Zanato, Jéssica, Manoella e Isis pelas saídas nos finais de semana e férias, essenciais para "manter as coisas no lugar".

Meus agradecimentos aos meus pais Cícero e Ione por sempre acreditarem, investirem e torcerem por mim incondicionalmente. Agradeço também por seus ensinamentos que me deram suporte para o desenvolvimento deste trabalho e da minha formação acadêmica. E faço um agradecimento especial por sempre me proporcionarem amor e carinho, estes que nunca faltaram em minha casa, seja ela onde for.

Agradeço às minhas irmãs Jaqueline e Thanise por me ajudarem a expandir minhas visões de mundo, quebrar meus preconceitos, acreditar mais no poder de transformação do ser humano e é claro: a me divertir em qualquer ocasião.

Finalmente, agradeço à Carollina, minha "válvula de escape", minha companheira, minha conselheira, minha namorada, pelos conselhos e paciência, pelo carinho e amor e por me fazer feliz ao longo de todos os passos desta caminhada.

"In the attempt to achieve a conceptual formulation of the confusingly immense body of observational data, the scientist makes use of a whole arsenal of concepts which he imbibed practically with his mother's milk; and seldom if ever is he aware of the eternally problematic character of his concepts."

Albert Einstein

Resumo

Materiais tixotrópicos possuem aplicações industriais economicamente importantes. Modelos constitutivos descrevendo seu comportamento, propostos recentemente, são formulados por meio de um sistema acoplado de duas equações: equação constitutiva (baseada em modelos viscoelásticos clássicos) e a equação de taxa (que descreve a evolução microestrutural do material). O módulo de cisalhamento e o(s) coeficiente(s) de viscosidade são considerados, nesta classe de modelos, funções do parâmetro estrutural. As expressões utilizadas para tais funções são definidas satisfazendo limites assintóticos, de tal forma que o modelo seja fisicamente consistente. Entretanto, não há consenso quanto a forma em que as expressões são formuladas. Objetivou-se determinar o formato da função associada ao módulo de cisalhamento, a partir de dados de testes reológicos, utilizando um modelo de Jeffreys modificado. A obtenção da expressão do módulo de cisalhamento foi definida como um problema inverso e, portanto, a teoria e algumas estratégias associadas foram discutidas. Utilizou-se uma estrutura multiobjetiva juntamente com o método de regularização de Tikhonov e o critério de escolha de parâmetro curva L, para a obtenção de soluções de problemas mal-postos associados. Os algoritmos formalizados no trabalho foram implementados por meio de um código desenvolvido no MATLAB. Como resultados, uma nova proposta para a função associada ao módulo de cisalhamento foi obtida e os parâmetros associados ao modelo constituído desta nova proposta foram ajustados a dados de testes reológicos.

Palavras-chave: Materiais tixotrópicos. Modelos constitutivos. Testes reológicos. Método de regularização de Tikhonov. Curva L. Problema inverso.

Abstract

Thixotropic materials have economically important industrial applications. Recently proposed constitutive models describing its behavior are formulated by means of a two coupled equations system: the constitutive equation (based on viscoelastic classic models) and the rate equation (in which the microstructural evolution is described). The shear modulus and the viscosity coefficient(s) are considered, in such a class of models, as functions of the structural parameter. The expressions used for such functions are defined by satisfying some asymptotic limits, in a way that the model is physically consistent. However, there is no agreement as to the form in which the expressions are formulated. It is aimed to determine the form of shear modulus function, from rheological tests data, using a modified Jeffreys model. The obtainment of an expression for the shear modulus function is defined as an inverse problem and therefore the theory and some strategies associated were discussed. It is used a multi-objective framework together with the Tikhonov regularization method and the L-curve parameter-choice criterion in order to get the solution for associated ill-posed problems. The algorithms formalized throughout the work were implemented through a MATLAB developed code. As results, a new proposal for the shear modulus function were obtained and the parameters associated with the model constituted of this new proposal are fitted to rheological tests data.

Keywords: Thixotropic materials. Constitutive models. Rheological tests. Tikhonov regularization method. L-curve. Inverse problem.

Lista de ilustrações

Figura 2.1 – Viscosidade de uma amostra de óleo cru, sob diversas condições experimentais, em função do tempo. Fonte: (SOARES; THOMPSON; MACHADO, 2013)	22
Figura 2.2 – Comparação do comportamento para alguns materiais em tensão, sob a aplicação de uma deformação constante. Fonte: (MACOSKO; LARSON, 1994)	23
Figura 2.3 – Modelo de Maxwell. Fonte: Adaptado de (DEUS; DUPIM, 2013)	24
Figura 2.4 – Carregamento de patamar de taxa de deformação (a) e a resposta em tensão para um material viscoelástico não tixotrópico(b), tixotrópico não viscoelástico (c) e tixotrópico viscoelástico (d). Fonte: (MEWIS; WAGNER, 2009)	25
Figura 2.5 – Mudança da viscosidade de uma solução de polibutadieno, em função do tempo. Fonte: (MACOSKO; LARSON, 1994)	26
Figura 2.6 – Esboço do modelo de Jeffreys modificado. Fonte: (SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014)	32
Figura 2.7 – Representação da cadeia de partículas. Fonte: (SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014)	34
Figura 3.1 – Curva L. Fonte: Adaptado de (HANSEN, 1999)	49
Figura 5.1 – Curva de escoamento: comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo	67
Figura 5.2 – Testes de taxa constante: comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo.	68
Figura 5.3 – Função associada ao módulo de cisalhamento utilizando uma abordagem via problemas inversos, $\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$	69
Figura 5.4 – Função associada ao módulo de cisalhamento utilizando uma abordagem via problemas inversos, $\dot{\gamma} = 100 \text{ s}^{-1}$	69
Figura 5.5 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 1,03 \cdot 10^{-6}$ e $G_0^* = 6,5004$	72
Figura 5.6 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 9,13 \cdot 10^{-4}$ e $G_0^* = 6,5386$	73
Figura 5.7 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 1,02 \cdot 10^{-1}$ e $G_0^* = 6,5386$	73
Figura 5.8 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 8,80 \cdot 10^{-4}$ e $G_0^* = 6,4993$	74
Figura 5.9 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 1,00 \cdot 10^{-6}$ e $G_0^* = 6,5000$	74

Figura 5.10–Curvas L obtidas a partir do algoritmo 3, via variável de folga para testes de taxa de deformação constante: $G = G_0^* \lambda \exp\left(\frac{m^*}{\lambda}\right)$	75
Figura 5.11–Curvas L obtidas a partir do algoritmo 2, considerando todos os parâmetros do modelo para testes de taxa de deformação constante: $G = G_0^* \lambda \exp\left(\frac{m^*}{\lambda}\right)$	77
Figura 5.12–Comparação entre resultados experimentais e simulação do modelo, considerando $G_N: \dot{\gamma} = 10^{-5} s^{-1}$	78
Figura 5.13–Comparação das funções relacionadas ao módulo de cisalhamento.	79
Figura 5.14–Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime permanente.	79
Figura 5.15–Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime transiente.	80
Figura 5.16–Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime permanente.. . . .	81
Figura 5.17–Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime transiente.	81

Lista de símbolos

λ	Parâmetro estrutural	[–]
τ	Tensão de cisalhamento.	[Pa]
t	Tempo.	[Pa]
γ	Deformação cisalhante,	[–]
G	Módulo de cisalhamento	[Pa]
η_c	Coefficientes de viscosidade	[Pa.s]
η_x	Viscosidade do elemento x	[Pa.s]
\underline{W}_c	Parâmetros do modelo desconsiderando a definição de $G(\lambda)$	
\underline{W}_G	Parâmetros associados à função $G(\lambda)$	
\underline{z}	Vetor de variáveis de folga	
L	Lagrangeana do problema com restrições	
$\underline{\Phi}$	Vetor de multiplicadores de Lagrange	
α_k	Parâmetros associado a k -ésima iteração do método de conjuntos ativos	
λ_i^A	Multiplicador de Lagrange associado a i -ésima restrição, utilizando o método de conjuntos ativos	
\mathcal{W}_k	Conjunto ativo na k -ésima iteração	
$\{(\cdot)_i\}_1^{N_x}$	Conjunto de (\cdot) correspondentes aos índices $i = 1, 2, \dots, N_x$	
$\{(\cdot)_i\}$	Conjunto de $(\cdot)_i$	
η	Viscosidade absoluta	[Pa.s]
G_r	Módulo de relaxação,	[Pa]
σ	Tensor tensão de Cauchy,	[Pa]
\mathbf{D}	Tensor de taxa de deformação,	[s ⁻¹]
t	Tempo	[s]
u_{in}	Energia interna intensiva	[J/m ³]
θ	Temperatura absoluta	[K]
$N_\alpha \equiv N$	Número de cadeias	[–]
N_β	Número de partículas	[–]
s_α	Potencial químico por cadeia	[J/(m ³ .N _α)]
s_β	Potencial químico por partícula	[J/(m ³ .N _β)]
ψ	Energia livre de Helmholtz	[J/m ³]
n	Função contínua de densidade de probabilidade	[m ⁻¹] ou [m ⁻²] ou [m ⁻¹]
K	Fator de coagulação	
K_ψ^*	Constante do modelo,[Equação 2.46]	[J.s ² /K.m ³]

η_0	Constante do modelo, [Equação 2.62]	[Pa.s]
α_1	Constante do modelo, [Equação 2.62]	[–]
α_2	Constante do modelo, [Equação 2.62]	[–]
β	Constante do modelo, [Equação 2.53]	[–]
k_0^*	Constante do modelo, [Equação 2.53]	[s ⁻¹]
G_0	Constante do modelo, [Equação 2.60]	[Pa]
m	Constante do modelo, [Equação 2.60]	[–]
A	Operador geral qualquer (sua definição varia no contexto)	
X, Y	Espaços métricos qualquer qualquer (sua definição varia no contexto).	
x, y, w, z, n	Elementos de espaços métricos	
$D(A)$	Domínio do operador A	
$R(A)$	Imagem do operador A	
K_F	Operador associado a equação de Fredholm	
$(A S)$	Restrição do operador A para o subespaço S	
$N(A)$	Núcleo do operador A	
A^*	Operador adjunto de A .	
A^{-1}	Operador inversa, correspondente a A .	
A^\perp	Inversa generalizada, correspondente a A .	
H	Espaços de Hilbert.	
Px	Projeção do elemento x .	
$\{v_j, u_j, \mu_j, \}$	Sistemas de autovalores de um operador A qualquer	
λ_R	Parâmetro de regularização.	
$\{R_{\lambda_R}\}$	Família de operadores associados à estratégias de regularização.	
$q(\lambda_R, \mu)$	Fatores de filtro.	
$F(u)$	Funcional associado ao elemento u .	
x_{λ_R}	Solução obtida utilizando regularização de Tikhonov.	
δ	Erro experimental	
Ψ, Λ	Propriedades associadas a curva L, seção 3.5	
λ_R^L	Parâmetro de regularização que satisfaz o critério da curva L	
$N_{\dot{\gamma}}$	Número de testes em regime permanente de uma determinada amostra.	
N_t	Número de instantes de tempo, no qual fez-se medidas em um teste de regime transiente	
N_{t^*}	Número de elementos de um conjunto contido de números obtidos após interpolação de dados	

$F_{imp}(t)$	Função do tempo que expressa a imposição de uma carga qualquer de cisalhamento	
f, g	Funções quaisquer (a depender do contexto)	
$\underline{\underline{A}}_d$	Operador associado a diferenciação numérica	
I	Conjunto representando intervalos de tempo	
$(\cdot, \cdot)_H$	Produto interno no espaço de Hilbert H	
N_G	Número de parâmetros associados a função $G(\lambda)$	
W	Vetor genérico, expressando parâmetros a serem determinados	
$\underline{\underline{J}}$	Matriz jacobiana	
N_e	Número de experimentos, associados à estrutura multi-objetiva	
F_M	Funcional associado a estrutura multi-objetiva	
N_{co}	Número de condição	
ϵ_1	Tolerância para o número de condição	
N_{nw}	Número de iterações máximo do método de Newton	
ϵ_{nw}	Tolerância associada ao método de Newton	
$\dot{\gamma}_a$	Taxa de deformação aplicada	[s^{-1}]
$H_s(t)$	Função degrau unitário de Heaviside	
Δ_t	Passo de tempo	[s]

Superscritos

$\dot{()}$	Derivada em relação ao tempo,
$()^i$	Valor no i -ésimo instante de tempo.
$()^j$	Valor no j -ésimo instante de tempo, obtido experimentalmente.
\bar{S}	Fecho do espaço S .
S^\perp	Espaço de elementos ortogonais a S .
$()^\delta$	Propriedade com erro experimental associado δ .
$()^{exp}$	Dados experimentais.

Subscritos

$()_m$	Referente ao elemento de Maxwell
$()_e$	Referente à parcela elástica do elemento de Maxwell
$()_\nu$	Referente à parcela viscosa do elemento de Maxwell
$()_v$	Referente ao elemento viscoso do modelo de Jeffreys
$()_\mu$	Referente ao elemento viscoso
$()_{eq}$	No equilíbrio/regime permanente
$()_{i,j}$	Componentes i e j de um tensor
$()_k$	Componentes k de um vetor
$()_F$	Propriedade associada a equação integral de Fredholm de primeira espécie.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Motivação	15
1.2	Definição dos problemas	17
1.3	Objetivo	18
1.4	Contribuições	18
1.5	Estrutura do trabalho	19
2	MATERIAIS TIXOTRÓPICOS: UMA REVISÃO	20
2.1	O conceito de tixotropia	20
2.2	Reestruturação, destruição e bifurcação da viscosidade	21
2.3	Viscoelasticidade linear e não linear	22
2.4	Tixotropia e viscoelasticidade	25
2.5	Modelos para materiais tixotrópicos	27
2.5.1	Modelos cinemáticos estruturais	27
2.5.2	Alguns modelos	28
2.6	Descrição do modelo	31
2.6.1	Considerações gerais	31
2.6.2	Equação constitutiva	31
2.6.3	Restrições aos funcionais associados	33
2.6.4	Equação da evolução estrutural	34
2.6.4.1	Quebra estrutural	34
2.6.4.2	Construção estrutural	35
2.6.5	Módulo de cisalhamento e coeficientes de viscosidade	37
2.7	Resumo do capítulo	38
3	PROBLEMAS INVERSOS	39
3.1	Teorema de Tikhonov e consequências	40
3.2	Decomposição em valores singulares (SVD)	42
3.3	Estratégias de Regularização: aspectos gerais	45
3.4	Regularização de Tikhonov	46
3.5	Curva L	49
3.6	Resumo do capítulo	50
4	ABORDAGEM NUMÉRICA	51
4.1	Equações do modelo	51
4.2	Testes reológicos	51
4.2.1	Regime permanente	51
4.2.2	Regime transiente	52

4.3	Tratamento de dados	53
4.4	Problemas formalmente estabelecidos	53
4.5	Método de Newton	55
4.6	Minimização Multi-Objetiva	56
4.7	Problemas com restrição	58
4.7.1	Variáveis de folga	59
4.7.2	Conjunto ativo	62
4.8	Estratégia geral e algumas considerações	65
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	67
5.1	Óleo cru	67
5.1.1	Uma nova abordagem para o módulo de cisalhamento	68
5.1.2	Obtenção de G_0^* e m^*	70
5.1.3	Abordagem via variáveis de folga	71
5.1.4	Considerando todos parâmetros do modelo	73
5.2	Fluido de perfuração	77
5.3	Conclusões dos resultados obtidos	82
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	83
	REFERÊNCIAS	85
	APÊNDICE A – ANÁLISE FUNCIONAL: RESULTADOS BÁSICOS	90
A.1	Introdução a operadores	90
A.2	Aproximação em espaços lineares	91
A.3	Operadores lineares	92
A.4	Operadores compactos	94
A.5	Autovalores e operadores autoadjuntos	95
	APÊNDICE B – SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA 5	96
B.1	Backward	97
B.2	Forward	98
	APÊNDICE C – LIMITES DE UMA PROPOSTA PARA $G(\lambda)$	99
	APÊNDICE D – DEDUÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO INICIAIS	100
D.1	Teste de taxa de deformação constante	100
D.1.1	Solução geral	101
D.1.2	Fator de integração	101
D.1.3	Obtendo a tensão inicial	103
D.2	Teste de tensão constante	105
	APÊNDICE E – CONDIÇÕES DE KARUSH-KUHN-TUCKER	108

1 Introdução

1.1 Motivação

Materiais tixotrópicos possuem aplicação em diversos setores industriais economicamente importantes como a indústria de alimentos, petróleo, revestimento, entre outros (MEWIS; WAGNER, 2009; BARNES, 1997). Pesquisas são feitas para modelar comportamento de materiais tixotrópicos de maneira robusta e precisa, no entanto ainda há muitos questionamentos associadas às abordagens utilizadas (MUJUMDAR; BERIS; METZNER, 2002; COUSSOT et al., 2002a; DULLAERT; MEWIS, 2006; MEWIS, 1979; BARNES, 1997; MENDES; THOMPSON, 2013; SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014).

Modelos tixotrópicos propostos recentemente (MENDES; THOMPSON, 2013; MENDES, 2009; MENDES, 2011; MUJUMDAR; BERIS; METZNER, 2002; DEUS; DUPIM, 2013; DEUS; NEGRAO; FRANCO, 2016) são constituídos de um sistema de duas equações acopladas: equação de taxa e equação constitutiva. A partir da equação de taxa, contabiliza-se a evolução estrutural do material. Seu formato geral é

$$\dot{\lambda} = \dot{\lambda}(\dot{\gamma}, \tau) \quad (1.1)$$

onde τ é a tensão no material ao longo do tempo, $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação e λ é o parâmetro estrutural, variável que quantifica o nível de estruturação do material.

A equação constitutiva é definida de maneira geral como

$$\tau = \tau(\dot{\gamma}, \lambda). \quad (1.2)$$

O formato da equação (1.2) é obtido modificando modelos viscoelásticos clássicos, como de Maxwell, Jeffreys ou Kelvin-Voigt (TRUESDELL; NOLL, 2004; MACOSKO; LARSON, 1994; BIRD et al., 1977): constantes dos modelos clássicos, como módulo de cisalhamento G e coeficiente de viscosidade η_c , são consideradas dependentes da microestrutura nos modelos adaptados, i.e. $G \equiv G(\lambda)$ e $\eta_c \equiv \eta_c(\lambda)$. $G(\lambda)$ e $\eta_c(\lambda)$ são definidas satisfazendo limites assintóticos necessários para que o modelo seja fisicamente consistente. Por não serem obtidas a partir de deduções, podem não ter formatos adequados para o problema, i.e. satisfazem os limites necessários, porém apresentam formatos que contribuem para erros nas respostas do modelo.

Determinados os dados de tensão e taxa de deformação, pode-se desejar obter o formato das funções $G(\lambda)$ e $\eta_c(\lambda)$. Ferramentas utilizadas para a solução de problemas deste tipo podem ser encontradas, sob o escopo da matemática aplicada, no contexto de *problemas inversos*.

Problemas ditos inversos são definidos usualmente como aqueles em que se procura determinar a causa de um determinado efeito e, contrariamente, em problemas diretos, busca-se obter o efeito da causa (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003; KIRSCH, 2011; ISAKOV, 1998; ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996). A diferença entre inverso e direto é dependente do que se define como

entrada e saída, o que usualmente varia com o contexto no qual o problema se insere, ou com o que foi historicamente definido¹.

Há exemplos de problemas aplicados no escopo da física e engenharia (KIRSCH, 2011; LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003): determinar a condutividade de um corpo, sabendo a configuração de temperatura e calor (NETO; NETO, 2005); definir as tensões associadas a uma determinada deformação aplicada sobre o material (DEUS et al., 2012; SILVA et al., 2015); determinar o coeficiente de transferência de calor, que gera uma configuração específica de temperatura (BAZÁN; BEDIN; BOZZOLI, 2016).

Foi feito um esforço da comunidade científica para desenvolver métodos mais robustos e de rápida convergência, que tratassem do mal condicionamento dos operadores associados (ALVES, 2005; BORGES, 2010; COLIBORO, 2011; MARGOTTI, 2011; QUIROZ, 2014; RAMSAY et al., 2007; LI; DING; YANG, 2012; LIU; XIAO; DING, 2013). Métodos de regularização demonstraram possuir tais características em aplicações de engenharia e física (DEUS et al., 2012; BAZÁN; BEDIN; BOZZOLI, 2016; EILKS; ELLIOTT, 2008). Dentre eles, o método de Tikhonov já é considerado difundido (ISAKOV, 1998; ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996; LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003; HANSEN, 1998). Em alguns trabalhos, trata-se da regularização aplicada à diferenciação numérica de dados com ruído (BRIE; RICHARD et al., 2005; CULLUM, 1971; KNOWLES; RENKA, 2014; CHARTRAND, 2011; STICKEL, 2010).

Problemas inversos podem ser reduzidos, após linearização, a equações do tipo:

$$Ax = y \quad (1.3)$$

onde procura-se determinar x , a partir de A e y . O problema (1.3) pode ser visto de outra maneira, como

$$\min_x \|Ax - y\| \quad (1.4)$$

Pode-se buscar resolver simultaneamente mais de um problema como 1.4, i.e., resolver problemas do tipo

$$\min_x \sum_{i=1}^N \vartheta_i \|A_i x - y_i\|, \quad (1.5)$$

sendo ϑ_i representam *pesos* associados ao problema i . Trabalhos abordam a possibilidade de lançar mão da estrutura multi-objetiva (GONG; JIANG; LI, 2016), para obter a solução de (1.5).

Busca-se, no presente trabalho, determinar o formato da função $G(\lambda)$ utilizando o modelo desenvolvido por Azikri de Deus et al. (2016), considerando dados de testes reológicos de óleo cru e fluido de perfuração. Aborda-se os problemas utilizando uma estrutura multi-objetiva e métodos de regularização são utilizados para a solução de problemas mal postos associados. A seguir, define-se formalmente os problemas a serem resolvidos no trabalho.

¹ De fato, pode-se definir dois problemas como inversos entre si se a formulação de um problema envolve o outro (ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996).

1.2 Definição dos problemas

O modelo proposto por Azikri de Deus et al. (2016) é constituído das seguintes equações

$$\frac{2\eta_\nu}{G} \dot{\tau} + \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \tau = \left[2\eta_\nu + 2 \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \eta_\mu + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G}\right] \dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma}; \quad (1.6)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{\varsigma} \left[\kappa(1 - \lambda)^\beta - (K_\psi^* \lambda^6 \ddot{\gamma} + \tau) \lambda \dot{\gamma} \right], \quad (1.7)$$

$$\eta_\mu = \eta_0 \exp(\alpha_2 \lambda); \quad (1.8)$$

$$\eta_\nu = \eta_0 \exp[(\alpha) \lambda] - \eta_\mu, \quad (1.9)$$

$$G = G_0 \exp(m \lambda^{-1}); \quad (1.10)$$

onde $\underline{W}_c = [\eta_0, \alpha, \alpha_2, \kappa, \beta, K_\psi^*, \varsigma]^T$ são os parâmetros do material associados às equações 1.6-1.9, $\underline{W}_G = [G_0, m]^T$, associados à equação (1.10). λ é o parâmetro estrutural, que contabiliza o nível de estruturação do material, variando de 0 (totalmente desestruturado) a 1 (totalmente estruturado).

Busca-se no presente trabalho, *determinar* um formato para $G(\lambda)$. Três problemas são considerados para atingir o objetivo do trabalho: dois inversos e um direto.

A simulação do modelo, utilizando parâmetros definidos (ou obtidos a partir de um ajuste) pode ser considerado como um problema direto. Formalmente,

Problema Direto 1. *Considera-se um teste de taxa de deformação (tensão) controlada, i.e. com $\{\dot{\gamma}(t_i)\}$ ($\{\tau(t_i)\}$) obtidos para os instantes $\{t_i\}$, $i = 1, 2, 3 \dots N$. Supõe-se o formato $G(\lambda(t))$ conhecido (como é o caso do modelo composto das equações (1.6)-(1.10)) e os parâmetros associados \underline{W}_G determinados. Determinar $\{\tau(t_i)\}$ ($\{\dot{\gamma}(t_i)\}$), utilizando as equações 1.6-1.10, considerando \underline{W}_c já conhecidos.*

Os problemas inversos resolvidos no trabalho são descritos de maneira geral.

Problema Inverso 1. *Considera-se um teste de taxa de deformação (tensão) controlada, i.e. com $\{\dot{\gamma}(t_i)\}$ ($\{\tau(t_i)\}$) obtidos para os instantes $\{t_i\}$, $i = 1, 2, 3 \dots N$. Supõe-se $\{\tau(t_i)\}$ ($\{\dot{\gamma}(t_i)\}$) conhecidos nos mesmos instantes. Determinar o formato de $\{G(\lambda(t_i))\}$, a partir das equações 1.6-1.9, considerando \underline{W}_c já conhecidos.*

Os problemas inversos considerados para os ajustes dos parâmetros do modelo são definidos da seguinte maneira.

Problema Inverso 2. *Considera-se um teste de taxa de deformação (tensão) controlada, i.e. com $\{\dot{\gamma}(t_i)\}$ ($\{\tau(t_i)\}$) obtidos para os instantes $\{t_i\}$, $i = 1, 2, 3 \dots N$. Supõe-se $\{\tau(t_i)\}$ ($\{\dot{\gamma}(t_i)\}$) conhecidos nos mesmos instantes. Determinar os parâmetros do modelo \underline{W}_c e \underline{W}_G , a partir das equações 1.6-1.9 e do formato obtido (definido) de $G(\lambda(t))$.*

Procura-se *determinar* a função $G(\lambda)$ seguindo os passos:

(i) Resolver o problema inverso 2, considerando $G(\lambda(t))$ definido na equação 1.10 e dados de óleo cru. Obtém-se \underline{W}_c e \underline{W}_G ;

(ii) Resolver o problema inverso 1, considerando os parâmetros \underline{W}_c obtidos no passo anterior e considerando $G(\lambda)$ não conhecido, i.e., desconsiderando a definição (1.10);

(iii) Definir, a partir do formato da curva obtida $\{G(\lambda(t_i))\}$ vs $\{t_i\}$, uma função $G(\lambda)$ que possui comportamento semelhante à curva e seja fisicamente consistente;

(iv) Resolver novamente o problema inverso 2, utilizando a função $G(\lambda)$ definida no passo anterior e os mesmos dados de óleo cru utilizados no passo (i), obtendo novos parâmetros \underline{W}_c e \underline{W}_G .

(v) Simular e ajustar modelo para um outro teste reológico utilizando dados de fluido de perfuração, i.e., resolver os problemas direto 1 e inverso 2, averiguando a capacidade do modelo de representar comportamentos conhecidos de materiais tixotrópicos.

Define-se, a seguir, os objetivos visados no trabalho.

1.3 Objetivo

A obtenção da função $G(\lambda)$, a partir de dados experimentais de óleo cru, é o objetivo principal do trabalho. Alguns objetivos específicos são mencionados:

-Analisar se há mudança significativa na função obtida e a definida anteriormente.

-Verificar se o modelo, considerado juntamente à função obtida, reproduzirá o comportamento de uma amostra de fluido de perfuração, sob teste de tensão constante.

-Averiguar se há mudanças do ponto de vista computacional, i.e. se há problemas na simulação do modelo, incorporando a função obtida.

-Testar a robustez do método de Tikhonov; verificar se apresenta resultados significativos no contexto do trabalho.

-Observar se há mudanças numérico-computacionais ao utilizar uma abordagem com otimização multi-objetiva.

A seguir, consideram-se as contribuições do trabalho.

1.4 Contribuições

Espera-se que a resposta da simulação do modelo possua maior proximidade com dados experimentais de materiais tixotrópicos, quando considerado juntamente com a nova função $G(\lambda)$ obtida. Uma descrição qualitativa dos fenômenos associados à tixotropia também pode ser modificada, quando considerada a nova proposta.

É necessário enfatizar que a abordagem a ser apresentada no trabalho, pode ser adaptada para a obtenção de outras funções associadas ao modelo de Azikri de Deus et al. (2016) ou outras propriedades de modelos constitutivos diferentes. Possíveis adaptações poderiam ser feitas de modo a considerar mais de um parâmetros estrutural ou a utilização de outros métodos para a solução dos problemas inversos associados. Portanto, o cumprimento dos objetivos do trabalho demonstra a

viabilidade de métodos associados a problemas inversos no contexto de tixotropia e/ou materiais viscoelásticos, fomentando futuras abordagens.

1.5 Estrutura do trabalho

O presente trabalho apresenta uma gama de assuntos correlatos ao objetivo principal e, portanto, foram organizados em uma sequência coerente com a abordagem pretendida. Trata-se, no próximo capítulo, do conceito de tixotropia. Os fenômenos principais associados são mencionados e revisa-se sucintamente aspectos da modelagem, no contexto de viscoelasticidade: verifica-se a origem do módulo de cisalhamento em modelos viscoelásticos, adaptados posteriormente, no contexto de tixotropia. O modelo de Azikri de Deus et al. (2016) é descrito ao final do capítulo.

Problemas inversos são abordados na sequência, usando resultados explicitados no apêndice A. São definidas, de maneira geral, as estratégias de regularização e em seguida restringe-se a abordagem para definir o método de regularização de Tikhonov.

Aspectos computacionais e associados a implementação a ser feita são definidos no capítulo 4. Os resultados obtidos são apresentados em seguida, com um novo formato para a função $G(\lambda)$, obtido a partir de dados de óleo cru, demonstrando que a metodologia definida no capítulo 4 possibilita obter a solução dos problemas inversos considerados. Ao final do capítulo utiliza-se o modelo juntamente com a nova proposta para $G(\lambda)$, para simular o comportamento de uma amostra de fluido de perfuração.

Alguns aspectos teóricos associados à tixotropia serão descritos no capítulo que segue, para embasar a discussão que será apresentada nos resultados e definir os principais termos e fenômenos mencionados na literatura.

2 Materiais tixotrópicos: uma revisão

2.1 O conceito de tixotropia

A palavra tixotropia, foi inserida por Peterfi em 1927 a partir da combinação das palavras gregas “Thixis” e “Trepo”, que significam, respectivamente, agitar (ou tocar) e mudança (MEWIS, 1979; BARNES, 1997). Esta definição evidencia as primeiras observações do fenômeno: alguns materiais mudavam da fase gel ¹, isotermicamente, para a fase sol ² devido a vibrações mecânicas e que, após algum tempo sem vibrações (em repouso), a fase gel era novamente obtida. Este processo poderia ser feito repetidamente. Alguns autores propuseram que uma nova mudança de fase havia sido descoberta.

Outras definições de tixotropia surgiram, conforme mais materiais apresentavam caráter tixotrópico e mais dúvidas foram surgindo em torno dos conceitos associados. Pryce-Jones em 1934 estabeleceu que a tixotropia é caracterizada pelo crescimento da viscosidade de um material quando se encontra em repouso e o decréscimo quando se encontra sob tensão. Recentemente (MENDES, 2011), definiu-se que materiais, cujo comportamento é dependente do tempo, são tixotrópicos se sua viscosidade, em regime permanente, decai com a taxa de deformação aplicada e que as mudanças na viscosidade do material são reversíveis. Embora várias outras propostas para um conceito único e global de tixotropia tenham sido feitas, nota-se que este ainda não está consolidado: dependendo do trabalho no qual este é utilizado, uma definição é feita, seja utilizando a proposta por Peterfi, Pryce-Jones, a utilizada por Mendes ou outra (BARNES, 1997).

Uma descrição dos principais fenômenos conhecidos associados à tixotropia é necessária para que se possa discutir resultados e modelos já propostos. Portanto, após uma discussão sobre mecanismos que levam à ocorrência da tixotropia, fenômenos e variáveis frequentemente mencionados na literatura são abordados.

O módulo de cisalhamento, propriedade a ser analisada, surge no contexto da viscoelasticidade. Logo, discute-se sobre este fenômeno e sua relação com a tixotropia. Exemplifica-se como a propriedade se insere na modelagem, utilizando um modelo de viscoelasticidade linear. Em seguida, é explicitado como este pode ser adaptado no contexto da tixotropia.

A abordagem muda de ponto de vista na segunda parte do capítulo: trata-se de uma revisão sobre a modelagem de materiais tixotrópicos. Enfatiza-se nestes modelos as funções usadas para descrever o módulo de cisalhamento.

¹ Fase na qual a substância possui uma cadeia contínua sólida englobando uma fase contínua líquida. Especificadamente, se alguma molécula de uma substância atinge dimensões macroscópicas, de maneira que esta se expanda pela solução, então a substância é um gel (ELLIOTT; LIRA, 1999).

² Suspensão coloidal de partículas sólidas em um líquido. Em uma suspensão coloidal, a força gravitacional é desprezível devido ao pequeno tamanho relativo da fase dispersa.

2.2 Reestruturação, destruição e bifurcação da viscosidade

É comum descrever alguns fenômenos associados à tixotropia através dos processos chamados de reestruturação (*Aging*) e destruição (*Rejuvenation*) (COUSSOT et al., 2002b; MENDES, 2011; MENDES; THOMPSON, 2013). Estes processos superpostos contribuem para a evolução da microestrutura do material (grau de estruturação), comumente contabilizada a partir de um parâmetro escalar, representado pela letra grega λ (MEWIS; WAGNER, 2009).

Admite-se que a reestruturação ocorra devido ao movimento browniano dos constituintes da microestrutura do material e/ou devido às colisões geradas a partir do escoamento (BARNES, 1997; DEUS; DUPIM, 2013; DEUS; DUPIM, 2012). Com as colisões, alguns constituintes (partículas ou cadeias de partículas) irão se acoplar a outros, estruturando o material, i.e. aumentando seu nível de estruturação.

Flocos, conceito comumente adotado na literatura (BARNES, 1997), são resultados de aglomerações de cadeias poliméricas formadas em um material estruturado. Podem coalescer a outros ou se desintegrar, a depender dos esforços aos quais o material está submetido (DEUS; DUPIM, 2013; DEUS; DUPIM, 2012). Em alguns casos, considera-se sua deformação (MUJUMDAR; BERIS; METZNER, 2002).

Não há consenso quanto ao mecanismo do processo de quebra ou destruição da microestrutura (EL-GENDY et al., 2012; MENDES, 2009; MEWIS, 1979; BARNES, 1997; TOORMAN, 1997; RITTER; BATYCKY et al., 1967). No entanto, é frequentemente aceito que pode ocorrer após o repouso do material, ou concomitantemente com o processo de estruturação. Esta ação conjunta dos dois processos pode ser averiguada através do fenômeno conhecido como a bifurcação da viscosidade ou efeito avalanche (COUSSOT et al., 2002b). Este fenômeno pode ser visto a partir de um teste de patamar de tensão (ou “Aging test”) (SOARES; THOMPSON; MACHADO, 2013). O teste consiste em submeter um determinado material a testes de tensão constante τ , e obter a resposta em taxa de deformação $\dot{\gamma}$ ou deformação γ^3 . Calcula-se a viscosidade absoluta do material a partir da equação $\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}}$, e observa-se sua variação com o tempo. Um exemplo de resultado, em termos de viscosidade absoluta, é apresentado na Figura 2.1.

A viscosidade se mantém aproximadamente constante, para tensões aplicadas acima de 25 Pa. Entretanto, para tensões abaixo de 25 Pa, a viscosidade tende a aumentar com o tempo. Com uma tensão aplicada de 25 Pa, a viscosidade varia de maneira semelhante a testes com tensões menores, até um determinado momento e então decresce de maneira abrupta. Após a queda, a viscosidade possui um comportamento semelhante às curvas com tensões maiores que 25 Pa. Tal dependência da tensão aplicada, caracteriza o fenômeno denominado bifurcação da viscosidade, ou efeito avalanche.

A estruturação possui grande influência no material abaixo da tensão que delimita a bifurcação da viscosidade (no caso da Figura, 25 Pa), embora a destruição também pode ocorrer (COUSSOT et al., 2002b; MENDES, 2011; SOARES; THOMPSON; MACHADO, 2013). Em testes com maiores valores de tensão, a destruição da microestrutura se sobressai e conseqüentemente a taxa de

³ Considerando σ e D , respectivamente os tensores tensão de Cauchy e o taxa de deformação (TRUESDALL; NOLL, 2004), $\tau \equiv \sigma_{1,2}$, $\dot{\gamma} \equiv D_{1,2}$. A direção 1 é a direção do escoamento, 2 é normal a superfície no qual este ocorre.

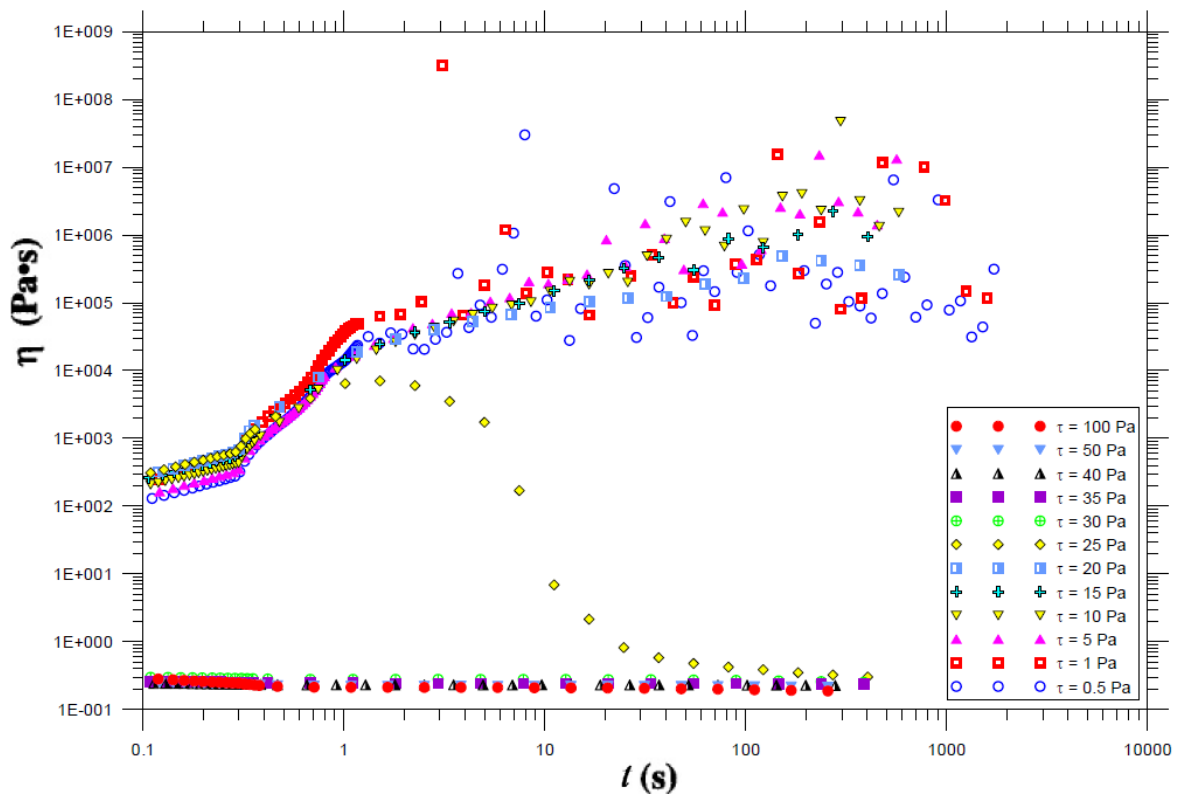


Figura 2.1 – Viscosidade de uma amostra de óleo cru, sob diversas condições experimentais, em função do tempo. Fonte: (SOARES; THOMPSON; MACHADO, 2013)

construção não é suficiente para reduzir a taxa de deformação do escoamento.

Grande parte dos fenômenos associados à tixotropia surgem também em discussões referentes à viscoelasticidade. Levando este fato em consideração e tendo em vista que o módulo de cisalhamento e seu significado físico surgem no mesmo contexto, discute-se os principais fenômenos associados à viscoelasticidade na subseção a seguir.

2.3 Viscoelasticidade linear e não linear

Materiais viscoelásticos possuem (MACOSKO; LARSON, 1994):

- decaimento da tensão após aplicada e mantida uma deformação e;
- se deforma, sob carregamento de tensão constante, no momento de aplicação da carga e continua a se deformar quando mantida a carga⁴.

Uma comparação entre materiais viscoelásticos, fluidos newtonianos e sólidos elásticos é evidenciada na figura 2.2, onde a resposta destes materiais é observada a partir da aplicação de uma deformação contante ao longo do tempo.

A tensão do sólido elástico (Figura 2.2b) e do fluido newtoniano (Figura 2.2c), são constantes após um curto intervalo posterior ao início da aplicação da carga de deformação 2.2a: no caso do sólido elástico a tensão estabiliza em um patamar diferente de 0; já no caso de fluidos newtonianos

⁴ Comportamento que pode ser denominado como *Creep*. Um teste com aplicação de tensão constante ao longo do tempo (*creeping test* (MENDES, 2011)) é feito, a fim de observar este comportamento.

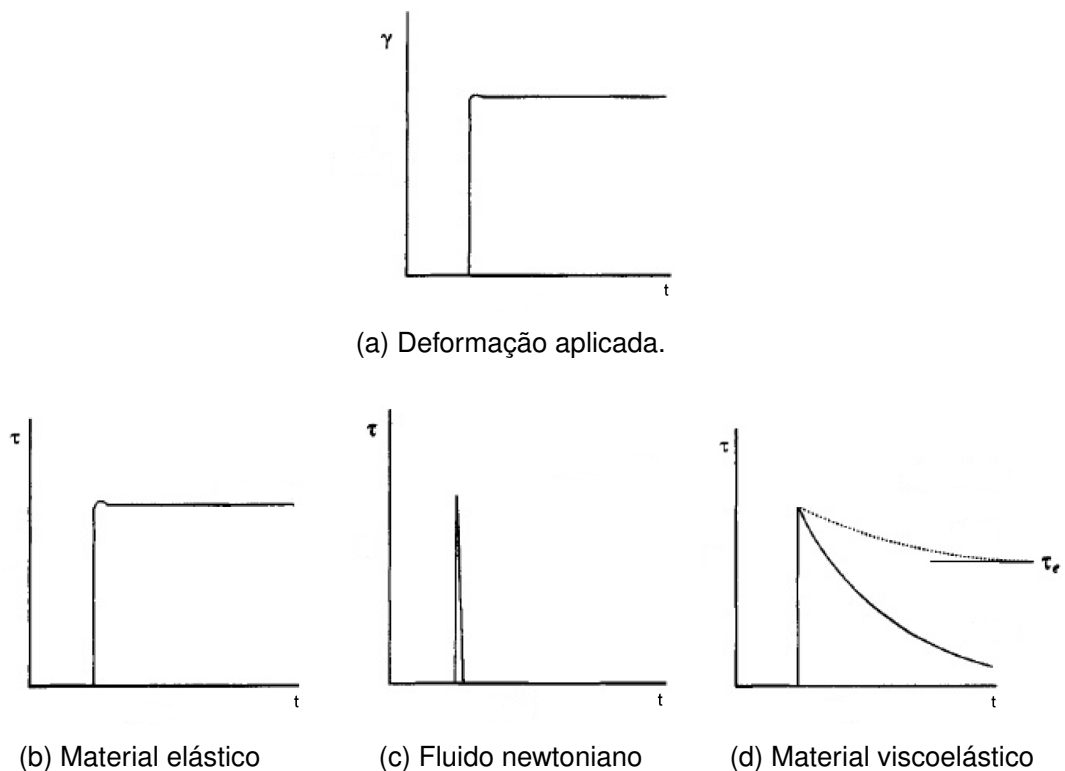


Figura 2.2 – Comparação do comportamento para alguns materiais em tensão, sob a aplicação de uma deformação constante. Fonte: (MACOSKO; LARSON, 1994)

a tensão estabiliza em valores aproximadamente nulos. Um comportamento distinto é observado para o material viscoelástico 2.2d: a tensão decresce monotonicamente até que um patamar seja alcançado.

A viscoelasticidade pode ser independente ou não da deformação aplicada. No primeiro caso, a viscoelasticidade é classificada como linear e é descrita através da equação (MACOSKO; LARSON, 1994)

$$G_r(t) = \frac{\tau(t, \gamma)}{\gamma} \quad [Pa] \quad (2.1)$$

onde $G_r(t)$ é o módulo de relaxação, τ e γ são a tensão e deformação de cisalhamento. O módulo de relaxação (para o caso de materiais lineares) é dependente apenas do tempo, ocorrendo, geralmente, para materiais sob cargas pequenas de deformação (MACOSKO; LARSON, 1994).

Materiais cujo módulo de relaxação é dependente da deformação aplicada, representados por

$$G_r(t, \gamma) = \frac{\tau(t, \gamma)}{\gamma}, \quad [Pa] \quad (2.2)$$

são definidos como viscoelásticos não lineares (MACOSKO; LARSON, 1994).

Modelos obtidos a partir da teoria do contínuo (TRUESDELL; NOLL, 2004) são utilizados para descrever materiais viscoelásticos lineares. Alguns são formulados a partir de analogias entre as relações constitutivas⁵ do material, com as equações dinâmicas de elementos constituídos de amortecedores (elementos viscosos) e molas (elemento elásticos), sob carregamentos de força. Considera-se, por exemplo, o modelo de Maxwell esquematizado na figura 2.3. Neste modelo, a

⁵ Relações que acoplam as respostas cinemáticas de um determinado material, com as cargas de força às quais é solicitado ou exerce.

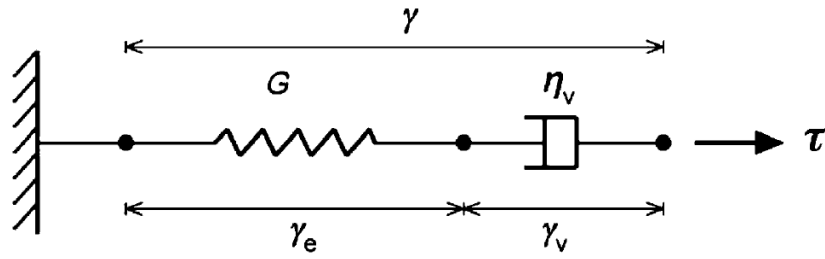


Figura 2.3 – Modelo de Maxwell. Fonte: Adaptado de (DEUS; DUPIM, 2013)

deformação é resultado da superposição da parcelas elástica $(\cdot)_e$ e viscosa $(\cdot)_\nu$ (ver figura 2.3) e a tensão deve ser igual em ambos elementos $\tau = \tau_e = \tau_\nu$.

A relação entre a tensão e deformação para o elemento elástico é descrita através da lei de Hooke (DEUS; DUPIM, 2013; MENDES, 2009)

$$\tau = G\gamma_e, \quad (2.3)$$

onde G é o módulo de cisalhamento do elemento elástico. Considerando G constante, a taxa de deformação neste elemento é descrita por

$$\dot{\gamma}_e = \frac{\dot{\tau}_e}{G}. \quad (2.4)$$

A tensão no elemento viscoso, é modelada de maneira semelhante a de um fluido newtoniano

$$\tau_\nu = 2\eta_\nu\dot{\gamma}_\nu, \quad (2.5)$$

onde $2\eta_\nu$ é a viscosidade do elemento viscoso. A partir das equações (2.4) e (2.5), a equação constitutiva do modelo de Maxwell pode ser obtida, considerando que a taxa de deformação total é igual à soma das parcelas elásticas e viscosa

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_\nu + \dot{\gamma}_e = \frac{\tau_\nu}{2\eta_\nu} + \frac{\dot{\tau}_e}{G} = \frac{\tau}{2\eta_\nu} + \frac{\dot{\tau}}{G}. \quad (2.6)$$

Relações constitutivas podem ser obtidas de maneira semelhante utilizando outros modelos viscoelásticos lineares apresentados na literatura, como os modelos de Jeffreys ou Kelvin-Voigt (BIRD et al., 1977; MACOSKO; LARSON, 1994). Estes estão sendo atualmente adaptados para materiais com comportamento não linear e/ou tixotrópicos (MENDES, 2011; MENDES; THOMPSON, 2013; DEUS; DUPIM, 2013; SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014). Para um material viscoelástico linear, como o caso apresentado, $2\eta_\nu$ e G são independentes do tempo. No entanto, materiais tixotrópicos viscoelásticos tem forte dependência de sua microestrutura. Conseqüentemente, no caso de uma adaptação do modelo de Maxwell, η_ν e G serão dependentes do parâmetro estrutural, isto é, $\eta_\nu \equiv \eta_\nu(\lambda)$ e $G \equiv G(\lambda)$ ⁶. Para se discutir eventuais propostas para estas funções se faz necessário comparar materiais viscoelásticos que apresentam tixotropia com aqueles onde esta tem efeito desprezível, i.e., materiais viscoelásticos sem tixotropia.

⁶ Uma discussão sobre as propostas para a função $G(\lambda)$ é feita posteriormente neste capítulo.

2.4 Tixotropia e viscoelasticidade

Objetivando observar de modo apropriado a interface entre tixotropia e viscoelasticidade, considera-se um teste de patamar de taxa de cisalhamento, seguido por um patamar com taxa menor. O teste evidencia as diferenças características de um material viscoelástico não tixotrópico, tixotrópico viscoelástico e tixotrópico não viscoelástico, da maneira explicitada na Figura 2.4.

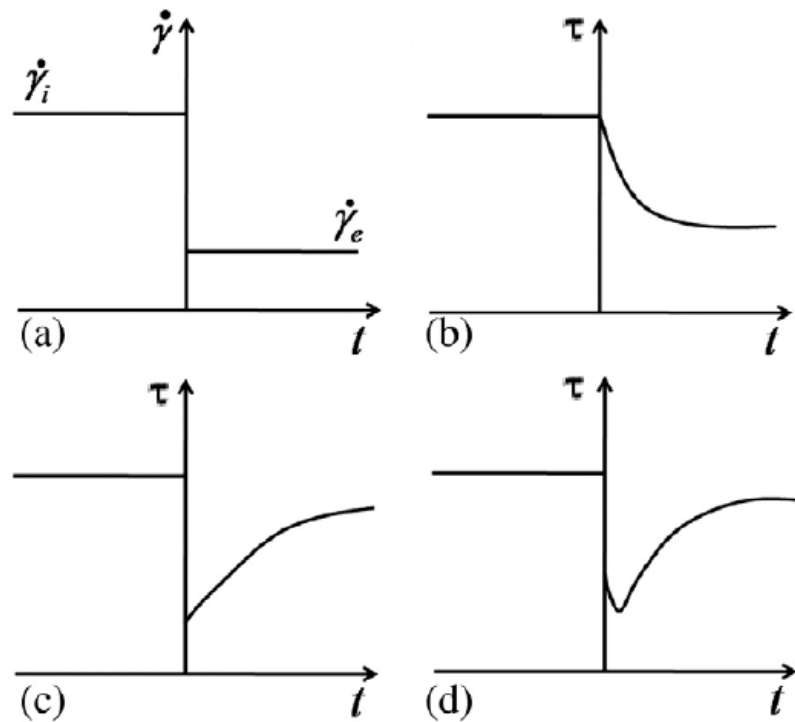


Figura 2.4 – Carregamento de patamar de taxa de deformação (a) e a resposta em tensão para um material viscoelástico não tixotrópico (b), tixotrópico não viscoelástico (c) e tixotrópico viscoelástico (d).
Fonte: (MEWIS; WAGNER, 2009)

Após a redução da taxa, o material viscoelástico não tixotrópico (Figura 2.4b) terá sua tensão monotonicamente reduzida, até atingir um novo patamar. No caso de materiais tixotrópicos não viscoelásticos (Figura 2.4c), a tensão cai instantaneamente, com um posterior crescimento devido a estruturação. Entretanto, para materiais tixotrópicos viscoelásticos, a tensão reduz durante um pequeno intervalo e devido à reconstrução, o aumento da tensão ocorre em seguida (Figura 2.4d).

Considera-se, por outro lado, testes de taxa constante onde não há um decaimento para patamar inferior (observado na Figura 2.4a), i.e. mantém-se a taxa constante indeterminadamente. Alguns materiais tixotrópicos viscoelásticos possuem redução de sua viscosidade com o aumento da taxa de deformação imposta (MACOSKO; LARSON, 1994): para patamares com maior taxa de deformação, a viscosidade em regime permanente estabiliza em valores inferiores, como é possível verificar a partir da evolução da viscosidade ao longo do tempo, representada na Figura 2.5.

Nota-se um pico (*overshoot*) na curva da viscosidade para altas taxas de deformação evidenciando um comportamento dependente da taxa de deformação aplicada.

Fenômenos associados a microestrutura podem ser utilizados para justificar mudanças no comportamento de materiais ao longo do tempo, como o decaimento da viscosidade e os picos de

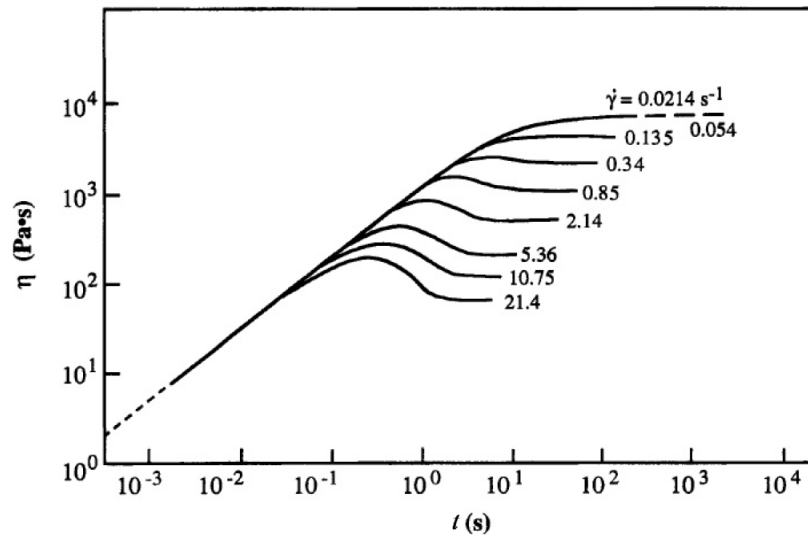


Figura 2.5 – Mudança da viscosidade de uma solução de polibutadieno, em função do tempo. Fonte: (MACOSKO; LARSON, 1994)

tensão, vistos na Figura 2.5. Em algumas abordagens (MENDES, 2009; MENDES, 2011; SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014; DULLAERT; MEWIS, 2006; MUJUMDAR; BERIS; METZNER, 2002), utiliza-se, como mencionado anteriormente, modelos viscoelásticos com propriedades variando com mudanças na microestrutura para simular tais fenômenos. Qualitativamente, descreve-se a resposta do material:

- no início do teste, onde o comportamento é predominantemente elástico, a microestrutura é praticamente intacta e não há significativa quebra estrutural;

- com o aumento da deformação, o mecanismo de quebra da microestrutura começa a se tornar significativo juntamente com o comportamento viscoso do material;

- ao final do teste, $G \rightarrow \infty^7$, fazendo com que o elemento elástico se torne totalmente rígido e não haja mais deformação elástica. Desta maneira, o comportamento viscoso é predominante.

É comum modelar (MENDES, 2009; MENDES, 2011; DEUS; NEGRAO; FRANCO, 2016) o módulo de cisalhamento $G(\lambda)$ como sendo uma função monotonicamente decrescente de λ , tal que $\lim_{\lambda \rightarrow 0} G(\lambda) = \infty$. Os coeficientes de viscosidade (η_ν no modelo de Maxwell) são funções monotonicamente crescente de λ . Embora a forma definida para estas funções façam com que o modelo exiba o resultado experimental esperado no limite em $\lambda \rightarrow 0$, não há consenso quanto a proposta de $G(\lambda)$ e $\eta_\nu(\lambda)$ que melhor representa o comportamento observado em materiais viscoelásticos tixotrópicos. Na seção a seguir, discute-se com mais detalhes aspectos da modelagem de materiais tixotrópicos.

⁷ Esta consideração é utilizada para modelos adaptado dos modelos de Jeffreys ou Maxwell ou uma combinação destes e não é verdadeira para o caso o modelo de Kelvin-Voigt. Esta consideração é tomada como geral no texto tendo em vista que o modelo a ser abordado e utilizado no trabalho é um modelo de Jeffreys, e tal consideração é verdadeira.

2.5 Modelos para materiais tixotrópicos

Atualmente, a comunidade científica tem se empenhado para que a tixotropia seja descrita por modelos reológicos robustos e fundamentados em teorias já estabelecidas (MEWIS; WAGNER, 2009). Alguns destes modelos foram avaliados e classificados em trabalhos de revisão (MEWIS, 1979; BARNES, 1997). De maneira geral, classifica-se os modelos propostos em fenomenológicos ou microestruturais.

Modelos fenomenológicos⁸, são propostos a luz da mecânica do contínuo e podem ser categorizados em duas subclasses de modelos: formulações baseadas no histórico do material, prática comum no escopo da teoria viscoelástica, e formulações que relacionam a resposta reológica ao nível de estruturação do material, utilizando equações cinemáticas para contabilizar a variação da estrutura no tempo.

Modelos microestruturais são formulados com o intuito de descrever completamente a evolução da estrutura a partir de fenômenos físicos microscópicos associados à estruturação do material. No entanto, devido a complexidade das mudanças resultantes do escoamento dos fluidos, muitas simplificações são necessárias.

Optou-se pela análise de um modelo fenomenológico que utiliza um parâmetro estrutural para contabilizar o nível de estrutura. Esta escolha foi feita, tendo em vista dois aspectos:

- De acordo com Mewis e Wagner (2009), esta abordagem pode ser considerada como simples, portanto sendo frequentemente utilizada e;

- Os efeitos do histórico no comportamento dos materiais tixotrópicos ainda não foram bem estabelecidos (ANDRADE et al., 2015) e podem ser contabilizados por outras variáveis, não previstas por modelos apresentados. Um parâmetro englobando estes efeitos, definindo o grau de estruturação atual, é uma estratégia pertinente na abordagem do problema.

Os principais aspectos de modelos contidos nesta subclasse são levantados na subseção a seguir.

2.5.1 Modelos cinemáticos estruturais

Modelos desta subclasse são, como mencionado anteriormente, constituídos de duas equações: constitutiva e de taxa. A equação constitutiva relaciona a tensão τ com a taxa de deformação $\dot{\gamma}$ e o parâmetro estrutural λ e tem a forma generalizada

$$\tau \equiv \tau(\lambda, \dot{\gamma}) \quad (2.7)$$

Modelos viscoelásticos clássicos, como o modelo de Maxwell apresentado no capítulo anterior, são utilizados (BARNES, 1997; DEUS; DUPIM, 2013) para a formulação desta equação. Em alguns casos, incorpora-se efeitos devido a anisotropia (JOU; CASAS-VÁZQUEZ; CRIADO-SANCHO, 2010).

A equação de taxa

$$\frac{d\lambda}{dt} \equiv \dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) \quad (2.8)$$

⁸ De acordo com classificação feita em (MEWIS; WAGNER, 2009).

contabiliza os efeitos relacionados com a evolução estrutural $\dot{\lambda}$ de materiais tixotrópicos. Considera-se, de maneira geral (MEWIS, 1979), apenas um tipo de estrutura incorporado pelo parâmetro estrutural (BARNES, 1997; MEWIS, 1979; MENDES; THOMPSON, 2013)). No entanto, em alguns trabalhos (BARNES, 1999), a possibilidade de mais de um tipo de estrutura é considerada.

Modelos desta subclasse formam a fundamentação teórica necessária para a formulação de modelos apresentados atualmente. Entretanto, uma formulação precisa e robusta, ainda não foi apresentada: os modelos propostos preveem o comportamento de materiais em aplicações específicas e não generalizadas (MEWIS; WAGNER, 2009). Após a divulgação de artigos de revisão relacionados à tixotropia (MEWIS, 1979; BARNES, 1997), novos modelos foram propostos, com o intuito de preencher vacâncias teóricas e abranger maior número de aplicações. Descreve-se alguns modelos apresentados recentemente na subseção a seguir. Uma ênfase é dada para as funções associadas as equações do modelo, análogas ao módulo de cisalhamento no modelo descrito no capítulo anterior.

2.5.2 Alguns modelos

Alguns modelos cinemáticos estruturais, nas primeiras década do século vinte e um, foram propostos, tais que em cada abordagem, aspectos relevantes associados à tixotropia foram sendo levantados. Mujumdar et al. (2002) propuseram um modelo com o intuito de prever os fenômenos de elasticidade, viscosidade e tensão limite de escoamento, possuindo dependência temporal. A equação de taxa é formulada considerando a parcela de destruição dependente da taxa de cisalhamento: se a taxa de cisalhamento e a deformação elástica estiverem no mesmo sentido, a parcela é considerada; caso contrário, é desprezada. O parâmetro estrutural foi definido como a variável que contabiliza o tamanho dos flocos no material. A equação constitutiva é obtida utilizando um modelo de Kelvin-Voigt, onde a tensão é particionada em uma parcela elástica e outra viscosa, ambas dependentes da estrutura. A forma da equação utilizada é

$$\tau = \lambda G \dot{\gamma}_e + (1 - \lambda) K \dot{\gamma}^n, \quad (2.9)$$

onde K , G e n são constantes do modelo. A primeira expressão ao lado direito, remete à parcela elástica, a segunda, viscosa. Os autores utilizam o conceito de deformação limite de escoamento: se a deformação elástica é menor que a deformação crítica, associada ao limite de escoamento, então a taxa de deformação será totalmente elástica. Define-se que a deformação crítica γ_c irá variar com o tamanho do floco: $\gamma_c(\lambda) = \gamma_{c0} \lambda^m$.

Nota-se que, embora o módulo de cisalhamento tenha sido considerado constante, os autores inseriram a variável representando o parâmetro estrutural λ multiplicando-o. Como λ varia no tempo, pode-se assumir que uma abordagem equivalente seria considerar o módulo de cisalhamento variando no tempo, proporcionalmente a λ (i.e. $G(\lambda) = C_q \lambda$, onde C_q seria uma constante qualquer), e a parcela elástica seria $G(\lambda) \dot{\gamma}_e$.

O modelo possui simplicidade na abordagem e apresenta resultados consistentes, utilizando simulações computacionais de negro de fumo.

Coussot et al. (2002) evidenciaram a bifurcação da viscosidade (fenômeno descrito anteriormente) através de testes feitos com uma suspensão de bentonita sob tensão controlada. A partir

deste comportamento, não esperado para fluidos ideais com tensão de limite de escoamento, os autores concluem que a viscosidade deve ser função do parâmetro estrutural. A equação constitutiva proposta foi

$$\tau = \eta(\lambda)\dot{\gamma}, \quad (2.10)$$

de modo a não utilizar funções associadas ao módulo de cisalhamento. A viscosidade absoluta η foi definida sendo crescente com λ . A equação de taxa foi formulada incorporando o efeito de gelificação da estrutura, considerando que a taxa temporal da reestruturação é inversamente proporcional ao tempo característico.

Dullaert e Mewis (2006) deduzem a equação constitutiva igualando a tensão de cisalhamento à sobreposição de contribuições de "partícula" e do meio. A contribuição da partícula é resultado da soma das parcelas elástica e viscosa (i.e., é obtida a partir de uma adaptação do modelo de Kelvin-Voigt), ambas dependentes do parâmetro estrutural λ . A parcela elástica foi formulada como

$$\tau_e = G(\lambda)\gamma_e(\lambda, \gamma). \quad (2.11)$$

Uma equação modelando a evolução da deformação elástica $\dot{\gamma}_e$ foi proposta, utilizando três parâmetros a determinar. O módulo de cisalhamento $G(\lambda)$ foi modelado como

$$G(\lambda) = \lambda G_0. \quad (2.12)$$

A equação de taxa é formulada incorporando os efeitos de quebra e recuperação da estrutura, além do efeito do movimento browniano na recuperação. É necessário enfatizar que, embora os autores tenham considerado o efeito do movimento browniano em sua formulação, os mecanismos que descrevem a influência do fenômeno na construção da microestrutura não são formalmente descritos. Ao final, o modelo é ajustado para dois tipos de suspensões de baixa elasticidade e os resultados obtidos são coerentes com as curvas obtidas experimentalmente.

Ardakani et al. (2011) apresentaram alguns resultados experimentais obtidos para pasta de dentes, explicitando que um comportamento de fluido com tensão limite de escoamento é evidenciado. A equação constitutiva foi definida a partir da sobreposição de uma parcela de tensão viscosa, dependente do parâmetro estrutural, e uma parcela dependente da tensão limite de escoamento. A equação de evolução do parâmetro estrutural é similar a outras apresentadas na literatura (MUJUMDAR; BERIS; METZNER, 2002).

Mendes (2011) apresentou um modelo para fluidos estruturados modificando o modelo de Jeffreys para a dedução da equação constitutiva (2.7). A viscosidade e o módulo elástico são consideradas funções do parâmetro estrutural. O módulo de cisalhamento $G(\lambda)$ é descrito como

$$G(\lambda) = \frac{G_0}{\lambda^m}, \quad (2.13)$$

onde G_0 e m são parâmetros associados ao material. A variação temporal do módulo de cisalhamento e do coeficiente de viscosidade não foram considerados explicitamente na dedução da equação constitutiva. Na equação de taxa (2.8), a parcela de quebra é considerada dependente do valor de regime permanente do parâmetro estrutural bem como da tensão e taxa de cisalhamento aplicadas ao fluido. O intuito do autor era prever os comportamentos tixotrópico e viscoelástico e determinar a tensão limite de escoamento. Simulações computacionais de testes de taxa de cisalhamento

constante, de tensão de cisalhamento constante foram feitas e resultados consistentes com o que é observado experimentalmente foram obtidos.

Azikri de Deus e Dupim (2012) estabeleceram restrições aos funcionais associados à tixotropia (tensão, taxa de deformação e parâmetro estrutural, por exemplo) e introduziram uma interpretação física ao parâmetro estrutural. Os autores propõem que o parâmetro estrutural é a razão entre o número instantâneo de ligações nas cadeias poliméricas e o número de ligações inicial, também nestas cadeias: se um fluido encontra-se completamente estruturado, seu número de ligações é igual ao número de ligações iniciais e o parâmetro estrutural assume o valor unitário; se este está completamente desestruturado, suas ligações foram todas quebradas e o parâmetro estrutural é nulo. Utilizando tal abordagem, a equação de taxa pode ser deduzida utilizando a equação de Smoluchowski (MAZO, 2008) para um material em escoamento isotérmico. Sua formulação incorporou, porém, apenas efeitos dos movimentos brownianos e o acoplamento de cadeias devido às colisões resultantes do escoamento do material não foram associadas. A equação constitutiva foi obtida modificando o modelo de Maxwell, com a dependência estrutural do módulo de cisalhamento modelada como na equação (2.13).

Mendes e Thompson (2013) propuseram um modelo mantendo o mesmo formato da equação constitutiva (2.7) proposta por Mendes (2011). A equação de taxa (2.8) passa a depender apenas do parâmetro estrutural referente ao material no equilíbrio e a um estado completamente estruturado. Outra modificação foi feita referente ao parâmetro estrutural, o qual varia de zero a um número positivo, não necessariamente igual a um: se o parâmetro estrutural tender a infinito, o comportamento de um material com tensão limite de escoamento verdadeira é alcançado; se não, os fenômenos *shear thinning* e tixotropia com tensão limite de escoamento aparente são observados. Neste sentido, a formulação das equações de evolução da viscosidade estrutural e do módulo de cisalhamento também foram modificadas. O formato adotado de $G(\lambda)$ foi

$$G(\lambda) = G_0 \exp \left[m \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0} \right) \right] \quad (2.14)$$

onde λ_0 , G_0 e m são parâmetros do modelo. Algumas simulações foram apresentadas para os testes de tensão controlada, taxa de cisalhamento controlado e LAOS (Large Amplitude Oscillatory Shear) e obteve concordância com o esperado por resultados experimentais.

Os modelos descritos anteriormente, demonstraram novos aspectos em relação à tixotropia e a modelagem do fenômeno. Entretanto, poucos trabalhos propuseram um significado físico quantitativo para o parâmetro estrutural (DEUS; DUPIM, 2013; DEUS; DUPIM, 2012) e em alguns, não foram consideradas, na formulação dinâmica, as taxas de evolução do módulo de cisalhamento e do coeficiente de viscosidade. O modelo abordado no trabalho de Azikri de Deus et al. (2016), expõe uma maneira de incorporar as taxas associadas às variáveis na formulação e estabelece um significado físico quantitativo para o parâmetro estrutural. A equação de taxa é formulada com base na teoria de coagulação de Smoluchowski, na equação generalizada de Gibbs e no modelo de reptação (GENNES et al., 1971; ELLIOTT; LIRA, 1999; MAZO, 2008). A seguir o modelo é descrito com mais detalhes.

2.6 Descrição do modelo

Uma descrição geral do modelo é feita na primeira subseção. As propriedades e hipóteses centrais associadas são discutidas e o escopo no qual o modelo se insere é estabelecido. Na segunda e terceira seções, a forma proposta para a equação constitutiva e de taxa são deduzidas, respectivamente. Finalmente, o módulo de cisalhamento e os coeficientes de viscosidade são especificados.

2.6.1 Considerações gerais

O material considerado para a obtenção do modelo de Azikri de Deus et al. (2016), é tixotrópico isotrópico em um processo isotérmico. De um ponto de vista microscópico, o material, em repouso, é considerado um sistema composto por um elemento contínuo constituído de longas cadeias de partículas, com apenas um tipo de microestrutura, contabilizada pelo parâmetro estrutural λ . No início de um carregamento, o material se encontra totalmente estruturado ($\lambda = 1$). Durante a aplicação de uma carga de cisalhamento, o elemento pode ser decomposto em estruturas constituídas de cadeias menores, denominadas "flocos" e, conforme a carga é mantida ou aumentada, os flocos podem se decompor em partículas isoladas (fluido completamente desestruturado, $\lambda = 0$). Esta descrição sobre a destruição do material, corresponde ao processo de desestruturação (*rejuvenation*), descrito anteriormente de maneira qualitativa. Este processo também pode ser denominado como processo de destruição ou degeneração. Em contrapartida, as colisões entre partículas, resultantes do movimento browniano e/ou ao escoamento⁹, podem resultar na coalescência dos flocos. Tal fenômeno corresponde ao processo de envelhecimento da estrutura (*aging*). Este pode ser denominado como estruturação ou construção da microestrutura (DEUS; DUPIM, 2013; DEUS; DUPIM, 2012; SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014).

2.6.2 Equação constitutiva

O modelo viscoelástico de Jeffreys (BIRD et al., 1977) pode ser descrito como um elemento de Maxwell $(\cdot)_m$ em paralelo a um elemento viscoso $(\cdot)_v$, composto por um amortecedor. O presente modelo é obtido, modificando este modelo viscoelástico, como esquematizado na Figura (2.6): suas propriedades variam de acordo com o parâmetro estrutural λ , i.e., o módulo de cisalhamento $G = G(\lambda)$ e os coeficientes de viscosidades do elemento de Maxwell $\eta_\nu = \eta_\nu(\lambda)$ e do elemento viscoso $\eta_\mu = \eta_\mu(\lambda)$ variam com a estrutura do material.

A parcela elástica da tensão no elemento de Maxwell (ver seção 2.3) associada à deformação na mola, é relacionada com a parcela viscosa, considerando que a tensão em todo o elemento é igual, i.e.

$$\tau_m = 2\eta_\nu \dot{\gamma}_\nu = G\gamma_e, \quad (2.15)$$

e

$$\dot{\tau}_m = G\dot{\gamma}_e + \dot{G}\gamma_e. \quad (2.16)$$

⁹ No trabalho de Azikri de Deus et al. (2016), considera-se apenas escoamento laminar.

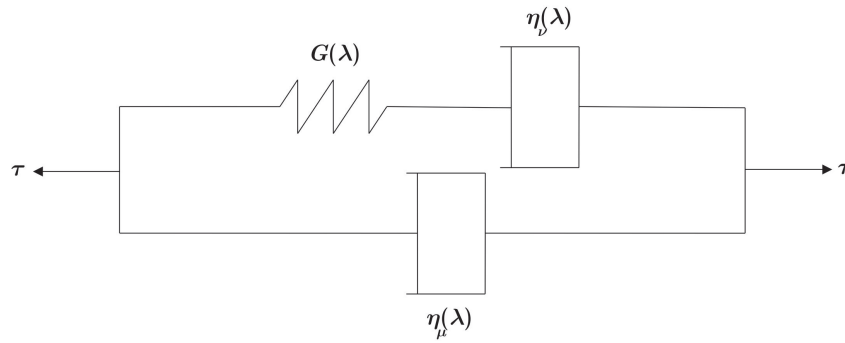


Figura 2.6 – Esboço do modelo de Jeffreys modificado. Fonte: (SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014)

Pode-se deduzir das equações (2.15) e (2.16)

$$\dot{\gamma}_e = \frac{\dot{\tau}_m}{G} - \dot{G} \frac{\tau_m}{G^2}. \quad (2.17)$$

Da equação (2.15),

$$\dot{\gamma}_v = \frac{\tau_m}{2\eta_\nu}. \quad (2.18)$$

A taxa de deformação total do elemento de Maxwell é a soma das parcelas viscosa e elástica, i.e.

$$\dot{\gamma}_m = \dot{\gamma}_e + \dot{\gamma}_v. \quad (2.19)$$

Inserindo as equações (2.17) e (2.18) na equação 2.19, e manipulando o resultado, obtém-se

$$\dot{\tau}_m = G\dot{\gamma}_m - \frac{G}{2\eta_\nu} \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2} \right) \tau_m. \quad (2.20)$$

A tensão do elemento viscoso é descrita por

$$\tau_v = 2\eta_\mu \dot{\gamma}_v. \quad (2.21)$$

Derivando ambos os lados,

$$\dot{\tau}_v = 2\eta_\mu \ddot{\gamma}_v + 2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma}_v \quad (2.22)$$

Considera-se as taxas de deformação do elemento de Maxwell e viscoso iguais, i.e. $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_m = \dot{\gamma}_v$. A tensão total é a sobreposição das tensões de cada elemento em paralelo, i.e., $\tau = \tau_m + \tau_v$, e $\dot{\tau} = \dot{\tau}_m + \dot{\tau}_v$. A equação constitutiva relacionando τ , $\dot{\tau}$, $\dot{\gamma}$ e $\ddot{\gamma}$ é deduzida

$$\dot{\tau} = \dot{\tau}_m + \dot{\tau}_v = 2\eta_\mu \ddot{\gamma}_v + 2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma}_v + G\dot{\gamma}_m - \frac{G}{2\eta_\nu} \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2} \right) \tau_m, \quad (2.23)$$

$$\dot{\tau} = 2\eta_\mu \ddot{\gamma} + 2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma} + G\dot{\gamma} - \frac{G}{2\eta_\nu} \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2} \right) \tau_m, \quad (2.24)$$

$$\frac{2\eta_\nu}{G} \dot{\tau} = \frac{2\eta_\nu}{G} 2\eta_\mu \ddot{\gamma} + \frac{2\eta_\nu}{G} 2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma} + 2\eta_\nu \dot{\gamma} - \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2} \right) \tau_m, \quad (2.25)$$

$$\frac{2\eta_\nu}{G} \dot{\tau} = \frac{4\eta_\nu \eta_\mu \ddot{\gamma}}{G} + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu \dot{\gamma}}{G} + 2\eta_\nu \dot{\gamma} - \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2} \right) (\tau - \tau_v), \quad (2.26)$$

$$\frac{2\eta_\nu}{G}\dot{\tau} + \left(1 - \frac{2\eta_\nu\dot{G}}{G^2}\right)\tau = \left[2\eta_\nu + 2\left(1 - \frac{2\eta_\nu\dot{G}}{G^2}\right)\eta_\mu + \frac{4\eta_\nu\dot{\eta}_\mu}{G}\right]\dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu\eta_\mu}{G}\ddot{\gamma}. \quad (2.27)$$

Considerando o contexto de configuração natural, utilizado em alguns trabalhos (RAJAGOPAL; SRINIVASA, 1998b; RAJAGOPAL; SRINIVASA, 1998a; RAJAGOPAL; SRINIVASA, 2000), foi demonstrado por Rajagopal e Srinivasa (2004), que uma classe de funções constitutivas poderiam ser construídas de tal modo que as variáveis de estado evoluíssem maximizando a taxa de produção de entropia. Utilizando alguns resultados obtidos pelos dois autores e considerando que a taxa de produção de entropia é máxima, pode-se demonstrar que a equação constitutiva (Eq. 2.27) é consistente com a primeira e segunda lei da termodinâmica de meios contínuos.

2.6.3 Restrições aos funcionais associados

Um modelo tixotrópico deve atender algumas restrições aos funcionais associados ao modelo (DEUS; DUPIM, 2013). Primeiramente, estabelece-se que

$$\eta(\lambda, \dot{\gamma}) > 0, \quad (2.28)$$

restrição necessária, à luz da inequação de Clausius-Duhem (DEUS; DUPIM, 2013; TRUESDELL; NOLL, 2004).

A tensão aumenta monotonicamente com a taxa de deformação, considerando a estrutura fixa (com tamanho de floco constante) (BARNES, 1997). Portanto,

$$\left.\frac{\partial\tau}{\partial\dot{\gamma}}\right|_\lambda > 0. \quad (2.29)$$

A curva de equilíbrio é definida através da equação

$$\lambda = \lambda_{eq} \rightarrow \dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) = 0, \quad (2.30)$$

e as restrições que asseguram que a curva de equilíbrio representa um estado estável (BARNES, 1997; DEUS; DUPIM, 2013), podem ser representadas por

$$\dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) > 0, \quad \lambda < \lambda_{eq} \quad (2.31)$$

e

$$\dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) < 0, \quad \lambda > \lambda_{eq}. \quad (2.32)$$

A definição formal de tixotropia, estabelecendo que um aumento da taxa de deformação gera a destruição da microestrutura, é evidenciada pela inequação (CHENG; EVANS, 1965; CHENG, 1974)

$$\left.\frac{\partial\dot{\lambda}}{\partial\dot{\gamma}}\right|_\lambda < 0. \quad (2.33)$$

As restrições são então, sumariamente,

$$\eta(\lambda, \dot{\gamma}) > 0 \quad (2.34)$$

$$\left. \frac{\partial \tau}{\partial \dot{\gamma}} \right|_{\lambda} > 0 \quad (2.35)$$

$$\dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) = 0, \quad \lambda = \lambda_{eq}; \quad (2.36)$$

$$\dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) > 0, \quad \lambda < \lambda_{eq}; \quad (2.37)$$

$$\dot{\lambda}(\lambda, \dot{\gamma}) < 0, \quad \lambda > \lambda_{eq}; \quad (2.38)$$

$$\left. \frac{\partial \dot{\lambda}}{\partial \dot{\gamma}} \right|_{\lambda} < 0. \quad (2.39)$$

2.6.4 Equação da evolução estrutural

A evolução estrutural do material é descrita por dois fenômenos distintos, como mencionado anteriormente: a destruição e construção estrutural. Supondo que os dois fenômenos podem ser superpostos, estes são descritos individualmente e em seguida, acoplados com o intuito de obter a expressão final para a equação de taxa.

2.6.4.1 Quebra estrutural

É enfatizado, inicialmente, o processo de degradação da microestrutura. Quando partículas que constituem o material se tocam ou colidem, estas têm a tendência de se juntarem por meio de ligações e, conforme o material é submetido a uma carga de cisalhamento, estas ligações tendem a se estender e eventualmente se quebrarem. Considera-se uma cadeia única de partículas sob tensão de cisalhamento τ , representada na Figura 2.7. As partículas que compõem o material são

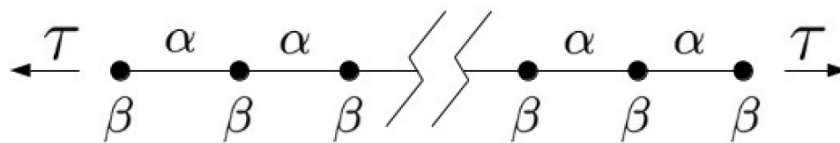


Figura 2.7 – Representação da cadeia de partículas. Fonte: (SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014)

representadas pelas unidades β e as ligações α . Denotando as variáveis associadas a α e β como $(\cdot)_{\alpha}$ e $(\cdot)_{\beta}$, respectivamente, pode-se obter a seguinte forma da equação generalizada de Gibbs (ELLIOTT; LIRA, 1999):

$$du_{in} = \theta ds - \tau d\gamma^* + \varsigma_{\alpha} dN_{\alpha} + \varsigma_{\beta} dN_{\beta} \quad (2.40)$$

onde u_{in} é a energia interna, θ é a temperatura, s é a entropia, γ^* é a deformação da cadeia e ς e N são os potenciais químicos e números de partículas, respectivamente.

Considera-se processos isotérmicos, $d\theta = 0$, e assume-se que o número de partículas não irá ser alterado e que suas dimensões são desprezíveis quando comparadas com as cadeias. Neste

sentido, segue que N_β é constante e $d\gamma^* \approx N_\alpha d\gamma_\alpha$. Com o intuito de simplificar a abordagem, o índice α é retirado, i.e. $Nd\gamma \equiv N_\alpha d\gamma_\alpha$ e $\varsigma_\alpha dN_\alpha \equiv \varsigma dN$. A partir destas considerações,

$$du_{in} = \theta ds - \tau Nd\gamma + \varsigma dN \quad (2.41)$$

e, diferenciando em relação ao tempo,

$$\dot{u}_{in} - \theta \dot{s} = -\tau N \dot{\gamma} + \varsigma \dot{N}. \quad (2.42)$$

A partir da definição da taxa de energia livre de Helmholtz $\dot{\psi}$ (ELLIOTT; LIRA, 1999)

$$\dot{\psi} \equiv \dot{u}_{in} - \theta \dot{s}, \quad (2.43)$$

a equação ((2.42)), é reescrita

$$\dot{\psi} = -\tau N \dot{\gamma} + \varsigma \dot{N}, \quad (2.44)$$

$$\frac{\dot{\psi} + \tau N \dot{\gamma}}{\varsigma} = \dot{N}. \quad (2.45)$$

A partir do *Reptation Model* (GENNES et al., 1971), ψ pode ser descrita, a partir de algumas manipulações algébricas, como

$$\psi = \frac{K_\psi N^7 \theta \dot{\gamma}^2}{2}, \quad (2.46)$$

onde K_ψ é uma constante que incorpora alguns efeitos estruturais generalizados (*bulk effects*). Derivando ambos os lados, em relação ao tempo,

$$\dot{\psi} = \frac{K_\psi 7 N^6 \dot{N} \theta \dot{\gamma}^2}{2} + K_\psi N^7 \theta \dot{\gamma} \ddot{\gamma} \quad (2.47)$$

A partir da consideração de que a variação da taxa de cisalhamento é dominante em relação à variação do número de cadeias, segue que $N \ddot{\gamma} \gg \dot{N} \dot{\gamma}$ e, portanto, obtém-se

$$\dot{\psi} = K_\psi N^7 \theta \dot{\gamma} \ddot{\gamma}. \quad (2.48)$$

Inserindo este resultado na equação (2.45), a quebra ou destruição estrutural é descrita como

$$\frac{K_\psi N^7 \theta \dot{\gamma} \ddot{\gamma} + \tau N \dot{\gamma}}{\varsigma} = \dot{N}. \quad (2.49)$$

$$\dot{N} = \frac{(K_\psi N^6 \theta \ddot{\gamma} + \tau) N \dot{\gamma}}{\varsigma}. \quad (2.50)$$

2.6.4.2 Construção estrutural

Um material, quando sob carga de cisalhamento, possui movimentos de naturezas distintas: movimentos devido ao escoamento laminar e o movimento browniano dos flocos constituintes. Desta forma, os flocos podem colidir e acoplar a outros em pares: processo conhecido como coagulação. A formulação da parcela de construção da equação de taxa do modelo foi feita de maneira similar a trabalhos de Azikri de Deus e Dupim (2012,2013); entretanto, são considerados efeitos do movimento browniano e do escoamento laminar, simultaneamente.

A reação de coagulação pode ser descrita por meio da notação $x, y \rightarrow x + y$, que representa a coalescência dos flocos de tamanho (comprimento, área ou volume) x e y formando um floco maior, de tamanho $x + y$. A taxa na qual os flocos x e y irão se acoplar será determinada através do fator de coagulação da reação $x, y \rightarrow x + y$, denotado por $K(x, y)$. A partir deste conceito, define-se que a reação de coagulação ocorre a uma taxa de $K(x, y)n(x)n(y)dy$, onde $n(x, t)$ e $n(y, t)$ são as funções contínuas de densidade de probabilidade no instante t de ocorrer um floco de tamanho x e y , respectivamente. A influência que cada movimento (browniano ou devido ao escoamento) terá na coalescência dos flocos, será determinada a partir da expressão de $K(x, y)$.

Considera-se a probabilidade de se obter um floco de tamanho x . O número de flocos de tamanho x aumenta através de reações do tipo $x - y, y \rightarrow x$ e reduz devido a reações do tipo $x, y \rightarrow x + y$, i.e.

$$\frac{dn(x, t)}{dt} = \frac{1}{2} \int_0^\infty K(x - y, y)n(x - y, t)n(y, t)dy - n(x, t) \int_0^\infty K(x, y)n(y, t)dy, \quad (2.51)$$

$$n(x, 0) = n_0(x) \quad (2.52)$$

No trabalho de Azikri de Deus et al. (2016), a expressão obtida para o fator de coagulação, incorporando efeitos das colisões de flocos devido ao movimento browniano e o escoamento laminar, foi

$$K(x, y) = k_0^* \left(e^{-px(\frac{\beta}{2}-1)} n(x, t)^{(\frac{\beta}{2}-1)} \right) \left(e^{-py(\frac{\beta}{2}-1)} n(y, t)^{(\frac{\beta}{2}-1)} \right), \quad (2.53)$$

onde k_0^* e β são constantes reais positivas.

Supõe-se que $n(x, 0)$, $x \geq 0$ é uma função contínua, não negativa e limitada, tal que

$$\Delta N(t) = \int_0^\infty n(x, t)dx, \quad (2.54)$$

onde ΔN pode ser definido como a variação dos números de cadeias no início do processo (instante de tempo 0) ao qual o material está submetido, menos o número de cadeias atual (instante de tempo t), i.e., $\Delta N = N_0 - N(t)$. Portanto, pode-se concluir, que $\Delta N(0) = 0$. Em seguida, considera-se que

$$\left(\int_0^\infty (n(x, t)^{\frac{\beta}{2}})dx \right)^2 \approx (\Delta N(t))^\beta. \quad (2.55)$$

A partir destas considerações, da definição do fator de coagulação (2.53), das equações (2.51) e (2.52), obteve-se

$$\frac{d}{dt} \Delta N(t) = -\frac{1}{2} k_0^* (\Delta N(t))^\beta, \quad (2.56)$$

Visto que N_0 é constante,

$$\frac{d}{dt} N(t) = \frac{1}{2} k_0^* (N_0 - N(t))^\beta. \quad (2.57)$$

Sobrepondo os efeitos de estruturação e os efeitos de destruição, descritos anteriormente, obtêm-se

$$\frac{d}{dt} N(t) = \frac{1}{2} k_0^* (N_0 - N(t))^\beta - \frac{(K_\psi N^6 \theta \dot{\gamma} + \tau) N \dot{\gamma}}{\varsigma}. \quad (2.58)$$

Considerando o parâmetro estrutural como a razão do número de cadeias atual em relação ao número de cadeias no início do processo, i.e., $\lambda \equiv \frac{N(t)}{N_0}$, a forma final da equação de taxa é

$$\frac{d\lambda}{dt} = k_0^{**} (1 - \lambda)^\beta - \frac{(K_\psi \lambda^6 \dot{\gamma} + \tau) \lambda \dot{\gamma}}{\varsigma}, \quad (2.59)$$

onde, com o intuito de simplificar a abordagem, definiu-se que $k_0^{**} \equiv \frac{k_0^* N_0^{\beta-1}}{2}$ e $K_\psi^* \equiv K_\psi \theta N_0$.

2.6.5 Módulo de cisalhamento e coeficientes de viscosidade

A escolha de uma função para consistente representação de $G(\lambda)$ deve satisfazer algumas restrições. Quando $G(\lambda)$ tende a infinito e um valor limitado é obtido para o coeficiente de viscosidade do elemento de Maxwell $\eta_\nu(\lambda)$, então o material terá comportamento viscoso. Em contrapartida, um módulo de cisalhamento e um coeficiente de viscosidade com valores finitos, implicam em um comportamento viscoelástico. Os efeitos de elasticidade são contabilizados quando o valor de $G(\lambda)$ é finito e desprezíveis quando seu valor tende a valores muito grandes, i.e., $\lim_{\lambda \rightarrow 0} G(\lambda) = \infty$ (MENDES, 2011; MENDES; THOMPSON, 2013). É considerado que o aumento indeterminado de $G(\lambda)$, deve preservar estabilidade da solução. Portanto, uma outra condição imposta é de que $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2} = 0$. Uma função que atende a estas restrições é

$$G = G_0 \exp(m\lambda^{-1}), \quad (2.60)$$

onde o módulo de cisalhamento terá um valor finito quando $\lambda = 1$, $G(1) = G_0 \exp(m)$, e tenderá a infinito quando $\lambda = 0$.

Considera-se que os materiais tixotrópicos terão sua viscosidade reduzida conforme seu grau de estruturação diminui, como pode ser observado para alguns materiais tixotrópicos com tensão de escoamento aparente. Considerando um material puramente viscoso ($G(\lambda) \rightarrow \infty$), observa-se que sua viscosidade absoluta é determinada como

$$\eta = 2\eta_\mu + 2\eta_\nu. \quad (2.61)$$

A partir da restrição imposta através da inequação (2.28) e das considerações acima, os coeficientes de viscosidade podem ser formulados da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \eta_\mu &= \eta_0 \exp(\alpha_2 \lambda), \\ \eta_\nu &= \eta_0 \exp[(\alpha) \lambda] - \eta_\mu. \end{aligned} \quad (2.62)$$

$2\eta_0 > 0$ é a viscosidade absoluta para um material totalmente desestruturado, e $\alpha > \alpha_2 \geq 0$ contabilizam a influência da evolução estrutural na resposta viscosa do material. Nota-se que um material puramente viscoso sempre terá sua viscosidade absoluta positiva, visto que

$$\eta = 2\eta_\mu + 2\eta_\nu = 2(\eta_0 \exp[(\alpha) \lambda] - \eta_\mu + \eta_\mu) = 2\eta_0 \exp[(\alpha) \lambda] > 0, \quad (2.63)$$

em conformidade com a inequação (2.28).

Os formatos de $G(\lambda)$ definidos em (2.60) e na subseção 2.5.2 satisfazem os limites definidos acima. Entretanto, pode-se verificar que as funções definidas não são as únicas a satisfazer os limites. Busca-se, portanto, determinar o formato desta função, a partir de métodos utilizados para a solução de problemas inversos. O mesmo poderia ser dito em relação aos coeficientes de viscosidade. Entretanto, considera-se, em primeira análise, apenas o módulo de cisalhamento. A seguir, as equações do modelo são sumariamente explicitadas:

$$\frac{2\eta_\nu}{G} \dot{\tau} + \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \tau = \left[2\eta_\nu + 2 \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \eta_\mu + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G}\right] \dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma}; \quad (2.64)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = k_0^{**}(1 - \lambda)^\beta - \frac{(K_\psi^* \lambda^6 \ddot{\gamma} + \tau)\lambda \dot{\gamma}}{\varsigma}; \quad (2.65)$$

$$G = G_0 \exp(m\lambda^{-1}); \quad (2.66)$$

$$\eta_\mu = \eta_0 \exp(\alpha_2 \lambda); \quad (2.67)$$

$$\eta_\nu = \eta_0 \exp[(\alpha)\lambda] - \eta_\mu. \quad (2.68)$$

O modelo possui nove parâmetros não negativos K_ψ^* , k_0^{**} , ς , G_0 , m , η_0 , α , α_2 e β . Com o intuito de simplificar deduções posteriores, a equação de taxa pode ser reescrita como

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{\varsigma} \left[\kappa(1 - \lambda)^\beta - (K_\psi^* \lambda^6 \ddot{\gamma} + \tau)\lambda \dot{\gamma} \right], \quad (2.69)$$

onde $\kappa \equiv k_0^{**}\varsigma$.

2.7 Resumo do capítulo

Descreveu-se, neste capítulo, as principais propriedades associadas à tixotropia:

- Discutiu-se sobre a ambiguidade em conceituar tixotropia e algumas definições utilizadas na literatura;
- Descreveu-se, qualitativamente, os fenômenos responsáveis por comportamentos específicos de materiais tixotrópicos;
- Definiu-se viscoelasticidade, diferenciando o fenômeno linear do não linear. Um tratamento quanto a modelagem foi feito, considerando a adaptação dos modelos para a tixotropia;
- As relações entre viscoelasticidade e tixotropia foram avaliadas;
- Uma revisão em relação a modelagem foi feita;
- Modelos propostos recentemente foram revisados e aspectos quanto a modelagem do módulo de cisalhamento foram levantados;
- O modelo a ser usado no trabalho foi apresentado e foi discutida a necessidade de uma análise mais precisa do módulo de cisalhamento e coeficientes de viscosidades.

3 Problemas inversos

A teoria associada a problemas inversos possui diversas abordagens (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003; KIRSCH, 2011; ISAKOV, 1998; ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996) e é aplicada em diversos setores associados à engenharia e física (DEUS et al., 2012; SILVA et al., 2015; BAZÁN; BEDIN; BOZZOLI, 2016). No presente capítulo, alguns dos principais resultados associados a problemas inversos são explicitados. A linha de raciocínio e a forma da exposição dos Teoremas adotada é semelhante àquela apresentada no capítulo 8 do livro de Lebedev et al. (2003) e serão utilizados, para fomentar a discussão, alguns resultados expostos no apêndice A.

Um problema é definido como bem-posto, segundo Hadamard (1923), caso possua as seguintes características (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003):

Existência- o problema sempre tem solução;

Unicidade- o problema não pode ter mais que uma solução;

Estabilidade- uma pequena perturbação na entrada fará com que a saída tenha apenas uma pequena mudança.

Problemas que não possuem uma ou mais destas características são denominados mal-postos.

Tem sido constatado que, desde as últimas décadas, cada vez maior número de aplicações importantes possuem relação com problemas mal-postos (KIRSCH, 2011; HANSEN, 1998; BAZÁN; BEDIN; BOZZOLI, 2016; DEUS et al., 2012; SILVA et al., 2015); muitos (não todos) são considerados inversos.

Problemas inversos e/ou mal-postos, de forma geral, podem ser reduzidos à equação

$$Ax = y \tag{3.1}$$

onde x, y pertencem aos espaços lineares normados¹ X e Y e A é um operador linear contínuo de X em Y , i.e. o domínio de A está em X e Y é o contra-domínio e A . O domínio do operador A é denotado por $D(A)$ e sua imagem $R(A)$.

O Teorema A.5 permite que se estenda um operador linear A quando seu domínio é aberto. Portanto, se $R(A) \subset Y$ e Y é um espaço de Banach, então não há perda de generalidade em assumir que $D(A)$ é fechado: se não for, o operador, sendo contínuo (e, do Teorema A.1, limitado) pode ser estendido para o fecho do domínio, denotado por $\overline{D(A)}$. Ainda, se X for um espaço de Banach então $\overline{D(A)}$ é também². Logo, caso X seja um espaço de Banach, então X pode ser redefinido como $\overline{D(A)}$, i.e. o operador A passa a ser definido em $\overline{D(A)}$.

O Teorema A.8 explicita condições para que A^{-1} seja contínua: é necessário que $R(A) = Y$, i.e. que $R(A)$ seja fechado e que $X = D(A)$ e Y sejam espaços de Banach. Se Y é um espaço de Banach, então, como mencionado anteriormente, não há perda de generalidade de assumir que $D(A) = X$ e portanto a solução do problema (3.1) será simplesmente $A^{-1}y$. Entretanto, a condição de que $R(A)$ seja fechado em um espaço de Banach Y pode apresentar dificuldades, que se tornam aparentes quando considera-se operadores compactos.

¹ Para uma definição destes espaços, ver Kreyszig (1989)

² Um subespaço fechado de um espaço métrico completo é também completo. Como o espaço de Banach é um espaço normado completo, a afirmação no texto é válida (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003).

Operadores compactos possuem aplicações importantes em diferentes ramos nas ciências e engenharia (HANSEN, 1998; BAUMEISTER, 1987). Um exemplo clássico é um caso especial da equação integral de Fredholm de primeira espécie,

$$A_F(f(s)) \equiv \int_0^1 K(s, y)f(y) = g(s), 0 \leq s \leq 1, \quad (3.2)$$

onde $f, g \in L^2(0, 1)$ e $K(s, y) \in L^2((0, 1) \times (0, 1))$, sendo $L^2(\Omega)$ espaço de Lebesgue associado ao domínio Ω . Pode-se demonstrar que A_F é um operador compacto (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003).

Suponha X, Y espaços de Banach, tal que X tenha dimensão infinita e $R(A)$ é fechado, de tal forma que pode-se considerar que $R(A) = Y$. Se A é compacto linear, então, do Teorema A.10, A é contínuo. Se, ainda, A é um para um, então, do Teorema A.8 sua inversa será contínua e, do Teorema A.1, é limitada. No entanto, do corolário A.1, não é o caso que A tenha uma inversa limitada. Portanto, têm-se o

Corolário 3.1. *Se X, Y são espaços de Banach e X possui dimensão infinita, então não existe operador linear compacto um para um de X em Y .*

Demonstração. Corolário 8.2.2 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

Conclui-se, portanto, que a equação (3.1) pode eventualmente apresentar três dificuldades para encontrar a solução:

- (i) $R(A)$ não é fechado e conseqüentemente $R(A) \neq Y$, i.e. existe pelo menos um elemento $y \in Y$ tal que y não pertence a $R(A)$;
- (ii) A pode não ser um para um e portanto tenha elementos não nulos em seu núcleo³;
- (iii) A inversa do operador, por mais que exista, pode não ser contínua.

Observa-se que se uma, ou mais, das três dificuldades anteriores ocorrerem, então o problema é considerado mal posto, a partir da observância das propriedades de Hadamard. Na subseção a seguir, maneiras para contornar estas dificuldades são discutidas.

3.1 Teorema de Tikhonov e conseqüências

O seguinte Teorema, atribuído a Andrei Nikolaevich Tikhonov, têm conseqüências fundamentais para a teoria de problemas inversos mal postos.

Teorema 3.1. (Tikhonov) *Sejam X, Y espaços lineares normados e A um operador contínuo um para um de X em Y . Seja S um subespaço compacto de X e seja $A|_S$ a restrição de A em S , então $(A|_S)^{-1}$ é contínuo.*

Demonstração. Teorema 8.2.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

Nota-se que o Teorema não faz menção a $R(A)$ ser fechado ou não: apenas considera a restrição do domínio a um subespaço compacto. No entanto, como o domínio do operador é restringido, a

³ Ver definição A.8.

imagem $R(A)$ possivelmente também será. Uma maneira de "expandir" a imagem do operador é a partir do procedimento descrito a seguir.

Considera-se, novamente, o problema (3.1), com $y \in H_2, x \in H_1$, sendo H_1, H_2 espaços de Hilbert e A um operador contínuo linear de H_1 em H_2 . Como $\overline{R(A)} \subset H_2$ é um subespaço fechado, então, do Teorema A.2, H_2 pode ser decomposto em $\overline{R(A)}$ e seu complemento ortogonal denotado por $R(A)^\perp = \overline{R(A)}^\perp$ ⁴ na forma

$$y = m_o + n, m_o \in \overline{R(A)}, n \in R(A)^\perp. \quad (3.3)$$

Denotando $R(A) + R(A)^\perp$ como o espaço formado pelos elementos que são resultados da soma dos elementos de $R(A)$ e $R(A)^\perp$, têm-se que $R(A) + R(A)^\perp$ é denso em H_2 . Considera-se $y \in R(A) + R(A)^\perp$. A projeção Py de y em $\overline{R(A)}$ é definida como

$$Py = \min_{u \in \overline{R(A)}} \|u - y\|. \quad (3.4)$$

Sendo $\overline{R(A)}$ fechado, também é espaço de Hilbert e portanto, linear. Consequentemente, será convexo⁵. Só existe um elemento $u \in \overline{R(A)}$ que satisfaz a equação (3.4), como deduzido no Teorema A.3. Pode-se provar que para o caso em que $y \in R(A) + R(A)^\perp, Py \in R(A)$. Portanto existe um $x \in H_1$ tal que

$$Py = Ax, \quad (3.5)$$

e, da definição de projeção, Ax será o elemento em $\overline{R(A)}$ mais próximo de y

$$Py = \min_{v \in H_1} \|Av - y\|. \quad (3.6)$$

Note que, por mais que Ax , que minimiza a equação (3.4), seja única (do Teorema A.3), x não necessariamente deve ser único, pois A pode não ser um para um. Das equações (3.3) e (3.5),

$$y = Py + n = Ax + n, n \in R(A)^\perp, \quad (3.7)$$

$$y - Ax = n \in R(A)^\perp, \quad (3.8)$$

Qualquer x que satisfaça a equação (3.8) é denominado solução de mínimos quadrados, pois minimiza $\|Av - y\|, v \in H_1$.

Foram abordados, na seção A.3, resultados associados às relações entre operadores e seus adjuntos (Definição A.7). Do Teorema A.9, têm-se que $R(A)^\perp = N(A^*)$. Portanto, da equação (3.8), têm-se que $y - Ax \in N(A^*)$, e, da definição A.8

$$A^*Ax = A^*y. \quad (3.9)$$

Do lema A.1, verifica-se que haverá apenas uma solução de mínimo quadrado x se e somente se $A^*Av = 0, v \in H_1$, não tiver solução não-trivial. Se $Av = 0$, então $A^*Av = 0$ enquanto se

⁴ Do Teorema, $R(A)^\perp$ será fechado.

⁵ $\overline{R(A)}$ é linear e, portanto, para quaisquer $x_1, x_2 \in \overline{R(A)}$, o elemento $tx_1 + (1-t)x_2, 0 \leq t \leq 1$, também está contido em $\overline{R(A)}$. Esta é justamente uma definição possível de conjunto convexo.

$A^*Av = 0$, $0 = (A^*Av, v) = (Av, Av) = \|Av\|^2$, tal que $Av = 0$. Logo, haverá apenas uma solução de mínimo quadrado se $Av = 0$ implicar $v = 0$, i.e. se A for um para um.

Supõe-se que A não seja um para um. Então os elementos de H_1 que satisfazem (3.5) formam um subespaço M fechado e convexo. Portanto, pode-se aplicar o Teorema A.3 para que se encontre apenas uma solução de (3.5) que minimize $\|v\|$, $v \in M$, i.e., existe apenas um v pertencente a M que possui norma mínima⁶. Uma outra maneira de contornar o problema de unicidade da solução é restringir o operador como pode ser visto no

Teorema 3.2. *Seja A um operador linear contínuo de H_1 em H_2 e $\bar{A} \equiv A|N(A)^\perp$ a restrição do operador A em $N(A)^\perp$. Para qualquer $y \in R(A) + R(A)^\perp$, a única solução de mínimos quadrados para o problema (3.1) é $\bar{A}^{-1}Py$, onde Py é definido em (3.6).*

Demonstração. Capítulo 8 do livro de Lebedev et al. (2003). □

O mapeamento A^\dagger de $D(A^\dagger) = R(A) + R(A)^\perp$ em $D(A)$, que associa y a uma única solução de norma mínima $A^\dagger y$, é a chamada inversa generalizada de Moore-Penrose. No caso do Teorema anterior, $A^\dagger y = \bar{A}^{-1}Py$.

Utilizar a inversa generalizada é uma forma de resolver o problema (3.1), tal que A pode não ser um para um e sua imagem não necessariamente fechada em H_2 . Entretanto, há restrições associadas à continuidade de A^\dagger , como pode ser visto a partir do

Teorema 3.3. *Sejam H_1, H_2 espaços de Hilbert e A um operador linear contínuo de H_1 em H_2 . A inversa generalizada A^\dagger de $D(A^\dagger)$ em H_1 é um operador fechado. É contínuo se e somente se $R(A)$ é fechado.*

Demonstração. Teorema 8.2.2 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

O resultado acima torna o problema ainda mais crítico caso A seja compacto, tendo em vista que a imagem deverá ter dimensão finita, como provado no Teorema A.12. Portanto outras ferramentas devem ser utilizadas para que se garanta uma solução única e estável para o problema. A seguir, descreve-se uma ferramenta utilizada e mencionada em referências associadas à problemas inversos: a decomposição em valores singulares (SVD) (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003; KIRSCH, 2011; HANSEN, 1998)

3.2 Decomposição em valores singulares (SVD)

Considera-se o problema (3.1), com A um operador compacto linear de H_1 em H_2 . A partir do Corolário A.2, AA^* e A^*A serão operadores compactos lineares autoadjuntos. Do Teorema A.13, suas imagens possuem um sistema completo. Um sistema completo para $R(A^*A)$, também será completo para $\overline{R(A^*A)}$ e o mesmo para $R(AA^*)$ e $\overline{R(AA^*)}$, respectivamente. Sendo $\overline{R(A^*A)}$ e $\overline{R(AA^*)}$ subespaços fechados dos espaço de Hilbert H_2 e H_1 , respectivamente, também serão

⁶ É necessário enfatizar que pode-se usar o Teorema A.3 para encontrar o único elemento mais próximo de um valor diferente de 0, como por exemplo, um outro elemento $x_0 \in H_1$.

espaços de Hilbert. Portanto, o Teorema A.4 é válido para estes subespaços: o conjunto de autovalores que formam um sistema ortonormal completo de $\overline{R(A^*A)}$ ($\overline{R(AA^*)}$) será também base do respectivo espaço. A existência de tal sistema completo é provada a partir do Teorema A.13.

Sejam os vetores ortonormais que compõe o sistema $v_1, v_2, \dots = \{v_k\}$, com autovalores correspondentes $\lambda_1, \lambda_2, \dots = \{\lambda_k\}$. Sendo os operadores AA^* e A^*A não negativos⁷, seus autovalores também serão não negativos e estes podem ser reorganizados de tal maneira que $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$. Toma-se um determinado autovalor λ_j de A^*A e seu respectivo autovetor v_j , tal que $A^*Av_j = \lambda_j v_j$. λ_j também será autovalor de AA^* , visto que $A(A^*Av_j) = AA^*(Av_j) = \lambda_j AA^*v_j$; Av_j é autovetor de AA^* , correspondente a λ_j , e a recíproca é válida. Do Teorema A.9, têm-se que $\overline{R(A^*A)} = N(A^*A)^\perp$. Como $Ax = 0 \leftrightarrow A^*Ax = 0$, i.e. $N(A^*A) = N(A)$, então $\overline{R(A^*A)} = N(A)^\perp$. Logo $\{v_j\}$ forma um sistema completo para $N(A)^\perp$ e portanto uma base para este subespaço.

Definindo $\mu_j = \sqrt{\lambda_j}$ e $u_j = \mu_j^{-1}Av_j$, tem-se

$$A^*u_j = \mu_j^{-1}A^*Av_j = \mu_j^{-1}\lambda_j v_j = \mu_j v_j \quad (3.10)$$

e

$$Av_j = \mu_j u_j \quad (3.11)$$

tal que

$$AA^*u_j = \mu_j Av_j = \mu_j^2 u_j = \lambda_j u_j \quad (3.12)$$

Portanto, $\{u_j\}$ forma uma base de autovetores de AA^* e do Teorema A.9 pode-se concluir que este sistema será completo em $\overline{R(AA^*)} = N(AA^*)^\perp = N(A^*)^\perp$. O sistema $\{v_j, u_j; \mu_j\}$ é denominado sistema singular do operador A e μ_j são os valores singulares de A .

Como $N(A)$ é um subespaço fechado de H_1 , então, do Teorema A.2, um elemento qualquer $x \in H_1$ pode ser representado como $x = m_o + n$, onde $m_o \in N(A)$ e $n \in N(A)$. Sendo $m_o = Px$ a projeção de x em $N(A)$ e $\{v_j\}$ base de $N(A)$, então x pode ser expressado como

$$x = Px + \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j v_j \quad (3.13)$$

onde $\alpha_j = (x, v_j)$. Logo,

$$Ax = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j Av_j = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \mu_j u_j. \quad (3.14)$$

Esta é a chamada decomposição em valores singulares de A .

Se $y \in R(A)$ então o problema (3.1) terá solução e

$$\sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \mu_j u_j = y. \quad (3.15)$$

Sendo $\{u_j\}$ uma base completa de $\overline{R(A)} = N(A^*)^\perp$ então

$$(y, u_j) = \alpha_j \mu_j = \mu_j (x, v_j), \quad (3.16)$$

$$\mu_j^{-1} (y, u_j) = \alpha_j. \quad (3.17)$$

⁷ $(A^*Ax, x)_{H_1} \geq 0$ e $(AA^*y, y)_{H_2} \geq 0$, para quaisquer $x \in H_1$ e $y \in H_2$.

y deve ser restringido tal que

$$\sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{-1} |(y, u_j)|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |\alpha_j|^2 = \|x\|^2 - \|Px\|^2 \leq \|x\|^2 < \infty, \quad (3.18)$$

i.e. $|(y, u_j)|$ deve decair mais rápido que μ_j . Por outro lado, se $y \in R(A)$ e

$$\sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{-1} |(y, u_j)|^2 < \infty, \quad (3.19)$$

então, considerando um vetor qualquer $v \in N(A)$, x definido como

$$x = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(y, u_j)}{\mu_j} v_j + v \quad (3.20)$$

será solução de (3.1).

Conclui-se que o problema (3.1) terá solução se e somente se $y \in \overline{R(A)}$ e se a restrição (3.19) for satisfeita. Esta condição é denominada critério de existência de Picard (HANSEN, 1998; KIRSCH, 2011).

Se A^*A tiver número finito de autovalores, então $\overline{R(A)} = N(A^*)^\perp$, que tem como base $\{u_j\}$, terá dimensão finita. Caso tenha infinitos autovalores, $\lambda_j \rightarrow 0$ e, devido ao critério de Picard, $|(y, u_j)|$ deve decair para zero mais rapidamente.

Toma-se o caso mais geral, em que $y \in R(A) + R(A)^\perp$. Como visto no Teorema 3.2, $A^\dagger y$ será o único elemento de $N(A)^\perp$ que satisfaz (3.6). Tal solução é obtida tomando $v = 0$ em (3.20), tal que

$$A^\dagger y = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(y, u_j)}{\mu_j} v_j, \quad (3.21)$$

ou seja, ao aplicar a inversa generalizada, projeta-se y em $\overline{R(A)}$ e encontra-se o único elemento que satisfaz (3.6). No entanto, tal inversa não será contínua: tomando, por exemplo, $y = u_k$, pode-se verificar que, embora $\|u_k\| = 1$, $A^\dagger u_k \rightarrow \infty$ com $k \rightarrow \infty$. Uma maneira de contornar este problema seria truncar a série tal que

$$x_n = \sum_{j=1}^n \frac{(y, u_j)}{\mu_j} v_j, \quad (3.22)$$

e $\|x_n - A^\dagger y\| \rightarrow 0$ com $n \rightarrow \infty$. Aparentemente, o problema então seria resolvido tomando n suficientemente pequeno. No entanto, a configuração do problema muda ao considerar erros experimentais, o que ocorre frequentemente em aplicações de problemas inversos (KIRSCH, 2011; ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996).

Suponha que os dados obtidos são y^δ e que os resultados em que erros experimentais não ocorreriam seria y , tal que $\|y - y^\delta\| \leq \delta$. A metodologia descrita acima seria utilizada para obter x_n^δ que se aproximasse de $A^\dagger y$, quando a aproximação da solução, desconsiderando erros experimentais, seria x_n . Têm-se que

$$\|x_n - x_n^\delta\| = \left\| \sum_{j=1}^n \frac{(y - y^\delta, u_j)}{\mu_j} v_j \right\| = \sum_{j=1}^n \frac{|(y - y^\delta, u_j)|^2}{\mu_j^2} \leq \frac{1}{\mu_n^2} \sum_{j=1}^n |(y - y^\delta, u_j)|^2 \leq \frac{\delta^2}{\mu_n^2} \quad (3.23)$$

e portanto

$$\|x_n^\delta - A^\dagger y\| \leq \|x_n - A^\dagger y\| + \|x_n - x_n^\delta\| \leq \|x_n - A^\dagger y\| + \delta \mu_n^{-1}. \quad (3.24)$$

Logo, para um n fixo, o erro entre a aproximação e a solução $\|x_n^\delta - A^\dagger y\|$ decai com δ , i.e. menores erros na obtenção dos dados implica em menor erro na aproximação. No entanto, para um δ fixo, têm-se que o erro tende a infinito com $n \rightarrow \infty$. Logo, é necessário escolher n que minimize simultaneamente $\|x_n - A^\dagger y\|$ e $\delta \mu_n^{-1}$, i.e. um n tal que $x_n^\delta \rightarrow A^\dagger y$ quando $\delta \rightarrow 0$. O esquema para a escolha de n é chamado estratégia (ou esquema) de regularização.

Na subseção a seguir, expõe-se alguns aspectos gerais associados a estratégias de regularização. Em seguida, resultados referentes ao método de regularização de Tikhonov, a ser utilizado no trabalho são mencionados.

3.3 Estratégias de Regularização: aspectos gerais

Considera-se o problema (3.1), com o operador A compacto linear, $x \in H_1$ e $y \in R(A) \subset H_2$ ⁸. Métodos de regularização, de um ponto de vista geral, são utilizados para gerar sequências de operadores, que aproximam elementos de H_1 da solução de problemas como (3.1). Estes métodos, levam em conta a possibilidade do problema ser mal-posto, sendo portanto necessários artifícios como o parâmetro de regularização para contornar dificuldades associadas. Formalmente, define-se *estratégia de regularização*.

Definição 3.1. *Seja uma família de operadores limitados lineares R_{λ_R} , que mapeiam um espaço de Hilbert H_2 em um espaço de Hilbert H_1 e A um operador linear compacto de H_1 em H_2 . Considera-se que cada operador R_{λ_R} corresponde a um escalar $\lambda_R > 0$. Se para esta família,*

$$\lim_{\lambda_R \rightarrow 0} R_{\lambda_R} A x = x, \quad (3.25)$$

então a família define uma estratégia de regularização.

O método de Tikhonov satisfaz a condição (3.25) mas pode divergir da solução quando considerados erros na obtenção de dados experimentais, como será visto na seção seguinte. Estratégias que contornam problemas como estes são ditas *admissíveis*. Formalmente,

Definição 3.2. *Sejam os operadores R_{λ_R} e A definidos como anteriormente. Uma estratégia de regularização $\lambda_R = \lambda_R(\delta)$ é dita admissível se, para todo $x \in H_1$, $\lambda_R(\delta) \rightarrow 0$ e*

$$\sup \left\{ \left\| R_{\lambda_R(\delta)} y^\delta - x \right\| : y^\delta \in H_2, \left\| A x - y^\delta \right\| \right\} \rightarrow 0, \delta \rightarrow 0. \quad (3.26)$$

É possível verificar que o método de Tikhonov será uma estratégia admissível, se $\frac{\delta}{\sqrt{\lambda_R}} \rightarrow 0$. No entanto, o método de Tikhonov não será a única estratégia admissível, o que pode ser verificado a partir do

⁸ O caso mais geral em que $y \notin R(A)$ é tratado analogamente, ao restringir o espaço de soluções, como deduzido no Teorema de Tikhonov e como feito nas subseções anteriores.

Teorema 3.4. *Considera-se os operadores A e R_{λ_R} definidos anteriormente, e o sistema singular de A $\{v_j, u_j; \mu_j\}$. Seja a função $q : (0, \infty) \times (0, \|A\|] \rightarrow \mathbb{R}$ com as seguintes características:*

- (1) $|q(\lambda_R, \mu)| \leq 1$ para todo $\lambda_R > 0$ e $0 < \mu \leq \|A\|$.
 (2) Para todo $\lambda_R > 0$, existe $c(\lambda_R)$ tal que

$$|q(\lambda_R, \mu)| \leq c(\lambda_R)\mu, 0 < \mu \leq \|A\|. \quad (3.27)$$

(3)⁹ $\lim_{\lambda_R \rightarrow 0} q(\lambda_R, \mu) = 1, 0 < \mu \leq \|A\|$. Então a família de operadores $\{R_{\lambda_R}\}$, com R_{λ_R} definido como

$$R_{\lambda_R}y := \sum_{j=1}^{\infty} \frac{q(\lambda_R, \mu_j)}{\mu_j} (y, v_j) u_j, y \in H_2 \quad (3.28)$$

será uma estratégia de regularização com $\|R_{\lambda_R}\| \leq c(\lambda_R)$ e será admissível se $\lambda_R(\delta) \rightarrow 0$ e $\delta c(\lambda_R(\delta)) \rightarrow 0$.

Demonstração. Teorema 2.6 (KIRSCH, 2011). □

Definição 3.3. *As funções $q(\lambda_R, \mu)$ com as propriedades definidas nas premissas do Teorema 3.4 são denominadas fatores de filtro.*

São exemplos de fatores de filtro:

- (a) (Tikhonov) $q(\lambda_R, \mu) = \mu^2 / (\lambda_R + \mu^2)$, com $c(\lambda_R) = 1/(2\sqrt{\lambda_R})$ ¹⁰.
 (b) $q(\lambda_R, \mu) = 1 - (1 - a\mu^2)^{\frac{1}{\lambda_R}}$, $0 < a < 1/\|A\|^2$, com $c(\lambda_R) = \sqrt{a/\lambda_R}$.
 (c) $c(\lambda_R) = 1/(\sqrt{\lambda_R})$ e

$$q(\lambda_R, \mu) = \begin{cases} 1, & \mu^2 \geq \lambda_R \\ 0, & \mu^2 < \lambda_R \end{cases}. \quad (3.29)$$

Restringe-se, na seção seguinte, a abordagem para o método de regularização de Tikhonov.

3.4 Regularização de Tikhonov

É possível observar, a partir da definição anterior, algumas condições em que estratégias de regularização sejam consideradas admissíveis. Dentre estas estratégias, a estratégia de regularização de Tikhonov é considerada bem estabelecida (KIRSCH, 2011; LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003; ENGL; HANKE; NEUBAUER, 1996). Nesta seção, são evidenciadas algumas propriedades associadas a esta estratégia. Considera-se, como anteriormente, um operador compacto linear A , de H_1 em H_2 . Deduziu-se, na seção 3.2, que, para o problema (3.1) ter solução, o critério de Picard deve ser satisfeito e, como enunciado no Teorema 3.3, A^\dagger será contínua somente se $R(A)$ for fechado. O fato de A^\dagger não ser contínua se deve ao fato de $\mu_j \rightarrow 0$, o que pode ser atribuído a A^*A não ser contínua. Para contornar o problema de não continuidade, a estratégia adotada é construir uma família de operadores que convirjam para o resultado obtido pela aplicação da inversa generalizada A^\dagger : chamados métodos (estratégias) de regularização. Nesta subseção expõe-se o caso específico do método de regularização de Tikhonov.

⁹ Esta condição pode ser substituída por considerações mais fortes, como pode ser visto nos Teoremas 2.7 e 2.8 do livro de Kirsch (2011).

¹⁰ Nota-se que substituindo esta forma de $q(\lambda_R, \mu)$ na equação (3.28), resulta em (3.48).

Foi deduzido anteriormente que uma única solução $A^\dagger y$ poderia ser encontrada para o problema (3.1), tal que satisfizesse (3.9) e, para que fosse única, tivesse norma mínima (pertencer a $N(A)^\perp$). Uma maneira de encontrar tal solução do problema é obter $x \in H_1$ que minimize o funcional

$$F(u) = \|Au - y\|_{H_2}^2 + \lambda_R \|u\|_{H_1}^2, \quad (3.30)$$

onde λ_R é denominado parâmetro de regularização. Este penaliza a redução do funcional, atribuindo peso para a minimização da norma da solução. Para minimizar $F(u)$, define-se um espaço de Hilbert H contendo pares ordenados $z \in H = \{x, y\}$, com $x \in H_1$ e $y \in H_2$, i.e. $H = H_1 \times H_2$. Pode-se provar que H é de fato um espaço de Hilbert, ao definir o produto interno para quaisquer $z_1, z_2 \in H$ como

$$(z_1, z_2)_H = (y_1, y_2)_{H_2} + \lambda_R (x_1, x_2)_{H_1} \quad (3.31)$$

sendo sua norma, portanto,

$$\|z\|_H^2 = \|y\|_{H_2}^2 + \lambda_R \|x\|_{H_1}^2. \quad (3.32)$$

O procedimento para encontrar o mínimo do funcional (3.30), é análogo ao que foi feito na subseção 3.1, considerando H como o análogo a H_2 . Primeiramente, nota-se que o operador linear A de $x \in H_1$ em $Ax \in H_2$, induz a definição do operador linear A_H , que leva $x \in H_1$ em $\{x, Ax\} \in H$. Como

$$\|\{x, Ax\}\|_H^2 = \|Ax\|_{H_2}^2 + \lambda_R \|x\|_{H_1}^2 \leq \{\|A\|^2 + \lambda_R\} \|x\|_{H_1}^2, \quad (3.33)$$

então, do Teorema A.1, A_H é contínuo. Pode-se demonstrar que $R(A_H)$, com elementos $\{x, Ax\}$, $x \in H_1$, $Ax \in H_2$, é fechado. Do Teorema A.3, existe um $x \in H_1$ que minimize a norma $\|\{x, Ax\} - \{0, y\}\|$, i.e. existe um $x \in H_1$ tal que

$$\|Ax - y\| + \lambda_R \|x\| = \inf_{u \in H_1} \{\|Au - y\| + \lambda_R \|u\|\} \quad (3.34)$$

Sendo $R(A_H)$ fechado, do Teorema A.2, H pode ser decomposto em $R(A_H)$ e $R(A_H)^\perp$. Logo

$$\{0, y\} = m_o + n, m_o \in R(A_H), n \in R(A_H)^\perp, \quad (3.35)$$

e, sendo $m_o \in R(A_H)$, existe $x \in H_1$ tal que $\{x, Ax\} = m_o$, tal que

$$\{0, y\} - \{x, Ax\} = n \in R(A_H)^\perp. \quad (3.36)$$

Para proceder de maneira análoga à abordagem na subseção 3.1, é necessário definir o operador adjunto de A_H . A partir da definição de operador adjunto (Definição A.7) e notando que

$$(\{x, Ax\}, \{x_1, y_1\})_H = (Ax, y_1)_{H_2} + \lambda_R (x, x_1)_{H_1} \quad (3.37)$$

é um funcional linear contínuo em H_1 , é possível demonstrar que o operador adjunto de A_H , A_H^* , deve satisfazer as equações

$$(\{x, Ax\}, \{x_1, y_1\})_H = (x, A_H^* \{x_1, y_1\})_{H_1} \quad (3.38)$$

e

$$A_H^* \{x_1, y_1\} = A^* y_1 + \lambda_R x_1. \quad (3.39)$$

Do Teorema A.9, têm-se que $R(A_H)^\perp = N(A_H^*)$. Logo, da equação (3.36)

$$A_H^* \{x, Ax - y\} = 0 \quad (3.40)$$

e, da equação (3.39),

$$A^* (Ax - y) + \lambda_R x = 0, \quad (3.41)$$

$$(A^* A + \lambda_R I) x = A^* y, \quad (3.42)$$

que possui a única solução

$$x = x_{\lambda_R} = (A^* A + \lambda_R I)^{-1} A^* y. \quad (3.43)$$

Objetiva-se construir x_{λ_R} , tal que, com $\alpha \rightarrow 0$, $x_{\lambda_R} \rightarrow A^\dagger y$. Nota-se, a partir de

$$\lambda_R x_{\lambda_R} = A^* y - A^* A x_{\lambda_R}, \quad (3.44)$$

que $x_{\lambda_R} \in R(A^*)$. Do Teorema A.9, $R(A^*) = N(A)^\perp$ e, como visto na subseção anterior, o conjunto de vetores $\{v_j\}$ formam uma base para $N(A)^\perp$. Portanto, uma representação possível para x_{λ_R} é

$$x_{\lambda_R} = \sum_{j=1}^{\infty} c_j v_j, \quad (3.45)$$

com $c_j = (x, v_j)$. Como x_{λ_R} deve satisfazer (3.43), então

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\lambda_j + \lambda_R) c_j v_j = A^* y \quad (3.46)$$

tal que

$$(\lambda_j + \lambda_R) c_j = (A^* y, v_j) = (y, A v_j) = \mu_j(y, u_j) \quad (3.47)$$

de forma que x_{λ_R} pode ser escrita como

$$x_{\lambda_R} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mu_j(y, u_j)}{(\lambda_j + \lambda_R)} v_j. \quad (3.48)$$

Utilizando a forma acima para x_{λ_R} , é possível obter os seguintes resultados¹¹

(i) $\|x_{\lambda_R}\|^2 \leq \zeta^2 \sum_{j=1}^{\infty} |(y, u_j)|^2 \leq \zeta^2 \|y\|^2$, com $\zeta = \max \left\{ 1, \frac{1}{\lambda_R} \right\}$;

(ii) se $y \in H_2$ satisfizer a condição de Picard, então $\lim_{\lambda_R \rightarrow 0} \|A^\dagger y - x_{\lambda_R}\|^2 = 0$;

(iii) Considerando erros na medição experimental de y , tal que $\|y^\delta - y\| \leq \delta$ (mesma notação que anteriormente),

$$\|x_{\lambda_R} - x_{\lambda_R}^\delta\| \leq \frac{\|y^\delta - y\|}{\sqrt{\lambda_R}} \leq \frac{\delta}{\sqrt{\lambda_R}}. \quad (3.49)$$

É possível concluir de (i) que o operador R_{λ_R} , tal que $R_{\lambda_R} y \equiv x_{\lambda_R}$, é um operador contínuo de H_2 em H_1 . De (ii), no limite em que $\lambda_R \rightarrow 0$, x_{λ_R} converge para $A^\dagger y$, caso este exista. Entretanto, verifica-se em (iii) que, conforme $\lambda_R \rightarrow 0$, o erro na solução tende a infinito, com δ fixo: propriedade característica de problemas mal-postos. Pode-se contornar o problema fazendo com que $\frac{\delta}{\sqrt{\lambda_R}} \rightarrow 0$, quando $\lambda_R \rightarrow 0$. O procedimento em que se obtém x_{λ_R} , a partir de um dado y , é comumente denominado *método de Tikhonov*.

¹¹ Para mais detalhes, ver seção 8.4 do livro de Lebedev et al. (2003) ou seção 2.2 do livro de Kirsch (2011)

3.5 Curva L

O critério para a determinação de λ_R , a ser utilizado no trabalho, será o critério curva L (*L-curve criterion*), proposto por Hansen (1992). Com o intuito de deduzir a forma em que o critério é estabelecido, define-se as seguintes funções

$$\Lambda(\lambda_R) = \log \|x_{\lambda_R}\| \quad (3.50)$$

e

$$\Psi(\lambda_R) = \log \|Ax_{\lambda_R} - y\|. \quad (3.51)$$

onde x_{λ_R} é definido na equação (3.48). A curva definida por $(\Lambda(\lambda_R), \Psi(\lambda_R))$ é denominada curva L, devido ao formato em "L", usual em problemas mal condicionados (BAZÁN; BEDIN; BOZZOLI, 2016). Um exemplo é explicitado na figura 3.1.

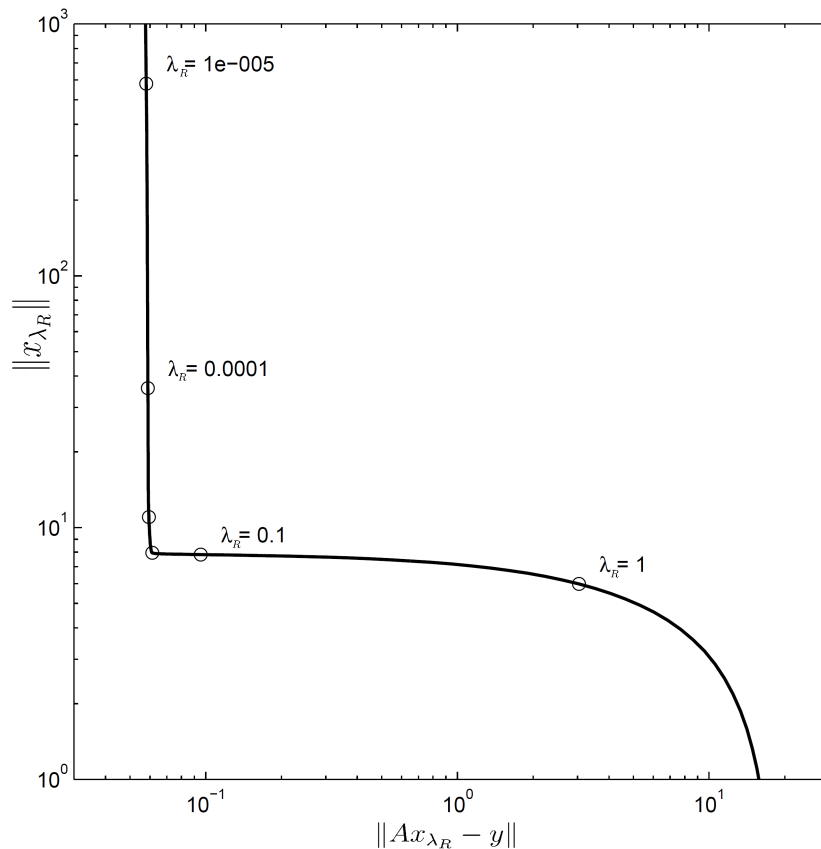


Figura 3.1 – Curva L. Fonte: Adaptado de (HANSEN, 1999)

Pode-se interpretar o formato da figura na seguinte forma (HANSEN, 1999; HANSEN, 1998): na parte aproximadamente vertical da curva, ao lado esquerdo da figura, os erros devido à regularização são predominantes e, na parte aproximadamente horizontal, predomina-se erros devido a perturbações nos dados. A partir desta interpretação, formulou-se (HANSEN, 1992) o critério para a escolha do parâmetro λ_R .

O critério consiste em encontrar o parâmetro que corresponde à "quina" da curva. Em outras palavras, no ponto onde a curvatura κ_{λ_R} , dada por

$$\kappa_{\lambda_R} = \frac{\Psi' \Lambda'' - \Lambda' \Psi''}{\left((\Lambda')^2 + (\Psi')^2 \right)^{3/2}} \quad (3.52)$$

seja máxima. Desta forma, o parâmetro de regularização utilizando o critério da curva "L", λ_R^L é

$$\lambda_R^L = \arg \max_{\lambda_R \in \mathbb{R}} \{ \kappa_{\lambda_R} \} \quad (3.53)$$

O processamento para obter λ_R^L corresponde a encontrar máximos de uma função de apenas uma variável.

Foram feitos estudos quanto à aplicabilidade do critério de curva "L" e demonstrou-se que em alguns casos, a solução poderia não ser convergente (HANKE, 1996; ENGL; GREVER, 1994). Entretanto, o método apresenta robustez e facilidade de tratamento de perturbações devido à ruídos em dados experimentais (HANSEN, 1999) e portanto, apresentou bons resultados em aplicações (DEUS et al., 2012; HANSEN, 1998).

3.6 Resumo do capítulo

Foram abordados neste capítulo:

- Os principais resultados sob o escopo da análise funcional, necessários para a solução de problemas inversos mal postos;
- O teorema de Tikhonov foi tratado e algumas de suas consequências foram contextualizadas;
- Decomposição em valores singulares e as dificuldades associadas a problemas mal postos;
- Aspectos gerais de estratégias de regularização;
- O método de regularização de Tikhonov foi explicitado e resultados associados a sua convergência mencionados;
- O critério de curva L foi definido.

4 Abordagem numérica

Objetiva-se, neste capítulo, definir a estratégia utilizada no trabalho, para a solução dos problemas inversos definidos na introdução. Portanto, após explicitar novamente as equações do modelo, aspectos experimentais e numérico-computacionais associados aos testes reológicos são mencionados. Em seguida, discute-se sobre o tratamento dos dados obtidos nos testes.

Os problemas mencionados na introdução são redefinidos na seção 4.4: são definidos de forma geral para testes com imposição de taxa de deformação e, como será comentado, podem ser adaptados para testes com cargas de tensão. Em seguida, a forma na qual os problemas serão resolvidos são especificadas: os algoritmos são formalizados para a solução de problemas irrestritos (seções 4.5 e 4.6) e para os problemas considerando restrições impostas sobre os parâmetros do modelo (seção 4.7). Finalmente, na seção 4.8, a ordem na qual os algoritmos foram utilizados e alguns aspectos computacionais e práticos são especificados. A seguir, as equações do modelo são reescritas, para facilitar a leitura e fomentar a discussão ao longo do capítulo.

4.1 Equações do modelo

$$\frac{2\eta_\nu}{G}\dot{\tau} + \left(1 - \frac{2\eta_\nu\dot{G}}{G^2}\right)\tau = \left[2\eta_\nu + 2\left(1 - \frac{2\eta_\nu\dot{G}}{G^2}\right)\eta_\mu + \frac{4\eta_\nu\dot{\eta}_\mu}{G}\right]\dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu\eta_\mu}{G}\ddot{\gamma}; \quad (4.1)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{\zeta} \left[\kappa(1 - \lambda)^\beta - (K_\psi^*\lambda^6\dot{\gamma} + \tau)\lambda\dot{\gamma} \right], \quad (4.2)$$

$$\eta_\mu = \eta_0 \exp(\alpha_2\lambda); \quad (4.3)$$

$$\eta_\nu = \eta_0 \exp[(\alpha)\lambda] - \eta_\mu, \quad (4.4)$$

$$G = G_0 \exp(m\lambda^{-1}); \quad (4.5)$$

4.2 Testes reológicos

Os testes reológicos são considerados em dois possíveis regimes: primeiramente discute-se aspectos associados ao regime permanente e em seguida, ao regime transiente.

4.2.1 Regime permanente

O regime permanente ocorre quando as variáveis associadas à resposta reológica e/ou estrutural do modelo não evoluem mais no tempo, i.e. $\ddot{\gamma} = \dot{\tau} = \dot{\lambda} = 0$ (MENDES; THOMPSON, 2013; DEUS;

DUPIM, 2013). Consequentemente $\dot{G} = \dot{\eta}_\nu = \dot{\eta}_\mu = 0$. A equação constitutiva (4.1) é reduzida a

$$\tau_{eq} = 2(\eta_{\nu eq} + \eta_{\mu eq}) \dot{\gamma}_{eq} = 2\eta_o \exp[(\alpha)\lambda_{eq}] \dot{\gamma}_{eq}, \quad (4.6)$$

onde propriedades (\cdot) no equilíbrio são representadas por $(\cdot)_{eq}$. A equação de taxa é reescrita como

$$\frac{1}{\varsigma} \left[\kappa(1 - \lambda_{eq})^\beta - \tau_{eq} \lambda_{eq} \dot{\gamma}_{eq} \right] = 0. \quad (4.7)$$

Considerando que não é o caso em que $\varsigma \rightarrow \infty$ e $\varsigma \neq 0$,

$$\kappa(1 - \lambda_{eq})^\beta - \tau_{eq} \lambda_{eq} \dot{\gamma}_{eq} = 0. \quad (4.8)$$

Impondo $\dot{\gamma}_{eq}$ e os parâmetros $\underline{W}_{eq} = [\eta_o, \kappa, \beta, \alpha, \alpha_2]^T$, pode-se obter τ_{eq} e λ_{eq} , a partir das equações (4.6) e (4.8). A curva formada por $\dot{\gamma}_{eq}$ e τ_{eq} obtidos define a curva de escoamento (*flow curve*).

São obtidos, experimentalmente, um conjunto de taxas de deformação $\left\{ \dot{\gamma}_{eq}^j \right\}_{j=1}^{N_\dot{\gamma}}$, com $N_\dot{\gamma}$ finito, e seus respectivos $\left\{ \tau_{eq}^j \right\}_{j=1}^{N_\dot{\gamma}}$. Há maneiras distintas de obter tais pontos (TARCHA et al., 2015; MAGNIN; PIAU, 1990).

4.2.2 Regime transiente

Os testes convencionalmente utilizados na simulação de materiais tixotrópicos em regime transiente são: patamar de taxa de deformação ou tensão e oscilatório de tensão ou taxa de deformação (EWOLDT; HOSOI; MCKINLEY, 2008; ROGERS; KOHLBRECHER; LETTINGA, 2012; EWOLDT, 2009; KLEIN et al., 2008; MENDES, 2011; MENDES; THOMPSON, 2013). De um ponto de vista matemático, estes testes são definidos impondo tensão, taxa de deformação ou deformação por meio de uma função real $F_{imp}(t)$, cujo domínio $t \in I \subset \mathbb{R}$ define um intervalo de tempo qualquer: $\tau(t) = F_{imp}(t)$, $\dot{\gamma}(t) = F_{imp}(t)$ ou $\gamma(t) = F_{imp}(t)$, respectivamente.

Toma-se, por exemplo, o caso de aplicação de um patamar de taxa de deformação $\dot{\gamma}_{ap}$ no instante $t_1 \in I$. Neste caso, $F_{imp}(t) = H(t - t_1)\dot{\gamma}_{ap}$, onde H é a função degrau unitário. Patamares de tensão, testes oscilatórios ou patamares em sequência podem ser estabelecidos redefinindo $F_{imp}(t)$ de maneira análoga.

Testes experimentais são definidos, de maneira genérica, a partir da imposição de carga de cisalhamento $\left\{ F_{imp}^{exp}(t_i) \right\}_{i=1}^{N_t}$ e obtenção da resposta $\left\{ R^{exp}(t_i) \right\}_{i=1}^{N_t}$, tal que o conjunto $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$, representa instantes de tempo do reômetro (SANTOS, 2010; TARCHA et al., 2015). Comumente, caso F_{imp}^{exp} defina um teste impondo taxa de deformação, R^{exp} representará a tensão obtida na aplicação do teste e vice-versa (DULLAERT; MEWIS, 2006; MEWIS, 1979; SILVA; DEUS; NEGRÃO, 2014). Idealmente, espera-se que $F_{imp}^{exp}(t_i) \approx F_{imp}(t_i)$, para um determinado teste definido por $F_{imp}(t)$: tendo como exemplo o patamar de taxa, espera-se que $F_{imp}^{exp}(t_i)$ consiga representar com certa precisão um patamar de taxa. Entretanto, discrepâncias significativas podem ser observadas (TARCHA et al., 2015). Portanto, um tratamento dos dados pode ser necessário para a simulação ou ajuste de parâmetros do modelo.

¹ Notação utilizada no restante do trabalho, para definir conjunto das variáveis entre colchete, com números naturais como índices, de 1 a $N_\dot{\gamma}$, no caso.

Os testes utilizados no trabalho foram: teste de taxa de deformação constante e teste de tensão constante. Os dados obtidos a partir do teste de taxa constante foram utilizados para obter a uma nova proposta para a função associada ao módulo de cisalhamento e os dados referente ao teste de tensão constante são comparados com a resposta do modelo utilizando esta nova proposta $G(\lambda)$. Os resultados, a serem apresentados foram obtidos considerando $F_{imp}^{exp}(t_i) \approx F_{imp}(t_i)$.

4.3 Tratamento de dados

É comum a necessidade de interpolação numérica de dados obtidos experimentalmente para a posterior simulação ou ajuste de modelos. Essencialmente, após a interpolação de quaisquer dados $\{(\cdot)^i\}_{i=1}^{N_t}$, obtidos nos instantes $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$, obtém-se um novo conjunto de valores $\{(\cdot)_*^j\}_{j=1}^{N_{t^*}}$ nos instantes $\{t_j^*\}_{j=1}^{N_{t^*}}$, tal que $(\cdot)_*^k = (\cdot)^l$ para $t_k^* = t_l$ e $N_t \leq N_{t^*}$. No restante do trabalho, não haverá distinção entre a notação dada aos conjuntos obtidos após a interpolação e os dados sem interpolação, i.e. assume-se que $\{(\cdot)^i\}_{i=1}^{N_t}$ representa o conjunto de valores da propriedade (\cdot) nos instantes $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$, interpolados ou não.

4.4 Problemas formalmente estabelecidos

Os problemas descritos na introdução são redefinidos, de maneira mais detalhada. No presente caso, considera-se testes reológicos impondo taxas de deformação. Entretanto, a abordagem pode ser generalizada para testes com aplicação de tensão ou deformação de forma análoga, como comentado no final desta seção.

Considera-se um intervalo de tempo $I \subset \mathbb{R}$, os parâmetros $\underline{W}_c = [\eta_0, \alpha, \kappa, \beta, \alpha_2, K_\psi^*, \varsigma]^T$ contidos nas equações (4.1) a (4.4) e \underline{W}_G , os parâmetros associados ao módulo de cisalhamento (no caso da equação (4.5), $\underline{W}_G = [G_0, m]^T$). Seja o conjunto funcional \mathbf{T} cujos elementos são funções reais, com domínio em I , que descrevem a tensão, taxa de deformação e o parâmetro estrutural ao longo do tempo. Seja \mathbf{M} o conjunto funcional cujos elementos são funcionais com domínio em $(0, 1) \times \mathbb{R}^{N_G} \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{N_G}$, onde N_G é o número de elementos de \underline{W}_G . Supõe-se que \mathbf{T} e \mathbf{M} são espaços de Hilbert, equipados com produto interno $(\cdot, \cdot)_{\mathbf{T}}$, $(\cdot, \cdot)_{\mathbf{M}}$ e normas induzidas $\|\cdot\|_{\mathbf{T}}$, $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$, respectivamente. O problema direto descrito na introdução é reescrito como

Problema Direto 2. Considerando conhecida a função $G(\lambda) \in \mathbf{G}$, os parâmetros \underline{W}_c , \underline{W}_G e a função $\dot{\gamma}(t) \in \mathbf{T}$, determinar $\tau(t) \in \mathbf{T}$, que satisfaça as equações (4.1)-(4.5).

O objetivo principal neste trabalho é resolver o seguinte

Problema Inverso 3. Considerando conhecida as funções $\tau(t), \dot{\gamma}(t) \in \mathbf{T}$ e os parâmetros do modelo \underline{W}_c , determinar a função $G(\lambda) \in \mathbf{G}$ que satisfaça as equações (4.1)-(4.4).

A função $\tau(t)$, de maneira geral, não é obtida analiticamente. Como mencionado anteriormente, resultados experimentais $\{\tau^{exp}(t_i)\}_{i=1}^{N_t}$ são obtidos para um número finito N_t de pontos $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$ ao longo do intervalo I . Uma nova abordagem é então proposta, considerando as funções

$\tau(t), \lambda(t), \dot{\gamma}(t) \in \mathbf{T}$ tratadas nos instantes $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$. Define-se os vetores $\underline{\tau} \in \mathbb{R}^{N_t}$, $\underline{\lambda}^{exp} \in \mathbb{R}^{N_t}$ e $\underline{\dot{\gamma}}^{exp} \in \mathbb{R}^{N_t}$, tais que $\tau(t_i)$, $\lambda(t_i)$ e $\dot{\gamma}(t_i)$ representam o valor da i -ésima componente dos vetores. Similarmente define-se o vetor $\underline{G} \in \mathbb{R}^{N_t}$ com a i -ésima componente representando $G(\lambda(t_i))$. Reformula-se, o problema 3.

Problema Inverso 4. Considerando conhecidos os vetores $\underline{\tau}^{exp}, \underline{\dot{\gamma}} \in \mathbb{R}^{N_t}$, determinar $\underline{G} \in \mathbb{R}^{N_t}$ que minimize o funcional

$$F(\underline{G}) = \|\underline{\tau}^{exp} - \underline{\tau}(\underline{G})\|^2 \quad (4.9)$$

onde $\underline{\tau}$ é a solução das equações (4.1)-(4.4) e da definição de G , nos instantes $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$.

Uma possível estratégia seria resolver as equações (4.1) a (4.4) considerando $\tau(t_i) = \tau^{exp}(t_i)$, i.e. resolver as equações

$$\begin{aligned} \frac{2(\eta_\nu)_i}{G_i} \dot{\tau}_i^{exp} + \left(1 - \frac{2(\eta_\nu)_i \dot{G}_i}{G_i^2}\right) \tau_i^{exp} &= \left[2(\eta_\nu)_i + 2\left(1 - \frac{2(\eta_\nu)_i \dot{G}_i}{G_i^2}\right)(\eta_\mu)_i + \frac{4\eta_\nu(\dot{\eta}_\mu)_i}{G}\right] \dot{\gamma}_i + \\ &+ \frac{4(\eta_\nu)_i(\eta_\mu)_i}{G_i} \ddot{\gamma}_i, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\left(\frac{d\lambda}{dt}\right)_i = \frac{1}{\varsigma} \left[\kappa(1 - \lambda_i)^\beta - (K_\psi^* \lambda_i^6 \ddot{\gamma}_i + \tau_i^{exp}) \lambda_i \dot{\gamma}_i \right], \quad (4.11)$$

$$(\eta_\mu)_i = \eta_0 \exp(\alpha_2 \lambda_i), \quad (4.12)$$

$$(\eta_\nu)_i = \eta_0 \exp[(\alpha + \alpha_2) \lambda_i] - (\eta_\mu)_i. \quad (4.13)$$

onde abrevia-se $(\cdot)(t_i) \equiv (\cdot)_i$. Os termos $\dot{\tau}_i^{exp}$ e $\ddot{\gamma}_i$ são obtidos a partir da discretização numérica de $\dot{\tau}_i^{exp}$ e $\dot{\gamma}_i$, respectivamente, o que pode ser feito utilizando os dados tratados, descritos na seção anterior.

Pode-se redefinir novamente o problema

Problema Inverso 5. Considerando conhecidos os vetores $\underline{\tau}^{exp}, \underline{\dot{\gamma}} \in \mathbb{R}^{N_t}$ e os parâmetros \underline{W}_c , determinar $\underline{G} \in \mathbb{R}^{N_t}$, tal que suas componentes satisfaçam as equações (4.10) a (4.13).

A partir da solução do problema 5, estipula-se um formato para $G(\underline{W}_G, \lambda)$, não necessariamente igual àquele proposto na equação (4.5), baseando-se em gráficos de $G \times \lambda$.

Definida a nova forma da função associada ao módulo de cisalhamento $G_N(\underline{W}_G, \lambda)$, é necessário o ajuste dos parâmetros \underline{W}_G associados. Define-se o

Problema Inverso 6. Considerando conhecidos os vetores $\underline{\tau}^{exp}, \underline{\dot{\gamma}} \in \mathbb{R}^{N_t}$, os parâmetros \underline{W}_c e a definição de G_N , determinar \underline{W}_G , que minimize o funcional (4.9), onde $\underline{\tau}$ é a solução das equações (4.1)-(4.4), nos instantes $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$.

Após determinados os parâmetros \underline{W}_G , o problema inverso 6 é generalizado, com o intuito de refinar os resultados obtidos: busca-se determinar todos os parâmetros, $\underline{W} = [\underline{W}_c^T \underline{W}_G^T]^T$ do modelo, utilizando como estimativa inicial, os parâmetros obtidos a partir da solução dos problemas mencionados anteriormente. Considera-se o

Problema Inverso 7. Considerando conhecidos os vetores $\underline{\tau}^{exp}, \dot{\underline{\gamma}} \in \mathbb{R}^{N_t}$ e a definição de G_N , determinar \underline{W} , que minimize o funcional (4.9), onde $\underline{\tau}$ é a solução das equações (4.1)-(4.4), nos instantes $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$.

É necessário enfatizar que os problemas anteriores, embora definidos considerando testes de carregamento de taxa de deformação, podem ser (e, como será visto no capítulo seguinte, foram) adaptados para testes com imposição de cargas de tensão. A adaptação dos algoritmos, a serem definidos, e dos problemas tratados anteriormente é feita modificando as variáveis da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \dot{\underline{\gamma}} &\rightarrow \underline{\tau} \\ \underline{\tau}^{exp} &\rightarrow \dot{\underline{\gamma}}^{exp} \\ \underline{\tau} &\rightarrow \dot{\underline{\gamma}} \\ \dot{\underline{\gamma}}(t) &\rightarrow \tau(t). \end{aligned} \tag{4.14}$$

A solução dos problemas definidos anteriormente é obtida utilizando o método de Newton, a ser descrito na sequência.

4.5 Método de Newton

A metodologia para a solução dos problemas definidos na seção anterior é descrita com mais detalhes nesta seção. De maneira geral, busca-se obter vetores como \underline{W}_G ou \underline{W} , tais que minimizem o funcional F definido na equação (4.9). A partir desta seção até o final do capítulo é considerado em todas as equações o vetor considerando todos os parâmetros do modelo \underline{W} , embora as mesmas deduções são válidas quando \underline{W} é restringido para \underline{W}_G .

O método de Newton (NOCEDAL; WRIGHT, 2006; KREYSZIG, 1988; RIBEIRO; KARAS, 2013) consiste na construção de uma sequência de pontos no domínio de F . Neste trabalho, denomina-se as variáveis (\cdot) na n -ésima iteração desta sequência como $(\cdot)^n$. Primeiramente, expande-se em série de Taylor, até termos de primeira ordem, a função $(\tau_i(\underline{W}^n) - \tau_i^{exp}) \equiv R_i(\underline{W}^n) \equiv R_i^n$ em torno de \underline{W}^n :

$$R_i^{n+1} \approx R_i^n + \sum_j \frac{\partial R_i^n}{\partial W_j} \Big|_{W=W^n} \Delta W_j^n, \tag{4.15}$$

tal que

$$\underline{R}^{n+1} \approx \underline{R}^n + \underline{J}(\underline{W}^n) \underline{\Delta W}^n, \tag{4.16}$$

onde $\Delta W_j^n = W_j^{n+1} - W_j^n$ e $J_{i,j} = \frac{\partial \tau_i^c}{\partial W_j} \Big|_{W_j=W_j^n}$. Portanto, na n -ésima iteração do método de Newton, busca-se minimizar o funcional

$$\|\underline{\tau}(\underline{W}^n) - \underline{\tau}^{exp}\|_2^2 = \|\underline{R}^{n+1}\|_2^2 \approx \|\underline{R}^n + \underline{J}(\underline{W}^n) \underline{\Delta W}^n\|_2^2 \tag{4.17}$$

ou, sob outra perspectiva, obter $\underline{\Delta W}^n$ que satisfaça

$$\underline{J}^n \underline{\Delta W}^n = -\underline{R}^n, \tag{4.18}$$

Devido à possibilidade da matriz \underline{J} ser mal condicionada, é possível que o problema de obter a solução via mínimos quadrados pode ser suscetível a problemas de convergência. Caso tais

operadores sejam mal condicionados, lança-se mão do método de Tikhonov descrito no capítulo anterior.

A solução da equação (4.17), consiste em encontrar $\underline{\Delta W}^n$ tal que

$$\underline{\Delta W}^n = \arg \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^N} \left\| \underline{A}^n \underline{x} - \underline{b}^n \right\|_2^2. \quad (4.19)$$

onde

$$\underline{A}^n = \underline{J}^n \quad (4.20)$$

e

$$\underline{b}^n = -\underline{R}^n. \quad (4.21)$$

Caso o problema seja mal posto, a regularização de Tikhonov consiste em minimizar

$$\left\| \underline{A}^n \underline{x} - \underline{b}^n \right\|_2^2 + \lambda_R \|\underline{x}\|_2^2, \quad (4.22)$$

i.e.

$$\underline{\Delta W}^n = \arg \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^N} \left\{ \left\| \underline{A}^n \underline{x} - \underline{b}^n \right\|_2^2 + \lambda_R \|\underline{x}\|_2^2 \right\}. \quad (4.23)$$

Portanto, em cada iteração do método de Newton, resolve-se (4.18) e caso \underline{J}^n seja mal condicionada, utiliza-se o método de Tikhonov e soluciona-se o problema (4.23).

4.6 Minimização Multi-Objetiva

As soluções dos problemas definidos anteriormente, são obtidas a partir de minimizações do tipo (4.23) ou (4.19), para um determinado teste experimental num intervalo I , com $\hat{\gamma}(t)$ definido neste intervalo. No entanto, é comum executar mais de um teste com o mesmo material. Uma alternativa para a solução do problema, considerando vários testes, seria resolver para cada teste os problemas inversos 5 e 6. Entretanto, podem ser encontradas discrepâncias significativas entre a solução para cada teste. Uma forma de contornar este problema seria utilizar minimização multi-objetiva (GONG; JIANG; LI, 2016).

Considerando N_e testes tal que para cada teste, sistemas no formato da equação (4.19) são encontrados (i.e., o método de Newton é aplicado para cada teste), obtém-se a expressão (4.19) na n -ésima iteração. Para cada teste atribui-se um índice j , tal que

$$\underline{A}_j^n = \underline{J}_j^n \quad (4.24)$$

e

$$\underline{b}_j^n = -\underline{R}_j^n. \quad (4.25)$$

correspondem à n -ésima iteração do método de Newton, para o j -ésimo teste.

O passo $\underline{\Delta W}^n$ que minimizará simultaneamente os funcionais

$$\mathcal{F}_j(\underline{x}) = \left\| \underline{A}_j^n \underline{x} - \underline{b}_j^n \right\|_2^2, \quad \underline{x} \in \mathbb{R}^N, \quad (4.26)$$

irá minimizar

$$\mathcal{F}(\underline{x}) = \sum_{j=1}^{N_e} \vartheta_j \mathcal{F}_j(\underline{x}), \quad \underline{x} \in \mathbb{R}^N \quad (4.27)$$

onde ϑ_j representa o peso associado ao teste j , podendo selecionar o teste que influenciará mais a minimização. Pode-se estabelecer que o passo que irá minimizar simultaneamente os funcionais associados aos N_e testes, na n -ésima iteração do método de Newton, necessariamente irá satisfazer

$$\underline{\Delta W}^n = \arg \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{F}(\underline{x}), \quad (4.28)$$

tal que o funcional \mathcal{F} pode ser reescrito como

$$\mathcal{F}(\underline{x}) = \|\underline{A}^* \underline{x} - \underline{b}^*\|_2^2 \quad (4.29)$$

onde

$$\underline{A}^* = \begin{bmatrix} \sqrt{\vartheta_1} \underline{A}_1^n \\ \sqrt{\vartheta_2} \underline{A}_2^n \\ \vdots \\ \sqrt{\vartheta_{N_e}} \underline{A}_{N_e}^n \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

e

$$\underline{b}^* = \begin{bmatrix} \sqrt{\vartheta_1} b_1^n \\ \sqrt{\vartheta_2} b_2^n \\ \vdots \\ \sqrt{\vartheta_{N_e}} b_{N_e}^n \end{bmatrix}. \quad (4.31)$$

Caso o problema (4.28) com \mathcal{F} definido por (4.29) seja mal posto, pode-se utilizar o método de Tikhonov. Neste caso, o problema (4.28) é reescrito como

$$\underline{\Delta W}^n = \arg \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^N} \{ \mathcal{F}(\underline{x}) + \lambda_R \|\underline{x}\|_2^2 \} \quad (4.32)$$

com \mathcal{F} definido em (4.29).

O procedimento até a obtenção do funcional (4.29), para a solução dos problemas inversos definidos no começo do capítulo, permitem a formulação dos algoritmos a serem utilizados. Primeiramente, considera-se o problema 5:

ALGORITMO 1: SOLUÇÃO DO PROBLEMA 5

1. Definir ϵ_1, N_e .
2. Interpolar dados e diferenciar numericamente. Definir N_t .
Caso $j \leq N_e$:
3. Resolver, por meio de diferenças finitas, o problema inverso 5, com $1 \leq i < N_t$. Plotar gráficos $G \times \lambda$ e comparar com funções conhecidas.
Ao final da iteração em j ,
4. Propor o formato $G(\underline{W}_G, \lambda)$.

No algoritmo, considera-se o parâmetro ϵ_1 , que define o menor número de condição no qual o método de Tikhonov/curva L será utilizado, i.e. em iterações cujo número de condição é maior que

ϵ_1 , o método de regularização descrito é utilizado. Este critério é discutido de maneira detalhada na última seção do presente capítulo.

O algoritmo para a solução do problema inverso 6 é considerado. Como enfatizado na seção anterior, pode-se verificar que o algoritmo pode ser adaptado para o problema inverso 2 ou para a determinação de parâmetros em regime permanente.

ALGORITMO 2: SOLUÇÃO DOS PROBLEMAS 6 E 7

1. Definir $\epsilon_1, N_e, \underline{W}_0, N_{nw}, \epsilon_{nw}$ e $\underline{W}^n = \underline{W}_0$.
2. Interpolar dados e diferenciar numericamente. Definir N_t .
Para cada passo de Newton $n \leq N_{nw}$, com o passo associado ao experimento $j \leq N_e$:
3. Obter \underline{A}_j^n e \underline{b}_j^n definidos nas equações (4.24) e (4.25); adicionar à matriz \underline{A}^* e ao vetor \underline{b}^* , definidos respectivamente nas equações (4.30) e (4.31).
Ao final da última iteração em j ($j = N_e$),
4. Obter $\underline{\Delta W}^n$, i.e. resolver a equação (4.29), caso $N_{co}(\underline{A}^*) < \epsilon_1$; caso $N_{co}(\underline{A}^*) \geq \epsilon_1$, utilizar o método de regularização de Tikhonov-curva L para resolver (4.32). $\underline{W}^{n+1} = \underline{\Delta W}^n + \underline{W}^n$.
5. Finalizar programa caso critério de convergência (tolerância associada a ϵ_{nw}) for satisfeito ou $n > N_{nw}$.

Define-se, na seção seguinte, duas formulações possíveis para que as restrições do modelo (parâmetros não negativos) sejam consideradas explicitamente.

4.7 Problemas com restrição

A forma de obtenção da solução dos problemas definidos anteriormente, foram formuladas de maneira irrestrita, i.e. não foram impostas ou consideradas explicitamente nenhuma das restrições do modelo de que os parâmetros devem ser não negativos. Tais abordagens são viáveis tendo em vista que (como discutido no apêndice E) há a possibilidade de métodos cujas restrições do problema não são explicitamente consideradas, forneçam soluções que as satisfaçam. Entretanto, como exposto no capítulo 5, em alguns casos não é possível obter uma solução consistente (em que as restrições são satisfeitas) utilizando as metodologias definidas anteriormente (RIBEIRO; KARAS, 2013; NOCEDAL; WRIGHT, 2006). Trata-se nesta seção de abordagens em que tais limitações são contornadas.

Duas abordagens serão consideradas: utilizando variáveis de folga e conjunto ativo. A abordagem com variáveis de folga permite que pontos na sequência gerada pelo método possam não satisfazer as restrições do problema, embora a solução deva satisfazer. Como será explicitado nos resultados deste trabalho (capítulo 5), em alguns casos, problemas numéricos podem ocorrer pois as variáveis em passos do método não satisfazem as restrições. Uma maneira de contornar estes problemas é utilizando a abordagem via conjuntos ativos, onde todos os pontos gerados no método devem satisfazer as restrições.

4.7.1 Variáveis de folga

Os parâmetros associados ao modelo, devem ser não negativos, como mencionado no capítulo anterior. Estas restrições sobre os parâmetros podem ser consideradas explicitamente para a obtenção da solução dos problemas considerados anteriormente, i.e., deseja-se obter \underline{W} que minimize o funcional

$$F(\underline{W}) = \|\underline{\tau}(\underline{W}) - \underline{\tau}^{exp}\|^2 \quad (4.33)$$

sujeito às restrições

$$-W_i \leq 0 \quad (4.34)$$

para todo $i \in (1, 2, \dots, N_G)$: busca-se \underline{W}_s que satisfaça

$$\underline{W}_s = \arg \min_{-W_i \leq 0} F(\underline{W}) \quad (4.35)$$

Este problema pode ser visto como

$$\underline{W}_s = \arg \min_{-W_i + z_i^2 = 0} F(\underline{W}) \quad (4.36)$$

onde \underline{z} é um vetor contendo as chamadas *variáveis de folga*. Este problema, com restrições apenas de igualdade, é um caso especial do problema tratado no teorema E.1 do apêndice E. Portanto, como resultado do teorema, o problema pode ser tratado considerando agora que as variáveis do problema não são apenas \underline{W} , mas também \underline{z} e $\underline{\Phi}$, onde $\underline{\Phi}$ são os *multiplicadores de Lagrange*. Portanto busca-se \underline{W}^* , \underline{z}^* e $\underline{\Phi}^*$ que satisfaçam

$$[\underline{W}^*, \underline{z}^*, \underline{\Phi}^*]^T = \arg \min L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) \quad (4.37)$$

onde

$$L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = F(\underline{W}) + \sum_{i=1}^N \Phi_i (-W_i + z_i^2). \quad (4.38)$$

Uma forma de expressar as condições KKT, explicitadas no apêndice E, é a partir das seguintes condições de estacionariedade do funcional $L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi})$:

$$\frac{\partial}{\partial W_j} L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = 0, \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial z_k} L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = 0 \quad (4.40)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial \Phi_l} L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = 0. \quad (4.41)$$

Explicitamente, têm-se que

$$\frac{\partial}{\partial W_j} L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = \frac{\partial}{\partial W_j} F(\underline{W}) - \Phi_j = (\underline{J}^T \underline{R})_j - \Phi_j = 0, \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial z_k} L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = -2\Phi_k z_k = 0 \quad (4.43)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial \Phi_l} L(\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Phi}) = -W_l + z_l^2 = 0. \quad (4.44)$$

Nota-se que se trata de um sistema não linear nas variáveis $[\underline{W}, \underline{z}, \underline{\Psi}]^T$. Para a solução deste problema, utiliza-se o método de Newton.

Considera-se as derivadas parciais da equação (4.42):

$$\frac{\partial}{\partial W_m} \left((\underline{J}^T \underline{R})_j - \Phi_j \right) = \frac{\partial}{\partial W_m} \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial \tau_i(\underline{W})}{\partial W_j} R_i \right) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial W_m} \left(\frac{\partial \tau_i(\underline{W})}{\partial W_j} R_i \right) \quad (4.45)$$

$$= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \tau_i(\underline{W})}{\partial W_m \partial W_j} R_i + \frac{\partial \tau_i(\underline{W})}{\partial W_j} \frac{\partial R_i}{\partial W_m} \right) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \tau_i(\underline{W})}{\partial W_m \partial W_j} R_i + \frac{\partial \tau_i(\underline{W})}{\partial W_j} \frac{\partial \tau_i(\underline{W})}{\partial W_m} \right) \quad (4.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial W_m} \left((\underline{J}^T \underline{R})_j - \Phi_j \right) = K_{jm} + (\underline{J}^T \underline{J})_{jm} \quad (4.47)$$

onde

$$K_{jm} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 \tau_i(\underline{W})}{\partial W_m \partial W_j} R_i. \quad (4.48)$$

Considerando a expansão dos termos das equações (4.42)-(4.44) até primeira ordem, obtém-se os gradientes associados à $(n+1)$ -ésima iteração de Newton:

$$\begin{aligned} (\underline{J}^T \underline{R})_j^{n+1} - \Phi_j^{n+1} &\approx (\underline{J}^T \underline{R})_j^n - \Phi_j^n + \sum_{m=1}^N \frac{\partial}{\partial W_m} \left((\underline{J}^T \underline{R})_j - \Phi_j \right)_{\underline{W}=\underline{W}^n} \Delta W_m^n + \\ &+ \sum_{l=1}^N \frac{\partial}{\partial \Phi_l} \left((\underline{J}^T \underline{R})_j - \Phi_j \right)_{\underline{\Phi}=\underline{\Phi}^n} \Delta \Phi_l^n \end{aligned} \quad (4.49)$$

$$-(2\Phi_k z_k)^{n+1} \approx -2\Delta \Phi_k^n z_k^n - 2\Phi_k^n \Delta z_k^n - 2\Phi_k^n z_k^n \quad (4.50)$$

e

$$(-W_l + z_l^2)^{n+1} \approx -W_l^n - \Delta W_l^n + (z_l^2)^n + 2z_l^n \Delta z_l^n. \quad (4.51)$$

Reescrevendo as equações matricialmente:

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \underline{W}} \right)^{n+1} \approx (\underline{J}^T \underline{R})^n - \underline{\Phi}^n + \left(\underline{K}^n + (\underline{J}^T \underline{J})^n \right) \underline{\Delta W}^n - \underline{\Delta \Phi}^n \quad (4.52)$$

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \underline{z}} \right)^{n+1} \approx -\text{diag}(z^n) \underline{\Delta \Phi}^n - \text{diag}(\underline{\Phi}^n) \underline{\Delta z}^n - \underline{Z}_{\Phi}^n \quad (4.53)$$

onde $[\underline{Z}_{\Phi}^n]_k \equiv \Phi_k^n z_k^n$, e

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \underline{\Phi}} \right)^{n+1} \approx -\underline{\Delta W}^n + 2\text{diag}(z^n) \underline{\Delta z}^n - \underline{W}^n + \underline{Z}_2^n. \quad (4.54)$$

onde $[\underline{Z}_2^n]_l = (z_l^2)^n$. Define-se

$$\underline{A}_R \equiv \begin{pmatrix} \underline{K}^n + (\underline{J}^T \underline{J})^n & \underline{0} & -\underline{1} \\ \underline{0} & -\text{diag}(\underline{\Phi}^n) & -\text{diag}(z^n) \\ -\underline{1} & 2\text{diag}(z^n) & \underline{0} \end{pmatrix}, \quad (4.55)$$

$$\underline{b}_R \equiv \begin{bmatrix} \underline{\Phi}^n - (\underline{J}^n)^T \underline{R}^n \\ \underline{Z}_\Phi^n \\ \underline{W}^n - \underline{Z}_2^n \end{bmatrix} \quad (4.56)$$

e

$$\underline{\Delta W}_R \equiv \begin{bmatrix} \underline{\Delta W}^n \\ \underline{\Delta Z}^n \\ \underline{\Delta \Phi}^n \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

de tal forma que minimizar $[\frac{\partial L}{\partial \underline{W}}, \frac{\partial L}{\partial \underline{Z}}, \frac{\partial L}{\partial \underline{\Phi}}]^T$ implica em obter $\underline{\Delta W}_R^*$ que satisfaça:

$$\underline{\Delta W}_R^* = \arg \min_{\underline{\Delta W}_R \in \mathbb{R}^{3N}} \left\| \underline{A}_R \underline{\Delta W}_R - \underline{b}_R \right\|_2^2. \quad (4.58)$$

Com a regularização de Tikhonov,

$$\underline{\Delta W}_R^* = \arg \min_{\underline{\Delta W}_R \in \mathbb{R}^{3N}} \left\{ \left\| \underline{A}_R \underline{\Delta W}_R - \underline{b}_R \right\|_2^2 + \lambda_R^L \left\| \underline{\Delta W}_R \right\|_2^2 \right\}. \quad (4.59)$$

O problema considerando a estrutura multi-objetiva e o método de Tikhonov, é formulado a partir de manipulações análogas às da seção anterior e consiste em obter $\underline{\Delta W}_R^*$ tal que

$$\underline{\Delta W}_R^n = \arg \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^{3N}} \left\{ \left\| \underline{A}_R^* \underline{x} - \underline{b}_R^* \right\|_2^2 + \lambda_R \left\| \underline{x} \right\|_2^2 \right\}, \quad (4.60)$$

onde

$$\underline{A}_R^* = \begin{bmatrix} \sqrt{\vartheta_1} \left(\underline{A}_R \right)_1^n \\ \sqrt{\vartheta_2} \left(\underline{A}_R \right)_2^n \\ \vdots \\ \sqrt{\vartheta_{N_e}} \left(\underline{A}_R \right)_{N_e}^n \end{bmatrix} \quad (4.61)$$

e

$$\underline{b}_R^* = \begin{bmatrix} \sqrt{\vartheta_1} (b_R)_1^n \\ \sqrt{\vartheta_2} (b_R)_2^n \\ \vdots \\ \sqrt{\vartheta_{N_e}} (b_R)_{N_e}^n \end{bmatrix}. \quad (4.62)$$

A implementação da metodologia descrita nesta seção é feita modificando o algoritmo 2, de modo que em cada iteração o problema (4.60) é resolvido:

ALGORITMO 3: SOLUÇÃO DOS PROBLEMAS 6 E 7 VIA VARIÁVEIS DE FOLGA

1. Definir $\epsilon_1, N_e, \underline{W}_0, N_{nw}, \epsilon_{nw}$ e $\underline{W}^n = \underline{W}_0$.
2. Interpolar dados e diferenciar numericamente. Definir N_t .
Para cada passo de Newton $n \leq N_{nw}$, com o passo associado ao experimento $j \leq N_e$:
3. Obter $\left(\underline{A}_R\right)_j^n$ e $\left(\underline{b}_R\right)_j^n$ definidos nas equações (4.55) e (4.56); adicionar à matriz \underline{A}^* e ao vetor \underline{b}^* , definidos respectivamente nas equações (4.61) e (4.62).
Ao final da última iteração em j ($j = N_e$),
4. Obter $\underline{\Delta W}^n$, i.e. resolver a equação (4.60). Calcular $\underline{W}^{n+1} = \underline{\Delta W}^n + \underline{W}^n$.
5. Finalizar programa caso critério de convergência (tolerância associada a ϵ_{nw}) for satisfeito ou $n > N_{nw}$.

Em alguma iteração do método, uma ou mais variáveis representadas a partir do vetor $\underline{\Delta W}_R^n$ podem não satisfazer as restrições do problema original (4.33), embora, caso o método convirja, espera-se que a solução satisfaça tais restrições. Entretanto, alguns problemas numéricos associados com a violação das restrições do problema podem ocorrer, como mencionado no capítulo 5. Portanto, uma segunda forma para o tratamento de problemas com restrição é formulada, na qual não há violação das restrições do problema em nenhum passo do método.

4.7.2 Conjunto ativo

A metodologia e os resultados a serem apresentados nesta subseção foram adaptados do capítulo 16 do livro de Nocedal e Wright (2006). Com o intuito de adequar os problemas tratados neste trabalho com a metodologia do livro, considera-se, o problema da n -ésima iteração de Newton, descrito pelo funcional apresentado na equação (4.17), i.e.

$$\mathcal{F}_A(\underline{\Delta W}^n) = \|\underline{R}^n + \underline{J}(\underline{W}^n)\underline{\Delta W}^n\|_2^2 \quad (4.63)$$

A solução do problema $\underline{\Delta W}_A^n$ deve satisfazer as restrições associadas aos parâmetros, tal que todos são não negativos em todas as iterações, i.e., tomando que $W_i^0 \geq 0$ para todo $i = 1, 2, 3 \dots N$, têm-se que

$$\underline{\Delta W}_A^n = \arg \min_{W_i^n + \underline{\Delta W}_i^n \geq 0} \mathcal{F}_A(\underline{\Delta W}^n) \quad (4.64)$$

O método de conjuntos ativos consiste em solucionar problemas como (4.64), construindo uma subsequência contida em \mathbb{R}^N que converge para uma solução que satisfaz as condições KKT, descritas no apêndice E. Tendo em vista que o problema definido a partir da equação (4.63) é convexo, o método foi escolhido devido ao baixo número de iterações apresentado posteriormente nos resultados, o que não justifica os passos mais caros do método de pontos interiores (NOCEDAL; WRIGHT, 2006). Considera-se o k -ésimo termo dessa subsequência. Define-se um conjunto contendo todos os índices associados às restrições ativas (definição E.1). Este é denominado *conjunto ativo* e será representado por \mathcal{W}_k . Considera-se que o $k + 1$ -ésimo termo desta subsequência,

$\underline{\Delta W}^{n,k+1}$, é definido como $\underline{\Delta W}^{n,k} + \alpha_k \underline{a}^k$, tal que $\alpha_k \in [0, 1]$ e \underline{a}^k satisfaz o problema considerando apenas as restrições ativas, i.e. tal que solucione o problema

$$\begin{aligned} \min_{\underline{a} \in \mathbb{R}^N} \quad & \mathcal{F}_A(\underline{\Delta W}^{n,k} + \underline{a}) \\ \text{t.q.} \quad & a_i = 0, \quad i \in \mathcal{W}_k. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Considerando o método de regularização de Tikhonov, juntamente com o critério de escolha de parâmetro de regularização curva L, o problema (4.65) é reescrito como

$$\begin{aligned} \min_{\underline{a} \in \mathbb{R}^N} \quad & [\mathcal{F}_A(\underline{\Delta W}^{n,k} + \underline{a}) + \lambda_R^L \|\underline{a}\|_2^2] \\ \text{t.q.} \quad & a_i = 0, \quad i \in \mathcal{W}_k. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Considerando, por outro lado, a estrutura multi-objetiva, definida na seção 4.6, juntamente com o método de Tikhonov/curva L, têm-se que o passo \underline{a} deve solucionar o problema

$$\begin{aligned} \min_{\underline{a} \in \mathbb{R}^N} \quad & [\mathcal{F}(\underline{\Delta W}^{n,k} + \underline{a}) + \lambda_R^L \|\underline{a}\|_2^2] \\ \text{t.q.} \quad & a_i = 0, \quad i \in \mathcal{W}_k. \end{aligned} \quad (4.67)$$

onde \mathcal{F} é definido na equação (4.29). Nota-se que para todos os tipos de problemas definidos anteriormente, a única diferença será qual dos funcionais será minimizado: \mathcal{F}_A , $\mathcal{F}_A + \lambda_R^L \|\underline{a}\|_2^2$ ou $\mathcal{F} + \lambda_R^L \|\underline{a}\|_2^2$: o restante da abordagem é semelhante para os problemas (4.65), (4.66) ou (4.67).

É possível notar que, caso $\underline{\Delta W}^{n,k}$ satisfaça as restrições ativas, i.e., $\Delta W_i^{n,k} + W_i^n \geq 0$ então $\Delta W_i^{n,k+1} = \Delta W_i^{n,k} + \alpha_k a_i + W_i^n = \Delta W_i^{n,k} + W_i^n \geq 0$. Como $\Delta W_i^{n,0}$ pode ser definido de maneira a satisfazer as restrições então todos os termos da sequência construídos da maneira descrita acima irão satisfazer as restrições ativas.

O termo α_k é utilizado para limitar o passo \underline{a}^k , tal que nenhuma das restrições *não* ativas sejam violadas. Neste sentido, pode-se provar que α_k definido como²

$$\alpha_k \equiv \min \left(1, \min_{i \notin \mathcal{W}_k, a_i^k \leq 0} \frac{-W_i^n - \Delta W_i^{n,k}}{a_i^k} \right) \quad (4.68)$$

possibilita a não violação de nenhuma restrição no passo $k + 1$: caso

$$\min_{i \notin \mathcal{W}_k, a_i^k \leq 0} \frac{-W_i^n - \Delta W_i^{n,k}}{a_i^k} < 1, \quad (4.69)$$

então alguma das restrições inativas foi violada e portanto o passo \underline{a}^k deve ser reduzido, de maneira a satisfazer esta restrição. A restrição que limita mais o passo³ irá se tornar ativa e, portanto, o conjunto ativo é redefinido; caso

$$\min_{i \notin \mathcal{W}_k, a_i^k \leq 0} \frac{-W_i^n - \Delta W_i^{n,k}}{a_i^k} \geq 1, \quad (4.70)$$

então a solução do problema não viola nenhuma das restrições inativas e portanto o conjunto ativo permanece o mesmo.

² Para mais detalhes, ver Nocedal e Wright (2006).

³ Quanto menor for o lado esquerdo da inequação (4.69), mais restrito o passo, como pode ser visto na equação (4.68).

O método irá convergir quando $\|\underline{a}^k\| \leq \epsilon_a$, onde ϵ_a é uma tolerância definida na inicialização do problema. Considera-se, hipoteticamente, que o método convirja na iteração k_a . Então, para que $\underline{\Delta W}^{n,k_a}$ seja solução do problema, as condições KKT devem ser satisfeitas. Da equação (E.4), é necessário que os multiplicadores de Lagrange λ_i^A , para todo $i \in \mathcal{W}_{k_a}$, satisfaçam a equação

$$2\lambda_i^A = \left[\underline{J}^T \underline{J} \underline{\Delta W}^{n,k_a} \right]_i + [\underline{R}^n]_i \quad (4.71)$$

tal que $\lambda_i^A \geq 0$, $i \in \mathcal{W}_{k_a}$. Caso $\lambda_i^A \leq 0$ então o conjunto ativo é redefinido, retirando alguma das restrições ativas.

O algoritmo a seguir resume o método de conjuntos ativos⁴:

ALGORITMO 4: MÉTODO DE CONJUNTOS ATIVOS

1. Definir ϵ_A , $\underline{\Delta W}^{n,0}$ (que satisfaça as restrições), um número máximo de iterações N_{max} , $k = 0$ e \mathcal{W}_0 (neste trabalho, definiu-se $\mathcal{W}_0 = \emptyset$ e $\underline{\Delta W}^{n,0} = \underline{0}$).

Enquanto $k \leq N_{max}$ faça

2. Resolver a equação (4.65) (ou as equações (4.66) ou (4.67)) para encontrar \underline{a}^k .

Se $\|\underline{a}^k\|_2 \leq \epsilon_A$ faça

- a) Obter os multiplicadores de Lagrange λ_i^A , a partir da equação (4.71), utilizando \mathcal{W}_k .

Se $\lambda_i^A \geq 0$ para todo $i \in \mathcal{W}_k$, então

- i. **Pare** o programa com solução $\underline{\Delta W}_A^n = \underline{\Delta W}^{n,k}$

Senão

- i. $j \leftarrow \arg \min_{l \in \mathcal{W}_k} \lambda_l^A$

- ii. $\underline{\Delta W}^{n,k+1} = \underline{\Delta W}^{n,k}$ e $\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k \setminus \{j\}$

Senão ($\|\underline{a}^k\|_2 > \epsilon_A$)

- a) Calcular α_k a partir da equação 4.68.

- b) $\underline{\Delta W}^{n,k+1} = \underline{\Delta W}^{n,k} + \alpha_k \underline{a}^k$.

Se $\alpha_k \leq 1$

- i. $\mathcal{W}_{k+1} = \{\mathcal{W}_k, l\}$ onde $l = \arg \min_{i \notin \mathcal{W}_k, \alpha_i^k \leq 0} \frac{-W_i^n - \Delta W_i^{n,k}}{\alpha_i^k}$.

Senão ($\alpha_k = 1$)

- i. $\mathcal{W}_{k+1} = \mathcal{W}_k$.

3. $k = k + 1$.

Utilizando o algoritmo 4, a obtenção da solução do problema 6 é redefinida, de modo a modificar o algoritmo 2 da seguinte maneira:

⁴ Algoritmo adaptado do algoritmo 16.3 do livro de Nocedal e Wright (2006)

ALGORITMO 5: SOLUÇÃO DOS PROBLEMA 6 E 7 VIA CONJUNTOS ATIVOS

1. Definir $\epsilon_1, N_e, \underline{W}_0, N_{nw}, \epsilon_{nw}$ e $\underline{W}^n = \underline{W}_0$.
2. Interpolar dados e definir N_t .
Para cada passo de Newton $n \leq N_{nw}$, com o passo associado ao experimento $j \leq N_e$:
3. Obter \underline{A}_j^n e \underline{b}_j^n definidos nas equações (4.24) e (4.25); adicionar à matriz \underline{A}^* e ao vetor \underline{b}^* , definidos respectivamente nas equações (4.30) e (4.31).
Ao final da última iteração em j ($j = N_e$),
4. Obter $\underline{\Delta W}^n$, utilizando o algoritmo 4, i.e. $\underline{\Delta W}^n = \underline{\Delta W}_A^n$.
5. Finalizar programa caso critério de convergência (tolerância associada a ϵ_{nw}) for satisfeito ou $n > N_{nw}$.

Os algoritmos 1-5 são formulados considerando alguns resultados experimentais e algumas medidas feitas computacionalmente (tolerâncias, número de condição, entre outros). Alguns detalhes associados a forma na qual os problemas descritos anteriormente serão resolvidos são explicitados na sequência.

4.8 Estratégia geral e algumas considerações

Os resultados, a serem apresentados no próximo capítulo, foram obtidos considerando dois testes reológicos com materiais diferentes:

- Teste com imposição de taxa de deformação constante aplicado sobre uma amostra de óleo cru a 4º C; os dados deste teste foram extraídos, utilizando a ferramenta (disponibilizada na internet) *WebPlotDigitizer* (ROHATGI, 2015) do trabalho de Tarcha et al. (2015) e
- Teste com tensão constante aplicada sobre uma amostra de fluido de perfuração, a base de óleo a 25º C, com especificação BR-MUL 117; os dados, a serem apresentados, foram disponibilizados pelo Centro de Pesquisas em Reologia e Fluidos Não Newtonianos (CERNN) da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

A estratégia para o cumprimento dos objetivos mencionados no capítulo de introdução do trabalho é descrita em alguns passos:

1. Considerando os dados de óleo cru, utiliza-se o algoritmo 1 para obter as curvas $G \times \lambda$ e propor uma nova forma G_N para o módulo de cisalhamento;
2. A partir dos algoritmos 2, 3 ou⁵ 5, obter os parâmetros que melhor ajustam o modelo aos dados do teste com óleo cru;
3. Utilizando a nova proposta para o módulo de cisalhamento G_N e os algoritmos 2, 3 ou 5, obter os parâmetros do modelo que melhor ajustam o modelo aos dados do teste com fluido de perfuração.

⁵ Como será visto nos resultados, para cada problema considerado, um algoritmo apresentou melhores resultados que outros.

É importante mencionar que, como parte da estratégia, buscou-se primeiramente utilizar os algoritmos considerando o problema de forma irrestrita, i.e., os algoritmos 1-2 e, caso alguma das restrições tenham sido violadas (caso algum dos parâmetros para os quais a sequência convergiu é negativo), então lançou-se mão dos algoritmos 3-5.

As soluções dos problemas, quando mal-postos, foram obtidas por meio do método de Tikhonov, utilizando o critério para a determinação do parâmetro de regularização curva L. Neste sentido, os algoritmos 1-5 foram implementados utilizando o software MATLAB, utilizando algumas sub-rotinas do pacote *REGULARIZATION TOOLS* (HANSEN, 1994). O critério prático utilizado a priori para medir o mal condicionamento dos operadores foi definido por meio do número de condição: considerando o operador A , o número de condição $N_{co}(A)$ é definido (HANSEN, 1998) como

$$N_{co}(A) = \|A\|_2 \|A^\dagger\|_2. \quad (4.72)$$

Uma maneira computacional prática (e viável) de obter seu valor é, a partir da decomposição SVD do operador A (ver seção 3.2 para mais detalhes), obter a razão entre o maior λ_{max} e menor λ_{min} autovalores correspondentes, i.e.

$$N_{co}(A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}. \quad (4.73)$$

Caso $N_{co}(A) \geq \epsilon_1$, então o método de Tikhonov-curva L foi utilizado. Como será visto nos resultados, ϵ_1 variou com cada teste, para que a solução obtida fosse consistente.

É necessário enfatizar que a abordagem definida neste capítulo pode ser adaptada para outras propriedades do modelo, i.e., pode-se adaptar a metodologia descrita para obter o formato da função associada ao(s) coeficiente(s) de viscosidade. Uma outra possível adaptação da abordagem apresentada seria utilizá-la considerando outro modelo constitutivo e/ou mais de um tipo de microestrutura, i.e. mais de um parâmetro estrutural. No capítulo seguinte os resultados do trabalho são expostos.

5 Resultados e discussões

Os dados utilizados para a obtenção dos resultados apresentados neste capítulo foram obtidos a partir de dois testes, mencionados no capítulo anterior: teste de taxa de deformação constante, aplicado a uma amostra de óleo cru e teste de tensão constante, aplicado sobre uma amostra de fluido de perfuração a base de óleo. Na seção 5.1 são considerados os problemas associados aos dados de óleo cru. A partir destes dados, busca-se obter as curvas $G \times \lambda$ e propor uma nova forma para a função associada ao módulo de cisalhamento G . Ao final da seção, alguns ajustes de curva são feitos de forma a determinar os parâmetros que ajustam o modelo aos dados experimentais.

A robustez do modelo, considerando a proposta para o módulo de cisalhamento $G(\lambda)$ (obtida na seção 5.1) é averiguada, utilizando os dados da amostra de fluido de perfuração na seção 5.2. É feito, novamente, um ajuste de curvas, com o intuito de obter os parâmetros que aproximam a resposta do modelo aos dados experimentais.

5.1 Óleo cru

Uma estimativa inicial para os parâmetros do modelo é feita considerando a definição da função associada ao módulo de cisalhamento utilizada nos trabalhos de Azikri de Deus et al. (2016) e de Silva et al. (2014): $G = G_0 \exp\left(\frac{m}{\lambda}\right)$. Os parâmetros utilizados como estimativa inicial para a simulação do teste com óleo cru, foram obtidos a partir de considerações físicas expostas no trabalho de Silva (2015): $\eta_0 = 0,09 \text{ Pa.s}$, $\alpha = 15$, $\alpha_2 = 9,59$, $\kappa = 0,11 \text{ J/m}^3$, $\beta = 1$, $m = 10^{-6}$, $G_0 = 6,5 \text{ Pa}$ e $\zeta = 5 \times 10^5 \text{ J s/m}^3$. A comparação entre a simulação do modelo e os dados experimentais obtidos no trabalho de Tarcha et al. (2015) no regime permanente e transiente são feitas, respectivamente, nas figuras 5.1 e 5.2.

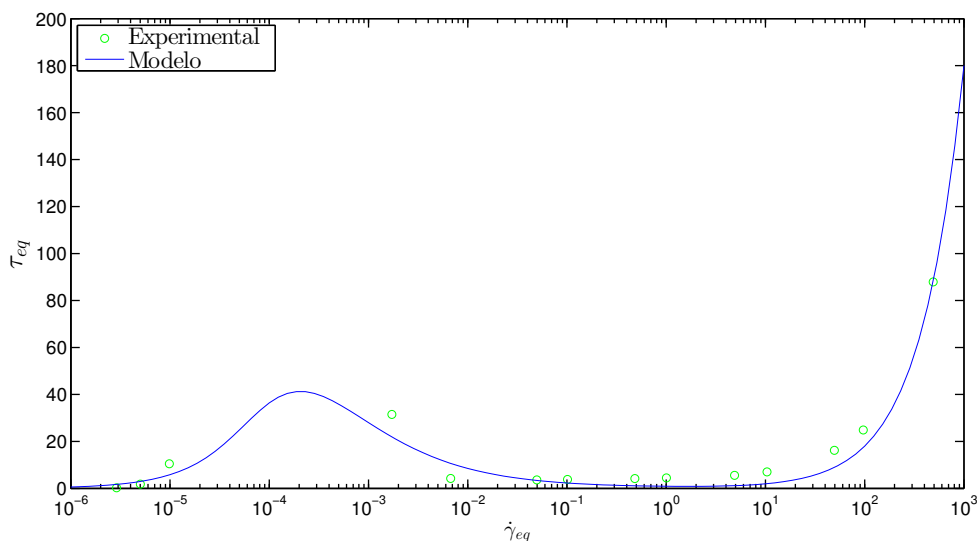


Figura 5.1 – Curva de escoamento: comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo

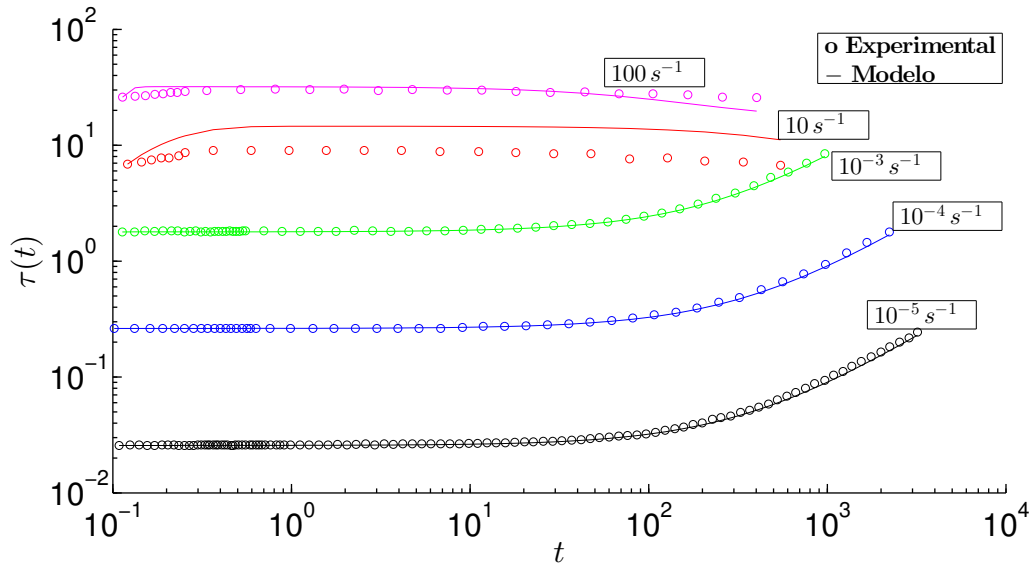


Figura 5.2 – Testes de taxa constante: comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo.

Os dados expostos na figura 5.1 foram obtidos a partir de aplicações de taxa de deformação constante, com duração de trinta minutos. Na figura 5.2, são aplicados patamares de taxa de deformação constante, com indicação da taxa ao lado da curva correspondente.

Nota-se que o comportamento das curvas obtidas a partir da simulação do modelo se aproximam dos dados experimentais, especialmente para pequenas taxas de deformação. É possível visualizar que para taxas de deformação maiores, as curvas experimentais se diferenciam significativamente daquelas obtidas a partir da simulação do modelo no início do teste. A seguir considera-se os resultados obtidos a partir da implementação do algoritmo 1, explicitado no capítulo anterior.

5.1.1 Uma nova abordagem para o módulo de cisalhamento

O objetivo, nesta etapa da abordagem, é obter uma expressão para o módulo de cisalhamento $G(\lambda)$ que minimize a diferença entre os resultados obtidos a partir da simulação do modelo e os dados experimentais. Considerando como estimativa, a priori, os parâmetros explicitados anteriormente, toma-se o problema 5: conhecidos os dados experimentais e os parâmetros não associados com a função $G(\lambda)$, i.e.,

$$\underline{W}_c = \begin{pmatrix} \eta_0 \\ \alpha \\ \kappa \\ \beta \\ \alpha_2 \\ \varsigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,09 \\ 15 \\ 0,11 \\ 1 \\ 9,59 \\ 5 \times 10^5 \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

obtem-se as curvas $G \times \lambda$ utilizando o algoritmo 1. Nas figuras 5.3 e 5.4, são apresentados os resultados obtidos para testes de taxa de deformação de 10 s^{-1} e 100 s^{-1} , respectivamente. É

importante mencionar que, devido à alta sensibilidade do problema a perturbações dos dados obtidos, não foi possível obter resultados consistentes para taxas pequenas de deformação.

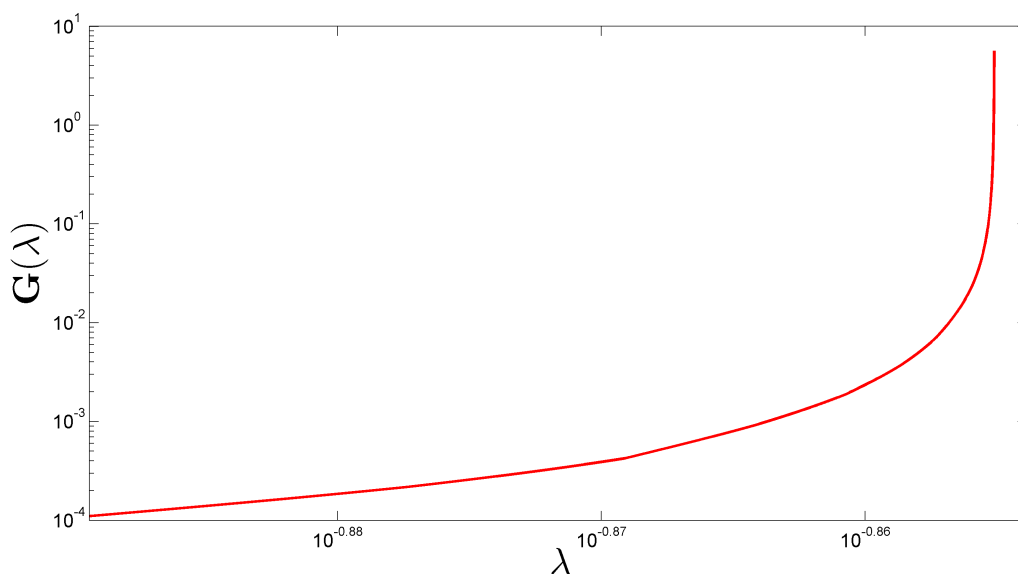


Figura 5.3 – Função associada ao módulo de cisalhamento utilizando uma abordagem via problemas inversos, $\dot{\gamma} = 10 \text{ s}^{-1}$.

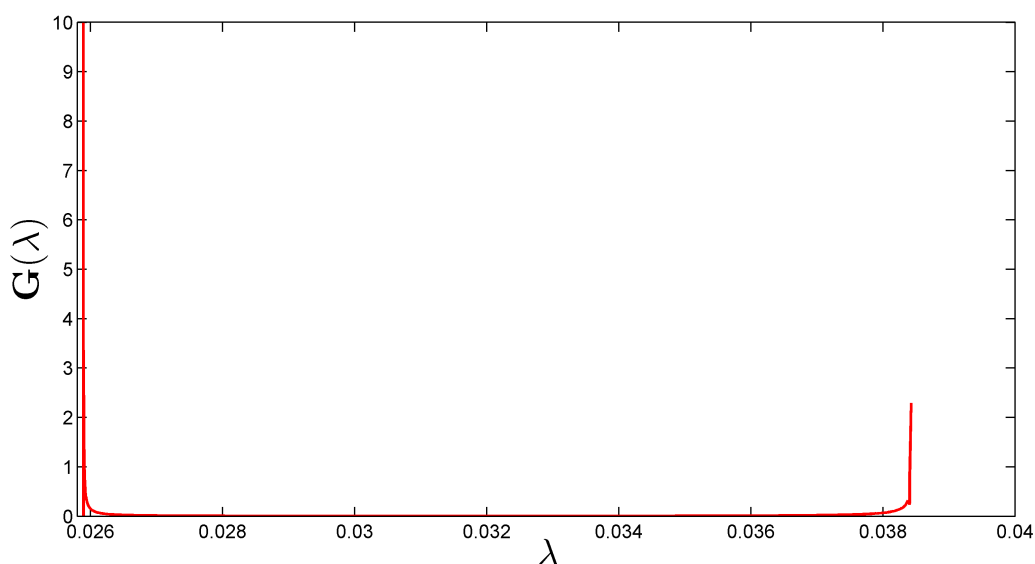


Figura 5.4 – Função associada ao módulo de cisalhamento utilizando uma abordagem via problemas inversos, $\dot{\gamma} = 100 \text{ s}^{-1}$.

Verifica-se que as curvas obtidas não correspondem com a proposta inicial para a função do módulo de cisalhamento, $G = G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$: para $\lambda \approx 0,026$, G cresce abruptamente, caracterizando uma mudança do comportamento viscoelástico para um comportamento viscoso; entretanto, para valores maiores de λ , G decai conforme λ reduz. A partir destas características, propõe-se, preliminarmente,

uma nova forma para o módulo de cisalhamento:

$$G_N = \lambda G_0^* \exp \frac{m^*}{\lambda}. \quad (5.2)$$

Prova-se, no apêndice C que esta proposta satisfaz os limites mencionados no capítulo 2. Considera-se, na sequência, a obtenção dos parâmetros do modelo para esta nova abordagem.

5.1.2 Obtenção de G_0^* e m^*

Os parâmetros não associados a $G_N(\lambda)$ são fixados novamente, com o intuito de obter valores de G_0^* e m^* que mais aproximam a simulação do modelo dos dados experimentais. Definindo \underline{W}_c como na equação (5.1), toma-se o problema 6, juntamente com o algoritmo 2 para sua solução: obter os parâmetros

$$\underline{W} \rightarrow \underline{W}_G \equiv \begin{pmatrix} m^* \\ G_0^* \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

que minimizem a diferença $\|\underline{\tau}^{exp} - \underline{\tau}(\underline{W}_G)\|^2$. Os resultados obtidos e alguns parâmetros computacionais são apresentados na tabela 5.1: "It." e "t" se referem ao número de iterações e o tempo de processamento necessários para a convergência, respectivamente e N_{co} é o número condição associado à última iteração. Foi considerado cada teste individualmente (testes com taxa de deformação 10^{-5} , 10^{-4} , ... $100 s^{-1}$), com $N_e = 1$, e ao final (na última linha), considerou-se a estrutura multi-objetiva, de modo a considerar todos os testes simultaneamente, i.e. $N_e = 5$. A mesma forma de exposição dos resultados foi utilizada nas tabelas 5.2 e 5.3. bgroup

Tabela 5.1 – Parâmetros computacionais associados ao algoritmo 2 para óleo cru, com \underline{W} e G_N definidos nas equações (5.3) e (5.2).

$\dot{\gamma} [s^{-1}]$	$\frac{\ \Delta \underline{W}\ }{\ \underline{W}\ }$	N_{co}	λ_R^L	t [s]	It.	m^*	G_0^*
10^{-5}	$7,77 \cdot 10^{-6}$	$1,94 \cdot 10^4$	77,34	14,93	3	0,0839	6,5125
10^{-4}	$9,09 \cdot 10^{-6}$	$2,53 \cdot 10^4$	469,25	10,28	3	0,1106	6,5175
10^{-3}	$8,64 \cdot 10^{-6}$	$5,10 \cdot 10^4$	1090,24	4,75	3	0,1240	6,5183
10	$3,00 \cdot 10^{-5}$	$2,72 \cdot 10^3$	1862,08	21,18	9	-1,0986	6,5345
100	$9,89 \cdot 10^{-5}$	$7,25 \cdot 10^4$	28127,77	132,37	12	-0,0746	6,5018
Multiobj.	$2,27 \cdot 10^{-6}$	18,02	3407,20	288,37	22	-0,1072	8,2620

A tolerância admitida para todos os testes foi $\frac{\|\Delta \underline{W}\|}{\|\underline{W}\|} \leq 10^{-4}$. Para a solução das equações diferenciais associadas, considerou-se discretizações temporais de $\Delta_t = 10^{-3} s$ para todos os testes, exceto para o teste de taxa $\dot{\gamma} = 100 s^{-1}$, onde, devido a alta sensibilidade da solução em relação à discretização, utilizou-se $\Delta_t = 10^{-6} s$.

O critério para a utilização do método de Tikhonov/curva L foi definido conforme o estabelecido no final do capítulo anterior: caso $N_{co} \geq \epsilon_1$, então o método seria utilizado. A priori, considerou-se $\epsilon_1 = 10^8$. Embora, nas primeiras iterações, onde $N_{co} \leq 10^8$, resultados consistentes para o passo $\Delta \underline{W}$, tenham sido obtidos sem a utilização de regularização, nas iterações posteriores, números de condição elevados ($N_{co} \gg 10^8$) foram observados e o método de Tikhonov/ curva L não pôde contornar o mal condicionamento dos operadores tratados nestas iterações. Portanto, não foi possível

convergir para uma solução do problema, utilizando este critério. Neste sentido, foi feita uma análise de ϵ_1 tal que possibilitasse a convergência do problema, utilizando a regularização para números de condição cada vez menores que 10^8 . Após feita esta análise, foi verificada a necessidade de considerar a regularização em todas as iterações em que $N_{co} \geq 10$ e, portanto, o método de Tikhonov/curva L foi utilizado nestas iterações para a obtenção de soluções consistentes.

Enfatiza-se que a minimização objetiva foi feita considerando todos os testes com o mesmo peso, i.e., foram considerados $\vartheta_j = 1$, para todo $j = 1, 2, 3, \dots, N_e$. Tal consideração é adotada em todo o trabalho, tendo em vista que não assume-se que um teste deva ter mais influência na obtenção de parâmetros que os demais.

Nota-se que, devido ao fato do algoritmo 2 ser feito para problemas irrestritos, os valores para os quais o método convergiu foram negativos e portanto inconsistentes. Logo, as restrições de não negatividade devem ser consideradas, o que é feito a seguir.

5.1.3 Abordagem via variáveis de folga

O algoritmo 3 foi a forma utilizada para obter a solução do problema anterior, considerando explicitamente as restrições sobre os parâmetros do modelo. O problema 6 é considerado novamente: obter \underline{W}_G que ajustam melhor o modelo aos dados experimentais. Os resultados e parâmetros computacionais respectivos, utilizando a abordagem via variáveis de folga, são apresentados na tabela 5.2.

Tabela 5.2 – Parâmetros computacionais associados ao algoritmo 3, considerando dados de óleo cru com $G = \lambda G_0^* \exp \frac{m^*}{\lambda}$.

$\dot{\gamma}$ [s^{-1}]	$\frac{\ \Delta W\ }{\ W\ }$	N_{co}	λ_R^L	t [s]	lt.	m^*	G_0^*
10^{-5}	$9,92 \cdot 10^{-5}$	$4,98 \cdot 10^2$	0,56	2,31	2	$1,03 \cdot 10^{-6}$	6,5004
10^{-4}	$3,87 \cdot 10^{-4}$	$1,67 \cdot 10^5$	0,54	4,89	6	$9,13 \cdot 10^{-4}$	6,5386
10^{-3}	$6,89 \cdot 10^{-5}$	$9,29 \cdot 10^4$	96,40	7,17	19	$1,02 \cdot 10^{-1}$	6,5386
10	$9,21 \cdot 10^{-5}$	$4,14 \cdot 10^8$	0,24	19,19	1	10^{-6}	6,5000
100	$3,29 \cdot 10^{-5}$	$8,26 \cdot 10^7$	1,81	25,25	2	$8,80 \cdot 10^{-4}$	6,4993
Multiobj.	$9,01 \cdot 10^{-5}$	$9,26 \cdot 10^7$	4691,61	25,25	1	10^{-6}	6,5000

A tolerância admitida para todos os testes foi a mesma que anteriormente, i.e. $\frac{\|\Delta W\|}{\|W\|} \leq 10^{-4}$, exceto para o teste de taxa $\dot{\gamma} = 10^{-4} s^{-1}$ onde não foi possível obter uma convergência para o método utilizando tolerâncias inferiores a $5 \times 10^{-4} s^{-1}$: os parâmetros oscilaram em torno dos parâmetros apresentados na tabela, mas não convergiram utilizando tolerâncias inferiores. É válido enfatizar que a discretização temporal para a solução das equações diferenciais envolvidas, variou, de modo a tornar a solução numericamente estável e o tempo computacional curto: para testes com taxa de deformação de 10^{-5} , 10^{-4} e 10^{-3} , foram consideradas $\Delta_t = 10^{-2}$ e para os outros testes, considerou-se $\Delta_t = 10^{-4}$.

O critério para a utilização do método de Tikhonov/curva L foi definido a priori, similarmente ao caso anterior: $\epsilon_1 = 10^8$. Entretanto, problemas semelhantes ao discutido anteriormente foram encontrados: caso o método não fosse considerado nas primeiras iterações, onde os números de condição eram baixos, então em iterações posteriores, não foi possível obter soluções consistentes

para operadores com números de condição altos. Foi feita uma análise novamente considerando a regularização para números de condição cada vez menores que 10^8 : foi verificada a necessidade de considerar a regularização em todas as iterações nas quais $N_{co} \geq 100$.

O parâmetro G_0^* não variou significativamente em relação ao estipulado a priori, i.e. 6,5 Pa. Entretanto, m^* variou significativamente de um teste em relação aos outros: em testes de taxa de deformação de 10^{-5} e 10 s^{-1} , os parâmetros foram próximos àqueles estipulados inicialmente enquanto em outros testes, parâmetros de ordens diferentes foram obtidas. Utilizando a estrutura multiobjetiva, na primeira iteração o critério de convergência já havia sido satisfeito e portanto os mesmos parâmetros iniciais foram obtidos. Nas figuras 5.5 a 5.9 são explicitadas as comparações entre os modelos utilizando os parâmetros obtidos na tabela.

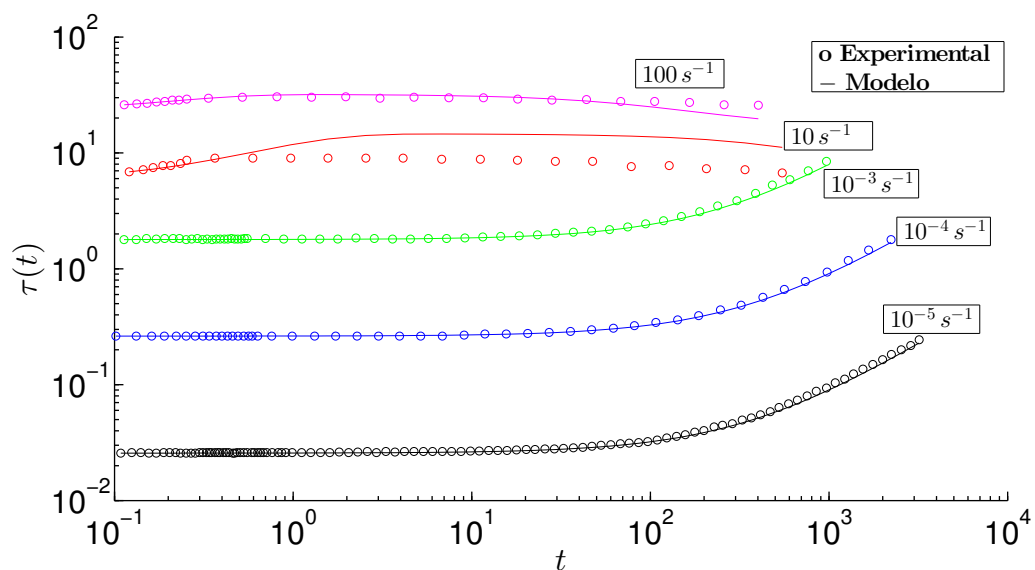


Figura 5.5 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 1,03 \cdot 10^{-6}$ e $G_0^* = 6,5004$.

As simulação do modelo explicitadas nas figuras 5.5, 5.6, 5.8 e 5.9 apresentaram melhor correspondência com os dados experimentais em relação à figura 5.7, como pode ser visto a partir de uma inspeção das figuras 5.5-5.9. Dentre estas, a simulação utilizando os parâmetros obtidos a partir da estrutura multiobjetiva ($m^* = 1,00 \cdot 10^{-6}$ e $G_0^* = 6,5000$, figura 5.9) possibilitou uma maior correspondência com os dados experimentais, quando comparado ao modelo com a proposta $G = G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$.

As curvas L obtidas na última iteração para cada teste ($N_e = 1$) são expostas nas figuras 5.10a-5.10e, e na figura 5.11f, a curva L obtida utilizando a estrutura multiobjetiva é apresentada ($N_e = 5$).

Nota-se, a partir dos números de condição da tabela 5.2 e das figuras 5.10a-5.10f, que para os testes com números de condições mais elevados (de ordem maior ou igual a 10^4) o formato em "L" das curvas se tornam mais acentuado. Tal comparação fica evidente ao averiguar a diferença entre a curva da figura 5.10a (menor número de condição, de ordem de grandeza 10^2) e da figura 5.10d (maior número de condição, de ordem de grandeza 10^8). Na subseção a seguir, os parâmetros

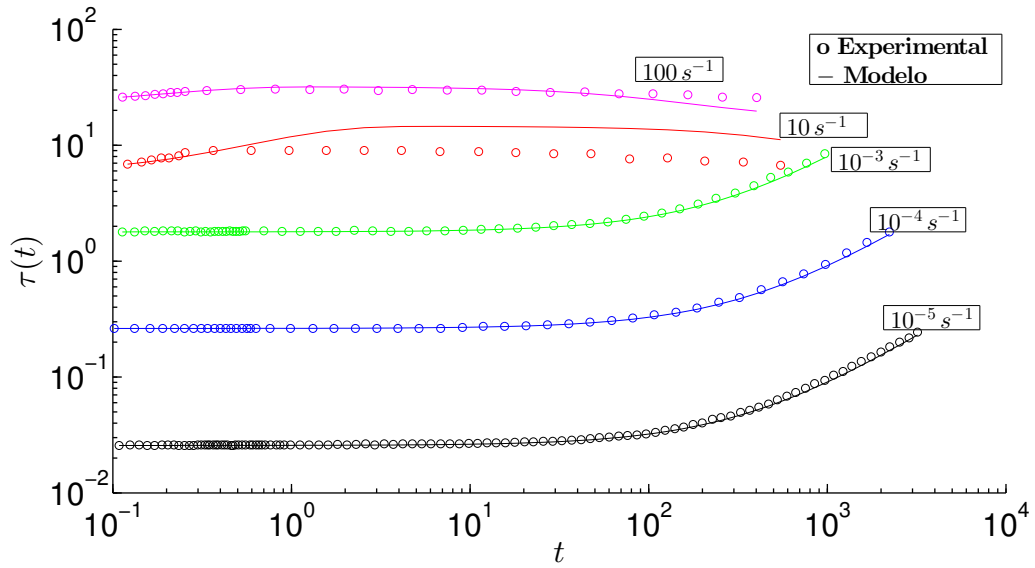


Figura 5.6 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 9,13 \cdot 10^{-4}$ e $G_0^* = 6,5386$.

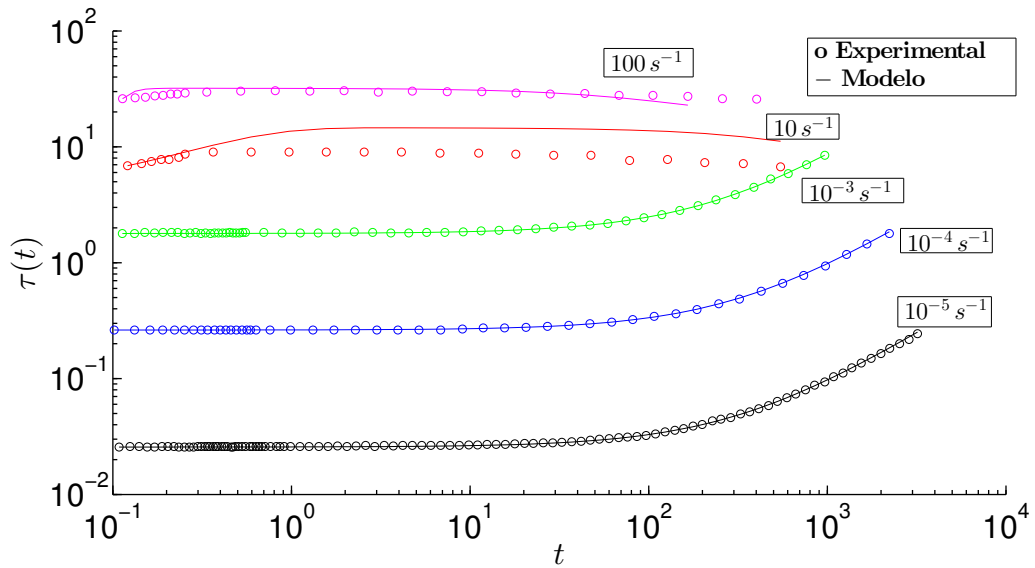


Figura 5.7 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 1,02 \cdot 10^{-1}$ e $G_0^* = 6,5386$.

\underline{W}_c não são mais considerados fixos e portanto são considerados juntamente com G_0^* e m^* para a minimização da diferença entre a resposta do modelo e os dados experimentais.

5.1.4 Considerando todos parâmetros do modelo

O algoritmo 2 foi utilizado nesta etapa do trabalho, considerando todos os parâmetros do modelo, i.e., com

$$\underline{W} = [\eta_0 \quad \alpha \quad \kappa \quad \beta \quad \alpha_2 \quad \varsigma \quad m^* \quad G_0^*]^T. \quad (5.4)$$

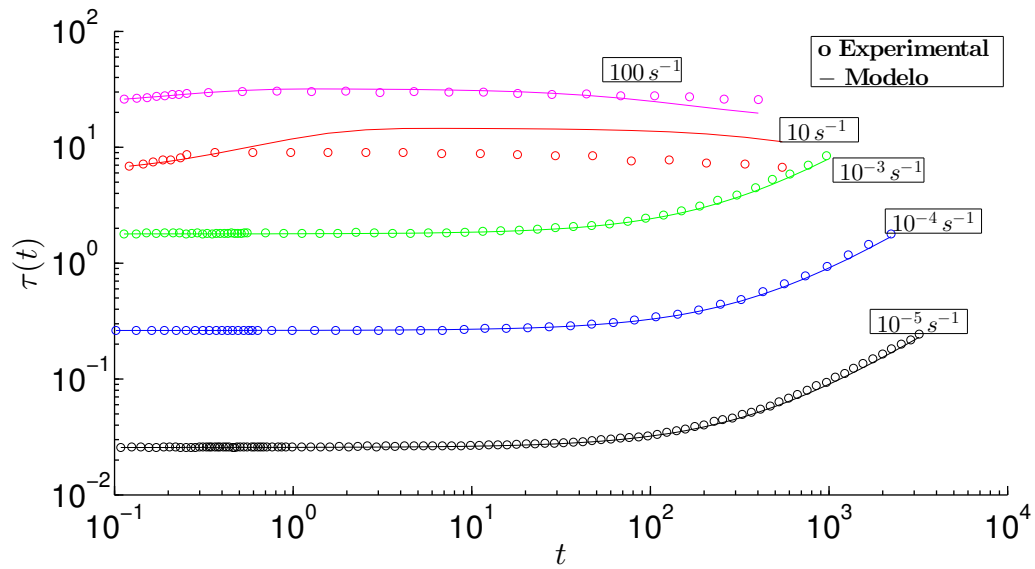


Figura 5.8 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 8,80 \cdot 10^{-4}$ e $G_0^* = 6,4993$.

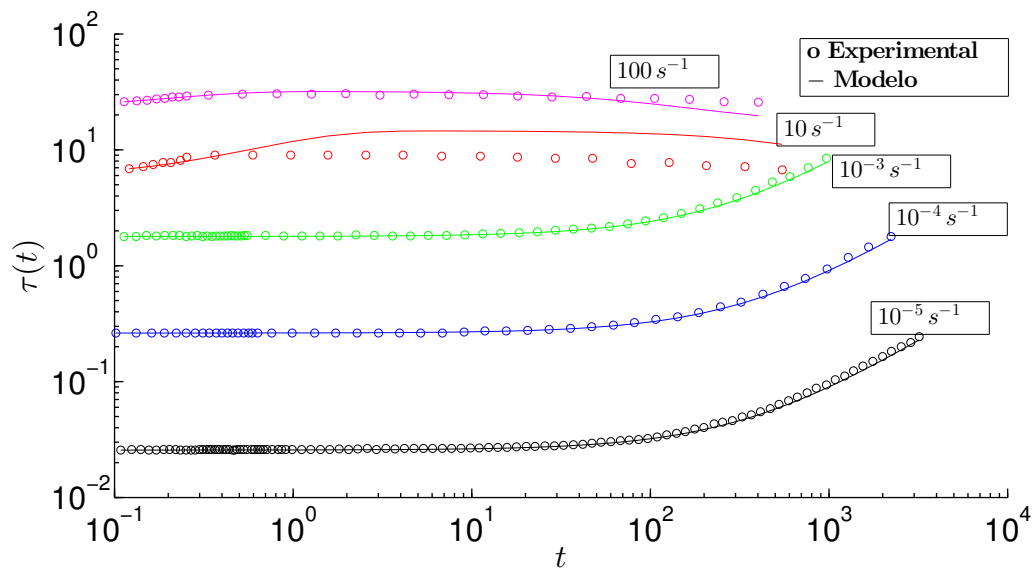


Figura 5.9 – Comparação entre os dados experimentais e a resposta do modelo: $m^* = 1,00 \cdot 10^{-6}$ e $G_0^* = 6,5000$.

Como mencionado, o algoritmo pode ser utilizado de forma similar à anterior para este problema. É necessário enfatizar que o método utilizado, não considera explicitamente as restrições de não negatividade do problema, como no caso dos algoritmos 3 e 5. Em todos os testes, o critério de convergência, $\frac{\|\Delta W\|}{\|W\|} \leq 10^{-4}$, foi satisfeito na primeira iteração e portanto os parâmetros obtidos, utilizando o novo formato G_N , foram: $\eta_0 = 0,09 Pa.s$, $\alpha = 15$, $\alpha_2 = 9,59$, $\kappa = 0,11 J/m^3$, $\beta = 1$, $m^* = 10^{-6}$, $G_0^* = 6,5 Pa$ e $\zeta = 5 \times 10^5 J s/m^3$. Os parâmetros computacionais são representados na tabela 5.3, no mesmo formato que anteriormente para este problema. Para todos os resultados obtidos, foi considerada a discretização temporal $\Delta_t = 10^{-3} s$ na solução das equações diferenciais

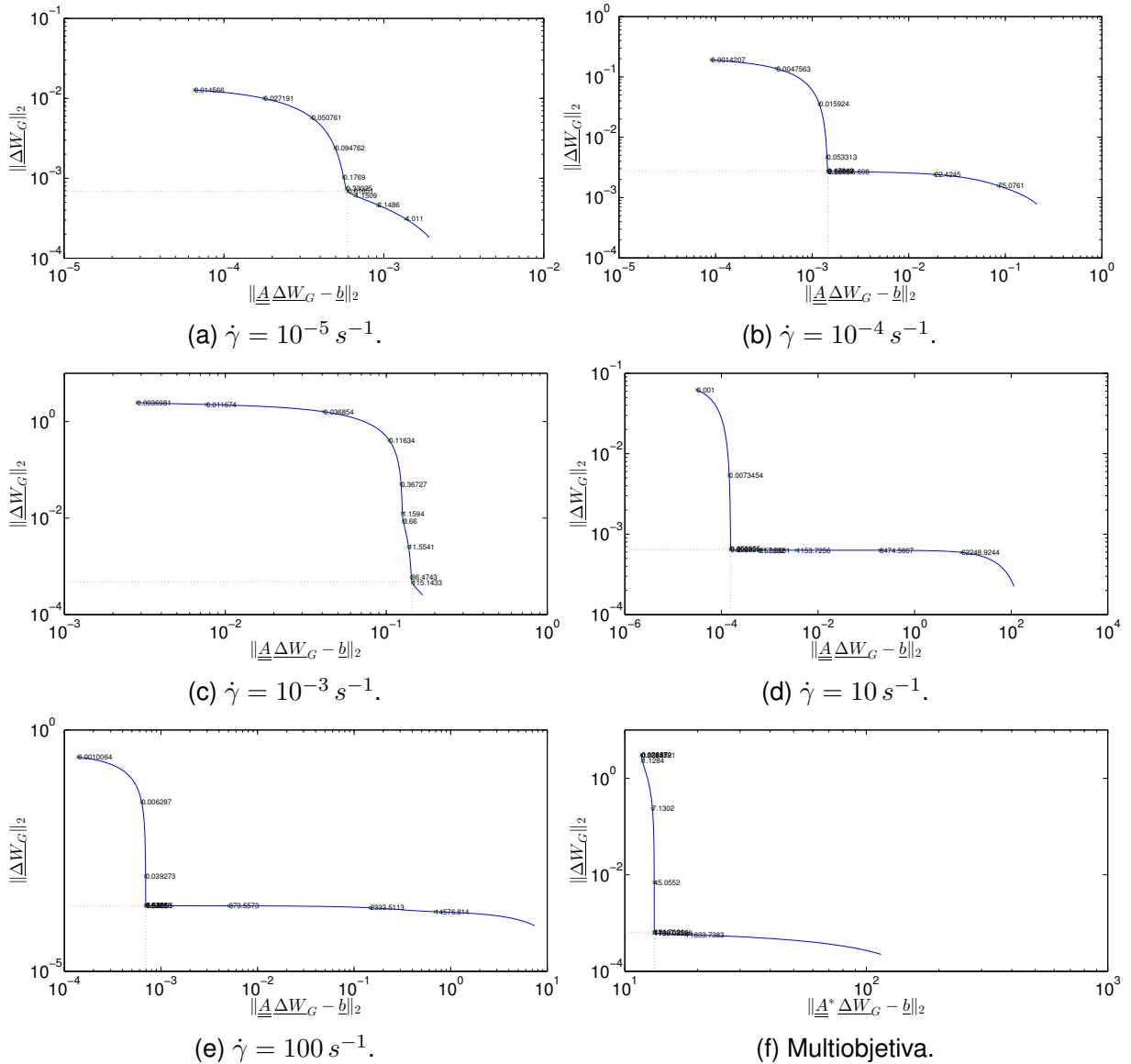


Figura 5.10 – Curvas L obtidas a partir do algoritmo 3, via variável de folga para testes de taxa de deformação constante: $G = G_0^* \lambda \exp\left(\frac{m^*}{\lambda}\right)$

obtidas.

Foi feita uma análise, novamente, considerando a regularização para números de condição cada vez menores que 10^8 , tendo em vista que utilizando este critério, não foi possível obter soluções consistentes devido aos problemas mencionados para os dois casos descritos anteriormente. A partir desta análise, verificou-se que era necessário considerar $\epsilon_1 = 10^6$, i.e. que o método de Tikhonov/curva L fosse utilizado nas iterações de Newton em que $N_{co} \geq 10^6$.

As curvas L obtidas, considerando individualmente cada teste ($N_e = 1$), são vistas nas figuras 5.11a a 5.11e. A curva associada a minimização multiobjetiva é apresentada na figura 5.11f.

O formato das curvas 5.11a a 5.11f difere dos resultados expostos nas figuras 5.10a a 5.10f, pois aparentam ter mais de uma quina. Em outras palavras, existem mais de uma região com elevada curvatura em cada curva, fazendo com que, possivelmente, o critério de curva L retorne parâmetros de regularização não próximos ao parâmetro ótimo, i.e., que minimiza as duas parcelas de erros

Tabela 5.3 – Parâmetros computacionais associados ao algoritmo 2 com dados de óleo cru, considerando \underline{W} definido na equação (5.4) e $G = \lambda G_0^* \exp \frac{m^*}{\lambda}$.

$\dot{\gamma} [s^{-1}]$	$\frac{\ \Delta \underline{W}\ }{\ \underline{W}\ }$	N_{co}	λ_R^L	$t [s]$
10^{-5}	$2,49 \cdot 10^{-6}$	$3,93 \cdot 10^{23}$	0,3125	17,4255
10^{-4}	$6,53 \cdot 10^{-6}$	$3,92 \cdot 10^{23}$	1,7999	12,1981
10^{-3}	$1,69 \cdot 10^{-7}$	$2,11 \cdot 10^{22}$	686,9803	5,4354
10	$7,83 \cdot 10^{-6}$	$3,75 \cdot 10^7$	21,8151	3,1493
100	$3,69 \cdot 10^{-6}$	$5,11 \cdot 10^7$	58,8218	2,5480
Multiobjetiva	$9,39 \cdot 10^{-8}$	$2,02 \cdot 10^7$	25069,7863	45,2883

associadas ao método de Tikhonov: $\|\Delta \underline{W}\|$ e $\|\underline{A} \Delta \underline{W} - \underline{b}\|$. Entretanto os resultados apresentados são consistentes pois apresentam baixo erro relativo ($\|\Delta \underline{W}\|$) e os resultados da simulação, vistos na figura 5.9, são consistentes quando comparados com os dados experimentais.

Importante mencionar que o resultado, utilizando a estrutura multiobjetiva, obtido na seção anterior e os resultados obtidos nesta seção coincidem: os mesmos parâmetros foram obtidos. Portanto, a comparação dos dados experimentais com o modelo, simulado a partir dos parâmetros obtidos nesta seção, seria a mesma que aquela apresentada na figura 5.9. Tendo em vista que ambos os resultados associados a nova proposta G_N para o módulo de cisalhamento coincidem, compara-se a simulação do modelo utilizando esta função com a simulação a partir da função definida a priori $G(\lambda)$: expõe-se nas figuras 5.12a a 5.12e, para cada teste de taxa de deformação constante, a solução das equações do modelo utilizando G e G_N e os dados experimentais.

É perceptível que o novo modelo para o módulo de cisalhamento apresenta resultados mais próximos com os dados experimentais: para pequenas taxas de deformação, a resposta do modelo utilizando ambas as propostas para o módulo de cisalhamento são aproximadamente as mesmas, o que corresponde a uma significativa correspondência com os dados experimentais; entretanto, para taxas maiores, a proximidade da resposta do modelo, utilizando a função G_N é mais próxima que utilizando a função G . Nas figuras 5.13a-5.13d são comparadas as funções $G(\lambda(t))$ e $G_N(\lambda(t))$ em relação ao tempo e ao parâmetro estrutural para os testes de taxa de 10 e 100 s^{-1} .

A resposta de ambas as funções são explicitamente diferentes durante todos os instantes de tempo: a função G é praticamente constante com valores próximos de $G_0 \approx 6,5$; já a função G_N possui valores já pequenos no começo do teste, devido a quebra quase instantânea da microestrutura no início do teste¹ e ao final do teste com $\dot{\gamma} = 100 s^{-1}$, um decaimento significativo é visto.

Os resultados expostos nas figuras 5.12a a 5.13c, corroboram, juntamente com os resultados apresentados nas figuras 5.3 e 5.4, para o argumento de que o modelo de Azikri de Deus et al. (2016) seja utilizado modificando a função $G(\lambda) = G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$ para $G_N(\lambda) = \lambda G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$. Para averiguar se o modelo juntamente com a nova função representam outros comportamentos associados a materiais tixotrópicos, analisa-se os resultados utilizando dados de outro material submetido a um diferente teste reológico.

¹ Para mais detalhes, pode-se observar as discussões sobre o início dos testes de patamares de carga de cisalhamento vistas no trabalho de Silva et al. 2014

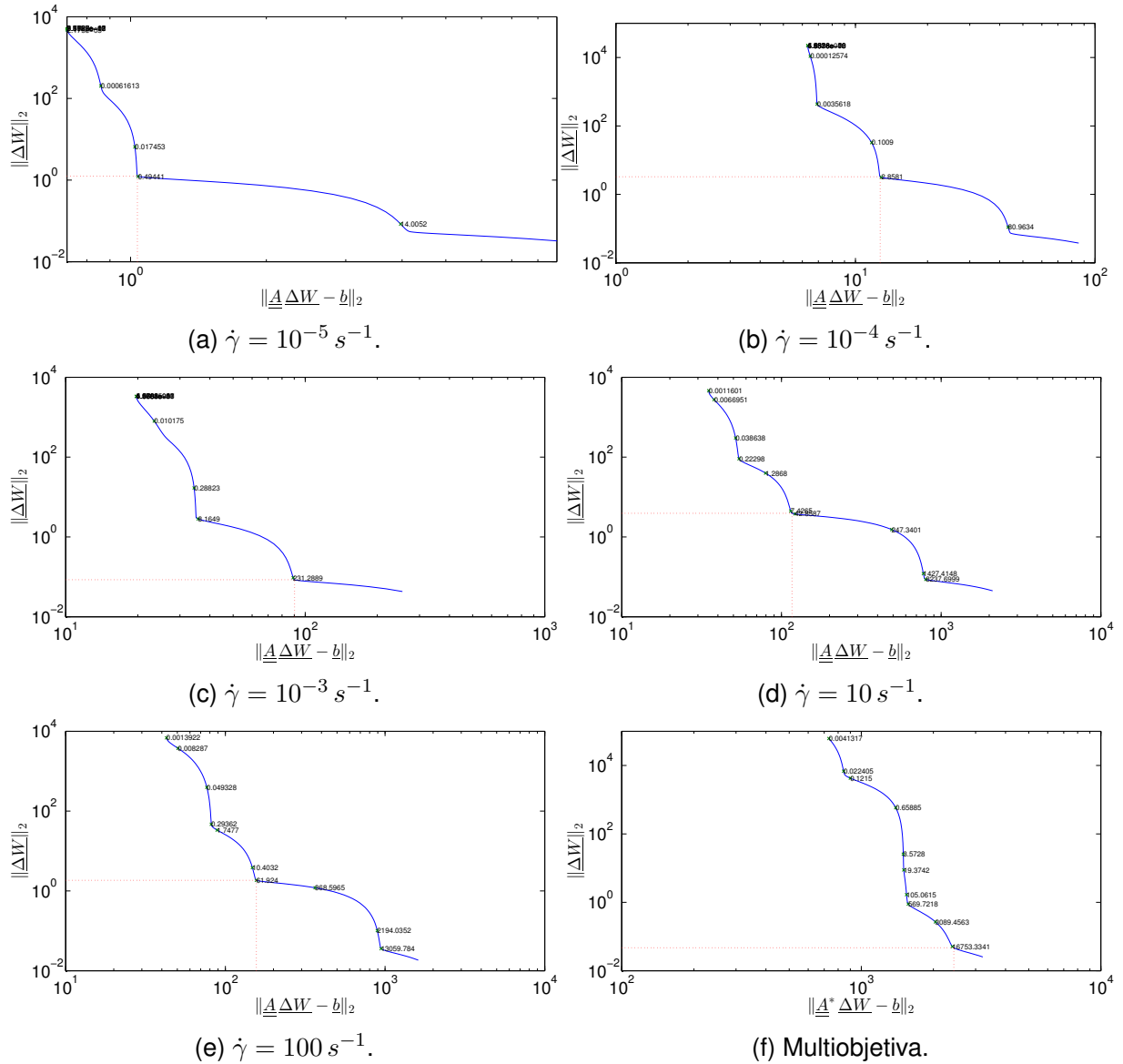


Figura 5.11 – Curvas L obtidas a partir do algoritmo 2, considerando todos os parâmetros do modelo para testes de taxa de deformação constante: $G = G_0^* \lambda \exp\left(\frac{m^*}{\lambda}\right)$

5.2 Fluido de perfuração

A robustez do modelo é verificada, utilizando, como mencionado no começo do capítulo, dados associados a testes de tensão constante aplicados sobre uma amostra de fluido de perfuração. Com o intuito de atribuir um maior grau de liberdade para a função associada ao módulo de cisalhamento, assume-se a forma

$$G(\lambda) \equiv \lambda^\zeta G_0 \exp \frac{m}{\lambda} \quad (5.5)$$

onde G_0 , ζ e m são parâmetros positivos. A forma do módulo de cisalhamento adotado anteriormente, é um caso especial da forma proposta na equação acima, onde $\zeta = 1$. Para se aproximar da análise anterior, considera-se como estimativa inicial $\zeta = 1$.

Utilizando considerações físicas análogas àquelas utilizadas para o teste de taxa constante com óleo cru (apresentado anteriormente), obtém-se como estimativa inicial para os parâmetros do

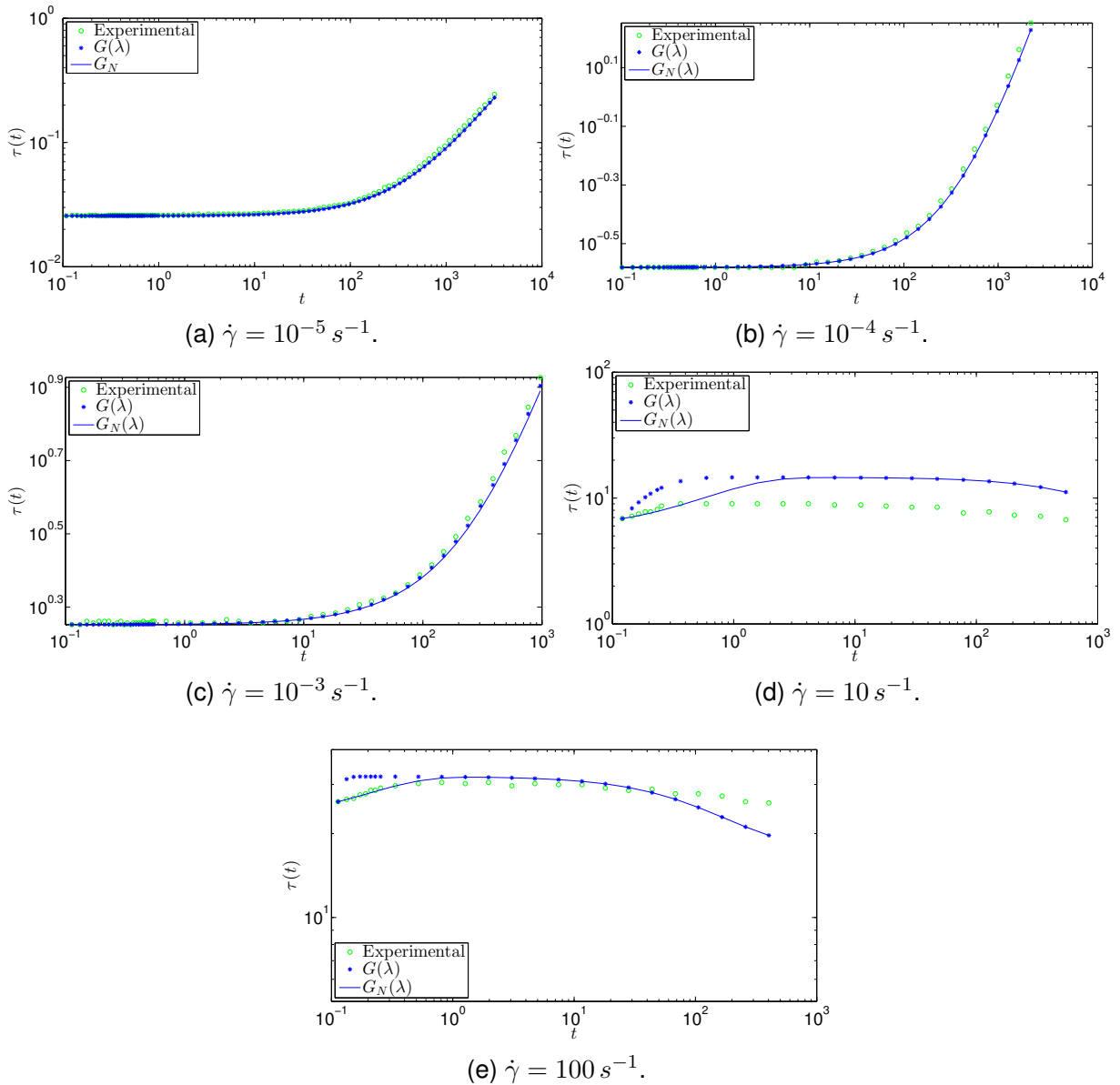


Figura 5.12 – Comparação entre resultados experimentais e simulação do modelo, considerando G_N : $\dot{\gamma} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$.

material: $\eta_0 = 4,0000 \times 10^{-2} \text{ Pa.s}$, $\alpha = 10,7000$, $\alpha_2 = 8,9300$, $\kappa = 27,0000 \text{ J/m}^3$, $\beta = 5,0000$, $m = 1,0000 \times 10^{-2}$, $G_0 = 200,0000 \text{ Pa}$ e $\zeta = 100,0000 \text{ J s/m}^3$, $K_{\psi}^* = 100,0000 \text{ Kg m}^{-1} \text{K}^{-1}$ e $\zeta = 1,0000$. Os resultados da simulação do modelo utilizando estes parâmetros juntamente com a definição (5.5) são apresentados nas figuras 5.14 e 5.15, para o regime permanente e transiente, respectivamente. Os dados apresentados na figura 5.14 são aqueles obtidos no último instante de tempo nos testes apresentados nas figuras 5.15a a 5.15d.

O modelo pode representar de maneira consistente o comportamento do material, embora possua resposta mais abrupta perto da região com maior taxa de deformação ao final do teste. Portanto toma-se os parâmetros considerados para as simulações apresentadas nas figuras 5.14 e 5.15 como uma estimativa inicial consistente. O passo seguinte é minimizar a diferença entre a resposta do modelo e os dados experimentais, i.e. minimizar $\|\tau^{exp} - \tau(W_G)\|^2$. Portanto, considera-

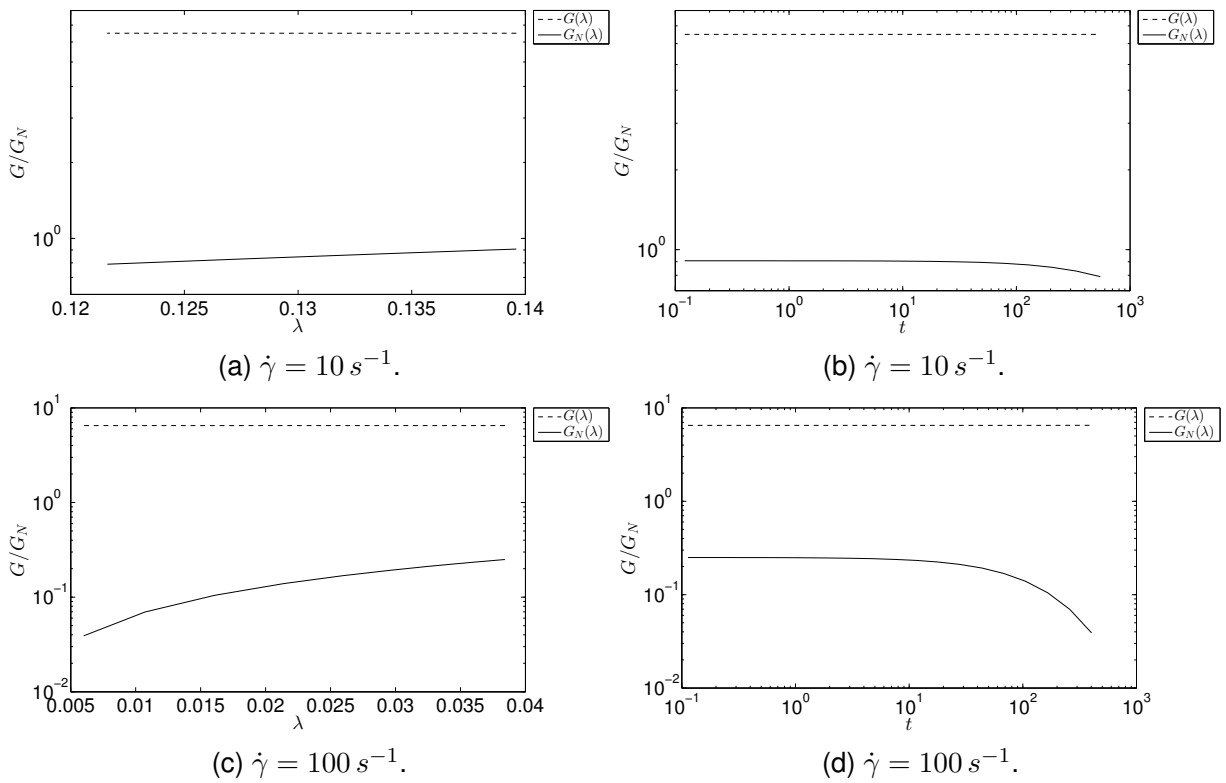


Figura 5.13 – Comparação das funções relacionadas ao módulo de cisalhamento.

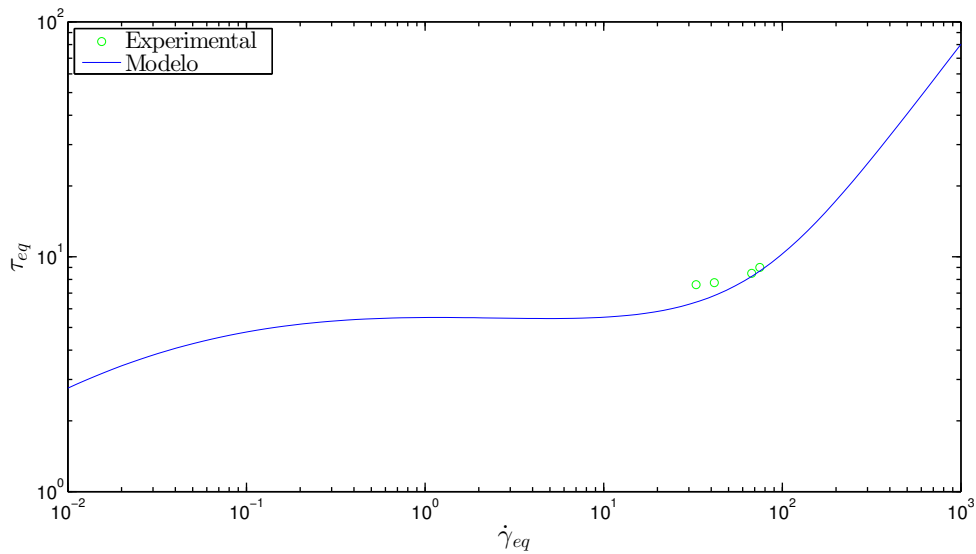


Figura 5.14 – Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime permanente.

se o problema 7 novamente: obter os parâmetros do modelo

$$\underline{W} = [\eta_0 \quad \alpha \quad \kappa \quad \beta \quad \alpha_2 \quad \varsigma \quad m \quad G_0 \quad K_\psi^* \quad \zeta]^T \quad (5.6)$$

que minimizem a diferença entre a resposta do modelo e os dados experimentais. A priori, considerou-se os algoritmos 2 e 3 para a solução deste problema. Entretanto, quando um ou mais parâmetros assumiram valores negativos, soluções inconsistentes foram obtidas. Neste sentido, adotou-se o

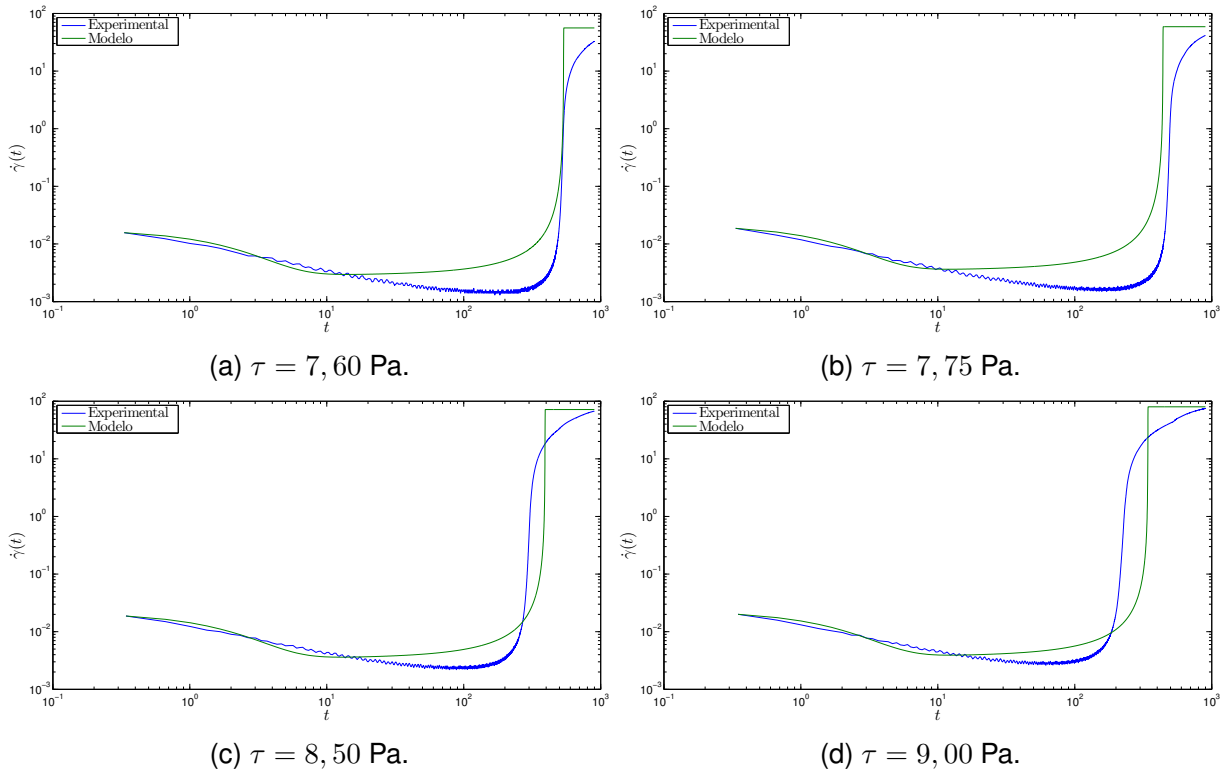


Figura 5.15 – Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime transiente.

método de conjunto ativos, tendo em vista que com este método, busca-se que, em cada iteração, as restrições do problema não sejam violadas. Considerou-se o algoritmo 5 utilizando a estrutura multiobjetiva, para obter os parâmetros do modelo: são mostrados na tabela 5.4 os resultados associados às iterações do algoritmo. A tolerância admitida foi de $\frac{\|\Delta W\|}{\|W\|} \leq 10^{-5}$.

Tabela 5.4 – Parâmetros computacionais associados às últimas iterações do algoritmo 5, considerando W definido na equação (5.6) e dados de fluido de perfuração: $G = \lambda^\zeta G_0^* \exp \frac{m^*}{\lambda}$.

Iteração	$\frac{\ \Delta W\ }{\ W\ }$	N_{co}	λ_R^L
0	$6,81 \times 10^{-5}$	Inf.	278293, 4
1	$4,46 \times 10^{-5}$	Inf.	206898, 4
2	$2,88 \times 10^{-4}$	$4,27 \times 10^{58}$	198248, 5
3	$8,17 \times 10^{-6}$	Inf.	173790, 3

É importante mencionar que embora das 4 iterações feitas, 3 apresentaram número de condição infinito, o método de Tikhonov/curva L utilizado em todas as iterações possibilitou a obtenção de soluções matematicamente consistentes. Os parâmetros obtidos na última iteração foram $\eta_0 = 5,4739 \times 10^{-2} Pa.s$, $\alpha = 10,6808$, $\alpha_2 = 8,9345$, $\kappa = 27,0000 J/m^3$, $\beta = 5,0053$, $m = 9,9771 \times 10^{-3}$, $G_0 = 200,0000 Pa$ e $\zeta = 100,0000 J s/m^3$, $K_\psi^* = 100,0000 Kg m^{-1}K^{-1}$ e $\zeta = 1,0000$. É importante notar que, embora a introdução de um novo parâmetro ζ na equação (5.5) tenha sido feita provendo maior grau de liberdade para o problema, os resultados evidenciam que tal parâmetro não se modificará substancialmente. A comparação entre a simulação utilizando estes parâmetros e os dados experimentais é explicitada na figura 5.17. A solução apresentada possui

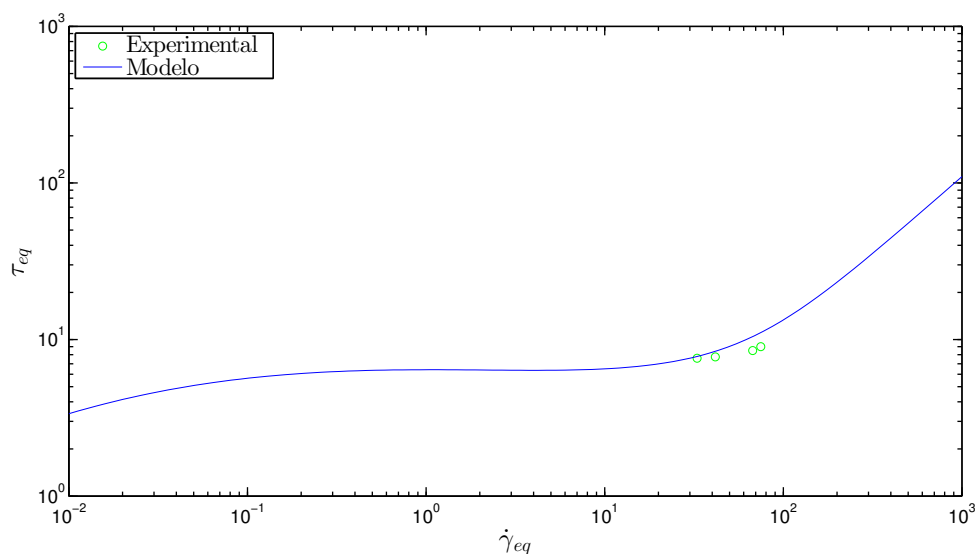


Figura 5.16 – Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime permanente..

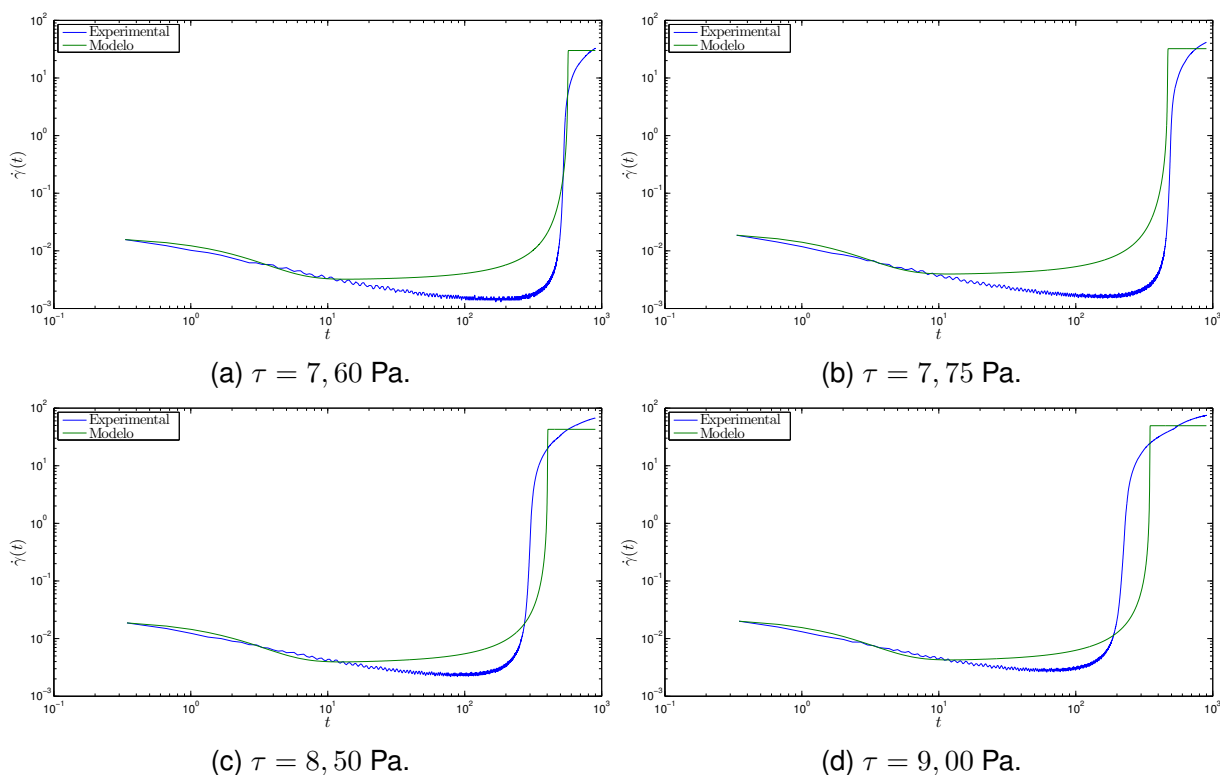


Figura 5.17 – Comparação entre a resposta do modelo e dados de teste de tensão constante aplicado sobre fluido de perfuração: regime transiente.

uma correspondência um pouco maior em relação aos dados experimentais quando comparada àquela relacionando os parâmetros referente à estimativa inicial. A seguir, algumas comentários são feitos em relação aos resultados obtidos neste capítulo.

5.3 Conclusões dos resultados obtidos

É possível afirmar, a partir dos resultados expostos, que o objetivo do trabalho foi alcançado: uma nova proposta para o módulo de cisalhamento foi obtida, utilizando dados de testes reológicos. Pode-se concluir que:

1. A nova forma para a função associada para o módulo de cisalhamento $G(\lambda) \equiv \lambda^\zeta G_0 \exp \frac{m}{\lambda}$ foi obtida através da solução de um problema inverso, utilizando dados experimentais de óleo cru;
2. Sobre a minimização multiobjetiva juntamente com o método de Tikhonov/ curva L, para a determinação dos parâmetros do modelo:
 - a) Apresentou resultados consistentes para a obtenção de todos os parâmetros do modelo para o teste com óleo cru; a mesma abordagem, considerando restrições por meio das variáveis de folga, resultou em parâmetros consistentes, quando considerados fixados os parâmetros \underline{W}_c ;
 - b) O método possibilitou a obtenção de uma solução para os problemas com operadores mal condicionados, embora valores elevados do número de condição tenham sido observados;
 - c) A solução possibilitou a obtenção de soluções consistentes, que pudessem melhorar as curvas obtidas na estimativa inicial;
3. O modelo considerando o novo módulo de cisalhamento resultou em soluções consistentes para o fluido de perfuração sob teste de tensão constante e para teste de taxa de deformação constante aplicados sobre óleo cru.

6 Considerações finais

O principal objetivo do presente trabalho foi obter uma forma para a função associada ao módulo de cisalhamento de um modelo associados a materiais tixotrópicos, a partir de dados experimentais de testes reológicos. Alguns aspectos em relação ao trabalho podem ser mencionados:

- i Uma revisão dos aspectos associados a modelagem e ao fenômeno de tixotropia foi feita;
- ii A abordagem utilizada foi definida via problema inverso, utilizando o modelo proposto por Azikri de Deus et al. (2016);
- iii Discutiu-se a inserção do módulo de cisalhamento em modelos tixotrópicos adaptados de clássicos viscoelásticos de forma que foram mencionados alguns modelos desta classe e descreveu-se a abordagem apresentada por Azikri de Deus et al. (2016);
- iv A teoria de problemas inversos foi sucintamente descrita e revisou-se a utilização das técnicas associadas empregadas em aplicações na engenharia;
- v O método de Tikhonov e o critério curva L, foram explicitados e exemplos da aplicação em problemas de engenharia foram mencionados onde definiu-se que os problemas mal postos do trabalho serão tratados utilizando estas técnicas;
- vi Discutiu-se sobre a decomposição em valores singulares e sua relação com o método de Tikhonov;
- vii A implementação computacional foi definida, onde considerou-se a regularização Tikhonov juntamente com o critério de escolha de parâmetros curva L na solução de problemas com matrizes mal condicionadas;
- viii Os problemas posteriormente resolvidos no trabalho foram formalmente definidos e os algoritmos para a obtenção da solução, definidos.
- ix A partir de dados experimentais e da abordagem numérica formalizada no capítulo 4, obteve-se uma nova forma para a função associada para o módulo de cisalhamento; tal forma possibilitou uma melhor representação dos dados experimentais quando comparada com os resultados obtidos utilizando a função G definida a priori;
- x A minimização multiobjetiva juntamente com o método de Tikhonov/ curva L apresentou resultados consistentes para a obtenção dos parâmetros do modelo;
- xi A consideração de restrições por meio de variáveis de folga e do método de conjuntos ativos, possibilitou a obtenção de parâmetros que aproximassem a resposta do modelo aos dados experimentais;
- xii O modelo considerando o novo módulo de cisalhamento resultou em soluções consistentes para o fluido de perfuração a base de óleo sob teste de tensão constante;

Pode-se concluir, de maneira geral, que o objetivo do trabalho foi atingido tendo em vista que foi obtida uma função para o módulo de cisalhamento que possibilita a representação do comportamento dos dados experimentais, de forma a minimizar as diferenças entre a resposta do modelo e os dados obtidos.

A abordagem utilizada pode ser adaptada de formas diferentes. Sugere-se que, para trabalhos futuros, a metodologia apresentada neste trabalho possa ser adaptada de modo a:

- i Obter as funções associadas aos coeficientes de viscosidade;
- ii Obter as funções associadas a propriedades de outros modelos constitutivos;
- iii Considerar outros métodos para a solução dos problemas mal postos associados;
- iv Considerar modelos com mais de um parâmetro estrutural na abordagem.

Referências

- ALVES, M. M. *Método de Landweber sem derivadas para identificação de parâmetros em equações diferenciais parciais elípticas*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.
- ANDRADE, D. E.; CRUZ, A. C. da; FRANCO, A. T.; NEGRÃO, C. O. Influence of the initial cooling temperature on the gelation and yield stress of waxy crude oils. *Rheologica Acta*, Springer, v. 54, n. 2, p. 149–157, 2015.
- BARNES, H. A. Thixotropy—a review. *Journal of Non-Newtonian fluid mechanics*, Elsevier, v. 70, n. 1, p. 1–33, 1997.
- BARNES, H. A. The yield stress—a review or ‘ $\pi\alpha\nu\tau\alpha\ \rho\epsilon\iota$ ’—everything flows? *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, v. 81, n. 1, p. 133–178, 1999.
- BAUMEISTER, J. *Stable solution of inverse problems*. [S.l.]: Springer, 1987.
- BAZÁN, F. S.; BEDIN, L.; BOZZOLI, F. Numerical estimation of convective heat transfer coefficient through linearization. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 102, p. 1230–1244, 2016.
- BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O.; CURTISS, C. F. *Dynamics of polymeric liquids*. [S.l.]: Wiley New York, 1977. v. 1.
- BORGES, A. J. *Técnicas resolutivas para problemas mal postos: estudo comparativo de métodos de regularização*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2010.
- BRIE, D.; RICHARD, A. et al. Regularization aspects in continuous-time model identification. *Automatica*, Elsevier, v. 41, n. 2, p. 197–208, 2005.
- CHARTRAND, R. Numerical differentiation of noisy, nonsmooth data. *ISRN Applied Mathematics*, Hindawi Publishing Corporation, v. 2011, 2011.
- CHENG, D. C. On the behaviour of thixotropic fluids with a distribution of structure. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 7, n. 14, p. L155, 1974.
- CHENG, D. C.; EVANS, F. Phenomenological characterization of the rheological behaviour of inelastic reversible thixotropic and antithixotropic fluids. *British Journal of Applied Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 11, p. 1599, 1965.
- COLIBORO, T. P. P. *Métodos de projeção para regularização com informação a priori*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.
- COUSSOT, P.; NGUYEN, Q.; HUYNH, H.; BONN, D. Viscosity bifurcation in thixotropic, yielding fluids. *Journal of Rheology (1978-present)*, The Society of Rheology, v. 46, n. 3, p. 573–589, 2002.
- COUSSOT, P.; NGUYEN, Q. D.; HUYNH, H.; BONN, D. Avalanche behavior in yield stress fluids. *Physical review letters*, APS, v. 88, n. 17, p. 175501, 2002.
- CULLUM, J. Numerical differentiation and regularization. *SIAM Journal on numerical analysis*, SIAM, v. 8, n. 2, p. 254–265, 1971.
- DEUS, H. P. Azikri de; DUPIM, G. S. P. Over structural nature of the thixotropic fluid behavior. *Physics Letters A*, Hikari Ltd., v. 6, n. 138, p. 6871–6889, 2012.

- DEUS, H. P. Azikri de; DUPIM, G. S. P. On behavior of the thixotropic fluids. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 377, n. 6, p. 478–485, 2013.
- DEUS, H. P. Azikri de; JR, C. R. Á. S.; BELO, I. M.; BECK, A. T. The tikhonov regularization method in elastoplasticity. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 36, n. 10, p. 4687–4707, 2012.
- DEUS, H. P. Azikri de; NEGRAO, C.; FRANCO, A. T. The modified jeffreys model approach for elasto-viscoplastic thixotropic substances. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 380, n. 4, p. 585–595, 2016.
- DULLAERT, K.; MEWIS, J. Thixotropy. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Elsevier, v. 139, n. 1, p. 21–30, 2006.
- EILKS, C.; ELLIOTT, C. M. Numerical simulation of dealloying by surface dissolution via the evolving surface finite element method. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 227, n. 23, p. 9727–9741, 2008.
- EL-GENDY, H.; ALCOUTLABI, M.; JEMMETT, M.; DEO, M.; MAGDA, J.; VENKATESAN, R.; MONTESI, A. The propagation of pressure in a gelled waxy oil pipeline as studied by particle imaging velocimetry. *AIChE Journal*, Wiley Online Library, v. 58, n. 1, p. 302–311, 2012.
- ELLIOTT, J. R.; LIRA, C. T. *Introductory chemical engineering thermodynamics*. [S.l.]: Prentice Hall PTR Upper Saddle River, NJ, 1999.
- ENGL, H. W.; GREVER, W. Using the l-curve for determining optimal regularization parameters. *Numerische Mathematik*, Springer, v. 69, n. 1, p. 25–31, 1994.
- ENGL, H. W.; HANKE, M.; NEUBAUER, A. *Regularization of inverse problems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1996.
- EWOLDT, R. H. *Nonlinear viscoelastic materials: bioinspired applications and new characterization measures*. Tese (Doutorado) — Massachusetts Institute of Technology, 2009.
- EWOLDT, R. H.; HOSOI, A.; MCKINLEY, G. H. New measures for characterizing nonlinear viscoelasticity in large amplitude oscillatory shear. *Journal of Rheology (1978-present)*, The Society of Rheology, v. 52, n. 6, p. 1427–1458, 2008.
- FRIEDMAN, A. *Foundations of modern analysis*. [S.l.]: Courier Corporation, 1970.
- GENNES, P.-G. de et al. Reptation of a polymer chain in the presence of fixed obstacles. *The journal of chemical physics*, World Scientific, v. 55, n. 2, p. 572, 1971.
- GONG, M.; JIANG, X.; LI, H. Optimization methods for regularization-based ill-posed problems: a survey and a multi-objective framework. *Frontiers of Computer Science*, Springer, p. 1–30, 2016.
- HANKE, M. Limitations of the l-curve method in ill-posed problems. *BIT Numerical Mathematics*, Springer, v. 36, n. 2, p. 287–301, 1996.
- HANSEN, P. C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the l-curve. *SIAM review*, SIAM, v. 34, n. 4, p. 561–580, 1992.
- HANSEN, P. C. Regularization tools: A matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems. *Numerical algorithms*, Springer, v. 6, n. 1, p. 1–35, 1994.
- HANSEN, P. C. *Rank-deficient and discrete ill-posed problems: numerical aspects of linear inversion*. [S.l.]: SIAM, 1998.
- HANSEN, P. C. *The L-curve and its use in the numerical treatment of inverse problems*. [S.l.]: IMM, Department of Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, 1999.

- ISAKOV, V. *Inverse problems for partial differential equations*. [S.l.]: Springer, 1998.
- JOU, D.; CASAS-VÁZQUEZ, J.; CRIADO-SANCHO, M. *Thermodynamics of fluids under flow*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010.
- KIRSCH, A. *An introduction to the mathematical theory of inverse problems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011. v. 120.
- KLEIN, C.; VENEMA, P.; SAGIS, L.; LINDEN, E. van der. Rheological discrimination and characterization of carrageenans and starches by fourier transform-rheology in the non-linear viscous regime. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, v. 151, n. 1, p. 145–150, 2008.
- KNOWLES, I.; RENKA, R. J. Methods for numerical differentiation of noisy data. *Electron. J. Differ. Equ.*, v. 21, p. 235–246, 2014.
- KREYSZIG, E. *Advanced engineering mathematics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1988.
- KREYSZIG, E. *Introductory functional analysis with applications*. [S.l.]: wiley New York, 1989.
- LEBEDEV, L.; VOROVICH, I.; GLADWELL, G. *Functional Analysis: Applications in Mechanics and Inverse Problems*. [S.l.]: Dordrecht: Springer Netherlands, 2003.
- LI, J.; DING, R.; YANG, Y. Iterative parameter identification methods for nonlinear functions. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 36, n. 6, p. 2739–2750, 2012.
- LIU, M.; XIAO, Y.; DING, R. Iterative identification algorithm for wiener nonlinear systems using the newton method. *Applied Mathematical Modelling*, Elsevier, v. 37, n. 9, p. 6584–6591, 2013.
- MACOSKO, C. W.; LARSON, R. G. *Rheology: principles, measurements, and applications*. [S.l.]: VCH New York, 1994.
- MAGNIN, A.; PIAU, J. Cone-and-plate rheometry of yield stress fluids. study of an aqueous gel. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, v. 36, p. 85–108, 1990.
- MARGOTTI, F. J. s. *Métodos tipo Newton inexatos para problemas inversos*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.
- MAZO, R. M. *Brownian motion: fluctuations, dynamics, and applications*. [S.l.]: OUP Oxford, 2008. v. 112.
- MENDES, P. R. de S. Modeling the thixotropic behavior of structured fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Elsevier, v. 164, n. 1, p. 66–75, 2009.
- MENDES, P. R. de S. Thixotropic elasto-viscoplastic model for structured fluids. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry, v. 7, n. 6, p. 2471–2483, 2011.
- MENDES, P. R. de S.; THOMPSON, R. L. A unified approach to model elasto-viscoplastic thixotropic yield-stress materials and apparent yield-stress fluids. *Rheologica Acta*, Springer, v. 52, n. 7, p. 673–694, 2013.
- MEWIS, J. Thixotropy - a general review. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Elsevier, v. 6, n. 1, p. 1–20, 1979.
- MEWIS, J.; WAGNER, N. J. Thixotropy. *Advances in Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 147, n. 1, p. 214–227, 2009.
- MUJUMDAR, A.; BERIS, A. N.; METZNER, A. B. Transient phenomena in thixotropic systems. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, v. 102, n. 2, p. 157–178, 2002.

- NETO, A. J. da S.; NETO, F. D. M. *Problemas inversos: conceitos fundamentais e aplicações*. [S.l.]: EdUERJ, 2005.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. *Numerical optimization 2nd*. [S.l.]: Springer, 2006.
- QUIROZ, J. R. *Métodos de quadrados mínimos totais regularizados*. Dissertação (Mestrado), 2014.
- RAJAGOPAL, K.; SRINIVASA, A. Mechanics of the inelastic behavior of materials. part ii: Inelastic response. *International Journal of Plasticity*, Elsevier, v. 14, n. 10, p. 969–995, 1998.
- RAJAGOPAL, K.; SRINIVASA, A. Mechanics of the inelastic behavior of materials—part 1, theoretical underpinnings. *International Journal of Plasticity*, Elsevier, v. 14, n. 10, p. 945–967, 1998.
- RAJAGOPAL, K.; SRINIVASA, A. A thermodynamic frame work for rate type fluid models. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, v. 88, n. 3, p. 207–227, 2000.
- RAMSAY, J. O.; HOOKER, G.; CAMPBELL, D.; CAO, J. Parameter estimation for differential equations: a generalized smoothing approach. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, Wiley Online Library, v. 69, n. 5, p. 741–796, 2007.
- RIBEIRO, A. A.; KARAS, E. W. *Otimização Contínua: aspectos teóricos e computacionais*. [S.l.: s.n.], 2013. v. 1.
- RITTER, R.; BATYCKY, J. et al. Numerical prediction of the pipeline flow characteristics of thixotropic liquids. *Society of Petroleum Engineers Journal*, Society of Petroleum Engineers, v. 7, n. 04, p. 369–376, 1967.
- ROGERS, S.; KOHLBRECHER, J.; LETTINGA, M. The molecular origin of stress generation in worm-like micelles, using a rheo-sans laos approach. *Soft Matter*, Royal Society of Chemistry, v. 8, n. 30, p. 7831–7839, 2012.
- ROHATGI, A. *WebPlotDigitizer*. 2015. Disponível em: <<http://arohatgi.info/WebPlotDigitizer/>>.
- SANTOS, T. G. M. dos. Avaliação de modelos de tixotropia aplicados a fluidos de perfuração. *Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Tecnológica Federal do Paraná*, 2010.
- SILVA, P.; BARBOSA, T. A.; DEUS, H. P. Azikri de et al. Elastoplasticity 2d problems: Numerical applications of the tikhonov regularization method. *Applied Mechanics & Materials*, v. 751, 2015.
- SILVA, T. A. B. P.; DEUS, H. P. Azikri de; NEGRÃO, C. O. R. A numerical approach on new constitutive model for thixotropic substances. *Applied Mechanics and Materials*, Trans Tech Publications, v. 751, n. 1, p. 95–101, 2014.
- SOARES, E. J.; THOMPSON, R. L.; MACHADO, A. Measuring the yielding of waxy crude oils considering its time-dependency and apparent-yield-stress nature. *Appl Rheol*, v. 23, p. 62798–1, 2013.
- STICKEL, J. J. Data smoothing and numerical differentiation by a regularization method. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 34, n. 4, p. 467–475, 2010.
- TARCHA, B. A.; FORTE, B. P.; SOARES, E. J.; THOMPSON, R. L. Critical quantities on the yielding process of waxy crude oils. *Rheologica Acta*, Springer, v. 54, n. 6, p. 479–499, 2015.
- TINSLEY, J.; F, D. L. *Applied functional analysis*. [S.l.]: CRC Press Incorporated, 1996.
- TOORMAN, E. A. Modelling the thixotropic behaviour of dense cohesive sediment suspensions. *Rheologica Acta*, Springer, v. 36, n. 1, p. 56–65, 1997.

TRUESDELL, C.; NOLL, W. *The non-linear field theories of mechanics*. [S.l.]: Springer, 2004.

ZILL, D.; WRIGHT, W. *Differential equations with boundary-value problems*. [S.l.]: Cengage Learning, 2012.

APÊNDICE A – Análise funcional: resultados básicos

São utilizados ao longo do capítulo 3 resultados associados a análise funcional. A seguir, enuncia-se alguns resultados e definições importantes, necessárias para discussões relacionadas a problemas inversos.

Os teoremas, lemas e corolários mencionados foram retirados do livro de Lebedev et al. (2003), onde tais resultados são provados. Ao longo deste apêndice, os resultados correspondente ao livro são mencionados entre parênteses, para que o leitor possa verificar suas provas. É necessário enfatizar que outras referências apresentam resultados semelhantes, podendo eventualmente abordar as provas de maneira distinta (KREYSZIG, 1989; TINSLEY; F, 1996).

A.1 Introdução a operadores

Primeiramente, considera-se algumas definições básicas associadas a operadores.

Definição A.1. (operador contínuo) *Sejam X, Y espaços métricos e A um operador de X em Y . O operador A é dito contínuo em $x_0 \in X$ se, dado $\epsilon > 0$, existe um $\delta > 0$, dependente de ϵ , tal que se $d(x, x_0)_X < \delta$, então $d(A(x), A(x_0))_Y < \epsilon^1$. Se A é contínuo em todos os pontos de um conjunto aberto $M \subset X$, então é dito contínuo em M .*

Definição A.2. (operador linear) *Sejam X, Y espaços normados lineares e A é um operador de X em Y . A é dito linear se seu domínio é um subespaço linear de X e, para todo $x_1, x_2 \in D(A)$ e todo $\alpha, \beta \in \mathbf{K}$,*

$$A(\alpha x_1 + \beta x_2) = \alpha A(x_1) + \beta A(x_2). \quad (\text{A.1})$$

A imagem $A(x)$, para um operador linear, é usualmente escrita como Ax .

O resultado seguinte explicita que um operador contínuo pode ser limitado e, a partir deste resultado define-se norma do operador.

Teorema A.1. *Seja A um operador linear de um espaço normado X em um espaço normado linear Y . O operador A é contínuo em $D(A)$ se e somente se existe uma constante c , tal que, para todo $x \in D(A)$, têm-se*

$$\|Ax\| \leq c\|x\|. \quad (\text{A.2})$$

A norma de A , denotada por $\|A\|$, é definida

$$\|A\| = \sup_{x \in D(A)} \left\{ \frac{\|Ax\|_Y}{\|x\|_X} \right\}. \quad (\text{A.3})$$

¹ A métrica entre dois elementos z_1, z_2 de um determinado métrico Z é denotada por $d(z_1, z_2)_Z$. Analogamente, a norma do elemento w_1 de um espaço normado linear W é $\|w_1\|_W$ e o produto interno definido no espaço de Hilbert H $(\cdot, \cdot)_H$.

Demonstração. Teorema 2.9.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

A.2 Aproximação em espaços lineares

A projeção dos elementos de um espaço de Hilbert em outro e a decomposição dos elementos em componentes ortogonais entre si são aspectos importantes, no contexto de problemas inversos. É possível provar o seguinte

Teorema A.2. *Seja H um espaço de Hilbert e $M \subset H$ um subespaço fechado. Então existe um subespaço fechado $N \subset H$, ortogonal a M^\perp , tal que H tem uma decomposição ortogonal em M e N , i.e. um elemento qualquer $y \in H$ pode ser unicamente representado como*

$$y = m + n, m \in M, n \in N. \quad (\text{A.4})$$

Demonstração. Teorema 4.3.2 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

O seguinte teorema é fundamental pois estabelece, sob determinadas condições, a unicidade de equações frequentemente encontradas em problemas de minimização.

Teorema A.3. *Seja H um espaço de Hilbert tal que $x \in H$ e $M \subset H$ seja um espaço convexo fechado. Existe um único elemento $y \in M$ que minimiza o funcional $F(y) = \|y - x\|$ em M .*

Demonstração. Teorema 4.3.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

Algumas definições fundamentais associadas a espaço de Hilbert são mencionadas.

Definição A.3. (Base) *Seja X um espaço linear normado. Um sistema de elementos $g_1, g_2, \dots \in X$ é dito ser base para X se qualquer elemento $x \in X$ tem uma representação única*

$$x = \sum_k^\infty \alpha_k g_k. \quad (\text{A.5})$$

com α_k escalares, i.e. se $x_n = \sum_k^n \alpha_k g_k$ então $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_n\| = 0$.

Definição A.4. (Sistema completo) *Considerando X definido anteriormente, se $g_1, g_2, \dots \in X$ é um sistema contável e, para todo $x \in X$ e qualquer $\epsilon > 0$, existir uma combinação linear de g_k tal que*

$$\left\| x - \sum_k^\infty \beta_k g_k \right\| \leq \epsilon, \quad (\text{A.6})$$

então g_1, g_2, \dots formam um sistema dito completo.

² Para quaisquer $m \in M$ e $n \in N$, $(m, n)_H = 0$.

Definição A.5. (Sistema ortonormal) Seja H um espaço de Hilbert. Um sistema de elementos $\{g_k\} \subset H$ é dito ser ortonormal se, para todos os inteiros m, n

$$(g_m, g_n) = \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}. \quad (\text{A.7})$$

O seguinte resultado relaciona bases e sistemas completos ortonormais.

Teorema A.4. Seja H um espaço de Hilbert. Se H tem um sistema completo ortonormal $\{g_k\} \subset H$, então é base para H . Qualquer elemento $f \in H$ tem uma representação única

$$f = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k g_k, \quad (\text{A.8})$$

chamada de série de Fourier para f . Os números $\alpha_k = (f, g_k)$ são ditos coeficientes de Fourier de f .

Demonstração. Teorema 4.5.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

A.3 Operadores lineares

Denomina-se $B(X, Y)$ como o espaço linear normado, cujos elementos são operadores lineares contínuos tal que $D(A) = X$ e $R(A) \subset Y$. A norma neste espaço é definida por A.3 (ver Lema 5.1.1 de Lebedev et al. (2003) e comentários anteriores ao Lema). O seguinte teorema descreve como um operador pertencente a este espaço pode ser estendido

Teorema A.5. Seja A um operador linear cujo domínio $D(A)$ é denso em um espaço normado X , cuja imagem está contida em um espaço de Banach Y , e que é limitado (contínuo) em $D(A)$, i.e. para todo $x \in D(A)$, existe $c > 0$ que satisfaz a equação A.2. Então haverá uma extensão ou continuação de A para X , denotado por A_e , tal que

1. $A_e \in B(X, Y)$,
2. $A_e x = Ax$, para todo $x \in D(A)$,
3. $\|A_e\| = \|A\|$.

Demonstração. Teorema 5.2.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

Fundamental para o tratamento de problemas inversos, é a definição de operador inverso.

Definição A.6. Seja X, Y espaços normados lineares e A um operador de X em Y . Se para todo $y \in Y$ existe não mais que um $x \in X$ tal que $Ax = y$, então A é dito ser um operador um para um. Neste caso, a correspondência de Y para X define um operador; tal operador é denominado inversa de A , denotado por A^{-1} .

Segue imediatamente da definição o

Lema A.1. *O operador A^{-1} existe se e somente se a equação $Ax = 0$ tem a única solução $x = 0$. Se existir, A^{-1} é linear.*

Demonstração. Assume-se que A^{-1} e $0 \neq x \in X$ existem, tal que $Ax = 0$ e A é um operador linear qualquer. Considerando um elemento qualquer $w \in X$, então $w + x \in X$, pois X é linear. Como o operador é definido para todo o domínio, existe $y \in Y$ tal que $Aw = y \in Y$. Da linearidade do operador A , segue que $A(x + w) = Ax + Aw = Aw = y$. Tal resultado contradiz o fato de que, como A^{-1} existe, A deve ser um para um. Portanto, se A^{-1} existir e $Ax = 0$, então $x = 0$.

Por outro lado assume-se que, se $Ax = 0$, então $x = 0$. Supõe-se que existe um $y \in Y$, tal que $y = Az$ e $y = Av$. Logo, $y - y = 0 = Az - Av$. Como A é linear, então, $Az - Av = A(z - v) = 0$ e, portanto, $z - v = 0$. Logo $v = z$ e, conseqüentemente, há apenas um elemento de $v \in X$ tal que $y = Av$, i.e. A é um para um. Da Definição A.6, A^{-1} existe.

Suponha que A^{-1} existe e $A^{-1}(y + u) \neq A^{-1}y + A^{-1}u$, onde $y, u \in Y$. Logo, existem apenas três elementos $x, v, w \in X$ tais que $Ax = y + u$, $A(w) = y$, $A(v) = u$, onde $x \neq w + v$. Entretanto, $Ax = Aw + Av = A(w + v)$ e portanto, $A(x - w - v) = 0$. Como deduzido anteriormente, se A^{-1} existe então $A(x - w - v) = 0$ implica em $x - w - v = 0$ e, portanto, $x = v + w$, o que é uma contradição. Logo, se A^{-1} existir, então será linear. \square

É possível deduzir, usando do Lema A.1, o seguinte

Teorema A.6. *O operador A^{-1} é contínuo (limitado) em $R(A)$ se e somente se existir uma constante $c > 0$, tal que, se $x \in D(A)$, então*

$$\|Ax\| \geq c\|x\|. \tag{A.9}$$

Demonstração. Teorema 5.3.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). \square

Os teoremas a seguir são fundamentais para verificar casos em que operadores compactos são mal postos impondo condições sobre a inversa

Teorema A.7. (Teorema de mapeamento aberto de Banach) *Sejam X e Y espaços de Banach e seja A um operador linear contínuo A de X em Y , tal que $Y = R(A)$. Então A mapeia conjuntos abertos de X em conjuntos abertos de Y .*

Demonstração. Teorema 5.3.3 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003) *apud* (FRIEDMAN, 1970). \square

Teorema A.8. *Sejam X e Y espaços de Banach e seja A um operador linear contínuo um para um, de X em Y , tal que $R(A) = Y$. Então A^{-1} é um operador linear contínuo de Y em X , onde $D(A) = X$.*

Demonstração. Teorema 5.3.4 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). \square

Enuncia-se a definição de operador adjunto e autoadjunto e o núcleo de operadores.

Definição A.7. (Adjunto e Autoadjunto) Seja A um operador contínuo de H_1 em H_2 . Seja $F(x) = (Ax, y)_{H_2}$, para um $y \in H_2$ fixo. $F(x)$ é um funcional linear limitado em H_1 . Pelo teorema da representação de Riesz (Teorema 4.3.2 de Lebedev et al. (2003)), existe um elemento $f \in H_1$ definido unicamente por F que satisfaz

$$F(x) = (Ax, y)_{H_2} = (x, f)_{H_1}. \quad (\text{A.10})$$

(Adjunto e Autoadjunto) A correspondência $y \rightarrow f$ define um operador A^* de H_2 em H_1 tal que $f = A^*y$. A^* é denominado o adjunto de A . Nota-se que $(Ax, y)_{H_2} = (x, A^*y)_{H_1}$. Se $H_1 = H_2 = H$ e $A = A^*$ então A é dito autoadjunto.

Definição A.8. Seja H_1, H_2 espaços de Hilbert e $A \in B(H_1, H_2)$. O núcleo de A , denotado por $N(A)$ é o conjunto de $x \in H_1$ tal que $Ax = 0$ e $N(A)^\perp$ denota seu complemento ortogonal.

Um resultado conectando o range/núcleo de um operador, com o núcleo/range de seu adjunto é o

Teorema A.9. Sejam H_1, H_2 espaços de Hilbert e $A \in B(H_1, H_2)$. Então segue que $R(A)^\perp = N(A^*)$, $R(A^*)^\perp = N(A)$, $\overline{R(A)} = N(A^*)^\perp$ e $\overline{R(A)^*} = N(A)^\perp$.

Demonstração. Teorema 5.5.1³ (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

A.4 Operadores compactos

Operadores compactos são importantes para demonstrar possíveis problemas mal-postos. A seguir, define-se um operador compacto.

Definição A.9. Sejam X, Y espaços lineares normados. Um operador A de X em Y é dito compacto (ou completamente contínuo) se mapeia conjuntos limitados de X em conjuntos compactos⁴ de Y .

Menciona-se alguns resultados básicos associados a estes operadores.

Teorema A.10. Um operador compacto linear é contínuo.

Demonstração. Teoremas 6.5.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

Teorema A.11. Sejam X, Y espaços normados lineares e A um operador compacto linear de X em Y e que $R(A) = Y$. Se A tem uma inversa limitada A^{-1} em Y , tal que $D(A^{-1}) = Y$ e $R(A^{-1}) = X$, então X é um espaço de dimensão finita.

Demonstração. Teoremas 6.5.4 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

Um resultado imediato do Teorema A.11, é o

³ A prova que $R(A)^\perp = N(A^*)$ e $R(A^*)^\perp = N(A)$ não é vista no teorema, mas é consequência direta do resultado e da definição de espaços ortogonais.

⁴ Um conjunto S tal que toda cobertura de S por uma coleção de conjuntos abertos $\{O_i\}$ tem uma subcobertura finita; ver Lebedev (2003) para mais detalhes.

Corolário A.1. *Se X, Y são espaços de Banach e X possui dimensão infinita, então um operador compacto linear A de X em Y , tal que $R(A)$ seja fechado, não tem uma inversa limitada.*

Demonstração. Corolário 8.2.1 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

O seguinte resultado impõe, sob certas condições, restrições na imagem de operadores em espaços de Hilbert.

Teorema A.12. *Seja A um operador compacto do espaço de Hilbert H_1 no espaço de Hilbert H_2 . Se $R(A)$ é fechado então possui dimensão finita.*

Demonstração. Teoremas 6.6.3 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

O seguinte resultado é importante no contexto da decomposição em valores singulares.

Corolário A.2. *Seja A um operador linear contínuo de um espaço de Hilbert H_1 em um espaço de Hilbert H_2 . Se A é compacto, então AA^* e A^*A são operadores lineares compactos autoadjuntos.*

Demonstração. Seção 6.6 do livro de Lebedev et al. (2003). □

A.5 Autovalores e operadores autoadjuntos

Menciona-se um resultado associando teoremas da seção A.3 e da seção anterior, fundamental para a decomposição em valores singulares.

Teorema A.13. *Um operador B compacto autoadjunto não nulo em um espaço de Hilbert H tem uma sequência finita ou infinita de autovetores ortonormais (correspondentes a autovalores não nulos) completos em $R(B)$, i.e. para todo $f = Bh$ a igualdade de Parseval*

$$\|f\|^2 = \sum_k |(f, x_k)|^2. \quad (\text{A.11})$$

é satisfeita.

Demonstração. Teorema 7.5.2 (LEBEDEV; VOROVICH; GLADWELL, 2003). □

APÊNDICE B – Solução numérica do problema 5

Resolver o problema 5 é resolver o seguinte sistema para G_i :

$$\frac{2(\eta_\nu)_i}{G_i} \dot{\tau}_i^{exp} + \left(1 - \frac{2(\eta_\nu)_i \dot{G}_i}{G_i^2}\right) \tau_i^{exp} = \left[2(\eta_\nu)_i + 2\left(1 - \frac{2(\eta_\nu)_i \dot{G}_i}{G_i^2}\right)(\eta_\mu)_i + \frac{4\eta_\nu(\dot{\eta}_\mu)_i}{G}\right] \dot{\gamma}_i + \frac{4(\eta_\nu)_i(\eta_\mu)_i}{G_i} \ddot{\gamma}_i, \quad (\text{B.1})$$

$$\left(\frac{d\lambda}{dt}\right)_i = \frac{1}{\varsigma} \left[\kappa(1 - \lambda_i)^\beta - (K_\psi^* \lambda_i^6 \ddot{\gamma}_i + \tau_i^{exp}) \lambda_i \dot{\gamma}_i\right], \quad (\text{B.2})$$

$$(\eta_\mu)_i = \eta_0 \exp(\alpha_2 \lambda_i), \quad (\text{B.3})$$

$$(\eta_\nu)_i = \eta_0 \exp[(\alpha) \lambda_i] - (\eta_\mu)_i. \quad (\text{B.4})$$

onde abrevia-se $(\cdot)(t_i) \equiv (\cdot)_i$. Os termos $\dot{\tau}_i^{exp}$ e $\ddot{\gamma}_i$ são obtidos a partir da discretização numérica de $\dot{\tau}_i^{exp}$ e $\ddot{\gamma}_i$, o que será discutido em outro relatório.

Neste relatório descreve-se dois métodos possíveis de resolver o sistema de equações acima: Euler backward e forward.

Reescreve-se a equação constitutiva:

$$\frac{A_i}{G_i} + \tau_i^{exp} - B_i \frac{\dot{G}_i}{G_i^2} = C_i - D_i \frac{\dot{G}_i}{G_i^2} + \frac{E_i}{G_i} \quad (\text{B.5})$$

onde

$$A_i = 2(\eta_\nu)_i \dot{\tau}_i^{exp} \quad (\text{B.6})$$

$$B_i = 2(\eta_\nu)_i \tau_i^{exp} \quad (\text{B.7})$$

$$C_i = 2((\eta_\nu)_i + (\eta_\mu)_i) \dot{\gamma}_i \quad (\text{B.8})$$

$$D_i = 4(\eta_\nu)_i (\eta_\mu)_i \dot{\gamma}_i \quad (\text{B.9})$$

$$E_i = 4(\eta_\nu)_i (\dot{\eta}_\mu)_i \dot{\gamma}_i + 4(\eta_\nu)_i (\eta_\mu)_i \ddot{\gamma}_i \quad (\text{B.10})$$

Divide-se todos os termos por $2(\eta_\nu)_i$, tal que

$$\frac{A'_i}{G_i} + C'_i - B'_i \frac{\dot{G}_i}{G_i^2} = -D'_i \frac{\dot{G}_i}{G_i^2} + \frac{E'_i}{G_i} \quad (\text{B.11})$$

onde

$$A'_i = \dot{\tau}_i^{exp} \quad (\text{B.12})$$

$$B'_i = \tau_i^{exp} \quad (\text{B.13})$$

$$C'_i = \frac{\tau_i^{exp}}{2(\eta\nu)_i} - \left(1 + \frac{(\eta\mu)_i}{(\eta\nu)_i}\right)\dot{\gamma}_i \quad (\text{B.14})$$

$$D'_i = 2(\eta\mu)_i \dot{\gamma}_i \quad (\text{B.15})$$

$$E'_i = 2(\dot{\eta}\mu)_i \dot{\gamma}_i + 2(\eta\mu)_i \ddot{\gamma}_i. \quad (\text{B.16})$$

Manipulando B.11:

$$A'_i G_i + C'_i G_i^2 - B_i \dot{G}_i = -D'_i \dot{G}_i + E'_i G_i \quad (\text{B.17})$$

$$(B'_i - D'_i) \dot{G}_i = (A'_i - E'_i) G_i + C'_i G_i^2 \quad (\text{B.18})$$

$$\dot{G}_i = \frac{(A'_i - E'_i) G_i + C'_i G_i^2}{B'_i - D'_i} \quad (\text{B.19})$$

B.1 Backward

Neste caso:

$$\dot{G}_i = \frac{G_i - G_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}. \quad (\text{B.20})$$

e portanto

$$\dot{G}_i = \frac{(A'_i - E'_i) G_i + C'_i G_i^2}{B'_i - D'_i} = \frac{G_i - G_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \quad (\text{B.21})$$

$$\frac{(A'_i - E'_i) G_i + C'_i G_i^2}{B'_i - D'_i} = \frac{G_i - G_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \quad (\text{B.22})$$

$$\frac{A'_i - E'_i}{B'_i - D'_i} G_i + \frac{C'_i}{B'_i - D'_i} G_i^2 = \frac{G_i}{t_i - t_{i-1}} - \frac{G_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \quad (\text{B.23})$$

$$\frac{C'_i}{B'_i - D'_i} G_i^2 + \left(\frac{A'_i - E'_i}{B'_i - D'_i} - \frac{1}{t_i - t_{i-1}} \right) G_i + \frac{G_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} = 0 \quad (\text{B.24})$$

Portanto G_i é encontrado resolvendo a equação de segundo grau acima. Três pontos são fundamentais:

- Como há duas soluções, escolhe-se a mais próxima de G_{i-1} ;
- Nota-se que no primeiro instante $\tau_1^{exp} - 2(\eta\mu)_1 \dot{\gamma}_1 \approx 0$. Este problema é evitado, tendo em vista que o primeiro instante τ_1^{exp} e $2(\eta\mu)_1 \dot{\gamma}_1$ não entram no equacionamento acima.
- A equação pode ser considerada válida para $i = 1$. Nesse caso, como $\tau_1^{exp} - 2(\eta\mu)_1 \dot{\gamma}_1 \approx 0$, então $B'_1 \approx D'_1$ e

$$(A'_1 - E'_1) G_1 = -C'_1 G_1^2 \quad (\text{B.25})$$

$$G_1 = \frac{C'_1}{E'_1 - A'_1} G_1^2 \quad (\text{B.26})$$

B.2 Forward

Neste caso:

$$\dot{G}_i = \frac{G_{i+1} - G_i}{t_{i+1} - t_i}. \quad (\text{B.27})$$

e portanto

$$\dot{G}_i = \frac{(A'_i - E'_i)G_i + C'_i G_i^2}{B'_i - D'_i} = \frac{G_{i+1} - G_i}{t_{i+1} - t_i} \quad (\text{B.28})$$

$$\frac{A'_i - E'_i}{B'_i - D'_i} G_i + \frac{C'_i}{B'_i - D'_i} G_i^2 = \frac{G_{i+1}}{t_{i+1} - t_i} - \frac{G_i}{t_{i+1} - t_i} \quad (\text{B.29})$$

$$\frac{G_{i+1}}{t_{i+1} - t_i} = \left(\frac{A'_i - E'_i}{B'_i - D'_i} + \frac{1}{t_{i+1} - t_i} \right) G_i + \frac{C'_i}{B'_i - D'_i} G_i^2 \quad (\text{B.30})$$

$$G_{i+1} = G_i + (t_{i+1} - t_i) \left(\frac{A'_i - E'_i}{B'_i - D'_i} \right) G_i + (t_{i+1} - t_i) \frac{C'_i}{B'_i - D'_i} G_i^2 \quad (\text{B.31})$$

Métodos de regularização podem ser utilizados para resolver o problema de $\tau_1^{exp} - 2(\eta\mu)_1 \hat{\gamma}_1 \approx 0$, e, conseqüentemente, $B'_1 \approx D'_1$.

APÊNDICE C – Limites de uma proposta para $G(\lambda)$

As condições que G deve satisfazer são:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} G(\lambda) = \infty \quad (\text{C.1})$$

e

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = 0 \quad (\text{C.2})$$

Com $G = G_0 \lambda \exp(\frac{m}{\lambda})$, têm-se que, expandindo a exponencial em série

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} G(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} G_0 \lambda \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{m}{\lambda}\right)^k = \infty, \quad (\text{C.3})$$

e

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial G}{\partial \lambda} \dot{\lambda}}{G^2}, \quad (\text{C.4})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{(G_0 \exp(\frac{m}{\lambda}) - G_0 \frac{m}{\lambda^2} \lambda \exp(\frac{m}{\lambda})) \dot{\lambda}}{G^2}, \quad (\text{C.5})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{(1 - \frac{m}{\lambda}) G_0 \exp(\frac{m}{\lambda}) \dot{\lambda}}{G^2}, \quad (\text{C.6})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{(1 - \frac{m}{\lambda}) G_0 \exp(\frac{m}{\lambda}) \dot{\lambda}}{G_0^2 \lambda^2 \exp(2\frac{m}{\lambda})}, \quad (\text{C.7})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{(1 - \frac{m}{\lambda}) \dot{\lambda}}{G_0 \lambda^2 \exp(\frac{m}{\lambda})} \quad (\text{C.8})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\varsigma} \left[\kappa(1 - \lambda)^\beta - \tau \dot{\gamma} \lambda \right] \frac{(1 - \frac{m}{\lambda}) \dot{\lambda}}{G_0 \lambda^2 \exp(\frac{m}{\lambda})}, \quad (\text{C.9})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\varsigma} \frac{\kappa(1 - \lambda)^\beta - \tau \dot{\gamma} \lambda + m \tau \dot{\gamma}}{G_0 \lambda^2 \exp(\frac{m}{\lambda})} - \frac{1}{\varsigma} \frac{\kappa(1 - \lambda)^\beta m}{G_0 \lambda^3 \exp(\frac{m}{\lambda})}, \quad (\text{C.10})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\varsigma} \frac{\kappa(1 - \lambda)^\beta - \tau \dot{\gamma} \lambda + m \tau \dot{\gamma}}{G_0 \lambda^2 \exp(\frac{m}{\lambda})} - \frac{1}{\varsigma} \frac{\kappa(1 - \lambda)^\beta m}{G_0 \lambda^3 \exp(\frac{m}{\lambda})}, \quad (\text{C.11})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\dot{G}}{G^2}(\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\varsigma} \frac{\kappa(1 - \lambda)^\beta - \tau \dot{\gamma} \lambda + m \tau \dot{\gamma}}{G_0 \lambda^2 \exp(\frac{m}{\lambda})} - \frac{1}{\varsigma} \frac{\kappa(1 - \lambda)^\beta m}{G_0 \lambda^3 \exp(\frac{m}{\lambda})} = 0. \quad (\text{C.12})$$

APÊNDICE D – Dedução das condições de contorno iniciais

São deduzidas as condições de contorno para o instante de tempo $t \rightarrow 0_+$. Primeiramente, considera-se o teste de taxa de deformação constante. Em seguida, o caso para o teste de tensão constante é analisado.

D.1 Teste de taxa de deformação constante

Considera-se a equação constitutiva 2.27. Multiplicando ambos os lados por $\frac{G}{2\eta_\nu}$,

$$\dot{\tau} + \frac{G}{2\eta_\nu} \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \tau = \frac{G}{2\eta_\nu} \left[2\eta_\nu + 2 \left(1 - \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \eta_\mu + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G}\right] \dot{\gamma} + \frac{G}{2\eta_\nu} \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma}, \quad (\text{D.1})$$

$$\dot{\tau} + \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{G}{2\eta_\nu} \frac{2\eta_\nu \dot{G}}{G^2}\right) \tau = \frac{G}{2\eta_\nu} \left[2\eta_\nu + 2\eta_\mu - \frac{4\eta_\nu \eta_\mu \dot{G}}{G^2} + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G}\right] \dot{\gamma} + \frac{G}{2\eta_\nu} \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma}, \quad (\text{D.2})$$

$$\dot{\tau} + \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{\dot{G}}{G}\right) \tau = \frac{G}{2\eta_\nu} \left[2\eta_\nu \dot{\gamma} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} - \frac{4\eta_\nu \eta_\mu \dot{G}}{G^2} \dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G} \dot{\gamma}\right] + \frac{G}{2\eta_\nu} \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma}, \quad (\text{D.3})$$

$$\dot{\tau} + \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{\dot{G}}{G}\right) \tau = \frac{G}{2\eta_\nu} \left[2\eta_\nu \dot{\gamma} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} - \frac{4\eta_\nu \eta_\mu \dot{G}}{G^2} \dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G} \dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma}\right]. \quad (\text{D.4})$$

Nota-se que

$$2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G}\right)} = 2\eta_\nu \left(\frac{2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma}}{G} + \frac{2\eta_\mu \ddot{\gamma}}{G} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} \overline{G^{-1}}\right), \quad (\text{D.5})$$

e

$$\overline{G^{-1}} = (-1)G^{-2}\dot{G} = -\frac{\dot{G}}{G^2}. \quad (\text{D.6})$$

Inserindo (D.6) em (D.5)

$$2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G}\right)} = 2\eta_\nu \left(\frac{2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma}}{G} + \frac{2\eta_\mu \ddot{\gamma}}{G} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} \left(-\frac{\dot{G}}{G^2}\right)\right), \quad (\text{D.7})$$

$$2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G}\right)} = 2\eta_\nu \left(\frac{2\dot{\eta}_\mu \dot{\gamma}}{G} + \frac{2\eta_\mu \ddot{\gamma}}{G} - \frac{2\eta_\mu \dot{\gamma} \dot{G}}{G^2}\right), \quad (\text{D.8})$$

$$2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G}\right)} = \frac{4\eta_\nu \dot{\eta}_\mu}{G} \dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu \eta_\mu}{G} \ddot{\gamma} - \frac{4\eta_\nu \eta_\mu \dot{G}}{G^2} \dot{\gamma}, \quad (\text{D.9})$$

Ao observar que o lado direito da equação D.9 é igual aos três últimos termos entre chaves da equação D.4, pode-se reescrever a equação constitutiva

$$\dot{\tau} + \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{\dot{G}}{G}\right) \tau = \frac{G}{2\eta_\nu} \left[2\eta_\nu \dot{\gamma} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} + 2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G}\right)}\right]. \quad (\text{D.10})$$

Assumindo que $\dot{\gamma}$ e $\ddot{\gamma}$ são funções do tempo t , renomeia-se os termos da equação (D.10),

$$\phi(t) = \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{\dot{G}}{G} \right) \quad (D.11)$$

e

$$\psi(t) = \frac{G}{2\eta_\nu} \left[2\eta_\nu \dot{\gamma} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} + 2\eta_\nu \left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} \right) \right]. \quad (D.12)$$

A equação constitutiva é reescrita como

$$\dot{\tau} + \phi(t)\tau = \psi(t). \quad (D.13)$$

D.1.1 Solução geral

A solução da equação D.13, uma equação não linear homogênea (ZILL; WRIGHT, 2012; KREYS-ZIG, 1988) é

$$\tau = \frac{\int \exp(\int \phi(t) dt + C_{cc1}) \psi(t) dt + C_{cc2}}{\exp(\int \phi(t) dt + C_{cc1})}, \quad (D.14)$$

$$\tau = \frac{\int \exp(\int \phi(t) dt + C_{cc1}) \psi(t) dt}{\exp(\int \phi(t) dt + C_{cc1})} + \frac{C_{cc2}}{\exp(\int \phi(t) dt + C_{cc1})}, \quad (D.15)$$

$$\tau = \frac{\int \exp(C_{cc1}) \exp(\int \phi(t) dt) \psi(t) dt}{\exp(C_{cc1}) \exp(\int \phi(t) dt)} + \frac{C_{cc2}}{\exp(C_{cc1}) \exp(\int \phi(t) dt)}, \quad (D.16)$$

$$\tau = \frac{\int \exp(\int \phi(t) dt) \psi(t) dt}{\exp(\int \phi(t) dt)} + \frac{C}{\exp(\int \phi(t) dt)}, \quad (D.17)$$

onde C_{cc1} and C_{cc2} são constantes e

$$C_{cc} = \frac{C_{cc2}}{\exp(C_{cc1})}. \quad (D.18)$$

D.1.2 Fator de integração

A partir da equação (D.17), nota-se que um importante passo na obtenção de uma forma explicita da tensão, na condição de contorno, é determinar a expressão do fator de integração, i.e., obter

$$\exp\left(\int \phi(t) dt\right). \quad (D.19)$$

Da equação D.12,

$$\exp\left(\int \phi(t) dt\right) = \exp\left(\int \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{\dot{G}}{G}\right) dt\right), \quad (D.20)$$

$$\exp\left(\int \phi(t) dt\right) = \exp\left(\int \left(\frac{G}{2\eta_\nu} - \frac{\dot{G}}{G}\right) dt\right), \quad (D.21)$$

$$\exp\left(\int \phi(t) dt\right) = \exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \exp\left(-\int \frac{\dot{G}}{G} dt\right) \quad (D.22)$$

e, utilizando a definição do módulo de cisalhamento,

$$G = G_0 \exp(m\lambda^{-1}), \quad (\text{D.23})$$

então,

$$\dot{G} = \overline{\dot{G}_0 \exp(m\lambda^{-1})} \quad (\text{D.24})$$

$$\dot{G} = G_0 \overline{\dot{\exp(m\lambda^{-1})}} = G_0 \frac{\partial \exp(m\lambda^{-1})}{\partial m\lambda^{-1}} \frac{\partial m\lambda^{-1}}{\partial \lambda} \dot{\lambda}, \quad (\text{D.25})$$

$$\dot{G} = G_0 \exp(m\lambda^{-1}) m(-1)\lambda^{-2} \dot{\lambda}, \quad (\text{D.26})$$

$$\dot{G} = G_0 \exp(m\lambda^{-1}) (-m)\lambda^{-2} \dot{\lambda} = G \frac{-m}{\lambda^2} \dot{\lambda}, \quad (\text{D.27})$$

e portanto,

$$\frac{\dot{G}}{G} = -\frac{m}{\lambda^2} \dot{\lambda}. \quad (\text{D.28})$$

Nota-se, também, que

$$-\int \frac{\dot{G}}{G} dt = -\int -\frac{m}{\lambda^2} \dot{\lambda} dt = \int \frac{m}{\lambda^2} d\lambda = m \int \lambda^{-2} d\lambda, \quad (\text{D.29})$$

$$-\int \frac{\dot{G}}{G} dt = \frac{m\lambda(t)^{-1}}{-1} = -\frac{m}{\lambda(t)} \quad (\text{D.30})$$

e

$$\exp\left(-\int \frac{\dot{G}}{G} dt\right) = \exp\left(-\frac{m}{\lambda(t)}\right), \quad (\text{D.31})$$

que, a partir da definição D.23, resulta em

$$\exp\left(-\int \frac{\dot{G}}{G} dt\right) = \exp\left(-\frac{m}{\lambda(t)}\right) = \frac{1}{\exp\left(\frac{m}{\lambda(t)}\right)} = \frac{1}{\frac{G}{G_0}} = \frac{G_0}{G}. \quad (\text{D.32})$$

Definindo

$$\chi = \exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \quad (\text{D.33})$$

e inserindo D.32 em (D.22), obtém-se

$$\exp\left(\int \phi(t) dt\right) = \exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \frac{G_0}{G} = \frac{\chi G_0}{G} \quad (\text{D.34})$$

A partir da definição D.33

$$\dot{\chi} = \overline{\dot{\exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right)}} = \exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \left[\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \ln \exp(1)\right], \quad (\text{D.35})$$

$$\dot{\chi} = \exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \overline{\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right)} = \exp\left(\int \frac{G}{2\eta_\nu} dt\right) \frac{G}{2\eta_\nu} \quad (\text{D.36})$$

$$\dot{\chi} = \frac{G\chi}{2\eta_\nu}. \quad (\text{D.37})$$

D.1.3 Obtendo a tensão inicial

Substituindo a equação D.34 na equação D.17,

$$\tau = \frac{\int \exp\left(\int \phi(t) dt\right) \psi(t) dt}{\exp\left(\int \phi(t) dt\right)} + \frac{C_{cc}}{\exp\left(\int \phi(t) dt\right)}, \quad (D.38)$$

$$\tau = \frac{\int \frac{\chi G_0}{\chi} \psi(t) dt}{\frac{\chi G_0}{\chi}} + \frac{C}{\frac{\chi G_0}{\chi}}, \quad (D.39)$$

$$\tau = \frac{G_0}{G_0} \frac{\int \frac{\chi \psi(t)}{\chi} dt}{\frac{\chi}{\chi}} + \frac{C}{G_0} \frac{G}{\chi}. \quad (D.40)$$

Definindo,

$$C'_{cc} = \frac{C_{cc}}{G_0}, \quad (D.41)$$

da equação D.1.3, obtém-se

$$\tau = \frac{G}{\chi} \int \frac{\chi \psi(t)}{G} dt + C'_{cc} \frac{G}{\chi}, \quad (D.42)$$

$$\tau = \frac{G}{\chi} \left[\int \frac{\chi \psi(t)}{G} dt + C'_{cc} \right] \quad (D.43)$$

$$\frac{\chi}{G} \tau = \int \frac{\chi \psi(t)}{G} dt + C'_{cc} \quad (D.44)$$

Inserindo a definição D.12,

$$\frac{\chi}{G} \tau = \int \frac{\chi}{G} \left[\frac{G}{2\eta_\nu} \left(2\eta_\nu \dot{\gamma} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} + 2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} \right) \right] dt + C' \quad (D.45)$$

$$\frac{\chi}{G} \tau = \int \left[\frac{\chi}{2\eta_\nu} \left(2\eta_\nu \dot{\gamma} + 2\eta_\mu \dot{\gamma} + 2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} \right) \right] dt + C' \quad (D.46)$$

$$\frac{\chi}{G} \tau = \int \left(\frac{\chi}{2\eta_\nu} 2\eta_\nu \dot{\gamma} + \frac{\chi}{2\eta_\nu} 2\eta_\mu \dot{\gamma} + \frac{\chi}{2\eta_\nu} 2\eta_\nu \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} \right) dt + C' \quad (D.47)$$

$$\frac{\chi}{G} \tau = \int \left(\chi \dot{\gamma} + \frac{\eta_\mu}{\eta_\nu} \chi \dot{\gamma} + \chi \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} \right) dt + C' \quad (D.48)$$

$$\frac{\chi}{G} \tau = \int \chi \dot{\gamma} dt + \int \frac{\eta_\mu}{\eta_\nu} \chi \dot{\gamma} dt + \int \chi \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} dt + C' \quad (D.49)$$

Entretanto, utilizando a integração por partes

$$\int \chi \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} dt = \chi \frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} - \int \dot{\chi} \frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} dt \quad (D.50)$$

em que, utilizando o resultado da equação D.37, é obtido

$$\int \chi \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} dt = \chi \frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} - \int \frac{G \chi}{2\eta_\nu} \frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} dt \quad (D.51)$$

$$\int \chi \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G} \dot{\gamma} \right)} dt = \chi \frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} - \int \frac{\eta_\mu}{\eta_\nu} \chi \dot{\gamma} dt \quad (D.52)$$

e, utilizando este resultado na equação (D.49), têm-se que

$$\frac{\chi}{G}\tau = \int \chi \dot{\gamma} dt + \int \frac{\eta_{\mu}}{\eta_{\nu}} \chi \dot{\gamma} dt + \chi \frac{2\eta_{\mu}\dot{\gamma}}{G} - \int \frac{\eta_{\mu}}{\eta_{\nu}} \chi \dot{\gamma} dt + C' \quad (D.53)$$

$$\frac{\chi}{G}\tau = \int \chi \dot{\gamma} dt + \chi \frac{2\eta_{\mu}\dot{\gamma}}{G} + C' \quad (D.54)$$

e finalmente, a expressão para a tensão τ é obtida,

$$\tau = \frac{\int \chi \dot{\gamma} dt + \chi \frac{2\eta_{\mu}\dot{\gamma}}{G} + C'}{\frac{\chi}{G}} \quad (D.55)$$

$$\tau = \frac{G}{\chi} \int \chi \dot{\gamma} dt + \frac{G}{\chi} \chi \frac{2\eta_{\mu}\dot{\gamma}}{G} + \frac{G}{\chi} C' \quad (D.56)$$

$$\tau = \frac{G}{\chi} \int \chi \dot{\gamma} dt + 2\eta_{\mu}\dot{\gamma} + \frac{G}{\chi} C' \quad (D.57)$$

$$\tau = \frac{G}{\chi} \left[\int \chi \dot{\gamma} dt + C' \right] + 2\eta_{\mu}\dot{\gamma}. \quad (D.58)$$

Quando não há aplicação de taxa de deformação, i.e., no instante $t = 0$, $\dot{\gamma} = 0$ e é suficiente admitir que $\tau = 0$. Portanto,

$$\chi_0 = \exp \left(\int_0^0 \frac{G}{2\eta_{\nu}} dt \right) = 1, \quad (D.59)$$

onde χ_0 é o fator χ para $t = 0$. Conclui-se que $C'_{cc} = 0$. A expressão para tensão é portanto,

$$\tau = \frac{G}{\chi} \int \chi \dot{\gamma} dt + 2\eta_{\mu}\dot{\gamma}. \quad (D.60)$$

Utilizando o limite $t \rightarrow 0^+$, obtém-se, para $\frac{G}{2\eta_{\nu}}$ limitado,

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} (\chi) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \left[\exp \left(\int_0^t \frac{G}{2\eta_{\nu}} dt \right) \right] = \exp \left(\int_0^0 \frac{G}{2\eta_{\nu}} dt \right) = 1, \quad (D.61)$$

e

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\int \chi \dot{\gamma} dt \right) = \dot{\gamma}_{ap} \lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\int \chi H(t) dt \right). \quad (D.62)$$

Esta integral pode ser resolvida, visto que conforme $t \rightarrow 0$, $\chi = 1$ e portanto

$$\dot{\gamma}_{ap} \lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\int \chi H(t) dt \right) = \dot{\gamma}_{ap} \lim_{t \rightarrow 0^+} \left(\int H(t) dt \right) = 0 \quad (D.63)$$

resultando em

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} (\tau) = 2\eta_{\mu 0} \dot{\gamma}_{ap}, \quad (D.64)$$

onde $\eta_{\mu 0} = \eta_{\mu}(t = 0) = \eta_0 \exp \alpha_2 \lambda_0$. Como visto no trabalho de Silva (2015), a depender do impacto, é possível que a microestrutura se modifique virtualmente de maneira instantânea.

D.2 Teste de tensão constante

Considera-se agora o teste de tensão constante. Novamente, a equação constitutiva é reescrita

e

$$\frac{2\eta_\nu}{G}\dot{\tau} + \left(1 - \frac{2\eta_\nu\dot{G}}{G^2}\right)\tau = \left[2\eta_\nu + 2\left(1 - \frac{2\eta_\nu\dot{G}}{G^2}\right)\eta_\mu + \frac{4\eta_\nu\dot{\eta}_\mu}{G}\right]\dot{\gamma} + \frac{4\eta_\nu\eta_\mu}{G}\ddot{\gamma} \quad (D.65)$$

$$2\eta_\nu\left(\frac{\dot{\tau}}{G} - \frac{\dot{G}}{G^2}\tau\right) + \tau = (2\eta_\nu + 2\eta_\mu)\dot{\gamma} + 2\eta_\nu\overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma}\right)} \quad (D.66)$$

$$2\eta_\nu\frac{\dot{\tau}}{G} + \tau = (2\eta_\nu + 2\eta_\mu)\dot{\gamma} + 2\eta_\nu\overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma}\right)}. \quad (D.67)$$

$$2\eta_\nu\frac{\dot{\tau}}{G} + \tau = \frac{(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{\frac{2\eta_\mu}{G}}\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma} + 2\eta_\nu\overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma}\right)} \quad (D.68)$$

$$\frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{2\eta_\nu} = \frac{G(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{4\eta_\mu\eta_\nu}\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma} + \overline{\left(\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma}\right)} \quad (D.69)$$

Definindo

$$\frac{2\eta_\mu}{G}\dot{\gamma} \equiv \varrho, \quad (D.70)$$

obém-se

$$\frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{2\eta_\nu} = \frac{G(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{4\eta_\mu\eta_\nu}\varrho + \dot{\varrho}. \quad (D.71)$$

Outras duas definições são feitas:

$$\frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{2\eta_\nu} \equiv \psi'(t); \quad (D.72)$$

e

$$\frac{G(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{4\eta_\mu\eta_\nu} \equiv \phi'(t). \quad (D.73)$$

e, analogamente ao que foi obtido para o teste de taxa de deformação,

$$\psi'(t) = \phi'(t)\varrho + \dot{\varrho} \quad (D.74)$$

e, portanto,

$$\varrho = \frac{\int \exp\left(\int \phi'(t) dt\right) \psi'(t) dt}{\exp\left(\int \phi'(t) dt\right)} + \frac{C_{cc1}}{\exp\left(\int \phi'(t) dt\right)}. \quad (D.75)$$

Define-se, novamente, que

$$\chi' = \exp\left(\int \phi'(t) dt\right) \quad (D.76)$$

e, utilizando as mesmas considerações anteriormente consideradas, a constante $C_{cc1} = 0$. Portanto,

$$\varrho = \frac{\int \chi' \psi'(t) dt}{\chi'} = \frac{\int \chi' \left(\frac{\dot{\tau}}{G} + \frac{\tau}{2\eta_\nu}\right) dt}{\chi'} = \frac{\int \chi' \frac{\dot{\tau}}{G} dt}{\chi'} + \frac{\int \chi' \frac{\tau}{2\eta_\nu} dt}{\chi'}. \quad (D.77)$$

Integrando por partes,

$$\varrho = \frac{\chi' \frac{\tau}{2\eta_\nu} - \int \dot{\chi}' \frac{\tau}{2\eta_\nu} dt}{\chi'} + \frac{\int \chi' \frac{\tau}{2\eta_\nu} dt}{\chi'} \quad (D.78)$$

$$\varrho = \frac{\tau}{G} - \frac{\int \dot{\chi}' \frac{\tau}{2\eta_\nu} dt}{\chi'} + \frac{\int \chi' \frac{\tau}{2\eta_\nu} dt}{\chi'}. \quad (D.79)$$

A partir da definição D.76, pode-se determinar, de maneira similar àquela utilizada para χ , a derivada temporal de χ'

$$\dot{\chi}' = \frac{G(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{4\eta_\mu\eta_\nu} \chi', \quad (\text{D.80})$$

e portanto,

$$\varrho = \frac{\tau}{G} - \frac{\int \left(\frac{G(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{4\eta_\mu\eta_\nu} \chi' \right) \frac{\tau}{G} dt}{\chi'} + \frac{\int \chi' \frac{\tau}{2\eta_\nu} dt}{\chi'}. \quad (\text{D.81})$$

$$\varrho = \frac{\tau}{G} + \frac{\int \left(\frac{1}{2\eta_\nu} - \frac{(2\eta_\nu + 2\eta_\mu)}{4\eta_\mu\eta_\nu} \right) \tau \chi' dt}{\chi'} \quad (\text{D.82})$$

$$\varrho = \frac{\tau}{G} - \frac{\int \frac{\tau \chi'}{2\eta_\mu} dt}{\chi'} \quad (\text{D.83})$$

$$\varrho = \frac{\tau}{G} - \tau \frac{\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt}{\chi'} + \frac{\int \dot{\tau} \left(\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt \right) dt}{\chi'}. \quad (\text{D.84})$$

A definição da função degrau unitário ($H(t)$) é

$$\frac{dH(t)}{dt} = \delta(t), \quad (\text{D.85})$$

onde $\delta(t)$ é o delta de Dirac. A definição de $\delta(t)$ pode ser enunciada como: para qualquer função $f(t)$ e um pequeno valor $\epsilon > 0$,

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} f(t)\delta(t-a) dt = f(a). \quad (\text{D.86})$$

Como consequência,

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(t)\delta(t) dt = f(0). \quad (\text{D.87})$$

Quando impõe-se um teste de tensão em $t \rightarrow 0_+$, a expressão para tensão τ é

$$\tau = H(t)\tau_{ap}, \quad (\text{D.88})$$

e portanto, utilizando as equações D.85, D.87 e D.88 em D.84, obtém-se

$$\varrho = \frac{H(t)\tau_{ap}}{G} - H(t)\tau_{ap} \frac{\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt}{\chi'} + \frac{\int \delta(t)\tau_{ap} \left(\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt \right) dt}{\chi'} \quad (\text{D.89})$$

$$\varrho = \frac{H(t)\tau_{ap}}{G} - H(t)\tau_{ap} \frac{\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt}{\chi'} + \tau_{ap} \frac{\int \delta(t) \left(\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt \right) dt}{\chi'} \quad (\text{D.90})$$

$$\varrho = \frac{H(t)\tau_{ap}}{G} - H(t)\tau_{ap} \frac{\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt}{\chi'} + \tau_{ap} \frac{\left(\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt \right)_{t=0}}{\chi'}. \quad (\text{D.91})$$

Tomando o limite $t \rightarrow 0^+$, $H(t) = 1$ e

$$\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt \rightarrow \left(\int \frac{\chi'}{2\eta_\mu} dt \right)_{t=0}. \quad (\text{D.92})$$

Portanto, a condição inicial é

$$\varrho_{t \rightarrow 0^+} = \frac{\tau_{ap}}{G_{t \rightarrow 0^+}}, \quad (\text{D.93})$$

i.e.,

$$\left(\frac{2\eta_\mu \dot{\gamma}}{G} \right)_{t \rightarrow 0^+} = \frac{\tau_{ap}}{G_{t \rightarrow 0^+}}, \quad (\text{D.94})$$

$$\dot{\gamma}_{t \rightarrow 0^+} = \frac{\tau_{ap}}{(2\eta_\mu)_{t \rightarrow 0^+}}, \quad (\text{D.95})$$

que pode ser reescrita, de maneira similar ao caso do teste de taxa de deformação constante:

$$\lim_{t \rightarrow 0^+}(\tau) = 2\eta_{\mu 0} \dot{\gamma}_{ap}$$

APÊNDICE E – Condições de Karush-Kuhn-Tucker

As discussões a serem feitas neste apêndice, tem como fundamento os resultados encontrados em livros associados à problemas de otimização em espaços euclidianos (RIBEIRO; KARAS, 2013; NOCEDAL; WRIGHT, 2006). Portanto, mais detalhes ou resultados mais gerais podem ser encontrados nesta referências. No presente apêndice será discutido apenas uma classe de problemas especial na qual os problemas do trabalho se encaixam.

Considere o problema:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && f(\underline{W}) \\ &\text{sujeito a} && \underline{A}\underline{W} = \underline{g} \\ &&& \underline{M}\underline{W} \geq \underline{r} \end{aligned} \tag{E.1}$$

onde $\underline{A} \in \mathbb{R}^{s \times n}$, $\underline{M} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, $\underline{g} \in \mathbb{R}^s$ e $\underline{r} \in \mathbb{R}^p$. É possível deduzir o seguinte

Teorema E.1. *Se \underline{W}^* é solução do problema (E.1), então existem vetores $\underline{\lambda}^* \in \mathbb{R}^s$ e $\underline{\mu}^* \in \mathbb{R}^p$ tais que*

$$\nabla f(\underline{W}^*) - \underline{A}^T \underline{\lambda}^* - \underline{M}^T \underline{\mu}^* = 0, \tag{E.2}$$

$$\mu_i^* \geq 0, \quad i = 1, 2, 3 \dots p \tag{E.3}$$

$$\mu_i \left(\sum_j^n M_{ij} W_j^* - r_i \right) = 0, \quad i = 1, 2, 3 \dots p \tag{E.4}$$

Demonstração. Teoremas 7.25 e 7.34 (RIBEIRO; KARAS, 2013). □

O teorema E.1 é um caso especial do teorema KKT (Karush-Kuhn-Tucker) (uma forma mais geral pode ser verificada no teorema 7.25 do livro de Ribeiro e Karas, 2013) e as equações (E.2) a (E.4) são frequentemente denominadas condições KKT.

Uma definição, necessária para a definição do método de conjuntos ativos, tratado no capítulo 4 é formalizada:

Definição E.1. *Considera-se o problema (E.1). Uma restrição $i_q \in \{1, 2, 3 \dots p\}$ é denominada ativa em \underline{W}_q , caso a seguinte equação seja satisfeita*

$$\sum_j^n M_{i_q j} W_j^{(q)} - r_{i_q} = 0. \tag{E.5}$$

Neste caso, é possível que $\mu_{i_q} \neq 0$.