ESTIMAÇÃO DA VISCOSIDADE POLIMÉRICA E TEMPO DE RELAXAÇÃO POR MEIO DE PROBLEMAS INVERSOS

Eduardo Marques Vieira, eduardo.m.vieira@edu.ufes.br
Wellington Betencurte da Silva, wellingtonufes@gmail.com
Ramon Silva Martins, ramon.martins@ufes.br
Marcio Ferreira Martins, marcio.martins@ufes.br
Humberto Belich, humberto.belich@ufes.br

Laboratório de Modelagem Multifísica, PPGEM, Universidade Federal do Espírito Santo, 514, Av. Fernando Ferrari, Vitória, 29.075-910, Brasil

Resumo. A viscosidade polimérica (η_p) de fluidos viscoelásticos é crucial para simulações transitórias precisas em dinâmica de fluidos computacional (DFC), mas não possui uma medida experimental direta, pois é um parâmetro numérico e não tem um análogo experimental explícito. O tempo de relaxação (λ) possui significado físico, mas pode ser desafiador de medir experimentalmente. Neste trabalho, propomos uma abordagem de problema inverso para estimar simultaneamente η_p e λ utilizando o método de Cadeias de Markov Monte Carlo (MCMC – em inglês). Desenvolvemos uma resposta transitória viscoelástica simplificada a um estímulo em degrau, baseada na equação constitutiva de Jeffreys, para descrever a resposta transitória de um fluido viscoelástico sob cisalhamento. Isso serve como base para a formulação do problema inverso. Aplicando o método MCMC, estimamos η_p e λ a partir de dados experimentais e validamos a abordagem por meio de simulações numéricas usando o modelo Oldroyd-B. Nossos resultados demonstram que os valores estimados de η_p e λ reproduzem efetivamente as tendências experimentais de velocidade, reduzindo a lacuna entre observações experimentais e simulações DFC. A contribuição deste estudo é a capacidade de estimar η_p (que não possui análogo físico direto); além disso, λ também é estimado simultaneamente.

Palavras-chave: Fluidos viscoelásticos. Estimativa da viscosidade polimérica. Tempo de relaxação. Problemas inversos.

1. INTRODUÇÃO

Uma compreensão aprofundada da viscoelasticidade é essencial para analisar o escoamento e a evolução estrutural de fluidos como soluções e fundidos poliméricos. Embora esses fluidos se comportem como líquidos sob cisalhamento constante, eles exibem uma resposta transitória dependente do material quando submetidos a perturbações (DENN, 1990). Normalmente, fluidos viscoelásticos são formados pela adição de um soluto polimérico em um solvente newtoniano (LARSON, 2005; BELICH et al., 2025). Entre os parâmetros que governam o escoamento desses fluidos estão as viscosidades do solvente e do soluto, o tempo de relaxação e a densidade (VIEIRA et al., 2025).

A viscosidade do solvente, η_s, é simples de medir: o fluido sem soluto é testado em um viscosímetro (FISCHER; REHAGE, 1997). A densidade do fluido viscoelástico, ρ, também é de fácil determinação (EREN, 2023). O tempo de relaxação, λ, é mais delicado, mas ainda assim mensurável (FISCHER; REHAGE, 1997; PEREIRA; ANDRADE; SOARES, 2013). No entanto, a viscosidade polimérica, η_p, que é um parâmetro fundamental em todos os modelos de fluidos viscoelásticos utilizados em estudos computacionais (VIEIRA et al., 2025), não possui um análogo experimental.

Além disso, η_p e λ exercem uma influência crucial na resposta transitória do escoamento em dinâmicas de fluidos computacional (DFC). Isso significa que todos os modelos de fluidos possuem um parâmetro de difícil estimativa e, consequentemente, difícil comparação com resultados experimentais.

Figura 1 – Metodologia para estimar a viscosidade polimérica e tempo de relaxação por problemas inversos

Fonte: Produção do próprio autor.

Neste artigo, apresentaremos uma metodologia para estimar simultaneamente η_p e λ utilizando técnicas de problemas inversos, ou seja, estimar os parâmetros de simulação observando a resposta do sistema (Figura 1-centro). Com isso, podemos obter os valores de η_p e λ a partir de um experimento (Figura 1-esquerda) e utilizar esses valores como parâmetros de entrada em simulações CFD (Figura 1-direita).

2. PROBLEMAS INVERSOS E O MÉTODO DE MCMC

Problemas diretos têm como objetivo obter um campo (por exemplo, de temperatura, velocidade, pressão, concentrações) a partir do conhecimento das propriedades físicas, termos-fonte e condições iniciais e de contorno (ORLANDE et al., 2011). Por outro lado, problemas inversos têm como objetivo estimar parâmetros de entrada (como condutividade térmica, viscosidade, etc.) por meio da observação das respostas de saída.

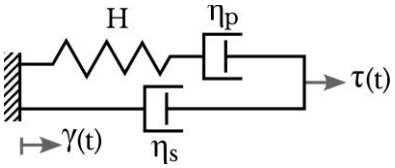
O método Cadeia de Markov Monte Carlo (MCMC – em inglês) é uma abordagem probabilística amplamente utilizada para a estimação de parâmetros em sistemas complexos, especialmente quando o espaço de soluções é de alta dimensão ou não linear (UR REHMAN; DASS; ASIRVADAM, 2015). O MCMC gera uma sequência de amostras da distribuição de probabilidade a posteriori dos parâmetros por meio da construção de uma cadeia de Markov que converge para essa distribuição-alvo. Isso é realizado por meio de amostragem iterativa, na qual a verossimilhança de cada nova amostra é avaliada com base em uma distribuição proposta e em um critério de aceitação. O método fornece não apenas estimativas pontuais para os parâmetros, mas também uma quantificação da incerteza, tornando-o particularmente valioso para problemas que envolvem incerteza ou dados incompletos (GREEN; WORDEN, 2015).

3. O PADRÃO DA RESPOSTA

Suponha um escoamento laminar com condição inicial de repouso, $\boldsymbol{u} = (0,0,0)$ m/s. No instante $t = 0$ s, uma velocidade constante é imposta; consequentemente, a velocidade em um ponto específico, $\boldsymbol{u}(x, y, z, t)$, parte de zero e se aproxima assintoticamente de um valor final u_f.

O modelo de sistema proposto neste artigo é baseado no modelo de Jeffreys (JEFFREYS, 1929), que possui um análogo mecânico representado por dois braços: um com um amortecedor representando a viscosidade do solvente, η_s, e outro com uma mola representando a elasticidade do polímero, H, e um amortecedor em série, que representa a "viscosidade polimérica", η_p. A Figura 2 mostra este sistema.

Figura 2 – Representação esquemática do modelo de Jeffreys para um fluido viscoelástico



Fonte: Produção do próprio autor.

3.1. DESENVOLVENDO O MODELO JEFFREYS

Nesta subseção, desenvolveremos a equação constitutiva do modelo de Jeffreys. Para isso, correlacionaremos a tensão e a taxa de deformação em ambos os braços e, posteriormente, somaremos as tensões.

3.1.1. O braço polimérico

A deformação $\boldsymbol{\gamma}_1$ no ramo superior é a soma da deformação na mola $\boldsymbol{\gamma}_m$ e da deformação no amortecedor $\boldsymbol{\gamma}_a$, ou seja,

$$\boldsymbol{\gamma}_1 = \boldsymbol{\gamma}_m + \boldsymbol{\gamma}_a \,. \tag{1}$$

Derivando a equação (1) em relação ao tempo obtemos a equação (2),

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}_1 = \dot{\boldsymbol{\gamma}}_m + \dot{\boldsymbol{\gamma}}_a \,. \tag{2}$$

A tensão em uma mola Hookeana é dada pela equação (3),

$$\boldsymbol{\tau}_m = H\boldsymbol{\gamma}_m \rightarrow \boldsymbol{\gamma}_m = \frac{\boldsymbol{\tau}_m}{H} \rightarrow \dot{\boldsymbol{\gamma}}_m = \frac{1}{H}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}_m}{\partial t} \tag{3}$$

e a tensão em um amortecimento Newtoniano é dada pela equação (4),

$$\boldsymbol{\tau}_a = \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}_a \rightarrow \dot{\boldsymbol{\gamma}}_a = \frac{1}{\eta_p}\boldsymbol{\tau}_a \tag{4}$$

Substituindo (3) e (4) na equação (2) tem-se a equação (5),

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}_1 = \frac{1}{H}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}_m}{\partial t} + \frac{1}{\eta_p}\boldsymbol{\tau}_a \,. \tag{5}$$

Note que $\boldsymbol{\tau}_m = \boldsymbol{\tau}_a = \boldsymbol{\tau}_1$, pois a mola e o amortecedor estão em série. Reorganizando a equação (5), obtemos a correlação entre a tensão e a taxa de deformação para o braço superior (equação (6)):

$$\boldsymbol{\tau}_1 + \frac{\eta_p}{H}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}_1}{\partial t} = \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}_1 \tag{6}$$

3.1.2. O braço do solvente

A equação (7) denota a tensão no braço do solvente, que é dada por um amortecedor Newtoniano:

$$\boldsymbol{\tau}_2 = \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}}_2 \tag{7}$$

3.1.3. A equação constitutiva

A tensão total, $\boldsymbol{\tau}$, é a soma da tensão em ambos os braços, i.e., $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2$, o que implica em

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_2 \tag{8}$$

Substituindo a equação (8) na equação (6), tem-se a equação (9):

$$\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_2 + \frac{\eta_p}{H}\frac{\partial(\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\tau}_2)}{\partial t} = \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_2 + \frac{\eta_p}{H}\left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} - \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_2}{\partial t}\right) = \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}_1 \,. \tag{9}$$

Pela equação (7):

$$\boldsymbol{\tau} - \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}}_2 + \frac{\eta_p}{H}\left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} - \frac{\partial(\eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}}_2)}{\partial t}\right) = \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}_1 \,, \tag{10}$$

e como η_s é constante com relação ao tempo, $\frac{\partial(\eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}}_2)}{\partial t} = \eta_s \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}_2}{\partial t}$. Além disso, como os braços estão em paralelo, a deformação necessita ser igual em ambos os braços, conforme a equação (11).

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}_1 = \dot{\boldsymbol{\gamma}}_2 = \dot{\boldsymbol{\gamma}} \,, \tag{11}$$

então, a equação (10) se modifica para equação (12),

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\eta_p}{H}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} - \frac{\eta_s \eta_p}{H}\frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}}{\partial t} = \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}} \,. \tag{12}$$

Reorganizando, finalmente obtemos a equação (13), que é a equação constitutiva do modelo de Jeffreys:

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\eta_p}{H}\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} = \left(\eta_s + \eta_p\right)\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \frac{\eta_s \eta_p}{H}\frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}}{\partial t} \,. \tag{13}$$

3.2. A EQUAÇÃO CONSTITUTIVA NO DOMÍNIO DA FREQUÊNCIA

Nesta subseção, manipularemos a equação constitutiva no domínio do tempo da seção anterior e a transformaremos para o domínio da frequência aplicando a transformada de Laplace.

Seja o estímulo do sistema no domínio do tempo $\boldsymbol{\tau}(t)$, assim, a transformada de Laplace nos fornece $\boldsymbol{T}(s)$, onde s é a frequência. Além disso, se a resposta no domínio do tempo for $\dot{\boldsymbol{\gamma}}(t)$, então no domínio da frequência ela se torna $\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s)$.

Utilizamos a transformada de Laplace porque é bem conhecido que, se a transformada de Laplace de $x(t)$ é $X(s)$, então a transformada de Laplace de $\frac{\partial x(t)}{\partial t}$ é $sX(s)$, ou seja, passar para o domínio da frequência facilita o tratamento das derivadas.

Ao aplicar a transformada de Laplace na equação (13), obtêm-se

$$\boldsymbol{T}(s) + \frac{\eta_p}{H} s\boldsymbol{T}(s) = \left(\eta_s + \eta_p\right)\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) + \frac{\eta_s \eta_p}{H} s\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) \,. \tag{14}$$

Organizando a equação (14), desenvolvemos a equação (15),

$$\left(1 + \frac{\eta_p}{H} s\right)\boldsymbol{T}(s) = \left(\left(\eta_s + \eta_p\right) + \frac{\eta_s \eta_p}{H} s\right)\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) \,, \tag{15}$$

portanto, o estímulo do sistema é dado pela equação (16):

$$\boldsymbol{T}(s) = \frac{\left(\eta_s + \eta_p\right) + \frac{\eta_s \eta_p}{H} s}{1 + \frac{\eta_p}{H} s}\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) \,. \tag{16}$$

Com a equação (16), a equação constitutive foi transposta para o domínio da frequência por meio da transformada de Laplace.

3.3. A FUNÇÃO DE TRANSFERÊNCIA

Seja $\boldsymbol{T}(s)$ a entrada de um sistema e $\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s)$ a saída. A função de transferência $G(s)$ correlaciona-os, de modo que

$$\boldsymbol{T}(s)\mathrm{G(s)} = \dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) \,, \tag{17}$$

consequentemente, manipulando a equação (17), a função de transferência dada pela equação (18) é

$$\mathrm{G(s)} = \frac{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s)}{\boldsymbol{T}(s)} \,. \tag{18}$$

Então, para o nosso caso, tem-se a equação (19),

$$\mathrm{G(s)} = \frac{\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s)}{\frac{\left(\eta_s+\eta_p\right)+\frac{\eta_s\eta_p}{H}s}{1+\frac{\eta_p}{H}s}\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s)} = \frac{\frac{\eta_p}{H}s + 1}{\frac{\eta_s\eta_p}{H}s + \left(\eta_s + \eta_p\right)} \,. \tag{19}$$

3.4. A RESPOSTA DO SISTEMA A UM ESTÍMULO AO DEGRAU

A entrada do sistema no domínio do tempo é

$$\boldsymbol{\tau}(\mathrm{t}) = \begin{cases} 0, t < 0 \\ A, t \geq 0 \end{cases}$$

e aplicando a transformada de Laplace

$$\boldsymbol{T}(\mathrm{s}) = \frac{A}{s} \,, \tag{20}$$

e substituindo a equação (20) na equação (17) obtêm-se

$$\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) = \frac{A}{s}\frac{\frac{\eta_p}{H}s + 1}{\frac{\eta_s\eta_p}{H}s + \left(\eta_s + \eta_p\right)} \,, \tag{21}$$

Neste ponto, para simplificar a notação, utilizaremos o tempo de relaxação $\lambda = \eta_p/H$ e a viscosidade total $\eta = \eta_s + \eta_p$, assim,

$$\dot{\boldsymbol{\Gamma}}(s) = \frac{A(\lambda s + 1)}{s(\eta_s \lambda s + \eta)} \,. \tag{22}$$

Para poder retornar ao domínio do tempo, precisamos aplicar a transformada inversa de Laplace. Assim, reescreveremos a fração na equação (22) da seguinte forma:

$$A\frac{\lambda s+1}{s(\eta_s\lambda s+\eta)} = A\left(\frac{B}{s}+\frac{C}{\eta_s\lambda s+\eta}\right) \tag{23}$$

Desse modo, utilizando frações parciais, a resposta no domínio da frequência se torna

$$\dot{\mathbf{\Gamma}}(s) = A\left(\frac{1/\eta}{s}+\left[\lambda\left(1-\frac{\eta_s}{\eta}\right)\right]\frac{1}{s(\eta_s\lambda s+\eta)}\right)\,. \tag{24}$$

Fazendo $\beta = \frac{\eta_s}{\eta_s+\eta_p}$ a razão da viscosidade do solvente para a viscosidade total, tem-se

$$\dot{\mathbf{\Gamma}}(s) = \frac{A}{\eta_s+\eta_p}\frac{1}{s}-\frac{A}{\eta_p}\frac{1}{s+\frac{\beta}{\lambda}}, \tag{25}$$

Assim, aplicando a transformada inversa de Laplace na equação (25), a resposta no domínio do tempo é

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}(t) = \frac{A}{\eta_s+\eta_p}-\frac{A}{\eta_p}e^{-\frac{\beta}{\lambda}t}\,. \tag{26}$$

Isso implica que a resposta da velocidade tem uma forma análoga, isto é,

$$u(t) = u_f - u_f e^{-\frac{\beta}{\lambda}t}\,. \tag{27}$$

Note que, na equação (27), $u(0)=0$ e $u(\infty)=u_f$. No entanto, como nosso ponto de partida é simples, ou seja, o modelo de Jeffreys, a resposta obtida não apresenta oscilações, uma propriedade que os fluidos viscoelásticos possuem (HALIN et al., 1998; XUE; TANNER; PHAN-THIEN, 2004; ZHANG et al., 2019). Portanto, propomos a seguinte modificação:

$$u(t) = u_f - u_f e^{-\frac{\beta}{\lambda}t}\cos\left(\frac{1}{\lambda}\sqrt{1-\beta^2}\,t\right) \tag{28}$$

Nesta equação (28), a frequência natural é $\omega_n = 1/\lambda$, o fator de amortecimento é β e a frequência de amortecimento é $\omega_a = \frac{1}{\lambda}\sqrt{1-\beta^2}$.

A equação (28) é utilizada quando o escoamento é iniciado abruptamente, enquanto a equação (29) é aplicada quando o escoamento é interrompido de forma súbita, sendo u_i a velocidade inicial no ponto considerado.

Se o fluido for Newtoniano ($\beta = 1$), a velocidade atinge o valor final sem oscilações. Entretanto, se houver contribuição elástica, a velocidade apresenta um overshoot seguido de uma resposta oscilatória. Além disso, o overshoot aumenta conforme o número de Weissenberg cresce (KHARAZMI; D'ORTONA; FAVIER, 2022), por exemplo, com o aumento da concentração polimérica (GUIDO et al., 2022). Se o fluido estiver em uma determinada velocidade e for abruptamente parado, o undershoot também se torna relevante à medida que Wi aumenta (GUIDO et al., 2022).

$$u(t) = u_i e^{-\frac{\beta}{\lambda}t}\cos\left(\frac{1}{\lambda}\sqrt{1-\beta^2}\,t\right) \tag{29}$$

4. ESTIMANDO OS PARÂMETROS DE UM TRABALHO EXPERIMENTAL

4.1. METODOLOGIA

Foi utilizado o algoritmo de Metropolis-Hastings (METROPOLIS et at., 1953) para a estimativa de parâmetros, empregando o método MCMC (LUENGO et al., 2020) para estimar η_p e λ a partir do trabalho experimental de Davies et al. (2010), no qual uma solução de CPyCl/NaSal é analisada em uma cessação abrupta do cisalhamento em um escoamento Couette de fenda larga.

Para isso, o algoritmo aleatoriza o palpite inicial e compara se o novo palpite é melhor com base no ajuste da curva experimental.

Como o MCMC é um método de otimização estocástico, a solução final varia e raramente converge para o mesmo resultado. Portanto, o algoritmo foi executado múltiplas vezes para obter um intervalo de confiança estatisticamente representativo.

No nosso caso particular, cada MCMC foi realizado com um período de burn-in de 2.000 amostras, totalizando 10.000 amostras. Esse processo foi repetido 500 vezes.

Definimos o valor inicial do parâmetro $\boldsymbol{P}$ e geramos um novo valor candidato, $\boldsymbol{P}^*$, expresso pela equação (30):

$$\boldsymbol{P}^* = \boldsymbol{P}_i + \sigma \tag{30}$$

onde $\boldsymbol{P}_i$ é o parâmetro atual e σ é um número aleatório que segue uma distribuição normal variando de $-\sigma$ a $+\sigma$.

Em seguida, é definida a probabilidade de aceitação α e, se um número aleatório entre zero e um for menor que α, o parâmetro candidato $\boldsymbol{P}^*$ é utilizado para resolver a equação do modelo. Se o coeficiente de determinação deste candidato (R^{2*}) for menor que o valor atual R^2, então o parâmetro $\boldsymbol{P}_i$ é atualizado (LIMA et al., 2024).

O algoritmo tem como objetivo maximizar o coeficiente de determinação, R^2 (equação (31)), pois $R^2 \to 1$ representa um bom ajuste da curva aos dados experimentais, enquanto $R^2 \to 0$ representa um ajuste ruim (OZER, 1985).

$$\mathrm{R}^2 \;=\; 1 \;-\; \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i \;-\; \hat{Y}_i}{\sum_{i=1}^{n} Y_i \;-\; \overline{Y}} \tag{31}$$

onde Y_i é o i-ésimo dado observado, $\hat{Y}_i$ é o i-ésimo dado estimado e $\overline{Y}$ é a média dos dados observados.

O processo se repete até atingir o número máximo de amostras.

Após aplicar o método n vezes e calcular as médias $\bar{\eta}_p$ e $\bar{\lambda}$ e os desvios padrões s_{η_p} e s_λ, definimos nosso nível de confiança CL. Consultamos o valor crítico z na tabela t-Student com $n-1$ graus de liberdade e nível de confiança CL.

O erro padrão é dado pela equação (32),

$$SE \;=\; \frac{s}{\sqrt{n}} \tag{32}$$

e o intervalo de confiança pela equação (33),

$$\begin{aligned} CL_{\eta_p} \;&=\; \bar{\eta}_p \pm zSE_{\eta_p} \\ CL_{\lambda} \;&=\; \bar{\lambda} \pm zSE_{\lambda} \end{aligned} \tag{33}$$

4.2. ANÁLISE ESTATÍSTICA

Como estamos avaliando uma parada abrupta a partir do trabalho de Davies et al. (2010), implementamos a equação 29 no algoritmo MCMC. Seguindo a subseção anterior, aplicamos o método MCMC quinhentas vezes, ou seja, $n = 500$, e escolhemos $CL = 95\%$. Consultando a tabela t-Student, obtemos $z = 1.965$. Em seguida, obtivemos $\bar{\eta}_p = 54.5416$ Pa.s, $s_{\eta_p} = 4.2640$ Pa.s, $\bar{\lambda} = 0.0037$ s e $s_\lambda = 0.0021$ s.

Isso implica na equação (34).

$$\begin{aligned} SE_{\eta_p} \;&=\; \frac{s_{\eta_p}}{\sqrt{n}} = 0.1907 \text{ Pa.s} \\ SE_{\lambda} \;&=\; \frac{s_\lambda}{\sqrt{n}} = 0.0001 \text{ s} \end{aligned} \tag{34}$$

Por fim, com 95% de confiança, os intervalos de confiança dos parâmetros são expostos pela equação (35).

$$\begin{aligned} CL_{\eta_p} \;&=\; 54.5416 \pm\; 0.3747 \text{ Pa.s} \\ CL_{\lambda} \;&=\; 0.0037 \pm\; 0.0002 \text{ s} \end{aligned} \tag{35}$$

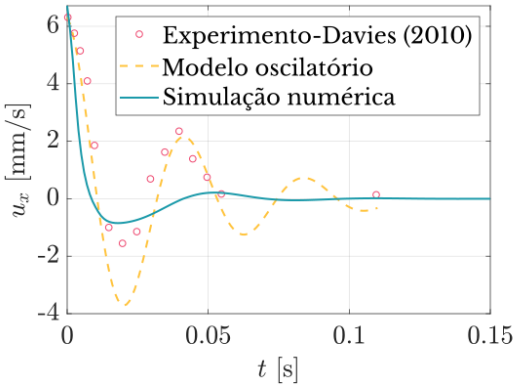
5. OS PARÂMETROS ESTIMADOS COMO ARGUMENTOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Na seção anterior, utilizamos o método MCMC para obter a viscosidade polimérica e o tempo de relaxação a partir de um experimento com solução diluída. Agora, utilizaremos esses valores de η_p e λ como parâmetros na simulação do modelo Oldroyd-B. Em seguida, simulamos um *wide-gap Couette flow* com $\eta_p = 54.5416$ Pa.s e $\lambda = 0.0037$ s.

A Figura 3 apresenta a evolução temporal da velocidade u_x, comparando os dados experimentais, o modelo oscilatório proposto e a simulação do modelo Oldroyd-B com os parâmetros estimados. Os resultados experimentais exibem um

overshoot inicial seguido por oscilações antes de atingir uma velocidade nula em regime permanente. O modelo oscilatório utilizado no problema inverso para estimar η_p e λ pelo método MCMC apresenta um *overshoot* mais pronunciado em relação aos dados experimentais. Entretanto, a simulação do modelo Oldroyd-B, ou seja, o problema direto com o argumento η_p e λ, fornece um ajuste mais próximo da tendência observada. O forte acordo entre as medições experimentais e a simulação do modelo Oldroyd-B indica que os valores estimados de η_p e λ ajustaram de forma precisa o comportamento viscoelástico do fluido, validando a eficácia da abordagem inversa empregada para a estimativa.

Figura 3 – Representação esquemática do modelo de Jeffreys para um fluido viscoelástico



Fonte: Produção do próprio autor.

6. CONCLUSÕES

Este estudo desenvolveu com sucesso uma abordagem de problema inverso para estimar a viscosidade polimérica (η_p) e o tempo de relaxação (λ), estabelecendo uma ponte entre observações experimentais e simulações computacionais. A metodologia proposta fornece uma solução prática para um desafio antigo na modelagem de fluidos viscoelásticos, permitindo simulações CFD mais precisas utilizando parâmetros de entrada realistas.

Uma limitação deste estudo é o uso do modelo de Jeffreys como ponto de partida. Embora algebricamente conveniente, este modelo pode não capturar efeitos viscoelásticos não lineares complexos observados em certas soluções poliméricas.

É importante enfatizar que o modelo proposto baseado no modelo de Jeffreys, desenvolvido neste artigo, não tem como objetivo substituir um trabalho de simulação. Trata-se de um modelo semiempírico simples, proposto apenas para estimar os parâmetros e, uma vez estimados a viscosidade polimérica e o tempo de relaxação, podemos utilizá-los como parâmetros de entrada em simulações numéricas (neste caso, usando o modelo de fluido viscoelástico Oldroyd-B).

Em conclusão, alcançamos com sucesso nosso objetivo, ou seja, utilizar o problema inverso para conectar experimentos a simulações por meio da estimativa dos valores de η_p e λ obtidos experimentalmente.

Encorajamos os pesquisadores experimentalistas a incluir evoluções temporais da velocidade em um ponto e a aplicar o problema inverso para estimar os parâmetros.

7. REFERÊNCIAS

BELICH, Humberto; FERREIRA MARTINS, Marcio; SILVA MARTINS, Ramon; SILVA AMORIM, Leandro; MARQUES VIEIRA, Eduardo. From the FENE Model to Polymer Rupture. **Brazilian Journal of Physics**, v. 55, n. 1, p. 15, 2025.

DAVIES, Colin J.; SEDERMAN, Andrew J.; PIPE, Chris J.; MCKINLEY, Gareth H.; GLADDEN, Lynn F.; JOHNS, Mike L. Rapid measurement of transient velocity evolution using GERVAIS. **Journal of Magnetic Resonance**, Amsterdam, v. 202, n. 1, p. 93–101, 2010.

DENN, Morton M. Issues in viscoelastic fluid mechanics. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 22, n. 1, p. 13–32, 1990.

EREN, Halit. Density measurement. In: **Mechanical Variables Measurement – Solid, Fluid, and Thermal**. CRC Press, 2023. p. 1–18.

FISCHER, Peter; REHAGE, Heinz. Rheological master curves of viscoelastic surfactant solutions by varying the solvent viscosity and temperature. **Langmuir**, v. 13, n. 26, p. 7012–7020, 1997.

GREEN, Peter L.; WORDEN, Keith. Bayesian and Markov chain Monte Carlo methods for identifying nonlinear systems in the presence of uncertainty. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 373, n. 2051, p. 20140405, 2015.

GUIDO, Renzo; RINDERKNECHT, Felipe; CABEZA, Cecilia; MARTÍ, Arturo C.; SARASÚA, Gustavo. Development and decay of vortex flows in viscoelastic fluids between concentric cylinders. Journal of Physics: Condensed Matter, Bristol, v. 34, n. 15, p. 154003, 2022.

HALIN, P.; LIELENS, G.; KEUNINGS, Roland; LEGAT, Vincent. The Lagrangian particle method for macroscopic and micro–macro viscoelastic flow computations. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 79, n. 2–3, p. 387–403, 1998.

JEFFREYS, H. The Earth. Cambridge: **Cambridge University Press**, 1929.

KHARAZMI, Amir Hosein Nosrat; D'ORTONA, Umberto; FAVIER, Julien. Oscillatory forcing of viscoelastic fluids using Lattice Boltzmann method. In: **25ème Congrès Français de Mécanique**, 2022.

LARSON, Ronald G. The rheology of dilute solutions of flexible polymers: progress and problems. **Journal of Rheology**, v. 49, n. 1, p. 1–70, 2005.

LIMA, Haianny Beatriz Saraiva; SOUSA, Ana Paula Souza de; SILVA, Wellington Betencurte da; COSTA, Deibson Silva da; RODRIGUES, Emerson Cardoso; ESTUMANO, Diego Cardoso. Parameter Estimation of Breakthrough Curve Models in the Adsorption Process of H2S and CO2 Using the Markov Chain Monte Carlo Method. **Applied Sciences**, v. 14, n. 16, p. 6956, 2024.

LUENGO, David; MARTINO, Luca; BUGALLO, Mónica; ELVIRA, Víctor; SÄRKKÄ, Simo. A survey of Monte Carlo methods for parameter estimation. **EURASIP Journal on Advances in Signal Processing**, v. 2020, p. 1–62, 2020.

METROPOLIS, Nicholas; ROSENBLUTH, Arianna W.; ROSENBLUTH, Marshall N.; TELLER, Augusta H.; TELLER, Edward. Equation of state calculations by fast computing machines. **The Journal of Chemical Physics**, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953.

ORLANDE, Hélcio R. B.; COLAÇO, Marcelo J.; COTTA, Carolina P. N.; GUIMARÃES, Gilmar; BORGES, Valério L. Problemas Inversos em Transferência de Calor. São Carlos, SP: SBMAC, 2011. **Notas em Matemática Aplicada**, v. 51, p. 113. Aplicações em problemas inversos e transferência de calor.

OZER, Daniel J. Correlation and the coefficient of determination. **Psychological Bulletin**, v. 97, n. 2, p. 307, 1985.

PEREIRA, Anselmo S.; ANDRADE, Rafhael M.; SOARES, Edson J. Drag reduction induced by flexible and rigid molecules in a turbulent flow into a rotating cylindrical double gap device: comparison between Poly (ethylene oxide), Polyacrylamide, and Xanthan Gum. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 202, p. 72–87, 2013.

UR REHMAN, M. Javvad; DASS, Sarat Chandra; ASIRVADAM, Vijanth Sagayan. Markov chain Monte Carlo (MCMC) method for parameter estimation of nonlinear dynamical systems. In: **2015 IEEE International Conference on Signal and Image Processing Applications (ICSIPA)**. Piscataway, NJ: IEEE, 2015. p. 7–10.

VIEIRA, Eduardo; MARTINS, Ramon; MARTINS, Marcio; BELICH, Humberto; AMORIM, Leandro. Modeling polymer rupture: The Elastic to Softening Transition and Rupture Analysis model. **Physics of Fluids**, v. 55, n. 1, p. 15, 2025.

XUE, S.-C.; TANNER, R. I.; PHAN-THIEN, N. Numerical modelling of transient viscoelastic flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 123, n. 1, p. 33–58, 2004.

ZHANG, Meng; ZHANG, Wu; WU, Zhengwei; SHEN, Yinan; WU, Huayin; CHENG, Jianping; ZHANG, Hongna; LI, Fengchen; CAI, Weihua. Modulation of viscoelastic fluid response to external body force. **Scientific Reports**, v. 9, n. 1, p. 9402, 2019.

8. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao LabTecMec-UFES por patrocinar o evento e a toda a comissão organizadora. Eduardo Marques Vieira agradece ainda a FAPES – n° 319/2024 pela bolsa de doutorado concedida para dedicação exclusiva.

9. RESPONSABILIDADE PELAS INFORMAÇÕES

Os autores são os únicos responsáveis pelas informações incluídas neste trabalho.