



Universidade do Porto

Faculdade de Engenharia

FEUP

Manuel António Moreira Alves

Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos em Regime Laminar

Análise Numérica, Teórica e Experimental

UNIVERSIDADE DO PORTO
Faculdade de Engenharia
BIBLIOTECA M
N.º 79770
CDU 62,1(043)
Data 8, 6, 2004

Resumo

A presente tese tem como objectivo o estudo teórico, experimental e numérico do escoamento de fluidos viscoelásticos em condições de regime laminar.

Do ponto de vista teórico analisam-se os escoamentos de Couette e de Poiseuille de um fluido viscoelástico descrito pelo modelo PTT. São deduzidas as soluções analíticas para os perfis transversais das diversas variáveis, em condições de escoamento completamente desenvolvido. Demonstra-se a possibilidade de ocorrência de instabilidades, identificando-se as condições críticas para o escoamento de Poiseuille, que estão relacionadas com a ocorrência de um máximo na curva da tensão de corte em função da taxa de deformação, para o escoamento reométrico de Couette. Este estudo também providencia as equações necessárias para implementação das condições fronteira nas paredes, para utilização no programa de simulação.

Em termos numéricos, implementam-se diversos esquemas de alta resolução clássicos, para a discretização dos termos convectivos das equações constitutivas, num procedimento de cálculo baseado no método dos volumes finitos. A simulação numérica do escoamento de referência de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 permite confirmar a elevada estabilidade dos métodos de alta resolução. A simulação do escoamento de referência dos fluidos UCM e Oldroyd-B, em torno de um cilindro confinado entre duas placas planas, demonstra a elevada precisão da metodologia desenvolvida, apresentando-se soluções de referência com precisão equivalente à obtida com métodos de elementos finitos. A principal vantagem do método dos volumes finitos reside numa redução significativa dos recursos computacionais, em particular em termos de memória necessária.

Para valores elevados da elasticidade do escoamento verifica-se que os métodos de alta resolução clássicos apresentam algumas dificuldades de convergência iterativa. Para colmatar esta limitação propõe-se um novo esquema de alta resolução, denominado CUBISTA, que possui propriedades de convergência iterativa melhoradas, aliadas a uma elevada precisão numérica. O esquema CUBISTA é aplicado ao estudo numérico do escoamento dos fluidos Oldroyd-B e PTT numa contracção plana 4:1, obtendo-se soluções com precisão claramente superior às existentes na literatura, numa gama mais alargada de valores do número de Débora. Em particular, para a versão exponencial do modelo PTT são obtidas soluções numéricas de elevada precisão para valores do número de Débora superiores a 10000.

Apresentam-se resultados experimentais de visualização do escoamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos numa contracção quadrada tridimensional 4:1, e numa expansão quadrada tridimensional 1:4, usando uma técnica de iluminação com luz laser e fotografia de elevado tempo de exposição.

Demonstra-se experimentalmente, e confirma-se por simulação numérica, que a elasticidade e a inércia conduzem a efeitos opostos, quer para o escoamento na contracção, quer na expansão. Para valores elevados da elasticidade verifica-se uma inversão no sentido do escoamento, no interior da recirculação junto ao plano de contracção. Esta observação experimental é confirmada numericamente, usando um modelo PTT multimodo, reproduzindo-se com precisão as visualizações do padrão de escoamento.

Palavras-chave: Fluidos viscoelásticos; Simulação numérica; Soluções analíticas; Visualização do escoamento; Reologia Computacional; Método dos Volumes Finitos; Métodos de alta resolução; CUBISTA; Fluidos de Boger; Contracção plana 4:1; Equações constitutivas diferenciais; Modelos UCM, Oldroyd-B e PTT.

Abstract

Laminar flow of viscoelastic fluids: numerical, theoretical and experimental analysis.

The main objective of the present thesis is to investigate laminar flows of viscoelastic fluids, using theoretical, experimental and numerical approaches.

The Couette and Poiseuille flows of PTT fluids are studied theoretically, and analytical solutions are derived for the transverse profiles of the relevant variables, under fully developed flow conditions. The possibility of occurrence of flow instabilities is demonstrated, and critical conditions are identified. It is demonstrated that the Poiseuille flow instability is related to the existence of a maximum in the shear stress *vs.* shear rate curve, for the Couette flow.

In terms of computational techniques, several classical high resolution schemes for the discretization of the convective terms of the constitutive equations are implemented in a finite volume method. The numerical simulation of the benchmark 4:1 planar contraction flow of UCM fluids confirms the boundedness property of these high resolution schemes, leading to enhanced stability of the solution algorithm. The second benchmark problem considered, the flow of UCM and Oldroyd-B fluids past a cylinder in a channel, demonstrates the high accuracy of the methodology developed, with similar degree of accuracy as that yielded by state of the art numerical *h-p* finite-element methods. The main advantage of the present finite volume method resides in a significant reduction of computational resources, mainly in terms of required memory.

For high elasticity values it is found that classical high resolution schemes can lead to iterative convergence difficulties. To avoid this limitation, a new high resolution scheme is proposed and it is demonstrated that this new scheme (CUBISTA) possesses enhanced convergence properties and high numerical accuracy. CUBISTA is then used for the numerical simulation of the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. Existing numerical solutions for this benchmark problem are highly inaccurate and the present work provides accurate solutions for a wider range of elasticity conditions, particularly in the case of the exponential version of the PTT model, for which Deborah numbers in excess of 10000 are achieved.

Flow visualizations are presented for Newtonian and viscoelastic fluids in two configurations: a 3D 4:1 square/square contraction and a 3D 1:4 square/square expansion. Streakline photography is used to visualize the flow patterns on the centreplane of the square ducts. The flow visualizations and the numerical results show that elasticity and inertia have opposite effects on the flow pattern, both for contraction and expansion flows. A new experimental finding is that elasticity leads to an inversion of the flow patterns within the recirculation zones for the 3D contraction flow. This is confirmed by numerical simulations with a multimode version of the PTT model, which is able to reproduce reasonably well the main characteristics of the observed viscoelastic flow patterns.

Keywords: Viscoelastic fluids; Numerical simulation; Analytical solutions; Flow visualization; Computational Rheology; Finite Volume Method; CUBISTA; Boger fluids; 4:1 planar contraction; Differential constitutive equations; UCM, Oldroyd-B and PTT models.

Résumé

Écoulement des fluides viscoélastiques en régime laminaire: analyse numérique, théorique et expérimental.

L'objectif principal de cette thèse est l'étude de l'écoulement des fluides viscoélastiques en régime laminaire, en utilisant des approches théoriques, expérimentales et numériques.

L'écoulement de Couette et de Poiseuille d'un fluide qui obéit le modèle PTT est analysé théoriquement, et des solutions analytiques sont obtenus pour les profils transversaux des variables pertinentes, sous conditions d'écoulement complètement développé. La possibilité de occurrence d'instabilités est démontrée, et les correspondantes conditions critiques sont identifiées.

En ce qui concerne l'analyse numérique, plusieurs schémas classiques de haute résolution pour la discretization des fluxes convectifs des équations constitutives sont introduits dans un programme basée à la méthode du volume finie. La simulation numérique de l'écoulement d'un fluide UCM dans une contraction plane 4:1 confirme la stabilité de l'algorithme devisé pour la résolution des équations. La simulation numérique de l'écoulement des fluides de type UCM et Oldroyd-B autour d'un cylindre placé dans un canal, démontre la haute précision de la méthodologie développée.

On a trouvé que, pour des hautes valeurs d'élasticité du fluide, les schémas classiques de haute résolution peuvent conduire à des difficultés de convergence itérative. Afin de contourner cette limitation, un nouveau schéma de haute résolution, intitulé CUBISTA, est proposé et on a démontré qu'il possède de bonnes propriétés de convergence itérative, et une haute précision numérique. Le schéma CUBISTA est utilisé pour la simulation numérique de l'écoulement des fluides Oldroyd-B et PTT dans une contraction plane 4:1. On montre que la précision numérique des solutions numériques existantes est basse, et donc on obtient des solutions numériques de haute précision, dans une gamme alarguée de conditions d'élasticité, mesurée par le numéro de Debra. En particulier, pour la version exponentielle du modèle PTT des simulations numériques pour des numéros de Debra supérieurs à 10 000 sont obtenus avec haute précision.

Visualisations de l'écoulement des fluides Newtoniens et viscoélastiques sont présentées pour une contraction tridimensionnel 4:1:1, et pour une expansion tridimensionnel 1:4:4 en usant une technique d'illumination laser et photographie de grand temps d'exposition. Il a été démontré, à partir des visualisations de l'écoulement et des simulations numériques, que l'élasticité et l'inertie conduisent à des effets contraires sur le modèle d'écoulement dans les géométries étudiées. L'élasticité conduit à une inversion de l'écoulement dans l'intérieur du vortex près de la contraction, et cette observation a été confirmée numériquement.

Mots clés: Fluides viscoélastiques; Simulation numérique; Solutions analytiques; Visualisation du écoulement; Rhéologie; Méthode du Volume Finie; CUBISTA; Fluides de Boger; Contraction 4:1; Équations constitutives différentielles; Modèles UCM, Oldroyd B et PTT.

Lágrima de preta

*Encontrei uma preta
que estava a chorar,
pedi-lhe uma lágrima
para a analisar.*

*Recolhi a lágrima
com todo o cuidado
num tubo de ensaio
bem esterilizado.*

*Olhei-a de um lado,
do outro e de frente:
tinha um ar de gota
muito transparente.*

*Mandei vir os ácidos,
as bases e os sais,
as drogas usadas
em casos que tais.*

*Ensaiei a frio,
experimentei ao lume,
de todas as vezes
deu-me o que é costume:*

*Nem sinais de negro,
nem vestígios de ódio.
Água (quase tudo)
e cloreto de sódio.*

*António Gedeão
in Máquina de Fogo (1961)*

*a meus Pais
à minha Avó
à Isa*

"The known is finite, the unknown infinite; intellectually we stand on an islet in the midst of an illimitable ocean of inexplicability. Our business in every generation is to reclaim a little more land."

T.H. Huxley (1825-1895)

Agradecimentos

Ao terminar esta tese desejo expressar a minha gratidão a um conjunto de pessoas e entidades, sem a ajuda das quais a realização deste trabalho teria sido comprometida.

Em primeiro lugar gostaria de agradecer aos orientadores científicos desta tese, Professores Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho e Paulo Jorge dos Santos Pimentel de Oliveira, pelo constante acompanhamento e incentivo. Além de ter aprendido muito com ambos cientificamente, ganhei dois novos amigos.

Ao Professor João Rui Guedes de Carvalho gostaria de expressar a minha gratidão pelo acompanhamento científico anterior à realização desta tese. A sua forma perspicaz de abordar os problemas marcou-me decisivamente do ponto de vista científico.

À Universidade do Porto, e em particular à Faculdade de Engenharia e ao Departamento de Engenharia Química, gostaria de agradecer a dispensa de serviço concedida durante três anos lectivos consecutivos.

Ao Centro de Estudos de Fenómenos de Transporte agradeço a ajuda financeira na aquisição da instalação experimental, assim como o apoio à participação em conferências internacionais.

À secção de Hidráulica, Recursos Hídricos e Ambiente, e em particular à Prof. Maria Fernanda Proença, agradeço a disponibilização de espaço laboratorial para montagem da instalação experimental, assim como o empréstimo do laser usado nas visualizações.

Ao Prof. Francisco Piqueiro agradeço a disponibilidade demonstrada para a escolha do equipamento fotográfico usado nas visualizações experimentais, assim como os seus conselhos sobre a técnica fotográfica adequada.

À Professora Maria do Pilar Gonçalves agradeço a disponibilização do reómetro, e ao Dr. Duarte Torres a ajuda na caracterização reológica dos fluidos.

Finalmente é devida uma palavra de reconhecimento ao apoio financeiro de outras organizações e instituições, nomeadamente à Fundação Calouste Gulbenkian, à Fundação Luso-Americana para o Desenvolvimento e ao Massachusetts Institute of Technology, na pessoa do Prof. K. J. Bathe.

Aos meus familiares e amigos agradeço o constante incentivo, e paciência, durante a realização deste trabalho.

ÍNDICE

LISTA DE SÍMBOLOS	xv
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 O CONCEITO DE FLUIDO VISCOELÁSTICO	1
1.2 TIPOS DE ANÁLISE DO ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	4
1.3 ESCOAMENTOS DE REFERÊNCIA PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	5
1.4 MOTIVAÇÃO E CONTRIBUIÇÃO DO PRESENTE ESTUDO	6
1.5 ORGANIZAÇÃO E ESTRUTURA DA TESE	8
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
2.1 INTRODUÇÃO	11
2.2 A GÊNESE DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	12
2.3 ESCOAMENTO NUMA CONTRACÇÃO	17
2.3.1 Definição do problema	17
2.3.2 Trabalhos pioneiros	19
2.3.3 Simulação numérica baseada no método dos volumes finitos	25
2.3.4 Desenvolvimentos mais recentes	35
2.4 ESCOAMENTO EM TORNO DE UM CILINDRO	41
2.4.1 Definição do problema	41
2.4.2 Comparação entre resultados experimentais e numéricos	42
2.4.3 Comparação entre resultados obtidos por diferentes métodos numéricos	43
2.5 ESCOAMENTO EM TORNO DUMA ESFERA EM QUEDA NUM TUBO	48
2.5.1 Definição do problema	48
2.5.2 Comparação entre resultados obtidos por diferentes métodos numéricos	49
2.5.3 Estudos numéricos com outros modelos reológicos	50
2.6 CONCLUSÕES	51
3 EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS	53
3.1 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO	53
3.2 CONCEITOS ELEMENTARES DE REOMETRIA	54
3.2.1 Reometria de corte	55
3.2.2 Reometria extensional	59
3.3 MODELO DE FLUIDO NEWTONIANO GENERALIZADO	60

3.4	MODELOS CONSTITUTIVOS PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	63
3.4.1	Modelo convectivo superior de Maxwell	63
3.4.2	Modelo de Oldroyd-B	64
3.4.3	Modelo de White-Metzner	66
3.4.4	Modelo de Phan-Thien-Tanner	67
3.4.5	Modelo de Giesekus	69
3.4.6	Modelos viscoelásticos multimodo	70
4	MÉTODO NUMÉRICO	73
4.1	COORDENADAS GENERALIZADAS	73
4.2	DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES	78
4.2.1	Equação da continuidade	81
4.2.2	Equação da conservação da quantidade de movimento	82
4.2.3	Equação constitutiva	86
4.3	FORMULAÇÃO PARA O CÁLCULO DOS CAUDAIS MÁSSICOS	89
4.4	FORMULAÇÃO PARA INTERPOLAÇÃO DA TENSÃO EXTRA NAS FACES	92
4.5	ESQUEMAS DE ORDEM ELEVADA PARA A DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS CONVECTIVOS	93
4.5.1	Comparação entre esquemas de interpolação	97
4.6	ESQUEMAS DE ALTA RESOLUÇÃO	102
4.6.1	Limitadores de fluxo convectivo	102
4.6.2	O critério da limitação convectiva e o diagrama NVD	107
4.6.3	Correspondência entre os limitadores de fluxo e a metodologia NVA	121
4.7	PROCEDIMENTO DE CÁLCULO	123
4.8	CONDIÇÕES FRONTEIRA	126
4.9	RESUMO	134
5	SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA O ESCOAMENTO DE UM FLUIDO PTT NUM CANAL E NUM TUBO	135
5.1	INTRODUÇÃO	135
5.2	FUNÇÕES MATERIAIS EM ESCOAMENTO DE CORTE SIMPLES ESTACIONÁRIO	137
5.3	ESCOAMENTO DESENVOLVIDO EM TUBOS E ENTRE DUAS PLACAS PARALELAS	141
5.4	INSTABILIDADE CONSTITUTIVA	147
5.5	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS PARA ESCOAMENTO ESTÁVEL ENTRE PLACAS PARALELAS E EM TUBOS	152
5.6	RESUMO	159

6	ESCOAMENTO DE UM FLUIDO UCM NUMA CONTRACÇÃO PLANA 4:1	161
6.1	INTRODUÇÃO	161
6.2	GEOMETRIA DO ESCOAMENTO E MALHAS COMPUTACIONAIS	162
6.3	RESULTADOS	166
6.3.1	Comportamento assintótico junto ao canto reentrante	167
6.3.2	Influência da elasticidade no padrão de escoamento	168
6.3.3	Dimensão e intensidade dos vórtices de canto e de entrada	172
6.3.4	Perfis de velocidades, tensões e pressão	175
6.3.5	Campos de tensão na vizinhança da singularidade	180
6.3.6	Queda de pressão na contracção (correção de Couette)	183
6.4	CONCLUSÕES	185
7	ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS EM TORNO DE UM CILINDRO	187
7.1	INTRODUÇÃO	187
7.2	GEOMETRIA DO ESCOAMENTO E MALHAS COMPUTACIONAIS	188
7.3	RESULTADOS	191
7.3.1	Ordem de convergência	192
7.3.2	Fluido UCM	195
7.3.3	Fluido Oldroyd-B	203
7.4	CONCLUSÕES	211
8	CUBISTA: UM NOVO ESQUEMA DE ALTA RESOLUÇÃO COM PROPRIEDADES ITERATIVAS MELHORADAS	213
8.1	INTRODUÇÃO	213
8.2	CUBISTA: UM NOVO ESQUEMA DE ALTA RESOLUÇÃO	214
8.3	RESULTADOS	221
8.3.1	Advecção pura de um escalar	222
8.3.2	Escoamento laminar num degrau	228
8.3.3	Simulação do escoamento de um fluido viscoelástico	235
8.4	CONCLUSÕES	242
9	SOLUÇÕES DE REFERÊNCIA PARA O ESCOAMENTO DE FLUIDOS OLDROYD-B E PTT EM CONTRACÇÕES PLANAS	243
9.1	INTRODUÇÃO	243
9.2	GEOMETRIA DO ESCOAMENTO E MALHAS COMPUTACIONAIS	244

9.3	RESULTADOS	245
9.3.1	Fluido Oldroyd-B	246
9.3.2	Fluido PTT linear	257
9.3.3	Fluido PTT exponencial	269
9.3.4	Padrões de escoamento numa contracção axissimétrica 4:1	274
9.3.5	Influência da razão de contracção no padrão de escoamento	277
9.4	CONCLUSÕES	282
10	ESCOAMENTO EM CONTRACÇÕES E EXPANSÕES 3D: VISUALIZAÇÃO E SIMULAÇÃO NUMÉRICA	285
10.1	INTRODUÇÃO	285
10.2	INSTALAÇÃO EXPERIMENTAL	289
10.3	CARACTERIZAÇÃO REOLÓGICA DOS FLUIDOS	293
10.3.1	Fluidos newtonianos (N85 e N91)	295
10.3.2	Fluidos de Boger (PAA100 e PAA300)	299
10.3.3	Fluido PAA500	308
10.4	VISUALIZAÇÃO DO ESCOAMENTO E SIMULAÇÃO NUMÉRICA	312
10.4.1	Fluidos newtonianos	312
10.4.2	Fluido PAA100	320
10.4.3	Fluido PAA300	327
10.4.4	Fluido PAA500	336
10.5	CONCLUSÕES	342
11	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO	347
11.1	CONCLUSÕES	347
11.2	SUGESTÕES PARA TRABALHO FUTURO	350
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	353

Lista de símbolos

a	Raio da esfera; parâmetro adimensional (Eq. 5.30)
a_F	Coefficiente das equações na forma discreta (Eqs. 4.32 e 4.45)
a_P	Coefficiente central das equações na forma discreta (Eqs. 4.31 e 4.45)
a_T	Factor de deslocamento
b	Face na direcção 'para baixo' da célula P
B	Célula na direcção 'para baixo' da célula P
B	Área de superfície
B_{li}	Componente segundo o eixo cartesiano i da área da face orientada segundo a coordenada generalizada l
B_f	Área escalar da face f da célula P
c	Número de Courant
C	Célula a montante da face f
C	Correcção de Couette
C_D	Coefficiente de arrasto
CR	Razão de contracção
D	Célula a jusante da face f
D	Tensor velocidade de deformação
De	Número de Débora
D_f	Condutância difusiva na face f
e	Face na direcção 'este' da célula P
E	Célula na direcção 'este' da célula P
E	Número de elasticidade ($= De/Re$)
f	Factor de atrito
F	Índice da célula vizinha à célula P, segundo a direcção f
F	Caudal mássico
$f()$	Função
f_x, f_y	Quociente da dimensão de células consecutivas segundo a direcção x e y
G	Módulo de distorção
G'	Módulo de conservação
G''	Módulo de perdas (dissipativo)
$g(\dot{\gamma})$	Função definida pela Eq. (4.162)
h	Semi-largura do canal (escoamento em torno de um cilindro num canal); espaçamento da célula
H	Semi-largura do canal ou raio do tubo (escoamento em contracções)
$H()$	Operador representativo da influência das células vizinhas à célula P (Secção 4.3)
I	Primeiro invariante (traço)
II	Segundo invariante
j	Índice (0-Placas paralelas; 1-tubo)
J	Tensor Jacobiano
J	Jacobiano ($= \det(J)$)
J_{il}	Componente il do Jacobiano ($= \partial x_i / \partial \zeta_l$)
k	Viscosidade dilatacional (vide Eq. 3.30); Parâmetro (3/2 - Placas paralelas; 2-tubo) (Cap. 5)
K	Factor correctivo do coefficiente de arrasto (vide Eq. 2.3); índice de consistência (vide Eq. 3.33)

M	Número de Mach viscoelástico ($= \sqrt{De Re}$)
n	Face na direcção 'norte' da célula P
n	Índice de lei de potência; direcção normal; número de modos
n	Vector unitário normal
N	Célula na direcção 'norte' da célula P
N_1	Primeira diferença de tensões normais
N_2	Segunda diferença de tensões normais
p	Pressão; ordem de convergência do esquema de diferenças
p'	Correcção à pressão
P	Ponto, índice de célula genérica
P'	Célula adjacente à célula P num plano de simetria
Pe	Número de Peclet
$Pe_{\Delta x}$	Número de Peclet da malha
Q	Caudal volúmico
r	Quociente de gradientes consecutivos (vide Eq. 4.96); distância ao canto reentrante
R	Raio do cilindro (escoamento em torno de um cilindro); raio do tubo (queda de uma esfera no interior de um tubo); constante dos gases perfeitos
Re	Número de Reynolds
s	Face na direcção 'sul' da célula P
S	Termo fonte das equações na forma discreta
S	Célula na direcção 'sul' da célula P
St	Número de Strouhal
t	Face na direcção 'para cima' da célula P
t	Tempo; direcção tangencial
t	Vector unitário tangencial
T	Tempo adimensional; temperatura absoluta
T	Vector tensão
T	Célula na direcção 'para cima' da célula P
t_{def}	Tempo característico de um processo de deformação
T_n, T_t	Componente normal e tangencial do vector tensão
Tr	Razão de Trouton (Eq. 3.29)
T_w	Tensão de corte na parede
\mathbf{u}	Vector velocidade
u, v, w	Componentes cartesianas da velocidade
U	Velocidade média
U	Célula a montante da célula C
$\hat{u}_{j,f}$	Componente j da velocidade na face f estimada por uma interpolação especial (Secções 4.2) – referente aos termos convectivos
$\tilde{u}_{j,f}$	Componente j da velocidade na face f estimada por uma interpolação especial (Secções 4.2 a 4.4)
U_N	Velocidade média para o escoamento de um fluido newtoniano (Eq. 5.41)
u_r	Velocidade radial
UU	Célula a montante da célula U
V	Volume de uma célula
x, y, z	Coordenadas cartesianas
x_i	Coordenada cartesiana segundo a direcção i

x_R	Comprimento da recirculação
X_R	Comprimento adimensional da recirculação ($= x_R / H_2$)
w	Face na direcção 'oeste' da célula P
W	Célula na direcção 'oeste' da célula P
y	Coordenada transversal
y'	Coordenada transversal adimensional ($= y/H$)
Y()	Função da tensão no modelo PTT (Eqs. 3.48 e 3.49)

Índices superiores

f	Na face f
n	Contador de iteração/passos de integração temporal
P	Célula genérica
T	Transposta
\sim	Interpolação especial (Secções 4.2)
$\tilde{\sim}$	Interpolação especial (Secções 4.2 a 4.4); variável normalizada (Eq. 4.106)
$\bar{\sim}$	Média; interpolação linear
*	Passo intermédio

Índices inferiores

c, crit	Condições críticas (limite de estabilidade)
CO	(Limitador de) Chakravarthy-Osher
crit	Condições críticas
e	Elástica
extr	Extrapolado
f	Na face f
f	Segundo a direcção da face f
F	Célula vizinha da célula P (segundo a direcção f)
FD	Condições de escoamento desenvolvido
i,j,k	Índices das coordenadas cartesianas (x_i)
in	Condições de entrada
l,k,m	Índices das coordenadas generalizadas (ς_l)
LW	(Limitador de) Lax-Wendroff
max	Máximo
min	Mínimo
P	Célula genérica
r,θ	Direcções radial e tangencial (coordenadas polares)
ref	Referência
v	Viscosa
VL	(Limitador de) Van Leer
x,y,z	Direcção cartesiana
w	Parede
WB	(Limitador de) Warming e Beam
∞	Taxa de deformação infinita
0	Taxa de deformação nula; condições de referência

Símbolos gregos

α	Factor de mobilidade (modelo de Giesekus)
β	Razão de viscosidades (Eq. 7.2)
β_{ki}	Coefficientes na transformação de eixos (vide Secção 4.1)
χ	Parâmetro definido pela Eq. (5.35)
δ	Ângulo de perdas
δ	Tensor unitário
δ_f	Distância à parede
ΔH	Energia de activação
δ_{ij}	Delta de Kroneker (componente ij do tensor unitário)
δt	Intervalo de tempo de integração temporal
ε	Parâmetro do modelo PTT; deformação de Hencky (vide Eq. 3.26); Erro numérico
$\dot{\varepsilon}$	Taxa de extensão
ϕ	Variável genérica
$\tilde{\phi}$	Variável genérica normalizada (Eq. 4.106)
γ	Deformação
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação
$\dot{\gamma}$	Tensor taxa de deformação
$\dot{\gamma}_r$	Taxa de deformação reduzida
Γ_ϕ	Coefficiente de difusão
η	Viscosidade viscosimétrica (de corte); parâmetro dos modelos viscoelásticos
$\bar{\eta}$	Razão de viscosidades (Secção 4.8)
η', η''	Viscosidades dinâmicas (escoamento dinâmico de corte)
η_E	Viscosidade elongacional
η_p	Viscosidade polimérica a taxa de deformação nula
η_s	Viscosidade newtoniana (do solvente)
η_r	Viscosidade reduzida
φ	Limitador de Sweby (vide Secção 4.6.1)
λ	Tempo de relaxação
λ_p	Tempo de relaxação; tempo de relaxação de Oldroyd
λ_r	Tempo de retardamento
θ	Ângulo
ρ	Massa volúmica
τ	Tensão
\mathcal{T}	Tensor das tensões
τ_{xy}	Tensão de corte
τ_{xx}	Tensão normal
τ_{yy}	Tensão normal
ξ	Parâmetro de deslizamento (modelo PTT); sistema de coordenadas locais (Secção 4.5)
s_l	Coordenada generalizada segundo a direcção l
ψ_R	Intensidade da recirculação
Ψ_R	Intensidade normalizada da recirculação ($= \psi_R / U_1 H_1 - 1$)
Ψ_1	Coefficiente da primeira diferença de tensões normais
Ψ_2	Coefficiente da segunda diferença de tensões normais
ω	Frequência angular

Abreviaturas

C14	Tetradecano
CDS	Esquema de diferenças centradas de 2ª ordem (<i>Central Differencing Scheme</i>)
CFD	Dinâmica de fluidos computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
CUBISTA	<i>Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection</i>
DC	Correcção diferida (<i>Deferred Correction</i>)
DG	Galerkin descontínuo (<i>Discontinuous Galerkin</i>)
EPTT	Versão exponencial do modelo PTT
EVSS	Separação elástica e viscosa da tensão (<i>Elastic Viscous Split Stress</i>)
FENE	<i>Finite Extensible Nonlinear Elastic</i>
JS	Modelo de Johnson-Segalman
K-BKZ	Modelo de Kaye-Bernstein-Kearsley-Zapas
LDPE	Polietileno de baixa densidade
LDV	Velocimetria Laser-Doppler (<i>Laser-Doppler Velocimetry</i>)
LPTT	Versão linear do modelo PTT
LUDS	Esquema de diferenças de montante de 2ª ordem (<i>Linear Upwind Differencing Scheme</i>)
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEE	Método dos Elementos Espectrais
MEF	Método dos Elementos Finitos
MVF	Método dos Volumes Finitos
NVA	Metodologia de variáveis normalizadas (<i>Normalized Variable Approach</i>)
NVD	Diagrama de variáveis normalizadas (<i>Normalized Variable Diagram</i>)
NVSF	Formulação de variável e espaço normalizado (<i>Normalized Variable and Space Formulation</i>)
PAA	Poliacrilamida
PIB	Poli-isobutileno
PS	Poliestireno
PTT	Modelo de Phan-Thien-Tanner
QUICK	Esquema de diferenças de montante de 3ª ordem (<i>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics</i>)
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
SIMPLEC	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations - Consistent</i>
SIMPLER	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations - Revised</i>
SIMPLEST	<i>SIMPLE with Splitting Technique</i>
SPTT	Versão simplificada do modelo PTT ($\xi = 0$)
SU	<i>Streamline-Upwind</i>
SUPG	<i>Streamline-Upwind/Petrov Galerkin</i>
TV	Variação total (<i>Total Variation</i>)
TVD	Variação total decrescente (<i>Total Variation Diminishing</i>)
UCM	Modelo convectivo superior de Maxwell (<i>Upper Convected Maxwell model</i>)

UDS Esquema de diferenças de montante de 1^a ordem (*Upwind Differencing Scheme*)

ULTIMATE *Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equations*

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo introdutório começa-se por ilustrar o conceito de fluido viscoelástico, seguindo-se uma descrição de alguns tipos de escoamento padrão vulgarmente utilizados para estudar o comportamento desses fluidos. A terminar o capítulo apresentam-se as motivações para a realização deste trabalho e descreve-se, de forma resumida, a estrutura geral da tese.

1.1 O conceito de fluido viscoelástico

A generalidade dos fluidos sintéticos apresenta características de comportamento não newtoniano, podendo-se encontrar este tipo de fluidos em diversos processos das indústrias petroquímica, alimentar, farmacêutica, dos plásticos, das tintas e dos detergentes, entre outras.

O trabalho apresentado nesta tese foi motivado pela necessidade de se aprofundar o actual conhecimento sobre o comportamento, em escoamento laminar, de uma classe particular de fluidos não newtonianos, designados por fluidos viscoelásticos. Uma vez que este tipo de fluidos tem frequentemente viscosidade bastante elevada, os escoamentos com relevância industrial processam-se habitualmente em condições de regime laminar.

Os fluidos viscoelásticos caracterizam-se por apresentarem simultaneamente comportamento viscoso e elástico quando sujeitos a uma deformação. Desta combinação resulta que os fluidos viscoelásticos em escoamento, apresentam frequentemente comportamentos inesperados, como se pode observar no interessante álbum de fotografias coligidas por Boger e Walters (1993).

O estudo do comportamento de fluidos viscoelásticos em escoamento faz parte de um ramo da ciência denominado Reologia. Esta disciplina ocupa-se do estudo da deformação e escoamento da matéria (Gomes de Castro *et al.*, 2001), tendo sido formalmente criada a 29 de Abril de 1929 por E. C. Bingham (Doraiswamy, 2002).

O conceito de fluido viscoelástico pode ser ilustrado por recurso a uma experiência de execução simples que, na essência, consiste em colocar um fluido no espaço entre dois discos paralelos sobrepostos e rodar lentamente um deles um determinado ângulo (e.g., 90° no sentido dos ponteiros do relógio, como se ilustra na Figura 1.1 a-b). Para um fluido puramente viscoso (inelástico) verifica-se que, uma vez terminada a rotação do disco superior, este permanecerá imóvel na sua posição final (desprezando eventuais efeitos inerciais que podem ser minimizados usando, por exemplo, fluidos de elevada viscosidade). Em contrapartida, para um fluido viscoelástico, após efectuar a rotação do disco superior e remover a força externa aplicada para o efeito, verifica-se um retrocesso parcial do disco superior. Se, em vez de um fluido, fosse colocado no espaço entre discos um sólido perfeitamente elástico, observar-se-ia uma recuperação completa da energia armazenada, voltando o disco superior à sua posição inicial (admite-se, nesta situação, que o sólido elástico está perfeitamente “colado” a ambos os discos e que a deformação não ultrapassa o limite elástico do material).

Deste exemplo conclui-se que os fluidos viscoelásticos guardam memória parcial da sua história de deformação, apresentando um comportamento intermédio entre o de um fluido puramente viscoso e o de um sólido perfeitamente elástico. Contudo, ao contrário dos sólidos elásticos, os fluidos viscoelásticos possuem uma memória evanescente. Este conceito também pode ser ilustrado pela experiência descrita, efectuando-a de duas formas distintas. Como se viu atrás, para o fluido viscoelástico após se efectuar a rotação do disco superior existe um retrocesso parcial. No entanto, se após se rodar o disco superior este for mantido na posição final durante um tempo suficientemente longo, por aplicação de uma força externa adequada (que decai ao longo do tempo), deixará de haver qualquer retrocesso do disco após libertação do mesmo. Nesta situação, as tensões tiveram tempo para relaxar e, dessa forma, a memória da posição inicial foi completamente perdida. Em contrapartida, para um sólido perfeitamente elástico, a memória é preservada e a posição inicial é sempre recuperada após se libertar o disco superior, independentemente do tempo que se espere.

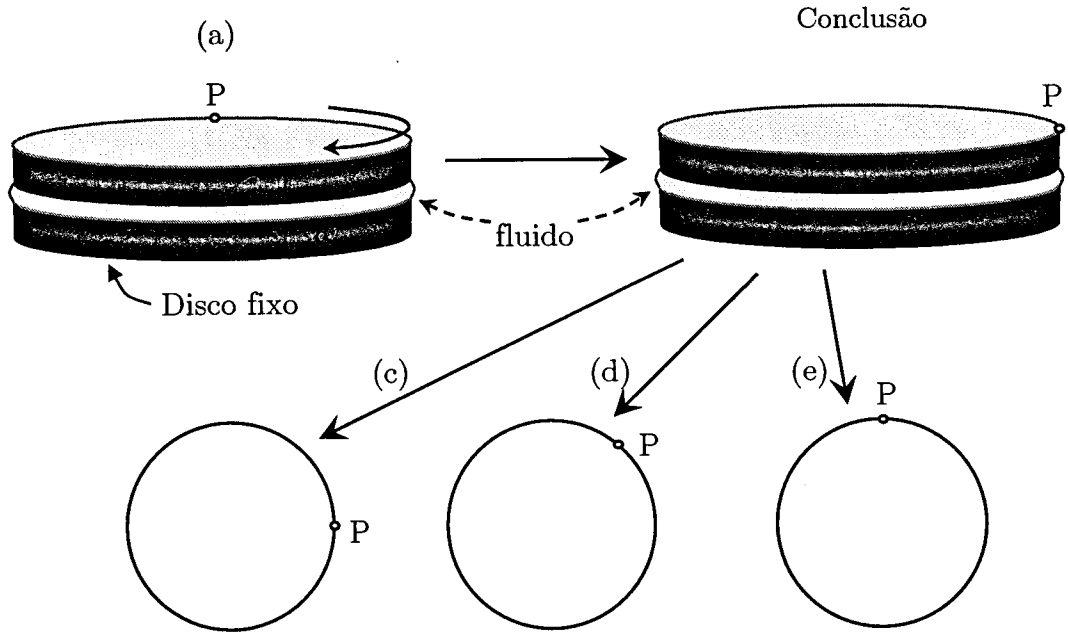


Figura 1.1: Experiência para ilustrar o comportamento de um fluido viscoelástico num escoamento de corte simples. (a) Posição inicial dos discos e (b) posição no final da rotação do disco superior. Em (c), (d) e (e) ilustra-se a posição final alcançada pelo disco superior (uma vez removida a força externa), respectivamente para um fluido inelástico, um fluido viscoelástico e um material perfeitamente elástico.

Embora se possa depreender da exposição anterior que existe uma fronteira clara que distingue um fluido inelástico (ou puramente viscoso) de um fluido viscoelástico, essa conclusão não é correcta. Na realidade, qualquer fluido pode comportar-se como inelástico ou como viscoelástico, dependendo do processo de deformação a que é sujeito. O quociente entre o tempo característico de relaxação molecular do fluido e um tempo característico do escoamento define o número de Débora, De . Este grupo adimensional, proposto por Reiner (1964), tem uma origem bíblica. No Antigo Testamento, 5º capítulo do livro dos Juizes, aparece o seguinte cântico de Débora¹: “(...) os montes agitavam-se diante de Javé, que vem do Sinai, diante de Javé, o Deus de Israel”. Com base nesta referência bíblica, Reiner sugeriu que o quociente entre o tempo de relaxação do material, λ , e um

¹ A tradução portuguesa do cântico de Débora, presente no livro dos Juizes do Antigo Testamento (Jz 5,1-5), tem um sentido ligeiramente diferente da versão Anglo-Saxónica, usada por Reiner para ilustrar o conceito do número de Débora. Na tradução Anglo-Saxónica aparece a seguinte citação “(...) *the mountains flowed before the Lord* (...)” (Reiner, 1964).

tempo característico do processo de deformação, t_{def} , fosse denominado número de Débora,

$$De = \frac{\lambda}{t_{\text{def}}} \quad (1.1)$$

Os dois casos limite para o número de Débora, $De \rightarrow 0$ e $De \rightarrow \infty$, correspondem às duas situações analisadas na Mecânica Clássica: fluidos newtonianos e sólidos perfeitamente elásticos.

No cântico de Débora está implícita a dualidade líquido/sólido que cada material pode apresentar, dependendo do tempo de relaxação do material e do tempo de observação. Tomando o exemplo bíblico acima citado, para o *comum dos mortais* as montanhas comportam-se como sólidos, uma vez que o tempo de observação é significativamente inferior ao tempo de relaxação da montanha, i.e. $De \rightarrow \infty$. Em contrapartida, para a *entidade divina* o comportamento da montanha é o de um fluido, já que neste caso o tempo de observação é supostamente infinito, pelo que $De \rightarrow 0$.

Considere-se agora o escoamento de um fluido polimérico, que possui um determinado tempo de relaxação. Para valores de De baixos, devido ao escoamento ser *lento* (para que o tempo de observação do fenómeno seja comparativamente elevado), o fluido apresenta um comportamento essencialmente newtoniano, uma vez que as macromoléculas têm tempo de relaxar e encontram-se sempre numa configuração de equilíbrio. Por outro lado, quando De assume valores elevados, o escoamento é de tal forma *rápido* que as macromoléculas não têm tempo para alterar a sua configuração (ou relaxarem), e o fluido apresenta um comportamento semelhante ao de um sólido elástico.

1.2 Tipos de análise do escoamento de fluidos viscoelásticos

A análise do escoamento de um fluido viscoelástico pode ser efectuada por via teórica, experimental, numérica, ou ainda por uma combinação destes métodos.

A obtenção de soluções analíticas por via teórica, embora seja muito atraente, restringe-se normalmente a escoamentos em geometrias simples, tais como o escoamento viscosimétrico de Couette ou de Poiseuille.

O estudo experimental do escoamento de fluidos viscoelásticos é frequente. Qualquer trabalho com relevância industrial inicia-se normalmente com um estudo experimental prévio do comportamento do material em condições de escoamento

controladas, usualmente efectuadas num reómetro. O estudo experimental de determinados escoamentos complexos de referência também se revela de especial importância, especialmente na aferição dos métodos de cálculo numérico.

A utilização de métodos numéricos na previsão de escoamentos de fluidos viscoelásticos em geometrias complexas verificou um crescimento significativo nos últimos anos. Actualmente, a previsão de escoamentos com relevância industrial tem-se revelado bastante promissora, sendo prova desse facto o sucesso de programas comerciais como o POLYFLOW, actualmente desenvolvido pela empresa Fluent Inc..

Nesta tese abordam-se os três tipos de análise referidos. Uma parte significativa do trabalho efectuado relaciona-se com o desenvolvimento de novos métodos numéricos para a previsão do comportamento, em escoamento laminar, de fluidos viscoelásticos. Procedeu-se ainda à dedução teórica de soluções analíticas para o escoamento de Poiseuille de um modelo específico de fluido viscoelástico (Phan-Thien e Tanner, 1977) e efectuaram-se medições experimentais do escoamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos numa contracção e numa expansão tridimensional.

1.3 Escoamentos de referência para fluidos viscoelásticos

Em dinâmica de fluidos computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*) é frequente definir-se um número reduzido de escoamentos de referência. Habitualmente não são conhecidas soluções analíticas para esses escoamentos padrão, pelo que os mesmos são estudados por diversos grupos de investigação independentes, por forma a obterem-se soluções numéricas concordantes de elevada precisão. Estes escoamentos de referência (*benchmark flows*) têm particular aplicabilidade na aferição da precisão, e da conveniente implementação, de novos métodos de cálculo numérico.

Em reologia computacional, e em particular na simulação numérica do escoamento de fluidos viscoelásticos em regime laminar, foram propostos vários escoamentos padrão ao longo dos últimos 25 anos, alguns dos quais inspirados em escoamentos com relevância industrial. Actualmente, alguns dos escoamentos de referência mais comuns em reologia computacional e experimental são os seguintes (Owens e Phillips, 2002):

- (i) Escoamento em contracções;

- (ii) Escoamento em torno de um cilindro num canal;
- (iii) Escoamento em torno de uma esfera num tubo;
- (iv) Escoamento no interior de cilindros rotativos com excentricidade;
- (v) Inchamento do extrudido.

Na Figura 1.2 ilustra-se, de forma simplificada, o funcionamento de uma extrusora. É possível identificar, de forma aproximada, três dos escoamentos de referência atrás enunciados, nomeadamente o escoamento numa contracção, o escoamento em torno de um cilindro e o inchamento do extrudido.

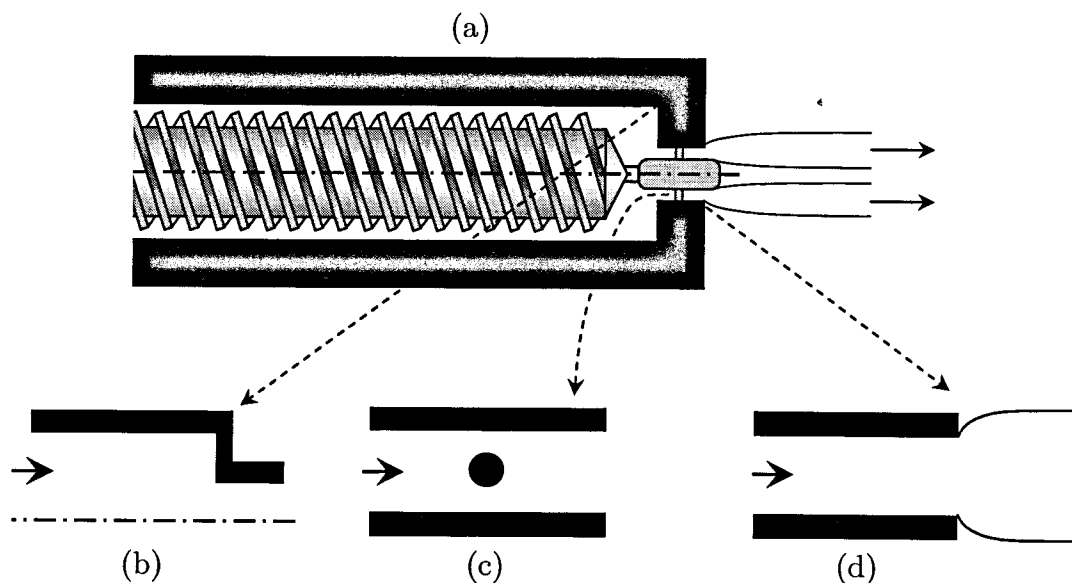


Figura 1.2: (a) Ilustração do escoamento numa extrusora, e respectiva analogia com alguns escoamentos de referência: (b) escoamento numa contracção; (c) escoamento em torno de um cilindro; (d) inchamento do extrudido. Baseado em McKinley (1991).

Neste trabalho, em termos numéricos, serão analisados predominantemente os escoamentos padrão em contracções e em torno de um cilindro num canal.

1.4 Motivação e contribuição do presente estudo

A análise do escoamento de fluidos newtonianos em regime laminar é actualmente um problema resolvido, já que existem métodos numéricos extremamente fiáveis e eficientes para a sua correcta previsão. Em contrapartida, a previsão adequada do escoamento de fluidos viscoelásticos em regime laminar é ainda casuística, não obstante o enorme avanço verificado nos últimos anos. Com alguma frequência, verifica-se que a previsão do efeito de um determinado parâmetro, no escoamento de um fluido viscoelástico, vai no sentido oposto ao indicado pela observação experimental. Estas diferenças podem ter origem quer em imprecisões numéricas na

resolução das equações de balanço, quer nas limitações das próprias equações constitutivas usadas para modelar o comportamento reológico dos fluidos.

Assim, com este trabalho pretende-se contribuir para aprofundar o actual conhecimento em dois vectores distintos, mas complementares. Por um lado, serão desenvolvidas estratégias de cálculo numérico eficientes e com elevada precisão, baseadas no método dos volumes finitos. Por outro lado, proceder-se-á à visualização experimental do escoamento de diversos fluidos viscoelásticos em geometrias complexas tridimensionais (contração e expansão súbitas), bem como à sua previsão numérica. Desta forma, será possível compreender um pouco melhor o comportamento destes fluidos em geometrias ainda pouco estudadas, e simultaneamente testar a capacidade preditiva do algoritmo desenvolvido.

Por razões históricas, a maioria dos métodos de cálculo usados em reologia computacional baseiam-se no método dos elementos finitos (Owens e Phillips, 2002). No entanto, desde o início da década de 1990, tem-se verificado um crescimento significativo no número de publicações relacionadas com o desenvolvimento de algoritmos baseados no método dos volumes finitos. A principal vantagem da utilização do método dos volumes finitos, em reologia computacional, reside na potencial economia de recursos computacionais, conseguindo-se simular escoamentos complexos tridimensionais num simples PC (Xue *et al.*, 1998a; Tanner e Xue, 2002).

Na opinião do autor do presente trabalho, os métodos de cálculo baseados na técnica dos volumes finitos oferecem uma alternativa muito interessante para a previsão do escoamento de fluidos viscoelásticos. Nesta tese irá tomar-se, como ponto de partida, o método de volumes finitos desenvolvido por Oliveira *et al.* (1998), com as devidas modificações descritas em Oliveira e Pinho (1999b,c).

Dado o carácter hiperbólico da generalidade das equações constitutivas usadas para representar o comportamento reológico dos fluidos viscoelásticos, a simulação do escoamento deste tipo de fluidos requer o uso de métodos numéricos robustos. A discretização do termo convectivo das equações constitutivas é um ponto fulcral, tanto em termos de precisão como de estabilidade numérica. A utilização de esquemas de discretização de diferenças de montante (com precisão numérica de 1ª ordem) tem sido usada com frequência nos cálculos baseados no métodos de volumes finitos (e.g., Hu e Joseph, 1990; Sasmal, 1995; Xue *et al.*, 1998a; Oliveira *et al.*, 1998), essencialmente devido à sua inerente estabilidade numérica. Contudo,

este esquema de discretização é muito pouco preciso, originando uma elevada difusão numérica artificial quando as linhas de corrente não se encontram alinhadas com a malha computacional, pelo que o seu uso é fortemente desaconselhável (Freitas, 1993).

A utilização de esquemas de discretização de ordem elevada foi efectuada em Oliveira e Pinho (1999b). Nesse trabalho obteve-se um ganho significativo em termos de precisão numérica, ainda que à custa de uma perda de estabilidade do método de cálculo. Assim, uma parte importante do presente trabalho visa o desenvolvimento de esquemas de discretização robustos e de elevada precisão, especificamente desenvolvidos para a discretização dos termos convectivos das equações de transporte. Para testar a sua implementação e demonstrar a sua elevada estabilidade, serão estudados alguns dos escoamentos de referência usados regularmente em reologia computacional. Simultaneamente, pretende-se demonstrar que é possível obter soluções numéricas com precisão semelhante à alcançada por métodos de elementos finitos, com ganhos significativos em termos de recursos computacionais.

1.5 Organização e estrutura da tese

Esta tese encontra-se dividida em onze capítulos. No Capítulo 2 apresenta-se um resumo da bibliografia relevante para este estudo seguindo-se, no Capítulo 3, a apresentação das equações que descrevem o escoamento de um fluido viscoelástico, em regime laminar e em condições isotérmicas. Faz-se ainda uma pequena revisão de alguns conceitos elementares de reometria e apresentam-se, com algum detalhe, os modelos reológicos usados neste trabalho.

No Capítulo 4 descreve-se, de forma resumida, a técnica dos volumes finitos usada na discretização das equações de balanço e constitutivas, bem como o procedimento de cálculo. É dada particular atenção à discretização do termo convectivo das equações constitutivas e à implementação das condições fronteira.

No Capítulo 5 apresenta-se a dedução das expressões analíticas para os escoamentos de Couette e de Poiseuille de um fluido viscoelástico descrito pelo modelo de Phan-Thien e Tanner (1977).

O algoritmo numérico é posteriormente aplicado à simulação do escoamento numa contracção plana e em torno de um cilindro num canal, respectivamente nos Capítulos 6 e 7. Para melhorar a convergência iterativa do método de cálculo

propõe-se, no Capítulo 8, um novo esquema de alta resolução, especificamente desenvolvido para a discretização dos termos convectivos das equações de transporte. O esquema de alta resolução proposto (denominado CUBISTA) é usado no Capítulo 9 na simulação do escoamento numa contracção plana, para modelos constitutivos diferentes dos considerados no Capítulo 6, obtendo-se soluções numéricas significativamente mais precisas do que as existentes na literatura.

No Capítulo 10 estuda-se, experimentalmente, o escoamento numa contracção e numa expansão tridimensional, de dois fluidos newtonianos e de três fluidos viscoelásticos com comportamento reológico distinto. Também se efectua a previsão numérica desses escoamentos, observando-se uma boa concordância com os resultados da visualização dos escoamentos em condições de regime permanente.

Finalmente, no Capítulo 11, apresenta-se um resumo das conclusões desta tese, bem como sugestões para futuros trabalhos.

“The secret to creativity is knowing how to hide your sources”

Albert Einstein (1879-1955)

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

Neste capítulo apresentam-se as principais referências bibliográficas respeitantes à simulação numérica de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Inicialmente descreve-se a evolução histórica dos métodos de cálculo, seguindo-se uma descrição detalhada dos principais trabalhos publicados relativamente aos três problemas de referência mais importantes em reologia computacional: escoamento em contracções; escoamento em torno de um cilindro; queda de uma esfera no interior de um tubo.

2.1 Introdução

Existem na literatura diversos livros dedicados ao estudo do comportamento dos fluidos viscoelásticos. Uma referência incontornável é o livro *“Dynamics of Polymeric Liquids”* de Bird *et al.* (1987a) onde se faz uma abordagem essencialmente teórica da dinâmica de fluidos de materiais poliméricos. Uma parte significativa desse livro é ainda dedicada à análise de várias equações constitutivas utilizadas para modelar o comportamento viscoelástico dos materiais poliméricos.

Do ponto de vista experimental destaca-se o livro *“Rheological Phenomena in Focus”* de Boger e Walters (1993), onde se ilustra o comportamento *bizarro* que os fluidos não newtonianos, e em particular os fluidos viscoelásticos, por vezes apresentam em escoamento. Uma parte significativa dos trabalhos experimentais de visualização efectuados com fluidos viscoelásticos aparece ilustrada nesta obra.

Em termos de reologia computacional existem duas obras de referência que traduzem o estado da arte em dois períodos distintos. O livro *“Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow”* de Crochet *et al.* (1984) traduz os desenvolvimentos embrionários da reologia computacional, desde a sua génese nos

finais da década de 1970 até 1983. A tremenda evolução que os métodos de cálculo e os computadores sofreram nos últimos vinte anos também se manifestaram na reologia computacional, e o recente livro “*Computational Rheology*” de Owens e Phillips (2002) retrata eficazmente essa evolução. Este livro revela-se uma excelente fonte bibliográfica pois nas suas 658 referências podem ser encontrados grande parte dos trabalhos mais relevantes, publicados na área da reologia computacional desde a sua génese até 2001. A título de curiosidade refira-se que dois dos trabalhos publicados no âmbito desta tese (Alves *et al.*, 2000; 2001b) já são citados e discutidos neste livro.

Embora os livros acima referidos contenham uma parte significativa das referências bibliográficas relevantes para este estudo, foram efectuadas pesquisas bibliográficas recorrendo a diversas bases de dados, bem como directamente através da Internet usando motores de pesquisa apropriados. Dada a constante actualização das bases de dados e a enorme volatilidade da informação disponível na Internet, as pesquisas foram repetidas com alguma frequência por forma a tentar encontrar o maior número de registos com interesse para o trabalho, bem como proceder a uma constante actualização da bibliografia, uma vez que o tema abordado neste trabalho encontra-se actualmente num estado de pesquisa significativa, como se pode constatar em Owens e Phillips (2002).

Neste capítulo irão ser apresentadas e discutidas as referências bibliográficas relativas à simulação numérica de escoamentos de fluidos viscoelásticos. No que toca à análise teórica e experimental, as referências relevantes para o presente trabalho serão analisadas nos Capítulos 5 e 10, por serem estes os capítulos dedicados a esses temas.

2.2 A génese da simulação numérica de escoamento de fluidos viscoelásticos

Os primeiros passos da reologia computacional ocorreram entre os finais da década de 1960 e o início da década de 1970, com a publicação dos primeiros resultados de simulação numérica das equações diferenciais ordinárias que resultam da aplicação de métodos de perturbação a escoamentos de baixa elasticidade. As contribuições mais significativas nesse período foram as de Walters e Waters (1968), Griffiths *et al.* (1969), Griffiths e Walters (1970) e Davies e Walters (1972). Nessa altura verificou-se também o aparecimento de um número significativo de publicações na

área da simulação numérica de escoamentos de fluidos não newtonianos inelásticos em geometrias bidimensionais, destacando-se os trabalhos publicados por Duda e Vrentas (1973) e por Tanner *et al.* (1975). A simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos em geometrias bidimensionais foi efectuada pela primeira vez em 1977, de forma independente por Perera e Walters (1977a,b) e por Kawahara e Takeuchi (1977). Enquanto os primeiros autores usaram um método de diferenças finitas para simular uma variedade de escoamentos complexos de um fluido descrito pelo modelo de Oldroyd de 4 constantes, Kawahara e Takeuchi enveredaram pela utilização do método dos elementos finitos na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos descritos pelo modelo de Maxwell.

Após a publicação destes trabalhos embrionários verificou-se uma proliferação de referências na área da reologia computacional, como se pode constatar em Crochet e Walters (1983). Estes autores apresentam uma revisão da bibliografia publicada até à data, relativa à simulação numérica de escoamentos de fluidos não newtonianos, e em particular de fluidos viscoelásticos. Um ano mais tarde, surge o primeiro livro inteiramente dedicado à simulação numérica de escoamentos de fluidos não newtonianos, onde mais uma vez é feita uma revisão detalhada da bibliografia relevante (Crochet *et al.*, 1984). Por essa altura já era notória a predominância, em número de publicações, da utilização do método dos elementos finitos, registando-se também a existência de um número razoável de trabalhos em que se utilizava o método das diferenças finitas.

Nesse período inicial, de desenvolvimento da reologia computacional, foi dada particular atenção à simulação dos seguintes problemas padrão (Crochet e Walters, 1983):

- (i) Escoamento em torno de obstáculos submersos (Townsend, 1980; Crochet, 1982; Tiefenbruck e Leal, 1982)
- (ii) Escoamento com superfície livre, e em especial a previsão do inchamento do extrudido (Chang *et al.*, 1979; Crochet e Keunings, 1980; Crochet e Keunings, 1982; Coleman, 1981; Caswell e Viriyayuthakorn, 1983)
- (iii) Previsão da pressão no orifício (Crochet e Bezy, 1979; Richards e Townsend, 1981; Jackson e Finlayson, 1982)
- (iv) Escoamento numa contracção (Perera e Walters, 1977b; Gatski e Lumley, 1978; Perera e Strauss, 1979; Viriyayuthakorn e Caswell, 1980; Bernstein *et al.*, 1981).

Para uma lista mais detalhada das referências bibliográficas relevantes publicadas até 1983 sugere-se a consulta de Crochet *et al.* (1984).

Após um período inicial de algum optimismo, em que se admitia que a aplicação directa das técnicas desenvolvidas para a simulação de escoamentos newtonianos também seria eficiente na simulação de escoamentos viscoelásticos, constatou-se que, de uma maneira geral, os resultados obtidos por diferentes grupos de investigação padeciam de um problema comum, nomeadamente a perda de convergência a baixos valores do número de Débora (ou de Weissenberg, como alguns autores preferem usar). Numa frase um tanto ou quanto pessimista, Crochet e Walters (1983) afirmavam que o limite máximo de elasticidade alcançado nas simulações publicadas até à data era de tal forma baixo que as soluções obtidas não eram mais do que simples perturbações em torno do caso newtoniano. Ficou assim identificado o problema principal que a reologia computacional deveria solucionar, e que ficou conhecido como o “problema do número elevado de Weissenberg” (*High Weissenberg Number Problem*, HWNP).

Mendelson *et al.* (1982) foram os primeiros a tentar explicar as possíveis causas para a perda de convergência verificada a valores relativamente baixos do número de Débora. Num trabalho dedicado a este assunto, Keunings (1986) descreveu quatro cenários possíveis para a evolução das simulações numéricas de escoamentos bidimensionais de fluidos viscoelásticos. Partindo-se de uma família de soluções estáveis e estacionárias, que emanam da solução newtoniana ($De = 0$), a evolução de uma determinada variável X (e.g., a queda de pressão numa contracção), seguirá uma das quatro possibilidades ilustradas na Figura 2.1.

No caso (a), apresentado na Figura 2.1, a solução existe e é estável para qualquer valor de De . Segundo Keunings (1986), e em particular para o escoamento de um fluido de Maxwell numa contracção, esta possibilidade é improvável já que se está a lidar com sistemas de equações altamente não lineares. Nos restantes casos apresentados na Figura 2.1 verifica-se o aparecimento de pontos irregulares na família de soluções que emanam do caso newtoniano. Na situação (b), pelo menos duas famílias de soluções cruzam-se a um determinado valor de De . Acima desse valor crítico (bifurcação), De_{crit} , é ainda possível que exista uma família de soluções estáveis, estacionárias e bidimensionais. No entanto, uma ou mais famílias de soluções temporalmente instáveis e/ou tridimensionais também existem. Numa tal situação, a utilização de um algoritmo de estado

estacionário desenvolvido para escoamento bidimensional revelar-se-á inútil, mesmo que se obtenha uma solução numérica convergente, já que esse resultado será artificial e sem qualquer significado físico. As restantes possibilidades correspondem à existência de um ponto limite (ou de viragem), como na Figura 2.1 (c), ou alternativamente a família de soluções termina abruptamente como se ilustra na Figura 2.1 (d).

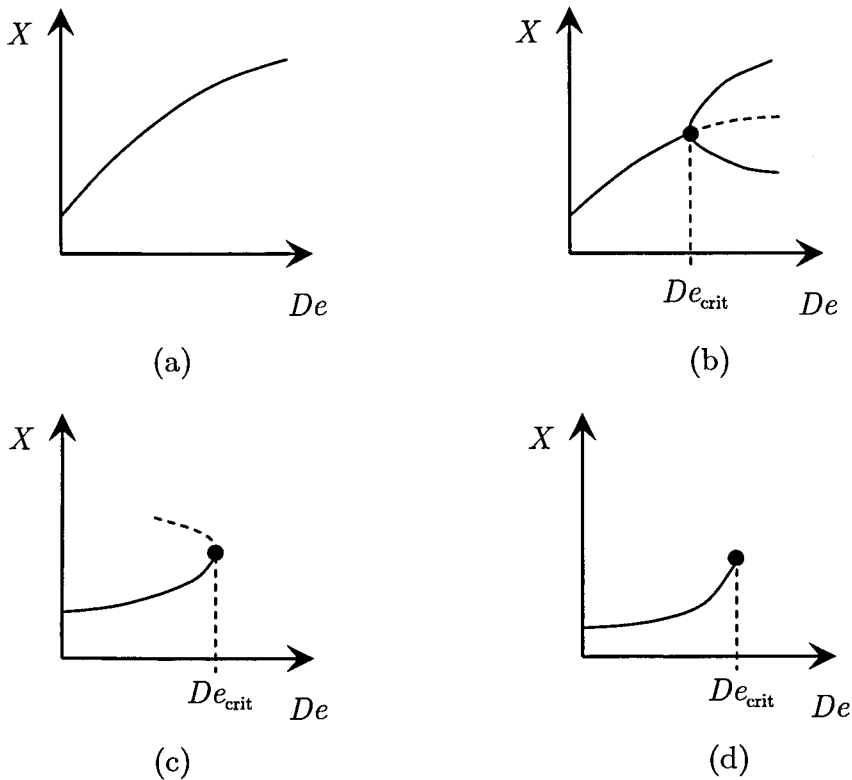


Figura 2.1: Evolução possível para uma variável X , com o aumento da elasticidade, a partir da solução newtoniana ($De=0$). (a) Solução estável em toda a gama de De ; (b)-(d) Existência de pontos irregulares na solução, respectivamente bifurcação, ponto limite e ponto terminal. Inspirado em Keunings (1986) e Brown *et al.* (1986).

É possível provar semi-analiticamente a existência de pontos limite para certos modelos viscoelásticos, em determinados escoamentos (Menon *et al.*, 1988; Larson, 1988). No entanto, a ocorrência de pontos irregulares por via numérica corresponde frequentemente a um artefacto numérico, e não a uma propriedade intrínseca desse escoamento. Por exemplo, van Schaftingen e Crochet (1985) demonstraram que o aparecimento de um ponto limite na solução numérica do escoamento de Poiseuille de um fluido de Johnson-Segalman ocorria apenas para um dos métodos numéricos utilizados nesse trabalho. Para os outros dois métodos adoptados no mesmo

estudo, a solução numérica obtida era incondicionalmente estável e coincidia com a solução analítica.

A existência de um verdadeiro ponto limite na solução numérica deverá ser confirmada por refinamentos sucessivos da malha, o que nem sempre se consegue de forma inequívoca. Na prática, o valor de De_{crit} obtido numericamente depende com frequência da malha usada na simulação (van Schaftingen e Crochet, 1985), verificando-se habitualmente uma diminuição de De_{crit} com o refinamento da malha. Como exemplo típico deste comportamento pode referir-se o escoamento de um fluido de Maxwell ou de Oldroyd-B numa contracção plana. Dada a existência de um ponto singular neste escoamento (Davies e Devlin, 1993; Hinch, 1993; Renardy, 1993), onde as tensões são teoricamente infinitas, a obtenção de soluções de elevada precisão tem-se revelado bastante difícil. A disparidade entre os valores de De_{crit} obtidos por diferentes grupos é grande, e a variação de De_{crit} com o refinamento da malha e com o esquema numérico usado na discretização é muito acentuada (Owens e Phillips, 2002). Não obstante todas as dificuldades, nos últimos anos tem-se verificado um progresso considerável na compreensão do problema do número elevado de Weissenberg. Actualmente já existe algum consenso, e admite-se que a sua origem se deve essencialmente a deficiências numéricas e não ao *mau comportamento* das equações constitutivas (Keunings, 1989; Crochet, 1994; Warichet e Legat, 1997; Renardy, 2000b; Tsai e Malkus, 2000). Como se demonstra em Warichet e Legat (1997), já é possível obter soluções numéricas de elevada precisão para certos escoamentos complexos de fluidos viscoelásticos, verificando-se uma boa concordância entre os resultados obtidos por vários grupos de investigação que usam métodos numéricos distintos. Esta estratégia de validação independente dos resultados numéricos obtidos por diferentes grupos de investigação tem-se mostrado extremamente útil na aferição da precisão dos métodos de cálculo numérico, bem como na compreensão das respectivas limitações, nomeadamente as relacionadas com o problema do número elevado de Weissenberg. Para o sucesso desta estratégia contribuiu, de forma significativa, a escolha de um número reduzido de escoamentos de referência (Hassager, 1988; Brown e McKinley, 1994). Desta forma, diferentes investigadores estudam os mesmos problemas, sendo assim possível efectuar comparações directas entre os métodos numéricos utilizados, sem a complicação adicional da existência de diferenças na geometria e/ou nas equações constitutivas adoptadas.

De entre os vários escoamentos de referência propostos ao longo dos últimos anos (Hassager, 1988; Brown e McKinley, 1994) é possível verificar actualmente alguma predilecção pelas seguintes geometrias (Owens e Phillips, 2002):

- (i) Escoamento numa contracção (plana ou axissimétrica);
- (ii) Escoamento em torno de um cilindro colocado no interior de um canal;
- (iii) Queda de uma esfera no interior de um tubo.

Apesar destes escoamentos já serem estudados há mais de duas décadas, verifica-se actualmente que ainda são um desafio surpreendente. Em particular, o escoamento numa contracção tem-se mostrado extremamente difícil de solucionar, como se passa a descrever.

2.3 Escoamento numa contracção

2.3.1 Definição do problema

A geometria deste escoamento é apresentada na Figura 2.2. O fluido desloca-se de um canal (ou tubo) para outro de secção inferior, originando um escoamento complexo que engloba regiões em que o escoamento é predominantemente de corte (junto às paredes), bem como zonas em que o escoamento é essencialmente extensional (ao longo do eixo central). Para uma determinada razão de contracção H_1/H_2 , verifica-se que o efeito geométrico é mais importante no caso da contracção axissimétrica, já que nessa situação a razão de velocidades é dada por $U_2/U_1 = (H_1/H_2)^2$, em contraste com a razão $U_2/U_1 = H_1/H_2$ verificada para a contracção plana (bidimensional).

No caso newtoniano este escoamento é função apenas do número de Reynolds, Re , e da razão de contracção. Na situação do escoamento de um fluido viscoelástico surge um novo parâmetro adimensional, que representa o quociente entre o tempo de relaxação do fluido, λ , e um tempo característico do escoamento. Como se viu atrás, este parâmetro adimensional corresponde ao número de Débora, que se define habitualmente para este escoamento por

$$De = \frac{\lambda U_2}{H_2}, \quad (2.1)$$

em que U_2 e H_2 representam a velocidade média na conduta a jusante do plano de contracção e a semi-largura da mesma, respectivamente (vide Figura 2.2).

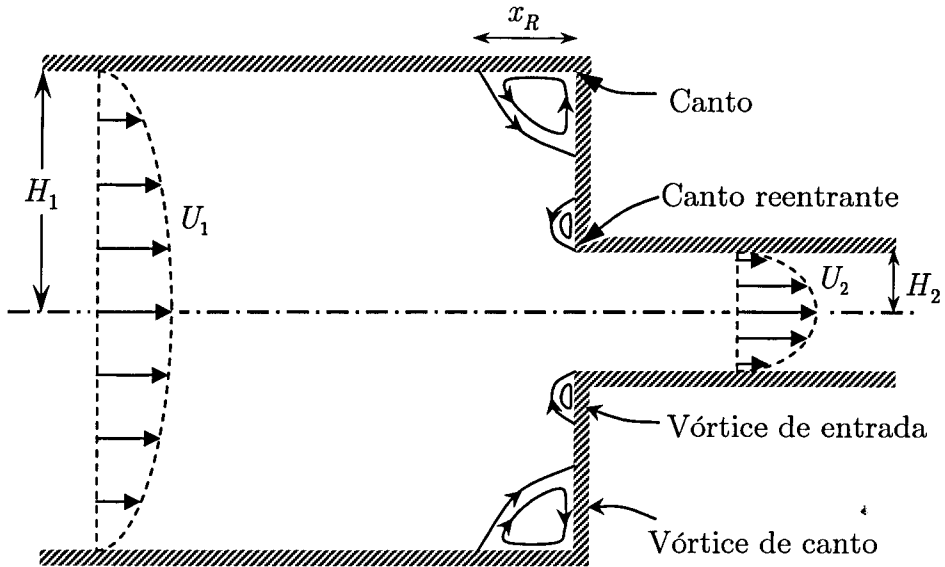


Figura 2.2: Ilustração do escoamento numa contração e identificação de algumas variáveis relevantes.

A complexidade deste escoamento aliada a uma geometria extremamente simples levaram a que o escoamento de um fluido UCM numa contração 4:1, a baixo número de Reynolds, fosse classificado como um dos mais importantes problemas numéricos para fluidos viscoelásticos. Esta escolha ocorreu em 1987 no *5th International Workshop on Numerical Methods in Non-Newtonian Flows*, que decorreu em Lake Arrowhead nos E.U.A. (Hassager, 1988). Saliente-se, contudo, que por esta altura já haviam sido publicados alguns trabalhos numéricos e experimentais para este escoamento com fluidos newtonianos bem como com fluidos viscoelásticos, e que foram certamente o *leitmotiv* para esta escolha. Os trabalhos de revisão de Boger (1987) e White *et al.* (1987) condensam os principais trabalhos experimentais e numéricos publicados até essa data para este escoamento padrão.

O estudo do escoamento de fluidos viscoelásticos em contrações não serve apenas como problema de validação numérica, mas tem importantes aplicações no eficaz processamento de polímeros. Neste caso, são importantes as correctas previsões da cinemática do escoamento e da queda de pressão. O objectivo prático será minimizar a queda de pressão e otimizar a cinemática por forma a eliminar escoamentos secundários indesejáveis e regiões de elevadas tensões.

2.3.2 Trabalhos pioneiros

De acordo com Owens e Phillips (2002), os primeiros autores a apresentarem resultados numéricos para as condições de referência propostas em Hassager (1988) foram Cochrane *et al.* (1981). Nesse trabalho compararam-se os resultados obtidos numericamente com as visualizações do escoamento de fluidos de Boger em contracções. Estes fluidos têm a particularidade de possuírem uma elevada elasticidade aliada a uma viscosidade aproximadamente constante (Boger, 1977), isolando-se assim de forma eficaz os efeitos elásticos. Desta forma interpretam-se inequivocamente os resultados em termos da influência da elasticidade do fluido, sem a complicação adicional da variação da viscosidade com a taxa de deformação, uma característica da generalidade das soluções poliméricas. Em termos numéricos, a utilização de modelos viscoelásticos diferenciais do tipo UCM ou de Oldroyd-B (que são usados frequentemente para modelar o comportamento de fluidos viscoelásticos de viscosidade constante) revela-se bastante crítica, já que é conhecido que estas equações reológicas diferenciais são as mais problemáticas do ponto de vista numérico, devido ao seu carácter hiperbólico (Owens e Phillips, 2002).

Walters e Webster (1982) estudaram experimentalmente, e também por via numérica, o escoamento de fluidos de Boger em contracções planas e axissimétricas com razões de contracção próximas de 4:1. Estes autores analisaram ainda o escoamento de um fluido viscoelástico reofluidificante, bem como a influência do arredondamento do canto reentrante da contracção. Os resultados experimentais sugeriam que no caso do escoamento de um fluido de Boger numa contracção plana a recirculação era praticamente inexistente, enquanto que o escoamento do mesmo fluido numa contracção axissimétrica originava uma recirculação com uma intensidade significativa, que tendia a aumentar com a elasticidade do escoamento. Para o fluido elástico reofluidificante (uma solução aquosa de poliacrilamida, PAA), Walters e Webster verificaram experimentalmente que a intensidade da recirculação era significativa e tinha um comportamento semelhante quer para o caso da contracção plana quer para a axissimétrica. Um ligeiro arredondamento do canto reentrante resultou em alterações profundas no padrão de escoamento, causadas pela eliminação do ponto singular de tensões aí existente. Estes autores observaram ainda uma boa concordância entre as simulações numéricas e as visualizações com fluidos newtonianos, não acontecendo o mesmo para o caso dos

fluidos viscoelásticos. Numa frase, Walters e Webster resumiam a completa inadequação das simulações numéricas obtidas nessa altura, para a previsão do escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções: “Enquanto muitos investigadores da área da mecânica dos fluidos não newtoniana obtêm resultados experimentais de crescimento do vórtice para o caso do escoamento numa contracção axissimétrica, e que não conseguem prever numericamente, neste trabalho obtivemos previsões numéricas de crescimento do vórtice para o caso da contracção plana, que não verificamos experimentalmente”. Ou seja, os resultados experimentais e as previsões numéricas obtidas no início da década de 1980 apresentavam tendências opostas, para o caso do escoamento de um fluido viscoelástico numa contracção plana ou axissimétrica.

Num trabalho de revisão publicado no ano seguinte, Crochet e Walters (1983) fizeram um apanhado dos resultados numéricos mais relevantes publicados até essa data. O mesmo tom pessimista continuava a ser expresso, dando-se particular ênfase ao problema do número elevado de Weissenberg. Este assunto figurou em muitos dos trabalhos publicados nos anos seguintes, tendo sido mesmo o tema predominante do 4th *International Workshop on Numerical Methods for Non-Newtonian Flows*, que decorreu em 1985 em Spa, Bélgica (Debbaut e Crochet, 1986; Dupret e Marchal, 1986; Joseph e Saut, 1986; Josse *et al.*, 1986; Keunings, 1986; Marchal e Crochet, 1986). O trabalho de Marchal e Crochet (1986) salienta-se dos restantes, essencialmente pelo valor elevado de De alcançado nas simulações. Estes autores estudaram o escoamento em contracções plana e axissimétrica 4:1, para dois modelos viscoelásticos (UCM e Oldroyd-B) recorrendo ao método dos elementos finitos, e usando funções hermitianas. Valores limite de De da ordem de 6 foram alcançados por este método, quadruplicando o valor obtido previamente para estes problemas padrão.

Keunings e Crochet (1984) utilizaram também o método dos elementos finitos para analisar o escoamento numa contracção 4:1 de um fluido viscoelástico reofluidificante descrito pelo modelo de Phan-Thien—Tanner (PTT) (Phan-Thien e Tanner, 1977). Os resultados obtidos sugeriam um crescimento da recirculação e um aumento da correcção de Couette (forma adimensional da queda de pressão extra induzida pela contracção) com o aumento do caudal.

White e Baird (1986) estudaram experimentalmente o escoamento de poliestireno (PS) e de polietileno de baixa densidade (LDPE) numa contracção

plana. A principal causa atribuída às diferenças observadas nos padrões de escoamento (inexistência de recirculação para o PS e a presença para o LDPE) foi o diferente comportamento elongacional dos dois polímeros. No ano seguinte, estes autores publicaram um trabalho de revisão dedicado ao escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções, fazendo um apanhado dos trabalhos experimentais e numéricos mais significativos (White *et al.*, 1987). As principais conclusões apresentadas e as recomendações para trabalhos futuros foram as seguintes:

- (i) Nem todos os fluidos viscoelásticos originam o aparecimento de vórtices para o escoamento numa contracção. Assim sendo, não se pode julgar o sucesso das simulações numéricas apenas pelo facto de se conseguir prever o aparecimento do escoamento secundário.
- (ii) A origem dos vórtices não deverá estar unicamente relacionada com as propriedades viscoelásticas do polímero em escoamento de corte, mas também com o seu comportamento extensional (um ano mais tarde, estes autores demonstraram que a correcta previsão numérica do escoamento do PS e do LDPE na contracção plana requer o uso de uma equação constitutiva que traduza correctamente o comportamento elongacional do polímero - White e Baird, 1988).
- (iii) As visualizações não se deverão limitar ao escoamento de soluções poliméricas, devendo-se alargar o seu estudo experimental ao escoamento de polímeros fundidos.
- (iv) Os estudos experimentais devem ir além da simples obtenção das linhas de corrente e dos campos de velocidade. Sugere-se a medição dos campos de tensões usando técnicas de birrefringência (*Flow Induced Birefringence*, FIB), em particular nas regiões junto ao plano de contracção, como demonstrado mais tarde por estes mesmos autores (White e Baird, 1988).

Num outro artigo de revisão publicado no mesmo ano por Boger (1987), analisaram-se os resultados da literatura para o escoamento em contracções axissimétricas com várias razões de contracção, e com diferentes tipos de fluidos. Este autor concluiu que, para fluidos newtonianos e não newtonianos inelásticos, o problema do escoamento numa contracção axissimétrica estava solucionado, já que se observava uma boa concordância entre os resultados experimentais e as simulações numéricas, quer para escoamentos a baixo número de Reynolds, quer para os casos em que a inércia não era desprezável. À medida que o número de

Reynolds aumentava verificava-se uma diminuição progressiva da recirculação, tanto em comprimento como em intensidade. Para o caso viscoelástico, a comparação entre os resultados experimentais e as simulações não era tão animadora. Tal como em White *et al.* (1987), Boger argumentava que a componente extensional era muito importante no escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções, pelo que a medição desta propriedade era imperativa para uma eficaz caracterização reológica do fluido. Esta foi a explicação avançada por Boger para tentar explicar a diferença verificada nos padrões de escoamento para dois fluidos de Boger com propriedades de escoamento de corte muito semelhantes. Enquanto que para um dos fluidos se observava um crescimento acentuado da recirculação com o aumento do caudal, para a mesma contracção axissimétrica 4.08:1 verificava-se um comportamento surpreendentemente diferente para o outro fluido, com uma diminuição da recirculação principal causada pelo aumento da elasticidade do escoamento, e com o aparecimento de um vórtice de entrada (*lip vortex*) junto ao canto reentrante. Os modelos viscoelásticos usados nas simulação numéricas deveriam então, por esta razão, traduzir correctamente a componente elongacional medida na caracterização reológica do fluido, para que fosse possível prever correctamente a *física* do escoamento.

Um passo importante na *batalha* contra o problema do número elevado de Weissenberg foi dado nesse mesmo ano por Marchal e Crochet (1987). Estes autores usaram o método dos elementos finitos com funções de aproximação biquadráticas para as velocidades, elementos bilineares para a pressão, e sub-elementos lineares 4×4 para as tensões, em conjugação com a utilização de SU inconsistente (*Streamline-Upwind*) para o tratamento do termo convectivo. Esta formulação revelou-se bastante estável, verificando-se a inexistência de perda de convergência do processo iterativo para o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção 4:1 (plana ou axissimétrica). Neste trabalho também foram usadas as formulações de Galerkin e SUPG (*Streamline-Upwind/Petrov Galerkin*) tendo-se constatado a sua fraca performance para o escoamento numa contracção plana. Os resultados obtidos com o método SU 4×4 para o escoamento na contracção plana sugeriam a existência de um vórtice de canto de dimensões reduzidas e de baixa intensidade de recirculação. A $De = 7.6$ verificou-se o aparecimento de um pequeno vórtice de entrada. No caso do escoamento na contracção axissimétrica de um fluido Oldroyd-B observou-se um crescimento

significativo do vórtice de canto com o aumento de De . A forma do vórtice prevista numericamente foi semelhante à observada experimentalmente por Nguyen e Boger (1979), contudo a correspondência nos valores de De experimentais e numéricos diferia em cerca de uma ordem de grandeza (mais tarde, em Boger *et al.* (1992) demonstrou-se que esta discrepância se devia essencialmente ao uso de diferentes definições do número de De nos trabalhos experimentais e numéricos). Para o escoamento de um fluido UCM na contracção axissimétrica verificou-se um crescimento menos pronunciado do vórtice de canto, e o valor máximo alcançado nas simulações foi $De = 7.68$.

Um ano mais tarde, um novo trabalho foi publicado pelo mesmo grupo de investigação, fazendo uso deste mesmo método. Nesse estudo, Debbaut *et al.* (1988) analisaram o escoamento numa contracção axissimétrica de fluidos descritos pelos modelos Oldroyd-B, PTT e Giesekus-Leonov, não tendo observado qualquer limitação em termos de número de De alcançável. Apesar destes resultados terem sido francamente animadores nessa época, deve-se salientar que os cálculos efectuados por estes autores usavam malhas bastante esparsas (as limitações computacionais dessa altura assim o exigiam) e a utilização da formulação SU acarreta uma perda significativa de precisão (comparativamente com outros métodos como Galerkin ou SUPG), como foi mais tarde demonstrado por Tanner e Jin (1991). De resto, Marchal e Crochet (1987) salientaram que o método SU inconsistente adiciona um termo extra à equação constitutiva, que se traduz na adição de difusão numérica artificial nas tensões, ao longo das linhas de corrente. Desta forma, a utilização de SU inconsistente traduz-se numa alteração da própria equação constitutiva (daí o uso do termo 'inconsistente' na sua designação), e como tal os resultados obtidos pelo método terão sempre que ser analisados com precaução uma vez que carecem de precisão, a menos que sejam usadas malhas computacionais bastante refinadas. Crochet *et al.* (1990) e Crochet e Legat (1992) demonstraram que a difusividade artificial introduzida pelo SU na integração das equações constitutivas diminui com o refinamento da malha, anulando-se no limite quando o tamanho dos elementos, h , tende para zero. No entanto, usando malhas computacionais com valores finitos de h , o erro induzido pela aplicação de SU pode ser bastante significativo.

Luo e Tanner (1989) também usaram o esquema SU, num método de elementos finitos desacoplado com iterações de Picard, para a simulação do escoamento de

fluidos de Maxwell e de Oldroyd-B em contracções planas e axissimétricas 4:1. Estes autores verificaram a sua elevada estabilidade no cálculo dos termos convectivos das equações constitutivas, tendo alcançado valores de $De = 5.5$ e 6.4 para as contracções plana e axissimétrica, respectivamente. No entanto, uma inspecção mais detalhada dos campos de tensões revelou uma suavização exagerada da solução, provavelmente causada pelo excesso de difusão numérica introduzida pelo esquema SU. Desta forma compreende-se a elevada estabilidade deste método, a qual é obtida à custa de uma diminuição da precisão da solução. Por outro lado, Luo e Tanner verificaram que a utilização dos métodos convencionais de Galerkin e a formulação SUPG revelaram-se menos estáveis, não obstante serem significativamente mais precisos que o método SU inconsistente.

A utilização do método 4×4 desenvolvido por Marchal e Crochet em 1987, em conjugação com o esquema SU inconsistente para o tratamento dos termos convectivos das equações constitutivas, foi adoptado em vários trabalhos subsequentes o que demonstra a enorme aceitação que este método obteve², não obstante as suas limitações já enunciadas.

Apesar da maioria dos trabalhos publicados por essa altura se basearem na aplicação do método dos elementos finitos (nas suas variadas formulações), em raras excepções ainda foi usado o método das diferenças finitas. Refiram-se, além dos trabalhos anteriormente citados, as contribuições de Choi *et al.* (1988), Keiller (1993) e Olsson (1994). No trabalho de Choi *et al.* (1988) analisou-se o escoamento de um fluido Giesekus-Leonov numa contracção plana 4:1. Na discretização do termo convectivo da equação constitutiva foi usado um esquema de diferenças de montante corrigido, envolvendo a adição artificial de um termo difusivo por forma a garantir precisão de 2ª ordem e elevada estabilidade. Os resultados obtidos sugeriam um crescimento da recirculação com o aumento de De , o que estava em sintonia com as observações experimentais de Evans e Walters (1986) para o caso de fluidos viscoelásticos reofluidificantes. Olsson (1994) também estudou numericamente o escoamento de um fluido de Giesekus em contracções planas 2:1 e 4:1, tendo usado um algoritmo baseado no método das diferenças finitas capaz de simular escoamentos transientes. Este autor optou ainda por adicionar um termo difusivo artificial de 2ª ordem para aumentar a estabilidade do método de cálculo.

² Como curiosidade refira-se que no final de 2003 já figuravam no *ISI Web of Knowledge*SM 243 citações a este trabalho.

No caso do trabalho de Keiller (1993) foi estudado o escoamento de fluidos do tipo Oldroyd-B e FENE (*Finite Extensible Nonlinear Elastic*) para contracções planas e axissimétricas com razões de contracção elevadas. O método de diferenças finitas usado baseava-se numa marcha temporal para atingir a solução de estado estacionário. Os resultados obtidos indicaram que a queda de pressão extra devida à contracção, no caso do escoamento de fluidos viscoelásticos, era inferior à do caso newtoniano, tanto para o escoamento numa contracção plana como numa contracção axissimétrica.

Uma forma eficaz para melhorar a qualidade das soluções numéricas, usando os *parcos* recursos computacionais disponíveis no início da década de 1990, consistiu no uso de técnicas de refinamento adaptativo da malha. Rao e Finlayson (1990) aplicaram essa técnica a um método baseado em elementos finitos, e estudaram a sua aplicação à previsão do escoamento numa contracção axissimétrica 4:1 de um fluido newtoniano e de um fluido de Maxwell. Para o caso newtoniano a técnica revelou-se eficiente, ao passo que no caso viscoelástico a qualidade da solução obtida diminuiu drasticamente, não se tendo verificado uma melhoria significativa com os refinamentos sucessivos da malha efectuados automaticamente pela metodologia de cálculo. Um ano mais tarde, estes autores obtiveram resultados bem mais animadores para o caso viscoelástico (Rao e Finlayson, 1991), tendo assim demonstrado a eficiência do método desenvolvido.

2.3.3 Simulação numérica baseada no método dos volumes finitos

Por esta altura começaram a surgir as primeiras publicações fazendo uso do método dos volumes finitos para a previsão do escoamento de fluidos viscoelásticos (Hu e Joseph, 1990; Yoo e Na, 1991; Darwish *et al.*, 1992). Os primeiros autores estudaram o escoamento de Stokes de um fluido UCM em torno de um cilindro, ao passo que Yoo e Na (1991) simularam o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1. Estes autores usaram malhas deslocadas (vide Figura 4.3) não uniformes, e o algoritmo SIMPLER (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations - Revised*) foi seleccionado para a ligação entre as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento. Os termos convectivos das equações constitutivas foram discretizados segundo uma versão modificada do esquema híbrido (Patankar, 1980), implementado com recurso ao método da correcção diferida (*Deferred Correction*, DC) proposto por Khosla e Rubin (1974). Os resultados obtidos mostraram que, à medida que o número de Déborah

aumentava, ocorria o aparecimento e o crescimento significativo de um vórtice de entrada, que interagia com o vórtice de canto. A influência dos números de Reynolds e de Débora na queda de pressão extra induzida pela contracção apresentavam comportamentos opostos: enquanto que o aumento do número de Débora originava uma diminuição da queda de pressão extra, o aumento do número de Reynolds conduzia a um efeito contrário.

O trabalho de Darwish *et al.* (1992), embora dedicado ao estudo do escoamento numa expansão plana 4:1 de um fluido UCM, merece particular destaque por ter utilizado pela primeira vez um esquema de alta resolução para o tratamento dos termos convectivos das equações constitutivas. Estes autores usaram o esquema SMART, desenvolvido por Gaskell e Lau (1988), implementando-o num método de volumes finitos. Foi usada uma formulação baseada nas variáveis primitivas (pressão, velocidades e tensões), calculadas em malhas deslocadas. A utilização do esquema de alta resolução, devido ao seu carácter intrinsecamente limitado (*bounded*), evita o surgimento de instabilidades numéricas, assim como uma boa precisão.

Apesar do aparecimento, no início da década de 1990, de trabalhos baseados no método dos volumes finitos, a predominância do método dos elementos finitos na previsão do escoamento de fluidos viscoelásticos é, ainda hoje, uma realidade. No entanto, nos últimos anos tem-se verificado um crescimento significativo do número de trabalhos que empregam métodos de volumes finitos e, em menor escala, métodos espectrais. Uma descrição detalhada dos desenvolvimentos mais importantes até 1998 na área da simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, usando o método dos elementos finitos, é apresentada em Baaijens (1998b). Neste trabalho faz-se um apanhado de várias técnicas usadas na discretização do termo convectivo das equações reológicas, dando-se particular destaque aos métodos SUPG e SU (acima referidos), bem como ao método de Raviart e Lesaint (1974), vulgarmente designado por método descontínuo de Galerkin (*Discontinuous Galerkin*, DG). A utilização do método de Lesaint-Raviart na previsão do escoamento de fluidos viscoelásticos foi efectuada, pela primeira vez, por Fortin e Fortin (1989).

A utilização de métodos espectrais na previsão do escoamento de fluidos viscoelásticos em regime laminar é recente, encontrando-se ainda pouco disseminada (para uma descrição do método e dos desenvolvimentos mais

relevantes na área da reologia computacional sugere-se a consulta de Owens e Phillips, 2002). A principal vantagem da utilização dos métodos espectrais reside na sua elevada precisão. No entanto, a sua aplicabilidade na solução de escoamentos de fluidos viscoelásticos restringe-se a problemas com geometrias simples e em que não existam pontos singulares (Owens e Phillips, 2002). Uma forma alternativa, que permite estudar problemas em geometrias complexas, é o método dos elementos espectrais. Este método, proposto inicialmente por Patera (1984), é semelhante ao método dos elementos finitos diferindo apenas nas funções de aproximação (*trial functions*). Uma forma proposta recentemente para promover a estabilização de métodos de elementos espectrais aplicados à simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos consistiu na utilização do método SUPG, frequentemente usado para o tratamento do termo convectivo em métodos dos elementos finitos (Chauvière e Owens, 2001).

Na última década têm surgido alguns trabalhos em reologia computacional, onde se conjuga a utilização dos métodos dos elementos finitos e dos volumes finitos. Dada a dificuldade na implementação de técnicas de estabilização no contexto dos elementos finitos, alguns autores enveredaram pela utilização de métodos híbridos (Sato e Richardson, 1994; Wapperom e Webster, 1998; Wapperom e Webster, 1999; Aboubacar e Webster, 2001; Aboubacar *et al.*, 2002a,b). O algoritmo proposto por Sato e Richardson utiliza o método dos elementos finitos na discretização das equações de conservação da quantidade de movimento (integração explícita no tempo), ao passo que a equação da continuidade e as equações constitutivas são discretizadas por um método implícito baseado em volumes finitos. A estabilização dos termos convectivos das equações constitutivas foi conseguida por utilização de um limitador de fluxo com variação total decrescente (*Total Variation Diminishing*, TVD), o qual garante estabilidade e evita o aparecimento de oscilações indesejáveis na solução calculada. Em Sato e Richardson (1994) estudaram-se os problemas do arranque do escoamento de Poiseuille para fluidos do tipo UCM e Oldroyd-B, assim como o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1. No caso do escoamento na contracção, a solução de estado estacionário foi obtida simulando o processo não estacionário, tendo sido analisada a influência dos números de De e Re . Para $Re = 0.01$ e 0.1 os resultados obtidos numericamente foram idênticos (em toda a gama de De), pelo que os autores concluíram que os efeitos inerciais são

desprezáveis para $Re < 0.1$. Verificou-se ainda uma diminuição do comprimento da recirculação com o aumento de De , tendo sido obtida convergência até $De = 1$. Para $Re = 1$ a influência da inércia no escoamento já foi significativa, traduzindo-se numa diminuição em cerca de 20% do comprimento da recirculação. Neste caso foi possível obter convergência até $De = 2$. Para $Re = 1$ e $De = 2$ foram apresentadas as linhas de corrente obtidas em duas malhas constituídas por 4400 elementos, mas com diferentes níveis de refinamento junto ao canto reentrante. A solução obtida na malha localmente mais refinada, junto ao canto reentrante, denotou a presença de um pequeno vórtice de entrada (além do habitual vórtice de canto), não acontecendo o mesmo na outra malha. Ficou assim a dúvida se o vórtice de entrada obtido era um artefacto numérico ou se de facto era real. No caso desta última hipótese ser a correcta, ficou claro que a sua previsão implica o uso de malhas com graus de refinamento elevados junto ao canto reentrante.

O algoritmo híbrido proposto por Wapperom e Webster (1998) utilizou o método dos elementos finitos na discretização das equações da continuidade e da conservação da quantidade de movimento, ao passo que as equações constitutivas (do tipo hiperbólico) foram aproximadas por um método de volumes finitos. Estes autores aplicaram o algoritmo a dois problemas bidimensionais com solução analítica conhecida. Em primeiro lugar estudaram o problema do transporte puramente advectivo de um escalar num campo de velocidades conhecido, para demonstrar a robustez de algoritmo proposto em lidar com problemas hiperbólicos. Seguidamente estudaram o escoamento de um fluido Oldroyd-B no mesmo campo de velocidades, demonstrando-se assim a capacidade do método resolver problemas envolvendo o escoamento de fluidos viscoelásticos. Com base nestes dois testes, os autores concluíram que o algoritmo híbrido proposto era bastante eficiente (chegando a ser dez vezes mais eficiente que o método equivalente baseado apenas no método dos elementos finitos) e possuía precisão numérica de 2ª ordem. Este método foi usado pelo mesmo grupo de investigação em vários trabalhos posteriores (Wapperom e Webster, 1999; Aboubacar e Webster, 2001; Aboubacar *et al.*, 2002a,b) envolvendo invariavelmente o escoamento de fluidos viscoelásticos do tipo Oldroyd-B e PTT em contracções planas e axissimétricas 4:1. Os resultados desses trabalhos serão analisados com algum detalhe ao longo desta tese.

Para finalizar esta secção irão ser apresentados os trabalhos mais recentes baseados exclusivamente no método dos volumes finitos. Além dos trabalhos já descritos (Hu e Joseph, 1990; Yoo e Na, 1991; Darwish *et al.*, 1992), desenvolvidos no início da década de 1990, têm surgido recentemente outras contribuições importantes usando diferentes abordagens. Tem sido notório que a aplicação do método dos volumes finitos na reologia computacional está a atingir a maturidade, alcançando actualmente performances idênticas à dos métodos baseados em elementos finitos.

Xue *et al.* (1995) estudaram o escoamento, numa conduta de secção rectangular, de fluidos viscoelásticos descritos pelos modelos PTT e PTT modificado (Phan-Thien, 1984). Foi utilizado um método implícito baseado em volumes finitos, recorrendo ao algoritmo SIMPLEST (*SIMPLE with Splitting Technique*) especialmente desenvolvido para o cálculo de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Segundo os autores, a principal característica deste método consiste na divisão do processo de cálculo em várias etapas sequenciais. A tensão elástica é acoplada à equação de conservação da quantidade de movimento de forma explícita, usando os valores calculados no tempo (ou iteração) anterior. As tensões são posteriormente actualizadas por solução das equações constitutivas, após obtenção do campo de velocidades com base nas equações de conservação da quantidade de movimento. A conservação de massa é garantida por resolução de uma equação de Poisson para a pressão. Para evitar o cálculo de soluções sem significado físico, nomeadamente o desacoplamento segundo uma distribuição em xadrez dos campos de pressão e velocidade, optou-se por utilizar malhas deslocadas. A pressão e as tensões elásticas são calculadas nos centros dos volumes de controlo (também designados por células), ao passo que as componentes da velocidade são avaliadas numa malha desfasada, cujo centro das células coincide com os centros das faces dos volumes de controlo. O uso de malhas deslocadas, apesar de facilitar o acoplamento entre os campos da pressão, das tensões e das velocidades, tem o inconveniente de ser pouco versátil no cálculo em geometrias complexas. Outra limitação importante do método proposto reside na utilização de um esquema de diferenças de montante de 1ª ordem (*Upwind Differencing Scheme*, UDS) na discretização dos termos convectivos. Apesar do esquema UDS ser muito estável, e evitar o aparecimento de oscilações indesejáveis na solução, tem o inconveniente de apenas possuir uma precisão de 1ª ordem (Patankar, 1980;

Ferziger e Peric, 1996). Por esta razão o uso deste esquema deve ser evitado, existindo recomendações importantes nesse sentido (Freitas, 1993). Para aumentar a estabilidade do método adicionaram-se termos difusivos artificiais, em ambos os membros das equações constitutivas. Um dos termos difusivos artificiais é avaliado de forma implícita, ao passo que o outro é calculado com base na solução conhecida do tempo de cálculo (ou iteração) anterior (i.e., explicitamente). Este procedimento aumenta a estabilidade do algoritmo de cálculo, não tendo qualquer influência na precisão da solução de estado estacionário, uma vez que à medida que a solução final é alcançada, os termos adicionados a ambos os membros das equações constitutivas compensam-se.

A metodologia desenvolvida por Xue *et al.* (1995) foi generalizada pelos mesmos autores, três anos mais tarde, e aplicada ao cálculo de escoamentos em geometrias tridimensionais (Xue *et al.*, 1998a). De acordo com estes autores, a utilização de modelos viscoelásticos diferenciais sem uma componente de tensão puramente viscosa (por exemplo o modelo UCM) pode causar problemas, essencialmente devido à perda do carácter elíptico das equações de conservação da quantidade de movimento. A solução adoptada para melhorar a estabilidade do algoritmo, e evitar o possível desacoplamento entre a cinemática e as equações constitutivas, consistiu numa mudança de variável aplicada às componentes do tensor das tensões. Essa formulação, proposta por Rajagopalan *et al.* (1990) e amplamente usada na simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos no contexto dos elementos finitos, denomina-se separação elástica e viscosa da tensão (*Elastic Viscous Split Stress*, EVSS) e, tal como o nome indica, consiste em separar a componente viscosa da componente elástica das tensões. A componente viscosa da tensão é adicionada às equações de conservação da quantidade de movimento, garantindo assim o seu carácter elíptico, ao passo que as equações constitutivas resultantes são resolvidas em função da nova variável, que traduz a componente elástica da tensão. Xue *et al.* (1998a) estudaram o escoamento de fluidos UCM, Oldroyd-B e PTT em contracções planas 4:1 bi- e tridimensionais. Foram feitos refinamentos sucessivos da malha, tendo-se analisado o comportamento assintótico junto ao canto reentrante para a geometria bidimensional. Para o escoamento de um fluido newtoniano, a baixo número de Reynolds, verificou-se uma boa concordância dos resultados numéricos com as previsões teóricas de Dean e Montagnon (1949) e Moffatt (1964), junto ao canto reentrante. Para o fluido

Oldroyd-B existiu alguma similaridade entre a análise teórica de Hinch (1993) e as simulações, embora os resultados numéricos não fossem suficientemente precisos para serem conclusivos. A principal causa para a imprecisão dos resultados obtidos com o fluido viscoelástico deveu-se à utilização do esquema UDS na discretização dos termos convectivos das equações reológicas. Nesse estudo analisou-se a influência da inércia e da elasticidade nos padrões de escoamento, mas em vez de usarem os habituais números de Reynolds e de Débora para caracterizar a influência da inércia e da elasticidade, respectivamente, Xue *et al.* (1998a) optaram por apresentar os resultados em função do número de elasticidade, $E = De / Re = \eta_0 \lambda / \rho H_2^2$, e do número de Mach viscoelástico, $M = \sqrt{De Re} = \sqrt{\rho \lambda / \eta_0} U_2$. Esta escolha tem a vantagem de se incluírem os efeitos geométricos apenas no grupo adimensional E , ao passo que a velocidade de escoamento apenas figura no parâmetro adimensional M . Com base nos resultados numéricos foi possível concluir que para fluidos com baixos valores de E o escoamento na contracção era de natureza newtoniana, apresentando um vórtice de canto que tendia a desaparecer com o aumento de M . Contrastando com este comportamento, fluidos com valores de E um pouco superiores, tal como os usados no trabalho experimental de Evans e Walters (1989), originavam o aparecimento de um vórtice de entrada, em simultâneo com o habitual vórtice de canto. Para valores de E ainda mais elevados, mantendo M constante, ocorria a fusão de ambos os vórtices, com o conseqüente crescimento do vórtice resultante. Baseando-se num número elevado de simulações, Xue *et al.* (1998a) propuseram um mapa que ilustra qualitativamente os diversos padrões de escoamento numa contracção plana 4:1, o qual se encontra reproduzido na Figura 2.3.

Para além das simulações em contracções planas 2D, que permitiram construir o importante mapa da Figura 2.3, Xue *et al.* (1998a) também estudaram o escoamento em contracções planas tridimensionais. Este é, possivelmente, o primeiro trabalho em que se comparam resultados obtidos experimentalmente numa contracção plana (Quinzani *et al.*, 1994), com simulações em que não são desprezados eventuais efeitos tridimensionais do escoamento. Qualitativamente existe uma concordância razoável entre os resultados medidos por Quinzani *et al.* (1994), usando as técnicas de birrefringência e de velocimetria laser-Doppler (*Laser-Doppler Velocimetry*, LDV), e as simulações tridimensionais de Xue *et al.* (1998a). Num outro trabalho destes autores publicado no mesmo ano (Xue *et al.*,

1998b) compararam-se os escoamentos de fluidos UCM e PTT numa contracção tridimensional plana 4:1:4 (a contracção ocorre apenas num dos planos alinhados com a direcção do escoamento) e numa contracção tridimensional quadrada/quadrada 4:1:1 (a constrição ocorre em ambos os planos alinhados com o escoamento). Para um mesmo fluido, as diferenças observadas em ambas as geometrias são significativas, devendo-se essencialmente à maior aceleração que ocorre no caso da contracção quadrada/quadrada 4:1:1.

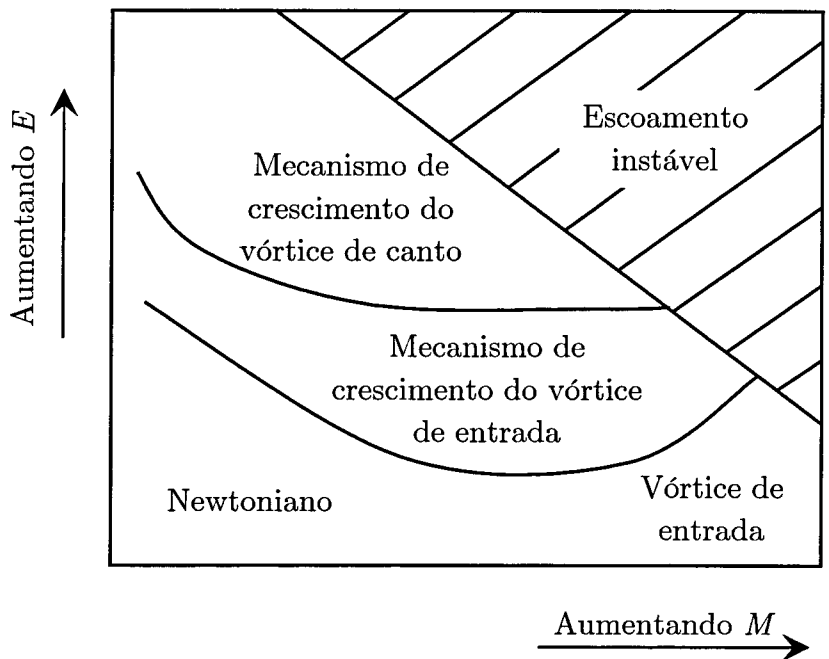


Figura 2.3: Tipos de vórtices observados numa contracção plana 4:1, em função dos parâmetros adimensionais E e M . Baseado em Xue *et al.* (1998a).

Mompean e Deville (1997) também analisaram numericamente o escoamento de um fluido Oldroyd-B em contracções planas bi- e tridimensionais. Estes autores desenvolveram um algoritmo de cálculo baseado no método de volumes finitos, utilizando malhas deslocadas não uniformes. O método MAC (*Marker And Cell*), originalmente proposto por Harlow e Welch (1965), foi usado para promover o acoplamento entre a pressão e as componentes da velocidade nas equações de conservação da quantidade de movimento. O cálculo das componentes da velocidade foi efectuado de forma explícita, enquanto a pressão foi obtida por solução implícita de uma equação de Poisson. A solução transiente foi obtida com base num algoritmo de marcha temporal, usando o método de Euler de 1ª ordem implementado de forma explícita. A discretização dos termos convectivos das equações de conservação da quantidade de movimento, e das equações

constitutivas, foi efectuada com o esquema QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*), desenvolvido por Leonard (1979). Este esquema de ordem elevada é significativamente mais preciso do que o esquema UDS (tem uma precisão numérica de 3^a ordem), no entanto é muito menos estável, podendo originar o aparecimento de oscilações na solução. As simulações efectuadas para o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana bidimensional 4:1 sugeriram uma diminuição do comprimento da recirculação com o aumento de De . Os autores reportaram ter alcançado soluções convergentes até $De = 27.3$, no entanto não demonstraram a sua independência da malha, uma vez que apresentaram apenas os resultados obtidos numa malha, cujo refinamento foi claramente insuficiente. Em toda a gama de valores de De analisados, nunca foi observado o aparecimento de um vórtice de entrada, possivelmente devido ao insuficiente refinamento da malha, em especial junto ao canto reentrante. Não são referidos valores do comprimento e da intensidade da recirculação para qualquer das simulações efectuadas, excepto para o caso do escoamento de Stokes de um fluido newtoniano, para o qual foi obtido o valor de $x_R/H_2 = 1.52$. Mompean e Deville também efectuaram simulações tridimensionais, tendo optado por estudar o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1:4. Foram usadas duas malhas distintas, sendo a mais refinada constituída por 86 961 células. Este número de células era muito significativo para a época, tendo sido por isso necessário recorrer a um supercomputador CRAY-YMP e tempos de CPU da ordem de 10 horas para uma simulação viscoelástica. Apesar da malha usada nas simulações 3D possuir um número significativo de células, o grau de refinamento da malha junto à contracção ainda era insuficiente, especialmente para simulações com o fluido Oldroyd-B. Saliente-se, no entanto, que este trabalho representou um marco histórico importante na tentativa de simular escoamentos em contracções tridimensionais de fluidos viscoelásticos. Comparando as linhas de corrente obtidas nas simulações bidimensionais com as obtidas no plano central da contracção tridimensional, verificou-se que o comprimento da recirculação foi significativamente inferior no caso da contracção 3D, devido a efeitos de parede.

Dou e Phan-Thien (1998) também deram um passo importante na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos com base no método dos volumes finitos. Estes autores desenvolveram um método aplicável a malhas não estruturadas, formadas por um conjunto de células triangulares. O algoritmo de cálculo foi

implementado de forma paralela, usando uma estratégia de decomposição do domínio de cálculo em vários sub-domínios. Foram utilizados até 24 processadores, tendo sido obtida uma boa eficiência de paralelização. O método desenvolvido baseia-se na aplicação do algoritmo SIMPLER e da formulação EVSS. A utilização de malhas não estruturadas do tipo colocadas (vide Figura 4.3), em que todas as variáveis são calculadas nos mesmos nós, aumenta a versatilidade do algoritmo de cálculo, tornando-o aplicável a geometria complexas. Dou e Phan-Thien estudaram o escoamento entre duas placas planas e em torno de um cilindro, para fluidos do tipo PTT. A análise detalhada dos resultados obtidos irá ser efectuada na próxima secção.

Oliveira *et al.* (1998) optaram também pela utilização do método dos volumes finitos e propuseram um novo método de cálculo, baseado em malhas colocadas (não deslocadas) não ortogonais, para a simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos. A inclusão dos termos inerciais nas equações constitutivas e de transporte permite a simulação de escoamentos variáveis, apesar dos autores terem apenas analisado soluções de estado estacionário, para os escoamentos de um fluido UCM num escoamento de entrada (*slip-stick*), e em torno de um cilindro. As soluções de estado estacionário foram obtidas efectuando uma marcha temporal, cujo passo de integração não está limitado, devido à utilização do método de Euler de 1ª ordem implementado de forma implícita. Uma das contribuições mais importantes deste trabalho foi o acoplamento entre os campos de tensão, pressão e velocidade. Este acoplamento é essencial para garantir a estabilidade do algoritmo, e baseou-se nas ideias de Rhie e Chow (1983) desenvolvidas para promover o acoplamento entre os campos de pressão e velocidade, em escoamentos newtonianos. O acoplamento entre os campos de tensão, pressão e velocidade, foi novamente abordado em Oliveira e Pinho (1999c), tendo sido apresentada uma variante do método de interpolação desenvolvido anteriormente. Para ilustrar as potencialidades do algoritmo, Oliveira e Pinho estudaram o escoamento numa contracção plana 4:1, para um fluido newtoniano e para um fluido UCM. Para o fluido viscoelástico foi possível alcançar soluções estáveis até $De = 8$ e 6 , para os casos $Re = 1$ e 0.5 , respectivamente. Estes valores de De foram superiores aos alcançados, nas mesmas condições, por Sato e Richardson (1994) e por Matallah *et al.* (1998), o que demonstrou a robustez do método numérico. Apesar das soluções terem sido calculadas em três malhas distintas, com diferentes graus de

refinamento, os resultados ainda careciam de precisão, especialmente a De elevados, devido à utilização do método UDS na discretização dos termos convectivos. Este assunto foi então abordado por Oliveira e Pinho (1999b) que estudaram o escoamento de fluidos UCM e PTT numa contracção plana 4:1 a $Re = 0.01$, i.e., em condições de inércia desprezável. Neste trabalho, além da utilização do método UDS na discretização dos termos convectivos das equações constitutivas, foi também implementado o esquema de diferenças de montante de 2ª ordem (*Linear Upwind Differencing Scheme*, LUDS). Embora se tenha verificado um aumento considerável na precisão da solução calculada com o esquema LUDS, a estabilidade do algoritmo diminuiu drasticamente. Por exemplo, a utilização do esquema LUDS para simular o escoamento do fluido UCM na malha mais refinada limitou a convergência da solução a $De = 1$, em contraste com o valor $De = 8$ alcançável com o esquema UDS. Desta forma, Oliveira e Pinho (1999b) sugeriram que o trabalho futuro deveria ser direccionado para a implementação de esquemas de discretização dos termos convectivos, que possuam simultaneamente ordem elevada de convergência e boa estabilidade, por forma a conseguir-se simular com boa precisão, escoamentos a elevados números de De . Este foi precisamente um dos pontos de partida para o trabalho desta tese.

2.3.4 Desenvolvimentos mais recentes

Durante a execução dos trabalhos conducentes à realização desta tese foram publicados vários trabalhos numéricos sobre o escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções, e que passam agora a ser analisados.

Phillips e Williams (1999) desenvolveram um algoritmo baseado no método dos volumes finitos para malhas deslocadas, utilizando o algoritmo SIMPLER. Os termos convectivos, presentes nas equações de conservação da quantidade de movimento e nas equações constitutivas, foram discretizados com base numa metodologia semi-lagrangiana. O algoritmo proposto foi aplicado ao estudo do escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1, a $Re = 0$ e 1. Os cálculos foram efectuados em três malhas, com diferentes níveis de refinamento, com um máximo de 4000 células. Foi alcançada convergência até $De = 2.5$, para ambos os valores de Re estudados, verificando-se uma ligeira diminuição do comprimento e intensidade da recirculação com o aumento de De . A inclusão da inércia originou uma diminuição da recirculação, o que está em acordo com a generalidade dos estudos anteriores em que se analisou a influência de Re no

padrão de escoamento. Para $Re = 0$ observou-se a presença de um vórtice de entrada a $De \geq 2$, cuja intensidade aumentava com a elasticidade do escoamento. Para $Re = 1$ observou-se também a existência de um pequeno vórtice de entrada, mas apenas a $De = 2.5$. Em ambos os casos, verificou-se uma forte dependência da intensidade do vórtice de entrada com a malha usada na simulação. Ficou assim, mais uma vez, a dúvida se o aparecimento do vórtice de entrada correspondia a um artefacto numérico ou a uma realidade física.

Mais recentemente, Phillips e Williams (2002) estudaram o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção 4:1 axissimétrica. O método de cálculo usado foi o mesmo do trabalho anterior, e as malhas empregues também possuíam características idênticas. Contrariamente ao trabalho anterior, agora para a contracção axissimétrica 4:1, verificou-se um aumento pronunciado do comprimento e da intensidade da recirculação com o aumento da elasticidade do escoamento. A influência da inércia foi semelhante, i.e., tende a diminuir a recirculação, e a convergência foi obtida apenas até $De = 1.5$. Em todos os casos estudados não foi visível o aparecimento de um vórtice de entrada, ao contrário do que acontecera para o escoamento na contracção plana 4:1.

Al Moatassime e Jouron (2001) desenvolveram um método de diferenças finitas multimalha (*multigrid*), enquanto Al Moatassime *et al.* (2001) usaram o mesmo algoritmo multimalha num método de volumes finitos. Em ambos os trabalhos usaram-se malhas deslocadas e o algoritmo SIMPLE, tendo sido estudado o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1, se bem que no primeiro trabalho também se estudou o escoamento de um fluido PTT. A discretização do termo convectivo das equações de conservação da quantidade de movimento foi efectuada com o esquema híbrido (Patankar, 1980), enquanto que o termo convectivo das equações constitutivas foi aproximado por diferenças de montante de 1ª ordem. Ambos os esquemas de discretização são pouco precisos, pelo que os resultados aí apresentados deverão ser analisados com prudência, tanto mais que as malhas usadas nas simulações apresentavam um refinamento pouco significativo (menos de 10 000 volumes de controlo). Em ambos os trabalhos apenas são apresentados alguns gráficos de contornos, não sendo indicados valores numéricos do comprimento e intensidade da recirculação, os quais são normalmente usados para verificação da precisão das soluções, por comparação com outros valores da literatura.

Wachs e Clermont (2000) desenvolveram um método de volumes finitos para a simulação do escoamento não isotérmico de fluidos viscoelásticos. Estes autores analisaram o escoamento de um fluido UCM numa contracção axissimétrica 4:1, para condições isotérmicas e também para condições não isotérmicas, em que foram impostas determinadas temperaturas nas paredes da contracção. As dependências com a temperatura, da viscosidade e do tempo de relaxação do fluido, foram contabilizadas usando o princípio de sobreposição tempo-temperatura, com o factor de deslocamento descrito pela equação de William-Landel-Ferry (WLF). Para promover a estabilidade do algoritmo foi usada a formulação EVSS, e a discretização dos termos convectivos foi efectuada com o esquema UDS. As equações de conservação e a equação constitutiva foram discretizadas em malhas deslocadas, em que as velocidades foram calculadas no centro das faces dos volumes de controlo, enquanto a pressão, as tensões elásticas e a temperatura foram avaliadas no centro dos volumes de controlo. Foram usadas seis malhas, com um número total de células compreendido entre 2 396 e 6 232. Para condições isotérmicas foi possível obter soluções estáveis até $De = 10$, nas várias malhas. No entanto, estes resultados devem ser analisados com alguma prudência, uma vez que foi utilizado um esquema de 1ª ordem na discretização dos termos convectivos. É possível observar uma dependência significativa dos resultados com a malha usada na simulação, e os autores chegam mesmo a alertar para esse facto afirmando que “(...) os resultados obtidos a $De > 6$ deverão ser considerados com bastante cuidado, por razões de precisão (...)”. As simulações efectuadas permitem observar um crescimento da dimensão do vórtice de canto com o aumento de De , verificando-se a mesma tendência para a intensidade da recirculação que, contudo, aumenta de forma menos pronunciada para $De > 5$. Verificou-se uma concordância razoável com os resultados obtidos por Sasmal (1995), que usou um método baseado em volumes finitos. Por outro lado, as simulações efectuadas por Coates *et al.* (1992) e por Baaijens (1998a), usando métodos baseados em elementos finitos, prevêm recirculações menores.

O método híbrido desenvolvido por Wapperom e Webster (1998, 1999), já descrito com algum detalhe, foi usado recentemente em diversos trabalhos. Em Aboubacar e Webster (2001) estudou-se o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1, tendo sido obtidas soluções convergentes até $De = 2.8$. Os resultados demonstram uma diminuição do comprimento e da intensidade do

vórtice de canto com o aumento de De . Verificou-se ainda o aparecimento de um vórtice de entrada a $De = 2$, cuja dimensão e intensidade diminuiu com os refinamentos sucessivos da malha. Em Aboubacar *et al.* (2002a) estudou-se o escoamento de fluidos Oldroyd-B e PTT em contracções planas 4:1. Além do canto reentrante abrupto, ilustrado na Figura 2.2, foi ainda estudado o escoamento para a situação em que o canto reentrante foi arredondado, por forma a eliminar a singularidade nas tensões. Para o escoamento do fluido Oldroyd-B na contracção abrupta, os resultados são os mesmos do trabalho anterior (Aboubacar e Webster, 2001). Para o escoamento do fluido Oldroyd-B na contracção arredondada foi possível obter resultados convergentes até $De = 4.4$, verificando-se uma diminuição gradual do comprimento e da intensidade do vórtice de canto, para toda a gama de De estudada. Contrariamente ao verificado para a contracção abrupta, para o canto reentrante arredondado não se observou o aparecimento de um vórtice de entrada, o que está de acordo com os resultados experimentais reportados em Boger e Walters (1993). Foi ainda estudado o escoamento para fluidos viscoelásticos reofluidificantes descritos pelo modelo PTT, nas suas versões linear LPTT (Phan-Thien e Tanner, 1977), e exponencial, EPTT (Phan-Thien, 1978). Verificou-se um aumento significativo da gama de De alcançável para ambos os modelos PTT, especialmente na sua forma exponencial, EPTT. Neste caso foi possível obter soluções estáveis até $De = 35$ e 100 para a contracção abrupta e arredondada, respectivamente. Em Aboubacar *et al.* (2002a) compararam-se os resultados obtidos em contracções axissimétricas 4:1, com os valores obtidos no trabalho anterior para contracções planas 4:1.

Meng *et al.* (2002) desenvolveram um método de elementos espectrais para a simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos. A técnica EVSS foi utilizada para promover a estabilidade do algoritmo de cálculo, o qual foi testado na simulação do escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1, a $Re = 0$. Foram obtidas soluções estáveis apenas até $De = 1.2$, não tendo sido detectado o aparecimento de um vórtice de entrada. Verificou-se uma ligeira diminuição do comprimento do vórtice de canto com o aumento de De , ao passo que a evolução da intensidade da recirculação não é monótona, verificando-se uma dependência pouco significativa com De .

A terminar esta secção, não poderiam deixar de ser referidos alguns trabalhos de revisão que foram publicados recentemente. Em 2000, durante o *XIII*

International Congress on Rheology, que decorreu em Cambrigde, Inglaterra, foram apresentados em sessões plenárias, dois trabalhos de revisão que discutem algumas das metas alcançadas nos últimos anos na área da reologia computacional, bem como alguns dos desafios para os próximos anos (Keunings, 2000; Tanner, 2000). Num outro artigo de revisão, Tanner e Xue (2002) fazem um apanhado dos trabalhos que tiveram algum sucesso na simulação de escoamentos estacionários de elevada elasticidade. São ainda descritos alguns dos trabalhos em que se modelam escoamentos viscoelásticos não estacionários, nomeadamente o arranque do escoamento de um fluido UCM ou Oldroyd-B num tubo, a evolução temporal do escoamento induzido pela queda de uma esfera num tubo, bem como o escoamento em contracções e em torno de um cilindro.

Apesar dos avanços significativos ocorridos nos últimos anos, a simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções é ainda hoje um desafio surpreendente, e muito ainda haverá a fazer. Na Figura 2.4 apresentam-se as dependências, com o número de De , do comprimento adimensional do vórtice de canto, $X_R \equiv x_R/H_2$, e da intensidade normalizada da recirculação, $\Psi_R \equiv (\psi_R/U_1H_1) - 1$, em que ψ_R representa o valor da função de corrente no centro do vórtice de canto. Os resultados apresentados na Figura 2.4 referem-se ao escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1, a $Re = 0$. Como se pode observar, existe uma variabilidade muito grande entre os resultados obtidos pelos vários autores, não sendo possível identificar dois conjuntos de resultados concordantes em toda a gama de De . Mais intrigante ainda, é o facto de se verificar uma disparidade significativa nos resultados numéricos obtidos para o caso newtoniano ($De = 0$), o que não é de forma alguma aceitável.

Os resultados da Figura 2.4 sugerem uma ligeira diminuição do comprimento do vórtice de canto com o aumento da elasticidade do escoamento de um fluido Oldroyd-B. Para a intensidade da recirculação nem sequer é possível indicar uma tendência para os resultados. As previsões de Aboubacar e Webster (2001) sugerem uma diminuição de Ψ_R com De , não se verificando a mesma tendência nos resultados obtidos pelos restantes autores.

Fica assim identificado um dos principais problemas actuais na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Esta tese irá dedicar uma parte significativa a este escoamento padrão, na tentativa de obter soluções com elevada precisão numérica que possam vir a ser usadas como referência em estudos posteriores.

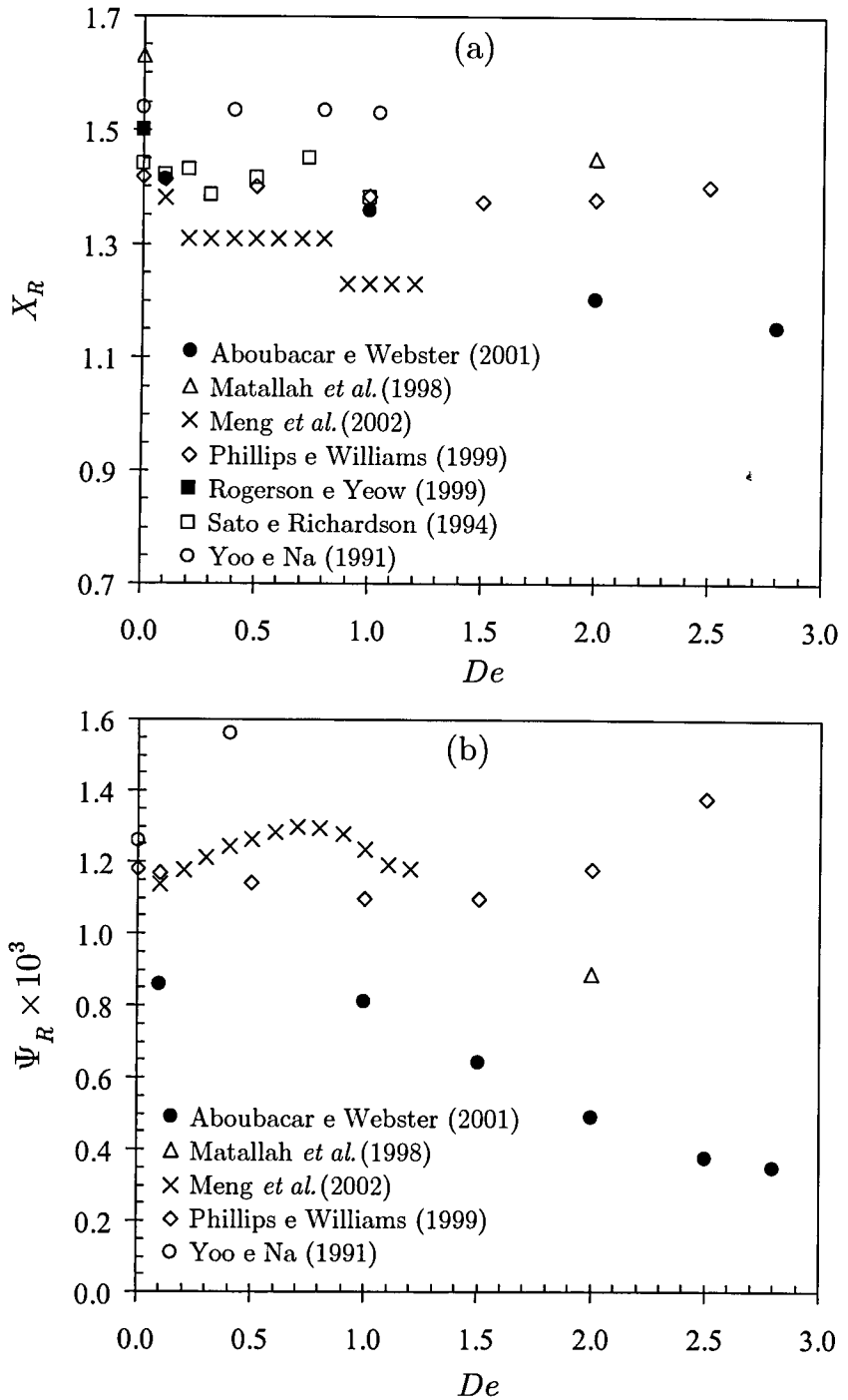


Figura 2.4: Escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contração 4:1 a $Re=0$. Variação, com o número de Débora, do comprimento do vórtice de canto (a) e da respectiva intensidade de recirculação (b).

2.4 Escoamento em torno de um cilindro

2.4.1 Definição do problema

Para fluidos newtonianos, a primeira abordagem ao escoamento em torno de corpos submersos foi feita por Stokes (1851), que obteve a solução analítica para o escoamento em torno de uma esfera, e a correspondente expressão para a força de arrasto exercida em condições de inércia desprezável³. Para o escoamento em torno de um cilindro, Oseen (1910) obteve uma solução analítica aproximada em condições de inércia não desprezável, para baixos valores do número de Reynolds. Anos mais tarde, Proudman e Pearson (1957) obtiveram a solução completa para o escoamento em torno de um cilindro, usando expansões assintóticas.

Dada a complexidade deste escoamento, não foi ainda possível obter uma solução exacta para o escoamento de um fluido viscoelástico em torno de um cilindro. Contudo, existem análises teóricas aproximadas (pois admitem que o campo de velocidades é idêntico ao caso newtoniano) que prevêem o comportamento assintótico em certas regiões do escoamento (Renardy, 2000a).

A análise do escoamento em torno de um cilindro, colocado entre duas paredes paralelas (vide Figura 2.5), é particularmente indicada para análise numérica, devido à complexidade do escoamento resultante e à inexistência de pontos geométricos singulares, ao contrário do que se verifica nas contracções abruptas. Por estas razões, este escoamento foi também seleccionado para problema de referência em reologia computacional (Brown e McKinley, 1994). Outras razões importantes que levaram à escolha deste escoamento padrão, devem-se à sua adequação para análise experimental (especialmente em estudos de birrefringência), bem como ao conhecimento experimental da origem de instabilidades elásticas, na esteira do cilindro, a valores de De da ordem de 1 (McKinley *et al.*, 1993). A previsão correcta do aparecimento destas instabilidades é, ainda hoje, um desafio importante. Neste escoamento o número de Débora é definido por

$$De = \frac{\lambda U}{R} \quad (2.2)$$

em que U traduz a velocidade média no canal, de largura $2h$, e R o raio do cilindro.

³ Daí a origem da denominação “escoamento de Stokes” para as situações em que o número de Reynolds é baixo.

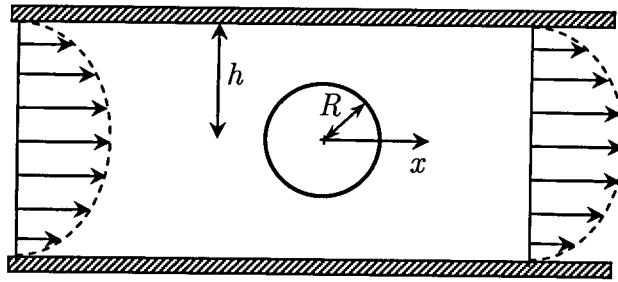


Figura 2.5: Ilustração do escoamento em torno de um cilindro, colocado simetricamente entre duas paredes paralelas, e ilustração de algumas variáveis relevantes.

2.4.2 Comparação entre resultados experimentais e numéricos

A partir de 1994, imediatamente após a proposta deste escoamento de referência (Brown e McKinley, 1994), começaram a surgir as primeiras publicações em que se efectuaram comparações directas, entre os resultados experimentais e de simulação numérica.

Baaijens *et al.* (1994), num estudo experimental deste escoamento padrão, seleccionaram o mesmo fluido previamente usado pelo grupo do MIT (Quinzani *et al.*, 1990; Armstrong *et al.*, 1992). Este fluido, constituído por uma mistura de 5% (em massa) de poli-isobutileno em tetradecano (PIB/C14), apresenta um comportamento viscosimétrico refluidificante e pode ser descrito, de forma razoável, por um modelo viscoelástico do tipo PTT. Baaijens *et al.* (1994) efectuaram medições detalhadas dos campos de velocidades e tensões, usando as técnicas de anemometria laser-Doppler e de birrefringência, respectivamente. As medições experimentais, efectuadas a $De = 0.216$ em regime de Stokes, foram posteriormente comparadas com simulações numéricas, usando um método de elementos finitos. Para o campo de velocidades observou-se uma boa concordância entre as medições experimentais e as simulações, não se tendo verificado o mesmo para as tensões. Em particular, ao longo do plano de simetria a jusante do cilindro, constatou-se uma discrepância acentuada entre as medições e as simulações das tensões, tendo-se observado valores cerca de duas vezes superiores às previsões numéricas, e uma relaxação das tensões significativamente mais lenta que a prevista.

Num segundo trabalho, Baaijens *et al.* (1995) demonstraram a inexactidão das medições das tensões apresentadas no trabalho precedente (Baaijens *et al.*, 1994), e construíram uma nova instalação experimental, na qual estudaram o escoamento

do mesmo fluido (5% PIB/C14), a vários caudais. Mais uma vez, as medições experimentais foram comparadas com simulações numéricas, desta vez usando diversos modelos reológicos: newtoniano generalizado, PTT e PTT multimodo (*multimode*). A comparação entre as medições experimentais e os resultados numéricos foi muito boa, para toda a gama estudada ($De = 0.25$ a 2.32), em particular quando se utilizou o modelo PTT multimodo. Também foram efectuadas medições experimentais dos campos de velocidades e tensões, para uma situação em que o cilindro se encontrava desalinhado do plano central. Mais uma vez, verificou-se uma boa concordância entre as simulações numéricas e as medições experimentais.

Num terceiro trabalho do grupo da Universidade Técnica de Eindhoven, Baaijens *et al.* (1997) estudaram novamente o escoamento em torno de um cilindro confinado, desta vez para um fundido de polietileno de baixa densidade (LDPE). Neste trabalho, os autores optaram por usar modelos constitutivos multimodo (com 4 ou 8 tempos de relaxação) do tipo Giesekus e PTT (na sua versão exponencial: Phan-Thien, 1978), mas nenhum deles permitiu obter simulações com boa concordância relativamente às observações experimentais das tensões, particularmente na esteira do cilindro.

Vários trabalhos comparativos, entre as medições experimentais e as simulações numéricas do escoamento em torno de um cilindro confinado, foram publicados nos últimos anos. Para uma descrição mais detalhada sugere-se a consulta de Verhelst (2001).

2.4.3 Comparação entre resultados obtidos por diferentes métodos numéricos

Apesar do escoamento em torno de um cilindro confinado não apresentar pontos singulares, a sua simulação numérica tem-se revelado particularmente difícil. Por um lado, verifica-se o desenvolvimento de camadas limite de tensões muito delgadas na parede do cilindro, onde ocorrem elevados gradientes de tensões. Por outro lado, e principalmente, o desenvolvimento de tensões normais elevadas na esteira do cilindro, que aumentam significativamente com De , também dificultam a obtenção de soluções numéricas estáveis a valores de De elevados. As maiores dificuldades observam-se com os modelos reológicos do tipo UCM ou Oldroyd-B, ocorrendo a divergência dos métodos numéricos a valores de De da $O(1)$, não sendo a isso alheio o facto do escoamento na esteira do cilindro apresentar um

comportamento predominantemente elongacional, e estes modelos reológicos apresentarem uma viscosidade elongacional ilimitada para $\lambda\dot{\epsilon} = 1/2$ (vide Tabela 3.1), sendo $\dot{\epsilon}$ a taxa de extensão (vide Secção 3.2.2).

A simulação deste escoamento tem sido efectuada por diversos grupos de investigação, usando diferentes métodos numéricos, resumindo-se na Tabela 2.1 as principais referências bibliográficas. Esta análise restringe-se apenas ao período posterior a 1994, altura em que se estabeleceu a importância deste problema de referência (Brown e McKinley, 1994). Para uma descrição pormenorizada das referências anteriores a esta data sugere-se a consulta de Baaijens (1994).

O método das diferenças finitas é actualmente pouco utilizado na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, tendo vindo a ser progressivamente substituído pelo método dos volumes finitos desde o início da década de 1990. Os principais trabalhos, em que foi utilizado o método das diferenças finitas na previsão do escoamento em torno de um cilindro (Pilate e Crochet, 1977; Townsend, 1980; Chilcott e Rallison, 1988), são anteriores a 1994 e, por essa razão, não constam da Tabela 2.1.

Como se pode observar na Tabela 2.1, a maioria dos trabalhos utiliza o método dos elementos finitos, embora haja uma utilização crescente do método dos volumes finitos e, em menor escala, do método dos elementos espectrais. A geometria com a razão $h/R = 2$ é a mais utilizada, tal como sugerido em Brown e McKinley (1994). A maioria dos estudos utiliza os modelos constitutivos de Oldroyd-B, UCM e PTT.

O principal parâmetro usado na aferição dos resultados é o coeficiente de arrasto, C_D , que traduz a força exercida pelo fluido sobre o cilindro numa forma adimensional. Embora seja um parâmetro importante, o coeficiente de arrasto pode não ser um bom indicador da qualidade, ou precisão, local das soluções numéricas, uma vez que se trata de uma quantidade integral (Fan *et al.*, 1999). Desta forma, o facto de duas simulações distintas originarem um valor semelhante de C_D , não implica necessariamente que os campos das diversas variáveis calculadas sejam idênticos. Eventuais diferenças poderão ser compensadas na integração das forças exercidas sobre a superfície do cilindro, podendo resultar num valor semelhante para o C_D . Uma forma inequívoca para verificar a qualidade de uma solução numérica será, além da utilização do C_D , confirmar se os campos das diversas variáveis calculadas são idênticos. Uma atenção especial deverá ser dada às tensões

normais, calculadas ao longo da superfície do cilindro e da linha central a jusante do cilindro (Fan *et al.*, 1999; Owens *et al.*, 2002).

Com base nos trabalhos apresentados na Tabela 2.1, podem-se retirar as seguintes conclusões (em particular para o escoamento de um fluido Oldroyd-B, em regime de Stokes, para $h/R = 2$):

- Existe uma discrepância significativa nos resultados apresentados pelos vários grupos de investigação (normalmente são tabelados valores de C_D em função de De). Surpreendentemente esta limitação observa-se mesmo a baixos valores de De , onde todos os métodos convergem para uma solução estável.
- Para $De \leq 0.7$, apenas se observa boa concordância entre os valores propostos por Fan *et al.* (1999), Caola *et al.* (2001) e Owens *et al.* (2002).
- Para valores de $De > 0.7$ não se observa concordância entre os resultados apresentados pelos vários autores. Em particular, Fan *et al.* (1999) e Owens *et al.* (2002) apresentaram os perfis das tensões normais ao longo da linha central a jusante do cilindro, para valores de De compreendidos entre 0.7 e 0.9. Os resultados dos dois trabalhos são semelhantes verificando-se uma perda significativa de precisão para $De \geq 0.8$. A partir desse valor não é possível obter soluções independentes da malha, pelo menos para as tensões normais na esteira do cilindro, pelo que os resultados apresentados pelos diversos autores a $De \geq 0.8$ poderão ser artefactos numéricos, causados por um refinamento insuficiente da malha e/ou imprecisão dos métodos numéricos empregues na discretização das equações (Fan *et al.*, 1999; Owens *et al.*, 2002).

Fica assim identificado um segundo problema, com grande relevância actual, que será estudado nesta tese com a finalidade de serem obtidas soluções numéricas de elevada precisão.

Tabela 2.1: Resumo dos principais trabalhos de simulação numérica do escoamento de fluidos viscoelásticos em torno de cilindros confinados entre duas paredes.

Referências bibliográficas	Método numérico ^(a)	Modelos reológicos ^(b)	h/R	Descrição
Barakos e Mitsoulis (1995)	MEF	K-BKZ	2.0	A utilização dum modelo constitutivo integral (K-BKZ) permitiu simular, com bastante precisão, os resultados experimentais de Baaijens <i>et al.</i> (1995). O coeficiente de arrasto diminui com o aumento de De .
Huang e Feng (1995)	MEF	Oldroyd-B	2.0	Analisa-se a influência dos efeitos de parede, elasticidade, viscoplasticidade e inércia. A proximidade das paredes aumenta o coeficiente de arrasto que, por seu lado, diminui com o aumento da elasticidade do fluido.
Hulsen <i>et al.</i> (1997)	MEF	Oldroyd-B	2.0	O modelo de Oldroyd-B é simulado microscopicamente e na sua forma macroscópica. Verifica-se uma boa concordância entre os resultados obtidos pelas duas estratégias.
Liu <i>et al.</i> (1998)	MEF	Oldroyd-B, Giesekus	2.0	Analisa-se o escoamento em torno de um cilindro confinado, bem como o escoamento em torno de um arranjo periódico de cilindros confinados. Analisa-se o efeito do espaçamento entre os cilindros. São apresentados valores para o coeficiente de arrasto para as diversas geometrias, usando vários modelos reológicos.
Dou e Phan-Thien (1998)	MVF	PTT	2.0	Desenvolvimento de um método de volumes finitos para malhas não estruturadas, implementado de forma paralela. Os resultados obtidos estão em acordo com simulações prévias, e com as medições experimentais de Baaijens <i>et al.</i> (1995). Demonstra-se uma boa eficiência da implementação paralela do algoritmo.
Mitsoulis (1998)	MEF	K-BKZ	1.6 2.0	A utilização de um modelo constitutivo integral (K-BKZ) permitiu simular, com boa precisão, os resultados experimentais obtidos para o escoamento, em torno de um cilindro confinado entre duas paredes, de três fundidos de polietileno (dois LDPE e um LLDPE). O coeficiente de arrasto diminui com o aumento de De .
Oliveira <i>et al.</i> (1998)	MVF	UCM	2.0 3.0 ∞	Analisa-se a influência da inércia e da elasticidade no coeficiente de arrasto. Os resultados obtidos estão de acordo, qualitativamente, com os resultados propostos por Huang e Feng (1995). Para os casos em que o cilindro está confinado entre duas paredes, verifica-se uma diminuição do coeficiente de arrasto com o aumento de De . Para a situação em que o cilindro está mergulhado num meio infinito, observa-se um aumento do coeficiente de arrasto com o aumento de De .
Sureshkumar <i>et al.</i> (1999)	MEF	Oldroyd-B	2.0	Analisa-se a estabilidade, para pequenas perturbações, do escoamento em torno de um cilindro confinado, ou de um arranjo periódico de cilindros confinados. Para o escoamento em torno de um cilindro, ou para um arranjo com grande espaçamento entre cilindros, verifica-se que o escoamento é estável, em toda a gama de De analisada. Para o arranjo com pequeno espaçamento entre cilindros, verifica-se o aparecimento de uma instabilidade no escoamento, provavelmente uma bifurcação supercrítica de Hopf.

Tabela 2.1: Conclusão.

Referências bibliográficas	Método numérico ^(a)	Modelos reológicos ^(b)	h/R	Descrição
Phan-Thien e Dou (1999)	MVF	UCM, PTT	2.0	Verifica-se uma redução do coeficiente de arrasto com o aumento de De , para ambos os fluidos analisados. Para o fluido UCM essa redução do arrasto deve-se às elevadas tensões normais, enquanto que para o fluido PTT deve-se, predominantemente, a efeitos de viscoplasticidade.
Fan <i>et al.</i> (1999)	MEF	UCM,	2.0	Analisa-se a variação do coeficiente de arrasto com De e ilustram-se as elevadas tensões normais que se observam ao longo da linha central, a jusante do cilindro.
Sun <i>et al.</i> (1999)	MEF	Oldroyd-B, Oldroyd-B, Giesekus	2.0 8.0	Para o fluido Oldroyd-B verifica-se um aumento do coeficiente de arrasto com De , para $h/R=8$. Para $h/R=2$ verifica-se uma diminuição inicial do coeficiente de arrasto, com o aumento de De , seguida de um aumento posterior. Para o fluido de Giesekus verifica-se uma diminuição do coeficiente de arrasto com o aumento de De .
Dou e Phan-Thien (1999)	MVF	Oldroyd-B	2.0	Observa-se uma redução inicial do coeficiente de arrasto com o aumento de De , seguida de um aumento posterior. O coeficiente de arrasto é decomposto nas várias parcelas, devidas às distribuições assimétricas na superfície do cilindro, da pressão, tensões normais, tensões de corte e tensões puramente viscosas.
Dou e Phan-Thien (2001)	MVF	Oldroyd-B	2.0	Neste trabalho procuram-se explicações para a perda de convergência nas soluções a De da $O(1)$, para os modelos UCM e Oldroyd-B. A perda de convergência deve-se, provavelmente, a um aumento acentuado, para $De > 1$, da tensão normal τ_{yy} . Apesar das tensões normais atingirem valores elevados ao longo da linha central a jusante do cilindro, este facto não deverá ter qualquer efeito sobre a perda de convergência.
Caola <i>et al.</i> (2001)	MEF	Oldroyd-B	2.0	A implementação do método de elementos finitos, de forma paralela, permitiu a utilização de malhas extremamente refinadas, até um total de 187816 nós. Obtiveram-se elevadas eficiências na paralelização do algoritmo de cálculo, superiores a 95% até um máximo de 16 processadores usados. Acima de $De=1$, a simulação transiente não converge para um estado estacionário.
Chauvière e Owens (2001)	MEE	Oldroyd-B, PTT	2.0	Demonstra-se a dificuldade de obtenção de soluções precisas, a De elevadas, para as tensões normais na linha central, a jusante do cilindro. Para o fluido Oldroyd-B, os resultados obtidos a $De > 0.8$ poderão ser artefactos numéricos já que não se obtém uma solução precisa, para as tensões normais, na esteira do cilindro. A perda de convergência para o modelo PTT, que ocorre a valores de De mais elevados, talvez seja devida à acumulação de erros na camada limite de tensões, existente na superfície do cilindro.
Owens <i>et al.</i> (2002)	MEE	Oldroyd-B	2.0	Comparam-se os valores do coeficiente de arrasto, com resultados propostos na literatura. Para $De < 0.8$ verifica-se boa concordância com os valores obtidos por outros autores. Para $De > 0.8$ não se verifica uma boa concordância entre os resultados propostos pelos vários autores que estudaram este problema.

^(a) MEE- Método dos elementos espectrais; MEF- Método dos elementos finitos; MVF- Método dos Volumes Finitos.

^(b) K-BKZ- Modelo de Kaye-Bernstein-Kearsley-Zapas (Papanastasiou *et al.*, 1983).

2.5 Escoamento em torno duma esfera em queda num tubo

2.5.1 Definição do problema

O escoamento de um fluido incompressível em torno de uma esfera, a baixo número de Reynolds, é um dos problemas mais antigos da história da mecânica dos fluidos clássica. A sua origem deve-se a Stokes que, em 1851, deduziu uma expressão analítica exacta para o escoamento em torno de uma esfera, a baixo número de Reynolds, mergulhada num meio infinito (Stokes, 1851). A influência das paredes no coeficiente de arrasto, para o caso da esfera estar colocada no interior de um tubo, foi analisada posteriormente por Faxén (1923).

O estudo deste escoamento tem utilidade em diversas áreas, nomeadamente na previsão do assentamento de suspensões, em leitos fluidizados ou até mesmo em reometria (na construção de viscosímetros do tipo *falling ball*).

Na Figura 2.6 ilustra-se esquematicamente o escoamento de um fluido viscoelástico, causado pela queda livre de uma esfera no interior de um tubo cilíndrico. A previsão do factor correctivo, K , do respectivo coeficiente de arrasto para um fluido UCM, foi seleccionado para problema de referência em reologia computacional no 5th *International Workshop on Numerical Methods in Non-Newtonian Flows*, que decorreu em 1987 em Lake Arrowhead, E.U.A., e cujas principais conclusões são apresentadas em Hassager (1988). O factor correctivo do coeficiente de arrasto define-se pelo quociente entre a força de arrasto, exercida sobre a esfera pelo fluido viscoelástico, e a força que seria exercida por um fluido newtoniano, em escoamento de Stokes num meio infinito, à mesma velocidade U ,

$$K = \frac{\text{Força de arrasto}}{6\pi\eta_0 a U} \quad (2.3)$$

em que η_0 representa a viscosidade total do fluido.

Para este problema de referência estabeleceu-se que a razão entre o raio do tubo e da esfera deverá ser $R/a = 2$, e o escoamento deverá ocorrer a baixo número de Reynolds (idealmente a $Re = 0$). Desta forma, evitam-se os efeitos inerciais e isolam-se convenientemente os efeitos elásticos. Para este escoamento, o número de Débora, é definido por $De = \lambda U / a$.

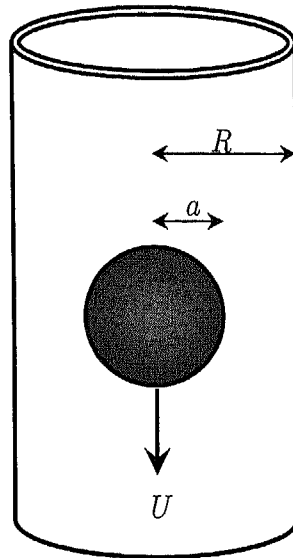


Figura 2.6: Ilustração da geometria para a queda de uma esfera num tubo e identificação de algumas variáveis relevantes.

2.5.2 Comparação entre resultados obtidos por diferentes métodos numéricos

O problema da queda de uma esfera, mergulhada no interior de um tubo, é possivelmente o problema de referência mais citado e mais bem documentado, na literatura da reologia computacional (Baaijens, 1998a). Este problema provou ser de extrema utilidade já que permitiu demonstrar a possibilidade de obtenção de resultados precisos e internacionalmente consistentes, usando diferentes métodos numéricos.

Apesar da inexistência de pontos singulares neste escoamento, à semelhança do que acontece no escoamento em torno de um cilindro, existem gradientes acentuados de tensões na vizinhança da esfera, bem como tensões normais elevadas ao longo do eixo central, a jusante do ponto de estagnação posterior. Estes dois factores tornam a simulação numérica deste escoamento um bom teste à eficiência e precisão dos métodos numéricos. Em 1993 já era possível observar resultados idênticos para K , até $De = 1.6$, por parte de quatro grupos de investigação independentes (Brown e McKinley, 1994), os quais utilizavam diferentes métodos numéricos. Apesar deste sucesso parcial, muito havia ainda a fazer, uma vez que as soluções numéricas tinham uma limitação no valor máximo de De alcançável.

Dois anos mais tarde, Yuran e Crochet (1995) conseguiram alcançar soluções estáveis até $De = 2.1$, cujos resultados eram concordantes com os obtidos por

Arigo *et al.* (1995). No ano seguinte, Luo (1996) alcançou soluções estáveis até $De = 2.8$, no entanto os resultados obtidos a valores elevados de De diferiam significativamente dos de outras referências. Sun *et al.* (1996) alcançou valores de $De = 3.2$, mas os resultados obtidos acima de $De = 1.5$ careciam de precisão, pois afastavam-se progressivamente dos valores de referência.

Em 1997 foram publicados dois trabalhos independentes (Baaijens *et al.*, 1997; Warichet e Legat, 1997), que conduziram a resultados muito semelhantes em toda a gama estudada. Em ambos os trabalhos o limite máximo alcançável foi $De = 2.5$, o que poderá indicar a existência de um ponto limite na solução. Dois anos mais tarde, Fan *et al.* (1999) também obtiveram valores concordantes para o coeficiente de arrasto, mas desta vez a convergência foi obtida apenas até $De = 2.2$.

De forma resumida, pode-se concluir que para o problema da queda de uma esfera no interior de um tubo, preenchido com um fluido UCM, foi possível obter soluções de elevada precisão numa gama significativa de valores de De . Embora a existência de um verdadeiro ponto limite na solução seja muito provável (já que o escoamento na esteira da esfera apresenta um carácter predominantemente elongacional, e a viscosidade elongacional do modelo UCM apresenta uma singularidade a $\lambda \dot{\epsilon} = 1/2$), a identificação precisa do respectivo valor de De não foi ainda obtida de forma inequívoca (Owens e Phillips, 2002).

Este escoamento ilustra de forma clara a vantagem de se escolher um número reduzido de escoamentos de referência, que são estudados de forma independente por diversos grupos de investigação. A validação das soluções numéricas por vários grupos de investigação independentes permite credibilizar esses resultados que, de outra forma, dificilmente seriam aceites como soluções de referência.

Embora este escoamento não seja analisado numericamente nesta tese, a sua inclusão na revisão bibliográfica deve-se à forte analogia com o escoamento em torno de um cilindro, e à possibilidade de obtenção de similaridades nas soluções de ambos os escoamentos. Refira-se, no entanto, que o escoamento em torno do cilindro é mais difícil de simular, o que se reflecte numa diminuição do valor máximo alcançável para o número de Débora.

2.5.3 Estudos numéricos com outros modelos reológicos

Embora o fluido UCM tenha sido eleito para este problema de referência, existem também na literatura diversos trabalhos em que se usaram fluidos

descritos por outros modelos reológicos. A título ilustrativo, podem referir-se alguns trabalhos em que foram utilizados os modelos de PTT (Luo e Tanner, 1986; Carew e Townsend, 1988; Jin *et al.*, 1991; Zheng *et al.*, 1991; Bush, 1993; Arigo *et al.*, 1995; Rajagopalan *et al.*, 1996) ou de Oldroyd-B (Luo e Tanner, 1986; Carew e Townsend, 1988; Zheng *et al.*, 1990; Gervang *et al.*, 1992; Lunsmann *et al.*, 1993; Bodart e Crochet, 1994; Chauvière e Owens, 2000). Embora a maioria destes trabalhos sejam para uma razão $R/a = 2$, outros rácios foram também estudados.

Para uma descrição detalhada da bibliografia relevante, e em particular das publicações recentes sobre este tópico, refira-se o artigo de revisão escrito por McKinley (2002).

2.6 Conclusões

Neste capítulo descreveram-se os principais avanços da reologia computacional, desde a publicação dos primeiros trabalhos até à actualidade. A maioria dos estudos utiliza o método dos elementos finitos, observando-se na última década um aumento significativo no número de grupos de investigação a desenvolverem algoritmos de cálculo baseados no método dos volumes finitos, essencialmente devido à sua potencial economia de recursos computacionais que os tornam particularmente atractivos para a simulação de problemas de larga escala.

Descreveram-se os principais trabalhos publicados para três dos mais importantes problemas de referência em reologia computacional: escoamento em contracções; escoamento em torno de um cilindro confinado; escoamento em torno de uma esfera em queda num tubo. Para o escoamento em contracções abruptas observa-se uma grande dispersão nos resultados obtidos pelos vários grupos de investigação, não existindo actualmente dois conjuntos de resultados compatíveis. É pois importante o estudo detalhado deste problema de referência, que já conta com uma história de mais de duas décadas.

O estudo do escoamento em torno de uma esfera em queda num tubo é um bom exemplo da vantagem resultante da definição de um pequeno número de problemas de referência em reologia computacional. Actualmente este problema pode considerar-se praticamente solucionado, já que existem soluções com elevada precisão, obtidas independentemente por vários grupos de investigação, para uma gama alargada de valores de De . Em contrapartida, para o escoamento de um fluido viscoelástico em torno de um cilindro ainda não existem soluções de

referência numa gama alargada de valores de De , pelo que este escoamento também será estudado em detalhe nesta tese.

“Everything should be made as simple as possible – but not simpler”

Albert Einstein (1879-1955)

Capítulo 3

Equações fundamentais

O cálculo numérico do escoamento de fluidos viscoelásticos passa pela resolução das equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, em simultâneo com uma equação constitutiva reológica adequada. Nas situações em que ocorre transferência de calor e/ou dissipação viscosa deverá também adicionar-se uma equação de conservação da energia térmica. Nesta tese, contudo, restringe-se a análise apenas a cálculos isotérmicos.

3.1 Equações de conservação

Na generalidade das situações de relevância prática, os fluidos não newtonianos encontram-se no estado líquido e podem ser considerados incompressíveis. Nestas circunstâncias, a equação de conservação da massa pode ser escrita na forma

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.1)$$

em que \mathbf{u} representa o vector velocidade, de componentes u_x , u_y e u_z segundo as coordenadas cartesianas x , y e z , respectivamente.

A equação de conservação da quantidade de movimento, pode ser escrita na forma vectorial como (Bird *et al.*, 2002)

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.2)$$

em que ρ , p e t representam, respectivamente, a massa volúmica do fluido, a pressão e o tempo. O fecho das equações anteriores implica a descrição do tensor das tensões, $\boldsymbol{\tau}$, por uma equação constitutiva reológica adequada. Este assunto irá

ser tratado com algum detalhe nas próximas secções, salientando-se desde já que $\boldsymbol{\tau}$ é um tensor simétrico (Bird e Wiest, 1995),

$$\boldsymbol{\tau} \equiv \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Por análise das equações anteriores conclui-se que, para simular um escoamento numa geometria tridimensional, será necessário resolver um sistema de 10 equações às derivadas parciais. As variáveis dependentes são: p , u_x , u_y , u_z , τ_{xx} , τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yy} , τ_{yz} e τ_{zz} . No caso de escoamentos incompressíveis de fluidos newtonianos, o tensor das tensões é uma função explícita do tensor velocidade de deformação, \mathbf{D} ,

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{D} = \eta_s [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3.4)$$

e a equação de conservação da quantidade de movimento simplifica-se na conhecida equação de Navier-Stokes (Bird *et al.*, 2002)

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.5)$$

em que η_s representa a viscosidade do fluido. A análise do escoamento, em regime laminar, de um fluido newtoniano incompressível traduz-se na resolução de um sistema de 4 equações às derivadas parciais, cujas variáveis dependentes são a pressão e as três componentes do vector velocidade.

3.2 Conceitos elementares de reometria

A solução de um problema de escoamento passa então pela escolha adequada de uma equação reológica para o tensor das tensões. No entanto, antes de serem apresentados alguns dos modelos constitutivos mais frequentes, é conveniente descrever alguns dos conceitos elementares de reometria e propriedades típicas dos fluidos não newtonianos. A reometria faz parte da reologia, e ocupa-se da medição experimental das características reológicas dos materiais, tais como a viscosidade de corte e as diferenças de tensões normais (Gomes de Castro *et al.*, 2001). Na caracterização reológica de um fluido não newtoniano frequentemente adoptam-se dois tipos de escoamento padrão: um escoamento de corte simples, e um escoamento elongacional.

3.2.1 Reometria de corte

Os reômetros de corte são equipamentos que permitem medir determinadas funções materiais, nomeadamente a viscosidade de corte, a primeira e segunda diferenças de tensões normais e os módulos de conservação e de perdas, entre outras.

Considere-se um escoamento laminar tangencial, vulgarmente denominado escoamento de Couette, tal como ilustrado na Figura 3.1. O fluido está confinado entre duas placas paralelas, uma das quais se encontra fixa, e a outra desloca-se horizontalmente a velocidade constante, U .

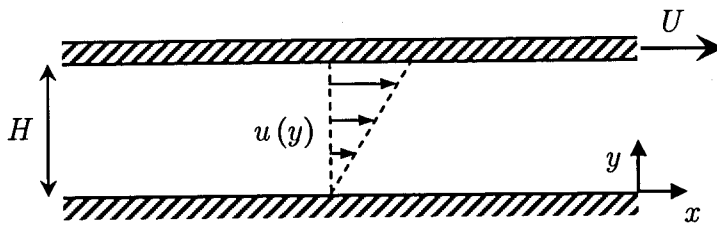


Figura 3.1: Representação esquemática do escoamento de Couette entre duas placas paralelas.

O perfil linear de velocidades é apenas função da coordenada transversal y ,

$$u = \frac{y}{H}U \quad (3.6)$$

pelo que a taxa de deformação será constante em todo o domínio, $\dot{\gamma} \equiv \frac{du}{dy} = \frac{U}{H}$.

Embora existam reômetros de placas paralelas, o seu uso não é prático, por razões tecnológicas, uma vez que apenas é possível promover uma deformação limitada da amostra. Geralmente, utilizam-se reômetros rotativos, os quais promovem o escoamento da amostra entre dois cilindros concêntricos, discos paralelos, ou entre um cone e um prato (para uma descrição pormenorizada dos diversos tipos de reômetros de corte, e respectivas vantagens e limitações, recomenda-se a leitura de Gomes de Castro *et al.*, 2001).

Funções materiais em escoamento de corte simples estacionário

Num escoamento de corte simples em estado estacionário, como o ilustrado na Figura 3.1, é possível determinar três funções materiais independentes: a viscosidade de corte, η , o coeficiente da primeira diferença de tensões normais, Ψ_1 , e o coeficiente da segunda diferença de tensões normais, Ψ_2 . Estas três funções

materiais caracterizam completamente o comportamento do material neste escoamento.

Viscosidade de corte

A viscosidade de corte (também conhecida por viscosidade viscosimétrica ou, simplesmente, viscosidade) define-se, por analogia com a lei de Newton para a viscosidade, como a razão entre a tensão de corte e a respectiva taxa de deformação,

$$\eta(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{xy}}{du/dy} = \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} \quad (3.7)$$

Tipicamente, os fluidos não newtonianos apresentam um comportamento reofluidificante, ou seja, a viscosidade de corte diminui com o aumento da taxa de deformação. Frequentemente verifica-se a existência de um patamar na viscosidade a baixas taxas de deformação, ocorrendo ainda em certos casos, um segundo patamar newtoniano a elevadas taxas de deformação. Apesar da maioria dos fluidos não newtonianos apresentar comportamento reofluidificante, existem algumas raras exceções: em certas suspensões de partículas irregulares é possível observar um comportamento reoespessante, isto é, a viscosidade de corte aumenta com a taxa de deformação; para determinados fluidos viscoelásticos, denominados fluidos de Boger, é possível observar uma viscosidade de corte aproximadamente constante.

Tensões normais

Para fluidos viscoelásticos observa-se experimentalmente que, num escoamento de corte simples, surge uma força normal que tende a afastar as placas paralelas. Essa força normal advém do coeficiente da primeira diferença de tensões normais, Ψ_1 , não ser nulo. Esta propriedade material define-se pelo quociente entre a primeira diferença de tensões normais, N_1 , e o quadrado da taxa de deformação,

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) \equiv \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{xx} - \tau_{yy}}{\dot{\gamma}^2} \quad (3.8)$$

verificando-se experimentalmente que a generalidade dos fluidos viscoelásticos apresenta um comportamento reofluidificante em Ψ_1 , partindo de um patamar constante a baixas taxas de deformação. Embora Ψ_1 seja usualmente positivo para a generalidade dos líquidos poliméricos, tem-se constatado experimentalmente que Ψ_1 poderá ser negativo no caso particular dos cristais líquidos.

A terceira propriedade material que se pode determinar num escoamento de corte é o chamado coeficiente da segunda diferença de tensões normais, Ψ_2 , definido por

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) \equiv \frac{N_2}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{yy} - \tau_{zz}}{\dot{\gamma}^2} \quad (3.9)$$

em que N_2 representa a segunda diferença de tensões normais. A determinação experimental de Ψ_2 não é simples e envolve habitualmente várias medições num reómetro, usando simultaneamente as geometrias de pratos paralelos e de cone e prato (Gomes de Castro *et al.*, 2001). Para fluidos viscoelásticos observa-se experimentalmente que Ψ_2 é geralmente negativo, e o seu valor absoluto é significativamente inferior ao de Ψ_1 (tipicamente $|\Psi_2| \leq 0.2|\Psi_1|$).

Para fluidos newtonianos as tensões normais num escoamento de corte simples são nulas, assim como ambas as diferenças de tensões normais.

Funções materiais em escoamento dinâmico de corte

Outra abordagem fundamental, bastante usada na caracterização reológica dos materiais viscoelásticos, baseia-se em medições dinâmicas não destrutivas por aplicação de tensões (ou deformações) de pequena amplitude com carácter oscilatório. As tensões (deformações) aplicadas deverão ser suficientemente baixas para evitar a destruição estrutural do material, mas sobretudo para que as funções materiais medidas sejam independentes da tensão aplicada, permitindo assim estudar o comportamento viscoelástico dos fluidos no regime linear.

Aplicando uma deformação oscilatória sinusoidal à placa superior da geometria ilustrada na Figura 3.1,

$$\gamma(t) = \gamma_0 \text{sen}(\omega t) \quad (3.10)$$

verifica-se experimentalmente que, para fluidos viscoelásticos, a tensão de corte encontra-se desfasada relativamente à deformação induzida,

$$\tau_{xy} = \tau_0 \text{sen}(\omega t + \delta) \quad (3.11)$$

em que δ se denomina ângulo de perdas, e traduz o desfasamento entre a deformação e a tensão. Desenvolvendo a expressão anterior na forma,

$$\tau_{xy} = \tau_0 [\cos(\delta) \text{sen}(\omega t) + \text{sen}(\delta) \cos(\omega t)] \quad (3.12)$$

pode concluir-se que a tensão de corte pode ser expressa pela soma de uma contribuição elástica, em fase com a deformação, e de uma contribuição viscosa desfasada em $\pi/2$. Surgem assim os conceitos do módulo de conservação, G' , e do módulo de perdas (ou dissipativo), G'' , uma vez que a expressão anterior pode ser reescrita na forma

$$\tau_{xy} = G'(\omega)\gamma_0 \text{sen}(\omega t) + G''(\omega)\gamma_0 \text{cos}(\omega t) \quad (3.13)$$

com

$$G'(\omega) = \frac{\tau_0}{\gamma_0} \text{cos}(\delta) \quad (3.14)$$

$$G''(\omega) = \frac{\tau_0}{\gamma_0} \text{sen}(\delta) \quad (3.15)$$

Para um material perfeitamente elástico a resposta da tensão encontra-se em fase com a deformação, i.e. $\delta = 0$, pelo que $G'(\omega) = \tau_0/\gamma_0$ e $G''(\omega) = 0$. Por outro lado, para um fluido newtoniano $\delta = \pi/2$, ou seja, $G'(\omega) = 0$ e $G''(\omega) = \tau_0/\gamma_0$.

Como $\dot{\gamma}(t) = \gamma_0\omega \text{cos}(\omega t)$, por analogia com a Eq. (3.7) podemos reescrever a Eq. (3.12) na forma

$$\tau_{xy} = \eta''(\omega)\gamma_0\omega \text{sen}(\omega t) + \eta'(\omega)\gamma_0\omega \text{cos}(\omega t) \quad (3.16)$$

em que as viscosidades dinâmicas são definidas por

$$\eta'(\omega) = \frac{\tau_0 \text{sen}(\delta)}{\gamma_0\omega} = \frac{G''}{\omega} \quad (3.17)$$

$$\eta''(\omega) = \frac{\tau_0 \text{cos}(\delta)}{\gamma_0\omega} = \frac{G'}{\omega} \quad (3.18)$$

É importante realçar que as viscosidades dinâmicas⁴ (ou outras funções que se podem definir, como a viscosidade complexa, o módulo complexo, etc.) não contêm qualquer informação extra além daquela que está implícita nos módulos de conservação e de perdas, G' e G'' .

⁴ Chama-se a atenção do leitor para o facto da viscosidade dinâmica aqui referida ser uma propriedade material associada a um escoamento dinâmico (i.e., não estacionário), enquanto que o termo *viscosidade dinâmica* usado em Mecânica dos Fluidos clássica é de facto a viscosidade de corte (constante), referida na secção anterior.

3.2.2 Reometria extensional

O segundo tipo de escoamento standard usado em reometria é o chamado escoamento extensional (ou elongacional). O modo mais simples de provocar uma deformação extensional consiste em prender uma amostra pelas extremidades e *puxá-la* numa determinada direcção. Nesta situação, o escoamento denomina-se de extensão simples se o campo de velocidades for expresso por

$$u_x = \dot{\epsilon} x \quad (3.19)$$

$$u_y = -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} y \quad (3.20)$$

$$u_z = -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} z \quad (3.21)$$

em que $\dot{\epsilon}$ representa a taxa de extensão, assumida constante. O filamento de líquido tem geralmente forma cilíndrica, sendo nessa situação recomendável o uso de coordenadas cilíndricas. Assim, em alternativa às Eqs. (3.20) e (3.21) é preferível usar uma componente radial da velocidade, definida por

$$u_r = -\sqrt{u_y^2 + u_z^2} = -\frac{1}{2} \dot{\epsilon} r \quad (3.22)$$

Considerando um filamento cilíndrico de comprimento L e raio R (ambos função do tempo), pode-se exprimir a taxa de extensão por,

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial t} \quad (3.23)$$

Por integração conclui-se que o comprimento do filamento aumenta exponencialmente com o tempo,

$$\frac{L}{L_0} = \exp(\dot{\epsilon} t) \quad (3.24)$$

e o raio do filamento diminui de forma exponencial para manter o volume total do filamento constante, i.e., $\pi R_0^2 L_0 = \pi R^2 L$, obtendo-se facilmente a evolução do raio do filamento ao longo do tempo

$$\frac{R}{R_0} = \exp\left(-\frac{\dot{\epsilon}}{2} t\right) \quad (3.25)$$

A deformação total a que a amostra é sujeita, denominada deformação de Hencky, será

$$\varepsilon = \int_0^t \dot{\varepsilon} dt = \int_{L_0}^L \frac{1}{L} dL = \ln \frac{L}{L_0} = -2 \ln \frac{R_0}{R} \quad (3.26)$$

A tensão desenvolvida na amostra será obtida pelo quociente entre a força exercida na amarra, F , e a área de secção recta do filamento,

$$\tau_{xx} - \tau_{rr} = \frac{F}{\pi R^2} = \frac{F \exp(\dot{\varepsilon}t)}{\pi R_0^2} \quad (3.27)$$

A viscosidade extensional uniaxial é definida por

$$\eta_E = \frac{\tau_{xx} - \tau_{rr}}{\dot{\varepsilon}} \quad (3.28)$$

sendo frequente a utilização de uma outra variável adimensional denominada razão de Trouton, Tr , definida pelo quociente entre a viscosidade extensional uniaxial e a viscosidade de corte a taxa de deformação nula,

$$Tr \equiv \frac{\eta_E}{\eta_0} \quad (3.29)$$

Refira-se que todos os fluidos possuem uma viscosidade extensional não nula. No caso dos fluidos viscoelásticos verifica-se que a viscosidade extensional varia com a taxa de extensão podendo exceder largamente o valor $Tr = 3$, que caracteriza os fluidos newtonianos.

Existem outras variantes da viscosidade extensional, obtidas por exemplo em ensaios de extensão biaxial ou plana. Para uma descrição destes tipos de extensão multiaxial, e dos métodos usados experimentalmente na sua determinação, sugere-se a consulta de Bird *et al.* (1987a) e de Gomes de Castro *et al.* (2001).

3.3 Modelo de fluido newtoniano generalizado

Aquando da apresentação da equação de conservação da quantidade de movimento, Eq. (3.2), foi referida a necessidade de uma equação constitutiva reológica para o tensor das tensões, que traduza de forma adequada o comportamento reológico do fluido. Existem diversos modelos reológicos na literatura, apropriados em determinadas condições, mas que poderão ser inadequados noutras. A escolha de um modelo constitutivo adequado é crucial para uma correcta representação do comportamento do fluido, no entanto a sua escolha nem sempre é fácil, dada a complexidade do comportamento de alguns fluidos.

Os modelos reológicos mais simples são válidos para fluidos puramente viscosos. Este tipo de fluidos não possui qualquer tipo de memória (a tensão depende exclusivamente da taxa de deformação instantânea, e não da sua história), podendo a sua viscosidade de corte ser constante ou variável, sendo o modelo classificado de newtoniano ou de newtoniano generalizado, respectivamente.

A equação reológica de um fluido newtoniano incompressível já foi apresentada anteriormente, *vide* Eq. (3.4). Num caso mais geral, em que eventuais efeitos de compressibilidade sejam importantes, a equação reológica de um fluido newtoniano será (Bird *et al.*, 2002)

$$\boldsymbol{\tau} = \eta_s [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] - \left(\frac{2}{3} \eta_s - \kappa \right) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \boldsymbol{\delta} \quad (3.30)$$

em que $\boldsymbol{\delta}$ representa o tensor unitário, com componentes δ_{ij} nulas para $i \neq j$ e unitárias para $i = j$. A variável κ traduz a viscosidade dilatacional, a qual normalmente poderá ser omitida (usando a hipótese de Stokes), excepto em casos muito específicos como nalguns escoamentos de fluidos com bolhas (Bird *et al.*, 2002). Para cálculos em que a compressibilidade do fluido seja desprezável, como os analisados nesta tese, e fazendo uso da equação da continuidade, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, a equação anterior simplifica-se na Eq. (3.4), acima apresentada.

A extensão mais simples da equação constitutiva newtoniana corresponde ao modelo newtoniano generalizado, aplicável aos fluidos não newtonianos puramente viscosos. Os modelos reológicos do tipo newtoniano generalizado possuem uma viscosidade de corte dependente da taxa de deformação. Neste caso, a Eq. (3.4) deverá ser generalizada em

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \eta(\dot{\gamma}) [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (3.31)$$

em que o invariante $\dot{\gamma}$ denomina-se taxa de deformação, e traduz a magnitude do tensor taxa de deformação definido por (Bird *et al.*, 1987a),

$$\dot{\gamma} = |\dot{\boldsymbol{\gamma}}| = \sqrt{\frac{1}{2} II(\dot{\boldsymbol{\gamma}})} = \sqrt{\frac{1}{2} (\dot{\boldsymbol{\gamma}} : \dot{\boldsymbol{\gamma}}^T)} \quad (3.32)$$

com $II(\dot{\boldsymbol{\gamma}})$ a representar o segundo invariante do tensor $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$.

Um dos modelos newtonianos generalizados usados com mais frequência é o modelo de lei de potência. Este modelo é válido para a região em que ocorre fluidificação, tipicamente a taxas de deformação elevadas, e traduz-se na forma

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (3.33)$$

em que K e n representam os índices de consistência e de lei de potência, respectivamente. O índice de consistência determina o nível de viscosidade a uma determinada taxa de deformação, ao passo que o índice de lei de potência regula o grau de fluidificação (variando tipicamente entre 0.5 e 1). Embora pouco frequente, o modelo de lei de potência também pode traduzir a viscosidade de corte de um fluido reoespesante, sendo nesse caso $n > 1$. O modelo de lei de potência é de fácil utilização, e é usado com relativa frequência, contudo apresenta algumas limitações, nomeadamente o facto da viscosidade aumentar indefinidamente com a diminuição da taxa de deformação. Por outro lado, para altas taxas de deformação a viscosidade tende a anular-se. O modelo de Carreau-Yasuda é uma generalização do modelo de lei de potência que elimina estas limitações, tomando a forma genérica (Yasuda *et al.*, 1981)

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + \frac{\eta_0 - \eta_{\infty}}{\left[1 + (\Lambda \dot{\gamma})^a\right]^{(1-n)/a}} \quad (3.34)$$

em que η_0 e η_{∞} representam as viscosidades a taxas de deformação muito baixas e muito elevadas, respectivamente. O parâmetro Λ traduz um tempo característico do fluido, que determina o valor da taxa de deformação a partir da qual a fluidificação se estabelece. O parâmetro a permite ajustar a rapidez da transição do patamar de viscosidade constante a baixas taxas de deformação para a zona de comportamento de lei de potência. Um caso particular do modelo de Carreau-Yasuda, para $a = 2$, denomina-se modelo de Carreau (1972)

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + \frac{\eta_0 - \eta_{\infty}}{\left[1 + (\Lambda \dot{\gamma})^2\right]^{(1-n)/2}} \quad (3.35)$$

Existem na literatura muitas variantes de modelos newtonianos generalizados. Por exemplo, o modelo de Cross (1965) é definido por,

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + \frac{\eta_0 - \eta_{\infty}}{1 + \alpha \dot{\gamma}^n} \quad (3.36)$$

e o modelo de Sisko (1958) por

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 + K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (3.37)$$

Para uma consulta mais aprofundada destes, e de outros modelos newtonianos generalizados, sugere-se a leitura de Gomes de Castro *et al.* (2001).

Não obstante a incapacidade destes modelos preverem características elásticas, em muitas aplicações práticas os efeitos de corte são dominantes, e os modelos

newtonianos generalizados têm particular utilidade. Nestas situações, a sua simplicidade torna-os bastante atractivos.

3.4 Modelos constitutivos para fluidos viscoelásticos

Existem na literatura diversos modelos constitutivos capazes de traduzir efeitos viscoelásticos. O grau de complexidade e a capacidade preditiva destes modelos reológicos varia consideravelmente. Infelizmente, a existência de uma equação constitutiva exacta, universalmente aplicável a todos os fluidos e a todos os escoamentos é claramente uma utopia. Existem, contudo, diversos modelos constitutivos capazes de obter resultados com precisão aceitável em determinadas condições. Nesta tese irão ser usados exclusivamente modelos viscoelásticos *quasi*- ou não lineares, do tipo diferencial.

3.4.1 Modelo convectivo superior de Maxwell

O modelo de Maxwell corresponde à idealização de um fluido relativamente simples: para deformações lentas comporta-se como um fluido newtoniano de viscosidade η_p ; para deformações rápidas comporta-se como um sólido elástico linear, com módulo de distorção G . É possível usar um modelo mecânico análogo para representar este fluido ideal, por combinação em série de uma mola ideal e de um amortecedor, como se ilustra na Figura 3.2.

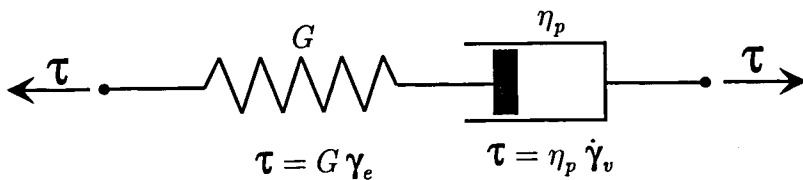


Figura 3.2: Modelo mecânico análogo de um fluido de Maxwell.

Ambos os elementos estão sujeitos à mesma tensão, τ , e a taxa de deformação total resulta da soma das taxas de deformação dos dois elementos, $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_e + \dot{\gamma}_v$, ou seja

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{G} \dot{\tau} + \frac{1}{\eta_p} \tau \quad (3.38)$$

A expressão anterior costuma ser apresentada na forma alternativa,

$$\tau + \lambda \frac{\partial \tau}{\partial t} = \eta_p \dot{\gamma} \quad (3.39)$$

em que $\lambda = \eta_p / G$ representa o tempo de relaxação de Maxwell. A Eq. (3.39) traduz o modelo mais simples capaz de descrever um fluido que é simultaneamente viscoso e elástico, e foi proposta por Maxwell (1867) para investigar o possível carácter viscoelástico de gases.

Embora a Eq. (3.39) seja de extrema utilidade para ilustrar o conceito de viscoelasticidade, a sua utilização na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos não é aceitável por violar o princípio da objectividade material (Oldroyd, 1950; 1984). A Eq. (3.39) pode ser generalizada por forma a verificar as *condições de admissibilidade* propostas por Oldroyd (1950, 1984). Para tal, deverá substituir-se a derivada parcial $\partial \boldsymbol{\tau} / \partial t$ pela derivada convectiva superior de Maxwell, $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$, definida por (Bird *et al.*, 1987a)

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \equiv \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.40)$$

O modelo de Maxwell resulta então na seguinte forma genérica,

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \boldsymbol{\tau} \right) = \eta_p (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \lambda (\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}) \quad (3.41)$$

que se denomina modelo convectivo superior de Maxwell (*Upper Convected Maxwell*, UCM). Este modelo viscoelástico *quasi-linear* é usado com frequência em simulações de referência de fluidos viscoelásticos, sendo aplicável à modelação do escoamento de fluidos de Boger.

O modelo UCM prevê valores constantes para a viscosidade de corte e para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais, e um valor nulo para o coeficiente da segunda diferença de tensões normais. Na Tabela 3.1 apresentam-se algumas funções materiais do modelo UCM. Observe-se que a viscosidade elongacional tende para infinito quando a taxa de extensão tende para $\lambda \dot{\epsilon} = 1/2$, sendo este comportamento singular em extensão um dos defeitos deste modelo. Uma outra observação interessante sobre esta equação constitutiva, baseada na sua utilização prática em reologia computacional, é que apesar de ser o modelo diferencial mais simples que incorpora efeitos elásticos, é o mais difícil do ponto de vista numérico.

3.4.2 Modelo de Oldroyd-B

O modelo de Maxwell, descrito na forma da Eq. (3.39), traduz uma relação linear entre as tensões e os gradientes de velocidade, incluindo ainda uma derivada

temporal das tensões. É ainda possível incluir a derivada temporal do gradiente do vector velocidade mantendo-se uma relação linear

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} = \eta_0 \left(\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_r \frac{\partial \dot{\boldsymbol{\gamma}}}{\partial t} \right) \quad (3.42)$$

Esta equação traduz o modelo de Jeffreys (1924), o qual contém três constantes: a viscosidade a taxa de deformação nula e duas constantes de tempo (a constante de tempo λ_r denomina-se tempo de retardamento). Este modelo foi inicialmente proposto para descrever a propagação de ondas no manto terrestre (Jeffreys, 1924).

O modelo de Jeffreys também pode ser representado por um análogo mecânico, o qual se ilustra na Figura 3.3.

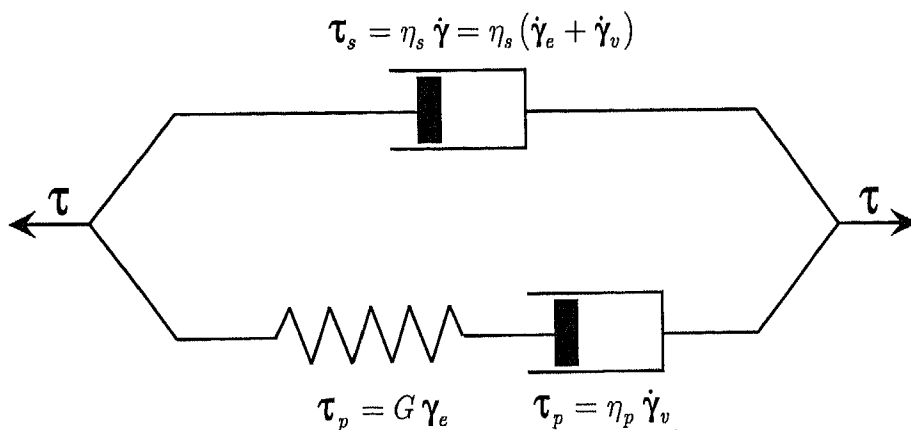


Figura 3.3: Modelo mecânico análogo ao modelo de Jeffreys.

A tensão total é obtida pela soma das tensões de cada um dos ramos,

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s \quad (3.43)$$

Combinando a Eq. (3.39), válida para $\boldsymbol{\tau}_p$, com a expressão para o amortecedor superior, $\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \eta_s (\dot{\boldsymbol{\gamma}}_e + \dot{\boldsymbol{\gamma}}_v)$, obtém-se a Eq. (3.42), sendo $\eta_0 = \eta_p + \eta_s$ e $\lambda_r = \lambda \eta_s / \eta_0$.

O modelo de Jeffreys, da mesma forma que o modelo de Maxwell, não verifica o princípio da objectividade material. A generalização, para um sistema de coordenadas genéricas, é semelhante à efectuada para o modelo UCM. A equação resultante denomina-se modelo de Jeffreys convectivo, ou modelo de Oldroyd-B (denominação adoptada nesta tese),

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_0 \left(\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_r \overset{\nabla}{\dot{\boldsymbol{\gamma}}} \right) \quad (3.44)$$

em que as derivadas convectivas superiores para a tensão e para a taxa de deformação, $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ e $\overset{\nabla}{\dot{\boldsymbol{\gamma}}}$, são calculadas pela Eq. (3.40).

Uma forma alternativa para apresentar o modelo de Oldroyd-B, corresponde a considerar a tensão total como a soma das contribuições de origem polimérica e de origem puramente viscosa (exercida pelo solvente em que o polímero se encontra diluído):

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p \\ \boldsymbol{\tau}_s &= \eta_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \\ \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}_p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \boldsymbol{\tau}_p \right) &= \eta_p (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \lambda (\boldsymbol{\tau}_p \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}_p)\end{aligned}\tag{3.45}$$

O modelo de Oldroyd-B é usado com frequência em reologia computacional, especificamente na simulação de escoamentos de fluidos de Boger. Este modelo reológico prevê valores constantes para a viscosidade de corte e para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais, e um valor nulo para o coeficiente da segunda diferença de tensões normais. Na Tabela 3.1 apresentam-se algumas funções materiais deste modelo viscoelástico. Tal como para o modelo UCM, continua a existir uma singularidade na viscosidade elongacional para $\lambda \dot{\epsilon} = 1/2$.

É possível combinar os dois elementos básicos (mola ideal e amortecedor) noutras formas alternativas, conduzindo a diferentes equações constitutivas quasi-lineares. O leitor interessado pode consultar Bird *et al.* (1987a) para uma listagem mais exaustiva desses modelos reológicos.

3.4.3 Modelo de White-Metzner

Os modelos UCM e Oldroyd-B, apesar de bastante utilizados na simulação de escoamentos de referência com fluidos viscoelásticos, são muito restritivos por serem apenas aplicáveis a fluidos viscoelásticos com viscosidade viscosimétrica e primeira diferença de tensões normais constantes. Como é sabido, a generalidade dos fluidos poliméricos possui características reofluidificantes em ambas as funções materiais. Surge assim a necessidade de utilizar equações constitutivas não lineares, mais complexas e com melhores capacidades preditivas.

Como se viu anteriormente para o modelo newtoniano generalizado, a inclusão da dependência da viscosidade de corte no segundo invariante do tensor das deformações revela-se de enorme utilidade prática. White e Metzner (1963)

propuseram uma generalização do modelo UCM incluindo a dependência em $\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2}(\dot{\mathbf{Y}} : \dot{\mathbf{Y}}^T)} = \sqrt{\frac{1}{2}II(\dot{\mathbf{Y}})}$, na forma

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\eta(\dot{\gamma})}{G} \nabla \boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\mathbf{Y}} \quad (3.46)$$

em que G representa um módulo constante. Este modelo não linear possui as vantagens de ser relativamente simples e possibilitar uma boa correlação da viscosidade de corte e da primeira diferença de tensões normais com a taxa de deformação. Na Tabela 3.1 apresentam-se as principais funções materiais para este modelo constitutivo. Tal como os modelos UCM e Oldroyd-B, o modelo de White-Metzner prevê uma viscosidade elongacional infinita, que ocorre a um valor da taxa de extensão função da expressão usada para descrever $\eta(\dot{\gamma})$. Refira-se ainda que a origem do modelo Oldroyd-B assenta numa base teórica forte, podendo este ser deduzido a partir da teoria cinética molecular, admitindo-se que a interacção entre as cadeias poliméricas se comporta como uma mola hookeana infinitamente extensível, ao passo que o modelo de White-Metzner é puramente empírico.

3.4.4 Modelo de Phan-Thien-Tanner

Não existe qualquer limitação que restrinja a inclusão de outras grandezas invariantes além do segundo invariante do tensor das deformações. Por exemplo, no modelo proposto por Phan-Thien e Tanner (1977), usualmente denominado por modelo PTT, inclui-se o primeiro invariante do tensor das tensões (o traço do tensor), na forma

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p \\ \boldsymbol{\tau}_s &= \eta_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \\ Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \frac{\nabla}{2} \boldsymbol{\tau}_p + \frac{\xi}{2} \lambda \{ \dot{\mathbf{Y}} \cdot \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \cdot \dot{\mathbf{Y}} \} &= \eta_p \dot{\mathbf{Y}} \end{aligned} \quad (3.47)$$

em que $Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p)$ representa uma função do primeiro invariante de $\boldsymbol{\tau}_p$ ($I(\boldsymbol{\tau}_p) = \text{tr } \boldsymbol{\tau}_p = \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz}$). Na versão original do modelo PTT (Phan-Thien e Tanner, 1977), assume-se uma função linear,

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p) = 1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_p} \text{tr } \boldsymbol{\tau}_p \quad (3.48)$$

Um ano mais tarde, Phan-Thien (1978) propôs a utilização de uma função exponencial para a Eq. (3.48),

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p) = \exp\left(\frac{\lambda\varepsilon}{\eta_p} \text{tr } \boldsymbol{\tau}_p\right) \quad (3.49)$$

O modelo PTT também tem uma forte base teórica, sendo deduzido com base em modelos de redes moleculares (Bird *et al.*, 1987b). Os cinco parâmetros que caracterizam o modelo PTT são o tempo de relaxação, λ , a viscosidade polimérica a taxa de deformação nula, η_p , a viscosidade do solvente, η_s , e dois parâmetros adimensionais, ε e ξ , que definem o carácter não linear do modelo. O parâmetro ε serve para eliminar a singularidade na viscosidade extensional, limitando o seu valor máximo (que é inversamente proporcional a ε). Por outro lado, o parâmetro de deslizamento, ξ , contabiliza o grau de deslizamento da rede molecular relativamente ao meio contínuo, tendo uma influência mais significativa no grau de fluidificação da viscosidade de corte e do primeiro coeficiente de tensões normais. A gama admissível para este parâmetro é $0 \leq \xi < 2$. Para $\xi = 0$ (modelo PTT simplificado) o modelo prevê um coeficiente nulo da segunda diferença de tensões normais. Para valores não nulos de ξ o modelo PTT prevê valores negativos do coeficiente da segunda diferença de tensões normais, o que está de acordo com as medições experimentais obtidas para a generalidade das soluções poliméricas e dos polímeros fundidos.

As versões exponencial e linear do modelo PTT diferem principalmente na curva da viscosidade extensional. Na versão exponencial do modelo PTT, a viscosidade extensional parte do valor newtoniano, $\eta_E = 3(\eta_p + \eta_s)$, a baixos valores da taxa de extensão, passa por um máximo (inversamente proporcional ao parâmetro ε), tendendo para um segundo patamar newtoniano inferior, $\eta_E = 3\eta_s$, para valores elevados da taxa de extensão. Por outro lado, a versão linear do modelo PTT prevê uma viscosidade extensional que também parte do valor newtoniano, $\eta_E = 3(\eta_p + \eta_s)$, a baixos valores da taxa de extensão, aumentando seguidamente até atingir um patamar (inversamente proporcional ao parâmetro ε , para $\varepsilon \leq 0.5$) a valores elevados da taxa de extensão. O primeiro tipo de comportamento é típico de polímeros fundidos e o segundo é mais frequente para soluções poliméricas. Na Tabela 3.1 apresentam-se algumas funções materiais deste modelo viscoelástico.

O modelo PTT degenera no modelo Oldroyd-B para $\varepsilon = \xi = 0$, e no modelo UCM se $\eta_s = \varepsilon = \xi = 0$.

3.4.5 Modelo de Giesekus

O modelo de Giesekus (1982) é outra equação constitutiva diferencial não linear na tensão, sendo definido por

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p \\ \boldsymbol{\tau}_s &= \eta_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \\ \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p + \alpha \frac{\lambda}{\eta_p} \{ \boldsymbol{\tau}_p \cdot \boldsymbol{\tau}_p \} &= \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}\end{aligned}\quad (3.50)$$

O modelo resulta da sobreposição das contribuições do solvente e do polímero, $\boldsymbol{\tau}_s$ e $\boldsymbol{\tau}_p$, para o tensor das tensões. Esta forma típica dos modelos constitutivos para soluções poliméricas surge *naturalmente* pelas equações serem derivadas com base na teoria cinética molecular (Bird *et al.*, 1987b). O modelo de Giesekus contém quatro parâmetros: um tempo de relaxação, λ ; as contribuições do solvente e do polímero para a viscosidade de corte a taxa de deformação nula, η_s e η_p ; e um *factor de mobilidade* adimensional, $0 \leq \alpha \leq 0.5$. A origem do termo α está associada à anisotropia do movimento browniano e/ou à anisotropia do arrasto hidrodinâmico exercido sobre as esferas que representam a macromolécula (Bird e Wiest, 1985). O modelo de Oldroyd-B também pode ser deduzido deste modelo, assumindo que o arrasto hidrodinâmico e o movimento browniano são isotrópicos, e admitindo um comportamento linear para a mola que une as esferas. O modelo de Oldroyd-B é recuperado para $\alpha = 0$, enquanto que o modelo UCM é obtido para o caso particular $\alpha = \eta_s = 0$.

O modelo de Giesekus prevê um comportamento reofluidificante para a viscosidade de corte, Ψ_1 e $|\Psi_2|$. A singularidade na viscosidade extensional também é eliminada, desde que $\alpha > 0$. O modelo prevê uma zona inicial de reoessamento da viscosidade extensional, atingindo-se um patamar de η_E para valores elevados da taxa de extensão. Na Tabela 3.1 apresentam-se algumas funções materiais deste modelo viscoelástico.

Além dos modelos viscoelásticos diferenciais descritos, existe uma enorme variedade de alternativas como, por exemplo, os modelos de Oldroyd de 4, 6 e 8 constantes, bem como os modelos de Gordon-Schowalter, Bird-DeAguiar,

Johnson-Segalman, FENE-P, FENE-CR, Pom-Pom, entre outros. Para o leitor interessado sugere-se a consulta de Bird *et al.* (1987a,b) e de Bird e Wiest (1995).

3.4.6 Modelos viscoelásticos multimodo

Dada a complexidade do comportamento viscoelástico de muitos fluidos poliméricos, por vezes a utilização das equações reológicas descritas anteriormente é apenas aproximada. Para uma melhor modelação do comportamento reológico dos fluidos, especialmente o comportamento dinâmico em viscoelasticidade linear, por vezes é vantajosa a utilização de modelos viscoelásticos multimodo, em que a tensão é obtida por um somatório de n contribuições distintas (modos), na forma,

$$\tau = \sum_{k=1}^n \tau_k \quad (3.51)$$

Desta forma incorporam-se facilmente nos modelos anteriores o facto observável de que os líquidos poliméricos não têm um único tempo de relaxação, mas sim uma gama de valores λ_i , e correspondentes módulos de distorção, G_i . Na prática, esta gama pode ser razoavelmente representada com um número de modos (n) entre 3 e 10, aproximadamente.

O modelo Oldroyd-B, vide Eq. (3.45), pode ser entendido como um modelo multimodo UCM (com dois modos), com os seguintes parâmetros: $\lambda_1 = \lambda$; $\eta_1 = \eta_p$; $\lambda_2 = 0$; $\eta_2 = \eta_s$.

Um modelo reológico multimodo não é mais que um somatório de diversas equações constitutivas do mesmo tipo, com diferentes parâmetros para cada um dos modos. Em determinados modelos multimodo é frequente o uso de alguns parâmetros comuns a todos os modos (e.g., o parâmetro α no modelo de Giesekus, ou os parâmetros ε e ξ no modelo PTT), variando-se apenas os valores dos tempos de relaxação e dos coeficientes de viscosidade de cada modo (λ_k e η_k), determinados a partir de medições reológicas em ensaios dinâmicos, como explicado anteriormente.

Do ponto de vista numérico não há dificuldades acrescidas devidas ao uso de modelos multimodo. A principal limitação será a maior exigência de recursos computacionais, em particular em termos de memória necessária.

Tabela 3.1: Funções materiais de alguns modelos viscoelásticos diferenciais. Baseado em Bird *et al.* (1987a).

Modelo Constitutivo	Escoamento de corte estacionário		Escoamento dinâmico de corte		Escoamento elongacional estacionário	
	$\eta(\dot{\gamma})$	$\Psi_1(\dot{\gamma})$	$\Psi_2(\dot{\gamma})$	$G'(\omega)$		$G''(\omega)$
UCM	η_p	$2\lambda\eta_p$	0	$\frac{\eta_p\lambda\omega^2}{1+(\lambda\omega)^2}$	$\frac{\eta_p\omega}{1+(\lambda\omega)^2}$	$\frac{3\eta_p}{(1+\lambda\dot{\epsilon})(1-2\lambda\dot{\epsilon})}$
Oldroyd-B	$\eta_s + \eta_p$	$2\lambda\eta_p$	0	$\frac{\eta_p\lambda\omega^2}{1+(\lambda\omega)^2}$	$\eta_s\omega + \frac{\eta_p\omega}{1+(\lambda\omega)^2}$	$3\eta_s + \frac{3\eta_p}{(1+\lambda\dot{\epsilon})(1-2\lambda\dot{\epsilon})}$
White-Metzner	$\eta(\dot{\gamma})$	$2\lambda(\dot{\gamma})\eta(\dot{\gamma})^{(a)}$	0	(b)	(b)	$\frac{3\eta(\dot{\gamma})}{[1+\lambda(\dot{\gamma})\dot{\epsilon}][1-2\lambda(\dot{\gamma})\dot{\epsilon}]}$ ^(a,c)
PTT	$\eta_s + \eta(\dot{\gamma})$ [$\eta(\dot{\gamma})$ obtido da Eq.(5.17)]	Eq. (5.18)	Eq. (5.19)	$\frac{\eta_p\lambda\omega^2}{1+(\lambda\omega)^2}$	$\eta_s\omega + \frac{\eta_p\omega}{1+(\lambda\omega)^2}$	vide Xue <i>et al.</i> (1998a) (págs. 203-204).
Giesekus	$\eta_s + \frac{\eta_p(1-f)^2}{1+(1-2\alpha)f}$	$\frac{2\eta_p f(1-\alpha f)}{(\lambda\dot{\gamma})^2 \alpha(1-f)}$	$-\frac{\eta_p \lambda f}{(\lambda\dot{\gamma})^2}$	$\frac{\eta_p\lambda\omega^2}{1+(\lambda\omega)^2}$	$\eta_s\omega + \frac{\eta_p\omega}{1+(\lambda\omega)^2}$	$3\eta_s + \frac{3\eta_p}{2\alpha} + \frac{\eta_p}{2\alpha\lambda\dot{\epsilon}} \times$ $[\sqrt{1-4(1-2\alpha)\lambda\dot{\epsilon}+4(\lambda\dot{\epsilon})^2} - \sqrt{1+2(1-2\alpha)\lambda\dot{\epsilon}+(\lambda\dot{\epsilon})^2}]$
	Com $f = \frac{1-\chi}{1+(1-2\alpha)\chi}$;	$\chi^2 = \frac{\sqrt{1+16\alpha(1-\alpha)(\lambda\dot{\gamma})^2} - 1}{8\alpha(1-\alpha)(\lambda\dot{\gamma})^2}$				

^(a) A constante de tempo é calculada por $\lambda(\dot{\gamma}) = \eta(\dot{\gamma}) / G$.

^(b) Não é possível definir G' e G'' para este modelo reológico.

^(c) $\dot{\gamma} \equiv \sqrt{II(\dot{\gamma})} / 2 = \sqrt{3} |\dot{\epsilon}|$.

“All the mathematical sciences are founded on relations between physical laws and laws of numbers, so the aim of exact science is to reduce the problems of nature to the determination of quantities by operations with numbers”

J.C. Maxwell, 1856

Capítulo 4

Método numérico

Neste capítulo, inicialmente apresentam-se as equações constitutivas e de conservação para um sistema de eixos coordenados generalizado. Segue-se uma descrição das particularidades do método dos volumes finitos usado na integração numérica das equações às derivadas parciais. Uma atenção especial será dada à discretização dos termos convectivos das equações diferenciais por se tratar de um assunto fulcral do presente trabalho.

4.1 Coordenadas generalizadas

Frequentemente, as fronteiras que delimitam o domínio de cálculo são superfícies curvas. Nessas circunstâncias, a utilização de uma malha computacional que segue as coordenadas cartesianas revela-se inadequada, pelo que a discretização das equações numa malha que se adapta à curvatura imposta pelas fronteiras é mais eficiente.

A metodologia adoptada nesta tese baseia-se na utilização de um sistema de eixos cartesianos para os vectores e tensores, juntamente com um sistema de coordenadas generalizadas não ortogonais para a malha computacional. Assim, define-se um sistema de eixos cartesianos x_i , $i = 1, 2, 3$ (para as coordenadas x , y e z , respectivamente), juntamente com um sistema de coordenadas generalizadas ζ_l , $l = 1, 2, 3$. Na Figura 4.1 ilustra-se a transformação entre os dois sistemas de eixos.

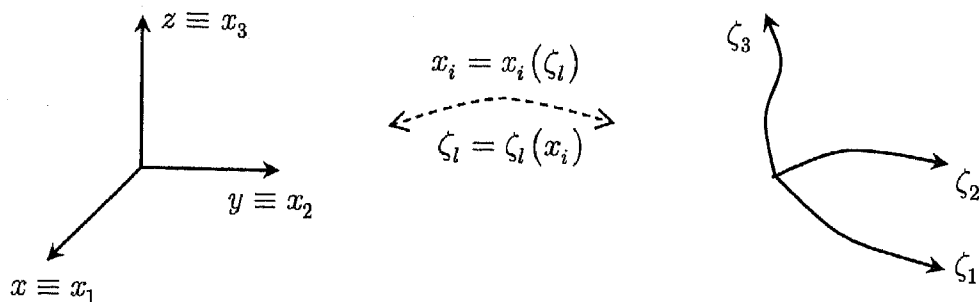


Figura 4.1: Representação esquemática da transformação de um sistema de eixos cartesianos, num sistema genérico de coordenadas não ortogonais.

A matriz jacobiana, \mathbf{J} , relativa à transformação entre os eixos cartesianos e as coordenadas generalizadas, define-se por

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \zeta_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \zeta_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \zeta_3} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Usando notação tensorial, a Eq. (4.1) é expressa por

$$J_{ii} = \frac{\partial x_i}{\partial \zeta_i} \quad (4.2)$$

A transformação das equações de balanço para o novo sistema de coordenadas pode ser efectuada de diversas formas. No presente trabalho adopta-se a metodologia descrita em Oliveira (1992), sendo válidas as seguintes regras de transformação⁵ (Vinokur, 1989)

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} J \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \frac{\partial \zeta_i}{\partial x_i} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \beta_{ii} \quad (4.4)$$

⁵ A convenção de Einstein para os índices repetidos é adoptada neste capítulo para os termos das equações às derivadas parciais. De acordo com esta regra aplicam-se somatórios sobre todas as direcções nos casos em que aparecem índices repetidos. Por exemplo, $\partial \beta_{ii} / \partial \zeta_i$ traduz de forma compacta o mesmo que $\sum_{i=1}^3 \partial \beta_{ii} / \partial \zeta_i$.

em que $J \equiv \det(\mathbf{J})$, e β_{ii} representa os cofactores de $\partial x_i / \partial \zeta_i$ na matriz jacobiana da transformação $x_i = x_i(\zeta_i)$ (Peric, 1985), os quais traduzem componentes de área após integração das equações (Oliveira, 1992).

As Eqs. (3.1) e (3.2), escritas segundo a convenção de Einstein num sistema de eixos cartesianos tomam a forma (optou-se por multiplicar a Eq. (3.1) por ρ por conveniência)

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (4.6)$$

Aplicando as regras de transformação, definidas pelas Eqs. (4.3) e (4.4), as equações de balanço num sistema de coordenadas genéricas resultam em

$$\frac{\partial \rho \beta_{ij} u_j}{\partial \zeta_i} = 0 \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial(\rho J u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \beta_{ij} u_j u_i)}{\partial \zeta_i} = -\frac{\partial(\beta_{ii} p)}{\partial \zeta_i} + \frac{\partial(\beta_{ij} \tau_{ij})}{\partial \zeta_i} \quad (4.8)$$

As Eqs. (4.7) e (4.8) estão escritas na formulação conservativa forte (os diversos termos aparecem no interior dos diferenciais). Esta formulação apresenta algumas vantagens do ponto de vista numérico (Ferziger e Peric, 1996), sendo por isso adoptada neste trabalho. Contudo, como se demonstra em Oliveira (1992), não existem vantagens na adopção da formulação conservativa forte para o termo do gradiente de pressão, existindo argumentos que favorecem o uso da formulação não conservativa para esse termo.

Outro ponto que merece destaque refere-se à inexistência de um termo difusivo na Eq. (4.8). Como é sabido, a presença de termos difusivos nas equações de transporte é vantajosa do ponto de vista da estabilidade dos métodos de volumes finitos (e.g., Patankar, 1980; Ferziger e Peric, 1996). Assim, em Oliveira *et al.* (1998) introduz-se o conceito da adição artificial de um termo difusivo a ambos os membros da Eq. (4.8). Embora a equação de conservação da quantidade de movimento se mantenha aparentemente inalterada, aumenta-se a estabilidade do algoritmo de cálculo. A diferença surge, em termos numéricos, devido ao termo difusivo adicionado ao membro esquerdo da Eq. (4.8) ser discretizado de forma implícita, enquanto que o termo adicionado ao membro direito da equação é tratado explicitamente. Ao longo do processo iterativo existirá uma diferença entre

os termos adicionados, que diminui à medida que se alcança a situação de estado estacionário. O erro introduzido na solução de estado transiente é proporcional ao intervalo de tempo de integração (esquema de 1ª ordem), contudo quando se atinge a solução de estado estacionário existe um cancelamento de ambos os termos adicionados, e a equação (4.8) é novamente recuperada. Este procedimento é semelhante ao usado no método EVSS (Rajagopalan *et al.*, 1990), frequentemente adoptado em simulações de escoamentos viscoelásticos.

A equação de conservação da quantidade de movimento, incluindo os termos difusivos artificiais, toma a seguinte forma (Oliveira *et al.*, 1998)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(J\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\beta_{ij}u_j u_i)}{\partial \zeta_l} - \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left(\frac{\eta_s + \eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} \right) = \\ - \beta_{ii} \frac{\partial p}{\partial \zeta_l} + \frac{\partial(\beta_{ij} \tau_{ij})}{\partial \zeta_l} - \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left(\frac{\eta_s + \eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} \right) \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde não se aplica a regra de soma ao índice sublinhado (l). A tensão total, τ_{ij} , pode ser decomposta numa tensão puramente newtoniana e numa tensão extra não newtoniana (elástica ou inelástica),

$$\tau_{ij} = \tau_{ij,s} + \tau_{ij,p} \quad (4.10)$$

A componente newtoniana é calculada por

$$\tau_{ij,s} = \eta_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \eta_s \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.11)$$

peço que a equação de conservação da quantidade de movimento pode ser reescrita na forma,

$$\begin{aligned} \frac{\partial(J\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\beta_{ij}u_j u_i)}{\partial \zeta_l} - \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left(\frac{\eta_s + \eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} \right) = -\beta_{ii} \frac{\partial p}{\partial \zeta_l} + \\ \frac{\partial(\beta_{ij} \tau_{ij,s})}{\partial \zeta_l} + \frac{\partial(\beta_{ij} \tau_{ij,p})}{\partial \zeta_l} - \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left(\frac{\eta_s + \eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

em que δ_{ij} representa o delta de Kroneker. Os termos apresentados no membro esquerdo desta equação serão discretizados implicitamente, sendo os restantes termos discretizados de forma explícita (i.e., são avaliados com base nos valores conhecidos do tempo de integração anterior), sendo incluídos no termo fonte das equações na sua forma discreta.

Para evitar repetições desnecessárias irá adoptar-se uma equação constitutiva genérica para a tensão extra, a qual engloba os diversos modelos constitutivos

descritos no capítulo anterior. Em termos de coordenadas generalizadas essa expressão toma a forma geral,

$$\begin{aligned}
 J Y \left(\tau_{kk,p} \right) \tau_{ij,p} + \lambda \frac{\partial (J \tau_{ij,p})}{\partial t} + \lambda \frac{\partial (\beta_{ik} u_k \tau_{ij,p})}{\partial \zeta_l} = -J \frac{\alpha \lambda}{\eta_p} \tau_{ik,p} \tau_{kj,p} + \\
 \eta_p \left[\beta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} + \beta_{li} \frac{\partial u_j}{\partial \zeta_l} \right] + \lambda \left[\beta_{ik} \tau_{kj,p} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} + \beta_{lk} \tau_{ki,p} \frac{\partial u_j}{\partial \zeta_l} \right] - \\
 J \frac{\xi \lambda}{2} \left[\tau_{jk,p} \gamma_{ik} + \tau_{ik,p} \gamma_{jk} \right] - \frac{2}{3} \eta_p \beta_{ik} \frac{\partial u_k}{\partial \zeta_l} \delta_{ij}
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

em que $Y(\cdot)$ é uma função dependente do traço do tensor extra, $\tau_{kk,p}$ ($\equiv \tau_{xx,p} + \tau_{yy,p} + \tau_{zz,p}$), de acordo com a Eq. (3.48) ou (3.49) conforme seja escolhida a versão linear ou a versão exponencial do modelo PTT. O último termo desta equação é teoricamente nulo para fluidos incompressíveis (vide também a Eq. (4.11)), tendo mesmo sido desprezado nas diversas equações do capítulo anterior, com exceção da Eq. (3.30). Contudo esse termo é preservado nos cálculos numéricos porque poderá não ser exactamente nulo durante o processo iterativo (devido a erros numéricos, que são mais significativos nos primeiros tempos de integração), e a sua inclusão aumenta a estabilidade do algoritmo de cálculo (Oliveira *et al.*, 1998). No caso de malhas colocadas, como as usadas neste trabalho, esse termo não é nulo mesmo quando o processo iterativo converge. A sua inclusão nas Eqs. (4.11) e (4.13) garante que o traço do tensor das tensões é nulo quando assim o deva ser.

Os termos apresentados no membro esquerdo da Eq. (4.13) serão discretizados implicitamente. Os restantes termos serão discretizados de forma explícita (i.e., são avaliados com base nos valores conhecidos do tempo de integração anterior), sendo incluídos no termo fonte das equações na sua forma discreta. A única excepção refere-se ao termo específico do modelo de Giesekus que será parcialmente discretizado de forma implícita.

Na Tabela 4.1 apresenta-se um resumo dos diversos modelos considerados e quais os parâmetros que devem ser considerados em cada caso. Como se pode observar todos os parâmetros são constantes com excepção de η_p e λ que poderão ser função da taxa de deformação.

Tabela 4.1- Valores dos parâmetros a usar na equação constitutiva geral (4.13) para os diversos modelos reológicos considerados na presente tese. Identificação dos modelos constitutivos em que ocorre reofluidificação e para os quais o coeficiente da 2ª diferença de tensões normais é não-nulo.

Modelo reológico	Parâmetros do modelo						Escoamento de corte	
	η_s	η_p	λ	ε	ξ	α	$\eta(\dot{\gamma})$	$\Psi_2(\dot{\gamma})$
Newtoniano	0	Const. ⁽¹⁾	0	0	0	0	η_p	0
Newtoniano generalizado	0	$\eta(\dot{\gamma})$ ⁽²⁾	0	0	0	0	$\eta(\dot{\gamma})$	0
UCM	0	Const.	Const.	0	0	0	η_p	0
Oldroyd-B	Const.	Const.	Const.	0	0	0	$\eta_s + \eta_p$	0
White-Metzner	0	$\eta(\dot{\gamma})$	$\eta(\dot{\gamma})/G$	0	0	0	$\eta(\dot{\gamma})$	0
PTT	Const.	Const.	Const.	Const.	Const.	0	$\eta(\dot{\gamma})$ ⁽³⁾	$\Psi_2(\dot{\gamma})$ ⁽³⁾
Giesekus	Const.	Const.	Const.	0	0	Const.	$\eta(\dot{\gamma})$ ⁽³⁾	$\Psi_2(\dot{\gamma})$ ⁽³⁾

⁽¹⁾ O modelo de fluido newtoniano também poderia ser considerado com $\eta_s = \text{Const.}$ e $\eta_p = 0$.

⁽²⁾ O modelo de fluido newtoniano generalizado também poderia ser considerado com $\eta_s = \eta(\dot{\gamma})$ e $\eta_p = 0$.

⁽³⁾ Vide Tabela 3.1.

4.2 Discretização das equações

O ponto de partida deste trabalho é o método dos volumes finitos desenvolvido por Oliveira *et al.* (1998). Por essa razão, aqui apenas se fará uma breve descrição do algoritmo de cálculo, já que este se encontra explicado com bastante detalhe em Oliveira *et al.* (1998) e em Oliveira e Pinho (1999b,c). A principal limitação deste método reside no tratamento dos termos convectivos presentes nas equações constitutivas (Oliveira e Pinho, 1999b). Assim, o principal trabalho numérico desta tese foi o desenvolvimento e a implementação de métodos numéricos estáveis e de elevada precisão para o tratamento dos termos convectivos das equações diferenciais. A sua descrição será aqui apresentada em detalhe, e a respectiva validação será efectuada pela simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos em algumas das geometrias de referência descritas no Capítulo 2. Foi também implementada a possibilidade de existência de um solvente newtoniano, segundo a

Eq. (4.10), que não estava incluída no código desenvolvido por Oliveira *et al.* (1998).

A metodologia é aplicável a geometrias tridimensionais de forma genérica. O domínio de cálculo é subdividido em células contíguas com forma hexaédrica, onde as equações diferenciais são integradas por aplicação do teorema de Gauss, garantindo-se assim a conservação das grandezas (Patankar, 1980).

A generalidade dos termos presentes nas equações diferenciais é discretizada usando diferenças centradas. De acordo com este esquema de discretização, as variáveis são estimadas por interpolação linear usando os valores conhecidos no centro das células adjacentes. A discretização dos termos convectivos é uma exceção, uma vez que a utilização de um esquema de diferenças centradas poderá ser problemática, principalmente em escoamentos fortemente convectivos (Patankar, 1980; Ferziger e Peric, 1996). No Capítulo 8 será apresentado um novo esquema de diferenças, desenvolvido especificamente para a discretização dos termos convectivos das equações diferenciais.

A integração das equações diferenciais é simplificada, e quase imediata, se forem usados alguns conceitos fundamentais, descritos em Peric (1985) e em Oliveira (1992): ao proceder-se à integração das Eqs. (4.7), (4.9) e (4.13), num volume de controlo genérico, as quantidades geométricas J e β_i transformam-se, respectivamente, em V (volume da célula) e B_i (componente, segundo o eixo cartesiano i , da área da face orientada segundo a coordenada generalizada l). Repare-se que para evitar qualquer confusão, os índices i , j e k referem-se sempre às componentes cartesianas, enquanto os índices l , m e n dizem respeito às direcções segundo as coordenadas generalizadas. Por outro lado, as derivadas $\partial/\partial\zeta_l$ são substituídas por diferenças finitas ao longo da direcção l (Oliveira, 1992):

$$\frac{\partial\phi}{\partial\zeta_l} = [\Delta\phi]_l \equiv \phi_{l^+} - \phi_{l^-} \quad (4.14)$$

A nomenclatura adoptada na identificação das células e dos eixos coordenados é a mesma que Oliveira *et al.* (1998) usaram, reproduzindo-se na Figura 4.2 para facilitar a sua compreensão.

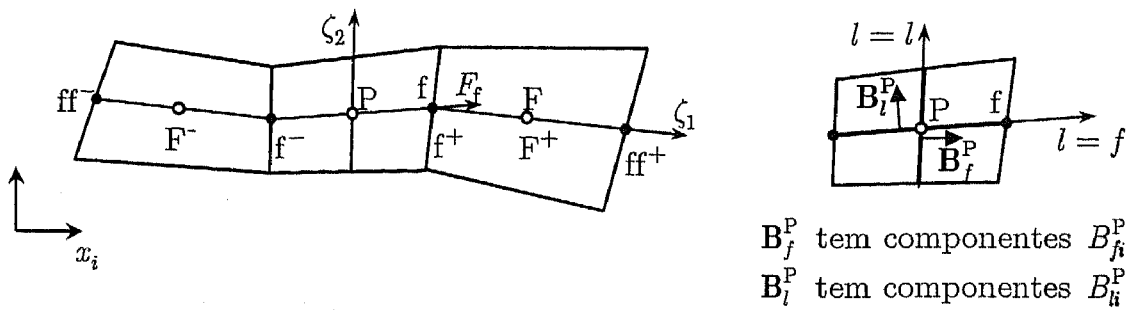


Figura 4.2: Definição de algumas variáveis. (a) Célula genérica P e células vizinhas; (b) vectores das áreas e respectivas componentes.

As diferenças de uma variável genérica, $\Delta\phi$, e as componentes das áreas dos diversos volumes de controlo, B_{fi} , podem ser avaliados quer nos centros dos volumes de controlo (P), quer nas suas faces (f),

$$[\Delta\phi]_f^P \equiv \phi_{f^+} - \phi_{f^-} \quad \text{e} \quad B_{fi}^P \quad (4.15)$$

$$[\Delta\phi]_f^f \equiv \phi_F - \phi_P \quad \text{e} \quad B_{fi}^f \quad (4.16)$$

A nomenclatura adoptada baseia-se na utilização de letras minúsculas para identificar as faces dos volumes de controlo e as letras maiúsculas para identificação dos centros das células, onde são calculadas as variáveis dependentes. Nas faces dos volumes de controlo, as variáveis dependentes são estimadas a partir dos valores nodais, usando esquemas de interpolação adequados. A letra 'F' identifica a célula vizinha da célula genérica 'P', segundo a direcção da face 'f' (vide Figura 4.2). Os caracteres duplos ('FF' ou 'ff') identificam as segundas células vizinhas, segundo a direcção f .

A molécula computacional, usada na discretização das equações, é constituída pela célula genérica 'P' e pelas suas células vizinhas: $F = 1$ a 6 , para W, E, S, N, B, T (Oeste, Este, Sul, Norte, Baixo, Topo), respectivamente. Na discretização dos termos convectivos poderão ser necessárias células mais afastadas: $FF = 1$ a 6 , para WW, EE, SS, NN, BB, TT, respectivamente. Estas seis células *afastadas* da célula 'P' originam contribuições que serão adicionadas ao termo fonte das equações, sendo avaliadas explicitamente.

4.2.1 Equação da continuidade

A Eq. (4.7), que traduz a conservação de massa num sistema de coordenadas generalizadas, pode facilmente ser integrada sobre uma célula genérica 'P' no espaço transformado (com volume unitário), resultando em (Oliveira *et al.*, 1998)⁶

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial \zeta_l} (\rho \beta_{lj} u_j) dV_\zeta = \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 \rho B_{lj} u_j \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 \left(\sum_{j=1}^3 \rho B_{ff}^j \tilde{u}_{j,f} \right) \quad (4.17)$$

O somatório de diferenças centradas na célula P é transformado num somatório de contribuições das faces que delimitam esse volume de controlo, em acordo com o teorema da divergência de Gauss. Como se utiliza uma malha colocada, em que todas as variáveis dependentes são calculadas no centro das células, o valor das componentes da velocidade no centro das faces é desconhecido. Assim, torna-se necessário proceder a uma interpolação adequada para estimar os valores de u_j nas diversas faces, aqui designada por $\tilde{u}_{j,f}$. A utilização de interpolação linear para estimar $\tilde{u}_{j,f}$ é desaconselhável, pois conduz frequentemente a um desacoplamento entre os campos de velocidade e de pressão (Ferziger e Peric, 1996). Rhie e Chow (1983) propuseram um método de interpolação capaz de evitar este desacoplamento, o qual será analisado na Secção 4.3 com algum detalhe.

Na Eq. (4.17) é possível identificar os caudais mássicos que atravessam as seis faces da célula P, definidos por

$$F_f = \sum_{j=1}^3 \rho B_{ff}^j \tilde{u}_{j,f} \quad (4.18)$$

A equação da continuidade, na forma discreta, simplifica-se então em

$$\sum_{f=1}^6 F_f = 0 \quad (4.19)$$

exprimindo simplesmente que a soma dos caudais mássicos que entram no volume de controlo P iguala a soma dos caudais mássicos que o abandonam (as áreas das faces em (4.18) e, por consequência, os fluxos mássicos, são definidos como positivos quando saem da célula P).

⁶ Para as equações na forma discreta não se usa a convenção de Einstein, optando-se por apresentar todos os somatórios.

4.2.2 Equação da conservação da quantidade de movimento

A integração da equação de conservação da quantidade de movimento e respectiva discretização também não oferece grandes dificuldades. Para simplificar a análise irá proceder-se à integração de cada um dos termos que figuram na Eq. (4.12) de forma separada.

(i) Termo inercial

O termo inercial é discretizado usando o método de Euler de 1ª ordem,

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial t} (J \rho u_i) dV = \frac{\rho V_P}{\Delta t} (u_{i,P} - u_{i,P}^{(n)}) \quad (4.20)$$

em que $u_i^{(n)}$ representa a componente, segundo o eixo cartesiano i , da velocidade no centro da célula P, para o tempo de integração anterior (n). Como se utiliza um método de cálculo implícito, todas as variáveis em que não figura um índice temporal referem-se ao novo tempo de integração. A utilização de um método implícito tem a vantagem de não limitar o passo de integração temporal, o que é vantajoso nas situações em que apenas se pretende obter a solução de estado estacionário.

(ii) Termo convectivo

A integração do termo convectivo é semelhante à integração da equação da continuidade, obtendo-se

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial \zeta_l} (\rho \beta_{lj} u_j u_i) dV = \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 (\rho B_{lj} u_j) u_i \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 F_f \hat{u}_{i,f} \quad (4.21)$$

em que os caudais mássicos nas faces, F_f , são calculados com a Eq. (4.18). O esquema de interpolação usado no cálculo da velocidade convectiva na face, $\hat{u}_{i,f}$, é um ponto importante do algoritmo de cálculo, existindo vários esquemas de interpolação propostos para estimar o valor de $\hat{u}_{i,f}$ (Ferziger e Peric, 1996; Leonard, 1996). No caso do esquema de diferenças de montante (UDS), o valor de $\hat{u}_{i,f}$ é igual à velocidade no centro da célula a montante (vide Figura 4.2):

$$\hat{u}_{i,f} = \begin{cases} u_{i,P} & \text{se } F_f \geq 0 \\ u_{i,F} & \text{se } F_f < 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

Os fluxos convectivos que figuram na Eq.(4.21) serão expressos por

$$F_f \hat{u}_{i,f} = \max(F_f, 0) u_{i,P} + \min(F_f, 0) u_{i,F} = F_f^+ u_{i,P} + F_f^- u_{i,F} \quad (4.23)$$

para o esquema UDS.

O esquema de diferenças de montante satisfaz incondicionalmente o critério da limitação convectiva, pelo que nunca origina soluções oscilatórias (Ferziger e Peric, 1996), contudo, tem uma limitação importante relacionada com a sua baixa precisão. Este esquema possui apenas precisão de 1ª ordem, e dá origem ao aparecimento de difusão numérica, pelo que a sua utilização é actualmente fortemente desaconselhada (Freitas, 1993; Leonard e Drummond, 1995).

A utilização de esquemas de diferenças com ordem de convergência elevada no cálculo de $\hat{u}_{i,f}$ apresenta dois inconvenientes: em primeiro lugar, a sua implementação é significativamente mais complexa; em segundo lugar, existe uma perda de estabilidade do algoritmo de cálculo. Na Secção 4.6 será apresentada uma forma simples de contornar estes dois obstáculos. Para já, basta referir que o esquema UDS será implementado de forma implícita, o que garante uma boa estabilidade (Patankar, 1980). Para se aumentar a precisão da discretização do termo convectivo adicionam-se explicitamente, ao termo fonte, as contribuições extra introduzidas pelo esquema de ordem elevada. Este assunto será analisado em detalhe nas Secções 4.5 e 4.6.

(iii) Termo difusivo artificial implícito

A integração do termo difusivo, adicionado artificialmente ao membro esquerdo da Eq. (4.9), resulta em

$$-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left(\frac{\eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} \right) dV = -\sum_{f=1}^6 \frac{\eta_{p,f}}{V_f} B_f^2 [\Delta u_i]_f^f = -\sum_{f=1}^6 D_{f,p} (u_{i,F} - u_{i,P}) \quad (4.24)$$

em que $B_f = \|\mathbf{B}_f^f\| = \sqrt{\sum_{j=1}^3 B_{fj}^f B_{fj}^f}$ representa a área superficial (escalar) da face

f , $V_f = \sum_{j=1}^3 B_{fj}^f [\Delta x_j]_f^f$ traduz o volume da pseudo-célula centrada na face f , e

$D_{f,p} \equiv \eta_{p,f} B_f^2 / V_f$ representa a condutância difusiva artificial.

(iv) Termo difusivo da tensão puramente newtoniana

A integração do termo difusivo devido à componente puramente newtoniana da tensão resulta em

$$\begin{aligned}
& - \int_{V_P} \frac{\partial(\beta_{ij} \tau_{ij,s})}{\partial \zeta_l} dV = - \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 B_{ij} \tau_{ij,s} \right) \right]_l^P = \\
& - \eta_s \sum_{f=1}^6 \frac{1}{V_f} \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{fj}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{fj}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right)
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Seguindo a metodologia descrita em Oliveira (1992), apenas se deverão avaliar implicitamente os fluxos difusivos alinhados com a direção das faces (primeiro termo do membro direito da equação anterior, para $m = f$), sendo as restantes contribuições adicionadas ao termo fonte,

$$S_{u_i\text{-difusao newtoniana}} = \eta_s \sum_{f=1}^6 \frac{1}{V_f} \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{m \neq f}^2 B_{fj}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{fj}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right) \tag{4.26}$$

onde as diferenças de velocidade são avaliadas com valores conhecidos do tempo de integração anterior. O termo difusivo normal, discretizado de forma implícita, é dado por

$$- \sum_{f=1}^6 \frac{\eta_s}{V_f} \sum_{j=1}^3 B_{fj}^f B_{fj}^f [\Delta u_i]_f^f = - \sum_{f=1}^6 D_{f,s} (u_{i,F} - u_{i,P}) \tag{4.27}$$

em que $D_{f,s} \equiv \eta_s B_f^2 / V_f$ representa a condutância difusiva devida à tensão puramente newtoniana. Repare-se que se obtém um termo em tudo análogo ao da Eq. (4.24), sendo mais fácil fazer a sua implementação tal como indicado pela Eq. (4.12): os dois termos de difusão implícitos são somados, Eqs. (4.24)+(4.27), e contabilizados conjuntamente; o termo difusivo newtoniano é calculado explicitamente como um todo, segundo a Eq. (4.25); posteriormente (passo (vii) abaixo), os termos difusivos alinhados com a face são subtraídos de forma explícita.

(v) Termo do gradiente de pressão

A integração do termo do gradiente de pressão resulta em

$$- \int_{V_P} \beta_k \frac{\partial p}{\partial \zeta_l} dV = - \sum_{l=1}^3 B_k^P [\Delta p]_l^P \equiv S_{u_i\text{-pressão}} \tag{4.28}$$

Esta contribuição é calculada explicitamente e adicionada ao termo fonte da equação da conservação da quantidade de movimento. No cálculo dos gradientes de pressão são necessários os valores da pressão nas seis faces que delimitam a célula

P. Neste caso é simplesmente usada uma interpolação linear com os valores conhecidos no centro da célula P e em cada uma das células vizinhas.

(vi) Termo do divergente da tensão extra

Este termo também é avaliado explicitamente, obtendo-se⁷

$$\int_{V_P} \frac{\partial(\beta_{ij}\tau_{ij})}{\partial\zeta_l} dV = \sum_{f=1}^6 \sum_{j=1}^3 B_{ff}^f \tilde{\tau}_{ij,f} \equiv S_{u_i} \text{-tensão extra} \quad (4.29)$$

O valor da tensão extra na face, $\tilde{\tau}_{ij,f}$, deverá ser estimado com um esquema de interpolação adequado, por forma a evitar o desacoplamento entre os campos de velocidade e tensão. Este desacoplamento poderá surgir devido ao uso de uma malha colocada, como se demonstra em Oliveira *et al.* (1998). Em Oliveira e Pinho (1999c) apresenta-se uma metodologia eficiente para estimar $\tilde{\tau}_{ij,f}$, inspirada no método de Rhie e Chow (1983) usado para calcular $\tilde{u}_{j,f}$ na equação (4.18), e evitar o desacoplamento entre os campos de pressão e de velocidade. A metodologia proposta em Oliveira e Pinho (1999c) é apresentada na Secção 4.4.

(vii) Termo difusivo artificial adicionado explicitamente

Para evitar inconsistências, o termo difusivo adicionado ao membro direito da Eq. (4.9), é discretizado da mesma forma que o termo difusivo adicionado ao membro esquerdo da equação,

$$-\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial\zeta_l} \left(\frac{\eta_p + \eta_p}{J} \beta_{ij}\beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial\zeta_l} \right) dV = -\sum_{f=1}^6 (D_{f,p} + D_{f,s}) (u_{i,F}^{(n)} - u_{i,P}^{(n)}) \equiv S_{u_i} \text{-difusão artificial} \quad (4.30)$$

só que neste caso é avaliado explicitamente, ao contrário da Eq. (4.24) em que se implementa o termo difusivo de forma implícita.

Assemblagem da equação discretizada

Agrupando os diversos termos que figuram na equação de conservação da quantidade de movimento, obtém-se (Oliveira *et al.*, 1998)

$$a_P u_{i,P} - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^{(n)} \quad (4.31)$$

em que os coeficientes a_F são obtidos por

⁷ Por uma questão de simplicidade de nomenclatura, no remanescente desta tese apenas se usa τ_{ij} para representar a tensão extra, em vez de $\tau_{ij,p}$ como anteriormente.

$$a_F = a_F^C + a_F^D \quad (4.32)$$

com a_F^D a traduzir a contribuição difusiva,

$$a_F^D = D_f \equiv D_{f,s} + D_{f,p} = (\eta_s + \eta_{p,f}) B_f^2 / V_f \quad (4.33)$$

e a_F^C a contribuição convectiva. Para o esquema UDS a contribuição convectiva é dada por (Oliveira *et al.*, 1998)

$$\begin{aligned} a_F^C &= -F_f^- = -\min(F_f, 0) && \text{para uma face } \textit{positiva}, f^+ \\ a_F^C &= +F_f^+ = +\max(F_f, 0) && \text{para uma face } \textit{negativa}, f^- \end{aligned} \quad (4.34)$$

O coeficiente central da Eq. (4.31), a_P , é calculado por

$$a_P = \frac{\rho V_P}{\delta t} + \sum_{F=1}^6 a_F \quad (4.35)$$

e o termo fonte é obtido a partir da soma dos diversos termos,

$$S_{u_i} = S_{u_i\text{-difusao}}^{\text{newtoniana}} + S_{u_i\text{-press\~ao}} + S_{u_i\text{-tens\~ao}}^{\text{extra}} + S_{u_i\text{-difus\~ao}}^{\text{artificial}} + S_{u_i\text{-HRS}} \quad (4.36)$$

obtidos a partir das Eqs. (4.26) a (4.30). O termo $S_{u_i\text{-HRS}}$ representa a contribuição devida ao uso (eventual) de esquemas de discretização mais precisos que o esquema UDS. Este assunto será analisado em detalhe nas Secções 4.5 e 4.6.

4.2.3 Equação constitutiva

A integração da equação constitutiva, e respectiva discretização num volume de controlo genérico, é semelhante ao efectuado para a equação de conservação da quantidade de movimento. Os diversos termos que figuram na Eq. (4.13) passam a ser analisados separadamente.

(i) Primeiro termo

A integração do primeiro termo da Eq. (4.13) num volume de controlo genérico P, conduz a

$$\int_{V_P} J Y(\tau_{kk}) \tau_{ij} dV = V_P Y[\text{tr}(\boldsymbol{\tau}_P)] \tau_{ij,P} \quad (4.37)$$

em que o traço do tensor da tensão extra no ponto P é calculado por $\text{tr}(\boldsymbol{\tau}_P) = \sum_{k=1}^3 \tau_{kk,P}$.

(ii) Termo inercial

A integração do termo inercial é semelhante ao descrito para a equação de conservação da quantidade de movimento, obtendo-se

$$\int_{V_P} \lambda \frac{\partial}{\partial t} (J \tau_{ij}) dV = \frac{\lambda_P V_P}{\Delta t} (\tau_{ij,P} - \tau_{ij,P}^{(n)}) \quad (4.38)$$

(iii) Termo convectivo

A integração e respectiva discretização do termo inercial é também semelhante ao descrito para a equação de conservação da quantidade de movimento,

$$\int_{V_P} \lambda \frac{\partial}{\partial \zeta_l} (\beta_{ik} u_k \tau_{ij}) dV = \frac{\lambda_P}{\rho} \sum_{f=1}^6 F_f \hat{\tau}_{ij,f} \quad (4.39)$$

A tensão convectiva na face f , $\hat{\tau}_{ij,f}$, deverá ser estimada com um método de discretização de ordem elevada para garantir boa precisão. Contudo, tal como para a velocidade, será implementado o esquema UDS de forma implícita, e os termos adicionais para garantir precisão de ordem elevada serão implementados explicitamente e adicionados ao termo fonte. Este assunto será discutido em detalhe nas Secções 4.5 e 4.6.

(iv) Termo não linear na tensão extra

O primeiro termo do membro direito da Eq. (4.13) é exclusivo do modelo de Giesekus (e da sua variante modelo de Giesekus-Leonov). A integração desse termo sobre um volume de controlo genérico resulta em

$$-\int_{V_P} J \frac{\alpha \lambda}{\eta_p} \tau_{ik} \tau_{kj} dV = -\frac{\alpha \lambda_P V_P}{\eta_{p,P}} \sum_{k=1}^3 \tau_{ik,P} \tau_{kj,P} \quad (4.40)$$

Os termos fonte adicionais são,

$$\begin{aligned} S'_{\tau_{xx}} &= -V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} (\tau_{xx}^2 + \tau_{xy}^2 + \tau_{xz}^2)_P \\ S'_{\tau_{yy}} &= -V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} (\tau_{xy}^2 + \tau_{yy}^2 + \tau_{yz}^2)_P \\ S'_{\tau_{zz}} &= -V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} (\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{zz}^2)_P \\ S'_{\tau_{xy}} &= -V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} (\tau_{xx} \tau_{xy} + \tau_{xy} \tau_{yy} + \tau_{xz} \tau_{yz})_P \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned}
 S'_{\tau_{xx}} &= -V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} \left(\tau_{xx} \tau_{xx} + \tau_{xy} \tau_{yz} + \tau_{xz} \tau_{zz} \right)_P \\
 S'_{\tau_{yz}} &= -V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} \left(\tau_{xy} \tau_{xx} + \tau_{yy} \tau_{yz} + \tau_{yz} \tau_{zz} \right)_P
 \end{aligned}
 \tag{cont.}$$

onde todas as componentes da tensão são calculadas com valores existentes no centro dos volumes de controlo P.

Observando as diversas parcelas da Eq. (4.41) verifica-se que cada componente do termo fonte é proporcional à respectiva componente da tensão extra. Assim, de acordo com Oliveira (2001) a formulação mais estável consistirá em adicionar um termo proporcional ao traço da tensão extra ($\tau_{kk} \equiv \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz}$) a cada um dos termos da equação anterior, e adicionar esse mesmo termo ao membro esquerdo da equação constitutiva e discretizá-lo de forma implícita, i.e.,

$$S_{\tau_{ij}}^{\text{Giesekus}} = S'_{\tau_{ij}} + V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} \tau_{ij,P} \sum_{k=1}^3 \tau_{kk,P} \tag{4.42}$$

$$a_P^\tau \rightarrow a_P^\tau + V_P \frac{\alpha \lambda_P}{\eta_{p,P}} \sum_{k=1}^3 \tau_{kk,P} \tag{4.43}$$

Uma vez que o traço da tensão extra é sempre positivo, e toma valores elevados junto a pontos *problemáticos* do domínio de cálculo (e.g., ponto singular no canto reentrante para o escoamento numa contracção-Oliveira, 2000), esta formulação conduz a um coeficiente central a_P^τ ainda *mais positivo*, aumentando a estabilidade do algoritmo de cálculo (Patankar, 1980; Oliveira, 2001).

(v) Restantes termos fonte

Os termos que figuram no membro direito da Eq. (4.13) são integrados sobre um volume de controlo genérico P, e discretizados de forma explícita. As diversas contribuições serão incluídas no termo fonte, que é expresso por

$$\begin{aligned}
 S_{\tau_{ij}} &= \eta_{p,P} \sum_{l=1}^3 \left(B_{ij}^P [\Delta u_i]_l^P + B_{li}^P [\Delta u_j]_l^P \right) + \lambda_P \sum_{l=1}^3 \left\{ \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^P \tau_{kj,P} \right) [\Delta u_i]_l^P + \right. \\
 &\quad \left. \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^P \tau_{ki,P} \right) [\Delta u_j]_l^P \right\} - V_P \frac{\xi \lambda_P}{2} [\tau_{jk} \gamma_{ik} + \tau_{ik} \gamma_{jk}]_P - \\
 &\quad \frac{2}{3} \eta_{p,P} \left(\sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 B_{lk}^P [\Delta u_k]_l^P \right) \delta_{ij} + S_{\tau_{ij}}^{\text{Giesekus}} + S_{\tau_{ij}-\text{HRS}}
 \end{aligned}
 \tag{4.44}$$

em que a origem do termo fonte adicional, $S_{\tau_{ij}-\text{HRS}}$, deve-se à utilização de esquemas de discretização de ordem elevada para o termo convectivo. Este assunto será discutido em detalhe nas Secções 4.5 e 4.6. O termo fonte $S_{\tau_{ij}}^{\text{Giesekus}}$ é calculado pela Eq. (4.42).

Agrupando os diversos termos que figuram na equação constitutiva, obtém-se

$$a_{\text{P}}^{\tau} \tau_{ij,\text{P}} - \sum_{\text{F}=1}^6 a_{\text{F}}^{\tau} \tau_{ij,\text{F}} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_{\text{P}} V_{\text{P}}}{\delta t} \tau_{ij,\text{P}}^{(n)} \quad (4.45)$$

sendo os coeficientes a_{F}^{τ} constituídos apenas por uma componente convectiva, devido à inexistência de um termo difusivo na equação constitutiva, o coeficiente central é obtido por

$$a_{\text{P}}^{\tau} = V_{\text{P}} \left(1 + \frac{\lambda_{\text{P}}}{\delta t} + \frac{\alpha \lambda_{\text{P}}}{\eta_{\text{p,P}}} \sum_{k=1}^3 \tau_{kk,\text{P}} \right) + \sum_{\text{F}=1}^6 a_{\text{F}}^{\tau} \quad (4.46)$$

e o termo fonte, $S_{\tau_{ij}}$, é calculado pela Eq. (4.44).

4.3 Formulação para o cálculo dos caudais mássicos

Como se referiu na Secção 4.2.1, o cálculo dos caudais mássicos que atravessam as faces dos volumes de controlo, Eq. (4.18), envolve interpolações adequadas para se estimar $\tilde{u}_{j,f}$ quando se utilizam malhas colocadas. Para malhas desfasadas os valores de $u_{j,f}$ são conhecidos (vide Figura 4.3), existindo assim um forte acoplamento entre os campos de velocidade e de pressão. Esta é talvez a principal vantagem das malhas desfasadas, e que justificou a sua predominância até meados da década de 1980 (Ferziger e Peric, 1996). Contudo, a sua principal desvantagem reside na dificuldade do tratamento de malhas não ortogonais para cálculo em geometrias complexas.

Rhie e Chow (1983) propuseram um método de interpolação adequado, capaz de evitar o desacoplamento entre os campos das velocidades e da pressão, tendo suscitado um maior interesse na utilização de malhas colocadas. Além da facilidade do tratamento de geometrias complexas, as malhas colocadas possuem outras vantagens, tais como uma simplificação em termos geométricos, com uma inerente economia de recursos de memória e uma simplificação do algoritmo de cálculo.

Para ilustrar a origem do possível desacoplamento entre os campos de velocidade e de pressão, considere-se o balanço de massa numa célula genérica de

uma malha colocada, como ilustrado na Figura 4.3 (a). Para simplificar a análise, considere-se que a malha é uniforme e ortogonal no sistema de eixos cartesiano. Neste caso, a equação da continuidade é expressa por

$$\rho(B_e \tilde{u}_{1,e} - B_w \tilde{u}_{1,w} + B_n \tilde{u}_{1,n} - B_s \tilde{u}_{1,s} + B_t \tilde{u}_{1,t} - B_b \tilde{u}_{1,b}) = 0 \quad (4.47)$$

em que B_f representa a área da face f . Usando interpolação linear para estimar as componentes da velocidade nas faces, o balanço de massa na célula P resulta em

$$B_e \frac{u_{1,E} - u_{1,W}}{2} + B_n \frac{u_{1,N} - u_{1,S}}{2} + B_t \frac{u_{1,T} - u_{1,B}}{2} = 0 \quad (4.48)$$

Verifica-se assim que a equação da continuidade na forma discreta é representada por um somatório de diferenças de velocidades entre células não adjacentes, o que poderá conduzir a instabilidades do algoritmo de cálculo (Patankar, 1980).

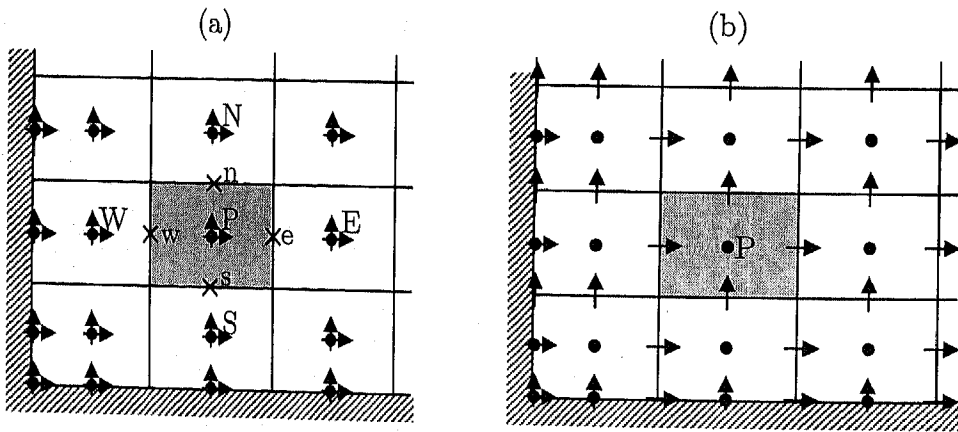


Figura 4.3: Localização dos nós onde são calculadas as componentes da velocidade (\rightarrow) e a pressão (\bullet): (a) Malha colocada (*collocated mesh*); (b) malha deslocada (ou desfasada; *staggered mesh*).

No esquema de interpolação inicialmente proposto por Rhie e Chow (1983), mais tarde sujeito a diversas reformulações entre as quais a de Issa e Oliveira (1994) que vai ser aqui seguida, começa-se por separar o termo do gradiente de pressão dos restantes termos fontes,

$$S_{u_i} = -\sum_{l=1}^3 B_{li}^P [\Delta p]_l^P + S'_{u_i} \quad (4.49)$$

Considere-se ainda, por uma questão de simplicidade, a seguinte definição

$$H(u_i) \equiv \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F} \quad (4.50)$$

A equação de conservação da quantidade de movimento, na sua forma discreta, pode ser reescrita na forma

$$(a_P)_P u_{i,P} = H_P(u_{i,P}) - \sum_{l=1}^3 B_{li}^P [\Delta p]_l^P + S'_{u_{i,P}} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^{(n)} \quad (4.51)$$

$$(a_P)_F u_{i,F} = H_F(u_{i,F}) - \sum_{l=1}^3 B_{li}^F [\Delta p]_l^F + S'_{u_{i,F}} + \frac{\rho V_F}{\delta t} u_{i,F}^{(n)} \quad (4.52)$$

para as células P e F, respectivamente. Os gradientes de pressão que figuram nas Eqs. (4.51) e (4.52) são avaliados nos centros das células, pelo que se torna necessário estimar os valores da pressão nas respectivas faces. No método de interpolação desenvolvido por Rhie e Chow (1983), o cálculo das componentes da velocidade nas faces, $\tilde{u}_{i,f}$, é feito por interpolação linear das equações da quantidade de movimento, com excepção do termo do gradiente de pressão segundo a direcção f, o qual é avaliado como se fosse usada uma malha deslocada. Issa e Oliveira (1994) implementaram essa ideia da seguinte forma, partindo das Eqs. (4.51) e (4.52):

$$\overline{a_P} \tilde{u}_{i,f} = \overline{H(u_i)} - B_{fi}^f [\Delta p]_f^f - \sum_{l \neq f} \overline{B_{li}^P} [\Delta p]_l^P + \overline{S'_{u_{i,P}}} + \left(\frac{\rho V}{\delta t} \right)_P \tilde{u}_{i,f}^{(n)} \quad (4.53)$$

onde todas as variáveis que apresentam uma barra superior são avaliadas na face f entre os volumes de controlo P e F por média aritmética (e.g., $\overline{a_P} = 0.5[(a_P)_P + (a_P)_F]$). É importante notar que se deve usar média aritmética, e não interpolação linear, uma vez que esta introduziria uma inconsistência quando a malha não é uniforme. A razão prende-se com o facto de se estarem a interpolar quantidades extensivas e não intensivas.

Calculando $\overline{a_P u_{i,P}}$, por média aritmética das Eqs. (4.51) e (4.52),

$$\overline{a_P u_{i,P}} = \overline{H(u_i)} - \sum_{l=1}^3 \overline{B_{li}^P} [\Delta p]_l^P + \overline{S'_{u_{i,P}}} + \left(\frac{\rho V}{\delta t} u_i^{(n)} \right)_P \quad (4.54)$$

e subtraindo esta expressão à Eq. (4.53) obtém-se o valor pretendido para $\tilde{u}_{i,f}$,

$$\tilde{u}_{i,f} = \frac{\overline{a_P u_{i,P}} + \overline{B_{fi}^P} [\Delta p]_f^P - B_{fi}^f [\Delta p]_f^f + \left(\frac{\rho V}{\delta t} \right)_P \tilde{u}_{i,f}^{(n)} - \left(\frac{\rho V}{\delta t} u_i^{(n)} \right)_P}{\overline{a_P}} \quad (4.55)$$

Como os valores de $\tilde{u}_{i,f}$ são apenas necessários no cálculo dos caudais mássicos que atravessam as faces dos volumes de controlo, Eq. (4.18), é conveniente trabalhar directamente com os caudais mássicos,

$$F_f = \frac{1}{a_P} \left\{ \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f \overline{a_P u_{i,P}} + \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f \overline{B_{fi}^P [\Delta p]_f^P} - \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f B_{fi}^f [\Delta p]_f^f + \left(\frac{\rho V}{\delta t} \right)_P F_f^{(n)} - \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f \left(\frac{\rho V}{\delta t} u_i^{(n)} \right)_P \right\} \quad (4.56)$$

evitando-se assim o armazenamento dos valores de $\tilde{u}_{i,f}^{(n)}$.

4.4 Formulação para interpolação da tensão extra nas faces

Como se referiu na Secção 4.2.2, o termo fonte descrito pela Eq. (4.29) necessita dos valores das componentes do tensor das tensões nas faces dos volumes de controlo. Como para a velocidade, a utilização de interpolação linear é desaconselhada, já que pode conduzir a um desacoplamento entre os campos de velocidade e tensão, como se demonstra em Oliveira *et al.* (1998), com um exemplo simples.

Uma solução possível para este problema, que surge novamente devido à utilização de uma malha colocada, passa pela utilização de um esquema de interpolação semelhante ao descrito na secção anterior. Em Oliveira *et al.* (1998) é proposta uma formulação, posteriormente modificada pelos mesmos autores para melhorar o seu desempenho em malhas não uniformes (Oliveira e Pinho, 1999c). Inspirados na formulação proposta por Rhie e Chow (1983) para evitar o desacoplamento pressão-velocidade, Oliveira e Pinho (1999c) sugerem a seguinte expressão

$$\tilde{\tau}_{ij,f} = \overline{\tau}_{ij,f} - \left(b'_{fi} [\Delta u_i]_f + b'_{fi} [\Delta u_j]_f - \frac{2}{3} \eta_p \sum_{k=1}^3 B'_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) + \left(\tilde{b}'_{fi} [\Delta u_i]_f + \tilde{b}'_{fi} [\Delta u_j]_f - \frac{2}{3} \eta_p \sum_{k=1}^3 \tilde{B}'_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) \quad (4.57)$$

com

$$b'_{fi} \equiv \frac{\eta_p B_{fi} + \lambda \sum_{k=1}^3 B_{fk} \tau_{ki}}{a_P^\tau} ; \quad B'_{fi} \equiv \frac{B_{fi}}{a_P^\tau} \quad (4.58)$$

e

$$\tilde{b}'_{fi} \equiv \frac{\left(\eta_p B_{fi} + \lambda \sum_{k=1}^3 B_{fk} \overline{\tau_{ki}} \right)_f}{V_f (a_P^\tau / V_P)} ; \quad \tilde{B}'_{fi} \equiv \frac{B_{fi}^f}{V_f (a_P^\tau / V_P)} \quad (4.59)$$

Neste caso a interpolação faz-se sobre quantidades intensivas (as tensões, por exemplo) pelo que a barra superior nas Eqs. (4.57) a (4.59) indica interpolação linear.

4.5 Esquemas de ordem elevada para a discretização dos termos convectivos

Como foi referido nas Secções 4.2.2 e 4.2.3, a utilização do esquema UDS na discretização dos termos convectivos conduz a erros grosseiros da solução numérica, a menos que sejam usadas malhas computacionais muito refinadas. Apesar deste esquema de discretização ser o mais estável (Patankar, 1980), a sua utilização é fortemente desaconselhada devido à sua baixa precisão e inerente introdução de difusão numérica (Freitas, 1993; Leonard, 1996).

Considere-se a equação de transporte para uma variável genérica ϕ (Patankar, 1980),

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{Termo transiente}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\phi)}_{\text{Termo convectivo}} - \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi)}_{\text{Termo difusivo}} = \underbrace{S_\phi(\phi)}_{\text{Termo fonte}} \quad (4.60)$$

em que Γ_ϕ representa um coeficiente de difusão. Nesta secção irá analisar-se o termo convectivo da Eq. (4.60), por forma a serem obtidos esquemas de discretização precisos, sem se comprometer a estabilidade do método numérico.

A utilização da equação de transporte genérica (4.60) deve-se às equações de balanço de massa (Eq. (3.1)), de conservação da quantidade de movimento (Eq. (3.2)) e constitutivas (e.g., Eq. (3.41)) serem casos particulares da Eq. (4.60), para $\phi = 1$, u_i e $(\lambda/\rho)\tau_{ij}$, respectivamente.

O termo convectivo da Eq. (4.60), escrito em coordenadas generalizadas, resulta em

$$\frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} \rightarrow \frac{1}{J} \frac{\partial(\rho \beta_{ij} u_j \phi)}{\partial \zeta_i} \quad (4.61)$$

Integrando o termo convectivo num volume de controlo genérico, de forma semelhante ao descrito para a Eq. (4.21), obtém-se

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial \zeta_i} (\rho \beta_{ij} u_j \phi) dV = \sum_{f=1}^6 F_f \phi_f \quad (4.62)$$

O método de cálculo do caudal mássico, F_f , foi descrito na Secção 4.3. Nesta secção irão descrever-se alguns dos esquemas de interpolação usados no cálculo de

ϕ_f . Por uma questão de simplicidade, na Eq. (4.62) e no remanescente desta secção em vez de se usar a variável $\hat{\phi}_f$, tal como nas Eqs. (4.21) e (4.39), usa-se simplesmente ϕ_f .

Considere-se um sistema de coordenadas locais, como o que se ilustra na Figura 4.4. As células D e U representam, respectivamente, os volumes de controlo a jusante e a montante da célula C, a qual se encontra a montante da face f. Note-se que a identificação das células depende do sentido da velocidade na face f, como se ilustra na Figura 4.4.

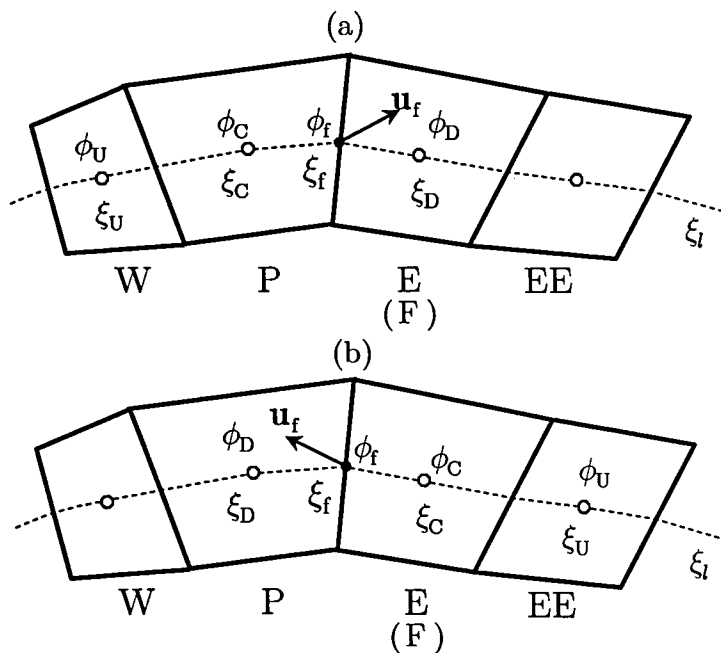


Figura 4.4: Definição das variáveis e do sistema de coordenadas locais na vizinhança da face f: (a) Velocidade positiva segundo a direcção ξ_i ; (b) velocidade negativa segundo ξ_i .

O valor da variável na face f, ϕ_f , depende dos valores das células vizinhas e do esquema de interpolação usado. Seguidamente apresenta-se uma descrição sucinta de alguns dos esquemas de discretização usados para estimar ϕ_f .

(i) O esquema de diferenças centradas (CDS)

Para o esquema de diferenças centradas (*Central Differencing Scheme*, CDS) o valor de ϕ_f é calculado por interpolação linear dos valores imediatamente a montante e a jusante da face f (vide Figura 4.4),

$$\begin{aligned} \phi_f(\text{CDS}) &= \phi_C + \frac{\overline{Cf}}{\overline{Cf} + \overline{fD}} (\phi_D - \phi_C) = \phi_C + \frac{\xi_f - \xi_C}{\xi_D - \xi_C} (\phi_D - \phi_C) = \\ &= \phi_P + \frac{\xi_f - \xi_P}{\xi_F - \xi_P} (\phi_F - \phi_P) \end{aligned} \quad (4.63)$$

em que \overline{Cf} representa a distância entre os pontos C e f, e \overline{fD} a distância entre os pontos f e D. O sistema de coordenadas locais ξ depende do sentido da velocidade na face f, como se ilustra na Figura 4.4. Para uma malha uniforme, o esquema CDS simplifica-se em $\phi_f = (\phi_C + \phi_D)/2 = (\phi_P + \phi_F)/2$.

O esquema CDS possui precisão de 2ª ordem, mas revela-se particularmente problemático em escoamentos fortemente convectivos (Patankar, 1980). A instabilidade *natural* do esquema CDS pode ser facilmente ilustrada para um escoamento unidimensional numa malha uniforme, como se ilustra na Figura 4.5.

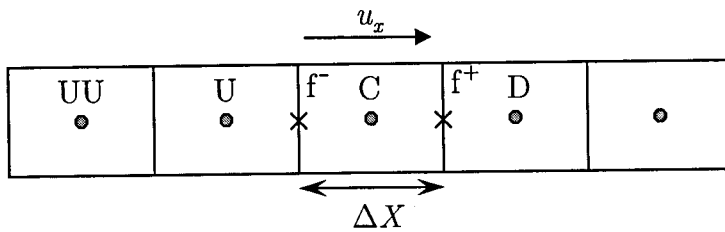


Figura 4.5: Malha uniforme unidimensional.

Assumindo um campo de velocidade constante, com caudal mássico F_f , o termo convectivo será expresso por

$$F_{f^+}\phi_{f^+} - F_{f^-}\phi_{f^-} = F(\phi_{f^+} - \phi_{f^-}) = F \frac{\phi_D - \phi_U}{2} \quad (4.64)$$

Esta equação mostra que o termo convectivo é independente do valor de ϕ na célula C, sendo calculado pela diferença da variável ϕ em nós alternados, o que poderá originar instabilidades numéricas (o famoso desacoplamento em tabuleiro de xadrez). Outra deficiência do esquema CDS, que o torna inadequado à discretização do termo convectivo das equações de transporte, resulta deste esquema ser insensível ao sentido do escoamento, o que é particularmente inadequado em escoamentos fortemente convectivos.

(ii) O esquema de diferenças de montante de 1ª-ordem (UDS)

O esquema de diferenças de montante de 1ª ordem, vulgarmente designado por UDS (*Upwind Differencing Scheme*), foi proposto por Courant *et al.* (1952). Estes autores perceberam a deficiência do esquema CDS no tratamento do termo convectivo, e propuseram que o valor da variável ϕ na face f seja igual ao valor do centro da célula imediatamente a montante (vide Figura 4.4),

$$\phi_f(\text{UDS}) = \phi_C \quad (4.65)$$

Num caso geral, a expressão para o fluxo convectivo de ϕ na face f será

$$F_f \phi_f = F_f \phi_C = F_f^+ \phi_P + F_f^- \phi_F \quad (4.66)$$

com $F_f^+ \equiv \max(F_f, 0)$ e $F_f^- \equiv \min(F_f, 0)$.

A Eq. (4.65) deverá ser usada apenas para o cálculo dos termos convectivos das equações de transporte, mantendo-se a discretização do termo difusivo com diferenças centradas de 2ª ordem (ou outro esquema de diferenças centradas de ordem elevada, como por exemplo diferenças centradas de 4ª ordem).

A principal vantagem do esquema UDS reside no facto de originar incondicionalmente valores positivos do coeficiente a_F das equações na forma discreta (vide Eqs. (4.31) a (4.35) e Eqs. (4.45) a (4.46)), o que *per se* é uma condição suficiente para se obter uma solução numérica fisicamente realista (Patankar, 1980). Tal como já foi referido, a grande desvantagem deste esquema de discretização reside na sua baixa precisão (1ª ordem), como se demonstrará na Secção 4.5.1 com um exemplo simples.

(iii) O esquema de diferenças de montante de 2ª ordem

Para escoamentos fortemente convectivos é previsível que o valor de ϕ_f dependa fortemente dos valores de ϕ nas células a montante, e dependa pouco de ϕ_D . Partindo desta ideia, Warming e Beam (1976) propuseram o esquema de diferenças de montante de 2ª ordem, LUDS (*Linear Upwind Differencing Scheme*), segundo o qual o valor de ϕ_f é calculado por extrapolação linear dos valores das duas células a montante da face f ,

$$\phi_f(\text{LUDS}) = \phi_C + \frac{\xi_f - \xi_C}{\xi_C - \xi_U} (\phi_C - \phi_U) \quad (4.67)$$

O fluxo convectivo na face 'e' será expresso por (vide Figura 4.4)

$$F_e \phi_e = F_e^+ \left[\phi_P + \frac{\xi_e - \xi_P}{\xi_P - \xi_W} (\phi_P - \phi_W) \right] + F_e^- \left[\phi_E + \frac{\xi_e - \xi_E}{\xi_E - \xi_{EE}} (\phi_E - \phi_{EE}) \right] \quad (4.68)$$

sendo possível obter expressões análogas para as restantes faces que delimitam o volume de controlo P.

Este esquema é significativamente mais estável que o esquema CDS, mas também apresenta alguns problemas de estabilidade em escoamentos fortemente convectivos. Numa malha uniforme a Eq. (4.67) simplifica-se em $\phi_f = (3\phi_C - \phi_U)/2$.

(iv) O esquema QUICK

Leonard (1979) propôs um esquema de interpolação de 3ª ordem denominado QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*), passando uma parábola pelos pontos (ξ_U, ϕ_U) , (ξ_C, ϕ_C) e (ξ_D, ϕ_D) . Este esquema foi proposto inicialmente para malhas uniformes, podendo facilmente ser generalizado para malhas não uniformes. A variação de ϕ no intervalo $[\xi_U, \xi_D]$ é do tipo

$$\phi = a\xi^2 + b\xi + c \quad (4.69)$$

As condições

$$\begin{aligned} \xi = \xi_U &\rightarrow \phi = \phi_U \\ \xi = \xi_C &\rightarrow \phi = \phi_C \\ \xi = \xi_D &\rightarrow \phi = \phi_D \end{aligned} \quad (4.70)$$

permitem calcular as constantes a , b e c , obtendo-se

$$\phi = \phi_U + \frac{(\xi - \xi_U)(\xi - \xi_C)}{(\xi_D - \xi_U)(\xi_D - \xi_C)}(\phi_D - \phi_U) + \frac{(\xi - \xi_U)(\xi_D - \xi)}{(\xi_C - \xi_U)(\xi_D - \xi_C)}(\phi_C - \phi_U) \quad (4.71)$$

O valor pretendido para ϕ_f será então

$$\phi_f(\text{QUICK}) = \phi_U + \frac{(\xi_f - \xi_U)(\xi_f - \xi_C)}{(\xi_D - \xi_U)(\xi_D - \xi_C)}(\phi_D - \phi_U) + \frac{(\xi_f - \xi_U)(\xi_D - \xi_f)}{(\xi_C - \xi_U)(\xi_D - \xi_C)}(\phi_C - \phi_U) \quad (4.72)$$

Numa malha uniforme a equação anterior simplifica-se em

$$\phi_f(\text{QUICK}) = \frac{\phi_C + \phi_D}{2} - \frac{1}{8}(\phi_D - 2\phi_C + \phi_U) \quad (4.73)$$

O fluxo convectivo na face 'e' é calculado por (vide Figura 4.4),

$$\begin{aligned} F_e \phi_e = F_e^+ &\left[\phi_W + \frac{(\xi_e - \xi_W)(\xi_e - \xi_P)}{(\xi_E - \xi_W)(\xi_E - \xi_P)}(\phi_E - \phi_W) + \frac{(\xi_e - \xi_W)(\xi_E - \xi_e)}{(\xi_P - \xi_W)(\xi_E - \xi_P)}(\phi_P - \phi_W) \right] + \\ &F_e^- \left[\phi_{EE} + \frac{(\xi_e - \xi_{EE})(\xi_e - \xi_E)}{(\xi_P - \xi_{EE})(\xi_P - \xi_E)}(\phi_P - \phi_{EE}) + \frac{(\xi_e - \xi_{EE})(\xi_P - \xi_e)}{(\xi_E - \xi_{EE})(\xi_P - \xi_E)}(\phi_E - \phi_{EE}) \right] \end{aligned} \quad (4.74)$$

obtendo-se facilmente expressões semelhantes para as restantes faces que delimitam o volume de controlo P.

4.5.1 Comparação entre esquemas de interpolação

Considere-se a seguinte equação de convecção/difusão em estado estacionário, num sistema de coordenadas unidimensional,

$$\frac{d(\rho u_x \phi)}{dx} = \Gamma \frac{d^2 \phi}{dx^2} \quad (4.75)$$

Esta equação corresponde a um caso particular da Eq. (4.60), em que os termos fonte e transiente são nulos.

Considerando que a massa volúmica e a velocidade são constantes, a Eq. (4.75) pode ser escrita na forma adimensional,

$$Pe \frac{d\phi}{dX} = \frac{d^2 \phi}{dX^2} \quad (4.76)$$

em que $Pe \equiv \rho u_x L / \Gamma$ representa o número de Péclet (global), e $X = x / L$ uma distância normalizada. A Eq. (4.76) sujeita às condições fronteira $\phi = 0$ em $X = 0$ e $\phi = 1$ em $X = 1$ possui a solução exacta,

$$\phi = \frac{e^{Pe X} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (4.77)$$

que poderá ser comparada com a solução numérica para avaliar a precisão e a monotonicidade do esquema de discretização usado no tratamento do termo convectivo.

A discretização da Eq. (4.76) toma a forma geral (vide Figura 4.5)

$$Pe \frac{\phi_{f^+} - \phi_{f^-}}{\Delta X} = \frac{d\phi}{dX} \Big|_{f^+} - \frac{d\phi}{dX} \Big|_{f^-} \quad (4.78)$$

Considerando uma expressão genérica para o esquema de interpolação usado na discretização do termo convectivo,

$$\phi_f = A\phi_U + B\phi_C + C\phi_D \quad (4.79)$$

os valores de ϕ nas faces 'e' e 'w' da célula P serão

$$\phi_e = \phi_{f^+} = \frac{Pe^+}{Pe} \left[\phi_P + \underline{A\phi_W + (B-1)\phi_P + C\phi_E} \right] + \frac{Pe^-}{Pe} \left[\phi_E + \underline{A\phi_{EE} + (B-1)\phi_E + C\phi_P} \right] \quad (4.80)$$

$$\phi_w = \phi_{f^-} = \frac{Pe^+}{Pe} \left[\phi_W + \underline{A\phi_{WW} + (B-1)\phi_W + C\phi_P} \right] + \frac{Pe^-}{Pe} \left[\phi_P + \underline{A\phi_E + (B-1)\phi_P + C\phi_W} \right] \quad (4.81)$$

com $Pe^+ \equiv \max(Pe, 0)$ e $Pe^- \equiv \min(Pe, 0)$. Nas Eqs. (4.80) e (4.81) optou-se por escrever os valores de ϕ nas faces na forma

$$\phi_f = \phi_{f,UDS} + \underline{\phi_f - \phi_{f,UDS}} = \phi_C + \underline{\phi_f - \phi_C} \quad (4.82)$$

sendo $\phi_{f,UDS}$ o valor de ϕ_f previsto pelo esquema UDS. Os termos sublinhados são avaliados explicitamente, com base nos valores conhecidos da iteração anterior,

enquanto que $\phi_{f,UDS}$ é avaliado implicitamente. Esta técnica, proposta por Khosla e Rubin (1974), é conhecida por correcção diferida (*Deferred Correction*, DC) e vai ser utilizada neste trabalho para implementar qualquer esquema de diferenças de ordem superior à unidade. À medida que o método iterativo vai convergindo para a solução, a diferença entre $\phi_{f,UDS}$ e $\underline{\phi_{f,UDS}}$ vai diminuindo. No limite, quando a solução final é obtida, a Eq. (4.82) é exacta, já que a diferença entre $\underline{\phi}$ e ϕ se anula (ou, mais correctamente, é da ordem de grandeza do erro estipulado para garantir a convergência do método numérico). A vantagem da técnica da correcção diferida reside no facto de se promover a estabilidade do algoritmo, uma vez que é garantida a positividade dos coeficientes a_F (como se demonstrará na Eq. (4.84)). Hayase *et al.* (1992) demonstraram que a utilização da correcção diferida corresponde à formulação *ótima*, em termos de estabilidade, para os esquemas de interpolação QUICK e CDS. Para o esquema LUDS é também possível efectuar uma análise semelhante à descrita em Hayase *et al.* (1992), e demonstrar que a formulação (4.82) é a mais aconselhada em termos de estabilidade numérica.

Substituindo as Eqs. (4.80) e (4.81) na Eq. (4.78), obtém-se a expressão

$$\begin{aligned} & \frac{Pe^+}{\Delta X} \left\{ \left[\phi_P + \underline{A\phi_W + (B-1)\phi_P + C\phi_E} \right] - \left[\phi_W + \underline{A\phi_{WW} + (B-1)\phi_W + C\phi_P} \right] \right\} + \\ & \frac{Pe^-}{\Delta X} \left\{ \left[\phi_E + \underline{A\phi_{EE} + (B-1)\phi_E + C\phi_P} \right] - \left[\phi_P + \underline{A\phi_E + (B-1)\phi_P + C\phi_W} \right] \right\} = \frac{\phi_E - 2\phi_P + \phi_W}{\Delta X^2} \end{aligned} \quad (4.83)$$

que, após alguma manipulação algébrica, pode ser expressa na forma compacta

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_\phi \quad (4.84)$$

com

$$\begin{cases} a_W = 1 + Pe_{\Delta x}^+ \\ a_E = 1 - Pe_{\Delta x}^- \\ a_P \equiv a_W + a_E = 2 + Pe_{\Delta x}^+ - Pe_{\Delta x}^- \\ S_\phi = Pe_{\Delta x}^+ \left[A\phi_{WW} + (B-A-1)\phi_W + (1+C-B)\phi_P - C\phi_E \right] + \\ \quad Pe_{\Delta x}^- \left[C\phi_W + (B-C-1)\phi_P + (1+A-B)\phi_E - A\phi_{EE} \right] \end{cases}$$

sendo $Pe_{\Delta x} = Pe \Delta X = \rho u_x \Delta x / \Gamma$ o número de Péclet local, baseado no espaçamento da malha, Δx . O termo fonte, S_ϕ , resulta somente da implementação da correcção diferida dos esquemas convectivos de ordem superior e é avaliado explicitamente. As constantes A , B e C são apresentadas na Tabela 4.2 para os esquemas de interpolação descritos anteriormente.

Tabela 4.2- Valores dos coeficientes A , B e C a serem usados na Eq. (4.79), para os esquemas usados na discretização do termo convectivo.

	A	B	$C (\equiv 1 - A - B)$
UDS	0	1	0
CDS	0	1/2	1/2
LUDS	-1/2	3/2	0
QUICK	-1/8	3/4	3/8

A equação de convecção/difusão (4.76) pode ser usada para comparar o desempenho dos diversos esquemas usados na discretização do termo convectivo.

Tomando como exemplo $Pe = 20$, efectuou-se a simulação numérica numa malha uniforme com 16 células, à qual corresponde o valor $Pe_{\Delta x} = Pe \Delta X = 20/16 = 1.25$. Os resultados obtidos com os diversos esquemas de discretização são apresentados na Figura 4.6, confirmando-se a baixa precisão do esquema UDS e a elevada precisão do método QUICK. Os esquemas CDS e LUDS possuem uma precisão intermédia, mas significativamente inferior à do esquema QUICK.

Estes resultados permitem demonstrar a superioridade, em termos de precisão, do esquema QUICK face aos restantes métodos de discretização. No entanto, um esquema de discretização para ser eficiente deverá também possuir a propriedade de monotonicidade, no sentido de evitar o aparecimento artificial de máximos ou mínimos locais, sem significado físico (i.e., a solução exacta das equações diferenciais não apresenta esses extremos locais). Lembra-se que, tanto neste problema simples, como nos problemas mais complexos envolvendo fluidos viscoelásticos, as equações de governo são resolvidas sequencialmente por um processo iterativo, de modo que o aparecimento de oscilações artificiais nos campos iterativos intermédios pode conduzir a instabilidades numéricas, com possibilidade de divergência do processo iterativo. Por exemplo, para o esquema CDS é possível demonstrar que a solução numérica da Eq. (4.76) só é monótona para valores de $Pe_{\Delta x} \leq 2$ (Patankar, 1980). Para valores de $Pe_{\Delta x} > 2$ a solução numérica poderá apresentar oscilações, como se ilustra na Figura 4.7 para $Pe_{\Delta x} = 4$. O esquema QUICK também pode tornar-se instável em condições fortemente convectivas, verificando-se para este exemplo um valor crítico de $Pe_{\Delta x} = 8/3$. Curiosamente, para este problema em particular, verifica-se que o esquema LUDS não induz o aparecimento de oscilações na solução, para qualquer valor de Pe . Contudo, trata-

se de uma coincidência uma vez que é sabido que este esquema de interpolação não é incondicionalmente estável. Deve ainda salientar-se que para valores de Pe elevados o esquema LUDS possui baixa precisão, sendo apenas ligeiramente mais preciso que o esquema UDS, como se ilustra na Figura 4.7.

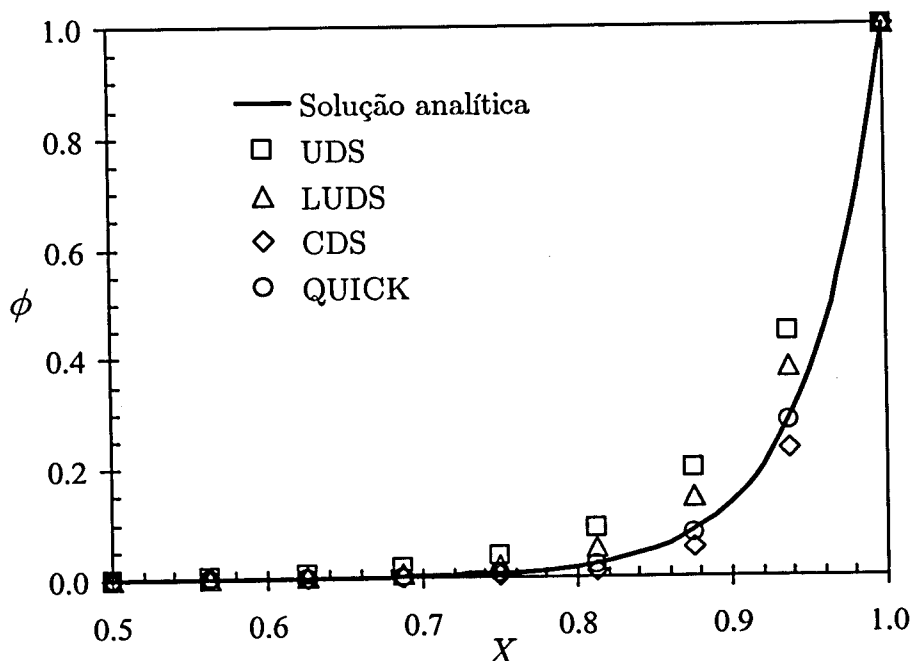


Figura 4.6: Solução numérica do problema da convecção/difusão a $Pe=20$ numa malha uniforme com 16 células. Comparação entre diferentes esquemas de discretização do termo convectivo.

Godunov (1959) demonstrou que um esquema de interpolação linear ($\phi_f = A\phi_U + B\phi_C + C\phi_D + \dots$), para possuir a propriedade de não gerar novos extremos (Critério da Preservação da Monotonicidade), terá no máximo precisão de 1ª ordem. O teorema de Godunov motivou a utilização generalizada do esquema UDS devido à sua capacidade de verificar incondicionalmente o critério da preservação da monotonicidade (Patankar, 1980).

Vários esquemas não lineares foram propostos posteriormente, destacando-se os esquemas HYBRID (Spalding, 1972) e POWER-LAW (Patankar, 1980) pela grande aceitação que obtiveram. Estes esquemas de interpolação são muito estáveis, contudo actualmente são desaconselhados devido ao excesso de difusão numérica que introduzem na solução para escoamentos fortemente convectivos, como se demonstra em Leonard e Drummond (1995).



Na próxima secção apresentam-se duas metodologias simples e eficientes para o desenvolvimento de esquemas de interpolação não lineares, capazes de verificar o critério da preservação da monotonicidade ao mesmo tempo que mantém uma precisão adequada.

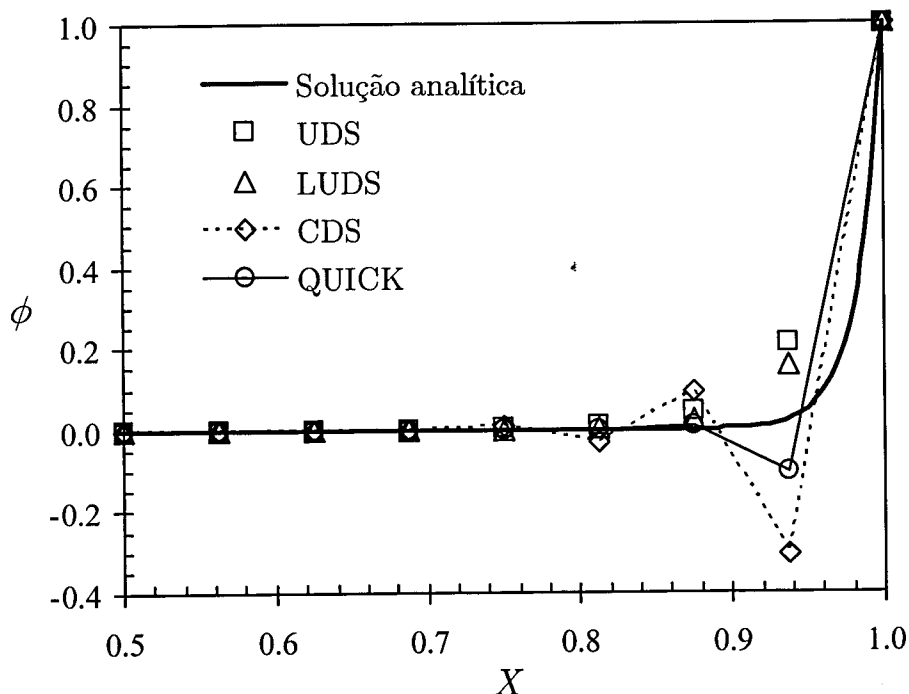


Figura 4.7: Solução numérica do problema da convecção/difusão a $Pe=60$ numa malha uniforme com 16 células. Comparação entre diferentes esquemas de discretização do termo convectivo.

4.6 Esquemas de alta resolução

Existem diversas metodologias para a criação de esquemas de discretização não lineares que verificam o critério da preservação da monotonicidade, frequentemente designados por esquemas de alta resolução (*High-Resolution Schemes*, HRS). Nesta tese são abordadas duas estratégias para a criação de esquemas de alta resolução, apresentando-se ainda a correspondência existente entre ambas as metodologias.

4.6.1 Limitadores de fluxo convectivo

O conceito de variação total decrescente da solução (*Total Variation Diminishing*, TVD), introduzido por Harten (1983), tem uma enorme relevância no desenvolvimento de esquemas de alta resolução. A variação total da solução (*Total variation*, TV) é definida por

$$TV(\phi^{n+1}) = \sum_f |\phi_P^{n+1} - \phi_F^{n+1}| \quad (4.85)$$

em que ϕ_P^{n+1} e ϕ_F^{n+1} representam os valores da variável ϕ nas células P e F localizadas em ambos os lados da face f. O índice superior $n+1$ representa o número da iteração, em problemas de estado estacionário, ou o número do passo de integração temporal em problemas transientes. Um esquema de interpolação denomina-se TVD quando verifica a relação

$$TV(\phi^{n+1}) \leq TV(\phi^n) \quad (4.86)$$

A Eq. (4.86) traduz uma condição suficiente, mas não necessária, para que um esquema de interpolação seja monótono.

Sweby (1984) considerou a equação hiperbólica

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_x \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (4.87)$$

que corresponde a um caso particular da equação de transporte (4.60), para uma situação em que os termos difusivo e fonte são nulos, e a velocidade u_x é constante. A integração da Eq. (4.87) para a célula genérica P pode ser expressa por (Sweby, 1984)

$$\phi_P^{n+1} = \phi_P^n - c(\phi_e - \phi_w) \quad (4.88)$$

em que $c = u_x \Delta t / \Delta x$ representa o número de Courant. O esquema de Lax e Wendroff (1960), com precisão de 2ª ordem, pode ser expresso por (Leonard, 1991)

$$\phi_{f,LW} = \frac{\phi_C^n + \phi_D^n}{2} - \frac{|c|}{2}(\phi_D^n - \phi_C^n) \quad (4.89)$$

ou, alternativamente,

$$\phi_{f,LW} = \phi_C^n - \frac{1-|c|}{2}(\phi_D^n - \phi_C^n) \quad (4.90)$$

O fluxo convectivo previsto pelo esquema de Lax-Wendroff (LW),

$$u_x \phi_{f,LW} = u_x \phi_C^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} c(1-|c|)(\phi_D^n - \phi_C^n) \quad (4.91)$$

traduz o fluxo convectivo do esquema UDS, corrigido por um fluxo antidifusivo. A adição do fluxo antidifusivo

$$-\frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Delta t} c(1-|c|)(\phi_D^n - \phi_C^n)$$

ao esquema UDS deve-se a este esquema ser excessivamente difusivo. Assim, ao compensar-se o excesso de difusão numérica do esquema UDS é possível obter precisão de 2ª ordem. Contudo, de acordo com o teorema de Godunov, a Eq. (4.89) não verifica o critério da preservação da monotonicidade, pelo que o esquema LW não é TVD.

Os diversos esquemas considerados por Sweby são lineares no número de Courant, na forma

$$\phi_f = (1 - |c|)\phi_f^n + |c|\phi_C^n = (1 - |c|)\phi_f^n + |c|\phi_{f,UDS}^n \quad (4.92)$$

podendo o esquema de Lax-Wendroff também ser representado nessa forma,

$$\phi_{f,LW} = (1 - |c|)\phi_{f,CDS}^n + |c|\phi_{f,UDS}^n \quad (4.93)$$

verificando-se que o esquema LW degenera em CDS para baixos valores de c .

De acordo com Sweby (1984), o valor de ϕ_f de um esquema de interpolação limitado poderá ser traduzido por

$$\phi_f = \phi_{f,UDS}^n + \varphi(\phi_{f,LW} - \phi_{f,UDS}^n) = \phi_C^n + \varphi(\phi_{f,LW} - \phi_C^n) \quad (4.94)$$

sendo φ um limitador de fluxo adequado. Substituindo as Eqs. (4.92) e (4.93) na Eq. (4.94) pode exprimir-se o limitador de fluxo numa forma alternativa,

$$\phi_f^n = \phi_C^n + \varphi(\phi_{f,CDS}^n - \phi_C^n) = \phi_C^n + \frac{\varphi}{2}(\phi_D^n - \phi_C^n) \quad (4.95)$$

Tal como van Leer (1974), Sweby assume que o limitador φ é função de gradientes consecutivos de ϕ na forma (vide Figura 4.8)

$$\varphi = \varphi(r) \quad \text{com} \quad r = \frac{\phi_C^n - \phi_U^n}{\phi_D^n - \phi_C^n} \quad (4.96)$$

Os pontos U, C e D são escolhidos em função do sentido do escoamento na face f , tal como anteriormente (vide Figura 4.4).

Sweby (1984) demonstrou que o limitador $\varphi(r)$ conduz a um esquema TVD se forem satisfeitas as seguintes condições

$$0 \leq \left(\frac{\varphi(r)}{r}, \varphi(r) \right) \leq 2 \quad (4.97)$$

as quais se reproduzem a sombreado na Figura 4.9, adequadamente designada na literatura por diagrama de Sweby.

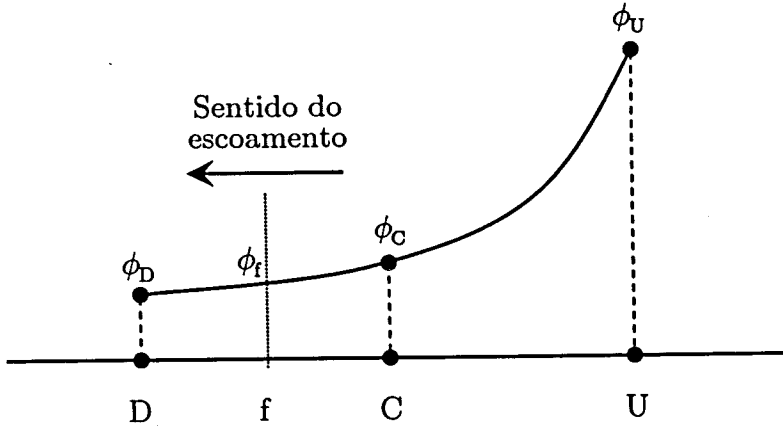


Figura 4.8: Variação local de ϕ na vizinhança da face f .

Da definição de limitador de fluxo, Eq. (4.94), conclui-se facilmente que para o esquema de Lax-Wendroff o limitador de fluxo é simplesmente,

$$\varphi_{LW} = 1 \quad (4.98)$$

Para o esquema de diferenças de montante de 2ª ordem de Warming e Beam (1976), o limitador de fluxo é dado por (Sweby, 1984)

$$\varphi_{WB} = r \quad (4.99)$$

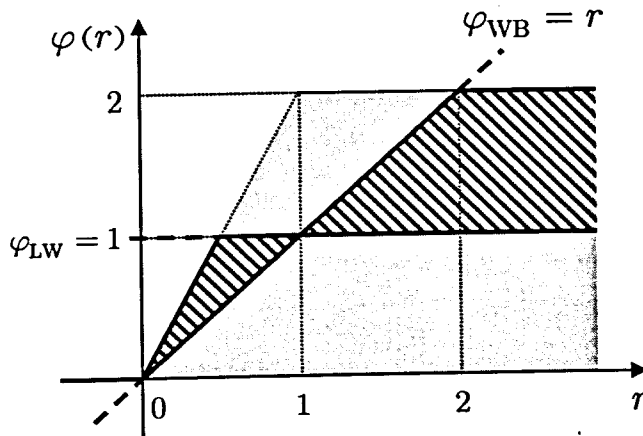


Figura 4.9: O diagrama de Sweby e a região TVD.

Qualquer esquema de 2ª ordem pode ser expresso como uma combinação linear dos esquemas LW e WB, desde que ϕ_e e ϕ_w sejam estimados com os valores dos nós ϕ_{WW} , ϕ_W , ϕ_P e ϕ_E . Desta forma, um esquema limitado com precisão de

2ª ordem (ou 3ª ordem) deverá situar-se na região intermédia entre as funções φ_{LW} e φ_{WB} no diagrama de Sweby, ilustrada na Figura 4.9 pela área a tracejado.

O ponto $\varphi(1) = 1$ é muito importante, uma vez que qualquer esquema com precisão de 2ª ordem, ou superior, terá forçosamente que o contemplar.

Em Sweby (1984) apresentam-se os limitadores de fluxo para alguns esquemas de alta resolução clássicos:

(i) Limitador de van Leer

$$\varphi_{VL} = \frac{r + |r|}{1 + |r|} \quad (4.100)$$

(ii) Limitador MINMOD

$$\varphi_{MINMOD} = \max\{0, \min(r, 1)\} \quad (4.101)$$

(iii) Limitador SUPERBEE

$$\varphi_{SUPERBEE} = \max\{0, \min(2r, 1), \min(r, 2)\} \quad (4.102)$$

(iv) Limitador de Chakravarthy e Osher

$$\varphi_{MINMOD} = \max\{0, \min(r, \psi)\} \quad (4.103)$$

Estes limitadores encontram-se representados na Figura 4.10, verificando-se que as funções MINMOD e SUPERBEE encontram-se, respectivamente, no limite inferior e superior da região de 2ª ordem. Em Sweby (1984) ilustra-se, com exemplos numéricos que o limitador MINMOD é ligeiramente difusivo, ao passo que o limitador SUPERBEE é demasiadamente compressivo. Por outro lado, o limitador de Chakravarthy e Osher não verifica a condição de simetria (Sweby, 1984),

$$\frac{\varphi(r)}{r} = \varphi(1/r) \quad (4.104)$$

conduzindo a uma distorção assimétrica de um perfil simétrico da variável ϕ à medida que este é transportado por convecção.

Em Waterson e Deconinck (1995) apresenta-se uma lista exaustiva de limitadores de fluxo, perfazendo um total de vinte esquemas de alta resolução.

A metodologia descrita nesta secção é eficiente e relativamente simples de implementar, contudo a imposição da propriedade TVD ao limitador é demasiadamente restritiva. Na próxima secção apresenta-se uma formulação mais geral para o desenvolvimento de esquemas de alta resolução.

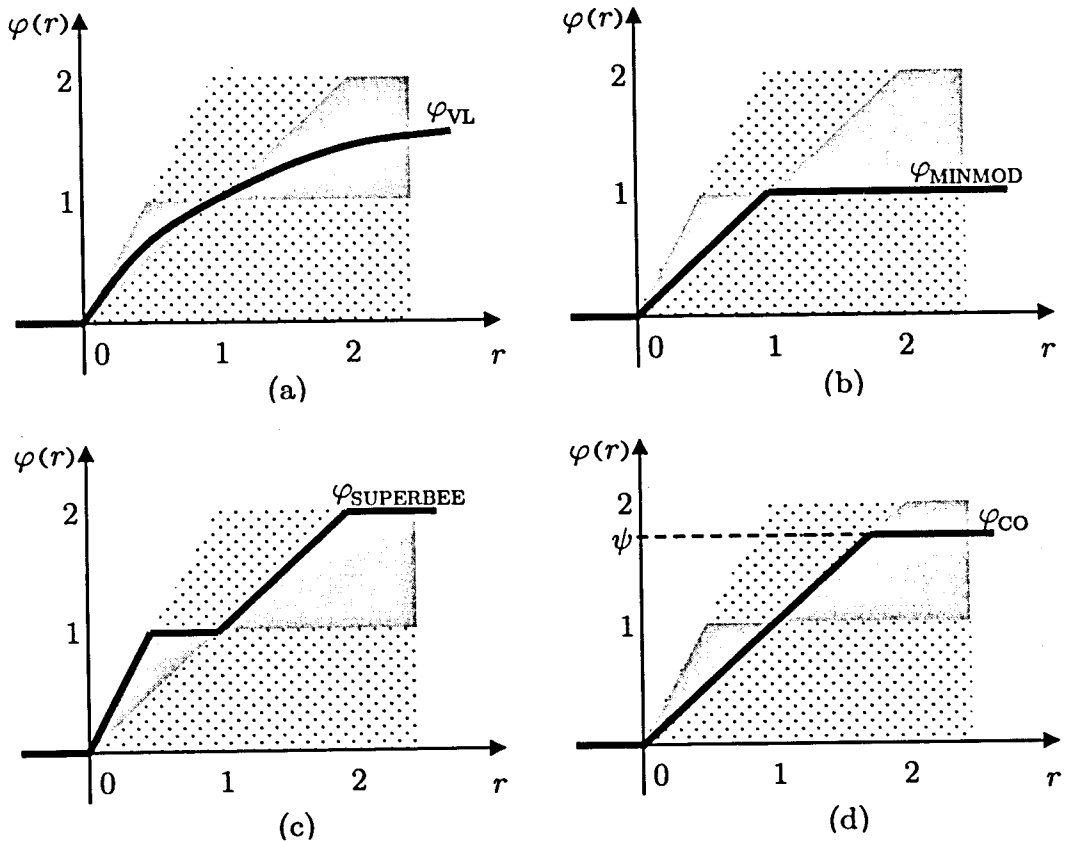


Figura 4.10: A região de 2ª ordem no diagrama de Sweby (sombreado). Representação de alguns limitadores de fluxo: (a) van Leer; (b) MINMOD; (c) SUPERBEE; (d) Chakravarthy-Osher.

4.6.2 O critério da limitação convectiva e o diagrama NVD

Um esquema de discretização com precisão até 3ª ordem pode ser traduzido na forma geral

$$\phi_f = f(\phi_U, \phi_C, \phi_D) \quad (4.105)$$

Novamente, os índices U e D referem-se, respectivamente, às células a montante e a jusante da célula C, a qual se encontra a montante da face f em consideração (vide Figura 4.4).

Leonard (1988) introduziu o conceito de variáveis normalizadas e a correspondente metodologia de variáveis normalizadas (*Normalized Variable Approach*, NVA), efectuando uma normalização da variável ϕ na forma,

$$\bar{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (4.106)$$

A vantagem da utilização deste tipo de normalização reside na simplificação que se introduz na Eq. (4.105), podendo ser reescrita na forma

$$\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C) \quad (4.107)$$

uma vez que na definição de variável normalizada está implícito que $\tilde{\phi}_U = 0$ e $\tilde{\phi}_D = 1$. A utilização desta normalização permite traduzir graficamente qualquer esquema de discretização (até 3ª ordem de convergência) num diagrama de variáveis normalizadas (*Normalized Variable Diagram*, NVD), representando-se $\tilde{\phi}_f$ vs. $\tilde{\phi}_C$ como se ilustra na Figura 4.11.

Uma forma de evitar o aparecimento de oscilações na solução calculada, sem qualquer significado físico, consiste em garantir que o valor de ϕ_f se situa entre os valores das células adjacentes, ϕ_C e ϕ_D . Este conceito serviu de base à criação do critério da limitação convectiva (*Convection Boundedness Criterion*, CBC) proposto por Gaskell e Lau (1988), segundo o qual um esquema de interpolação é intrinsecamente limitado se a relação funcional $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C)$ for contínua e verificar as seguintes condições,

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq 1 & \text{se } \tilde{\phi}_C \in]0,1[\\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C & \text{se } \tilde{\phi}_C \notin]0,1[\end{cases} \quad (4.108)$$

as quais definem a área sombreada da Figura 4.11 em conjunto com a recta $\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C$.

Na metodologia NVA está subjacente a utilização de uma malha uniforme. Contudo, em problemas práticos é frequente usarem-se malhas não uniformes, por forma a concentrar um maior número de volumes de controlo nas regiões onde se prevê que ocorrerão os gradientes mais elevados das variáveis calculadas. Assim, num caso geral, a relação funcional (4.105) deverá ser traduzida na forma

$$\phi_f = f(\phi_U, \phi_C, \phi_D, \xi_U, \xi_C, \xi_f, \xi_D) \quad (4.109)$$

em que a variável ξ representa um sistema de coordenadas locais, dependente do sentido da velocidade na face f , como se ilustra na Figura 4.4. Seguindo o mesmo princípio usado na normalização da variável ϕ , Darwish e Moukalled (1994) sugerem uma normalização de ξ do tipo

$$\tilde{\xi} = \frac{\xi - \xi_U}{\xi_D - \xi_U} \quad (4.110)$$

conduzindo a uma simplificação da Eq. (4.109), na forma

$$\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C, \tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f) \quad (4.111)$$

Esta metodologia, proposta por Darwish e Moukalled (1994), denomina-se formulação normalizada da variável e do espaço (*Normalized Variable and Space Formulation*, NVSF), e representa uma generalização, para malhas não uniformes, da formulação NVA proposta por Leonard (1988). O critério CBC, traduzido matematicamente pela Eq. (4.108) e graficamente na Figura 4.11, é igualmente válido na metodologia NVSF.

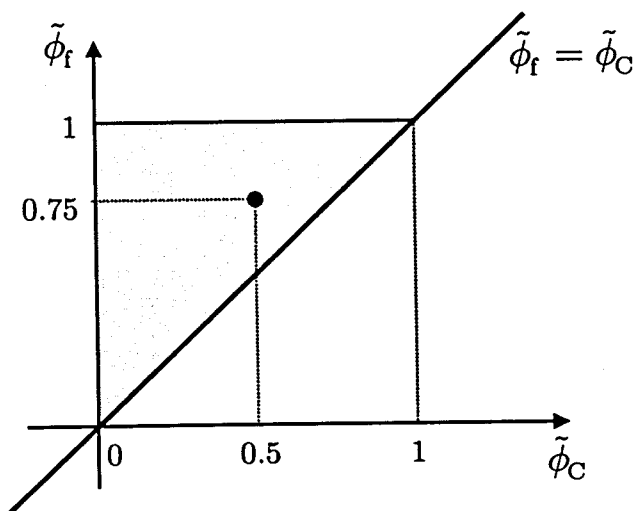


Figura 4.11: O diagrama NVD. Ilustração da região onde é válido o critério CBC (zona sombreada e recta $\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C$).

A metodologia NVSF degenera no método NVA para malhas uniformes. No caso de malhas não uniformes a utilização da metodologia NVSF é mais correcta, apesar do método NVA ser usado com grande sucesso e sem uma perda de precisão significativa. No entanto, a complexidade adicional inerente à generalização NVSF não é significativa, pelo que se opta por usar nesta tese essa formulação mais geral.

A transformação dos esquemas de interpolação lineares para variáveis normalizadas e a respectiva representação no diagrama NVD é relativamente simples, e permite facilmente identificar as zonas em que um determinado esquema é ou não limitado. Tomando como exemplo o esquema UDS, a sua normalização resulta em

$$\phi_f = \phi_C \Leftrightarrow \frac{\phi_f - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} = \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \Rightarrow \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C \quad (4.112)$$

confirmando-se que este esquema é limitado em toda a região do diagrama NVD. Os diversos esquemas de interpolação lineares descritos anteriormente podem ser

convertidos para a metodologia NVSF, obtendo-se invariavelmente uma relação do tipo (Darwish e Moukalled, 1994)

$$\tilde{\phi}_f = A + B \tilde{\phi}_C \quad (4.113)$$

em que as variáveis A e B traduzem parâmetros geométricos, dependentes do esquema de interpolação escolhido. Na Tabela 4.3 apresentam-se as expressões para A e B de alguns esquemas de interpolação lineares, segundo as metodologias NVA e NVSF. A conversão das expressões da metodologia NVSF para a NVA é imediata, bastando notar que numa malha uniforme $\tilde{\xi}_f = 3/4$ e $\tilde{\xi}_C = 1/2$.

Tabela 4.3- Coeficientes A e B a serem usados na Eq. (4.113), para alguns esquemas lineares usados na discretização do termo convectivo (Darwish e Moukalled, 1994).

	NVA		NVSF	
	A	B	A	B
UDS	1	1	1	0
CDS	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C}{1 - \tilde{\xi}_C}$	$\frac{1 - \tilde{\xi}_f}{1 - \tilde{\xi}_C}$
LUDS	0	$3/2$	0	$\tilde{\xi}_f / \tilde{\xi}_C$
QUICK	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{\tilde{\xi}_f(\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{1 - \tilde{\xi}_C}$	$\frac{\tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)}{\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C)}$

Os esquemas UDS, CDS, LUDS e QUICK encontram-se representados na Figura 4.12, verificando-se que apenas o esquema UDS verifica o critério CBC em toda a gama, em consonância com o teorema de Godunov. Pode ainda observar-se que todos os esquemas, com exceção do UDS, passam pelo ponto Q, de coordenadas $(\tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$. Este ponto é muito importante na criação de esquemas de alta resolução, uma vez que é condição necessária e suficiente para um esquema possuir precisão de 2ª ordem que a sua relação funcional $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C, \tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$ passe por esse ponto (Darwish e Moukalled, 1994). No caso da formulação NVA o ponto Q tem coordenadas $(1/2, 3/4)$. Para um esquema de interpolação alcançar precisão de 3ª ordem, além de passar no ponto Q, o declive da função $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C, \tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$ nesse ponto Q deverá igualar o declive do esquema QUICK (Darwish e Moukalled, 1994),

$$\left(\frac{\partial \tilde{\phi}_f}{\partial \tilde{\phi}_C} \right)_Q = \frac{\tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)}{\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C)} \quad (4.114)$$

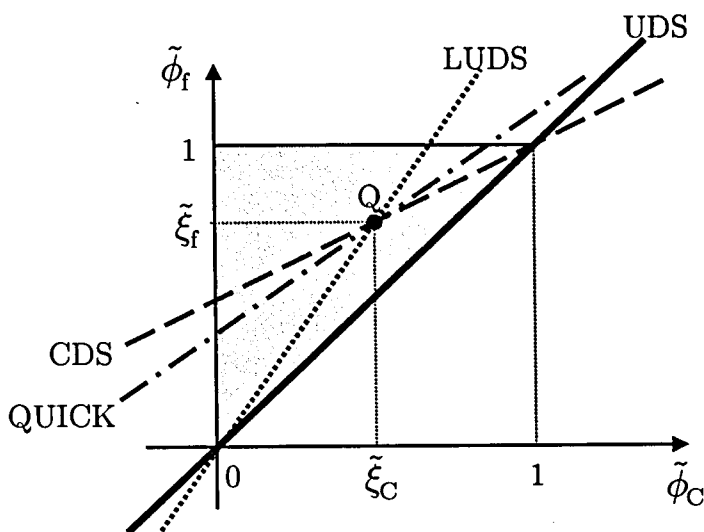


Figura 4.12: Ilustração de alguns esquemas lineares no diagrama NVD.

A tarefa de criação de métodos de alta resolução é agora relativamente simples, partindo-se destas duas regras e usando o critério CBC. Na literatura é possível encontrar uma grande diversidade de propostas desenvolvidas no âmbito da metodologia NVA, posteriormente generalizadas para a metodologia NVSF por Darwish e Moukalled (1994). Nesta secção apenas se reproduz uma pequena amostra dos esquemas de alta resolução propostos na literatura, apresentando-se as expressões correspondentes para as metodologias NVSF e NVA:

(i) Esquema MINMOD (Harten, 1983; Zhu e Rodi, 1991)

$$\begin{aligned}
 \text{NVSF: } \tilde{\phi}_f &= \begin{cases} \frac{\tilde{\xi}_f}{\tilde{\xi}_C} \tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \tilde{\xi}_C \\ \frac{1 - \tilde{\xi}_f}{1 - \tilde{\xi}_C} \tilde{\phi}_C + \frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C}{1 - \tilde{\xi}_C} & \tilde{\xi}_C \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \\
 \text{NVA: } \tilde{\phi}_f &= \begin{cases} \frac{3}{2} \tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{1}{2} \\ \frac{\tilde{\phi}_C + 1}{2} & \frac{1}{2} \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases}
 \end{aligned} \tag{4.115}$$

(ii) Esquema SMART (Gaskell e Lau, 1988)

$$\text{NVSF: } \tilde{\phi}_f = \begin{cases} \frac{\tilde{\xi}_f(1-3\tilde{\xi}_C+2\tilde{\xi}_f)\tilde{\phi}_C}{\tilde{\xi}_C(1-\tilde{\xi}_C)} & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{\tilde{\xi}_C}{3} \\ \frac{\tilde{\xi}_f(1-\tilde{\xi}_f)}{\tilde{\xi}_C(1-\tilde{\xi}_C)}\tilde{\phi}_C + \frac{\tilde{\xi}_f(\tilde{\xi}_f-\tilde{\xi}_C)}{1-\tilde{\xi}_C} & \frac{\tilde{\xi}_C}{3} \leq \tilde{\phi}_C \leq \frac{\tilde{\xi}_C}{\tilde{\xi}_f}(1+\tilde{\xi}_f-\tilde{\xi}_C) \\ 1 & \frac{\tilde{\xi}_C}{\tilde{\xi}_f}(1+\tilde{\xi}_f-\tilde{\xi}_C) < \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \quad (4.116)$$

$$\text{NVA: } \tilde{\phi}_f = \begin{cases} 3\tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{1}{6} \\ \frac{3}{4}\tilde{\phi}_C + \frac{3}{8} & \frac{1}{6} \leq \tilde{\phi}_C \leq \frac{5}{6} \\ 1 & \frac{5}{6} < \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} ,$$

(iii) Esquema CLAM (van Leer, 1974; Zhu, 1991)

$$\text{NVSF: } \tilde{\phi}_f = \begin{cases} \frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C^2}{\tilde{\xi}_C(1-\tilde{\xi}_C)}\tilde{\phi}_C - \frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C}{\tilde{\xi}_C(1-\tilde{\xi}_C)}\tilde{\phi}_C^2 & 0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \quad (4.117)$$

$$\text{NVA: } \tilde{\phi}_f = \begin{cases} \tilde{\phi}_C(2-\tilde{\phi}_C) & 0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases}$$

(iv) Esquema WACEB (Song *et al.*, 2000)

$$\text{NVA: } \tilde{\phi}_f = \begin{cases} 2\tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{3}{10} \\ \frac{3}{4}\tilde{\phi}_C + \frac{3}{8} & \frac{3}{10} \leq \tilde{\phi}_C \leq \frac{5}{6} \\ 1 & \frac{5}{6} < \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \quad (4.118)$$

$$\text{NVSF: } \tilde{\phi}_f = \begin{cases} 2\tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{\tilde{\xi}_C \tilde{\xi}_f (\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{2\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C) - \tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)} \\ \frac{\tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)}{\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C)} \tilde{\phi}_C + \frac{\tilde{\xi}_f(\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{1 - \tilde{\xi}_C} & \frac{\tilde{\xi}_C \tilde{\xi}_f (\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{2\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C) - \tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)} \leq \tilde{\phi}_C \leq \frac{\tilde{\xi}_C(1 + \tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{\tilde{\xi}_f} \\ 1 & \frac{\tilde{\xi}_C}{\tilde{\xi}_f} (1 + \tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C) < \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases}$$

(v) Esquema GAMMA (Jasak *et al.*, 1999)

$$\begin{aligned} \text{NVSF: } \tilde{\phi}_f &= \begin{cases} \tilde{\phi}_C \left[1 + \frac{1}{\beta_m} \frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C}{1 - \tilde{\xi}_C} (1 - \tilde{\phi}_C) \right] & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \beta_m \\ \frac{1 - \tilde{\xi}_f}{1 - \tilde{\xi}_C} \tilde{\phi}_C + \frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C}{1 - \tilde{\xi}_C} & \beta_m \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \\ \text{NVA: } \tilde{\phi}_f &= \begin{cases} \tilde{\phi}_C \left[1 + \frac{1}{2\beta_m} (1 - \tilde{\phi}_C) \right] & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \beta_m \\ \frac{\tilde{\phi}_C + 1}{2} & \beta_m \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \end{aligned} \quad (4.119)$$

(vi) Esquema NOTABLE (Pascau e Pérez, 1993)

$$\begin{aligned} \text{NVSF: } \tilde{\phi}_f &= \frac{\tilde{\phi}_C}{\tilde{\xi}_C^2 [\tilde{\xi}_C(2 - \tilde{\xi}_C) - 1]} \left\{ [\tilde{\xi}_f(2\tilde{\xi}_C - \tilde{\xi}_f) - \tilde{\xi}_C^2] \tilde{\phi}_C^2 + [(\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)(1 - 3\tilde{\xi}_C^2) + \right. \\ &\quad \left. \tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C^2) - \tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)(1 + \tilde{\xi}_C)] \tilde{\phi}_C + [\tilde{\xi}_f \tilde{\xi}_C(3\tilde{\xi}_C - \tilde{\xi}_f - 1) - \tilde{\xi}_C^4] \right\} \quad (4.120) \\ \text{NVA: } \tilde{\phi}_f &= \tilde{\phi}_C \left(\tilde{\phi}_C^2 - \frac{5}{2} \tilde{\phi}_C + \frac{5}{2} \right) \end{aligned}$$

Em termos de precisão numérica, é sabido que os esquemas de discretização cuja função na vizinhança de $\tilde{\phi}_C = \tilde{\xi}_C$ se encontra junto à linha do esquema UDS são excessivamente difusivos. Por outro lado, os esquemas cuja função na vizinhança de $\tilde{\phi}_C = \tilde{\xi}_C$ se encontram acima da linha do esquema QUICK tendem a ser excessivamente compressivos (Leonard, 1996). Um outro aspecto importante a ter em consideração no design de um esquema de alta resolução, tem a ver com as transições do esquema. As descontinuidades na derivada da função

$\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C, \tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$ deverão ser pouco pronunciadas, e de preferência afastadas de $\tilde{\phi}_C = \tilde{\xi}_C$.

A maioria dos pontos do domínio de cálculo encontram-se tipicamente numa situação em que $\tilde{\phi}_C \approx \tilde{\xi}_C$ ($=1/2$ em malhas uniformes), designada por região de escoamento suave (*smooth flow region*). Assim, deverão evitar-se transições abruptas na função $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C)$ do esquema de alta resolução sobretudo nessa região, caso contrário poderá ocorrer a chamada instabilidade de transição (*'switching' instability*-Jasak *et al.*, 1999), resultando em dificuldades de convergência do algoritmo de cálculo.

O esquema MINMOD corresponde a uma combinação adequada de CDS e LUDS, usando-se ainda UDS nas zonas em que ocorrem máximos ($\tilde{\phi}_C > 1$) ou mínimos locais ($\tilde{\phi}_C < 0$) da variável ϕ . Este esquema, inicialmente proposto no âmbito dos limitadores de fluxo (Sweby, 1984), viria a ser reinventado por Zhu e Rodi (1991) usando a metodologia NVA (denominando-se esquema SOUCUP-*Second-Order Upwind-Central differencing first-order UPwind*). O esquema MINMOD apresenta alguns problemas de convergência iterativa causados pela instabilidade de transição, devido à mudança entre o esquema LUDS e CDS ocorrer precisamente na região de escoamento suave, $\tilde{\phi}_C = \tilde{\xi}_C$.

O esquema SMART, proposto por Gaskell e Lau (1988), corresponde a uma versão limitada do esquema QUICK apresentando precisão de 3ª ordem. Este esquema não verifica a propriedade TVD, podendo em determinadas situações conduzir a dificuldades de convergência. Para tentar colmatar esta limitação do esquema SMART, Song *et al.* (2000) fizeram uma pequena alteração ao esquema SMART por forma a torná-lo TVD, surgindo assim o esquema WACEB.

O esquema CLAM (*Curved Line Advection Method*), inicialmente proposto por van Leer (1974), viria a ser reinventado por Zhu (1991) no contexto da formulação NVA, sendo-lhe atribuída a designação HLP (Hybrid Linear/Parabolic Approximation).

O esquema GAMMA foi proposto por Jasak *et al.* (1999) com o intuito de melhorar a convergência iterativa do esquema MINMOD. O parâmetro ajustável do esquema, β_m , deverá ser escolhido no intervalo $1/10 \leq \beta_m \leq 1/2$. Para aumentar a precisão do esquema deverá seleccionar-se um valor de β_m baixo, enquanto que para se melhorar a convergência iterativa do método deverá optar-se por um valor de $\beta_m \approx 1/2$ (Jasak *et al.*, 1999).

Pascau e Pérez (1993) propuseram o esquema NOTABLE, cuja construção se baseia na aplicação directa das regras enunciadas anteriormente para garantir precisão de 3ª ordem. Assim, usa-se um polinómio interpolador de 3º grau que passa pelos pontos (0,0) e (1,1), bem como pelo ponto de coordenadas $(\tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$ para garantir precisão de 2ª ordem. Estas 3 condições definem uma parábola, que resulta no esquema CLAM (ou HLP). A quarta condição usada para definir inequivocamente um polinómio de 3º grau é a condição de precisão de 3ª ordem do esquema, a qual se obtém igualando o declive do polinómio interpolador ao declive do esquema QUICK em $\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_C$. Embora o esquema NOTABLE tenha sido introduzido por Pascau e Pérez (1993) no contexto da formulação NVA, a sua generalização para a metodologia NVSF é imediata, resultando na Eq. (4.120) aqui deduzida.

Na Figura 4.13 representam-se os esquemas de alta resolução no diagrama NVD para as metodologias NVA e NVSF.

A implementação dos esquemas de alta resolução é simplificada se for usado o método da correcção diferida de Khosla e Rubin (1974). A integração do termo convectivo da Eq. (4.60) num volume de controlo genérico conduz à Eq. (4.62), em que o fluxo convectivo na face f , $F_f \phi_f$, deverá ser estimado pelo esquema de alta resolução escolhido. O valor de ϕ_f é calculado directamente da definição de variáveis normalizadas,

$$\phi_f = \phi_U + \tilde{\phi}_f (\phi_D - \phi_U) \quad (4.121)$$

com $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C, \tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$ ou $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C)$ consoante seja usada a metodologia NVSF ou NVA, respectivamente.

Para simplificar a explicação da metodologia usada na implementação dos esquemas de alta resolução, apresenta-se uma descrição detalhada dos passos necessários ao cálculo dos fluxos convectivos. Sem perda de generalidade, ilustra-se o método para a face 'e' do volume de controlo P:

1. Dependendo do sentido da velocidade na face f (ou do sinal do caudal mássico F_e) identificar as células C, U e D (vide Figura 4.4):

$$F_e \geq 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} U \leftarrow W \\ C \leftarrow P \\ D \leftarrow E \end{array} \right. \quad F_e < 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} U \leftarrow EE \\ C \leftarrow E \\ D \leftarrow P \end{array} \right.$$

2. Calcular as coordenadas normalizadas e o valor de $\tilde{\phi}_C$

$$\tilde{\xi}_C = \frac{\xi_C - \xi_U}{\xi_D - \xi_U} \quad \tilde{\xi}_f = \frac{\xi_f - \xi_U}{\xi_D - \xi_U} \quad \tilde{\phi}_C = \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}$$

NOTA: Numa malha uniforme apenas é necessário calcular $\tilde{\phi}_C$ ($\tilde{\xi}_C = 1/2$ e $\tilde{\xi}_f = 3/4$).

3. Calcular $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C, \tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$ para o esquema de alta resolução seleccionado

4. Calcular o valor pretendido do fluxo convectivo na face, usando o método da correcção diferida:

$$F_e \phi_e = F_e \left[\phi_U + \tilde{\phi}_f (\phi_D - \phi_U) \right] = F_e \phi_C + F_e \left[\left[\phi_U + \tilde{\phi}_f (\phi_D - \phi_U) \right] - \phi_C \right] = \\ (F_e \phi_e)_{UDS}^{n+1} + \left[(F_e \phi_e)_{HR}^n - (F_e \phi_e)_{UDS}^n \right]$$

Os valores sublinhados são avaliados explicitamente e adicionados ao termo fonte das equações na sua forma discreta. Essa contribuição corresponde à diferença entre o fluxo convectivo na face f previsto pelo método de alta resolução (HR) e o fluxo previsto pelo esquema UDS. Desta forma, o fluxo convectivo previsto pelo esquema UDS é avaliado implicitamente, promovendo a estabilidade do processo iterativo de cálculo. Desenvolvendo a expressão anterior, obtém-se

$$F_e \phi_e = F_e^+ \phi_P + F_e^- \phi_E + \underline{\underline{F_e^+ \left[\left[\phi_W + \tilde{\phi}_e (\phi_E - \phi_W) \right] - \phi_P \right]}} + \underline{\underline{F_e^- \left[\left[\phi_{EE} + \tilde{\phi}_e (\phi_P - \phi_{EE}) \right] - \phi_E \right]}}$$

em que $F_e^+ \equiv \max(F_e, 0)$ e $F_e^- \equiv \min(F_e, 0)$.

A aplicação do esquema de alta resolução às restantes faces do volume de controlo P é idêntica, pelo que se torna desnecessária a sua repetição.

É possível implementar os métodos de alta resolução de outras formas (e.g., usando o conceito da mediana, como se descreve em Leonard, 1996), contudo o resultado obtido é exactamente o mesmo.

Para se ilustrar a robustez dos diversos métodos de alta resolução apresentados, e comparar a respectiva precisão, apresenta-se um exemplo simples de transporte por convecção, de um escalar ϕ , num domínio bidimensional

$$\frac{\partial(u_x \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y \phi)}{\partial y} = 0 \quad (4.122)$$

A equação de transporte considerada neste exemplo corresponde a um caso particular da Eq. (4.60), em que apenas o termo convectivo é não nulo.

Considere-se o transporte de um perfil em degrau num domínio quadrado, num campo de velocidade constante ($u_x/u_y = \sqrt{3}$), que origina um escoamento com uma inclinação de 30° relativamente ao domínio de cálculo. Nas fronteiras de entrada estipulam-se os seguintes perfis da variável dependente

$$\begin{aligned} \phi &= 1 & \text{para} & \quad 1 - \text{tg}(\theta/2) \leq y \leq 1 \wedge x = 0 \\ \phi &= 0 & \text{para} & \quad 0 \leq y < 1 - \text{tg}(\theta/2) \wedge x = 0 \\ \phi &= 0 & \text{para} & \quad 0 < x < 1 \wedge y = 0 \end{aligned} \quad (4.123)$$

Este exemplo, apesar de aparentemente simples, é um caso de teste usado com frequência em estudos comparativos de esquemas de discretização dos termos convectivos, essencialmente devido às dificuldades numéricas que costuma suscitar (e.g., Leonard, 1988; Gaskell e Lau, 1988; Zhu, 1991; Darwish e Moukalled, 1994; Ferziger e Peric, 1996; Jasak *et al.*, 1999).

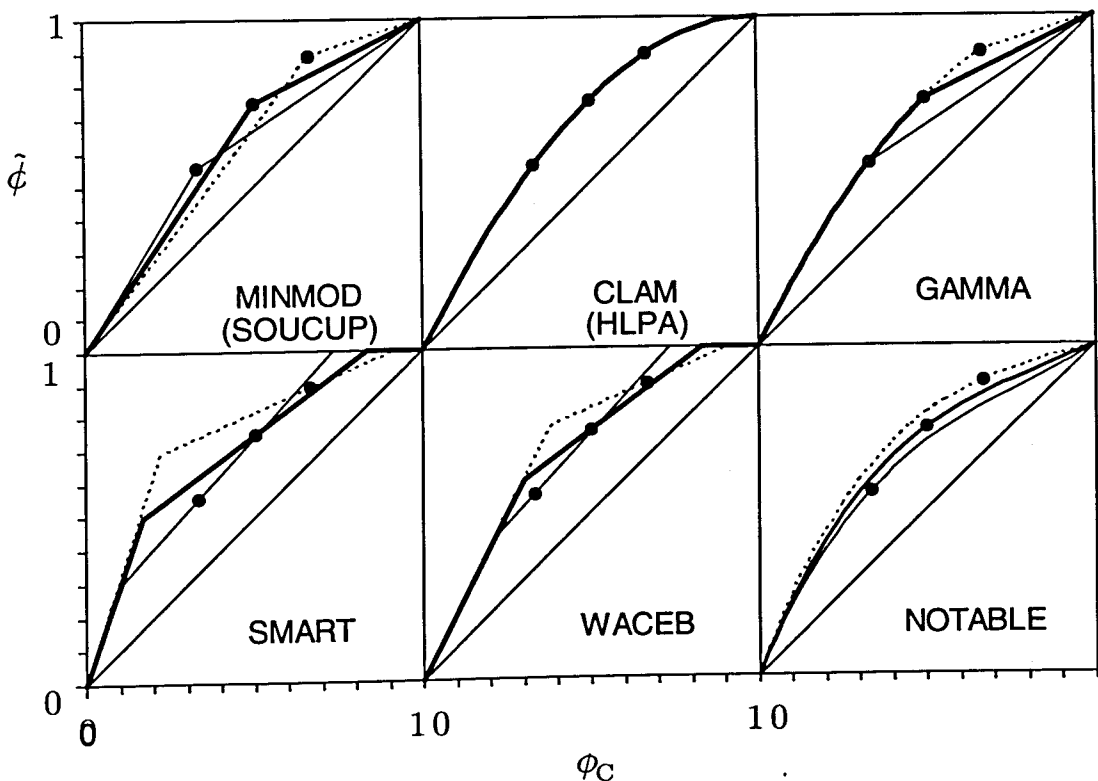


Figura 4.13: Representação de alguns esquemas de alta resolução no diagrama NVD: malha uniforme (—); malha não uniforme com um factor de expansão 2 (---); malha não uniforme com um factor de compressão 0.5 (-----). Os círculos a negro referem-se às condições de escoamento suave, i.e. ao ponto de coordenadas (ξ_C, ξ_f) .

O método de discretização é semelhante ao descrito anteriormente, pelo que apenas se apresentam os resultados das simulações. O domínio de cálculo foi dividido em 21×21 células uniformes.

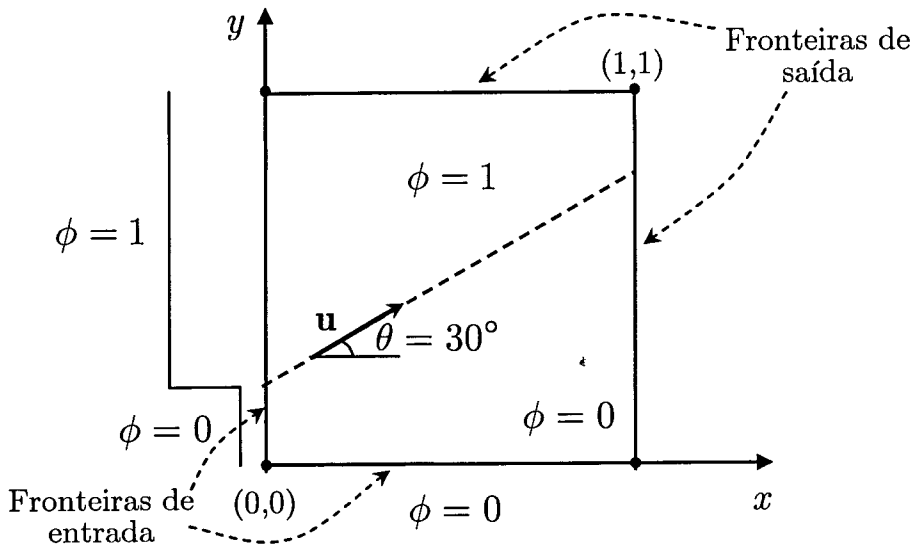


Figura 4.14: Transporte por convecção de um perfil em degrau.

A comparação entre as soluções obtidas pelos diversos esquemas de discretização irá restringir-se ao perfil de ϕ na linha vertical $x = 1/2$, cujo perfil teórico de ϕ é dado por

$$\phi\left(x = \frac{1}{2}, y\right) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 \leq y < 1/2 \\ 1 & \text{para } 1/2 \leq y \leq 1 \end{cases} \quad (4.124)$$

Na Figura 4.15 apresentam-se os perfis de ϕ calculados com os esquemas lineares UDS, CDS, LUDS e QUICK. Verifica-se que apenas o esquema UDS conduz a uma solução fisicamente aceitável, completamente isenta de oscilações artificiais. Contudo, e como já foi realçado anteriormente, este esquema é pouco preciso, originando uma solução numérica exageradamente difusiva, como se pode observar na Figura 4.15 (a). Para os esquemas lineares com ordem de convergência superior a 1 verifica-se, de acordo com o teorema de Godunov, que as soluções obtidas possuem oscilações, sendo bastante acentuadas para o caso particular do esquema CDS. A precisão obtida com os esquemas LUDS e QUICK é aceitável, contudo também se observam *ligeiras* oscilações indesejáveis, que em determinadas situações podem ter consequências inaceitáveis. Por exemplo, supondo que no

presente exemplo a variável ϕ representa a fracção molar de uma espécie química, verifica-se a ocorrência de fracções negativas dessa espécie em determinados pontos do domínio de cálculo, o que é fisicamente inaceitável.

Em contrapartida, as soluções numéricas obtidas com os esquemas de alta resolução são perfeitamente suaves e monótonas, como se pode observar na Figura 4.16. Fica assim ilustrada a superioridade dos métodos de alta resolução relativamente aos esquemas clássicos de discretização do termo convectivo, em particular nas situações em que os termos convectivos são dominantes. Verifica-se que os esquemas de alta resolução possuem precisão equivalente, sendo contudo possível ordená-los por ordem decrescente de precisão: SMART, WACEB, NOTABLE, CLAM, GAMMA, MINMOD. O esquema UDS, devido à sua precisão de 1ª ordem, é significativamente mais difusivo que os esquemas de alta resolução.

Observando a Figura 4.13, em particular para as curvas correspondentes a malha uniforme, é possível correlacionar a precisão dos vários esquemas (ilustrada na Figura 4.16) com o afastamento da respectiva função no diagrama NVD à linha correspondente ao esquema UDS e com a aproximação à linha do esquema QUICK. Assim, os esquemas de alta resolução cuja função no diagrama NVD se aproximam da linha referente ao esquema QUICK são mais precisos. Os esquemas que se aproximam da linha UDS são tendencialmente mais difusivos, e por essa razão menos precisos. De forma idêntica, esquemas cuja função no diagrama NVD se situe acima da linha QUICK (aproximando-se da recta $\tilde{\phi}_f = 1$, referente ao esquema de diferenças de jusante, DDS - *Downwind Differencing Scheme*) são exageradamente compressivos, o que também é indesejável. Embora não se tenham apresentado esquemas de alta resolução deste tipo, existem diversas propostas na literatura, tais como os esquemas SUPERBEE (Roe, 1985), Super-C ou Hyper-C (Leonard, 1991).

Dado o carácter hiperbólico da generalidade das equações constitutivas reológicas analisadas nesta tese, torna-se necessário utilizar esquemas intrinsecamente limitados para a discretização dos termos convectivos. Desta forma será possível aumentar a estabilidade e robustez do procedimento de cálculo, como se sugere em Oliveira e Pinho (1999b).

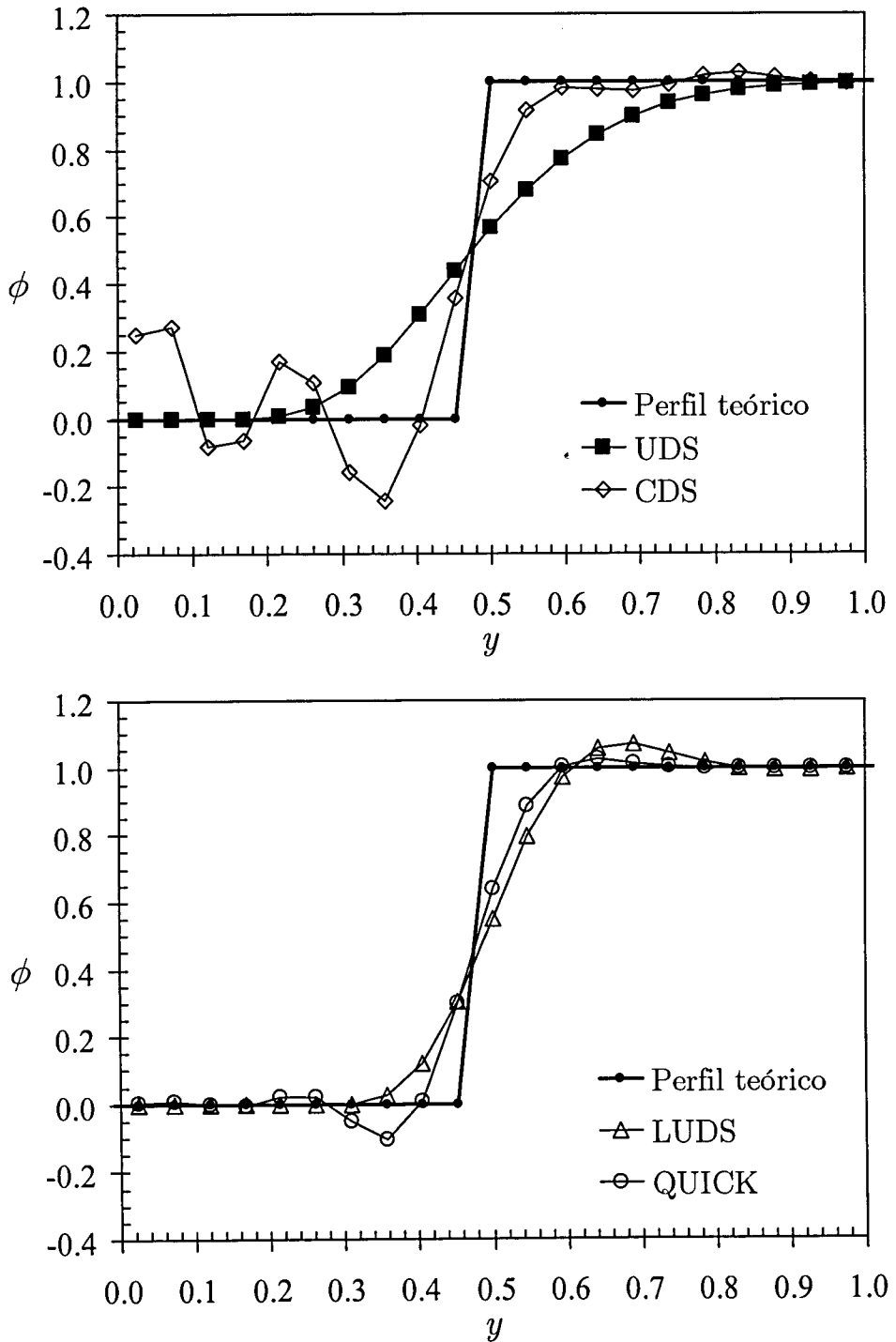


Figura 4.15: Solução numérica para o problema do transporte por convecção de um escalar. Resultados obtidos numa malha constituída por 21×21 células, ao longo da linha vertical $x = 1/2$, para os seguintes esquemas de discretização: (a) UDS e CDS; (b) LUDS e QUICK.

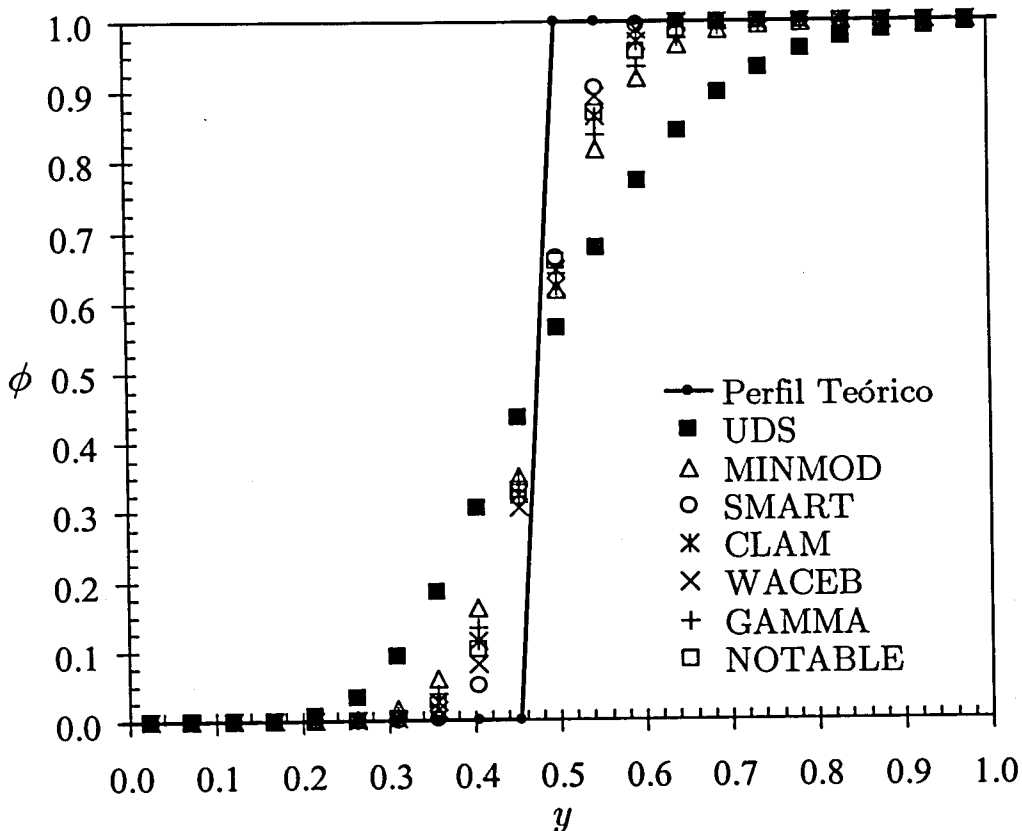


Figura 4.16: Solução numérica para o problema do transporte por convecção de um escalar. Resultados obtidos numa malha constituída por 21×21 células, ao longo da linha vertical $x = 1/2$, para vários esquemas de alta resolução. Comparação com o perfil teórico e com a solução numérica obtida com o esquema UDS.

4.6.3 Correspondência entre os limitadores de fluxo e a metodologia NVA

A estratégia baseada em limitadores de fluxo convectivo desenvolvida por Sweby (1984) e a metodologia NVA proposta por Leonard (1988) à primeira vista não parecem ser comparáveis. Contudo, em Leonard (1991) apresentam-se as relações de transformação duma metodologia na outra. Partindo da Eq. (4.95),

$$\phi_f^n = \phi_C^n + \frac{\varphi}{2}(\phi_D^n - \phi_C^n) \Rightarrow \varphi = 2 \frac{\phi_f^n - \phi_C^n}{\phi_D^n - \phi_C^n} = 2 \frac{(\phi_f^n - \phi_U^n) - (\phi_C^n - \phi_U^n)}{(\phi_D^n - \phi_U^n) - (\phi_C^n - \phi_U^n)}$$

Dividindo o numerador e o denominador por $(\phi_D^n - \phi_U^n)$ obtém-se a relação pretendida,

$$\varphi(r) = \frac{\tilde{\phi}_f^n - \tilde{\phi}_C^n}{(1 - \tilde{\phi}_C^n)/2} \tag{4.125}$$

A variável r também pode ser transformada para a metodologia NVA de forma semelhante. Partindo da sua definição, Eq. (4.96),

$$r = \frac{\phi_C^n - \phi_U^n}{\phi_D^n - \phi_C^n} = \frac{\phi_C^n - \phi_U^n}{(\phi_D^n - \phi_U^n) - (\phi_C^n - \phi_U^n)}$$

obtem-se facilmente a relação pretendida:

$$r = \frac{\tilde{\phi}_C^n}{1 - \tilde{\phi}_C^n} \quad (4.126)$$

Usando as Eqs. (4.125) e (4.126) é possível transpor o diagrama de Sweby para o diagrama NVD e, desta forma, comparar a zona TVD na metodologia baseada em limitadores de fluxo com a região onde é verificado o critério CBC no diagrama NVD.

A região TVD no diagrama de Sweby é expressa pela Eq. (4.97). Substituindo as Eqs. (4.125) e (4.126) na Eq. (4.97), obtém-se

$$0 \leq \left(\frac{\tilde{\phi}_f^n - \tilde{\phi}_C^n}{(1 - \tilde{\phi}_C^n)/2} \frac{1 - \tilde{\phi}_C^n}{\tilde{\phi}_C^n}, \frac{\tilde{\phi}_f^n - \tilde{\phi}_C^n}{(1 - \tilde{\phi}_C^n)/2} \right) \leq 2$$

que, após alguma manipulação, permite obter o resultado pretendido:

$$1 \leq \frac{\tilde{\phi}_f^n}{\tilde{\phi}_C^n} \leq 2 \quad \wedge \quad 0 \leq \frac{\tilde{\phi}_f^n - \tilde{\phi}_C^n}{1 - \tilde{\phi}_C^n} \leq 1 \quad (4.127)$$

As inequações (4.127) podem ser representadas no diagrama NVD, conduzindo à reunião da região identificada a tracejado na Figura 4.17 com a linha que define o esquema UDS, $\tilde{\phi}_f^n = \tilde{\phi}_C^n$. Comparando as regiões TVD e CBC, ilustradas na Figura 4.17, constata-se que o critério TVD (que está implícito nos esquemas de alta resolução desenvolvidos segundo a metodologia dos limitadores de fluxo) é mais restritivo que o critério CBC. Por exemplo, é fácil verificar que o esquema SMART, desenvolvido segundo a metodologia NVA, não verifica o critério TVD em toda a sua gama.

A metodologia baseada nos limitadores de fluxo foi proposta por Sweby (1984) para a solução de problemas em regime transiente, usando um método explícito de integração temporal (daí o uso do número de Courant em diversas equações da Secção 4.6.1, o qual está limitado entre os valores 0 e 1 por forma a garantir a estabilidade do algoritmo de cálculo). O índice temporal presente nas Eqs. (4.125) a (4.127) traduz a solução conhecida no passo de integração anterior. Assim, o limitador de fluxo é avaliado explicitamente, de forma semelhante à técnica da

correção diferida usada na metodologia NVA. Desta forma, por uma questão de simplicidade, no remanescente desta tese opta-se por não escrever o índice temporal.

A metodologia baseada em limitadores de fluxo também pode ser aplicável a problemas estacionários, em que a solução pretendida é obtida por um processo iterativo. Neste caso, o índice (n) representa um contador do número da iteração.

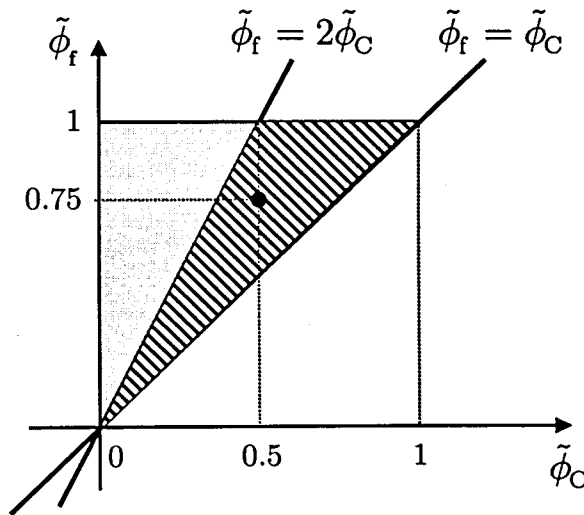


Figura 4.17: Comparação entre a região TVD (tracejado) e a região CBC (sombreado) no diagrama NVD.

4.7 Procedimento de cálculo

As equações constitutivas e de conservação da quantidade de movimento na forma discreta são resolvidas de forma sequencial, usando o algoritmo SIMPLEC (*SIMPLE Consistent*) proposto por van Doormal e Raithby (1984). Este método é usado para efectuar a ligação dos campos de pressão e velocidade por forma a verificar a equação da continuidade. O algoritmo SIMPLEC foi desenvolvido para métodos de cálculo iterativo de escoamento em regime permanente, tendo sido modificado posteriormente por Issa e Oliveira (1994) para utilização em algoritmos de cálculo de estado não estacionário com malhas colocadas (como o descrito neste capítulo), com a vantagem adicional de também ser aplicável ao cálculo de escoamentos permanentes, como forma alternativa ao uso de sub-relaxação em métodos de cálculo iterativo para escoamentos em regime permanente.

Uma vez que o algoritmo SIMPLEC proposto por van Doormal e Raithby (1984) apenas está relacionado com o cálculo de um campo de pressão que

satisfaça a restrição imposta pela equação da continuidade, a sua extensão para escoamentos de fluidos viscoelásticos é afectada apenas de forma marginal pela inclusão das equações constitutivas diferenciais. Assim, na parte inicial do algoritmo são introduzidos dois novos passos, de acordo com a estratégia proposta por Oliveira *et al.* (1998):

- (i) Os campos de tensão são calculados inicialmente, por solução implícita da Eq. (4.45) para as seis componentes do tensor das tensões. Esta etapa deve ser efectuada antes de serem resolvidas as equações de conservação da quantidade de movimento pela primeira vez.
- (ii) A equação de conservação da quantidade de movimento na forma discreta, Eq. (4.31), é resolvida de forma implícita para cada uma das três componentes da velocidade. O termo do divergente da tensão, Eq. (4.29), é incluído no termo fonte das equações de conservação da quantidade de movimento, devendo ser usada a técnica especial de interpolação descrita na Secção 4.4, usando os campos de tensão obtidos no passo anterior.

Segue-se uma descrição da estratégia de cálculo, indicando-se de forma sucinta as principais etapas do algoritmo de solução. Para cada incremento no tempo, de passo δt , são necessários três passos:

- (i) As seis componentes do tensor das tensões são calculadas de forma sequencial, por solução da equação constitutiva discretizada de forma implícita (da Eq. (4.45), com $\tau_{ij,P}^{(n)}$ incluído no termo fonte, $S_{\tau_{ij}}$):

$$a_P^\tau \tau_{ij,P}^{(n+1)} - \sum_{F=1}^6 a_F^\tau \tau_{ij,F}^{(n+1)} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_P V_P}{\delta t} \tau_{ij,P}^{(n)} \quad (4.128)$$

em que os coeficientes a_P^τ e o termo fonte, $S_{\tau_{ij}}$, são baseados nos campos de velocidade e tensão referentes ao passo temporal anterior, e $\tau_{ij}^{(n+1)}$ representa o valor de τ_{ij} no novo instante de tempo ($n+1$). A Eq. (4.128) traduz de forma compacta um sistema de equações lineares em termos das variáveis $\tau_{ij}^{(n+1)}$ em cada um dos centros das células que constituem a malha computacional.

- (ii) As equações de conservação da quantidade de movimento na forma discreta, Eq. (4.31), são resolvidas de forma implícita para cada uma das componentes da velocidade:

$$\left(\sum_{F=1}^6 a_F + S_P + \frac{\rho V_P}{\delta t} \right) u_{i,P}^* - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F}^* = - \sum_{l=1}^3 B_{li} [\Delta p^{(n)}]_l^P + S'_u \quad (4.129)$$

em que o termo do gradiente de pressão é baseado nos valores obtidos no tempo de integração anterior (n), tendo-se destacado do termo fonte por uma questão de conveniência, como se verá já de seguida. O termo referente ao divergente da tensão, Eq. (4.29), está incluído no termo fonte S'_{u_i} , sendo calculado com os valores actuais das tensões na face, $\bar{\tau}_{ij,f}^{(n+1)}$, usando a técnica especial de interpolação traduzida pela Eqs. (4.57)-(4.59), nas quais são necessários os coeficientes centrais das equações das tensões, $a_{\bar{p}}$, obtidos no passo anterior. Esta é a razão pela qual as equações constitutivas deverão ser resolvidas previamente às equações de conservação da quantidade de movimento. Os campos de velocidade obtidos nesta etapa (u_i^*) em princípio não satisfazem a equação da continuidade, pelo que se torna necessário efectuar uma correcção adequada.

(iii) A terceira etapa do algoritmo consiste numa correcção ao campo de velocidades obtido na etapa anterior (u_i^*), por forma a garantir a conservação de massa em todo o domínio de cálculo. Para tal calcula-se um novo campo de velocidades, $u_i^{(n+1)}$, que satisfaz simultaneamente a equação da continuidade e a seguinte forma factorizada da equação de conservação da quantidade de movimento,

$$\left(\sum_{F=1}^6 a_F + S_P \right) u_{i,P}^* + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^{(n+1)} - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F}^* = - \sum_{l=1}^3 B_l [\Delta p^{(n+1)}]_l^P + S'_{u_i} \quad (4.130)$$

onde apenas a velocidade no termo inercial e a pressão são actualizadas para o novo tempo de integração, mantendo-se os restantes termos inalterados.

Subtraindo a Eq. (4.129) de (4.130) obtém-se a correcção à velocidade

$$\frac{\rho V_P}{\delta t} [u_{i,P}^{(n+1)} - u_{i,P}^*] = - \sum_{l=1}^3 B_l^P [\Delta p']_l^P \quad (4.131)$$

em que a variável $p' \equiv p^{(n+1)} - p^{(n)}$ traduz a correcção de pressão, calculada pela expressão (Issa e Oliveira, 1994)

$$a_P^p p' = \sum_{F=1}^6 a_F^p p'_F - \sum_{f=1}^6 F_f^* \quad (4.132)$$

obtida de forma a que o campo de velocidades no novo tempo de integração, $u_i^{(n+1)}$, garanta a conservação de massa ($\sum_f F_f^{(n+1)} = 0$, vide Eqs. (4.18) e (4.19)).

O coeficiente central da equação de correcção da pressão é calculado por

$$a_P^p = \sum_{F=1}^6 a_F^p \quad (4.133)$$

com

$$a_F^p = \frac{\rho B_f^2}{(\rho V / \delta t)_f} \quad (4.134)$$

onde a barra superior indica média aritmética. Estes coeficientes não variam ao longo do tempo, podendo ser calculados no início do processo de cálculo e memorizados para utilização futura.

O campo de pressão é actualizado para o novo instante ($n + 1$),

$$p^{(n+1)} = p^{(n)} + p' \quad (4.135)$$

as velocidades no centro dos volumes de controlo (nós principais) são calculadas com a Eq. (4.131), e os fluxos mássicos nas faces das células com

$$F_f^{(n+1)} = F_f^* - a_F^p (p'_F - p'_P) \quad (4.136)$$

ficando assim completo o algoritmo.

A solução dos sistemas de equações lineares é efectuada com o método dos gradientes conjugados (Meijerink e van der Vorst, 1977), efectuando-se um condicionamento inicial das matrizes por factorização incompleta LU.

Para o cálculo de escoamentos em regime permanente é necessário especificar um critério de convergência adequado para se interromper o processo de cálculo na solução pretendida. O critério adoptado corresponde à norma L_1 dos resíduos nas diversas células, devidamente normalizados, devendo decair para valor baixo predefinido, δ . Tipicamente usa-se $\delta = 10^{-4}$ como critério de paragem, confirmando-se a sua adequação nos diversos casos por comparação da solução obtida usando diferentes valores de δ , na gama 10^{-3} a 10^{-5} .

4.8 Condições fronteira

A discretização das equações não fica completa antes de serem especificadas as condições fronteira adequadas. Na Figura 4.18 ilustra-se uma célula bidimensional P situada na vizinhança de uma célula fronteira F, de espessura nula.

As componentes da velocidade devem ser especificadas nas diversas fronteiras que delimitam o domínio de cálculo. Dado o carácter hiperbólico da equação constitutiva, apenas é necessário especificar o valor das componentes das tensões nas fronteiras de entrada. Para fluidos incompressíveis, como os analisados neste trabalho, o valor absoluto da pressão é irrelevante, apenas interessando a sua

variação no domínio de cálculo. É prática corrente especificar-se o valor da pressão absoluta num determinado ponto do domínio de cálculo (e.g., num ponto da fronteira de entrada) e iniciar o processo iterativo com um campo de pressão nulo, o qual é actualizado ao longo do processo de cálculo por imposição da conservação de massa, usando o algoritmo SIMPLEC descrito na Secção 4.7.

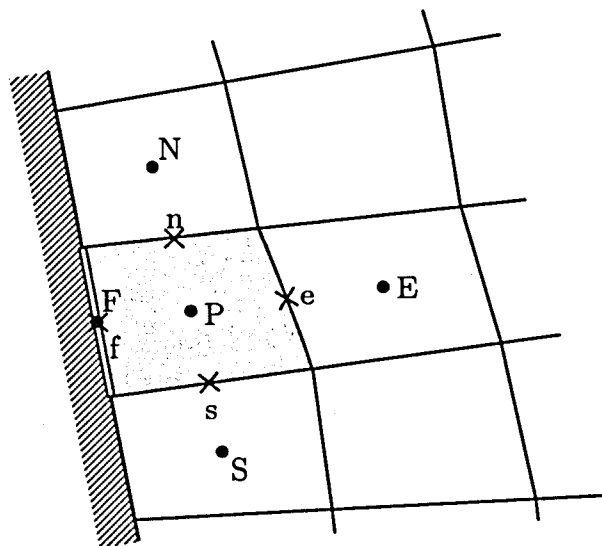


Figura 4.18: Ilustração de uma célula fronteira F , situada segundo a direcção w da célula P .

(i) Fronteiras de entrada

Nas fronteiras em que o fluido entra no domínio de cálculo devem ser especificados os valores das componentes do vector velocidade e do tensor das tensões. Consoante o problema em estudo, poderão ser usados perfis teóricos para as componentes da velocidade e tensão (caso existam soluções analíticas para o modelo reológico adoptado), perfis medidos experimentalmente, ou outros.

(ii) Fronteiras de saída

Normalmente, os valores das variáveis dependentes nas fronteiras de saída do domínio de cálculo são desconhecidas. Se a fronteira de saída for colocada longe da região de interesse do problema (e.g., afastada de uma contracção), os perfis das diversas variáveis estarão perfeitamente desenvolvidos. Nestas condições é legítimo especificar na fronteira de saída um gradiente nulo para as componentes do vector velocidade e do tensor das tensões, consistindo em igualar os valores na fronteira aos correspondentes valores no centro da célula imediatamente a montante. Para a

pressão impõe-se um gradiente constante, extrapolando-se o seu valor linearmente para a fronteira de saída a partir dos valores das duas células adjacentes a montante.

(iii) Planos de simetria

Nos planos de simetria, por definição, os fluxos convectivos e difusivos são nulos. Estas condições podem ser impostas usando regras de reflexão sobre uma célula simétrica fictícia, como a ilustrada na Figura 4.19, de acordo com o método descrito em Oliveira (1992). Usando esta estratégia é possível reproduzir exactamente a mesma solução que se obteria usando a totalidade do domínio de cálculo.

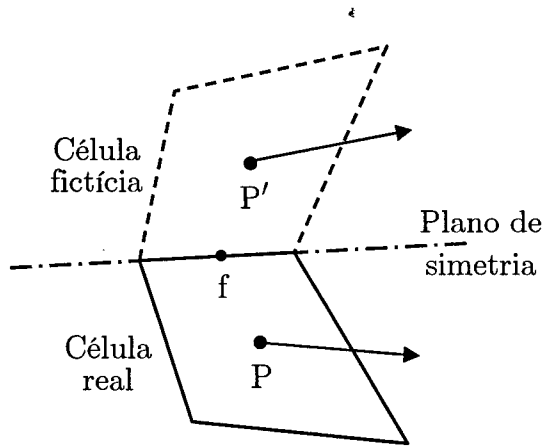


Figura 4.19: Ilustração de uma célula P , adjacente a um plano de simetria (perpendicular ao papel), e da correspondente célula fictícia reflectida, P' .

A regra de reflexão aplicada ao vector velocidade, \mathbf{u} , estipula que nos pontos P e P' as componentes tangenciais à fronteira são iguais, e as componentes perpendiculares à fronteira são simétricas,

$$\begin{aligned} u_{n,P'} &= -u_{n,P} \\ u_{t,P'} &= u_{t,P} \end{aligned} \quad (4.137)$$

Na Eq. (4.137) decompôs-se o vector velocidade nas suas componentes normal e paralela ao plano de simetria, $\mathbf{u} = u_n \mathbf{n} + u_t \mathbf{t}$, sendo \mathbf{n} e \mathbf{t} os correspondentes vectores unitários. Partindo da Eq. (4.137) é possível obter a velocidade no ponto P' ,

$$\mathbf{u}_{P'} = u_{t,P'} \mathbf{t} + u_{n,P'} \mathbf{n} = u_{t,P} \mathbf{t} - u_{n,P} \mathbf{n}$$

ou,

$$\mathbf{u}_{P'} = \mathbf{u}_P - 2 u_{n,P} \mathbf{n} \quad (4.138)$$

A velocidade na célula fronteira é calculada por interpolação linear das velocidades nas células P e P', resultando

$$u_{i,F} = \frac{1}{2}(u_{i,P} + u_{i,P'}) = u_{i,P} - u_{n,P} n_i \quad (4.139)$$

sendo $u_{n,P}$ calculado por

$$u_{n,P} = \sum_{j=1}^3 u_{j,P} n_j \quad (4.140)$$

em que n_j traduz a componente, segundo a direcção cartesiana j , do vector unitário perpendicular ao plano de simetria.

A regra da reflexão aplicada a uma quantidade escalar, tal como a pressão, traduz-se simplesmente por

$$p_f = p_P \quad (4.141)$$

Para definir as condições fronteira para as componentes do tensor das tensões, é preferível trabalhar com o vector tensão, \mathbf{T} , cujas componentes cartesianas são

$$T_i = \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} n_j \quad (4.142)$$

A regra de reflexão aplicada ao vector tensão, $\mathbf{T} = T_n \mathbf{n} + T_t \mathbf{t}$, estipula que

$$\begin{aligned} T_{t,P'} &= -T_{t,P} \\ T_{n,P'} &= T_{n,P} \end{aligned} \quad (4.143)$$

Usando interpolação linear para a fronteira obtém-se

$$\begin{aligned} T_{t,f} &= 0 \\ T_{n,f} &= T_{n,P} \end{aligned} \quad (4.144)$$

sendo a componente normal de \mathbf{T} expressa por

$$T_{n,P} = \sum_{j=1}^3 T_{j,P} n_j = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \tau_{jk,P} n_k n_j \quad (4.145)$$

Assim, a condição fronteira definida pela Eq. (4.144) pode ser traduzida por

$$\mathbf{T}_f = T_{n,f} \mathbf{n} = T_{n,P} \mathbf{n} = \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \tau_{jk,P} n_k n_j \right) \mathbf{n} \quad (4.146)$$

ou,

$$T_{i,f} = T_{n,P} n_i = \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \tau_{jk,P} n_k n_j \right) n_i \quad (4.147)$$

Usando a Eq. (4.142), obtém-se o resultado pretendido

$$\sum_{k=1}^3 \tau_{ik,f} n_k = \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \tau_{jk,P} n_k n_j \right) n_i \quad (4.148)$$

que representa um sistema de equações nas componentes do tensor das tensões na face f (note-se que os valores de $\tau_{jk,P}$ são conhecidos).

Observando as equações de conservação da quantidade de movimento conclui-se não ser necessário calcular as diversas componentes do tensor das tensões. Da Eq. (4.29) conclui-se que a contribuição da face f (situada no plano de simetria) para o termo fonte da célula P é dada por

$$\left(S_{u_i - \text{tensão}} \right)_f = \sum_{j=1}^3 B_{fj}^f \tau_{ij,f} = B_f \sum_{j=1}^3 \tau_{ij,f} n_j \quad (4.149)$$

sendo o vector normal unitário calculado por $n_j = B_{fj}^f / B_f$, em que B_f traduz a área escalar da face fronteira. A condição de simetria para as tensões é então implementada na forma

$$\left(S_{u_i - \text{tensão}} \right)_f = T_{n,P} B_f n_i \quad (4.150)$$

(iv) Paredes

Para uma parede impermeável que se desloca a uma velocidade \mathbf{u}_w , a condição de não deslizamento impõe que

$$u_{i,f} = u_{i,w} \quad (4.151)$$

A utilização de uma malha colocada conduz à necessidade de se especificarem as condições fronteira para a pressão nas paredes (vide Eq. (4.28) aplicada a uma célula adjacente a uma parede). A utilização de extrapolação linear, com base nos valores das duas células vizinhas da parede (segundo a sua direcção normal), é usada com alguma frequência em CFD com fluidos newtonianos (Ferziger e Peric, 1996). Contudo, Oliveira (2001) demonstrou que para certos modelos viscoelásticos, nomeadamente os que originam valores elevados de tensões normais perpendiculares às paredes, a utilização de extrapolação linear da pressão conduz a perfis oscilatórios na vizinhança da parede, resultando em fortes instabilidades do

algoritmo de cálculo. Oliveira (2001) propôs uma formulação mais robusta, em que a pressão na parede é calculada por (ver Figura 4.20)

$$p_f = (2p_P - p_{f^-}) + \frac{a_P u_{n,P}}{B_f} \quad (4.152)$$

sendo o termo entre parêntesis o valor da pressão na parede obtido por simples extrapolação linear, e $u_{n,P}$ a componente da velocidade normal à parede.

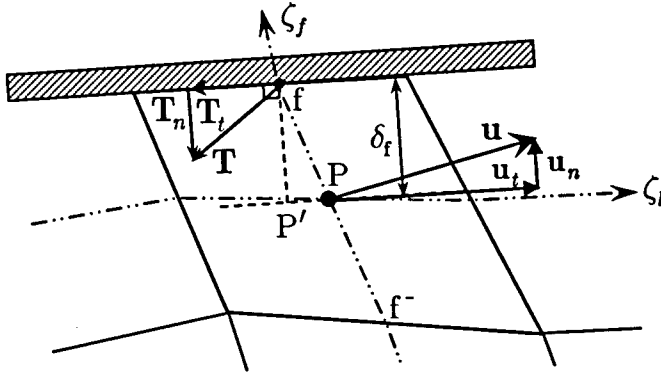


Figura 4.20: Ilustração de uma célula adjacente a uma parede.

O termo relativo ao gradiente de pressão na célula vizinha da parede, necessário para avaliar o termo fonte descrito pela Eq. (4.28), é calculado por

$$[\Delta p]_{n,P} = [\Delta p]_{n,P(\text{ext. linear})} + \frac{a_P u_{n,P}}{B_f} \quad (4.153)$$

Dado o carácter hiperbólico das equações constitutivas viscoelásticas, não é necessário impor condições fronteira nas paredes para as componentes do tensor das tensões, as quais devem ser calculadas como parte do problema numérico. No entanto, e para reduzir o tempo computacional, poderão ser impostas condições fronteira adequadas nas paredes.

A Eq. (4.29) sugere que a contribuição, segundo o eixo cartesiano i , do termo do divergente da tensão na parede é dado por

$$S_{u_i - \text{tensão extra},f} = \sum_{j=1}^3 B_f^f \tau_{ij,f} = \sum_{k=1}^3 B_f n_j \tau_{ik,f} = B_f T_{i,f} \quad (4.154)$$

em que T_i representa o vector tensão, composto por uma componente tangencial (T_t) e uma componente normal (T_n) à parede,

$$T_i = T_t + T_n \quad (4.155)$$

como se ilustra na Figura 4.20. O escoamento adjacente a uma parede é essencialmente viscosimétrico, pelo que a componente tangencial do vector tensão será

$$T_{i_t} = \eta(\dot{\gamma}) \frac{\partial u_{i_t}}{\partial n} \quad (4.156)$$

em que n representa a direcção normal à parede e $\eta(\dot{\gamma})$ traduz a viscosidade viscosimétrica (que poderá ser função da taxa de deformação local, dependendo do modelo viscoelástico escolhido). Para a célula adjacente à parede, a Eq. (4.156) traduz-se por (vide Figura 4.20)

$$\left(T_{i_t}\right)_f = \eta(\dot{\gamma}_f) \frac{u_{i_t,f} - u_{i_t,P'}}{\delta_f} \quad (4.157)$$

em que δ_f representa a distância da parede ao ponto P' (segundo a direcção perpendicular à parede) e $u_{i_t,f} \equiv u_{i,f}$ traduz a componente i da velocidade da parede (para uma parede estática será $u_{i_t,f} \equiv u_{i,f} = 0$). Desprezando uma eventual não ortogonalidade da célula adjacente à parede, o ponto P' coincidirá com o ponto P , pelo que poderá considerar-se legítima a aproximação $u_{i_t,P'} \cong u_{i_t,P}$.

A componente tangencial da velocidade no centro da célula P é calculada por

$$u_{i_t,P} = u_{i,P} - u_{n_i,P} = u_{i,P} - \left(\sum_{j=1}^3 u_{j,P} n_j \right) n_i \quad (4.158)$$

e a função da viscosidade viscosimétrica, $\eta(\dot{\gamma})$, deverá ser avaliada a $\dot{\gamma}_f = (u_{i,f} - u_{i,P}) / \delta_f$. Para os modelos reológicos usados nesta tese é possível obter expressões analíticas para $\eta(\dot{\gamma})$ (vide Tabela 3.1).

Considere-se a equação de conservação da quantidade de movimento na sua forma discreta, Eq. (4.31), reescrita para uma célula P adjacente a uma parede

$$a_P u_{i,P} = G(u_i) + \underline{a_F (u_{i,F} - u_{i,P})} - a_F (u_{i,F} - u_{i,P}) + B_f T_{i,f} \quad (4.159)$$

em que o operador $G(u_i) \equiv \sum a_F u_{i,F} + S'_{u_i}$ engloba todos os termos que não estão relacionados com a face fronteira f , e $B_f T_{i,f}$ traduz a força exercida sobre essa face. Devido à ausência de fluxos convectivos através da parede, o coeficiente a_F no termo sublinhado da Eq. (4.159) simplifica-se em $a_F = D_f \equiv (\eta_s + \eta_{p,f}) B_f / \delta_f$ (vide Eqs. (4.32) a (4.34)), traduzindo uma condutância difusiva que será avaliada de forma implícita. Assim sendo, esse termo deverá ser colocado no membro esquerdo da Eq. (4.159), obtendo-se

$$(a_p + D_f)u_{i,p} = G(u_i) + \underline{D_f u_{i,p} + B_f T_{i,f}} \quad (4.160)$$

em que o termo sublinhado traduz a contribuição da parede para o termo fonte, $S_{u_{i,f}}$. Usando a Eq. (4.157), conclui-se que

$$S_{u_{i,f}} = D_f u_{i,p} + B_f T_{i,f} = D_f \left[u_{i,p} + \bar{\eta}_f (u_{i,f} - u_{i,p}) \right] = \quad (4.161)$$

$$D_f \left[u_{i,f} + (1 - \bar{\eta}_f)(u_{i,p} - u_{i,f}) + n_i \bar{\eta}_f u_{n,p} \right]$$

em que a razão de viscosidades, $\bar{\eta}_f \equiv \eta(\dot{\gamma}_f)/(\eta_s + \eta_{p,f})$, representa o grau de reofluidificação do fluido para os modelos PTT e Giesekus, e toma o valor unitário para os modelos newtoniano, newtoniano generalizado, UCM, Oldroyd-B e White-Metzner (vide Tabela 4.1).

Para certos modelos viscoelásticos, tais como o modelo de Giesekus e de PTT (com $\xi \neq 0$), além da força tangencial que o fluido exerce sobre a parede, existirá também uma força normal. A componente perpendicular à parede do vector tensão pode ser escrita na forma (Oliveira, 2001)

$$T_n = -g(\dot{\gamma})\lambda\eta_p\dot{\gamma}^2 \quad (4.162)$$

em que a função $g(\dot{\gamma})$ é específica do modelo reológico usado, sendo proporcional ao coeficiente da segunda diferença de tensões normais: $g(\dot{\gamma}) = -\Psi_2(\dot{\gamma})/\lambda\eta_p$. Efectuando uma manipulação algébrica semelhante à descrita acima, obtém-se uma expressão mais genérica que a Eq. (4.161), válida para todos os modelos reológicos considerados nesta tese,

$$S_{u_{i,f}} = D_f u_{i,p} + B_f \left(T_{t_i} + T_{n_i} \right) = \quad (4.163)$$

$$D_f \left[u_{i,f} + (1 - \bar{\eta}_f)(u_{i,p} - u_{i,f}) + n_i \left(\bar{\eta}_f u_{n,p} \pm g(\dot{\gamma}_f)\lambda\delta_f\dot{\gamma}_f^2 \right) \right]$$

Quando a parede se encontra na direcção positiva de ζ_f , tal como ilustrado na Figura 4.20, deverá considerar-se o sinal negativo no termo da Eq. (4.163) que é precedido pelo símbolo \pm . Na situação contrária, em que a parede se encontra na direcção negativa de ζ_f , deverá considerar-se o sinal positivo.

Para os modelos de fluido newtoniano, newtoniano generalizado, UCM, Oldroyd-B e White-Metzner a razão de viscosidades é $\bar{\eta} = 1$ e a função $g(\dot{\gamma})$ é nula. Para o modelo de Giesekus será $\bar{\eta} = \eta(\dot{\gamma})/(\eta_s + \eta_p)$ e $g(\dot{\gamma}) = -\Psi_2(\dot{\gamma})/\lambda\eta_p$, em que a viscosidades viscosimétrica e o coeficiente da segunda diferença de tensões normais são calculados pelas expressões apresentadas na Tabela 3.1.

Relativamente ao modelo PTT, as expressões de $\eta(\dot{\gamma})$ e $\Psi_2(\dot{\gamma})$ necessárias à Eq. (4.163) serão deduzidas no próximo capítulo, onde se analisa teoricamente o escoamento de Couette e de Poiseuille para um fluido descrito por este modelo reológico.

4.9 Resumo

Neste capítulo descreveu-se o algoritmo de cálculo, baseado no método dos volumes finitos, usado na simulação numérica das equações de balanço e constitutivas. A discretização do termo convectivo das equações de transporte foi analisado em maior detalhe, tendo-se descrito a estratégia usada na implementação de métodos de alta resolução segundo a metodologia NVSF.

*“Do not worry about your difficulties in Mathematics.
I can assure you mine are still greater.”*

Albert Einstein (1879-1955)

Capítulo 5

Solução analítica para o escoamento de um fluido PTT num canal e num tubo[§]

Neste capítulo apresentam-se as soluções analíticas referentes ao escoamento de Couette e de Poiseuille, em estado estacionário, para um fluido viscoelástico descrito pelo modelo PTT completo, na sua versão com uma função linear das tensões. As expressões aqui deduzidas são novas, e incluem a variação, segundo a direcção perpendicular ao escoamento, das componentes do tensor das tensões, da pressão, da viscosidade e da velocidade axial. Para o escoamento simples de Couette, apresentam-se as expressões das funções materiais deste modelo reológico. Também se demonstra que, neste escoamento simples, as condições que dão origem a um máximo na curva da tensão de corte em função da taxa de deformação, estão relacionadas com as condições críticas para a ocorrência de um escoamento de Poiseuille instável.

5.1 Introdução

Phan-Thien e Tanner (1977) desenvolveram uma equação constitutiva, baseada em modelos moleculares, com boa capacidade de previsão do comportamento reológico de polímeros fundidos, mas que também pode ser aplicada a soluções poliméricas concentradas ou semi-diluídas. Este modelo, apresentado na Secção 3.4.4, ficou conhecido pelas iniciais dos seus autores, PTT, sendo usado com frequência em

[§] Este capítulo é baseado no artigo “Alves, Pinho e Oliveira (2001c). Study of steady pipe and channel flows of a single-mode Phan-Thien-Tanner fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 101: 55-76”.

estudos numéricos do escoamento de fluidos viscoelásticos em geometrias complexas.

Em condições isotérmicas, o modelo PTT é descrito pela Eq. (3.47), aqui transcrita

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p \\ \boldsymbol{\tau}_s &= \eta_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \\ Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}_p) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p + \frac{\xi}{2} \lambda \{ \dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} \} &= \eta_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}\end{aligned}$$

Neste capítulo irá considerar-se o caso particular da Eq. (3.47) em que a contribuição do solvente para a tensão total é nula, $\boldsymbol{\tau}_s = 0$, uma situação *natural* quando se considera o escoamento de um polímero fundido. Nessas condições, o modelo PTT resulta na expressão

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \frac{\xi}{2} \lambda \{ \dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} \} = \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}} \quad (5.1)$$

tendo-se optado por eliminar o índice p na viscosidade do polímero, por uma questão de simplicidade. O qualitativo “PTT completo”, aqui usado, refere-se ao facto do coeficiente ξ não ser nulo.

Tal como se referiu na Secção 3.4.4, existem duas formulações para a função $Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau})$. Neste capítulo irá considerar-se apenas a versão linearizada do coeficiente da tensão,

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) = 1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta} \text{tr } \boldsymbol{\tau} \quad (5.2)$$

O estudo do escoamento de fluidos viscoelásticos em tubagens e em canais é relevante para várias áreas do conhecimento, como por exemplo na indústria de processamento de polímeros (Tadmor e Gogos, 1979). A obtenção de soluções analíticas é extremamente útil em diversas situações, tais como:

- (i) Utilização como condições fronteira em simulações numéricas (como se descreve na Secção 4.8), ou como método de aferição da precisão dos resultados dessas simulações;
- (ii) Validação de resultados experimentais, calibração de instrumentos de medida e desenvolvimento de técnicas experimentais para determinação de propriedades físicas dos fluidos (viscosímetros, reómetros, etc.);

(iii) Verificação de hipóteses assumidas no desenvolvimento da teoria do escoamento de fluidos viscosos (e.g., hipótese de não deslizamento numa parede sólida).

Recentemente, Oliveira e Pinho (1999a) deduziram as expressões analíticas para o escoamento de Poiseuille, num tubo e num canal, para a versão simplificada do modelo PTT ($\xi = 0$). Choi *et al.* (1988), Lim e Schowalter (1987) e Schleiniger e Weinacht (1991) fizeram um estudo semelhante para o modelo de Giesekus. De forma idêntica, Deiber e Santa Cruz (1984) estudaram analiticamente o escoamento de um fluido de Oldroyd a 8 constantes, deduzindo o perfil de velocidade num tubo. Kolkka *et al.* (1988) deduziram o perfil de velocidade teórico para o escoamento desenvolvido num canal, para um fluido de Johnson-Segalman (JS) com solvente newtoniano. Mais recentemente, Oliveira (2002) obteve a solução analítica para o escoamento completamente desenvolvido de um fluido reofluidificante descrito pelo modelo FENE-P.

Para equações constitutivas viscoelásticas mais simples, como o modelo UCM ou Oldroyd-B, o perfil de velocidades e o gradiente de pressão axial em escoamento desenvolvido num tubo ou num canal, são idênticos aos de um fluido newtoniano (vide Shah e London, 1978). Para fluidos newtonianos generalizados sugere-se a consulta de Bird *et al.* (1987a) e de Skelland (1967), onde são apresentadas diversas soluções analíticas para este tipo de fluidos inelásticos.

Neste capítulo faz-se uma generalização, para o modelo PTT completo, do trabalho teórico desenvolvido em Oliveira e Pinho (1999a). Apenas é considerada a versão linear do coeficiente da tensão, uma vez que não foi possível obter uma solução analítica para a forma exponencial do modelo PTT completo. Antes de se deduzirem as soluções analíticas para o escoamento completamente desenvolvido num tubo e num canal, é conveniente começar pela obtenção das funções materiais deste modelo, em escoamento reométrico de corte simples estacionário.

5.2 Funções materiais em escoamento de corte simples estacionário

Considere-se um escoamento de corte simples, em que o fluido se encontra confinado entre duas placas paralelas, uma das quais está fixa e a outra em movimento, com velocidade U , como se ilustra na Figura 3.1. A componente axial

da velocidade (única componente não nula do vector velocidade) varia linearmente com a distância à placa estacionária,

$$u(y) = \dot{\gamma} y \quad (5.3)$$

em que $\dot{\gamma} \equiv du/dy$ representa a taxa de deformação. Para este escoamento simples, a equação constitutiva (5.1) simplifica-se em

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{xx} = \lambda(2 - \xi) \dot{\gamma} \tau_{xy} \quad (5.4)$$

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{yy} = -\lambda \xi \dot{\gamma} \tau_{xy} \quad (5.5)$$

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{xy} = \eta \dot{\gamma} + \lambda \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \dot{\gamma} \tau_{yy} - \frac{\lambda \xi}{2} \dot{\gamma} \tau_{xx} \quad (5.6)$$

sendo a função $Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau})$ expressa pela Eq. (5.2), em que o traço do tensor das tensões é definido por $\text{tr } \boldsymbol{\tau} = \tau_{xx} + \tau_{yy}$. Como o escoamento é plano, as tensões τ_{xx} , τ_{yz} e τ_{zz} são nulas, assim como as componentes v e w da velocidade. Dividindo a Eq. (5.5) pela Eq. (5.4), obtém-se a seguinte relação entre tensões normais,

$$\tau_{yy} = -\frac{\xi}{2 - \xi} \tau_{xx} \quad (5.7)$$

A função $Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau})$ poderá assim ser expressa apenas em função de τ_{xx} , na forma

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) = 1 + \frac{2\lambda\xi(1 - \xi)}{\eta(2 - \xi)} \tau_{xx} \quad (5.8)$$

Explicitando τ_{xy} na Eq. (5.4) e substituindo-a na Eq. (5.6), e usando a Eq. (5.7), obtém-se a seguinte expressão para a componente normal da tensão,

$$\tau_{xx}^3 + a_1 \tau_{xx}^2 + a_2 \tau_{xx} + a_3 = 0 \quad (5.9)$$

de coeficientes,

$$a_1 = \frac{\eta(2 - \xi)}{\varepsilon \lambda(1 - \xi)} \quad (5.10)$$

$$a_2 = \frac{\eta^2(2 - \xi)^3 \dot{\gamma}^2 \xi}{4\varepsilon^2(1 - \xi)^2} + \frac{\eta^2(2 - \xi)^2}{4\varepsilon^2 \lambda^2(1 - \xi)^2} \quad (5.11)$$

$$a_3 = -\frac{\eta^3(2 - \xi)^3 \dot{\gamma}^2}{4\varepsilon^2 \lambda(1 - \xi)^2} \quad (5.12)$$

A solução real desta equação cúbica pode ser obtida usando a fórmula de Cardan-Tartaglia (vide, Madureira, 1948), resultando em

$$\tau_{xx}(\dot{\gamma}) = \sqrt[3]{-\frac{\beta}{2} + \sqrt{\frac{\beta^2}{4} + \frac{\alpha^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{\beta}{2} - \sqrt{\frac{\beta^2}{4} + \frac{\alpha^3}{27}}} - \frac{a_1}{3} \quad (5.13)$$

com

$$\alpha = a_2 - \frac{a_1}{3} \quad (5.14)$$

$$\beta = a_3 - \frac{a_1 a_2}{3} + \frac{2a_1^3}{27} \quad (5.15)$$

A Eq. (5.13), apesar da aparente complexidade, traduz uma relação explícita da tensão normal τ_{xx} na taxa de deformação, $\dot{\gamma}$, e nos parâmetros do modelo PTT.

A tensão de corte, τ_{xy} , pode ser obtida a partir da Eq. (5.6), resultando em

$$\tau_{xy}(\dot{\gamma}) = \frac{\eta - \lambda \xi \tau_{xx}}{1 + [2\varepsilon \lambda (1 - \xi) / \eta (2 - \xi)] \tau_{xx}} \dot{\gamma} \quad (5.16)$$

tendo-se optado por exprimi-la em função da tensão τ_{xx} , a qual é calculada a partir da Eq. (5.13).

As funções materiais para este modelo reológico podem ser obtidas directamente das respectivas definições,

$$\eta(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} = \frac{\eta - \lambda \xi \tau_{xx}}{1 + [2\varepsilon \lambda (1 - \xi) / \eta (2 - \xi)] \tau_{xx}} \quad (5.17)$$

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{xx} - \tau_{yy}}{\dot{\gamma}^2} = \frac{2}{2 - \xi} \frac{\tau_{xx}}{\dot{\gamma}^2} \quad (5.18)$$

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{yy} - \tau_{zz}}{\dot{\gamma}^2} = -\frac{\xi}{2 - \xi} \frac{\tau_{xx}}{\dot{\gamma}^2} \quad (5.19)$$

Para $\xi = 0$ recupera-se o modelo SPTT (PTT simplificado), o qual foi analisado em detalhe por Oliveira e Pinho (1999a). A Eq. (5.19) mostra que o modelo SPTT origina um valor nulo para o coeficiente da segunda diferença de tensões normais ($\Psi_2(\dot{\gamma}) = 0$). O modelo SPTT apresenta um comportamento reofluidificante, para valores moderados a elevados da taxa de deformação, quer para a viscosidade de corte, $\eta(\dot{\gamma})$, quer para o primeiro coeficiente de tensões normais, $\Psi_1(\dot{\gamma})$. Este comportamento pode ser observado nas linhas contínuas sem símbolos representadas, em escala log-log, na Figura 5.1: para a tensão de corte, quando a taxa de deformação é baixa ($\lambda \dot{\gamma} < 1$) observa-se um declive unitário, o qual decresce com o aumento de $\dot{\gamma}$; de forma semelhante, observa-se um declive de 2, nas curvas de τ_{xx} a baixos valores de $\dot{\gamma}$, o qual decresce com o aumento de $\dot{\gamma}$ (reofluidificação em Ψ_1).

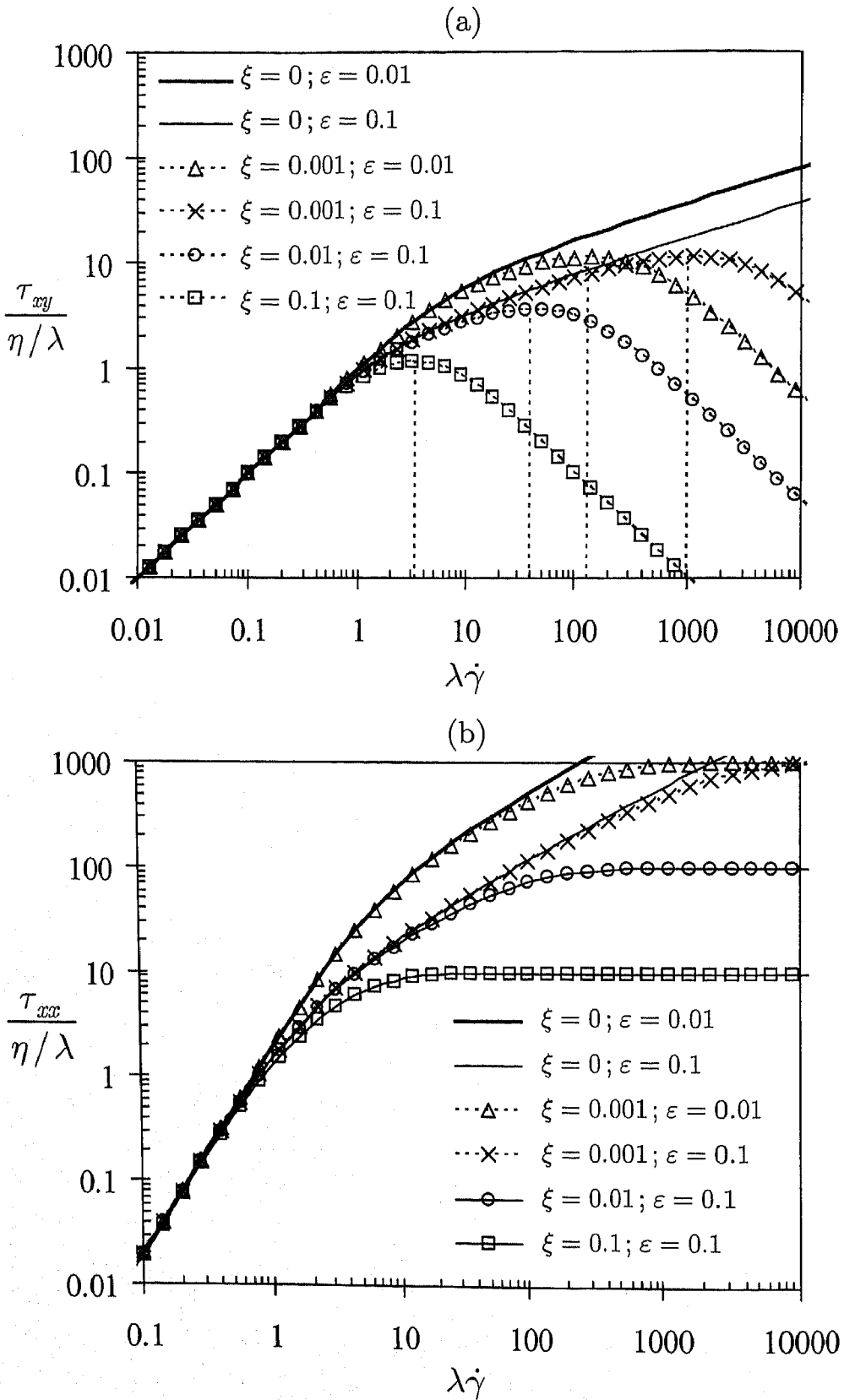


Figura 5.1: Variação da tensão de corte τ_{xy} (a) e da tensão normal τ_{xx} (b) com a taxa velocidade de deformação, para o escoamento de Couette de um fluido PTT.

Para a versão completa do modelo PTT ($\xi \neq 0$), observa-se um comportamento não monótono na tensão de corte, de forma semelhante ao observado para um fluido de Johnson-Segalman por Español *et al.* (1996) e por Georgiou e Vlassopoulos (1998). Na Figura 5.1 verifica-se que as curvas da tensão de corte são fortemente influenciadas pelo parâmetro ξ . Acima de um valor crítico da taxa de deformação ($\dot{\gamma}_c$), definido pelo ponto em que a curva da tensão de corte atinge o máximo, a refluidificação do fluido é de tal forma forte que $d[\log \eta(\dot{\gamma})]/d(\log \dot{\gamma})$ torna-se inferior a -1 . O valor da taxa de deformação crítica depende de ξ e ε , tendo sido deduzida a seguinte relação

$$\lambda \dot{\gamma}_c = \frac{\varepsilon(1-\xi) + \xi(2-\xi)}{[\xi(2-\xi)]^{3/2}} \quad (5.20)$$

que mostra como o valor crítico $\dot{\gamma}_c$ diminui à medida que ξ aumenta e ε diminui.

Os pontos críticos nas curvas da tensão de corte estão identificados na Figura 5.1 (a) pelas linhas verticais, representadas a traço interrompido. Os valores máximos da tensão de corte são independentes de ε , como se ilustra na Figura 5.1 (a). Os correspondentes valores máximos de τ_{xx} , para a taxa de deformação crítica, podem ser calculados por

$$\left(\frac{\tau_{xx}}{\eta/\lambda} \right)_{\max} = \frac{1}{2\sqrt{\xi(2-\xi)}} \quad (5.21)$$

A Eq. (5.20) traduz um resultado importante, relativo à estabilidade de escoamentos de corte do fluido PTT. Esse resultado será deduzido de uma forma simples na próxima secção, onde se analisa teoricamente o escoamento desenvolvido em tubos e entre duas placas paralelas (canal).

5.3 Escoamento desenvolvido em tubos e entre duas placas paralelas

Nesta secção analisam-se simultaneamente os escoamentos completamente desenvolvidos num tubo e num canal (formado pela justaposição de duas placas paralelas). Por conveniência introduz-se uma notação compacta idêntica à usada em Oliveira e Pinho (1999a): o índice j toma os valores 0 (placas paralelas) ou 1 (tubo) e o parâmetro k os valores 3/2 (placas paralelas) ou 2 (tubo).

Considere-se o escoamento entre duas placas paralelas (tubo) com um espaçamento (diâmetro) $2H$, em que a coordenada transversal e a respectiva

componente da velocidade são y e v . O sistema de coordenadas escolhido está centrado ($y = 0$) no plano de simetria (eixo central), como se ilustra na Figura 5.2. Nas paredes ($y = \pm H$) verifica-se a condição de não deslizamento, traduzida matematicamente por $u = v = 0$. Para escoamentos completamente desenvolvidos verifica-se que o gradiente de pressão ($\partial p / \partial x$) é constante, e os perfis da componente axial da velocidade e das componentes não nulas do tensor das tensões dependem apenas do eixo de coordenadas transversal, y . Aplicando a equação da continuidade, obtém-se um perfil nulo para a componente transversal da velocidade: $v = 0$.

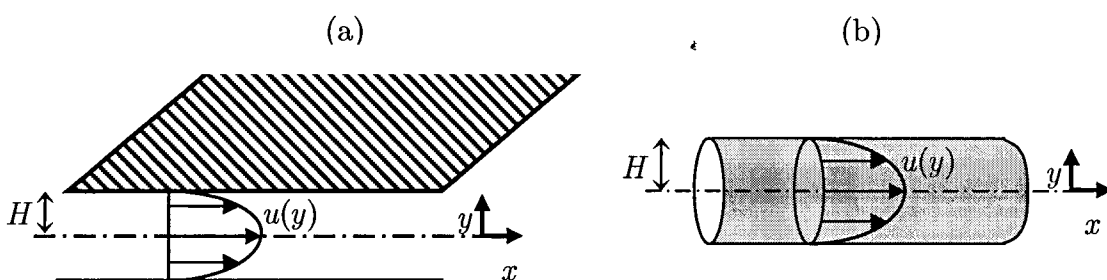


Figura 5.2: Ilustração do escoamento completamente desenvolvido entre duas placas paralelas (a) e num tubo (b). Identificação de algumas variáveis relevantes.

A aplicação da equação de conservação da quantidade de movimento (3.2) segundo a direcção x resulta em

$$\tau_{xy} = (\partial p / \partial x) \frac{y}{2j} \quad (5.22)$$

concluindo-se assim que a tensão de corte varia linearmente com y , independentemente do modelo reológico considerado.

A equação constitutiva (5.1) para um escoamento de Poiseuille reduz-se ao mesmo conjunto de expressões obtidas para o escoamento de Couette, Eqs. (5.4)-(5.6). Contudo, nesta situação é conveniente substituir $\dot{\gamma}$ pelo gradiente de velocidade, du/dy , uma vez que agora já não assume um valor constante, e a componente axial da velocidade é uma das variáveis de interesse. As Eqs. (5.4)-(5.6) tomam a forma

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{xx} = \lambda(2 - \xi) \tau_{xy} \frac{du}{dy} \quad (5.23)$$

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{yy} = -\lambda \xi \frac{du}{dy} \tau_{xy} \quad (5.24)$$

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{xy} = \eta \frac{du}{dy} + \lambda \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \tau_{xy} \frac{du}{dy} - \frac{\lambda \xi}{2} \tau_{xx} \frac{du}{dy} \quad (5.25)$$

sendo a função $Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau})$ novamente definida pela Eq. (5.8). Fazendo uso da Eq. (5.7), é possível reescrever a Eq. (5.25) na forma

$$Y(\text{tr } \boldsymbol{\tau}) \tau_{xy} = \eta \frac{du}{dy} - \lambda \xi \tau_{xx} \frac{du}{dy} \quad (5.26)$$

que, após divisão pela Eq. (5.23), conduz à seguinte expressão

$$\lambda \xi \tau_{xx}^2 - \eta \tau_{xx} + \lambda(2 - \xi) \tau_{xy} = 0 \quad (5.27)$$

Esta equação quadrática possui duas raízes reais distintas,

$$\tau_{xx} = \frac{\eta}{2\lambda\xi} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\lambda^2\xi(2-\xi)\tau_{xy}}{\eta^2}} \right] \quad (5.28)$$

sendo apenas uma delas fisicamente aceitável. A equação de conservação da quantidade de movimento segundo x , Eq. (5.22), mostra que no plano (eixo) de simetria ($y = 0$) a tensão de corte é nula. Da Eq. (5.23) conclui-se que para $y = 0$ a tensão normal τ_{xx} também é nula, pelo que a solução da Eq. (5.27) com significado físico é a referente ao sinal negativo em (5.28),

$$\tau_{xx} = \frac{\eta}{2\lambda\xi} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{4\lambda^2\xi(2-\xi)\tau_{xy}}{\eta^2}} \right] \quad (5.29)$$

Por uma questão de simplicidade, e para tornar as equações mais compactas, é conveniente definir o seguinte parâmetro adimensional,

$$a \equiv \frac{-2^{1-j} \lambda (\partial p / \partial x) H}{\eta} \sqrt{\xi(2-\xi)} \quad (5.30)$$

que mede a elasticidade do escoamento, tendo o significado de um número de Débora modificado, baseado numa velocidade característica obtida a partir do gradiente de pressões (ver Eq. (5.41), mais adiante).

Usando as Eqs. (5.22) e (5.30) é possível reescrever a Eq. (5.29) numa forma mais compacta,

$$\tau_{xx} = \frac{\eta}{2\lambda\xi} \left[1 - \sqrt{1 - (ay')^2} \right] \quad (5.31)$$

em que $y' \equiv y/H$ representa a coordenada transversal na forma adimensional. O gradiente de pressões, $(\partial p / \partial x)$, é negativo para escoamento desenvolvido. Como

$0 \leq \xi < 2$ conclui-se que o parâmetro adimensional a , definido na Eq. (5.30), representa um valor real positivo. Para além da importância do resultado em si, a Eq. (5.31) ilustra que $|ay'| \leq 1$ por forma à expressão da tensão normal τ_{xx} conduzir a um valor real. Este ponto é muito importante, e será analisado em detalhe na Secção 5.4. Para já basta admitir que $a \leq 1$, por forma a garantir uma solução fisicamente aceitável para τ_{xx} (caso contrário, τ_{xx} seria imaginário).

As Eqs. (5.31), (5.22) e (5.7) traduzem as expressões analíticas pretendidas para as componentes não nulas do tensor das tensões. Uma forma alternativa, e conveniente, de representar estas expressões consiste em normalizá-las usando, por exemplo, a tensão de corte na parede para o fluido newtoniano (ou UCM), $\tau_w = 2k\eta U/H$. Assim, as componentes não nulas do tensor das tensões podem ser expressas na forma adimensional,

$$T_{xx} = \frac{\tau_{xx}}{2k\eta U/H} = \frac{1 - \sqrt{1 - (ay')^2}}{4k\xi De} \quad (5.32)$$

$$T_{yy} = \frac{\tau_{yy}}{2k\eta U/H} = -\frac{1 - \sqrt{1 - (ay')^2}}{4k(2 - \xi)De} \quad (5.33)$$

$$T_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{2k\eta U/H} = -\frac{ay'}{4kDe\sqrt{\xi(2 - \xi)}} \quad (5.34)$$

sendo o número de Débora definido na forma habitual, $De = \lambda U/H$.

Substituindo as Eqs. (5.31), (5.22) e (5.7) na Eq. (5.23) obtém-se, após alguma manipulação algébrica, uma expressão para a variação transversal da taxa de deformação. Essa expressão pode ser integrada, obtendo-se o perfil transversal de u . No entanto, para simplificar as equações, é conveniente definir um novo parâmetro adimensional χ , que combina os parâmetros ε e ξ na forma,

$$\chi \equiv \frac{\xi(2 - \xi)}{\varepsilon(1 - \xi)} \quad (5.35)$$

podendo-se traduzir o perfil transversal de $\dot{\gamma}$ por,

$$\dot{\gamma} = \frac{du}{dy} = \frac{2^{j-1}\eta}{\lambda^2\xi(2 - \xi)(\partial p/\partial x)H} \left[\left(1 + \frac{2}{\chi}\right) \left(\frac{1}{y'} - \frac{\sqrt{1 - (ay')^2}}{y'}\right) - \frac{a^2 y'}{\chi} \right], \quad (5.36)$$

ou, em termos de variáveis adimensionais por,

$$\Gamma(y') = \frac{\dot{\gamma}}{2kU/H} = -\frac{1}{2kDe\sqrt{\xi(2-\xi)}} \left[\left(1 + \frac{2}{\chi}\right) \left(\frac{1}{y'} - \frac{\sqrt{1-(ay')^2}}{y'} \right) - \frac{a^2 y'}{\chi} \right]. \quad (5.37)$$

A variação da viscosidade segundo a direcção transversal obtém-se directamente da definição, e fazendo uso das Eqs. (5.22) e (5.36),

$$\mu(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} \Rightarrow \frac{\mu(\dot{\gamma})}{\eta} = \frac{a^2 y'}{2 \left[\left(1 + 2/\chi\right) \left[1/y' - \left(\sqrt{1-(ay')^2} \right) / y' \right] - (a^2 y' / \chi) \right]} \quad (5.38)$$

O perfil de velocidades obtém-se por integração da Eq. (5.36), resultando em

$$u(y') = \int_0^y \dot{\gamma} \, dy = H \int_0^{y'} \dot{\gamma} \, dy' = \frac{2^{j-1} \eta}{\lambda^2 \xi (2-\xi) (\partial p / \partial x)} \times \left(1 + \frac{2}{\chi}\right) \left[\ln \frac{1 + \sqrt{1-(ay')^2}}{1 + \sqrt{1-a^2}} + \sqrt{1-a^2} - \sqrt{1-(ay')^2} \right] + \frac{(\partial p / \partial x) H^2}{2^j \eta \chi} [1 - y'^2] \quad (5.39)$$

Esta expressão traduz a solução analítica para o escoamento de um fluido PTT num canal ou num tubo, para um determinado gradiente de pressão aplicado. Trata-se de um resultado inédito, que é apresentado de forma explícita e totalmente analítica, com a velocidade a depender do gradiente de pressão aplicado. Contudo, em aplicações práticas é frequente conhecer-se o caudal de escoamento ou, de forma equivalente, a correspondente velocidade média, U , sendo o gradiente de pressão desconhecido. Assim, é conveniente normalizar a Eq. (5.39) na forma,

$$\frac{u(y')}{U} = -\frac{4k U_N}{a^2 U} \left[1 + \frac{2}{\chi}\right] \left[\ln \frac{1 + \sqrt{1-(ay')^2}}{1 + \sqrt{1-a^2}} + \sqrt{1-a^2} - \sqrt{1-(ay')^2} \right] - \frac{2k U_N}{\chi U} [1 - y'^2] \quad (5.40)$$

O parâmetro U_N , usado na equação anterior, define-se por

$$U_N \equiv -\frac{(\partial p / \partial x) H^2}{2^{j+1} k \eta} \quad (5.41)$$

e representa a velocidade média que seria obtida para o escoamento de um fluido newtoniano de viscosidade η , sujeito ao mesmo gradiente de pressão, $(\partial p / \partial x)$. Uma vez que o fluido PTT exhibe um comportamento reofluidificante, facilmente se conclui que $0 \leq U_N / U \leq 1$.

O rácio U_N/U pode ser interpretado como um gradiente de pressão adimensional e, no caso de U ser conhecido, constitui uma incógnita do problema. O seu valor pode ser obtido por integração do perfil transversal de velocidade, usando a definição de velocidade média,

$$U \equiv \frac{1}{H^{j+1}} \int_0^H 2^j y^j u(y) dy \quad (5.42)$$

A integração do perfil de velocidades conduz a diferentes expressões para o escoamento entre duas placas paralelas e num tubo. Assim, para o escoamento completamente desenvolvido entre duas placas paralelas ($j = 0$; $k = 3/2$), obtém-se

$$\left(\frac{U_N}{U}\right)^{-1} = \frac{6}{a^2} \left[1 + \frac{2}{\chi}\right] \left[1 - \frac{\pi}{4a} + \frac{1}{2a} \operatorname{arctg}\left(\frac{\sqrt{1-a^2}}{a}\right) - \frac{\sqrt{1-a^2}}{2}\right] - \frac{2}{\chi} \quad (5.43)$$

Para o escoamento desenvolvido num tubo, a integração da Eq. (5.42) conduz a

$$\left(\frac{U_N}{U}\right)^{-1} = \frac{4}{a^2} \left[1 + \frac{2}{\chi}\right] \left[1 - \frac{2}{3} \sqrt{1-a^2} - \frac{2}{3} \frac{1 - \sqrt{1-a^2}}{a^2}\right] - \frac{2}{\chi} \quad (5.44)$$

Deve salientar-se que as Eqs. (5.43) e (5.44) não traduzem relações explícitas em U_N/U , uma vez que o parâmetro adimensional a também é função de U_N/U . Partindo das definições de a e U_N , Eqs. (5.30) e (5.41), demonstra-se facilmente que U_N/U e a estão relacionados pela expressão

$$a = 4k \frac{U_N}{U} De \sqrt{\varepsilon(1-\xi)} \sqrt{\chi}. \quad (5.45)$$

Esta relação sugere que sejam usados dois novos parâmetros adimensionais, nomeadamente o número de Débora modificado, $De^* = De \sqrt{\varepsilon(1-\xi)}$, e o parâmetro χ , definido pela Eq. (5.35). Estes parâmetros não são adequados no caso limite do modelo Johnson-Segalman ($\varepsilon = 0$), para o qual é preferível trabalhar directamente com De e ξ .

As Eqs. (5.43) e (5.44) traduzem funções não lineares nos parâmetros adimensionais do modelo, podendo-se escrever na forma compacta

$$\frac{U_N}{U} = f(De^*, \chi). \quad (5.46)$$

A solução desta equação não linear, ou das correspondentes Eqs. (5.43) e (5.44), tem de ser obtida usando métodos numéricos, como por exemplo o método da bissecção, o método de Newton-Raphson, ou outros (Pina, 1995). Após se ter

calculado U_N/U para os parâmetros pretendidos, o cálculo do perfil de velocidades é imediato, bastando para tal usar a Eq. (5.40).

No cálculo de problemas de engenharia, envolvendo escoamentos de fluidos poliméricos em condutas, é frequente o interesse no cálculo da queda de pressão no tubo, por exemplo para efectuar o dimensionamento de bombas. Para tal é vantajoso conhecer-se uma expressão para fRe , em que f representa o factor de fricção de Fanning e Re o número de Reynolds, aqui definidos na forma

$$f \equiv - \frac{2^{1-j} (\partial p / \partial x) H}{\rho U^2} \quad (5.47)$$

$$Re \equiv \frac{2^j \rho U H}{\eta} \quad (5.48)$$

Usando estas definições, e após alguma manipulação algébrica, obtém-se o resultado pretendido

$$fRe = 2^{j+2} k \frac{U_N}{U} \quad (5.49)$$

Esta expressão mostra que a variação de fRe com De , ε e ξ é proporcional à correspondente variação do parâmetro U_N/U . Assim, não é necessário estudar o comportamento de fRe em separado, bastando analisar a dependência de U_N/U com os parâmetros do modelo.

5.4 Instabilidade constitutiva

A obtenção de uma solução fisicamente aceitável para o perfil de tensões normais τ_{xx} , Eq. (5.31), está sujeita à condição $|ay'| \leq 1$, como se referiu na secção anterior. Como $|y'| \leq 1$ conclui-se que

$$|ay'| \leq 1 \Rightarrow a \leq 1 \quad (5.50)$$

Como se verá adiante, a relação $a = 1$ corresponde às condições críticas em que surge uma instabilidade constitutiva, surgindo um máximo local na variação da tensão de corte com a taxa de deformação para um escoamento de Couette simples (ver Secção 5.2), de forma semelhante à descrita para o modelo JS por Español *et al.* (1996) e por Georgiou e Vlassopoulos (1998).

O valor máximo da taxa de deformação ocorre junto à parede da conduta, i.e., para $y = H$. Denotando esse valor por $\dot{\gamma}_{\max} \equiv |\dot{\gamma}_{y=H}|$, e usando a Eq. (5.36) obtém-se a expressão

$$\dot{\gamma}_{\max} = -\frac{2^{j-1}\eta}{\lambda^2\xi(2-\xi)(\partial p/\partial x)H}\left[\left(1+\frac{2}{\chi}\right)\left(1-\sqrt{1-a^2}\right)-\frac{a^2}{\chi}\right] \quad (5.51)$$

O sinal negativo foi adicionado à equação anterior por forma a obter-se um valor positivo de $\dot{\gamma}_{\max}$ na parede. Impondo a condição de estabilidade crítica à equação anterior, $a = 1$ (vide Eq. (5.50)), e usando a definição do parâmetro adimensional a , Eq. (5.30), obtém-se

$$\dot{\gamma}_{\max,c} = \frac{1}{\lambda\sqrt{\xi(2-\xi)}}\left[1+\frac{1}{\chi}\right] \quad (5.52)$$

que traduz o valor máximo da velocidade de deformação (junto à parede da conduta) nas condições críticas, $a = 1$. A Eq. (5.52) pode ser escrita na forma alternativa,

$$\lambda\dot{\gamma}_{\max,c} = \frac{\varepsilon(1-\xi) + \xi(2-\xi)}{[\xi(2-\xi)^{3/2}]} \quad (5.53)$$

que é igual à Eq. (5.20) para $\lambda\dot{\gamma}_c$, apresentada na Secção 5.2 e ilustrada na Figura 5.1 (a). Desta forma, conclui-se que o valor crítico da taxa de deformação ($\dot{\gamma}_c$) para o qual ocorre o máximo na curva τ_{xy} vs. $\dot{\gamma}$, num escoamento de corte simples (Figura 5.1-a), é o mesmo valor máximo admissível para a velocidade de deformação ($\dot{\gamma}_{\max,c}$) no caso do escoamento numa conduta. Acima deste valor máximo de taxa de deformação, as equações de balanço para o escoamento numa conduta não conduzem a uma solução real. Assim, a instabilidade constitutiva verificada para o modelo PTT, que se deve a uma variação não monótona da tensão de corte num escoamento de corte simples, está relacionada com o aparecimento de uma solução imaginária para o caso mais complexo do escoamento de Poiseuille entre duas placas paralelas ou num tubo. Como a instabilidade constitutiva está relacionada com o aparecimento de um máximo na curva da tensão de corte, verifica-se que para valores não nulos de ξ essa instabilidade ocorrerá sempre para um determinado valor de $\lambda\dot{\gamma}_c$, como se mostra na Figura 5.1 (a). Para se ilustrar inequivocamente este resultado, apresenta-se na Figura 5.3 a dependência de $\lambda\dot{\gamma}_c$ com os parâmetros materiais ε e ξ do modelo PTT. Verifica-se que o aumento do parâmetro ε tende a alargar a gama em que a solução calculada pelo modelo PTT é estável (i.e., $\lambda\dot{\gamma}_c$ maiores). Em contrapartida, o aumento do parâmetro ξ conduz a uma diminuição de $\lambda\dot{\gamma}_c$, verificando-se ainda que para qualquer valor de ξ não nulo existe sempre um

limite máximo de $\lambda\dot{\gamma}$ a partir do qual deixa de existir uma solução estável. Para o modelo SPTT ($\xi = 0$) a Eq. (5.20) conduz a $\lambda\dot{\gamma}_c \rightarrow \infty$, o que indica que a solução é estável para qualquer valor de $\dot{\gamma}$, de acordo com o descrito em Oliveira e Pinho (1999a).

Embora o parâmetro ε tenha um efeito estabilizador, uma vez que implica um aumentando do valor de $\lambda\dot{\gamma}_c$, verifica-se não ter qualquer influência no valor crítico do gradiente de pressão, que pode ser calculado pela expressão

$$\frac{(-\partial p / \partial x)_c H}{\eta / \lambda} = \frac{2^{j-1}}{\sqrt{\xi(2-\xi)}} \quad (5.54)$$

obtida a partir das Eqs. (5.51) e (5.53) para as condições críticas ($a = 1$).

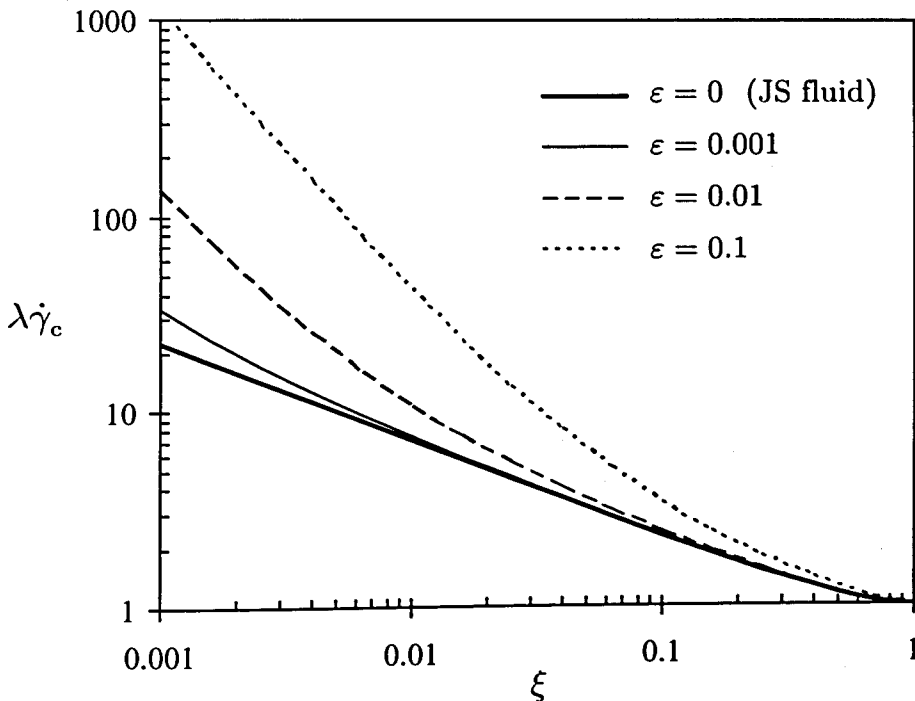


Figura 5.3: Variação da taxa de deformação crítica com os parâmetros materiais do modelo PTT.

A condição de estabilidade crítica pode ser apresentada numa forma alternativa, envolvendo quantidades globais médias e números adimensionais. Nesta forma é possível obter expressões que ilustram melhor, do ponto de vista físico, o aparecimento da instabilidade constitutiva para o escoamento entre placas paralelas e tubos. A Eq. (5.46) indica que a queda de pressão adimensional, U_N/U , depende de dois parâmetros adimensionais, De^* e χ . Na condição limite de estabilidade crítica, a relação adicional $a = 1$ implica que apenas existirá um grupo

adimensional independente, De^* ou χ . Manipulando algebricamente as Eqs. (5.43) e (5.45), e usando a condição de estabilidade crítica, $a = 1$, é possível obter a seguinte relação para o escoamento entre duas placas paralelas,

$$\left(\frac{U}{U_N}\right)_c \sqrt{\frac{1}{10 - 3\pi} \left[\left(\frac{U}{U_N}\right)_c - 6 \left(1 - \frac{\pi}{4}\right) \right]} = 6De_c^* \quad (5.55)$$

em que De_c^* e $(U_N/U)_c$ denotam valores críticos de De^* e U_N/U , que separam as regiões com soluções admissíveis e com soluções imaginárias das equações de balanço e constitutivas. Representando a Eq. (5.55) num gráfico de U_N/U vs. De^* obtém-se a linha espessa, representada na Figura 5.4. Esta figura pode ser interpretada como um mapa de estabilidade, já que a região abaixo da linha *grossa* não é fisicamente admissível (região *instável*), pelo que as soluções terão necessariamente que estar localizadas acima desta linha crítica, obtida a partir da Eq. (5.55). Na Figura 5.4 ilustra-se a influência dos parâmetros materiais ε e ξ no valor de U_N/U : aumentando o valor de ξ reduz-se o rácio U_N/U e restringe-se a gama de soluções admissíveis; em contrapartida, o aumento do parâmetro ε tende a estabilizar o escoamento.

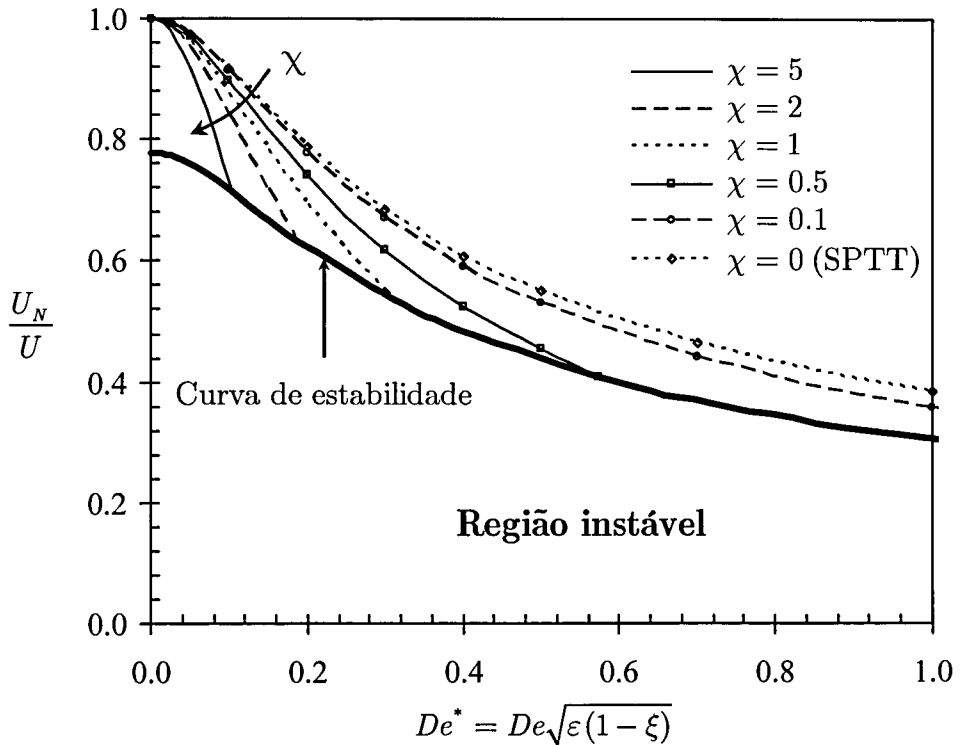


Figura 5.4: Mapa de estabilidade do modelo PTT e dependência de U_N/U com De^* e χ para o escoamento de Poiseuille entre duas placas paralelas.

No limite, quando De^* tende para zero (elasticidade desprezável), a razão de velocidades crítica (ou queda de pressão) tende para $(U_N/U)_c \rightarrow 1/6(1 - \pi/4) \approx 0.7766$. No outro extremo, quando $De^* \rightarrow \infty$, verifica-se da Eq. (5.55) que $(U_N/U)_c \rightarrow 0$. Também é conveniente analisar o limite $\varepsilon \rightarrow 0$, em que o modelo PTT degenera no modelo JS ($\chi \rightarrow \infty$), permitindo assim efectuar comparações directas com os resultados apresentados por Kolkka *et al.* (1988). Para tal é conveniente exprimir De_c^* em função de χ , na forma

$$De_c^* = \frac{1}{\sqrt{\chi}} \left[\left(1 - \frac{\pi}{4} \right) + \frac{1}{3\chi} \left(5 - \frac{3}{2}\pi \right) \right] \quad (5.56)$$

e, como foi referido antes, para esta condição limite é mais conveniente usar o número de Débora definido na sua forma usual, De . Nesse sentido, a definição (5.35) para χ é introduzida na expressão anterior, resultando em

$$De_c = \frac{1}{\sqrt{\xi(2-\xi)}} \left[\left(1 - \frac{\pi}{4} \right) + \frac{1}{3\chi} \left(5 - \frac{3}{2}\pi \right) \right] \quad (5.57)$$

Para o modelo JS ($\chi \rightarrow \infty$) obtém-se, da equação anterior, $De_c(\text{JS}) = (1 - \pi/4)/\sqrt{\xi(2-\xi)}$ que é igual ao resultado apresentado em Kolkka *et al.* (1988). Nesse trabalho, o número de Weissenberg crítico é apresentado na respectiva Eq. (33), $We_c = (1 - \ln 2)/\sqrt{1-c^2}$, com $c = 1 - \xi$, e em que o número de Weissenberg, $We \equiv \lambda U_0/H$, está definido em função da velocidade máxima U_0 no plano central ($y = 0$). Usando o perfil de velocidades obtido na Eq. (5.40), para $y' = 0$, $a = 1$ e $\chi \rightarrow \infty$ obtém-se $U_0/U = (1 - \ln 2)/(1 - \pi/4)$, o que permite confirmar que o valor de De_c aqui deduzido e o valor de We_c apresentado em Kolkka *et al.* (1988) são compatíveis.

Para o escoamento num tubo é também possível deduzir, de forma idêntica à descrita anteriormente para a Eq. (5.55), uma curva crítica que separa a região estável da zona instável,

$$\left(\frac{U}{U_N} \right)_c \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{U}{U_N} \right)_c} - 2 = 8De_c^* \quad (5.58)$$

Esta função está representada na Figura 5.5, juntamente com a dependência de U_N/U com De^* e χ .

Para $De^* \rightarrow 0$, a queda de pressão crítica tende para $(U_N/U)_c \rightarrow 3/4$. Em termos de χ , o número de Débora crítico pode ser traduzido por

$$De_c^* = \frac{1}{6\sqrt{\chi}} \left[1 + \frac{1}{2\chi} \right] \quad (5.59)$$

Para o modelo JS ($\varepsilon \rightarrow 0$ ou $\chi \rightarrow \infty$) obtém-se $De_c(JS) = 1/6\sqrt{\xi(2-\xi)}$. Para o outro extremo, em que se recupera o modelo de PTT simplificado ($\xi \rightarrow 0$), obtém-se $De_c \rightarrow \infty$, ou seja, o escoamento é sempre estável, como descrito em Oliveira e Pinho (1999a).

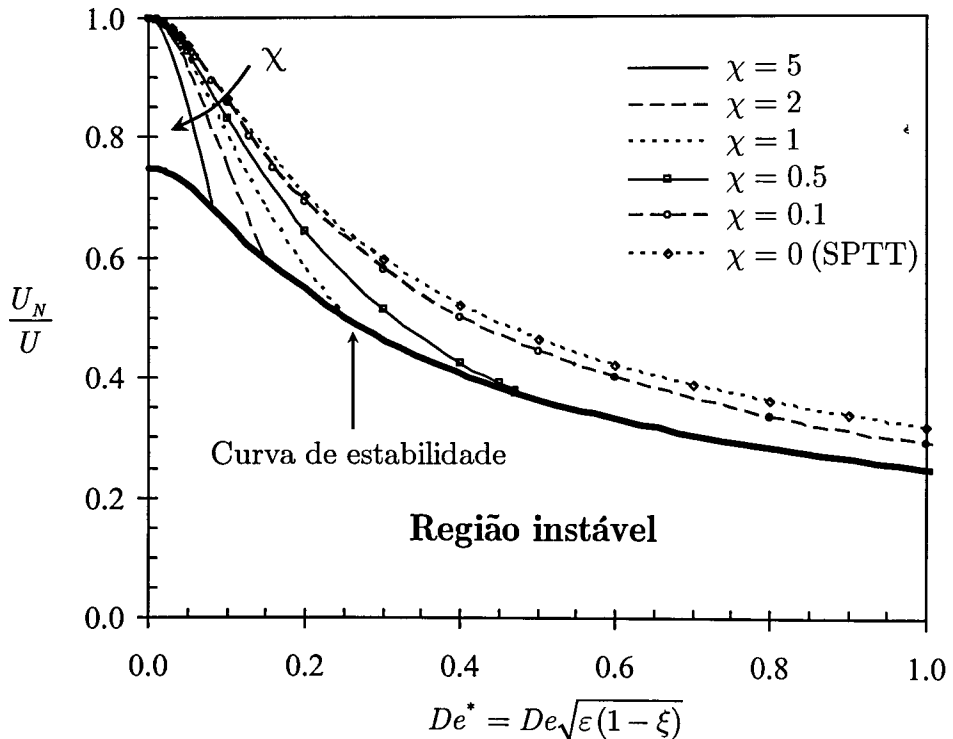


Figura 5.5: Mapa de estabilidade do modelo PTT e dependência de U_N/U com De^* e χ para o escoamento num tubo.

Na Figura 5.6 apresenta-se a variação de De_c com χ , para o escoamento desenvolvido entre placas paralelas e num tubo. Esta representação ilustra claramente que a gama de valores de De admissíveis para a obtenção de um escoamento estável aumenta com o decréscimo do parâmetro χ , i.e., à medida que o parâmetro ε aumenta e ξ diminui.

5.5 Discussão dos resultados para escoamento estável entre placas paralelas e em tubos

As linhas a traço *fino*, representadas nas Figuras 5.4 e 5.5, traduzem a variação de U_N/U com o número de Débora modificado, para diferentes valores do parâmetro

χ . O carácter reofluidificante do fluido PTT tende a diminuir a viscosidade junto à parede, comparativamente com o fluido newtoniano. Consequentemente, para um gradiente de pressão idêntico o caudal do fluido PTT será maior, ou seja, o quociente U_N/U decresce com os parâmetros que promovem a reofluidificação, nomeadamente De e χ .

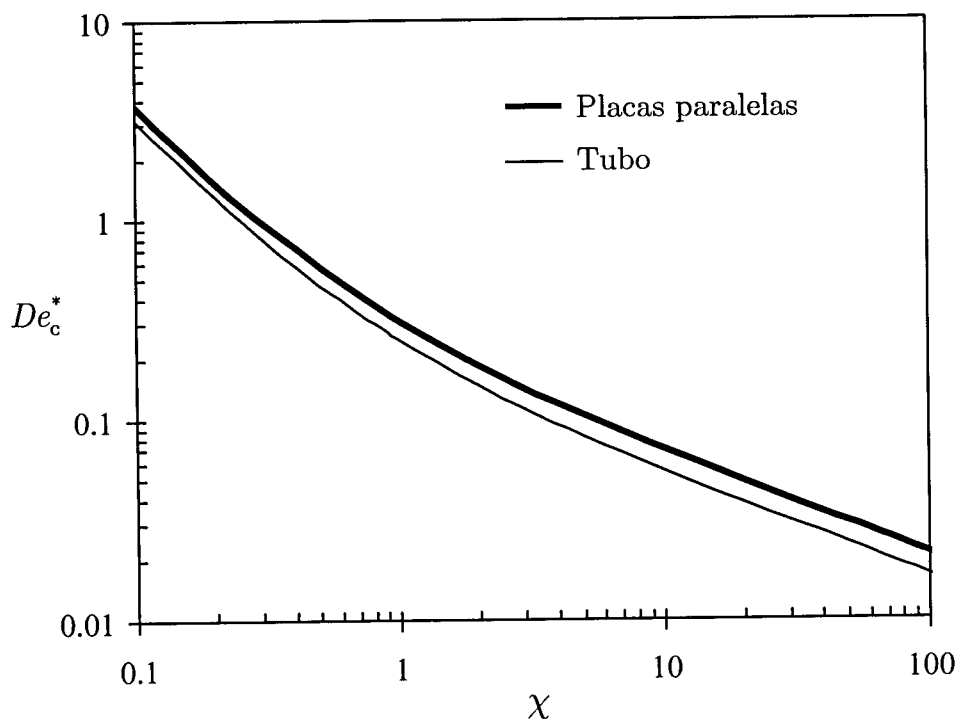


Figura 5.6: Variação do número de Débora crítico modificado, De_c^* , com o parâmetro χ . Comparação entre o escoamento de Poiseuille entre duas placas paralelas e num tubo.

À medida que U_N/U diminui, devido a efeitos de reofluidificação junto às paredes do canal ou do tubo, observa-se na Figura 5.7 que os perfis de velocidade tornam-se mais achatados junto ao plano (eixo) central. Os perfis normalizados das componentes não nulas do tensor das tensões são apresentados nas Figuras 5.8 a 5.10. As Figuras 5.7 a 5.10 poderiam ter sido representadas numa forma mais compacta, usando o número de Débora modificado em abcissa e a variável χ como parâmetro, tal como foi feito nas Figuras 5.4 e 5.5. Contudo, optou-se por apresentar as figuras nesta forma alternativa, para se analisar separadamente o efeito dos parâmetros ε e ξ do modelo PTT.

A tensão de corte varia linearmente com a coordenada transversal, independentemente da equação constitutiva considerada, uma vez que essa relação é estabelecida pelo balanço de quantidade de movimento, Eq. (5.22). Contudo, a

magnitude de T_{xy} depende significativamente dos parâmetros do modelo, como se ilustra na Figura 5.8.

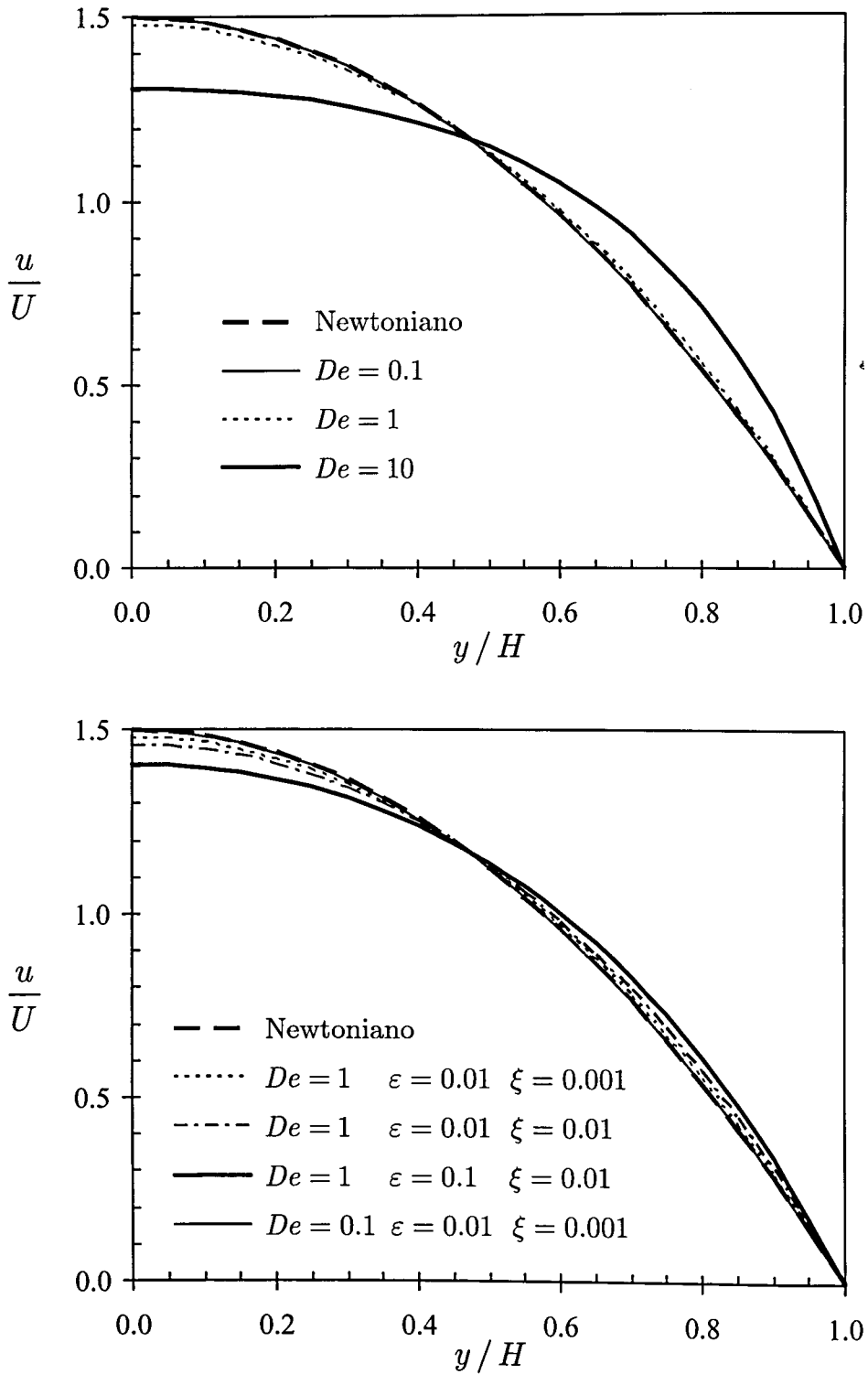


Figura 5.7: Perfis transversais da componente axial da velocidade para o escoamento entre duas placas paralelas. (a) Influência do número de Débora ($\varepsilon = 0.01$, $\xi = 0.001$); (b) efeito dos parâmetros ε e ξ .

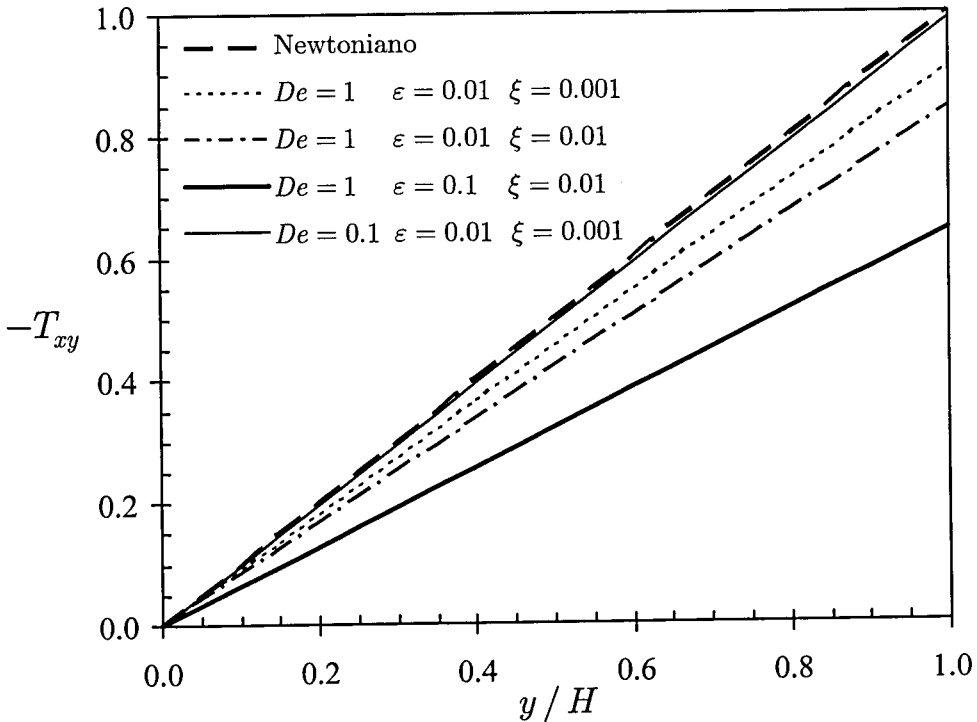
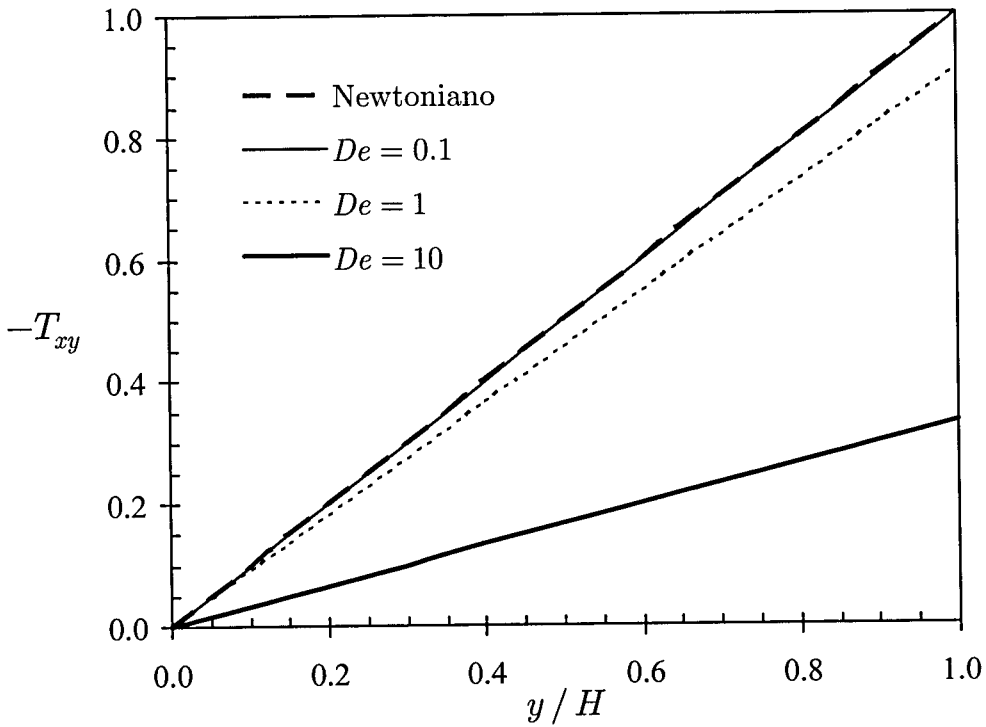


Figura 5.8: Perfis transversais da tensão de corte adimensional para o escoamento entre duas placas paralelas. (a) Influência do número de Débora ($\varepsilon = 0.01$, $\xi = 0.001$); (b) efeito dos parâmetros ε e ξ .

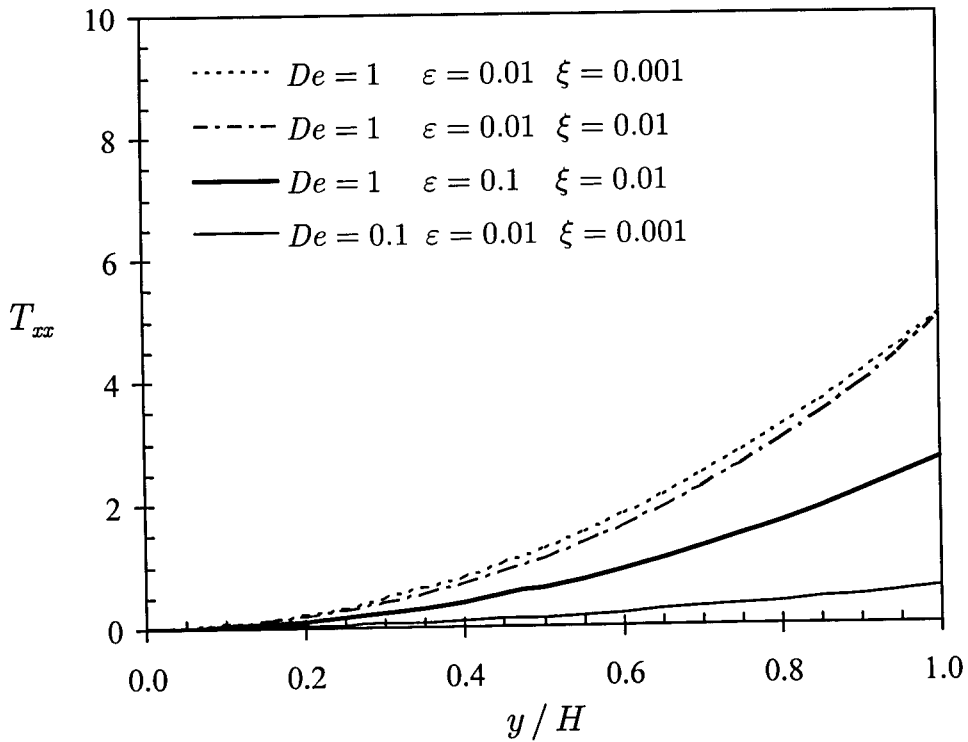
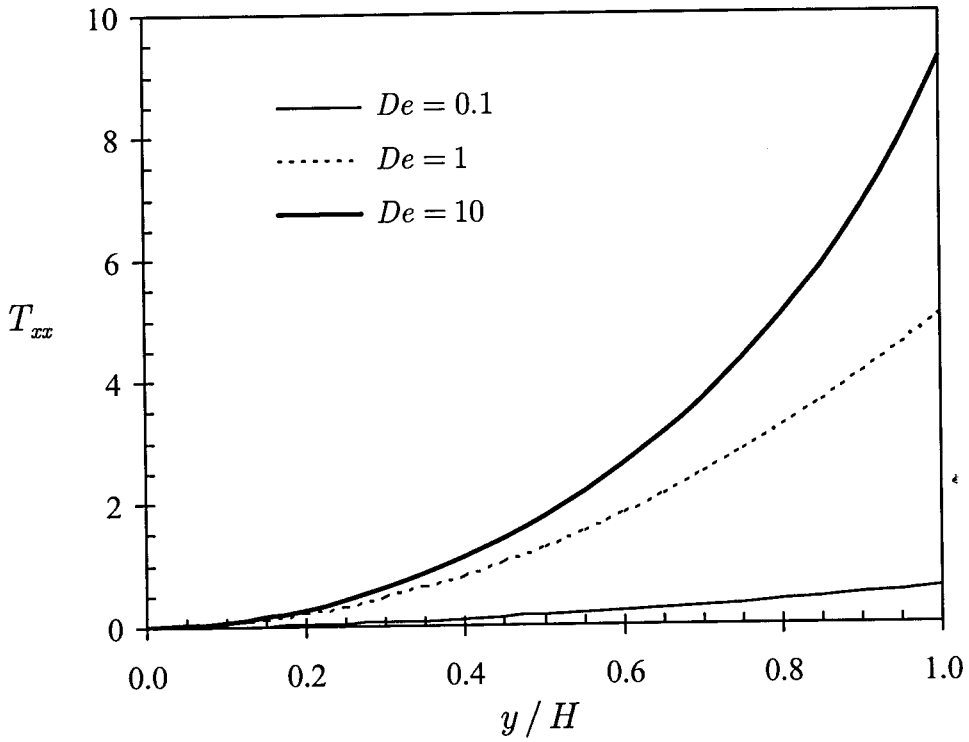


Figura 5.9: Perfis transversais da tensão normal T_{xx} para o escoamento entre duas placas paralelas. (a) Influência do número de Déborah ($\epsilon = 0.01$, $\xi = 0.001$); (b) efeito dos parâmetros ϵ e ξ .

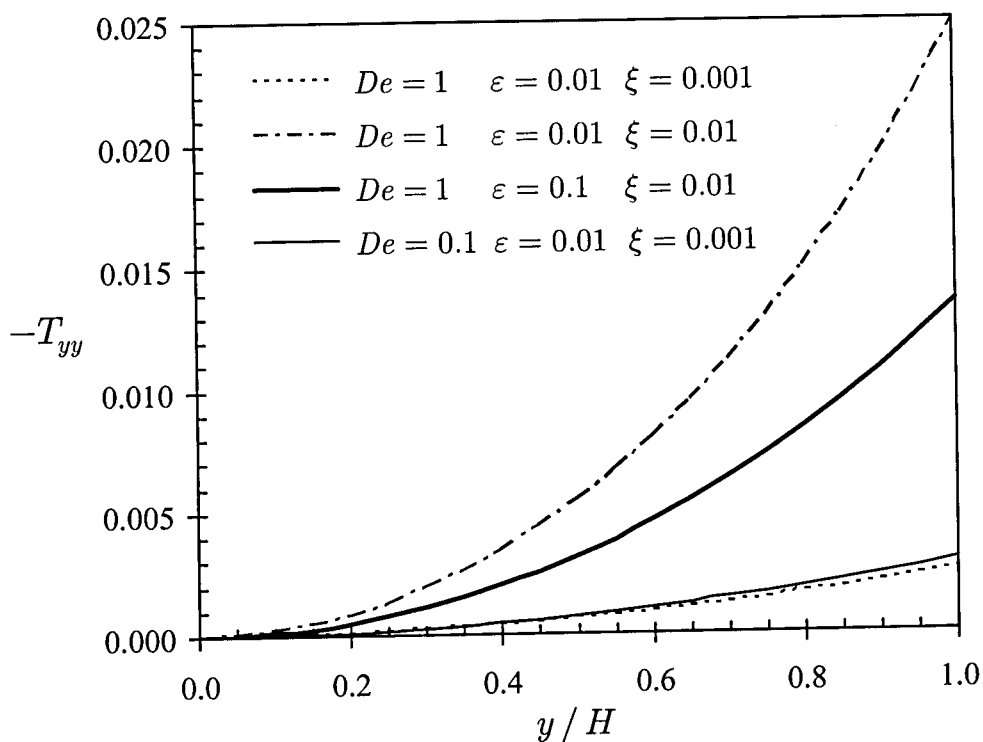
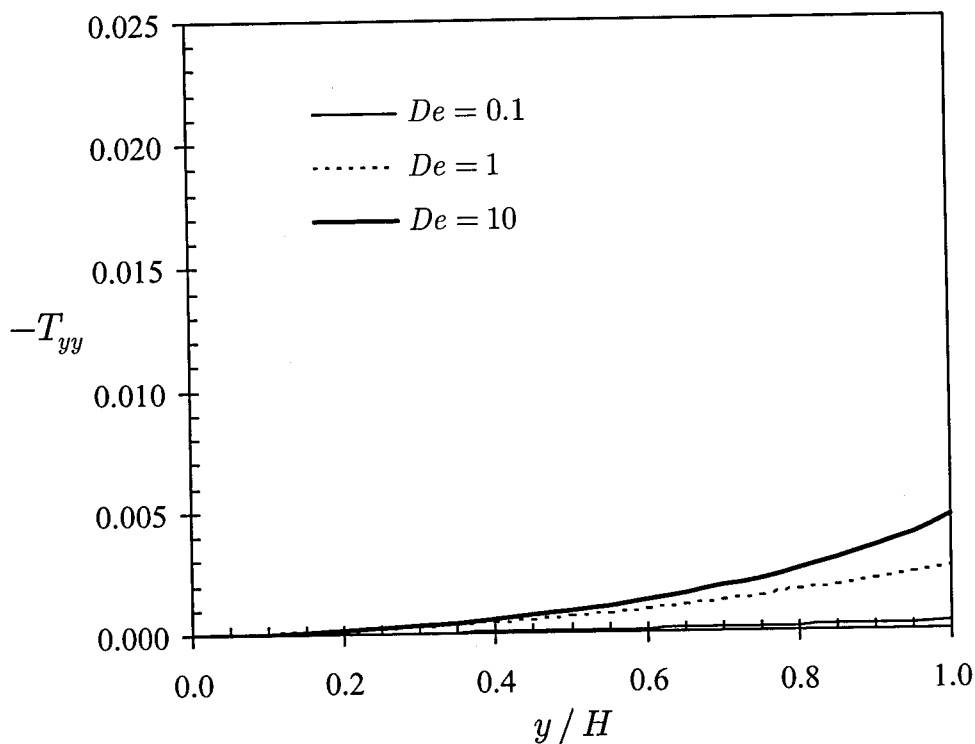


Figura 5.10: Perfis transversais da tensão normal T_{yy} para o escoamento entre duas placas paralelas. (a) Influência do número de Débora ($\varepsilon = 0.01$, $\xi = 0.001$); (b) efeito dos parâmetros ε e ξ .

De acordo com o descrito anteriormente, para um conjunto de parâmetros do modelo PTT que originem um acréscimo do grau de reofluidificação do fluido, obtém-se um perfil de velocidades mais uniforme junto ao plano (eixo) central, e um aumento da taxa de deformação junto à parede. Este aumento de $\dot{\gamma}$ origina uma diminuição da viscosidade do fluido na vizinhança da parede com a consequente diminuição da tensão de corte na parede, originando uma diminuição do gradiente de pressão na conduta, para uma determinada velocidade média, U (vide Eq. (5.54)).

A tensão de corte adimensional na parede, T_w , pode ser obtida da Eq. (5.34),

$$T_w = \left| T_{xy}(y' = 1) \right| = \frac{a}{4kDe\sqrt{\xi(2-\xi)}} = \frac{U_N}{U} \quad , \quad (5.60)$$

pelo que a sua dependência com os parâmetros do modelo PTT é igual à apresentada nas Figuras 5.4 e 5.5. Os parâmetros ε , ξ e λ (este último através de De) contribuem para um aumento da reofluidificação do fluido, originando dessa forma um decréscimo de $|T_{xy}|$, como se pode verificar na Figura 5.8. Em contrapartida, para as tensões normais já se observa um comportamento diferente. Na Figura 5.9 observa-se que um aumento dos parâmetros ε e ξ conduz a um decréscimo de T_{xx} , enquanto o aumentando da elasticidade do escoamento (aumentando λ , ou o correspondente valor de De) aumenta o valor de T_{xx} .

A tensão normal transversal, T_{yy} , é obtida pelo produto de T_{xx} por um factor que é função de ξ (vide Eq. (5.7)). Curiosamente, verifica-se que o efeito de ξ nesse factor multiplicativo, $\xi/(2-\xi)$, é mais importante que o efeito em T_{xx} e, consequentemente, $|T_{yy}|$ aumenta com ξ , em contraste com o que acontece para T_{xx} . A influência dos parâmetros ε e ξ nas várias componentes do tensor das tensões é tanto mais significativa quanto maior o valor de De . Assim, para valores de De baixos (e.g., $De \leq 0.1$) verifica-se que os parâmetros ε e ξ têm uma influência pouco significativa nos valores das tensões, como se ilustra nas Figuras 5.8 a 5.10.

Para finalizar esta análise é interessante observar os perfis transversais das diversas variáveis, para uma situação próxima das condições críticas. Usando a título exemplificativo os valores $\xi = 0.2$ e $\varepsilon = 0.1$ (usuais em aplicações práticas), obtém-se da Eq. (5.35) o valor $\chi = 4.5$. Nestas condições, o valor crítico para o número de Débora modificado será $De_c^* = 0.11121$ (ou $De_c = 0.39318$), de acordo com a Eq. (5.56). Escolhendo um valor de De ligeiramente inferior às condições

críticas (por exemplo, $De = 0.393 \Rightarrow De^* \approx 0.11116$), é possível representar os perfis transversais das diversas variáveis. Para estas condições ligeiramente sub-críticas, observa-se na Figura 5.11 (a) que o perfil transversal de u apresenta um comportamento perfeitamente *normal*, assim como a tensão de corte T_{xy} . Em contrapartida, a tensão normal T_{xx} (e conseqüentemente T_{yy} , vide Eq. (5.7)) apresenta um gradiente transversal bastante elevado na vizinhança da parede, como se observa na Figura 5.11 (b): é esta singularidade do gradiente de T_{xx} junto à parede ($y/H = 1$) que induz um comportamento crítico (não sustentável) do escoamento.

5.6 Resumo

Neste capítulo analisaram-se os escoamentos de Couette e de Poiseuille para um fluido cujo comportamento reológico é descrito pelo modelo PTT. Apresentaram-se as respectivas soluções analíticas e foram identificadas as zonas de estabilidade em que é possível obter uma solução estável para o escoamento completamente desenvolvido entre duas placas paralelas ou num tubo. Os resultados exactos aqui apresentados são inéditos, e estão relacionados com a importante questão da falta de estabilidade (física e/ou numérica) inerente a alguns dos modelos constitutivos mais utilizados em aplicações comuns (Grillet *et al.*, 2002).

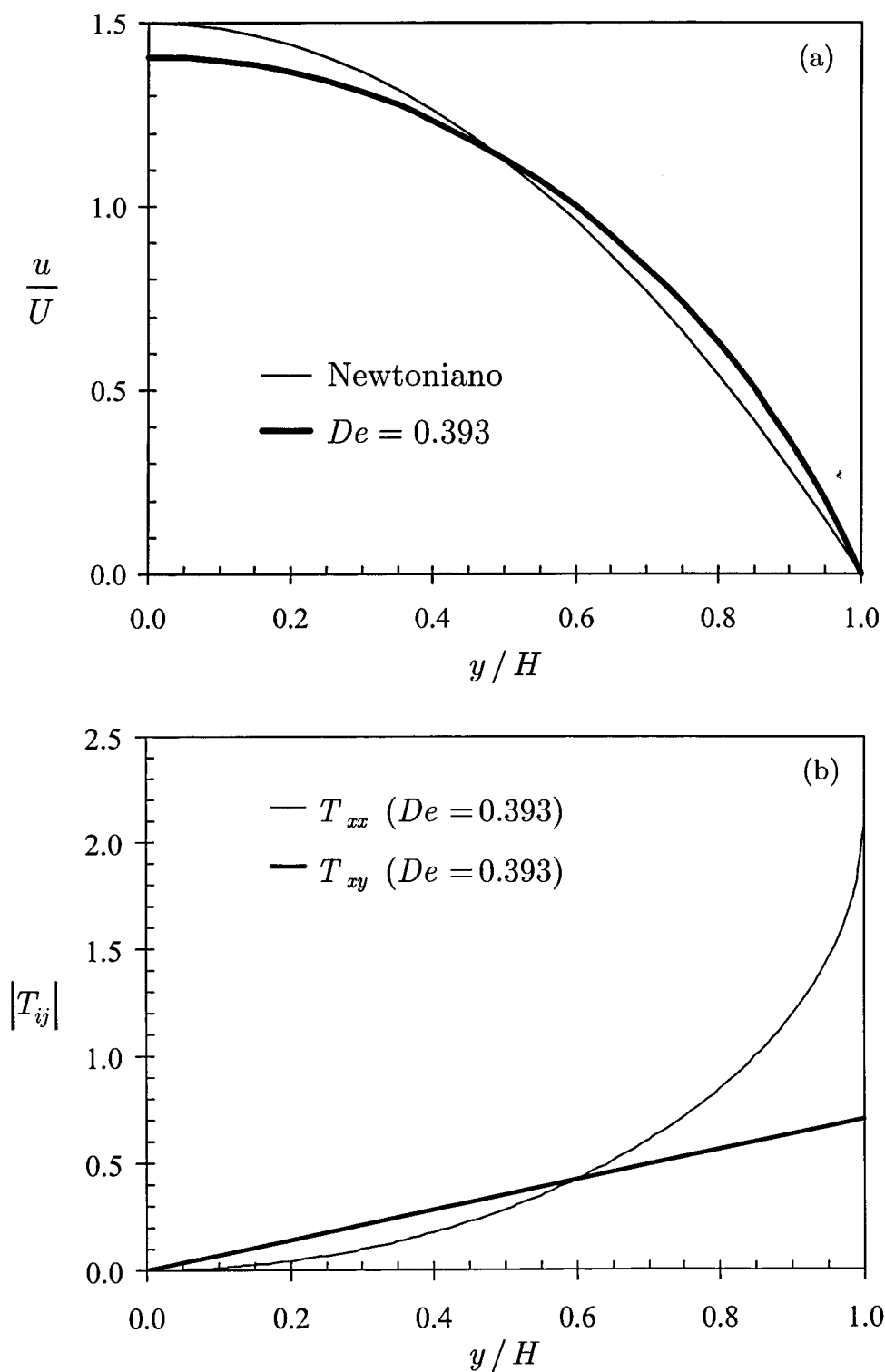


Figura 5.11: Perfis transversais para o escoamento de Poiseuille entre duas placas paralelas em condições *quasi-críticas* ($De = 0.393$; $\xi = 0.2$; $\varepsilon = 0.1$): (a) Velocidade; (b) tensões.

*“As far as the laws of mathematics refer to reality, they are not certain,
and as far as they are certain, they do not refer to reality”.*

Albert Einstein (1879-1955)

Capítulo 6

Escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1[§]

Neste capítulo estuda-se o escoamento de referência de um fluido UCM numa contracção plana 4:1, usando o método dos volumes finitos descrito no Capítulo 4. As simulações efectuadas referem-se a condições de escoamento de Stokes, assumindo-se um valor constante para o número de Reynolds, $Re=0.01$. Analisa-se a influência da elasticidade do fluido no padrão de escoamento resultante, variando-se o número de Débora. As simulações apresentadas foram efectuadas em 4 malhas sucessivamente refinadas, aplicando-se a extrapolação de Richardson para se obterem soluções numéricas com precisão elevada. Apresentam-se resultados com elevada precisão até $De=3$, usando-se o esquema MINMOD na discretização do termo convectivo da equação constitutiva. Analisa-se o comportamento assintótico das componentes da velocidade e do tensor das tensões, junto ao canto reentrante da contracção, obtendo-se uma boa concordância com as previsões teóricas de Hinch (1993).

6.1 Introdução

As equações constitutivas diferenciais usadas habitualmente para modelar o comportamento reológico de fluidos viscoelásticos não possuem qualquer termo difusivo, o que torna a discretização do respectivo termo convectivo extremamente importante. Os esquemas *convencionais* de segunda ou terceira ordem (e.g., CDS, LUDS, QUICK) são problemáticos devido a não garantirem monotonicidade da solução em condições fortemente convectivas. Assim, dado o carácter hiperbólico

[§] Este capítulo é baseado no artigo “Alves, Pinho e Oliveira (2000). Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 93: 287-314”.

das equações constitutivas é aconselhável o uso de esquemas intrinsecamente limitados (Oliveira e Pinho, 1999b). Esta é a principal motivação para o trabalho apresentado neste capítulo, onde se analisam as vantagens em termos de estabilidade e precisão que resultam da implementação do esquema de alta resolução MINMOD na discretização do termo convectivo da equação constitutiva.

Como se referiu na Secção 2.3, o escoamento de um fluido viscoelástico numa contracção plana 4:1 é actualmente um dos principais problemas de referência em reologia computacional. No entanto, apesar deste escoamento já ser estudado numericamente há mais de 25 anos, verifica-se a inexistência de soluções de referência que possam ser usadas com confiança. A este respeito, a Figura 2.4 ilustra claramente o estado da arte para o escoamento de um fluido Oldroyd-B: não é possível ainda afirmar inequivocamente se um aumento da elasticidade do escoamento se reflecte num decréscimo do comprimento e da intensidade da recirculação formada junto à contracção.

De forma semelhante, para o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana, o padrão de escoamento previsto em diversos estudos numéricos não é concordante. Por exemplo, em alguns estudos numéricos foi reportado o aparecimento de um vórtice de entrada em simultâneo com um vórtice de canto, enquanto que noutros estudos apenas se obtém um vórtice de canto. Assim, actualmente ainda persiste a dúvida sobre qual o padrão correcto do escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1.

6.2 Geometria do escoamento e malhas computacionais

A geometria em estudo consiste numa contracção plana 4:1, idêntica à descrita na Secção 2.3.1. Apesar de já ter sido apresentado na Figura 2.2 um esquema da contracção, apresenta-se na Figura 6.1 um novo esquema onde se ilustra a forma como o domínio de cálculo foi subdividido, além de serem incluídos os sistemas de eixos utilizados e as variáveis relevantes para este escoamento.

Uma vez que o escoamento é simétrico relativamente ao plano central, nos cálculos apenas será considerada metade da contracção, como se ilustra na Figura 6.1. Desta forma reduzem-se, aproximadamente para metade, os requisitos computacionais em memória e em tempo de CPU.

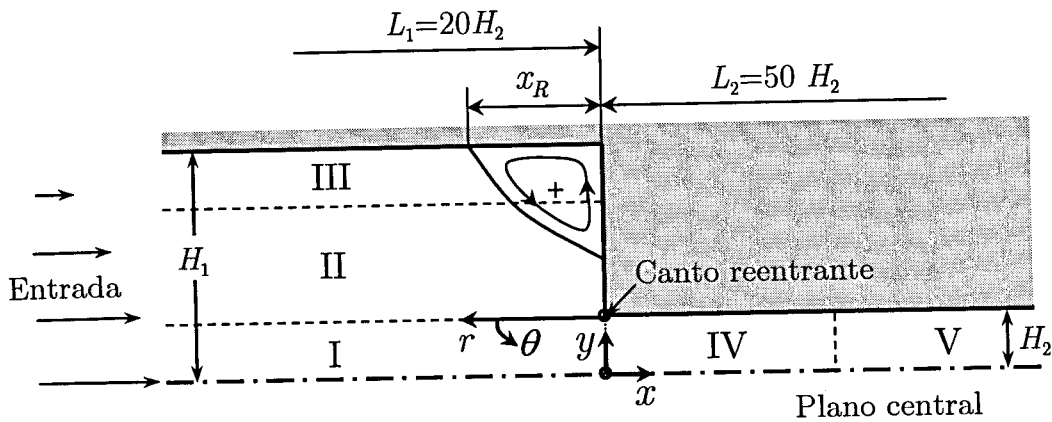


Figura 6.1: Representação esquemática da contracção plana 4:1. Note-se que apenas está representado metade do domínio devido à simetria existente relativamente ao plano central.

As malhas computacionais usadas nas simulações são ortogonais e não uniformes, com uma maior concentração de células na vizinhança do canto reentrante e ao longo da parede da conduta a jusante do plano de contracção, como se pode observar na Figura 6.2. Como se demonstra em Oliveira e Pinho (1999b), a utilização de um domínio computacional compreendido entre $x = -20H_2$ e $x = 50H_2$ é adequado à simulação do escoamento, a baixo Re , de um fluido UCM numa contracção plana 4:1.

Para o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 é possível definir dois grupos adimensionais independentes. Tal como em estudos anteriores, escolheram-se os números de Débora e de Reynolds, aqui definidos em termos de variáveis a jusante,

$$Re = \frac{\rho U_2 H_2}{\eta} \quad (6.1)$$

$$De = \frac{\lambda U_2}{H_2} \quad (6.2)$$

tendo-se fixado o valor de $Re = 0.01$ e analisado a influência de De no padrão de escoamento resultante.

As quatro malhas computacionais utilizadas nas simulações são constituídas por cinco blocos (ilustrados na Figura 6.1), cujas características geométricas são apresentadas na Tabela 6.1.

Tabela 6.1- Características geométricas das malhas computacionais.

	Malha 1			Malha 2			Malha 3			Malha 4		
	NX×NY	f_x	f_y	NX×NY	f_x	f_y	NX×NY	f_x	f_y	NX×NY	f_x	f_y
Bloco I	24×10	0.8210	0.8475	47×20	0.9061	0.9206	94×40	0.9519	0.9595	188×80	0.9756	0.9795
Bloco II	24×13	0.8210	1.2091	47×25	0.9061	1.0996	94×50	0.9519	1.0486	188×10	0.9756	1.0240
Bloco III	24×5	0.8210	0.7384	47×9	0.9061	0.8593	94×17	0.9519	0.9270	188×34	0.9756	0.9628
Bloco IV	20×10	1.2179	0.8475	40×20	1.1036	0.9206	80×40	1.0505	0.9595	160×80	1.0249	0.9795
Bloco V	7×10	1.3782	0.8475	13×20	1.1740	0.9206	25×40	1.0835	0.9595	50×80	1.0409	0.9795
N. Células	942			3598			14258			57032		
	$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.04 H_2$			$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.02 H_2$			$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.01 H_2$			$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.005 H_2$		

A dimensão de células consecutivas, segundo uma determinada direcção, varia de acordo com uma progressão geométrica de razão constante, definida por $f_x \equiv \delta x_{i+1} / \delta x_i$, em que δx_i representa a dimensão segundo a direcção x da célula i . De forma semelhante, para a direcção y , define-se a razão da progressão geométrica por $f_y \equiv \delta y_{j+1} / \delta y_j$. Para garantir uma transição suave nas dimensões das células, e dessa forma evitar uma deterioração na precisão dos esquemas de discretização, as razões f_x e f_y deverão ser escolhidos criteriosamente tendendo para valores unitários (maior uniformidade) nas malhas mais refinadas.

No processo de refinamento da malha o número de células em cada direcção é duplicado, e as razões da progressão geométrica tomam o valor da raiz quadrada das razões da progressão geométrica da malha precedente. Este procedimento permite efectuar um refinamento de malha consistente, obtendo-se uma malha mais refinada com o quádruplo do número de células, e em que as respectivas dimensões são metade das da malha precedente. Este procedimento permite utilizar mais facilmente a extrapolação de Richardson (1910) no cálculo da ordem de convergência do método numérico, p , e estimar uma solução mais precisa usando os valores obtidos em várias malhas com diferentes níveis de refinamento. Caso sejam conhecidas três soluções numéricas (ϕ_{4h} , ϕ_{2h} e ϕ_h) obtidas em três malhas consecutivamente refinadas (com espaçamentos mínimos de $4h$, $2h$ e h), a ordem de convergência do método pode ser calculada por (Ferziger e Peric, 1996)

$$p = \frac{\log\left(\frac{\phi_{2h} - \phi_{4h}}{\phi_h - \phi_{2h}}\right)}{\log 2} \quad (6.3)$$

e o erro da solução calculada na malha mais refinada, ε_h , pode ser estimado a partir de

$$\varepsilon_h \approx \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^p - 1} \quad (6.4)$$

A utilização da extrapolação de Richardson permite estimar uma solução mais precisa, ϕ_{extr} , usando a equação anterior escrita na forma

$$\varepsilon_h = \left(\lim_{h \rightarrow 0} \phi \right) - \phi_h \Rightarrow \phi_{\text{extr}} \approx \phi_h + \varepsilon_h = \phi_h + \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^p - 1} \quad (6.5)$$

A ordem de convergência do método numérico pode ser estimada pela Eq. (6.3) apenas quando a convergência com o refinamento da malha é monótona, o que acontece para malhas suficientemente refinadas. Quando as soluções são obtidas em malhas *grosseiras*, a dependência do erro numérico com a dimensão das células da malha é irregular e a utilização da extrapolação de Richardson não é adequada (Ferziger e Peric, 1996).

Neste trabalho são usadas malhas com elevado grau de refinamento, o que pode ser verificado na Tabela 6.1 e na Figura 6.2. Por exemplo, a malha 4 é constituída por 57032 células e apresenta um espaçamento normalizado mínimo junto ao canto reentrante de 0.005, em ambas as direcções (i.e., $\delta x_{\text{min}} / H_2 = \delta y_{\text{min}} / H_2 = 0.005$), sendo provavelmente a malha mais refinada, usada até à presente data para prever o escoamento de Stokes de um fluido UCM numa contracção. A combinação do uso de malhas extremamente refinadas com a discretização baseada em métodos de alta resolução permitirá assim obter soluções numéricas com precisão elevada.

As simulações apresentadas neste capítulo foram efectuadas num PC equipado com um processador Pentium III[®] a 500 MHz, e com 128 MB de memória SDRAM. Os tempos de cálculo obtidos dependem da malha usada, do número de Débora simulado, dos campos usados para estimativa inicial e do esquema de discretização adoptado para o tratamento do termo convectivo da equação constitutiva. Note-se que era possível iniciar o processo de cálculo partindo de um campo nulo das diversas variáveis, mesmo para valores de De elevados, o que demonstra a robustez da metodologia de cálculo. Contudo, para reduzir o tempo de CPU necessário, usou-se como estimativa inicial a solução calculada para o número de Débora imediatamente inferior.

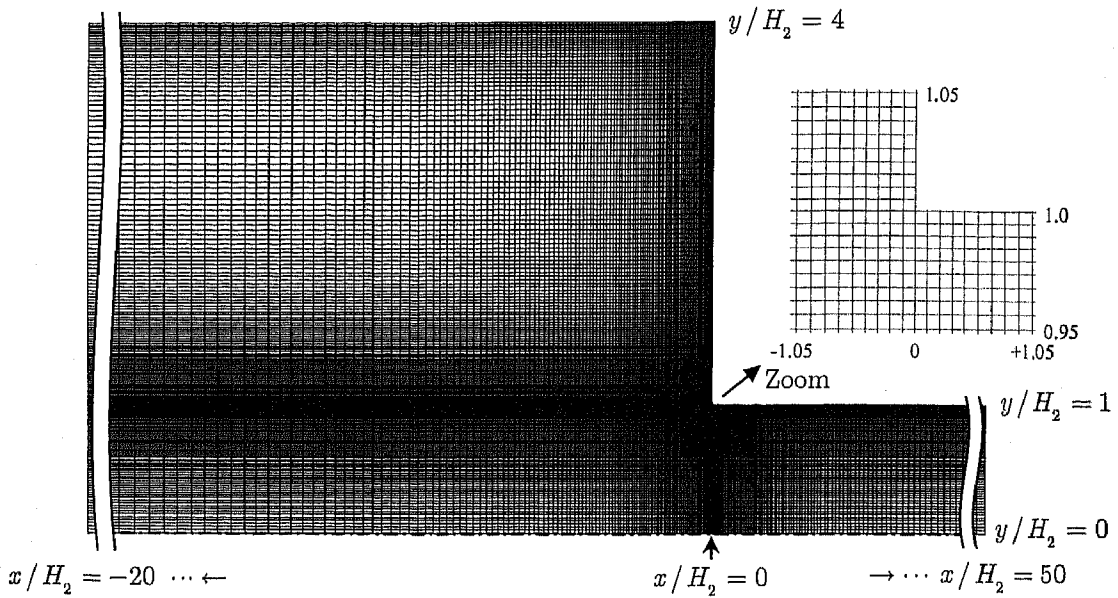


Figura 6.2: Vista parcial da malha 4, junto ao plano da contracção. Zoom da região localizada junto ao canto reentrante.

Os tempo de CPU obtidos, normalizados pelo número total de células da malha, rondavam tipicamente os 0.08ms por cada passo de integração temporal, usando-se o esquema UDS. Por exemplo, para $De = 3$ obtiveram-se tempos de CPU de cerca de 30 min para a malha 1, 4 hr para a malha 2, 34 hr para a malha 3 e vários dias para a malha 4. Nas simulações efectuadas com o esquema MINMOD, obtiveram-se tempos de cálculo por passo de integração temporal superiores em cerca de 30%.

6.3 Resultados

Nesta secção apresentam-se os resultados obtidos para a simulação do escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 em condições de inércia praticamente desprezável ($Re = 0.01$), usando-se as quatro malhas descritas na Tabela 6.1. Pretende-se investigar a influência do grau de refinamento da malha e a importância da precisão do esquema usado na discretização do termo convectivo da equação constitutiva, analisando-se as seguintes características do escoamento:

- (i) Comportamento assintótico junto à singularidade do canto reentrante;
- (ii) Influência da elasticidade no padrão de escoamento;
- (iii) Dimensão e intensidade dos vórtices de canto e de entrada (obtenção de resultados de referência);

- (iv) Perfis de velocidades, tensões e pressão ao longo da linha central e da parede da conduta plana a jusante da contracção;
- (v) Campos de tensões na vizinhança da singularidade;
- (vi) Queda de pressão na contracção (correção de Couette).

6.3.1 Comportamento assintótico junto ao canto reentrante

Dean e Montagnon (1949) e Moffatt (1964) deduziram expressões teóricas para o comportamento assintótico das componentes da velocidade e tensão, na vizinhança do canto reentrante, para o escoamento de um fluido newtoniano numa contracção. As expressões obtidas tomam a forma assimpótica

$$u_i \propto r^{0.545}; \quad \tau_{ij} \propto r^{-0.455} \quad (6.6)$$

para um dado ângulo θ , no sistema de coordenadas polares (r, θ) centrado no canto reentrante, ilustrado na Figura 6.1. A Eq. (6.6) prevê a existência de um ponto singular no canto reentrante, para as componentes da tensão, mesmo para o escoamento de um fluido newtoniano.

Na Figura 6.3 apresentam-se os resultados obtidos para o escoamento de Stokes de um fluido newtoniano na vizinhança do ponto singular, ao longo da linha vertical que passa no canto reentrante ($\theta = \pi/2$). O comportamento assintótico previsto pela Eq. (6.6) é bem descrito nas quatro malhas usadas. A única excepção refere-se à tensão de corte, para a qual se observam alguns desvios nas malhas mais grosseiras, demonstrando-se assim a necessidade da utilização de malhas bastante refinadas, mesmo em cálculos com fluidos newtonianos.

A análise teórica de Hinch (1993), para o escoamento de um fluido Oldroyd-B na vizinhança do canto reentrante numa contracção plana, conduziu a expressões assimpóticas para as componentes da velocidade e das tensões na forma,

$$u_i \propto r^{5/9}; \quad \tau_{ij} \propto r^{-2/3} \quad (6.7)$$

Repare-se que o grau de singularidade das tensões no caso viscoelástico é superior ao do fluido newtoniano, implicando que as tensões vão tender mais rapidamente para infinito junto ao canto singular. Esta é uma das razões para a maior dificuldade do cálculo numérico com fluidos viscoelásticos.

A análise teórica que conduziu à Eq. (6.7) é válida para valores de De inferiores a 1, aproximadamente, admitindo-se que nestas condições não deverá existir um vórtice de entrada (Hinch, 1993). Na dedução da Eq. (6.7) também se

assume um predomínio das tensões elásticas sobre a componente puramente newtoniana da tensão. Assim, a análise efectuada por Hinch para um fluido Oldroyd-B também deverá ser válida para o escoamento de um fluido UCM na vizinhança dum canto reentrante, como indicado pelo próprio autor.

Efectuaram-se simulações a $De = 1$ usando o esquema MINMOD, nas quatro malhas descritas na Tabela 6.1, com o objectivo de testar a validade das previsões teóricas de Hinch. Os resultados obtidos apresentam-se na Figura 6.4, onde se pode observar uma boa concordância entre as simulações numéricas e as previsões teóricas, em particular para a malha mais refinada. Os desvios observados entre a previsão teórica e os resultados numéricos são mais significativos junto ao canto reentrante. Este resultado já era em parte esperado, uma vez que a análise teórica é válida na vizinhança do canto reentrante, mas apenas a partir de uma certa distância deste (Hinch, 1993). Por outro lado, junto ao canto reentrante esperavam-se ligeiras oscilações da solução numérica causadas pela mudança de esquema de discretização junto às fronteiras, onde se muda de um esquema de alta resolução para um esquema de diferenças de montante nas células adjacentes às paredes. Contudo, as oscilações observadas são pouco significativas, sendo menos intensas do que as reportadas noutros estudos similares (e.g. Figs. 8, 12 e 13 em Apelian *et al.*, 1988; Fig. 9 em Coates *et al.*, 1992; Figs. 5, 15 e 16 em Sasmal, 1995; Figs. 8-11 em Baaijens, 1998a; Figs. 5 e 6 em Xue *et al.*, 1998a).

6.3.2 Influência da elasticidade no padrão de escoamento

Para o escoamento de um fluido newtoniano ($De = 0$) verifica-se que as linhas de corrente obtidas com os esquemas UDS, CDS, LUDS e MINMOD são idênticas, para qualquer uma das quatro malhas usadas. Este facto não surpreende, uma vez que para $Re \cong 0$ a discretização do termo convectivo na equação da quantidade de movimento é irrelevante. Em contrapartida, para o escoamento de um fluido UCM verificam-se diferenças significativas entre os esquemas de discretização tanto em termos de precisão como de estabilidade, que resultam das aproximações feitas ao representar o termo convectivo da equação constitutiva para as tensões. Por exemplo, para o esquema UDS é possível obter soluções até cerca de $De = 10$, enquanto que para o esquema CDS verifica-se que o algoritmo de cálculo diverge para qualquer valor não nulo de De . O esquema LUDS é estável apenas para valores de De relativamente baixos, observando-se um decréscimo significativo do valor máximo de De alcançável com o aumento do grau de refinamento da malha.

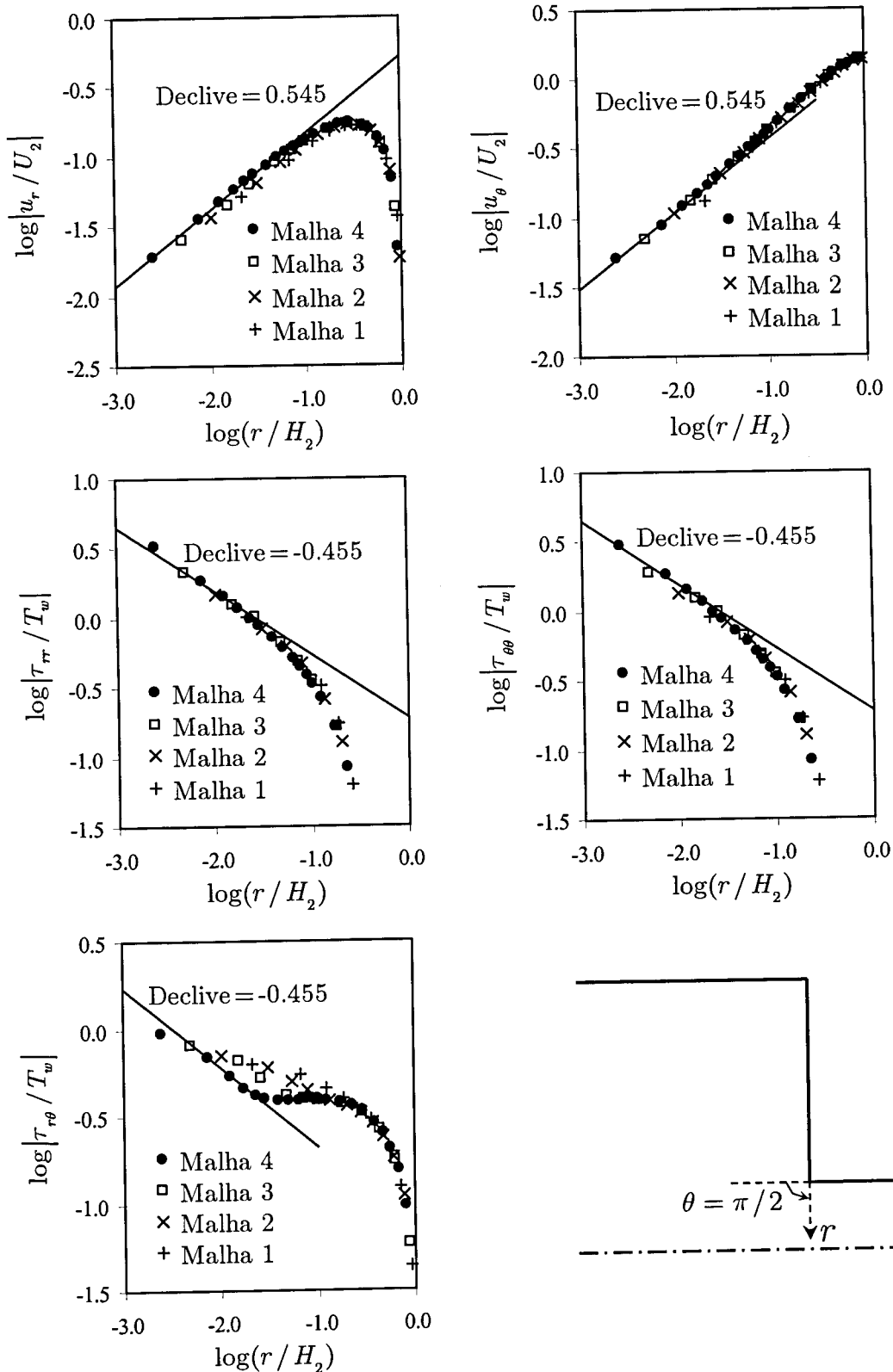


Figura 6.3: Comportamento assintótico das componentes da velocidade e da tensão junto ao canto reentrante de uma contracção plana 4:1, ao longo da direcção $\theta = \pi/2$, para o escoamento de Stokes de um fluido newtoniano. Comparação com as previsões da Eq. (6.6).

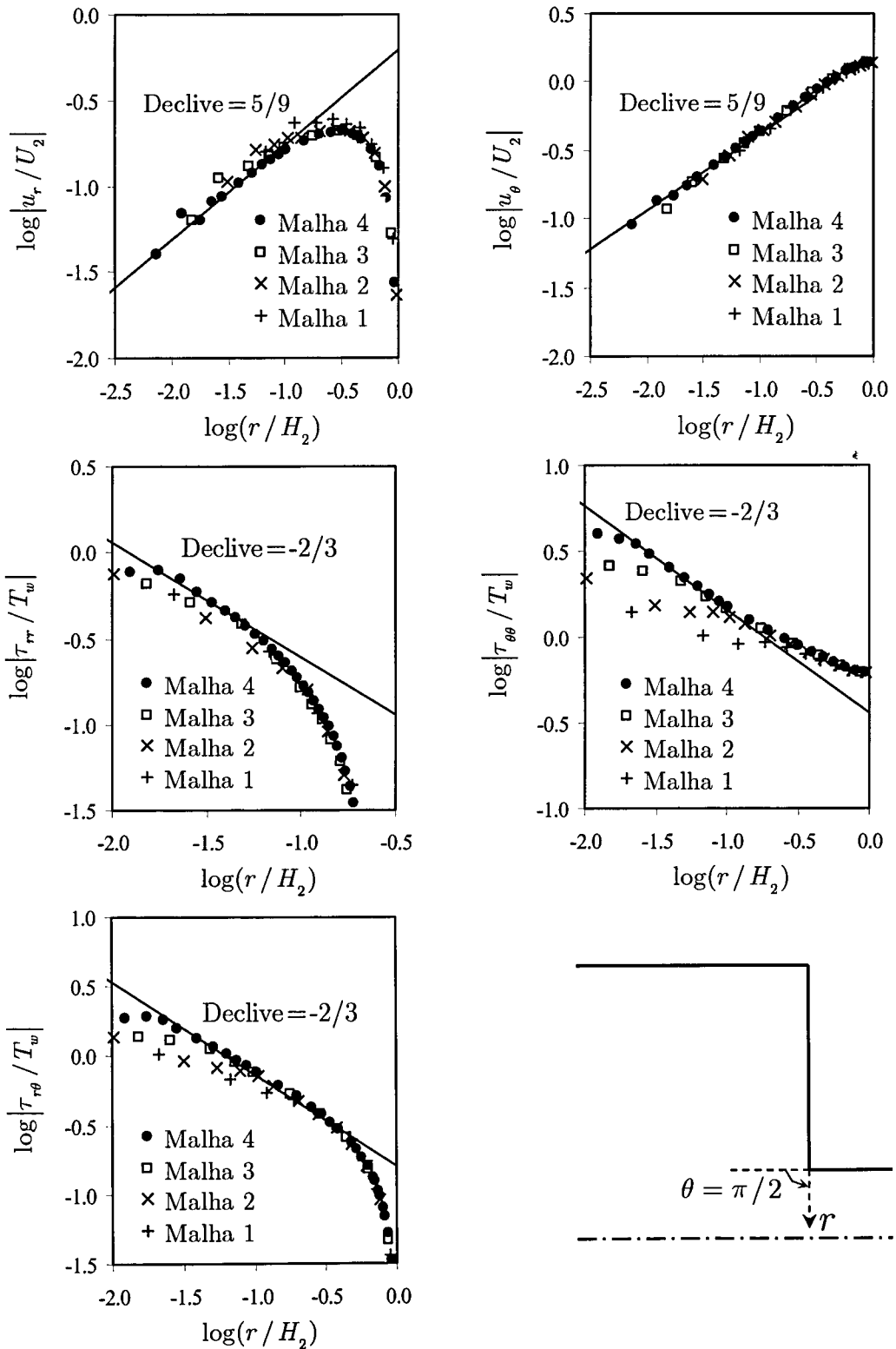


Figura 6.4: Comportamento assintótico das componentes da velocidade e da tensão junto ao canto reentrante de uma contracção plana 4:1, ao longo da direcção $\theta = \pi/2$, para o escoamento de Stokes de um fluido UCM a $De = 1$. Comparação com as previsões da Eq. (6.7).

A implementação do esquema de alta resolução MINMOD conduziu a uma melhoria significativa na precisão dos resultados e simultaneamente a um aumento da estabilidade da metodologia de cálculo. Contudo, este método também apresenta algumas limitações, que serão discutidas em detalhe no Capítulo 8.

Os resultados obtidos na malha 3 com o esquema MINMOD são apresentados na Figura 6.5, para a gama de valores de De compreendida entre 0 e 5. Estes resultados confirmam a tendência observada em Oliveira e Pinho (1999b), onde foi usado o esquema LUDS na discretização do termo convectivo das equações constitutivas. No trabalho efectuado no âmbito desta tese, constatou-se que a utilização do esquema MINMOD permite aumentar significativamente a gama de valores de De alcançável e, simultaneamente, obter uma maior precisão. Na Figura 6.5, e nas Tabelas 6.2 e 6.3, observa-se uma diminuição significativa da dimensão (em 38%) e da intensidade (em 83%) do vórtice de canto até cerca de $De = 3$, seguindo-se um crescimento do vórtice para De superiores. A dimensão do vórtice de canto, apresentada na Tabela 6.2, define-se pelo seu comprimento normalizado,

$$X_R = x_R / H_2 \quad (6.8)$$

e a intensidade da recirculação, apresentada na Tabela 6.3, é definida pelo quociente entre o caudal que circula no interior da recirculação e o caudal de entrada na contracção,

$$\Psi_R = \frac{\psi_R - U_1 H_1}{U_1 H_1} = \frac{\psi_R}{U_1 H_1} - 1 \quad (6.9)$$

em que ψ_R representa o valor da função de corrente no centro da recirculação (por conveniência assume-se que no plano de simetria, $y = 0$, o valor da função de corrente é nulo).

As linhas de corrente representadas no interior da(s) recirculações da Figura 6.5, encontram-se igualmente espaçadas ($\delta_\psi = 2 \times 10^{-4}$), para ilustrar mais facilmente a intensidade dos vórtices e permitir comparações visuais directas entre os vários casos. Para $De = 1$ observa-se o aparecimento de um pequeno vórtice de entrada, o qual aumenta em tamanho e em intensidade com o número de Débora. Com o aumento da elasticidade observa-se uma aproximação gradual do vórtice de entrada ao vórtice de canto, seguida de uma fusão dos vórtices, que se encontra praticamente concluída a $De = 5$.

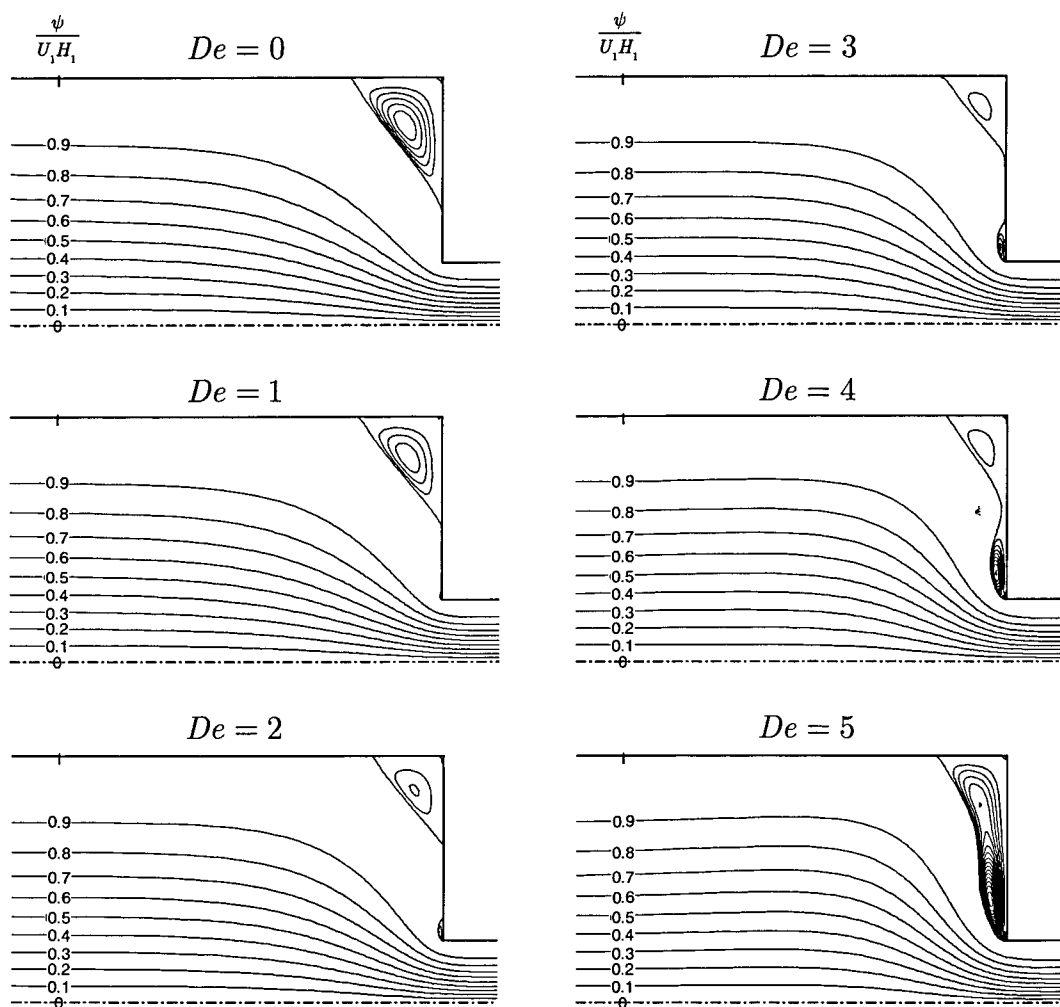


Figura 6.5: Sequência das linhas de corrente previstas com o esquema MINMOD na malha 3, para valores de De crescentes ($Re = 0.01$). As linhas de corrente no interior dos vórtices encontram-se igualmente espaçadas, com $\delta_\psi = 2 \times 10^{-4}$.

6.3.3 Dimensão e intensidade dos vórtices de canto e de entrada

A utilização de um refinamento consistente da malha computacional permite facilmente utilizar a técnica de extrapolação de Richardson, com os valores obtidos nas três malhas mais refinadas. Nas Tabelas 6.2 e 6.3 apresentam-se os resultados obtidos para o comprimento e para a intensidade do vórtice de canto, respectivamente. Na Tabela 6.3 apresentam-se também, entre parêntesis, os valores da intensidade do vórtice de entrada, quando exista.

Os resultados de X_R , apresentados na Tabela 6.2, são particularmente úteis para *benchmarking*, uma vez que a incerteza dos resultados está quantificada (Roache, 1997), sendo inferior a 2.5% para $De \leq 3$.

Tabela 6.2- Comprimento adimensional do vórtice de canto (X_R) em função do número de Débora, da malha e do esquema de discretização.

De	Esquema	Malha 1	Malha 2	Malha 3	Malha 4	Extrap. ^(c)	Dif.(%) ^(c)
0	CDS	1.470	1.488	1.494	1.495	1.496	0.1
	MINMOD	1.472	1.488	1.494	1.495	1.496	0.1
1	UDS	1.387	1.400	1.383	1.360	1.337	1.7
	LUDS	1.354	1.367	1.350	1.338	1.333	0.4
	MINMOD	1.349	1.371	1.349	1.339	1.335	0.3
2	UDS	1.546	1.443	1.318	1.219	1.120	8.8
	LUDS	1.308	1.222	(a)	(a)	---	---
	MINMOD	1.361	1.259	1.154	1.118	1.105	1.2
3	UDS	1.819	1.628	1.375	1.162	0.949	22.4
	LUDS	1.334	(a)	(a)	(a)	(a)	---
	MINMOD	1.517	1.266	1.014	0.946	0.923	2.5
4	UDS	2.074	1.845	1.526	1.203	0.880	36.7
	LUDS	1.378	(a)	(a)	(a)	(a)	---
	MINMOD	1.644	1.337	0.987	(b)	0.870	13.4
5	UDS	2.274	2.059	1.714	1.300	0.886	46.7
	LUDS	1.485	(a)	(a)	(a)	(a)	---
	MINMOD	1.687	1.517	1.127	(b)	0.997	13.0

^(a) Diverge.^(b) Não se obtém convergência iterativa (a solução oscila ligeiramente).^(c) Diferença entre a solução obtida na Malha 4 (ou 3) e o valor previsto pela extrapolação de Richardson ("Extrap.").

Relativamente a Ψ_R , apenas se extrapolaram os resultados da Tabela 6.3 para baixos valores de De , caso contrário seriam obtidos valores extrapolados fisicamente irrealistas. Esta limitação deve-se principalmente ao valor de Ψ_R ser obtido por integração numérica do campo de velocidades, o que conduz à redução numa unidade da ordem de convergência (vide Roache, 1997). Assim, para os valores de De mais elevados seria necessário efectuar simulações em malhas ainda mais refinadas do que a malha 4, para ser possível efectuar uma extrapolação adequada de Ψ_R . No entanto, os tempos de cálculo seriam proibitivos, pelo que não se efectuaram essas simulações. Para a intensidade do vórtice de entrada, Ψ_{lip} , este efeito é ainda mais significativo (devido à sua localização ser junto ao ponto singular do escoamento), pelo que se optou por não efectuar qualquer tipo de extrapolação para os valores de Ψ_{lip} .

Globalmente, os resultados obtidos por Oliveira e Pinho (1999b) são confirmados neste estudo. No entanto, a utilização neste trabalho de uma malha altamente refinada (malha 4) e do esquema MINMOD, permitiu a obtenção de resultados significativamente mais precisos. Uma análise destes resultados permite concluir que, à medida que a precisão aumenta, as previsões para o tamanho e intensidade dos vórtices tende a diminuir. Deste modo, o esquema UDS em malhas grosseiras apresenta previsões de recirculações artificialmente intensificadas.

Como se pode observar na Tabela 6.2, os esquemas UDS e MINMOD apresentam uma maior estabilidade, relativamente aos esquemas LUDS e CDS, uma vez que é possível alcançar soluções a valores de De significativamente mais elevados. A principal limitação do esquema UDS reside na sua baixa precisão, como se pode confirmar na Tabela 6.2 para valores de $De \geq 2$.

Na Figura 6.6 ilustra-se a influência do grau de refinamento da malha nas linhas de corrente previstas com os esquemas UDS e MINMOD, para $De = 3$. Os efeitos benéficos do uso de esquemas de alta resolução não se limitam a um acréscimo de estabilidade, mas também a uma melhoria da precisão numérica, como aí se vê, observando-se uma boa convergência da solução com o refinamento da malha, já que o padrão de escoamento calculado com o esquema MINMOD nas malhas 3 e 4 é semelhante. Em contrapartida, os resultados obtidos com o esquema UDS são pouco precisos, e nem mesmo na malha 4 é possível obter uma precisão aceitável. Não obstante a baixa precisão do esquema UDS, verifica-se que o valor de X_R estimado com base na extrapolação de Richardson, $X_{R,extr} = 0.949$, é próximo do valor $X_R = 0.923$ obtido com o esquema MINMOD, demonstrando-se assim a vantagem do uso da técnica da extrapolação de Richardson como forma de estimar uma solução com maior precisão.

De acordo com Roache (1997), a técnica da extrapolação de Richardson aplica-se não só a valores pontuais da solução numérica, mas também a parâmetros que dependam dessa solução, desde que se usem métodos consistentes e de elevada ordem (com pelo menos uma ordem de precisão superior ao método numérico empregue na discretização das equações) na sua determinação. Para o escoamento numa contracção, o parâmetro X_R é usado com frequência para efeitos comparativos dos resultados, uma vez que é bastante sensível à qualidade da solução calculada numericamente. A verdadeira ordem de convergência do método numérico pode então ser estimada com base no valor obtido para X_R em três

malhas consecutivamente refinadas, usando-se a Eq. (6.3). Por exemplo, para o esquema MINMOD a $De = 3$ obteve-se $p = 1.9$, usando os valores de X_R calculados nas malhas 2 a 4, valor este próximo da ordem de convergência teórica do método ($p = 2$).

De acordo com Ferziger e Peric (1996) e com Roache (1997), a técnica da extrapolação de Richardson também pode ser usada para estimar quantitativamente a incerteza dos resultados numéricos, calculando-se a diferença entre os valores calculados e os obtidos pela extrapolação. Na Figura 6.7 apresenta-se a variação do erro de X_R em função do espaçamento mínimo das malhas, para o caso $De = 3$. Nessa figura demonstra-se que a ordem de convergência real do método numérico se aproxima da respectiva ordem de convergência teórica (ordem 2 para o esquema MINMOD e 1 para o esquema UDS), ilustrando-se também que a zona de convergência assintótica com o refinamento da malha é alcançada na malha 2 para o esquema MINMOD, enquanto que apenas é atingida na malha 3 para o esquema UDS. Para demonstrar inequivocamente estes pontos, além das quatro malhas descritas anteriormente foram efectuadas novas simulações em três malhas suplementares, com refinamentos intermédios entre as malhas 1 a 4, para o caso $De = 3$. Esses resultados adicionais são incluídos na Figura 6.7, corroborando as afirmações anteriores.

6.3.4 Perfis de velocidades, tensões e pressão

Na Figura 6.8 apresentam-se os perfis ao longo da linha $y/H_2 = 0.98$, da componente longitudinal da velocidade, da pressão e da primeira diferença de tensões normais, respectivamente a $De = 0$ e $De = 3$. A primeira diferença de tensões normais ($N_1 \equiv \tau_{xx} - \tau_{yy}$) encontra-se normalizada pela tensão de corte na parede para escoamento completamente desenvolvido na conduta de jusante ($T_w = 3\eta U_2/H_2$) e, como se ilustra nessa figura, é bastante sensível ao grau de refinamento da malha, em particular para o caso viscoelástico. A componente longitudinal da velocidade é menos influenciada pelo grau de refinamento da malha. A linha $y/H_2 = 0.98$ foi escolhida para acentuar as diferenças entre os perfis obtidos nas diversas malhas, uma vez que essa linha passa junto ao canto reentrante e à parede da conduta a jusante da contracção, onde se observam os gradientes mais acentuados das diversas variáveis, e em particular de N_1 .

Tabela 6.3- Intensidade do vórtice de canto ($\Psi_r \times 10^3$) em função do número de Débora, da malha e do esquema de discretização^(a).

<i>De</i>	Esquema	Malha 1	Malha 2	Malha 3	Malha 4	Extrap.
0	CDS	1.209	1.185	1.164	1.161	1.160
	MINMOD	1.212	1.184	1.164	1.161	1.160
1	UDS	1.155 (0.439)	0.948 (0.241)	0.850 (0.124)	0.768 (0.051)	0.664
	LUDS	0.933 (0.384)	0.832 (0.210)	0.743 (0.136)	0.706 (0.102)	0.674
	MINMOD	0.913 (0.562)	0.813 (0.299)	0.741 (0.174)	0.707 (0.092)	0.674
	UDS	2.401	1.400 (1.364)	0.794 (0.734)	0.527 (0.401)	0.284
2	LUDS	0.963 (1.049)	0.563 (0.474)	(b)	(b)	---
	MINMOD	1.139 (1.384)	0.650 (1.116)	0.421 (0.403)	0.353 (0.390)	0.316
3	UDS	7.087	3.729 (4.234)	1.296 (2.149)	0.537 (1.030)	(d)
	LUDS	1.337 (1.429)	(b)	(b)	(b)	---
	MINMOD	2.687 (4.628)	0.886 (2.527)	0.285 (0.651)	0.205 (0.774)	0.192
	UDS	12.294	8.678	4.276	0.911 (1.805)	(d)
4	LUDS	2.355	(b)	(b)	(b)	---
	MINMOD	6.258	1.836 (3.630)	0.335 (1.623)	(c)	
5	UDS	15.500	12.804	7.448	1.955	(d)
	LUDS	3.386	(b)	(b)	(b)	---
	MINMOD	6.793	6.361	1.006 (3.341)	(c)	

^(a) Os valores entre parêntesis (quando existam) referem-se ao vórtice de entrada, $\Psi_{ip} \times 10^3$.

^(b) Diverge.

^(c) Não se obtém convergência iterativa (a solução oscila ligeiramente).

^(d) Valores negativos (sem significado físico).

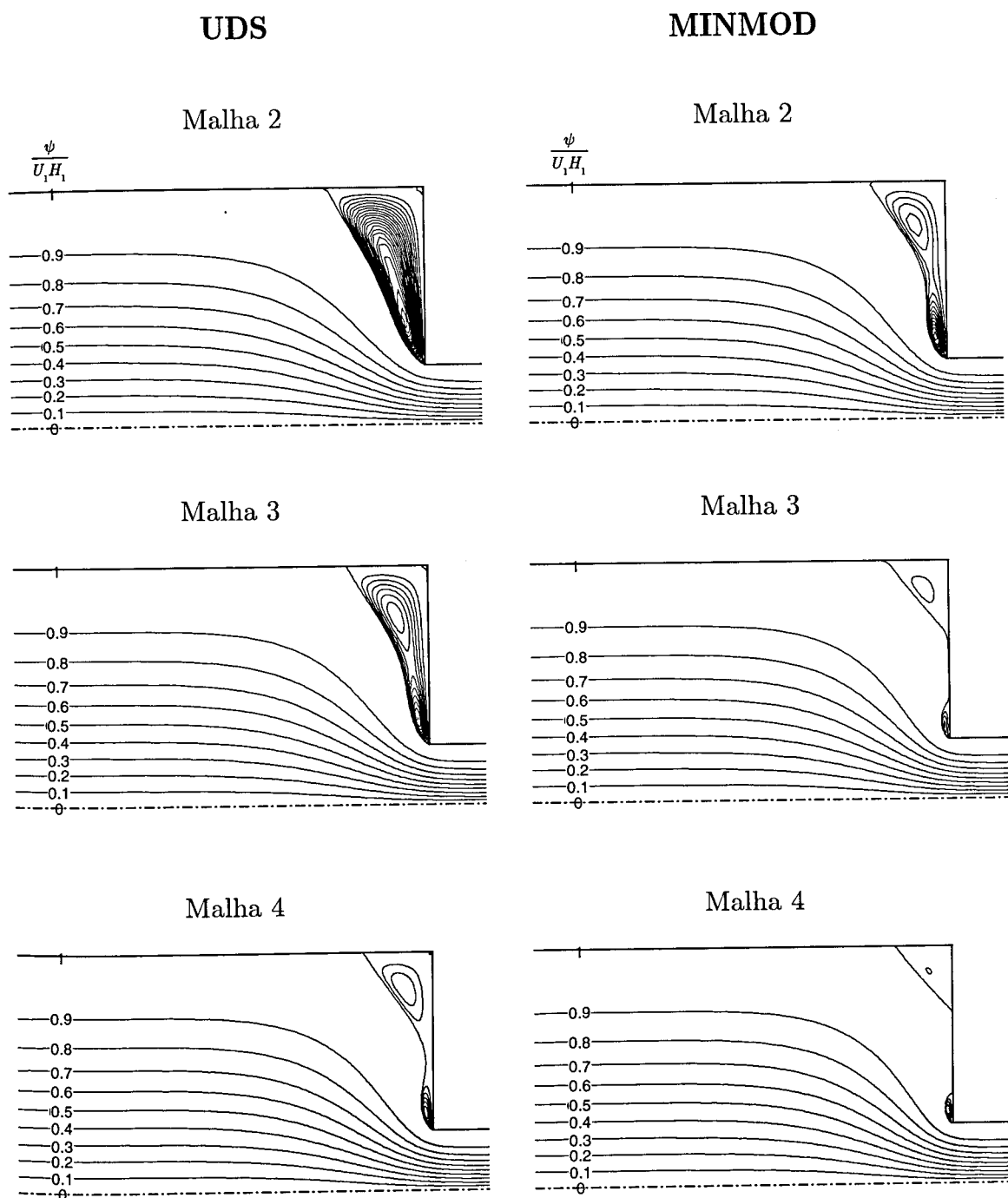


Figura 6.6: Efeito combinado do grau de refinamento da malha e do esquema de discretização, no padrão de escoamento obtido para $Re = 0.01$ e $De = 3$.

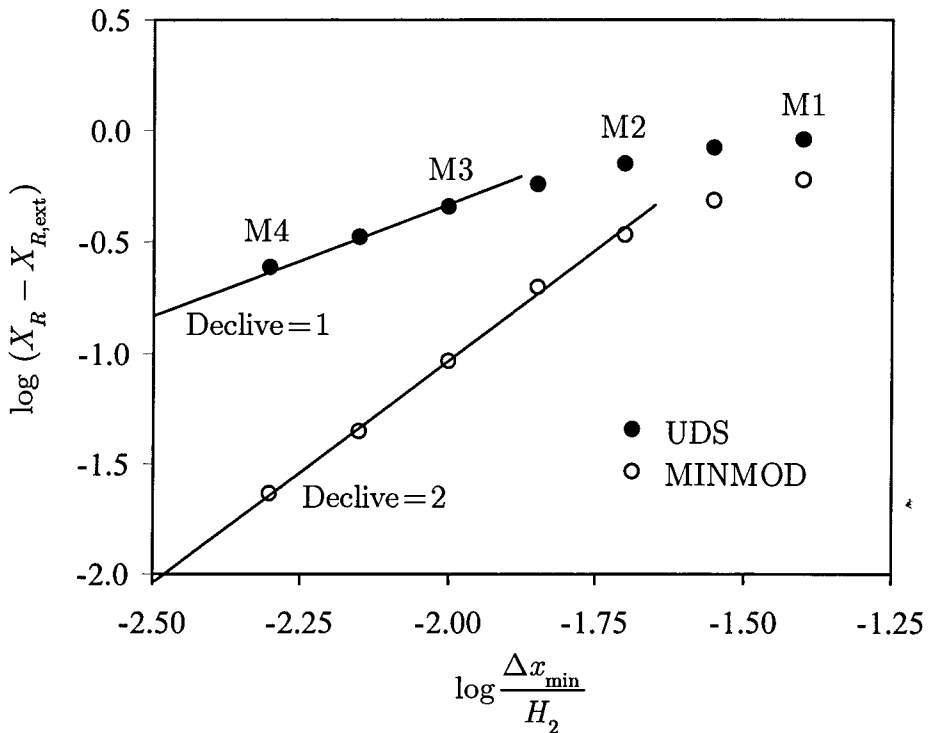


Figura 6.7: Erro estimado para X_R , em função do refinamento da malha, obtido com os esquemas UDS e MINMOD a $De=3$.

Nas Figuras 6.9 e 6.10 analisa-se o comportamento da pressão e de N_1 na vizinhança da singularidade, para linhas a y/H_2 constantes, sucessivamente mais próximas da parede a jusante da contracção (distâncias normalizadas de 0.0125, 0.0075 e 0.0025), obtidas na malha 4 para $De = 0$ e para $De = 3$. À medida que a distância ao ponto singular diminui verifica-se que os picos na pressão e em N_1 aumentam de intensidade e tornam-se mais estreitos. A localização do máximo da tensão, para valores de y/H_2 constantes, encontra-se representada na Figura 6.10, observando-se um aumento progressivo de N_1 com o aumento do grau de refinamento da malha, confirmando-se assim a singularidade prevista para N_1 no canto reentrante ($x = 0, 1 - y/H_2 = 0$).

Na Figura 6.11 representam-se os perfis da velocidade, pressão e N_1 ao longo do plano de simetria ($y/H_2 = 0$). Dado o afastamento significativo ao ponto singular observa-se uma menor sensibilidade dos resultados ao grau de refinamento da malha, podendo-se concluir que a precisão dos resultados obtidos na malha 3 já é bastante elevada para ambos os casos representados: $De = 0$ e $De = 3$. Os resultados da Figura 6.11 reflectem melhor os habituais testes de convergência com o refinamento da malha em dinâmica dos fluidos computacional para o caso

newtoniano (em que não existem singularidades quando não se calculam as tensões). Observe-se que a convergência é mais rápida para $De = 0$, comparativamente ao caso viscoelástico $De = 3$.

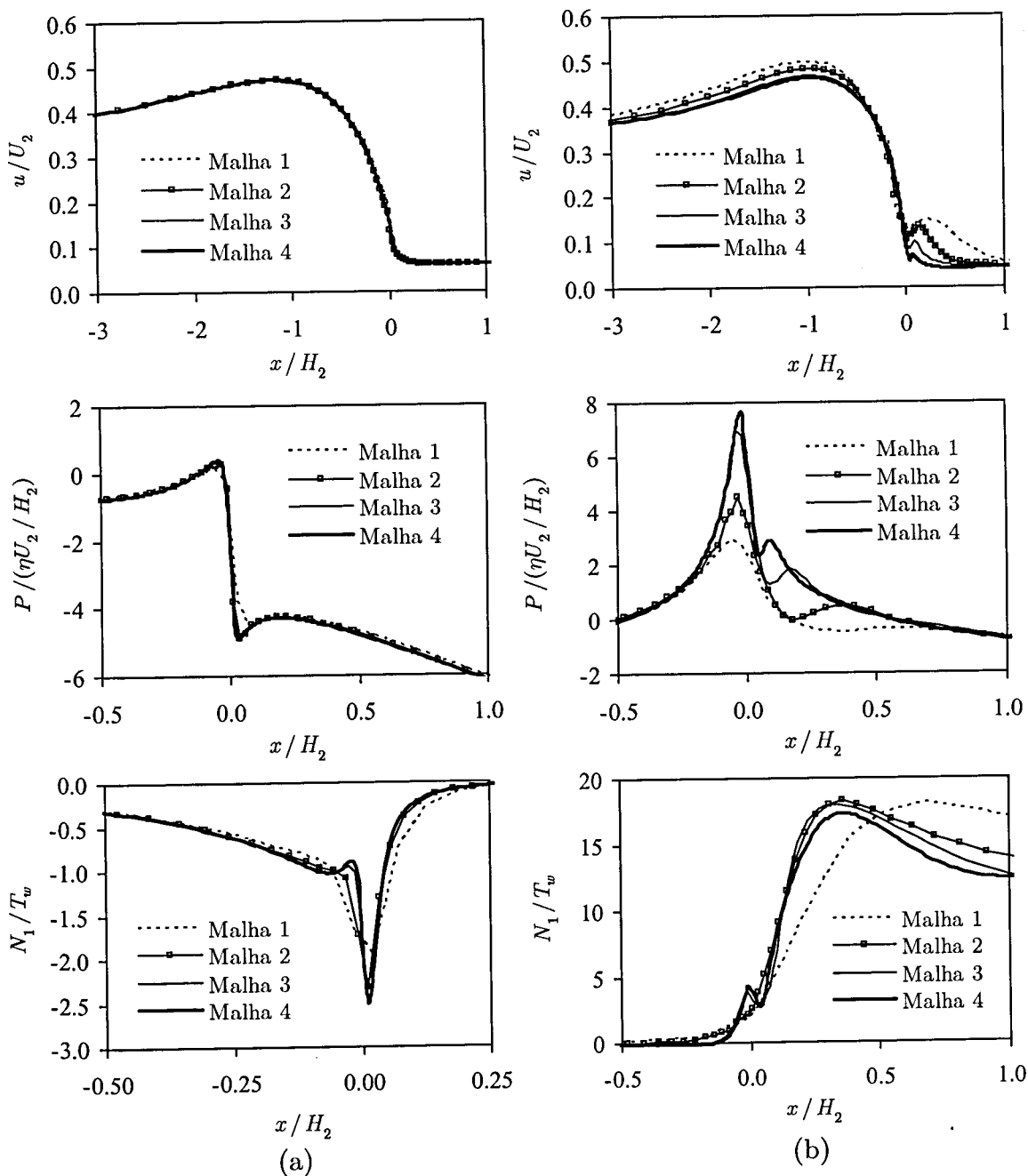


Figura 6.8: Perfis da componente longitudinal da velocidade, pressão e primeira diferença de tensões normais ao longo da linha $y/H_2 = 0.98$: (a) $De = 0$; (b) $De = 3$.

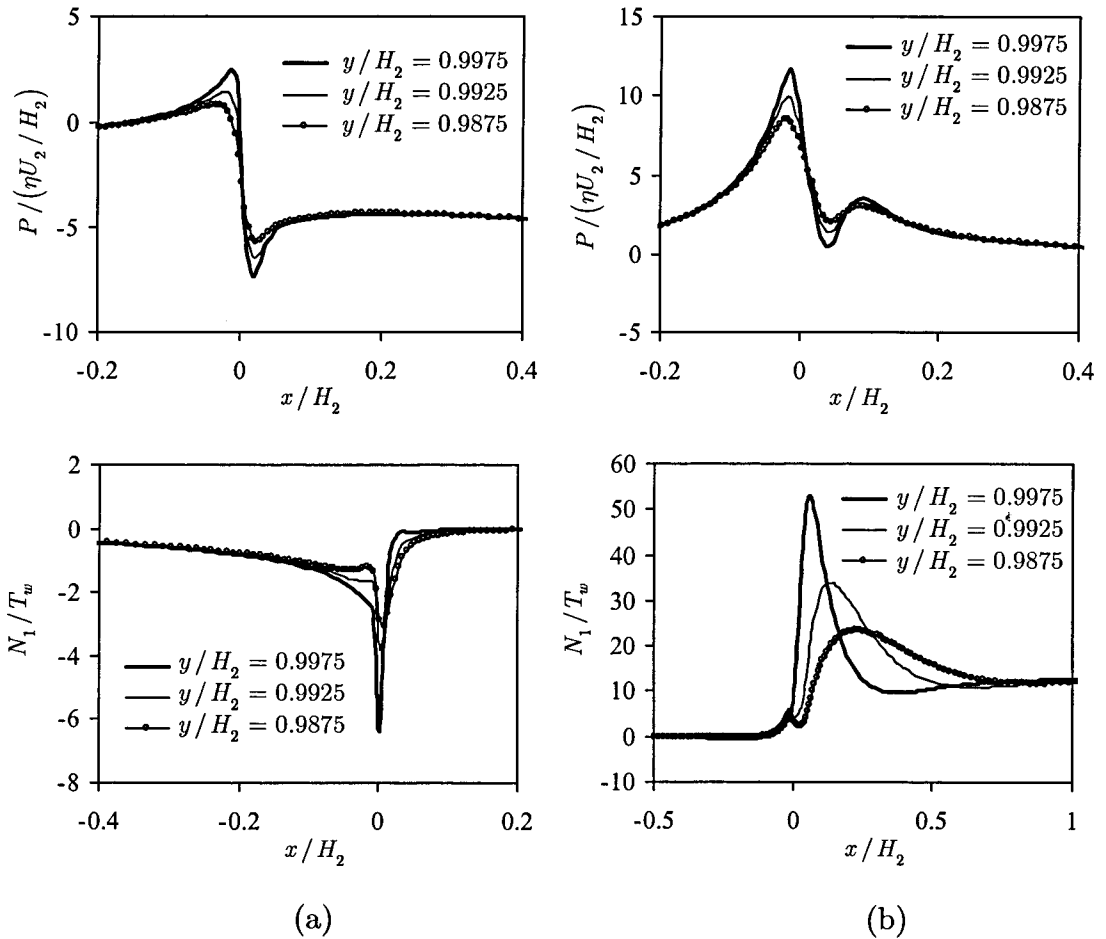


Figura 6.9: Perfis longitudinais da pressão e da primeira diferença de tensões normais na vizinhança da singularidade e da parede da conduta a jusante da contração: (a) $De=0$; (b) $De=3$.

6.3.5 Campos de tensão na vizinhança da singularidade

A Figura 6.12 ilustra a boa convergência do esquema MINMOD com o refinamento da malha, para $De = 3$. Os campos de N_1 calculados nas malhas 2, 3 e 4 mostram claramente a convergência de 2ª ordem do método numérico: reduzindo o espaçamento da malha para metade, passando da malha 2 para a malha 3, verifica-se uma variação perceptível dos contornos de N_1 ; reduzindo o espaçamento da malha novamente para metade (passando da malha 3 para a malha 4) observa-se apenas uma variação marginal nos contornos de N_1 , numa proporção aproximadamente de quatro para um, de acordo com o esperado para um esquema com precisão de 2ª ordem ($\mathcal{O}(h^2)$). A Figura 6.12 mostra ainda que os contornos de N_1 são suaves em todo o domínio, mesmo para a malha mais grosseira.

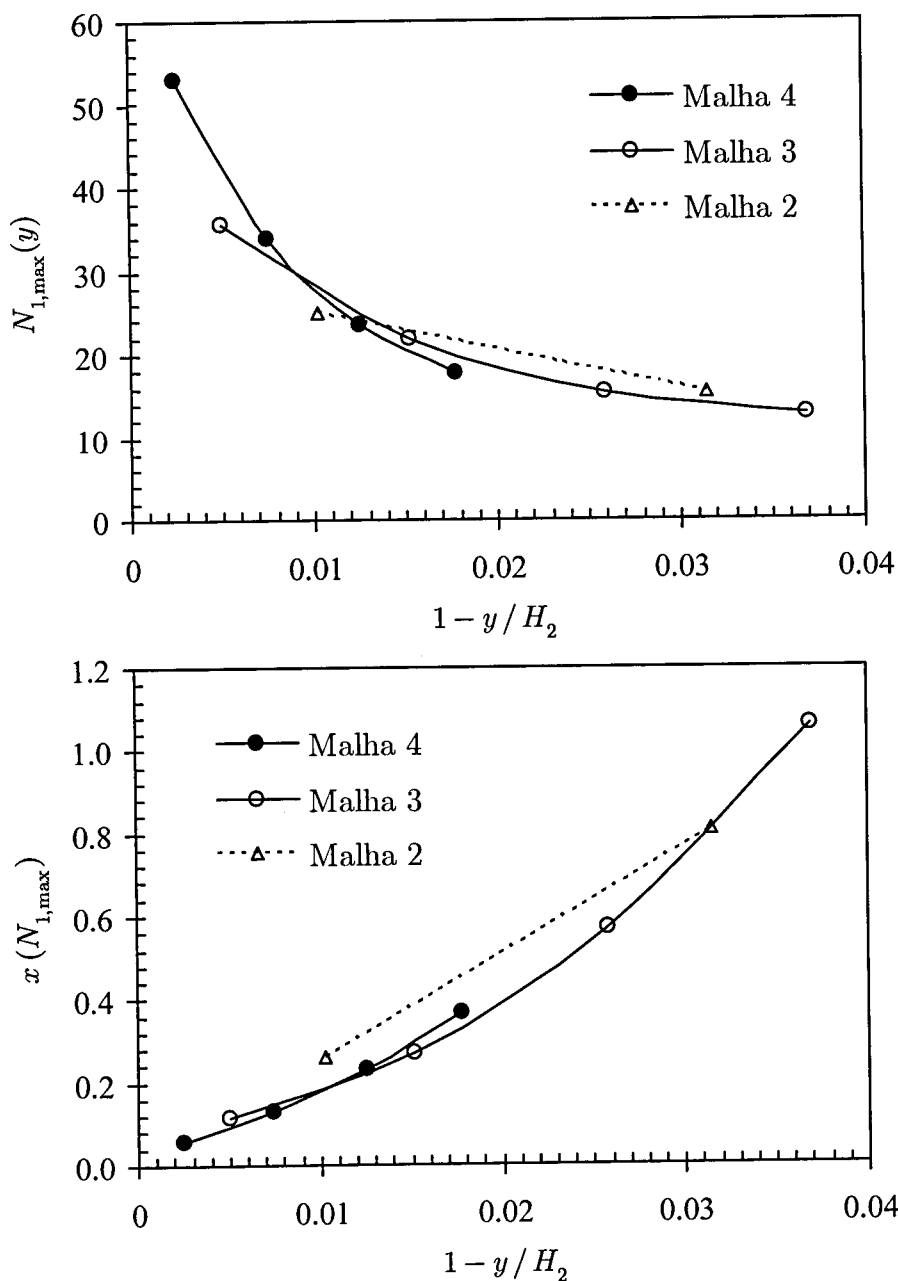


Figura 6.10: (a) Variação do máximo de N_1 com a distância à parede da conduta a jusante da contracção e (b) correspondente localização espacial.

Na Figura 6.13 representam-se em maior detalhe os campos de tensões e da pressão, em particular para a região adjacente ao canto reentrante. Os resultados foram calculados na malha 4, da qual uma pequena zona é também mostrada na Figura 6.13. Os valores máximos das tensões normais observam-se na parede da conduta a jusante da contracção, mesmo junto ao canto reentrante. Novamente são observados campos *suaves* para as tensões, devido ao uso do esquema de alta resolução que previne o aparecimento de oscilações na solução numérica.

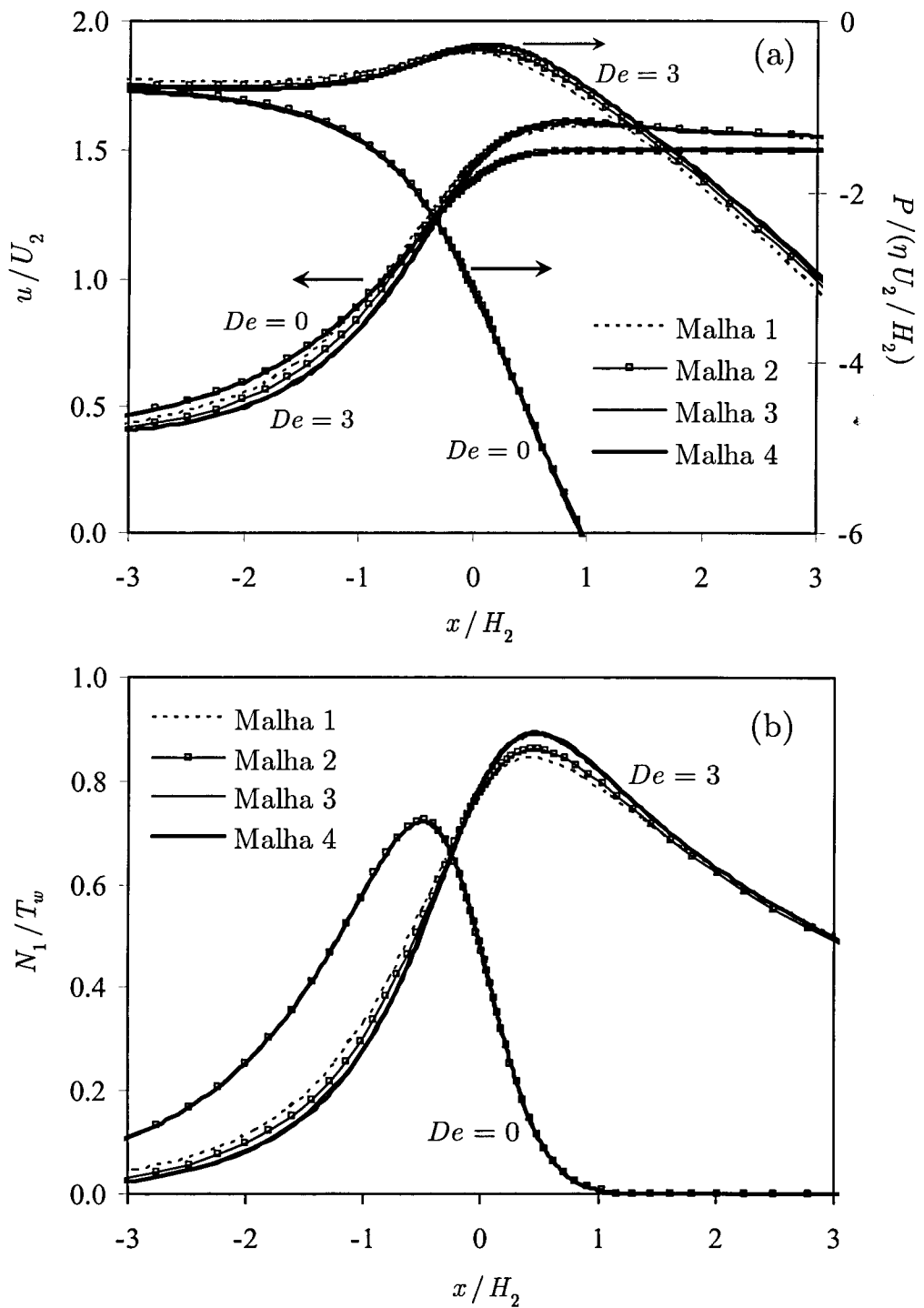


Figura 6.11: Perfis, ao longo da linha de simetria ($y/H_2=0$), para a componente longitudinal da velocidade e pressão (a) e para a primeira diferença de tensões normais (b).

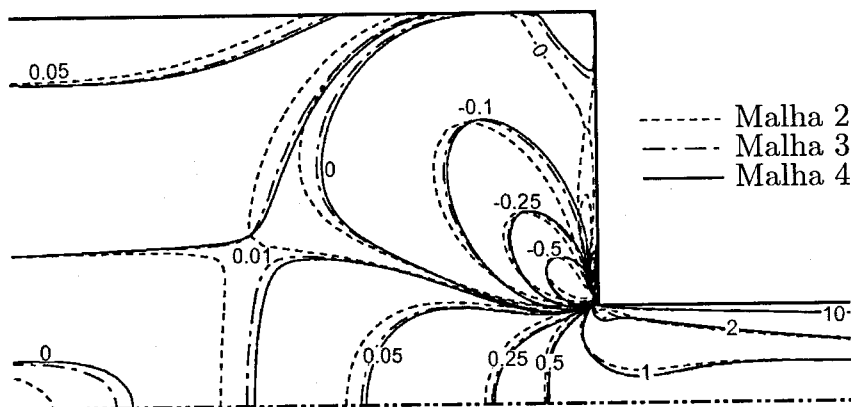


Figura 6.12: Contornos de N_1/T_w obtidos com o esquema MINMOD nas malhas 2, 3 e 4, para $De = 3$.

6.3.6 Queda de pressão na contracção (correção de Couette)

A queda de pressão extra causada pela contracção pode ser expressa adimensionalmente na forma de uma correção de Couette (Coates *et al.*, 1992),

$$C \equiv \frac{\Delta p - (\Delta p_1)_{FD} - (\Delta p_2)_{FD}}{2 T_w} \quad (6.10)$$

em que Δp traduz a queda de pressão entre as secções de entrada e de saída e $(\Delta p_1)_{FD}$ e $(\Delta p_2)_{FD}$ representam as quedas de pressão que se observariam em escoamento de Poiseuille completamente desenvolvido nas condutas a montante e a jusante da contracção, respectivamente. Os valores obtidos para a correção de Couette apresentam-se na Figura 6.14, onde se pode observar a boa concordância existente entre os valores calculados nas malhas 3 e 4 (e consequentemente nos valores estimados com base na extrapolação de Richardson).

A precisão estimada para C , obtida pela diferença entre o valor extrapolado e o valor calculado na malha 4, é de 0.03% para o caso newtoniano, 0.3% para $De \leq 3$ e 0.7% para $De > 3$. Na Figura 6.14 também se apresentam valores de C obtidos numericamente por Debbaut *et al.* (1988) para o fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1, e por Coates *et al.* (1992) para o escoamento numa contracção axissimétrica dos fluidos MCR (*Modified Chilcott-Rallison*) e MUCM (*Modified UCM*). Embora as condições estudadas por estes autores sejam diferentes das consideradas neste capítulo, a tendência observada na Figura 6.14 é semelhante, o que não era sequer esperado.

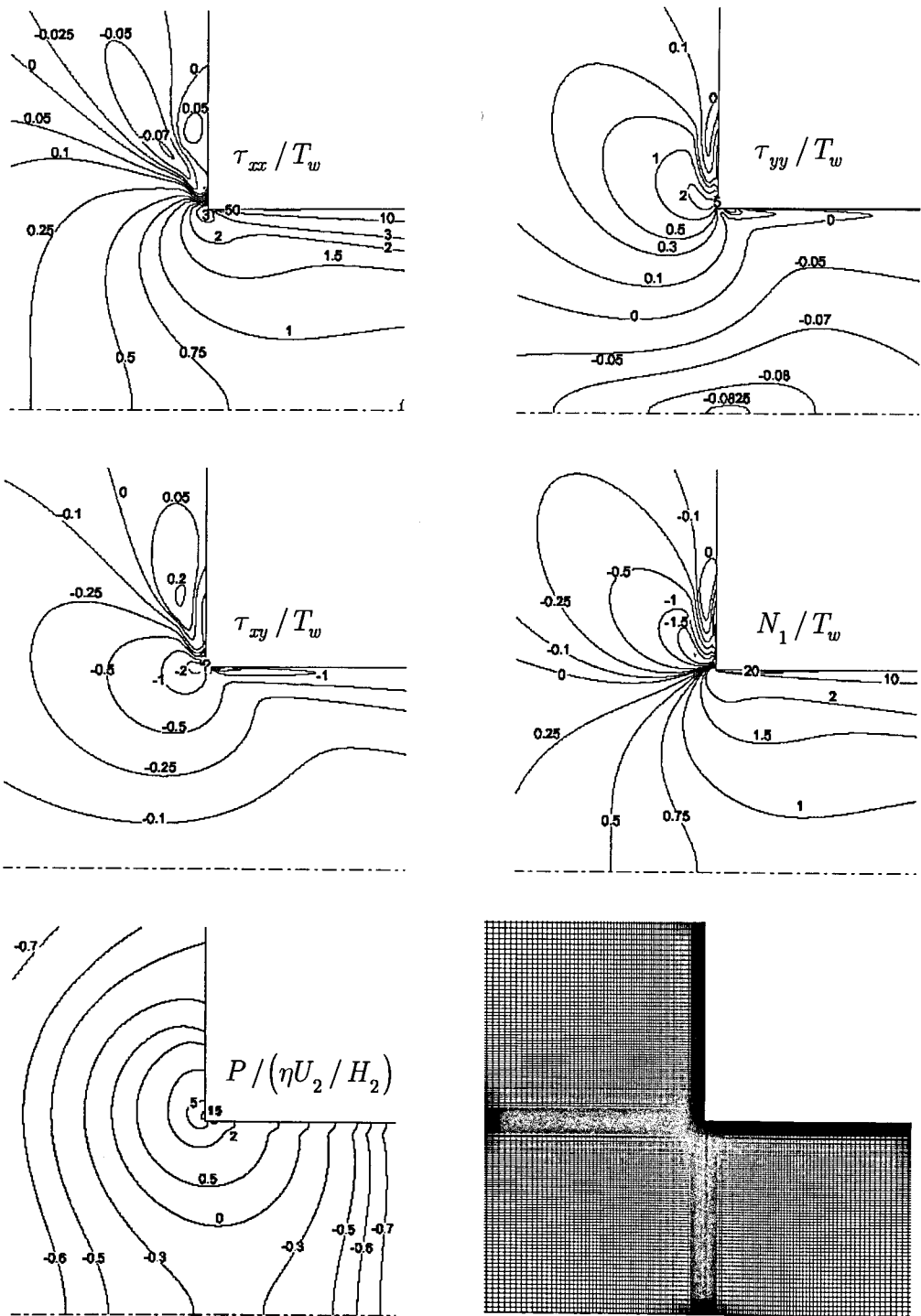


Figura 6.13: Contornos de τ_{xx}/T_w , τ_{yy}/T_w , τ_{xy}/T_w , N_1/T_w e $P/(\eta U_2/H_2)$ junto à singularidade, para $De=3$. Resultados obtidos com o esquema MINMOD na malha 4, também ilustrada (junto ao canto reentrante).

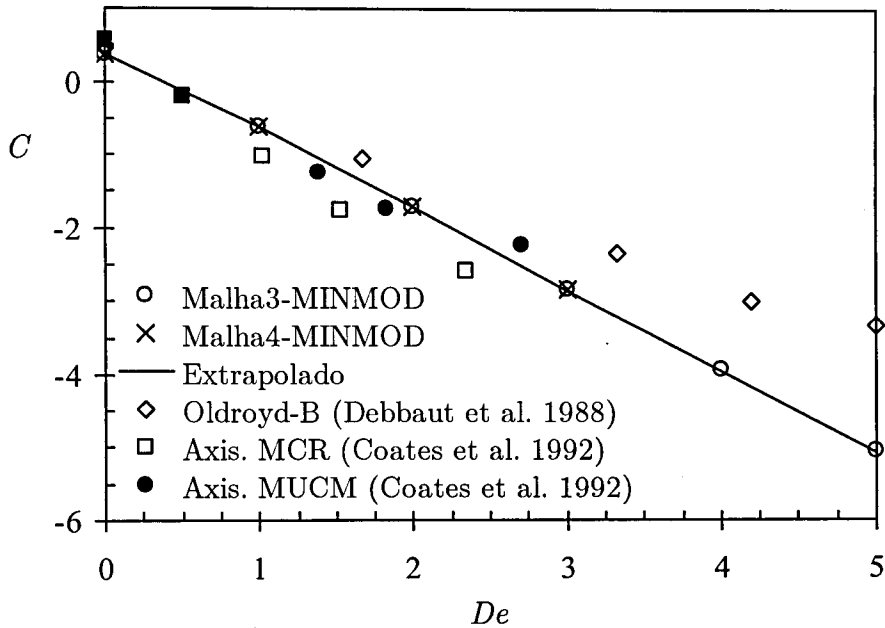


Figura 6.14: Variação da correcção de Couette com o número de Débora. Comparação com outros estudos numéricos.

6.4 Conclusões

Neste capítulo analisou-se numericamente o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1, em condições de inércia desprezável ($Re = 0.01$). Demonstrou-se que o esquema de diferenças usado na discretização do termo convectivo da equação constitutiva é extremamente importante, sendo um ponto essencial para garantir estabilidade ao processo de cálculo e precisão dos resultados. Usando os esquemas CDS e LUDS (com precisão teórica de 2ª ordem) observam-se dificuldades de convergência, causadas pela baixa estabilidade convectiva destes métodos. Em contrapartida, utilizando o esquema de alta resolução MINMOD (criado a partir de uma combinação adequada dos esquemas LUDS, CDS e UDS de forma a evitar o aparecimento artificial de extremos locais) foi possível obter soluções estáveis e precisas até valores relativamente elevados de De , ficando demonstrada a maior estabilidade do algoritmo numérico.

A ordem de convergência do esquema MINMOD foi estimada com base na variação do comprimento do vórtice de canto com o grau de refinamento da malha, tendo sido obtido o valor $p = 1.9$, a partir de soluções numéricas calculadas em três malhas distintas.

Verificou-se uma boa concordância entre as previsões teóricas de Hinch (1993) e os resultados calculados numericamente com o esquema MINMOD, para o comportamento assintótico junto ao ponto singular, das diversas componentes da velocidade e tensão.

As simulações reportadas neste capítulo confirmam qualitativamente os resultados obtidos por Oliveira e Pinho (1999b), sendo contudo significativamente mais precisos. A correção de Couette foi prevista com elevada precisão até $De = 5$, observando-se um decréscimo com De aproximadamente linear, em sintonia com as previsões de outros autores.

“Nothing is impossible for the man who doesn’t have to do it himself.”

Lei de Weiler

Capítulo 7

Escoamento de fluidos viscoelásticos em torno de um cilindro[§]

Neste capítulo analisa-se numericamente o escoamento em torno de um cilindro confinado num canal, para os fluidos UCM e Oldroyd-B. As simulações efectuadas referem-se a condições de escoamento de Stokes, anulando-se o termo convectivo nas equações de conservação da quantidade de movimento ($Re=0$). A discretização do termo convectivo das equações constitutivas é efectuada com os esquemas de alta resolução MINMOD e SMART, demonstrando-se a elevada estabilidade de ambos. Analisa-se a influência do número de Débora no coeficiente de arrasto do cilindro, obtendo-se uma excelente concordância com os resultados numéricos de Fan et al. (1999). As incertezas nos valores do coeficiente de arrasto são quantificadas com base na técnica da extrapolação de Richardson, verificando-se que os erros obtidos com o esquema SMART são aproximadamente metade dos calculados com o esquema MINMOD. Para ambos os esquemas de alta resolução observa-se uma convergência de 2ª ordem com o refinamento da malha.

7.1 Introdução

Na Secção 2.4 apresentaram-se os trabalhos mais relevantes para o escoamento de Stokes de um fluido viscoelástico em torno de um cilindro confinado entre duas placas paralelas. Este escoamento foi proposto em 1994 para problema de referência em reologia computacional (Brown e McKinley, 1994), observando-se desde então um interesse elevado no seu estudo (Owens e Phillips, 2002). As

[§] Este capítulo é baseado no artigo “Alves, Pinho e Oliveira (2001b). The flow of viscoelastic fluids past a cylinder: finite-volume high-resolution methods. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **97**: 207-232”.

principais conclusões apresentadas na Secção 2.4.3, para o caso particular do fluido Oldroyd-B, podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- Existe uma discrepância significativa entre os valores do coeficiente de arrasto (C_D) previstos pelos diversos grupos de investigação, mesmo para baixos do número de Débora, De ;
- Para $De \leq 0.7$ apenas se observa boa concordância entre os valores propostos por Fan *et al.* (1999), Caola *et al.* (2001) e Owens *et al.* (2002) (estas duas últimas referências foram publicadas posteriormente ao trabalho efectuado para este capítulo);
- Para $De > 0.7$ não se observa boa concordância entre os resultados previstos pelos diversos grupos de investigação.

Embora actualmente já existam valores de C_D concordantes para $De \leq 0.7$ (Fan *et al.*, 1999; Alves *et al.*, 2001b; Caola *et al.*, 2001; Owens *et al.*, 2002), o cenário não era tão optimista aquando da publicação do trabalho apresentado neste capítulo, que se baseia em Alves *et al.* (2001b). Como se verá, os resultados apresentados neste capítulo correspondem ao primeiro estudo independente a confirmar a elevada precisão dos valores de C_D obtidos por Fan *et al.* (1999), estabelecendo esses resultados como valores de referência para este escoamento padrão.

7.2 Geometria do escoamento e malhas computacionais

O problema em estudo consiste no escoamento em torno de um cilindro, colocado perpendicularmente no centro de um canal. Na Figura 7.1 apresenta-se um esquema com a geometria do escoamento e as variáveis relevantes.

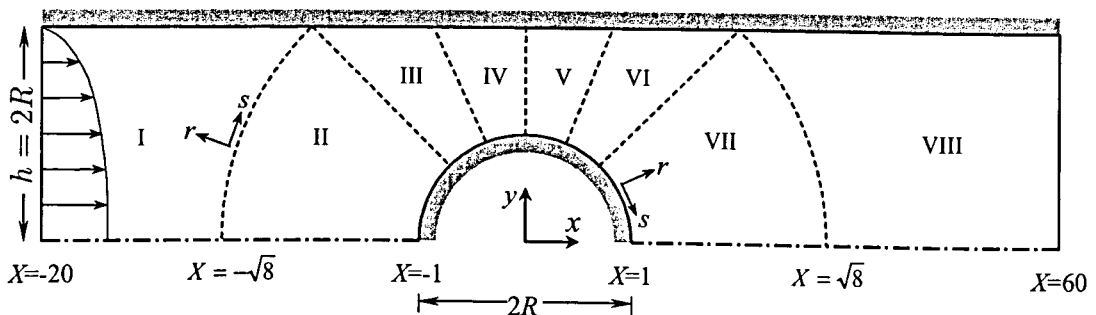


Figura 7.1: Representação esquemática da geometria em estudo e definição dos blocos usados na geração da malha computacional ($X = x/R$). O escoamento processa-se da esquerda para a direita.

De acordo com a sugestão de Brown e McKinley (1994) considera-se a razão $h/R = 2$, em que h representa a semi-largura do canal e R o raio do cilindro. O domínio computacional tem um comprimento total de $80R$, desde $x = -20R$ até $x = 60R$ (o cilindro está centrado na origem do sistema de coordenadas $x - y$).

Embora a conduta a montante do cilindro seja suficientemente longa para o desenvolvimento completo dos campos de velocidades e tensões, optou-se por impor na secção de entrada do domínio de cálculo os perfis teóricos da velocidade e tensões. A conduta a jusante do cilindro também é suficientemente longa para que os perfis à saída do domínio de cálculo se encontrem completamente desenvolvidos, bem como para evitar eventuais efeitos indesejáveis no escoamento causados pela condição fronteira de saída. Nestas condições é legítimo estipular no plano de saída gradientes axiais nulos para todas as variáveis, incluindo o gradiente de pressão.

Todos os cálculos reportados neste capítulo foram efectuados para o caso limite $Re = 0$, tendo-se anulado o termo convectivo nas equações de conservação da quantidade de movimento. Assim, o grupo adimensional com relevância para este escoamento é somente o número de Débora, aqui definido na sua forma usual,

$$De = \frac{\lambda U}{R} \quad (7.1)$$

sendo U a velocidade média no canal.

Para o escoamento de Stokes de um fluido Oldroyd-B torna-se necessário definir um segundo grupo adimensional, sendo habitualmente escolhida a razão entre a viscosidade do solvente newtoniano, η_s , e a viscosidade total, η_0 ,

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0} = \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p} \quad (7.2)$$

O valor $\beta = 0.59$ caracteriza o fluido de Boger usado nas experiências de McKinley *et al.* (1993), e tem sido usado desde então na maioria dos trabalhos numéricos publicados para este escoamento (e.g., Liu *et al.*, 1998; Fan *et al.*, 1999; Sun *et al.*, 1999; Dou e Phan-Thien, 1999; Caola *et al.*, 2001; Owens *et al.*, 2002), sendo também adoptado neste estudo para efectuar comparações directas dos resultados.

Admite-se que existe simetria do escoamento relativamente ao plano central ($y = 0$), considerando-se assim apenas metade do domínio de cálculo. Na geração da malha computacional efectuou-se a divisão do domínio de cálculo em oito blocos estruturados, como se ilustra na Figura 7.1. Em cada um desses blocos existe uma maior concentração de células junto à parede do cilindro e na vizinhança da linha

central (particularmente para a malha M60-WR), para ser possível prever com boa precisão a camada limite e a esteira a jusante do cilindro, onde se observam gradientes elevados de tensões normais (Fan *et al.*, 1999). Foram utilizadas sete malhas computacionais, cujas características geométricas são detalhadas na Tabela 7.1. O número colocado à direita da letra M indica o número de células na direcção radial entre a parede do cilindro e a parede do canal.

Tabela 7.1- Características geométricas das malhas (NS \times NR células por bloco)^(a).

Bloco	M30	M45	M60	M60(WR)	M75	M90	M120
I	25 \times 24	38 \times 36	50 \times 48	50 \times 60	62 \times 60	75 \times 72	100 \times 96
II	25 \times 30	38 \times 45	50 \times 60	50 \times 60	62 \times 75	75 \times 90	100 \times 120
III	13 \times 30	19 \times 45	25 \times 60	25 \times 60	31 \times 75	38 \times 90	50 \times 120
IV	13 \times 30	19 \times 45	25 \times 60	25 \times 60	31 \times 75	38 \times 90	50 \times 120
V	13 \times 30	19 \times 45	25 \times 60	25 \times 60	31 \times 75	38 \times 90	50 \times 120
VI	13 \times 30	19 \times 45	25 \times 60	25 \times 60	31 \times 75	38 \times 90	50 \times 120
VII	25 \times 30	38 \times 45	50 \times 60	66 \times 60	62 \times 75	75 \times 90	100 \times 120
VIII	25 \times 30	38 \times 45	50 \times 60	66 \times 60	62 \times 75	75 \times 90	100 \times 120
NC	4410	9918	17400	19320	26970	39330	69600
(NS) ^{tot}	102	152	200	216	248	302	400
$(\Delta r/R)_{\min}^{(b)}$	0.00963	0.00646	0.00481	0.00481	0.00383	0.00318	0.00238
$(\Delta s/R)_{\min}^{(b)}$	0.0302	0.0207	0.0157	0.000613	0.0127	0.0104	0.00785

^(a)NC: número total de células; NS, NR: número de células segundo as direcções tangencial e radial, respectivamente; (NS)^{tot}: número de células tangenciais em torno do (meio) cilindro.

^(b)Célula com menor dimensão (localizada na superfície do cilindro).

Para ilustrar o elevado grau de refinamento das malhas usadas neste estudo, apresenta-se na parte superior da Figura 7.2 a malha intermédia, M60. A malha M120 é ainda mais refinada, possuindo um número total de células quatro vezes superior, como se pode verificar na Tabela 7.1. Como se demonstrará, nem mesmo a malha M120 é suficientemente refinada na direcção tangencial (s) para prever adequadamente as tensões normais elevadas que se desenvolvem na esteira do cilindro. Por essa razão criou-se uma malha equivalente à M60, mas com uma maior concentração de células na zona da esteira, que lhe dá um refinamento local na direcção tangencial dez vezes superior ao da malha M120. A nomenclatura M60-WR foi escolhida para indicar que a malha tem um refinamento semelhante à malha M60, excepto na zona da esteira do cilindro onde se efectuou um refinamento local mais intenso (daí o uso do sufixo WR, indicativo da malha ser *Wake Refined*), como se ilustra na Figura 7.2. A malha M60-WR será usada apenas no estudo detalhado dos campos de tensões na esteira do cilindro.

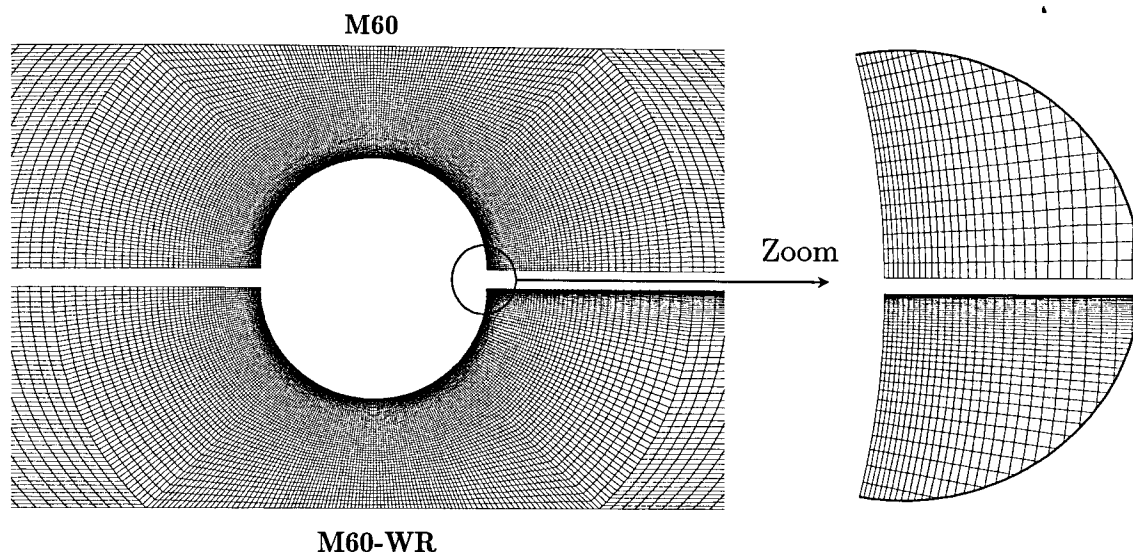


Figura 7.2: Ilustração das malhas M60 e M60-WR (*Wake Refined*) na vizinhança do cilindro.

7.3 Resultados

Os resultados obtidos são apresentados em duas formas distintas: por um lado analisa-se uma quantidade escalar integral, representativa do escoamento como um todo; por outro lado, apresentam-se perfis detalhados na vizinhança do cilindro da velocidade e da tensão normal, τ_{xx} .

A quantidade escalar que se costuma seleccionar para este escoamento é o coeficiente de arrasto, calculado por integração dos campos de tensão e pressão ao longo da superfície do cilindro,

$$C_D \equiv \frac{1}{\eta_0 U} \int_S (\boldsymbol{\tau} - p \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{i} \, dS \quad (7.3)$$

em que $\boldsymbol{\delta}$ representa o tensor unitário, \mathbf{n} um vector unitário perpendicular à superfície do cilindro e \mathbf{i} um vector unitário alinhado com a direcção x .

A previsão correcta de uma quantidade integral não é garantia de que os campos de velocidade, pressão ou tensão tenham sido calculados com precisão adequada, uma vez que poderá haver cancelamento de erros. Assim, também serão apresentados os perfis de velocidade, pressão e tensão normal na camada limite junto ao cilindro e ao longo da linha central. Os resultados obtidos neste estudo serão comparados com resultados publicados antes da realização do trabalho apresentado neste capítulo (Liu *et al.*, 1998; Fan *et al.*, 1999; Sun *et al.*, 1999; Dou e Phan-Thien, 1999), que decorreu durante o primeiro semestre de 2000.

Posteriormente à data de publicação do material contido neste capítulo (Alves *et al.*, 2001b) foram publicados outros trabalhos relevantes para este escoamento, que também serão analisados (Caola *et al.*, 2001; Owens *et al.*, 2002).

7.3.1 Ordem de convergência

Os valores do coeficiente de arrasto previstos nas diversas malhas são apresentados nas Tabelas 7.2 e 7.3 para os fluidos UCM e Oldroyd-B, respectivamente, incluindo-se também os valores obtidos por outros autores. Nas colunas “Extrap.” indicam-se os valores de C_D estimados com a técnica da extrapolação de Richardson.

A ordem de convergência do método numérico pode ser obtida por dois métodos alternativos. Num desses procedimentos, também usado por Liu *et al.* (1998), representam-se graficamente os valores de C_D calculados nas várias malhas computacionais, em função duma dimensão característica dessas malhas (e.g., Δr_{\min}). Efectuando um ajuste do tipo,

$$C_D = C_{D,\text{extr}} + b(\Delta r)^p \quad (7.4)$$

e usando-se por exemplo o método dos mínimos quadrados, é possível estimar simultaneamente o valor *extrapolado* do coeficiente de arrasto, $C_{D,\text{extr}}$, e a ordem de convergência do método, p .

Alternativamente pode-se usar a técnica da extrapolação de Richardson para estimar a ordem de convergência e o valor exacto (ou de referência) do coeficiente de arrasto, $C_{D,\text{ref}}$, usando as Eqs. (6.3) e (6.5). Representando o erro estimado, $|C_D - C_{D,\text{ref}}|$, em função de $(\Delta r/R)_{\min}$ é possível determinar a ordem de convergência do método a partir do declive obtido, em escalas log-log, como se ilustra na Figura 7.3. Para $C_{D,\text{ref}}$ usou-se o valor estimado com o esquema SMART, por ser o mais preciso.

As ordens de convergência obtidas por este segundo método são apresentadas na Tabela 7.4. Como esperado, verifica-se que o esquema UDS apenas possui precisão de 1ª ordem. Em contrapartida, para os esquemas de alta resolução SMART e MINMOD obtém-se precisão de 2ª ordem (aproximadamente), sendo o erro das soluções calculadas com o esquema SMART cerca de metade do que se obtém com o esquema MINMOD.

Tabela 7.2- Coeficientes de arrasto previstos para o fluido UCM nas diversas malhas computacionais. Comparação com os resultados obtidos por Fan et al. (1999).

<i>De</i>	M45	M60	M75	M90	M120	Extrap.	Esquema	Fan <i>et al.</i> (1999)	
								MIX 1	DEVSS
0	132.23 ^(a)	132.342			132.369	132.378	SMART	132.36	132.36
0.01		132.080			132.225	132.370	UDS		
		132.129			132.250	132.291	MINMOD		
		132.132			132.251	132.291	SMART		
0.025		131.688			131.878	132.069	UDS		
		131.809			131.941	131.985	MINMOD		
		131.817			131.945	131.988	SMART		
0.05		130.534			130.786	131.038	UDS		
		130.768			130.907	130.953	MINMOD		
		130.780			130.912	130.956	SMART		
0.1		126.799			127.141	127.483	UDS		
		127.203			127.347	127.395	MINMOD		
		127.224			127.356	127.400	SMART	127.41	127.42
0.2		117.077			117.485	117.893	UDS		
		117.615			117.751	117.796	MINMOD		
		117.645			117.767	117.808	SMART	117.81	117.83
0.3	107.806	108.043	108.178	108.264	108.385	108.727	UDS		
	108.387	108.484	108.534	108.566	108.600	108.639	MINMOD		
	108.444	108.515	108.555	108.582	108.614	108.647	SMART	108.66	108.68
0.4		101.134			101.300	101.466	UDS		
		101.265			101.344	101.370	MINMOD		
		101.287			101.361	101.385	SMART	101.41	101.43
0.5		96.390			96.275	96.160	UDS		
		95.984			96.030	96.045	MINMOD		
		95.987			96.037	96.054	SMART	96.08	96.11
0.6		93.467			92.970	92.473	UDS		
		92.302			92.306	92.307	MINMOD		
		92.277			92.298	92.305	SMART	92.33	92.37
0.7		91.973			90.995	90.017	UDS		
		89.857			89.799	89.780	MINMOD		
		89.796			89.774	89.767	SMART	89.79	89.84
0.8		91.578			90.039	88.500	UDS		
		88.359			88.207	88.156	MINMOD		
		88.253			88.178	88.153	SMART		88.18
0.9	93.113	92.029	91.221	90.581	89.856	87.683	UDS		
	87.850	87.585	87.452	87.373	87.277	87.174	MINMOD		
	87.590	87.395	87.325	87.268	87.218	87.160	SMART		
1.0		93.063			90.268	87.473	UDS		
		87.272			86.750	86.576	MINMOD		
		87.050			^(b)	^(b)	SMART		
1.1		94.630			90.995	87.360	UDS		
		87.355			^(b)	^(b)	MINMOD		
1.2		96.828			^(b)	^(b)	UDS		
1.3		98.942					UDS		
1.4		102.060					UDS		
1.5		104.575					UDS		

^(a) Calculado na malha M30.^(b) Não converge.

Tabela 7.3- Coeficientes de arrasto previstos para o fluido Oldroyd-B nas diversas malhas computacionais (com o esquema SMART).

De	M45	M60	M75	M90	M120	Extrap.
0.01		132.282			132.336	132.354
0.025		132.156			132.209	132.227
0.05		131.735			131.788	131.806
0.1		130.307			130.343	130.355
0.2		126.575			126.618	126.632
0.3	123.107	123.151	123.175	123.185	123.195	123.210
0.4		120.564			120.596	120.607
0.5		118.814			118.832	118.838
0.6		117.782			117.786	117.787
0.7		117.344			117.328	117.323
0.8		117.410			117.370	117.357
0.9	117.948	117.907	117.888	117.876	117.865	117.851
1.0		118.685			118.560	118.518

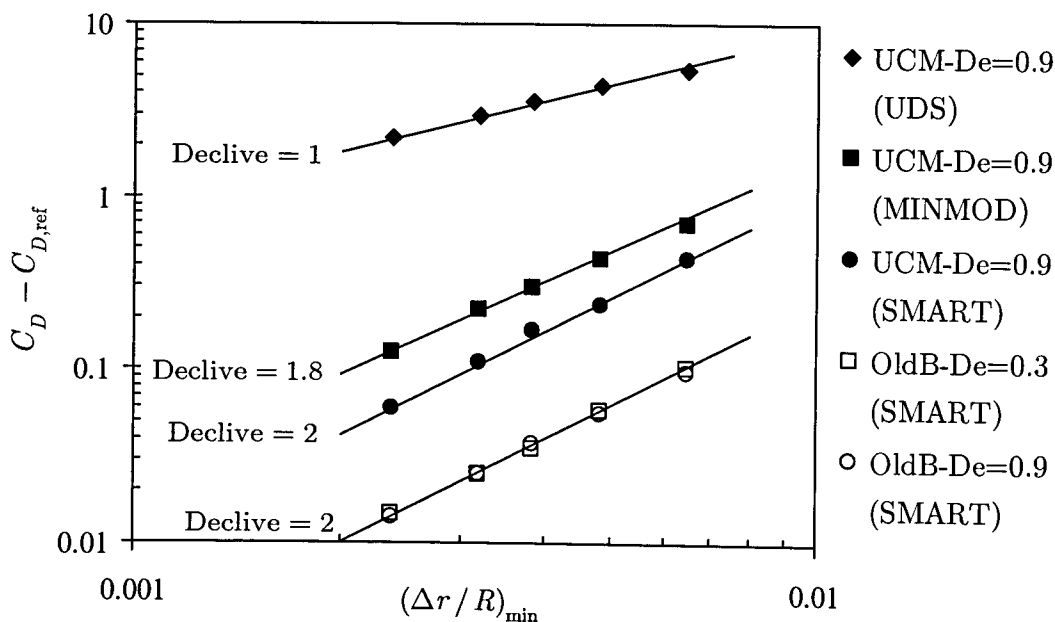


Figura 7.3: Erro estimado no coeficiente de arrasto em função da dimensão mínima das malhas computacionais. Determinação da ordem de convergência dos esquemas usados na discretização do termo convectivo das equações constitutivas.

Tabela 7.4- Ordem de convergência do método numérico obtida com os diversos esquemas de discretização do termo convectivo das equações constitutivas.

De	UCM			Oldroyd-B
	UDS	MINMOD	SMART	SMART
0.3	1.1	1.9	2.0	2.0
0.9	1.0	1.8	2.0	2.0

7.3.2 Fluido UCM

Na Figura 7.4(a) comparam-se os resultados de C_D obtidos neste estudo, com os valores propostos por Fan *et al.* (1999) e por Phan-Thien e Dou (1999). Os resultados obtidos neste trabalho, por extrapolação dos valores calculados com os esquemas MINMOD e SMART, são idênticos. Verifica-se uma excelente concordância entre os resultados obtidos neste estudo e os valores propostos por Fan *et al.* (1999), para toda a gama de De . Os resultados apresentados em Fan *et al.* (1999) foram calculados com um método de elementos finitos, usando uma técnica de refinamento h - p com elevado grau de precisão, baseada em polinômios até 6º grau. A desvantagem desse método, além dos recursos computacionais intensivos, reside na sua aplicabilidade limitada, não sendo estável em problemas onde existam pontos singulares, como é o caso do escoamento de um fluido viscoelástico numa contracção. Os resultados calculados por Phan-Thien e Dou (1999) com um método CVFEM (mistura de volumes de controlo e elementos finitos) afastam-se significativamente dos valores obtidos neste estudo, chegando a ser menos precisos do que os valores calculados com o esquema UDS na malha M60. Por outro lado os resultados obtidos por Phan-Thien e Dou (1999) limitam-se a valores de $De \leq 0.43$, enquanto que o esquema UDS na malha M60 permite obter soluções estáveis até $De = 1.5$, como se ilustra na Figura 7.4(b). Esta figura também ilustra que os resultados obtidos com o esquema UDS só são precisos caso sejam usadas malhas computacionais muito refinadas, ou se for possível utilizar a técnica da extrapolação de Richardson. Esta limitação agrava-se à medida que a elasticidade aumenta (maiores valores de De).

Para se ilustrar inequivocamente o ganho em precisão numérica conseguido com a implementação dos esquemas de alta resolução, apresenta-se na Figura 7.5 a variação do erro relativo nos valores de C_D com o número de Débora. A solução de referência foi estimada com o esquema SMART usando a técnica da extrapolação de Richardson. Para $De \leq 0.5$ observa-se uma boa concordância entre as várias previsões, apesar do esquema UDS já demonstrar uma imprecisão acrescida (com diferenças superiores a 0.6% nas soluções obtidas na malha M60). Para $De > 0.5$ observa-se uma deterioração progressiva na precisão dos valores de C_D calculados com o esquema UDS. Por exemplo, a $De = 0.7$ o erro relativo em C_D sobe para 2.5 e 1.4% nas malhas M60 e M120, respectivamente. Contudo, mesmo para este valor elevado de De , os erros obtidos com o esquema UDS não são tão elevados,

caso sejam considerados os valores estimados pela extrapolação de Richardson (neste caso apenas 0.3%), em vez dos valores de C_D obtidos nas malhas mais refinadas. Em contrapartida, para os esquemas de alta resolução os erros relativos são sempre baixos: por exemplo, para $De = 0.9$ obtém-se um erro de apenas 0.07% na malha M120, e de 0.3% na malha M60, quando se usa o esquema SMART na discretização do termo convectivo da equação constitutiva.

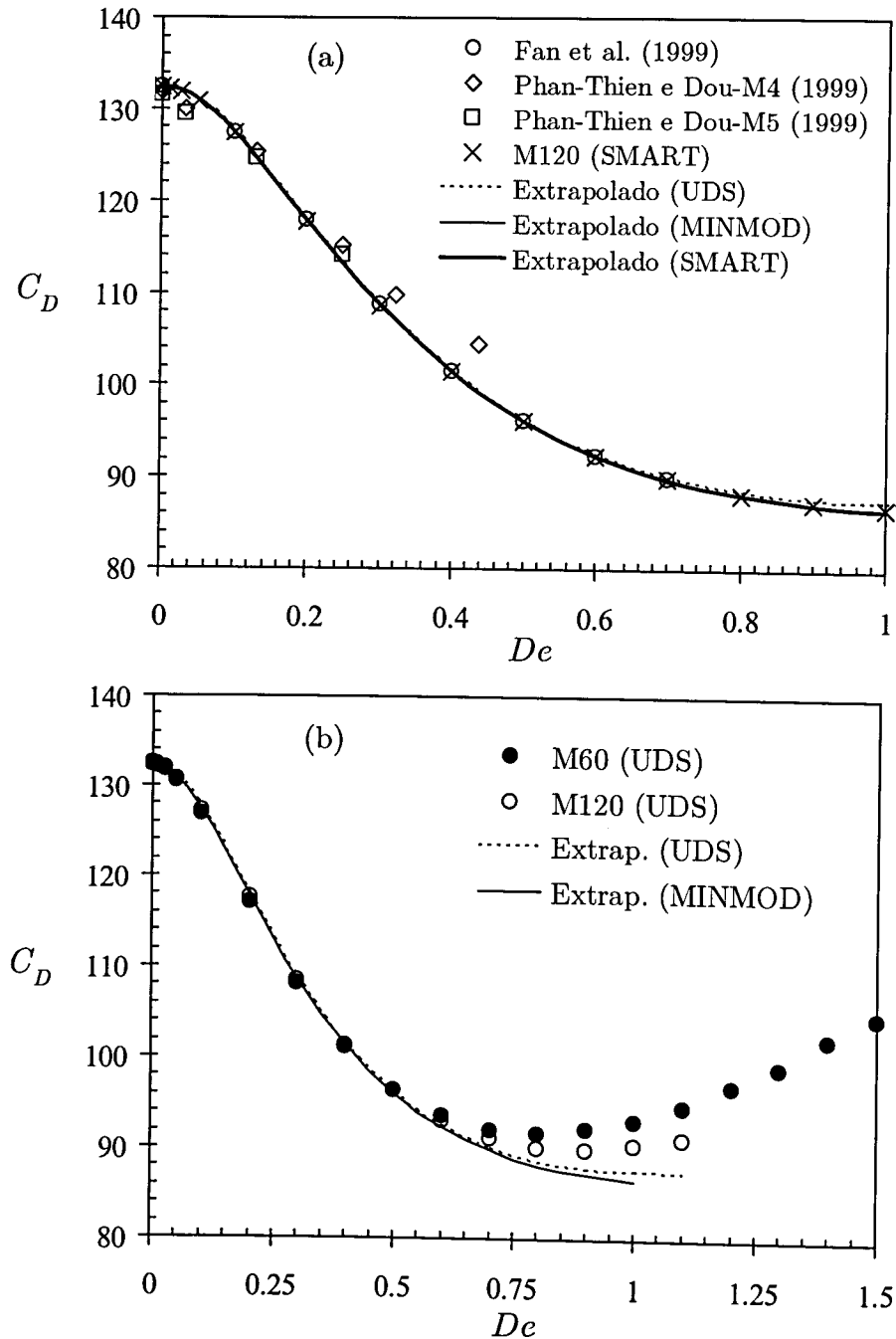


Figura 7.4: Variação do coeficiente de arrasto com o número de Débora: (a) comparação com resultados obtidos por outros autores; (b) previsões obtidas com o esquema de diferenças de montante de 1ª ordem (UDS).

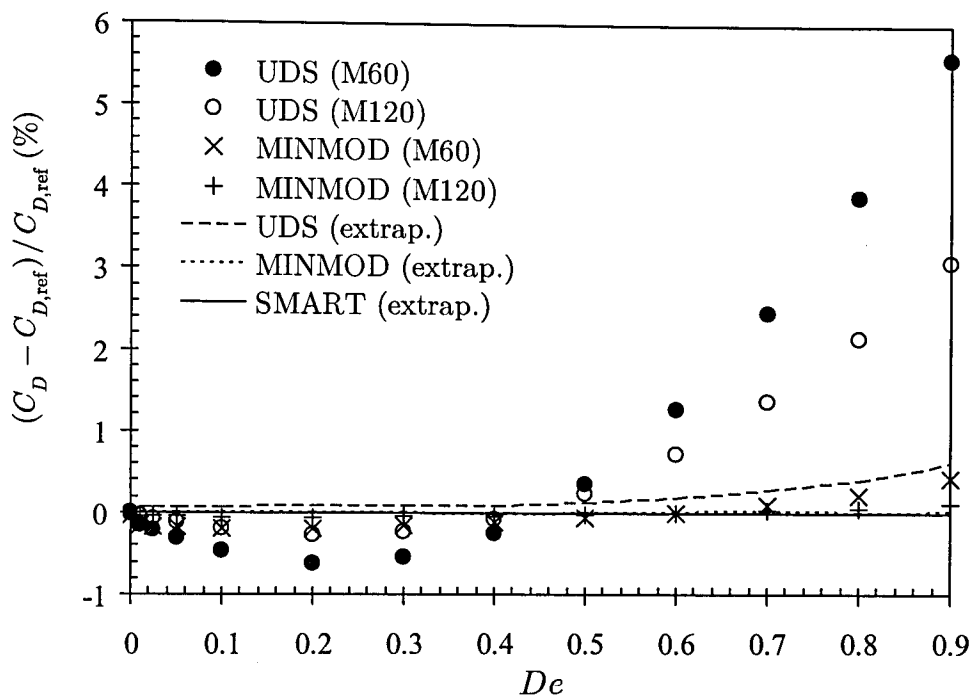


Figura 7.5: Influência do número de Débora no erro relativo do coeficiente de arrasto (calculado relativamente ao valor extrapolado com o esquema SMART).

Na Figura 7.6 comparam-se os perfis da velocidade ao longo da linha central ($y = 0$) para um fluido newtoniano ($De = 0$), e para um fluido UCM a diferentes valores de De . Tal como esperado, o perfil newtoniano é simétrico (devido à reversibilidade dos escoamentos newtonianos a baixo Re). Para o fluido UCM perde-se a simetria do escoamento, observando-se que um aumento da elasticidade conduz a um alongamento da zona de recuperação da velocidade, excepto na região vizinha do ponto de estagnação na esteira do cilindro (como se demonstra na pequena figura colocada no interior da Figura 7.6). Os perfis apresentados na Figura 7.6, obtidos com o esquema SMART na malha M120, são independentes da malha computacional uma vez que as previsões obtidas nas malhas M60 e M120 são coincidentes. A Figura 7.6 mostra que, para o fluido UCM, existe um deslocamento das linhas de corrente para jusante do cilindro, comparativamente ao caso newtoniano. A excepção restringe-se apenas a uma pequena região localizada junto ao ponto de estagnação de jusante, onde ocorre um ligeiro desvio das linhas de corrente na direcção de montante.

Na Figura 7.7 apresentam-se os perfis da tensão normal τ_{xx} , ao longo da linha central e da superfície do cilindro, verificando-se a ocorrência de dois máximos locais de τ_{xx} . O primeiro máximo de τ_{xx} ocorre na camada limite que se

desenvolve sobre a superfície do cilindro, e o segundo máximo localiza-se na esteira do cilindro, a uma pequena distância do ponto de estagnação de jusante. Na Figura 7.7 observa-se que o aumento da tensão normal máxima na camada limite é progressivamente menor com De , enquanto que o máximo de τ_{xx} localizado na esteira do cilindro aumenta exponencialmente para os valores de De mais elevados. Resultados semelhantes foram reportadas por Fan *et al.* (1999), que relacionaram o crescimento brusco do máximo de τ_{xx} na esteira do cilindro com a perda de convergência do seu método de cálculo para valores de De elevados. A este respeito, o método desenvolvido na presente tese demonstra uma maior robustez, uma vez que foi possível alcançar soluções estáveis até $De = 1$ e 0.9 , respectivamente para os esquemas MINMOD e SMART, em contraste com as simulações de Fan *et al.* (1999) que apenas são estáveis até $De = 0.75$.

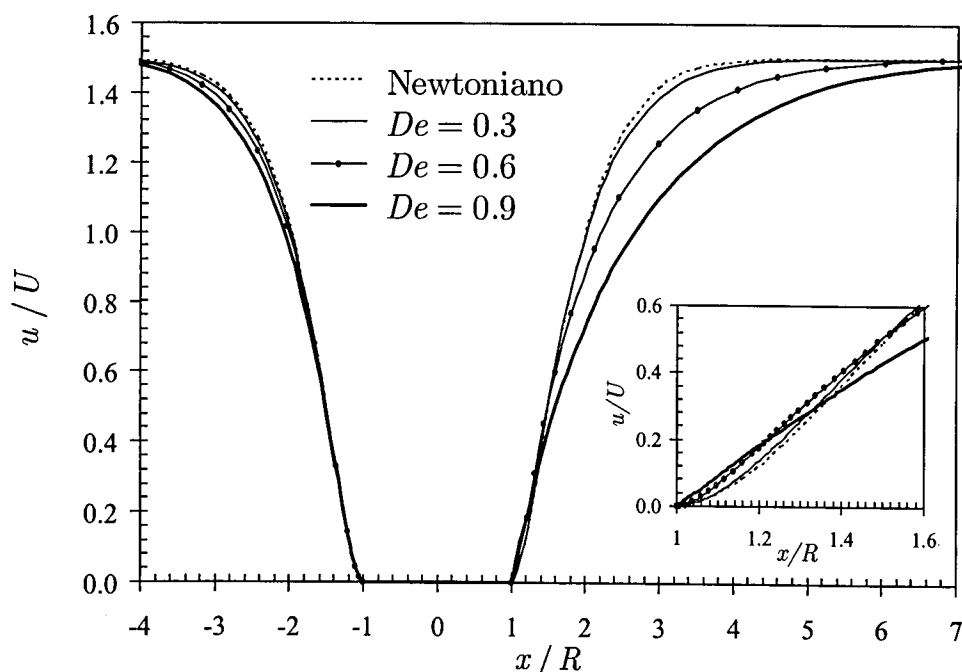


Figura 7.6: Influência do número de Débora nos perfis da componente longitudinal da velocidade, ao longo da linha de simetria, para o fluido UCM.

Para um valor moderado da elasticidade do fluido, $De = 0.6$, observa-se na Figura 7.8 uma boa concordância entre as previsões do presente trabalho e os resultados obtidos por Fan *et al.* (1999), excepto na região da esteira onde as previsões da malha mais refinada, M120, ficam um pouco aquém dos valores obtidos por Fan *et al.* (1999). Contudo, efectuando um maior refinamento da malha na região localizada junto à linha central a jusante do cilindro, é possível

reproduzir com grande precisão os perfis de τ_{xx} obtidos por Fan *et al.* (1999), como se ilustra na Figura 7.8 (resultados obtidos com a malha M60-WR). Na Figura 7.8 também é visível o ganho em precisão obtido pelo esquema de alta resolução, relativamente ao esquema UDS. Os resultados obtidos com o esquema MINMOD são significativamente menos dependentes do grau de refinamento da malha computacional, estando de acordo com os resultados de Fan *et al.* (1999).

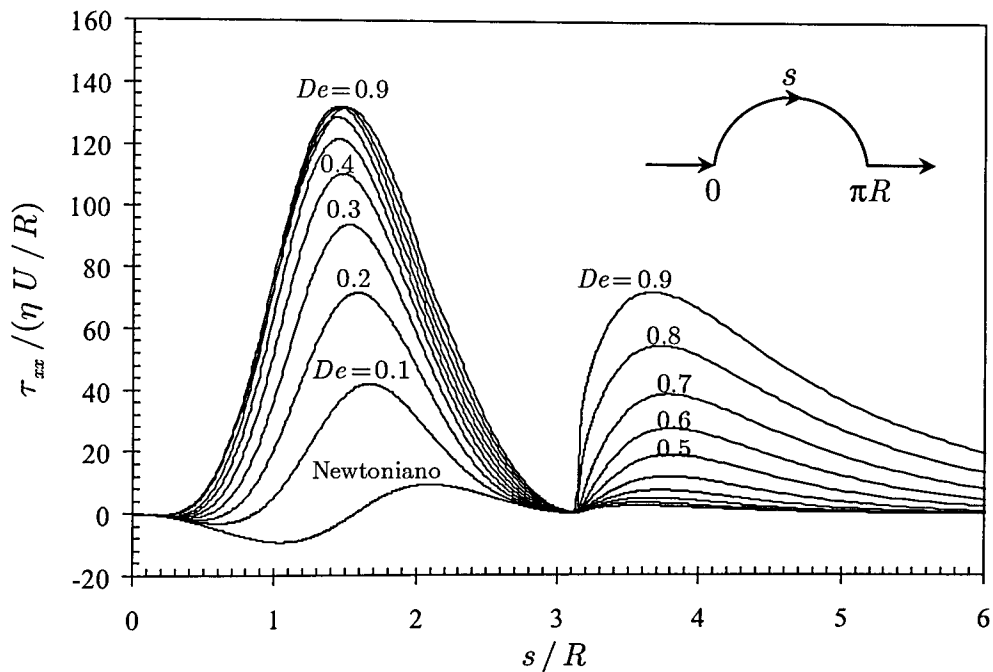


Figura 7.7: Influência do número de Débora nos perfis de τ_{xx} na parede do cilindro e ao longo da linha central. Resultados obtidos na malha M120 com o esquema SMART para o fluido UCM.

Na esteira do cilindro observa-se uma dependência significativa dos resultados com o refinamento da malha, em particular para os valores de τ_{xx} calculados para os valores de De mais elevados, como se mostra na Figura 7.8. De forma idêntica, Fan *et al.* (1999) referem que a $De \approx 0.7$ os resultados de τ_{xx} na esteira do cilindro deixam de ser independentes do grau do polinómio usado, acabando mesmo por se perder a convergência iterativa a $De = 0.75$. É precisamente nesta gama de valores de De que os resultados obtidos neste trabalho se começam a afastar dos valores obtidos por Fan *et al.* (1999).

Na Figura 7.9 analisa-se a influência do número de Débora nos dois máximos locais de τ_{xx} . Observa-se um decréscimo da precisão dos resultados com o aumento de De , especialmente para o máximo localizado na linha central a jusante do cilindro. O máximo local na camada limite (Máximo 1) tende para um valor

assimptótico, o qual é calculado na malha M120 com boa precisão. Em contrapartida, o segundo máximo local de τ_{xx} , localizado na esteira do cilindro, aumenta exponencialmente com De . Este segundo máximo local ocorre na linha central a jusante do cilindro ($\theta = 0$, ou $y = 0$), pelo que se obtêm valores superiores à medida que se aumenta o refinamento tangencial local nessa região. Assim, as previsões obtidas na malha M60-WR (com um refinamento elevado na esteira do cilindro) são bastante precisas, e comparam favoravelmente com as previsões de Fan *et al.* (1999) até $De = 0.75$. Acima deste valor de De observa-se um aumento muito acentuado do 2º máximo de τ_{xx} , o que se reflecte em dificuldades de convergência.

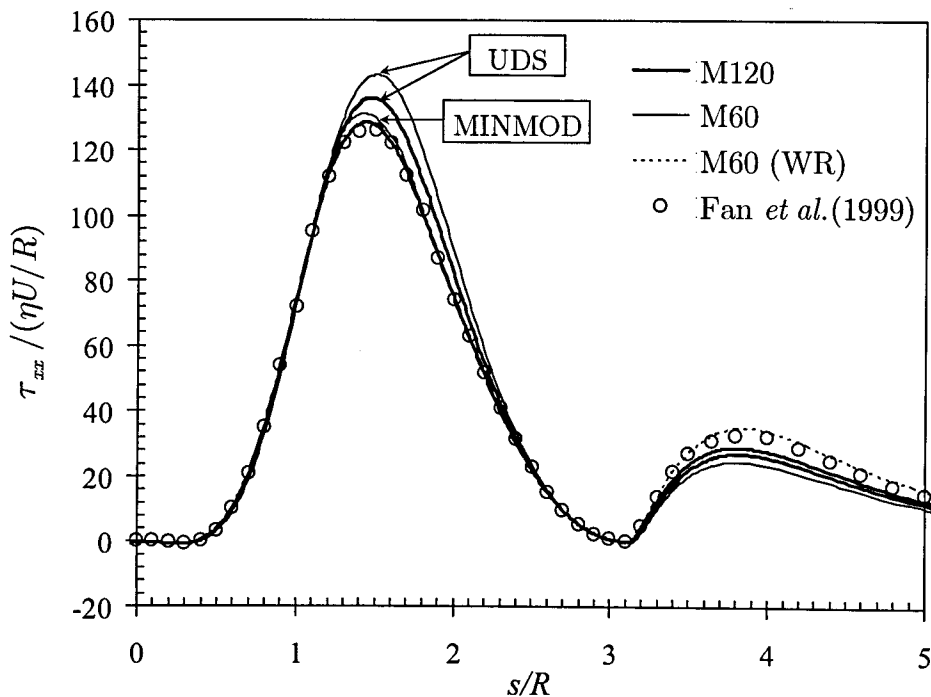


Figura 7.8: Influência do esquema de discretização e do grau de refinamento da malha no perfil de τ_{xx} ao longo da parede do cilindro e da linha central na esteira. Comparação com as previsões de Fan *et al.* (1999) a $De=0.6$.

É curioso observar que foi possível obter convergência na malha M120 até $De = 0.9$ usando o esquema de alta resolução mais preciso (SMART). Contudo, ao utilizar-se a malha M60-WR apenas se obtém convergência até $De = 0.75$, valor este em perfeita sintonia com o limite alcançado por Fan *et al.* (1999). Desta forma conclui-se que, provavelmente, as soluções numéricas obtidas para $De > 0.75$ correspondem a um artefacto numérico, e o escoamento não é estável, pois a

insuficiente resolução das elevadas tensões normais que se desenvolvem na esteira do cilindro poderá conferir uma estabilidade artificial às soluções numéricas.

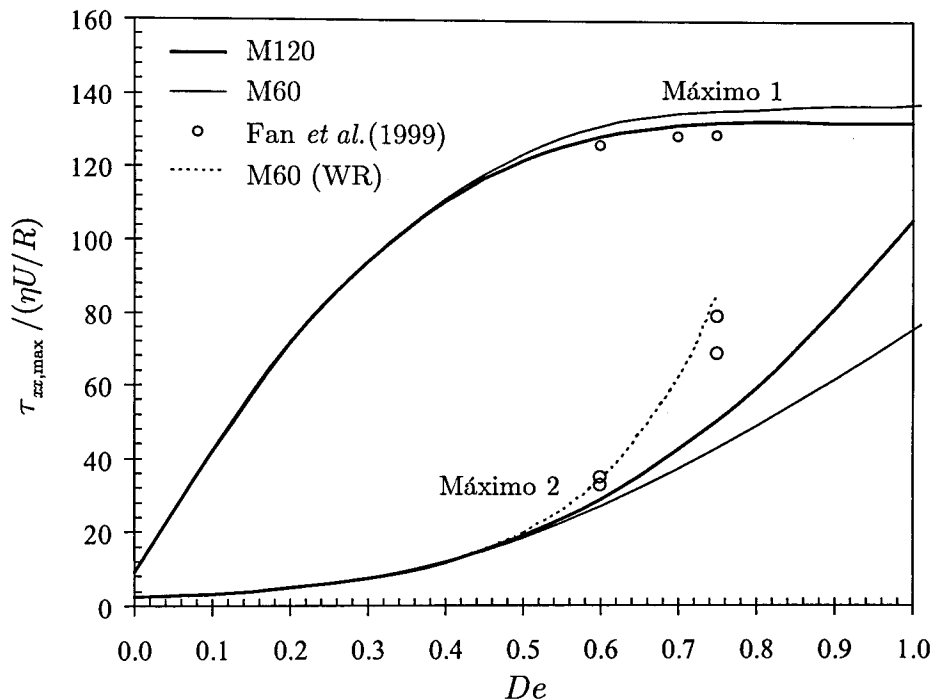


Figura 7.9: Variação dos máximos locais em τ_{xx} com o número de Débora para o fluido UCM. O máximo 1 refere-se à camada limite e o máximo 2 à linha central na esteira do cilindro.

Na Figura 7.10 apresenta-se a variação de τ_{xx} com a coordenada azimutal θ , calculada nas malhas M120 e M60-WR. Os perfis foram obtidos a uma distância constante ao centro do cilindro (r constante) correspondente à localização exacta, para cada valor de De , do máximo de τ_{xx} observado na esteira do cilindro. Os resultados obtidos na malha M120 apresentam uma boa precisão até à célula adjacente à linha central. Contudo, dado que a tensão normal ainda está a aumentar, um maior refinamento na direcção θ conduz a valores ainda mais elevados de τ_{xx} (em particular para $De \geq 0.7$), como se demonstra com os resultados obtidos na malha M60-WR. Para $De \leq 0.6$ observa-se que τ_{xx} tende para um valor constante à medida que θ decresce. Por outro lado, para valores de De superiores ($De \approx 0.7 - 0.75$) verifica-se que a tensão normal aumenta indefinidamente à medida que θ tende para zero. Conclui-se assim, com base nos resultados numéricos obtidos com a malha M60-WR, que possivelmente existirá um ponto singular na tensão normal para $De \approx 0.7$, originando a perda de convergência iterativa do método numérico. Infelizmente não é possível afirmar

inequivocamente se a *singularidade* tem uma origem física ou se é o resultado de erros numéricos. No entanto, a excelente concordância com os resultados numéricos de Fan *et al.* (1999) não serão certamente uma coincidência. Note-se também que o escoamento nesta região tem um forte carácter elongacional, e os modelos UCM e Oldroyd-B possuem uma singularidade na viscosidade extensional para $\lambda\dot{\epsilon} = 1/2$ (vide Tabela 3.1).

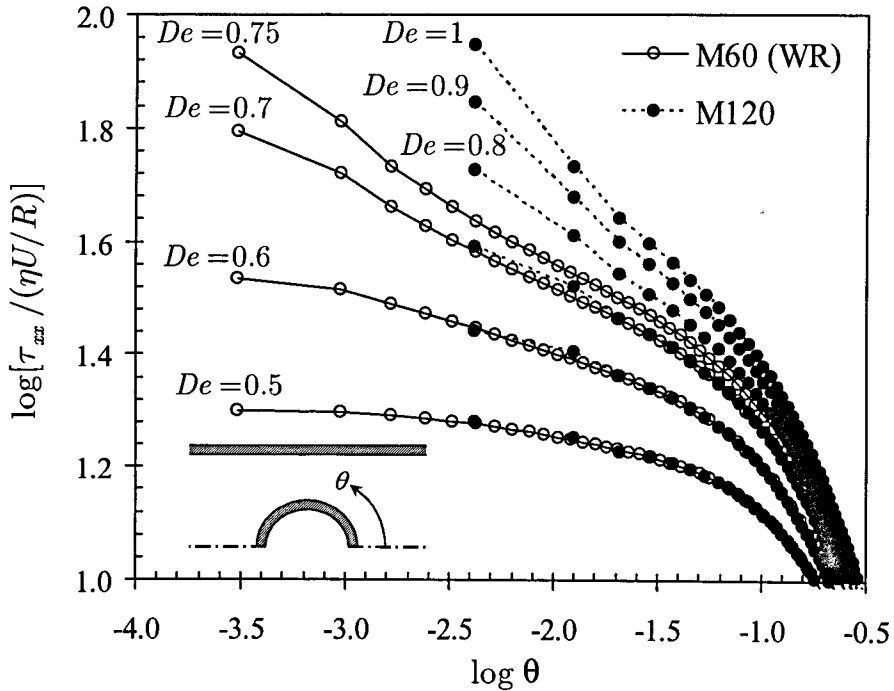


Figura 7.10: Comportamento assintótico da tensão normal com a posição azimutal para valores elevados de Débora.

As dificuldades numéricas observadas para valores de De elevados, com a correspondente perda de convergência iterativa, podem também ser explicadas pela variação da pressão ao longo da superfície do cilindro e da linha central na esteira. Como se pode ver na Figura 7.11, à medida que De aumenta observa-se um ligeiro acréscimo da pressão ao longo da parede do cilindro. No entanto, junto ao ponto de estagnação posterior verifica-se um comportamento significativamente diferente: para baixos valores de De observa-se um aumento progressivo da pressão com a elasticidade do fluido; acima de um valor crítico de De (entre 0.3 e 0.6) observa-se o aparecimento de um pico negativo na pressão, cuja intensidade aumenta significativamente com De . Na Figura 7.11 observa-se que para $De = 0.9$ o ponto de estagnação apresenta um comportamento aproximadamente singular.

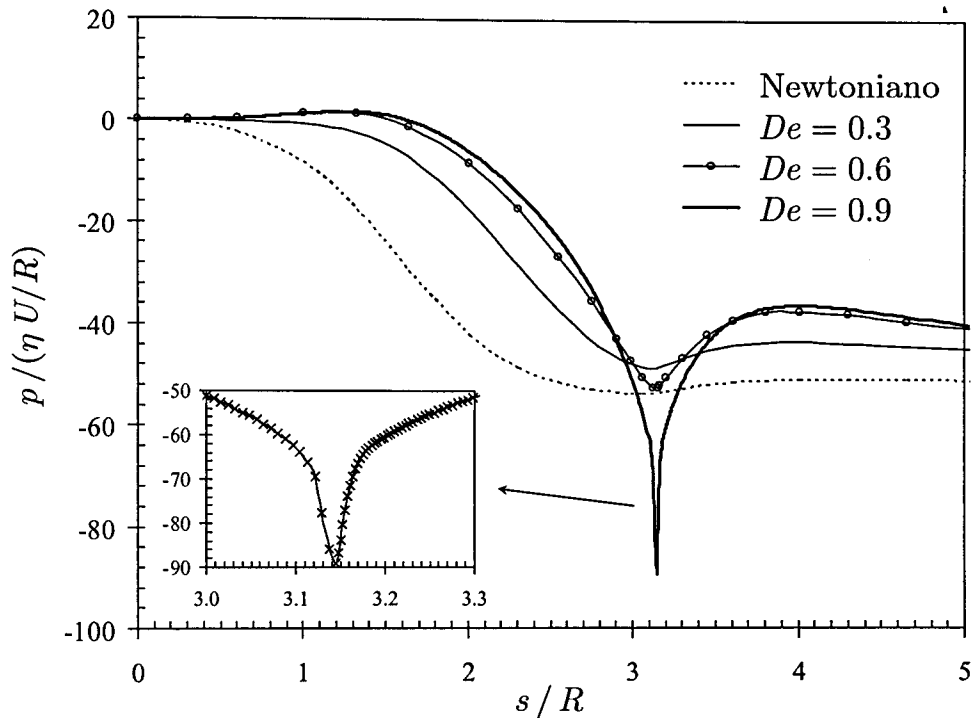


Figura 7.11: Influência do número de Débora nos perfis de pressão observados ao longo da superfície do cilindro e da linha de simetria a jusante do mesmo (fluido UCM; esquema SMART; $p=0$ no ponto de estagnação frontal).

Num estudo teórico recente, Renardy (2000a) efectua uma análise assintótica para o comportamento das tensões na vizinhança do cilindro. Nesse estudo prevê-se um aumento proporcional a De^3 para as tensões na esteira do cilindro, bem como a existência de uma região próxima do cilindro onde as tensões crescem na proporção de De^5 . Na Figura 7.12 representa-se a influência do número de Débora no valor máximo de τ_{xx} observado na esteira do cilindro, calculado nas malhas M60, M120 e M60-WR. Os resultados obtidos na malha mais refinada segundo a direcção azimutal (M60-WR) sugerem um aumento proporcional a De^3 para baixos valores de De , e proporcional a De^5 para os valores mais elevados de De . Para as malhas menos refinadas na esteira do cilindro observa-se um aumento menos acentuado no valor máximo de τ_{xx} ($\propto De^2$ na malha M60 e $\propto De^{2.6}$ na malha M120).

7.3.3 Fluido Oldroyd-B

Nas simulações efectuadas para o fluido Oldroyd-B apenas foi usado o esquema SMART, por ser o mais preciso. Na Tabela 7.3 apresentam-se os valores do coeficiente de arrasto obtidos nas diversas malhas. Na Tabela 7.5 comparam-se

esses valores com os resultados obtidos por Fan *et al.* (1999), Sun *et al.* (1999), Liu *et al.* (1998), Dou e Phan-Thien (1999), Caola *et al.* (2001), Chauvière e Owens (2001) e Owens *et al.* (2002).

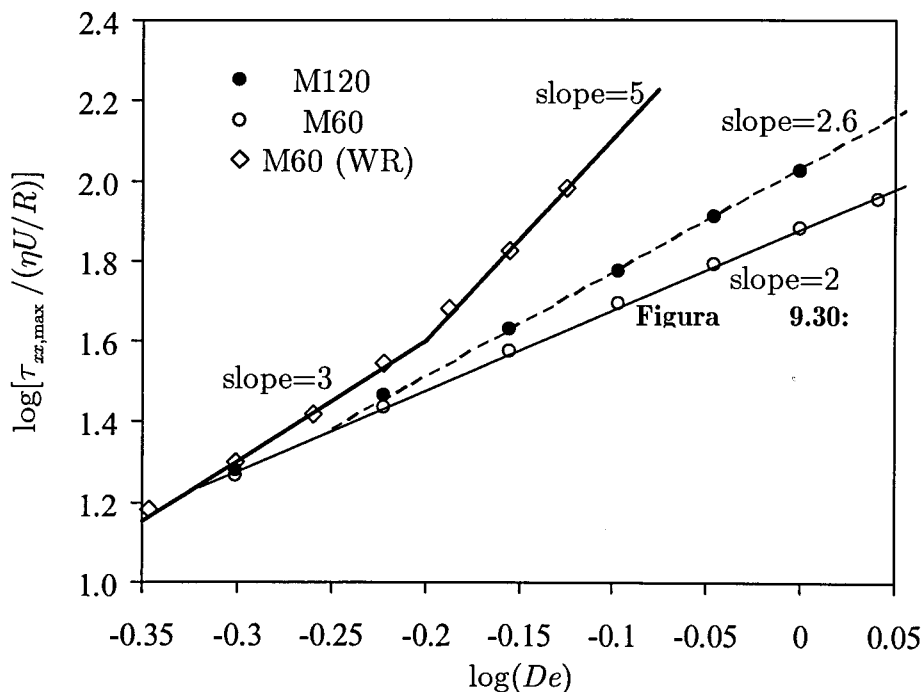


Figura 7.12: Influência do número de Débora e do grau de refinamento da malha no valor máximo de τ_{xz} na esteira do cilindro.

Os valores do coeficiente de arrasto representam-se na Figura 7.13, onde se pode observar uma boa concordância entre as previsões obtidas nas malhas M60 e M120. Assim, os valores de C_D estimados pela técnica da extrapolação de Richardson também são idênticos aos resultados calculados na malha M120, estando em perfeita concordância com os resultados obtidos por Fan *et al.* (1999). A perda de precisão dos resultados obtidos por Dou e Phan-Thien (1999) é perfeitamente visível para $De > 0.3$. Por outro lado, os resultados obtidos pelo grupo do MIT (Liu *et al.*, 1998; Sun *et al.*, 1999) são um pouco superiores aos obtidos nesta tese e em Fan *et al.* (1999).

Para o fluido UCM observou-se uma diminuição de C_D com De (vide Figura 7.4). Para o fluido Oldroyd-B observa-se na Figura 7.13 uma diminuição de C_D até $De \approx 0.75$, seguida de um aumento progressivo para valores de De mais elevados. Na Tabela 7.5 apresentam-se os valores de C_D obtidos neste estudo e os resultados de outros grupos de investigação. Para $De = 1$ todos os métodos

conduzem a soluções estáveis, o que sugere uma estabilização induzida pela tensão puramente newtoniana existente no fluido Oldroyd-B.

Tabela 7.5- Comparação entre os valores do coeficiente de arrasto previstos neste estudo e resultados da literatura (fluido Oldroyd-B).

De	Presente trabalho:		Fan <i>et al.</i> (1999)	Sun <i>et al.</i> (1999)	Liu <i>et al.</i> (1998)	Dou e Phan-Thien (1999)	Caola <i>et al.</i> (2001)	Chauvière e Owens (2001)	Owens <i>et al.</i> (2002)
	Alves <i>et al.</i> (2001b) M120	Extrapolado							
0	132.369	132.378	132.36	132.34	132.34	131.81	132.3	132.28	132.357
0.1	130.343	130.355	130.36	130.33		129.72			
0.2	126.618	126.632	126.62	126.63		126.41			
0.3	123.195	123.210	123.19	123.26		123.52			
0.4	120.596	120.607	120.59	120.76		121.56		120.55	
0.5	118.832	118.838	118.83	119.11	119.48	120.58	118.8	118.80	118.827
0.6	117.786	117.787	117.77	118.17	118.72	120.49		117.75	117.775
0.7	117.328	117.323	117.32	117.84	118.54	121.13		117.20	117.291
0.8	117.370	117.357	117.36	117.98		122.57		116.95	117.237
0.9	117.865	117.851	117.79	118.50		124.48		116.88	117.503
1.0	118.560	118.518	118.49	119.32	119.47	126.89	117.8	117.21	118.030
1.1				120.38		129.72	118.0		118.786
1.2				121.65		133.16			119.764
1.3				123.07		136.94			

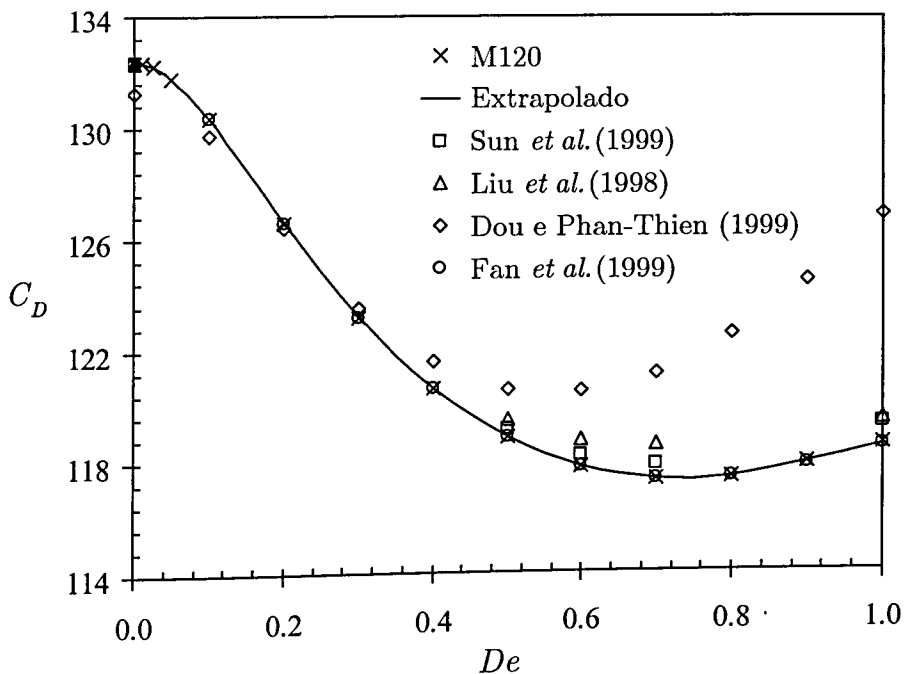


Figura 7.13: Variação do coeficiente de arrasto com o número de Débora para o fluido Oldroyd-B. Comparação com resultados da literatura, publicados previamente ao presente estudo.

Os valores de C_D obtidos por Caola *et al.* (2001), Chauvière e Owens (2001) e por Owens *et al.* (2002) (vide Tabela 7.5) foram publicados posteriormente aos resultados obtidos no âmbito desta tese (Alves *et al.*, 2001b). Esses valores são incluídos na Figura 7.14, juntamente com os resultados obtidos neste trabalho e por Fan *et al.* (1999), para simplificar a análise comparativa. Para $De \leq 0.7$ verifica-se uma excelente concordância entre os resultados, ocorrendo um afastamento progressivo para $De \geq 0.8$. A concordância entre os valores obtidos neste estudo e os resultados de Fan *et al.* (1999) é elevadíssima, o que sugere que possam ser usados como valores de referência para este escoamento. Contudo, para $De \geq 0.8$ não é possível assegurar a sua exactidão porque os perfis das tensões normais na esteira do cilindro não são totalmente independentes da malha, como sucede para o fluido UCM. De resto, tanto Fan *et al.* (1999) como Chauvière e Owens (2001) referem que as soluções numéricas obtidas para $De > 0.8$ devem ser consideradas com precaução.

Os resultados obtidos nesta tese foram calculados em malhas extremamente refinadas, o que possibilita a obtenção de soluções com precisão elevada. Os restantes trabalhos apresentados na Tabela 7.5 fazem uso de malhas significativamente menos refinadas, com excepção do trabalho de Caola *et al.* (2001). Nesse estudo foi usado processamento paralelo, permitindo o uso de malhas computacionais extremamente refinadas (até um máximo de 751 110 graus de liberdade). Os cálculos foram efectuados num *cluster* constituído por 16 estações de trabalho Dell Precision 610[®], cada uma das quais com 1GB de memória e com um duplo processador Pentium III Xeon[®] a 500MHz.

Para a malha M120 usada no presente estudo, existe um total de 417 600 graus de liberdade, o que também é bastante significativo atendendo ao facto das simulações terem sido efectuadas num vulgar PC equipado com um processador AMD Athlon[®] a 500 MHz com apenas 256 MB de memória SDRAM. Pode assim concluir-se que o método dos volumes finitos é significativamente menos exigente em termos de recursos computacionais.

Na Figura 7.15 apresentam-se os perfis da tensão normal τ_{xx} na parede do cilindro e ao longo da linha central na esteira, para $De = 0.7$. Novamente, as previsões obtidas nas malhas M60 e M120 diferem significativamente na esteira do cilindro, onde é necessário utilizar a malha M60-WR para capturar correctamente o perfil longitudinal de τ_{xx} . Para valores de De superiores, os valores previstos

para o coeficiente de arrasto são muito semelhantes aos de Fan *et al.* (1999), observando-se apenas diferenças nos perfis de τ_{xx} na esteira do cilindro. Nessa zona observa-se uma influência importante do grau de refinamento da malha nos perfis de τ_{xx} , como se ilustra na Figura 7.16. Também é visível uma ligeira dependência do grau de refinamento da malha junto à parede superior do canal, contudo essas diferenças são menos importantes uma vez que os gradientes de τ_{xx} nessa região são muito menores.

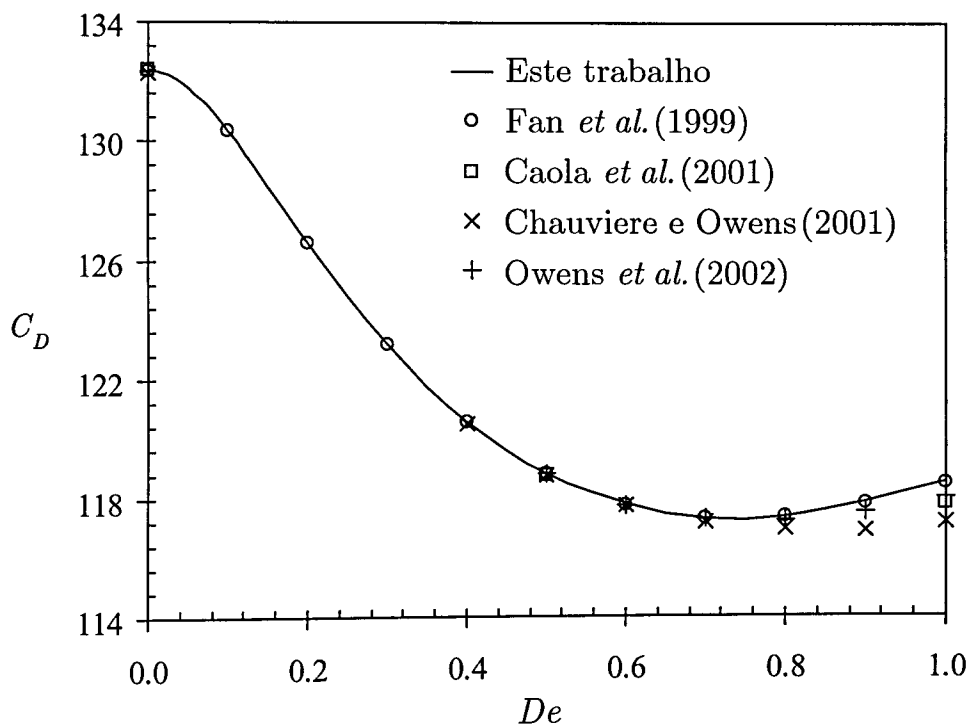


Figura 7.14: Variação do coeficiente de arrasto com o número de Débora para o fluido Oldroyd-B. Comparação com os resultados obtidos por outros grupos de investigação.

Na Figura 7.17 ilustra-se a influência do número de Débora nos perfis de τ_{xx} ao longo da parede do cilindro e da linha central na esteira. Contrariamente ao fluido UCM (vide Figura 7.7), em que o valor máximo da tensão normal na parede do cilindro (primeiro máximo) estabiliza para $De \approx 0.6 - 0.7$, para o fluido Oldroyd-B observa-se uma tendência para o primeiro máximo da tensão normal aumentar progressivamente com De . Este aumento poderá explicar o acréscimo no valor de C_D observado para o fluido Oldroyd-B a valores elevados de De , o que não acontece para o fluido UCM (cf. Figuras 7.4 e 7.13).

Os perfis de velocidade calculados na malha M120 para o fluido Oldroyd-B a $De = 0, 0.3, 0.6$ e 0.9 apresentam-se na Figura 7.18. De forma semelhante ao fluido UCM (vide Figura 7.6), observa-se um afastamento das linhas de corrente para jusante, o que resulta numa diminuição do valor de C_D com o aumento da elasticidade, para valores baixos a moderados de De . Em contrapartida, na esteira do cilindro observa-se uma aproximação das linhas de corrente na direcção do cilindro. Para ilustrar estas observações, na Figura 7.19 representam-se as linhas de corrente previstas para o fluido newtoniano e para o fluido Oldroyd-B a $De = 0.9$. Observa-se que a elasticidade do fluido conduz a um afastamento das linhas de corrente na direcção de jusante, excepto na esteira do cilindro onde se verifica uma tendência contrária. Um comportamento idêntico foi relatado por Bush (1993) para o problema equivalente do escoamento de um fluido viscoelástico em torno de uma esfera.

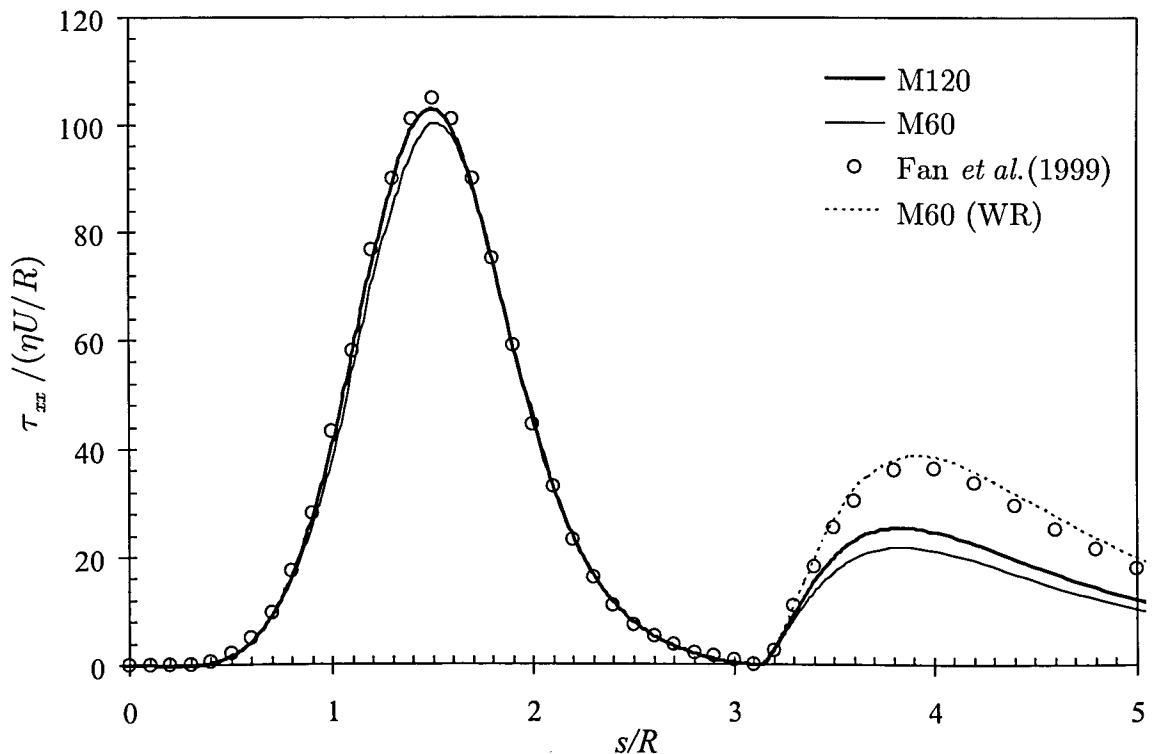


Figura 7.15: Influência do grau de refinamento da malha no perfil de τ_{xx} ao longo da parede do cilindro e da linha central na esteira. Comparação com as previsões de Fan *et al.* (1999) para $De=0.7$. Resultados obtidos com o esquema SMART.

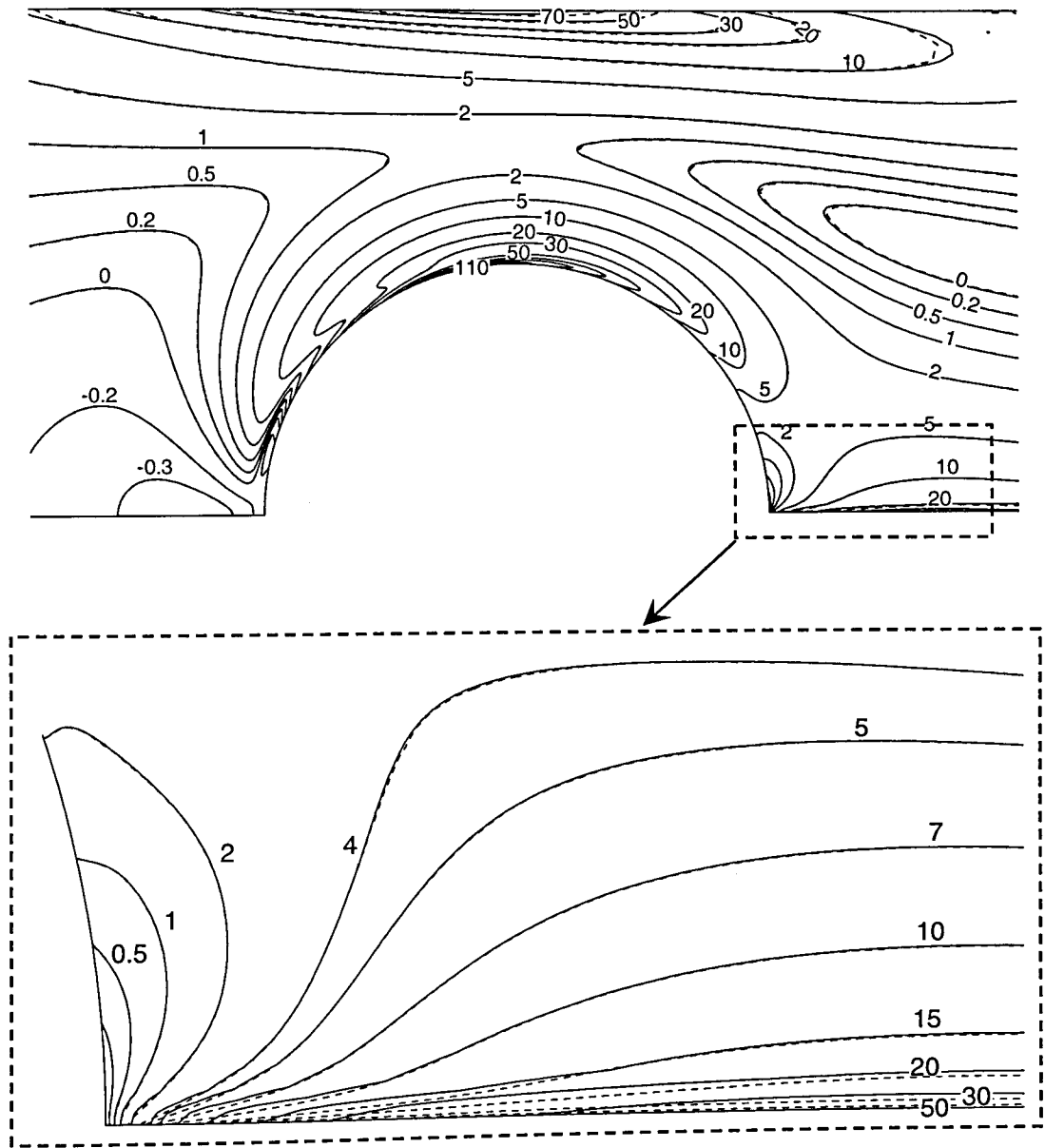


Figura 7.16: Comparação entre as previsões obtidas nas malhas M60 (----) e M120 (—) para a tensão normal adimensionalizada, $\tau_{xx}/(\eta U/R)$.

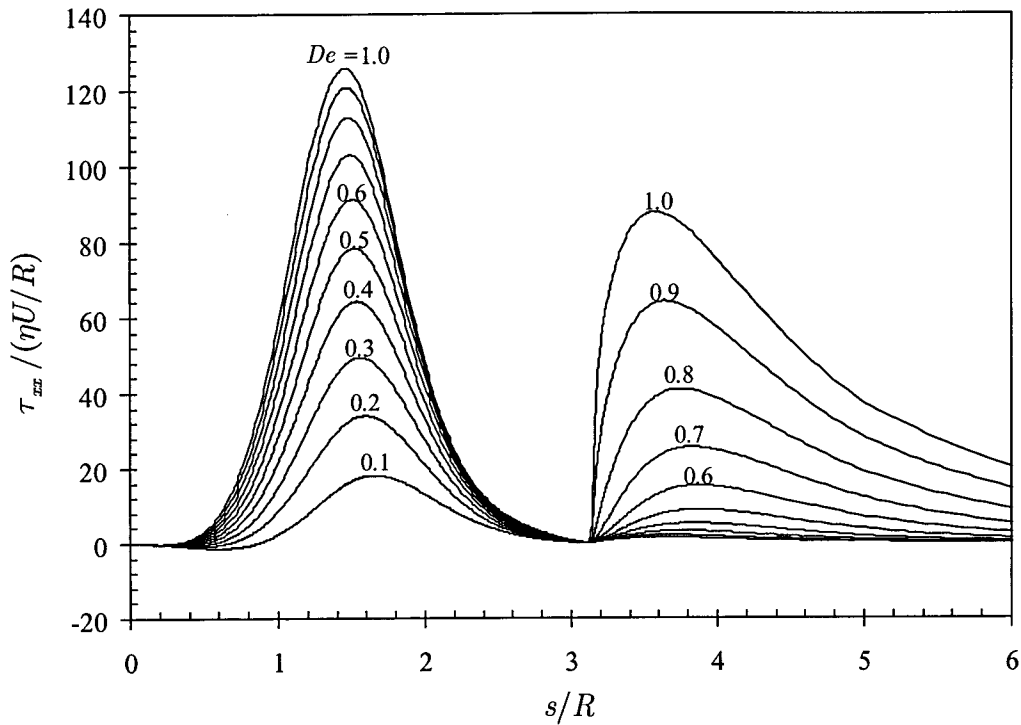


Figura 7.17: Influência do número de Débora nos perfis de τ_{xx} na parede do cilindro e ao longo da linha central na sua esteira. Resultados obtidos na malha M120 com o esquema SMART para o fluido Oldroyd-B.

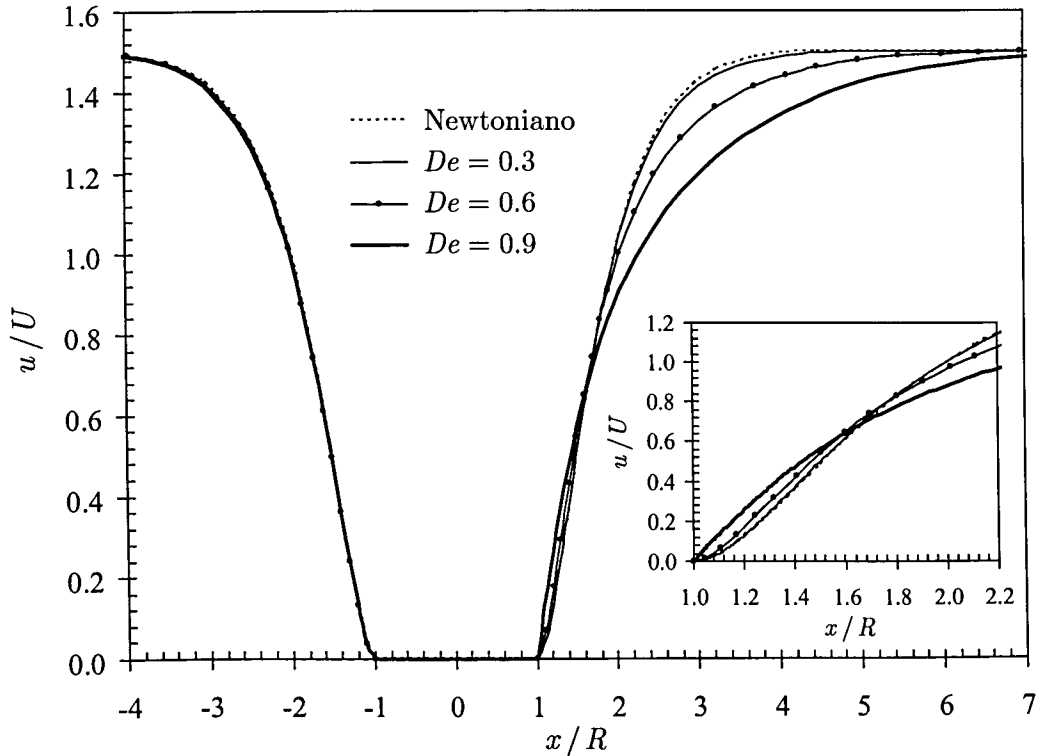


Figura 7.18: Influência de De nos perfis da velocidade axial normalizada ao longo da linha central. Resultados calculados na malha M120 para o fluido Oldroyd-B.

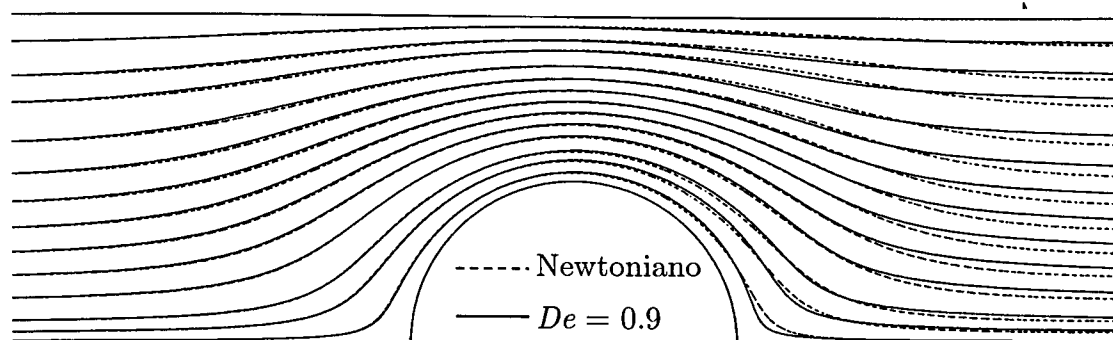


Figura 7.19: Linhas de corrente previstas para o escoamento de um fluido newtoniano (----) e de um fluido Oldroyd-B a $De = 0.9$ (—).

7.4 Conclusões

Neste capítulo analisou-se numericamente o escoamento em torno de um cilindro confinado entre duas placas planas (razão de bloqueio 1/2), para os fluidos UCM e Oldroyd-B. A utilização dos esquemas de alta resolução MINMOD e SMART, em conjunto com malhas computacionais com um número elevado de células, permitiu obter soluções numéricas com elevada precisão. A ordem de convergência com o refinamento da malha foi estimada em 2.0 e 1.8, respectivamente para os esquemas de alta resolução SMART e MINMOD, e em 1.0 para o esquema UDS.

Os valores de C_D obtidos para $De \leq 0.75$ com o fluido UCM estão de acordo com os resultados apresentados por Fan *et al.* (1999), podendo ser considerados valores de referência para este escoamento padrão. Para o fluido Oldroyd-B obteve-se boa concordância para $De \leq 0.7$ com os resultados apresentados por Fan *et al.* (1999), Caola *et al.* (2001) e Owens *et al.* (2002), podendo assim ser usados como valores de referência.

O erro dos valores propostos para o coeficiente de arrasto foi estimado com a técnica da extrapolação de Richardson. Os resultados calculados na malha mais refinada possuem uma precisão de 0.03% e 0.01% para os fluido UCM e Oldroyd-B, respectivamente (excepto para os valores de De mais elevados, para os quais se estima um erro de 0.07% para o fluido UCM a $De = 0.9$, e 0.03% para o fluido Oldroyd-B a $De = 1$). Fica assim demonstrado que a utilização de métodos de volumes finitos na previsão de escoamentos de fluidos viscoelásticos permite a obtenção de soluções com precisão semelhante à dos métodos de elementos finitos,

desde que sejam usados esquemas de discretização adequados, em acordo com as opiniões veiculadas por Baaijens (1998a) e por Dou e Phan-Thien (1999).

Para $De > 0.8$ não foi possível obter soluções independentes da malha para os perfis de tensões normais na esteira do cilindro. O mesmo comportamento foi descrito por Fan *et al.* (1999) e por Owens *et al.* (2002), pelo que os resultados para $De > 0.8$ devem ser considerados com precaução.

Capítulo 8

CUBISTA: Um novo esquema de alta resolução com propriedades iterativas melhoradas[§]

Os esquemas de alta resolução usados na discretização dos termos convectivos das equações de transporte, apesar de oferecerem um ganho de precisão face aos esquemas clássicos, sem introduzirem oscilações na solução, por vezes originam problemas de convergência iterativa dos métodos de cálculo. Neste capítulo apresenta-se um novo esquema de alta resolução com propriedades iterativas melhoradas, o qual é testado em três tipos de problemas de referência: (i) transporte de um escalar por advecção pura num campo de velocidade constante; (ii) escoamento de um fluido newtoniano num degrau; (iii) escoamento de um fluido viscoelástico de Maxwell numa contracção plana com razão 4:1 e em torno de um cilindro confinado por duas placas paralelas.

8.1 Introdução

As vantagens inerentes à utilização de esquemas de alta resolução na discretização dos termos convectivos das equações de transporte, e em particular para as equações constitutivas viscoelásticas, já foram discutidas em detalhe na Secção 4.6.

Um outro aspecto muito importante a considerar, e que é frequentemente negligenciado, refere-se às propriedades de convergência iterativa do esquema de alta resolução. Em determinadas condições observam-se dificuldades de convergência no procedimento iterativo de cálculo do escoamento, causadas pela

[§] Este capítulo é baseado no artigo "Alves, Oliveira e Pinho (2003a). A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 41: 47-75".

utilização de esquemas de alta resolução, devidas a uma conjugação de diversos factores, tais como: (i) variações acentuadas da derivada da função do esquema de alta resolução, em especial na vizinhança do ponto de escoamento suave ($\tilde{\phi}_C = \tilde{\xi}_C$); (ii) não observância da propriedade da variação total decrescente; (iii) proximidade do esquema de alta resolução ao esquema de diferenças de jusante ($\tilde{\phi}_f = 1$).

As dificuldades de convergência iterativa associadas à utilização de esquemas de alta resolução foram já reportadas por outros autores, destacando-se os recentes trabalhos de Jasak *et al.* (1999) e de Song *et al.* (2000). Estes autores propuseram esquemas de alta resolução com propriedades de convergência melhoradas, mas que se mostraram ainda insuficientes para a utilização na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Isto irá ser ilustrado com dois escoamentos envolvendo um fluido viscoelástico do tipo UCM, um através de uma contracção plana 4:1, e outro em torno de um cilindro colocado transversalmente entre duas placas paralelas.

8.2 CUBISTA: um novo esquema de alta resolução

Leonard (1991) propôs a metodologia ULTIMATE (*Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equations*) para a simulação de escoamentos não estacionários usando uma formulação explícita. No limite, quando o número de Courant tende para zero, a metodologia ULTIMATE degenera no critério CBC de Gaskell e Lau (1988), descrito em detalhe na Secção 4.6.2. O critério ULTIMATE difere do critério CBC apenas para baixos valores de $\tilde{\phi}_C$, devendo observar-se a condição suplementar

$$\tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq \frac{1}{C} \tilde{\phi}_C \quad \text{para} \quad \tilde{\phi}_C \leq C \quad (8.1)$$

ilustrada na Figura 8.1 (a). De forma idêntica, as condições necessárias para que um esquema explícito aplicado a um problema não estacionário possua a propriedade TVD podem ser expressas pelas seguintes inequações (Leonard, 1996),

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq (2 - C) \tilde{\phi}_C & \quad \text{para} \quad \tilde{\phi}_C \leq 1/2 \\ \tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq 1 - C(1 - \tilde{\phi}_C) & \quad \text{para} \quad \tilde{\phi}_C > 1/2 \end{aligned} \quad (8.2)$$

Estas desigualdades são ainda mais restritivas que as resultantes do critério ULTIMATE, como se ilustra na Figura 8.1 (b). Este facto não é inesperado, uma vez que as condições TVD são menos gerais que as condições de preservação da

monotonicidade da solução (nas quais se baseiam os critérios ULTIMATE e CBC), sendo condição suficiente para garantir convergência para a solução fraca (*weak solution*) da equação de transporte (Hirsch, 1990 - pg. 525-529). Embora o critério TVD não garanta que a solução numérica satisfaça a condição de entropia, a experiência mostra que os esquemas TVD conduzem habitualmente a soluções fisicamente aceitáveis (Sweby, 1984).

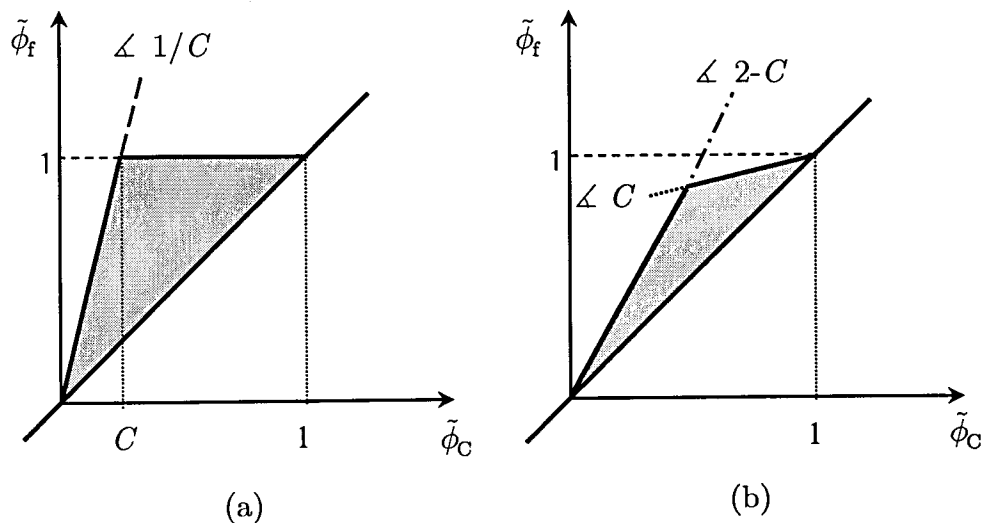


Figura 8.1: Região admissível para cálculos explícitos não estacionários envolvendo esquemas de alta resolução: (a) metodologia ULTIMATE; (b) critério TVD.

A principal contribuição do presente capítulo tem a ver com o reconhecimento da importância dos esquemas de alta resolução satisfazerem simultaneamente o critério CBC (vide Eq. (4.108)) e as restrições TVD, definidas na Eq. (8.2), para se assegurar uma boa convergência iterativa do algoritmo de cálculo. Obviamente esta questão só surge com métodos de integração implícitos, logo iterativos, e por isso não foi considerada nos trabalhos de Leonard, que usou tipicamente métodos explícitos de resolução das equações diferenciais. Partindo deste pressuposto propõe-se um novo esquema de alta resolução que possui simultaneamente elevada precisão numérica e boas características de convergência. Os conceitos subjacentes ao esquema proposto passam a ser apresentados e discutidos em detalhe, usando-se a metodologia NVA (válida para malhas uniformes) por uma questão de simplicidade:

(i) *Esquema principal e precisão numérica*

O esquema de alta resolução proposto deve basear-se num esquema de diferenças com elevada precisão numérica. A escolha incidiu sobre o esquema QUICK

(precisão de 3ª ordem) por ser significativamente mais preciso que os esquemas clássicos de 2ª ordem (e.g., CDS, LUDS, FROMM), sem aumentar o grau de dificuldade na sua implementação numérica (cf. Leonard, 1991; 1996).

(ii) *Região de escoamento suave*

As mudanças na função do esquema de alta resolução não devem ocorrer perto da região de escoamento suave ($0.4 \leq \tilde{\phi}_C \leq 0.6$) já que a experiência com esquemas deste tipo (e.g., MINMOD) demonstra que a mudança abrupta no declive da função $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C)$, perto de $\tilde{\phi}_C = 0.5$, pode conduzir a problemas de convergência iterativa. Assim, a recta $\tilde{\phi}_f = 0.375 + 0.75 \tilde{\phi}_C$, representativa do esquema QUICK, deverá ser prolongada o mais possível para a esquerda e para a direita do ponto $\tilde{\phi}_C = 0.5$ no diagrama de variáveis normalizadas.

(iii) *Restrições TVD*

O esquema de alta resolução deve verificar as restrições TVD, definidas pela Eq. (8.2) e ilustradas na Figura 8.1 (b), tomando-se C como um parâmetro empírico a determinar com base em experiências numéricas. Se for usado o critério CBC (ou o critério ULTIMATE com $C = 0$) obtém-se o esquema de alta resolução SMART, composto pela recta $\tilde{\phi}_f = 0.375 + 0.75 \tilde{\phi}_C$ referente ao esquema QUICK, uma porção do esquema de diferenças de jusante, $\tilde{\phi}_f = 1$, e uma linha recta de declive 3 a ligar o esquema QUICK à origem do diagrama NVD (vide Figura 4.13). De forma idêntica, usando as restrições TVD para condições de estado estacionário ($C = 0$), obtém-se o esquema WACEB (Song *et al.*, 2000), cuja diferença relativamente ao esquema SMART reside apenas na recta de declive 2, que une o esquema QUICK à origem do diagrama NVD.

(iv) *Escolha do parâmetro C*

O interesse principal desta tese prende-se com a simulação de escoamentos em condições de estado estacionário. Como essa solução é obtida por um método implícito de marcha no tempo, parece razoável supor que irá existir alguma analogia com simulações de facto não estacionárias. As restrições TVD ilustradas na Figura 8.1 (b) são válidas para algoritmos explícitos aplicados a escoamentos em regime não estacionário, que forçosamente têm de respeitar a condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL, vide Ferziger e Peric, 1996), que impõe $C \leq 1$. Na metodologia usada no presente trabalho é possível definir um número de Courant (e.g., $C = \max[u_x \delta t / \delta x, u_y \delta t / \delta y]$), contudo o seu valor poderá ser bastante

superior à unidade (da ordem de 10) devido à utilização de métodos implícitos que não restringem o passo de integração temporal (e também por não haver interesse em representar com precisão o carácter transiente do escoamento). Assim, o parâmetro C não deve ser aqui encarado como um verdadeiro número de Courant, mas sim como um parâmetro ajustável, a otimizar por forma a melhorar as características de convergência iterativa do esquema de alta resolução.

Para o valor limite $C = 0$, o esquema de alta resolução proposto degenera no esquema WACEB, que se demonstrará possuir algumas dificuldades de convergência iterativa em certos escoamentos. Experiências numéricas para o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 demonstraram que aumentando o valor do parâmetro C de 0 (WACEB) para 0.1, a convergência iterativa melhora ligeiramente, persistindo ainda algumas dificuldades de convergência. Efectuando um número significativo de simulações (nem todas aqui descritas) foi possível verificar que o valor $C = 0.25$ correspondia às condições óptimas, tendo sido obtida convergência para a tolerância desejada (por muito baixa que fosse) em todos os problemas estudados. Note-se que o valor de C deve ser mantido o mais baixo possível para reduzir a difusão numérica nas regiões problemáticas do escoamento ($\tilde{\phi}_C \cong 0$ e $\tilde{\phi}_C \cong 1$).

Existe portanto um compromisso entre aumentar o valor de C , para melhorar a convergência iterativa do esquema de alta resolução, e diminuir o seu valor para aumentar a precisão numérica, em particular quando existam gradientes elevados. O valor $C = 0.25$ pareceu, com base em experiências numéricas, ser um bom compromisso entre estes dois factores.

(v) *A dificuldade causada pelo esquema de diferenças de jusante*

Apesar do valor $C = 0.25$ ter sido obtido empiricamente, a partir de um número elevado de experiências numéricas, existem argumentos formais que suportam essa escolha. A região mais problemática dos esquemas de alta resolução baseados no esquema QUICK (e.g., WACEB, SMART) corresponde à gama de valores de $\tilde{\phi}_C \cong 1$, onde é usado o esquema de diferenças de jusante (*downwind*), $\tilde{\phi}_f = 1$. O uso de *downwind* puro origina um coeficiente a_p negativo nas equações de transporte na forma discreta, o que conduz frequentemente a problemas de estabilidade quando são usados algoritmos implícitos. Por outro lado, quando se aumenta progressivamente $\tilde{\phi}_C$ desde valores típicos de escoamento suave ($\tilde{\phi}_C = 0.5$), verifica-se que a partir de um certo valor de $\tilde{\phi}_C$ a variação quadrática

característica do esquema QUICK (ξ representa uma coordenada local: $\phi_C = \phi(0)$; $\phi_D = \phi(1)$; $\phi_U = \phi(-1)$),

$$\phi(\xi) = \phi_C + \frac{\phi_D - \phi_U}{2} \xi + \frac{\phi_D + \phi_U - 2\phi_C}{2} \xi^2 \quad (8.3)$$

alcança a situação esquematizada na Figura 8.2, onde é possível observar um *overshoot* em $\tilde{\phi}$, não sendo portanto garantida a monotonicidade da solução. É nessa altura que o esquema de diferenças de jusante é solicitado, e os problemas de estabilidade podem surgir. O ponto exacto que conduz ao aparecimento de *overshoot* pode ser obtido da condição

$$\left[\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right]_{\xi \rightarrow 1} \leq 0 \Rightarrow \frac{3\phi_D + \phi_U - 4\phi_C}{2} \leq 0 \quad (8.4)$$

que conduz a

$$\tilde{\phi}_C \equiv \frac{\phi_C - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \geq \frac{3}{4} \quad (8.5)$$

Assim, para valores de $\tilde{\phi}_C$ superiores a 0.75 (correspondendo a $\tilde{\phi}_{f, \text{QUICK}} = 0.9375$) não é seguro utilizar a linha referente ao esquema QUICK, devendo seguir-se ao longo da linha que une os pontos (0.75, 0.9375) e (1, 1) no diagrama NVD, obtendo-se desta forma um declive $C = 0.25$, igual ao valor optimizado com base em experiências numéricas.

(vi) Condições de simetria do limitador

Das considerações anteriores conclui-se que o limitador é constituído por três segmentos de recta na região monótona ($0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1$): Limitador TVD à esquerda ($\tilde{\phi}_C \cong 0$), i.e., linha recta de declive $2 - C$ partindo da origem; linha recta referente ao esquema QUICK ($\tilde{\phi}_f = 0.375 + 0.75\tilde{\phi}_C$) na região intermédia, correspondente à zona de escoamento suave; limitador TVD à direita ($\tilde{\phi}_C \cong 1$), i.e., linha recta de declive C passando no ponto (1, 1) do diagrama NVD. Como o parâmetro C é ajustável, e não um verdadeiro número de Courant, podem escolher-se valores diferentes para o declive do segmento de recta à esquerda ($2 - C_1$), e para o declive do segmento de recta à direita da linha QUICK (C_2). Contudo, a escolha de valores diferentes para C_1 e C_2 viola a condição de simetria do limitador, conduzindo a eventuais distorções de perfis simétricos que se desloquem por advecção.

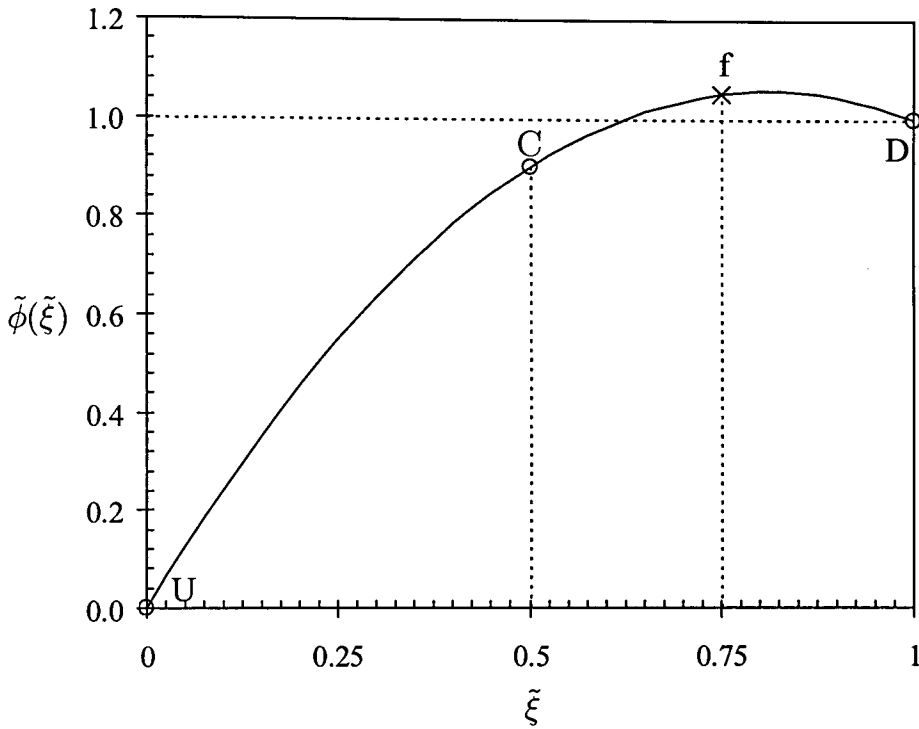


Figura 8.2: Ilustração de uma situação em que ocorre um máximo na função interpoladora do esquema QUICK ($\tilde{\phi}_C = 0.9$).

A condição de simetria do limitador é facilmente obtida se este for convertido da metodologia NVA,

$$\tilde{\phi}_f = \max \left\{ \tilde{\phi}_C, \min \left[(2 - C_1) \tilde{\phi}_C, \frac{3}{8} + \frac{3}{4} \tilde{\phi}_C, 1 - C_2 + C_2 \tilde{\phi}_C \right] \right\} \quad (8.6)$$

para a metodologia proposta por Sweby (1984), baseada em limitadores de fluxo,

$$\varphi(r) = \max \left\{ 0, \min \left[2r(1 - C_1), \frac{3}{4} + \frac{r}{4}, 2(1 - C_2) \right] \right\} \quad (8.7)$$

em que φ representa o limitador de fluxo e r o quociente entre gradientes consecutivos ($\varphi = (\tilde{\phi}_f - \tilde{\phi}_C) / 0.5(1 - \tilde{\phi}_C)$ e $r = \tilde{\phi}_C / (1 - \tilde{\phi}_C)$). A condição de simetria do limitador de fluxo (vide Eq. (4.104)),

$$\varphi\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{\varphi(r)}{r}$$

conduz a

$$\begin{aligned} \varphi\left(\frac{1}{r}\right) &= \max \left\{ 0, \min \left[2\frac{1}{r}(1 - C_1), \frac{3}{4} + \frac{1}{4r}, 2(1 - C_2) \right] \right\} = \\ &= \frac{1}{r} \max \left\{ 0, \min \left[2(1 - C_1), \frac{3}{4}r + \frac{1}{4}, 2(1 - C_2)r \right] \right\} \end{aligned} \quad (8.8)$$

Comparando as Eqs. (8.7) e (8.8) conclui-se que o esquema proposto é (aproximadamente) simétrico se $C_1 = C_2$. O esquema de alta resolução é apenas aproximadamente simétrico porque a linha intermédia, referente ao esquema QUICK, não verifica a condição de simetria. De facto, um esquema de diferenças de ordem ímpar nunca pode ser simétrico. No entanto, uma vez que o esquema QUICK é usado apenas na zona de escoamento suave não deverá conduzir a distorções assimétricas significativas dos perfis transportados por advecção, pelo que o esquema proposto é aproximadamente simétrico, desde que se use $C_1 = C_2$. Fica assim fundamentada teoricamente a escolha do valor $C = 0.25$ para ambos os segmentos de recta, por forma a verificar o critério TVD nos extremos $\tilde{\phi}_C \cong 0$ e $\tilde{\phi}_C \cong 1$ e a garantir maior estabilidade.

O esquema proposto foi designado por CUBISTA, acrónimo de Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection. Segundo a formulação NVA, o esquema proposto é representado pela função,

$$\tilde{\phi}_f = \begin{cases} \frac{7}{4}\tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{3}{8} \\ \frac{3}{8} + \frac{3}{4}\tilde{\phi}_C & \frac{3}{8} \leq \tilde{\phi}_C \leq \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} + \frac{1}{4}\tilde{\phi}_C & \frac{3}{4} < \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \quad (8.9)$$

O esquema CUBISTA pode ser generalizado para a metodologia NVSF, obtendo-se a expressão (Alves *et al.*, 2003a)

$$\tilde{\phi}_f = \begin{cases} \left[1 + \frac{\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C}{3(1 - \tilde{\xi}_C)} \right] \frac{\tilde{\xi}_f}{\tilde{\xi}_C} \tilde{\phi}_C & 0 \leq \tilde{\phi}_C < \frac{3}{4}\tilde{\xi}_C \\ \frac{\tilde{\xi}_f(1 - \tilde{\xi}_f)}{\tilde{\xi}_C(1 - \tilde{\xi}_C)} \tilde{\phi}_C + \frac{\tilde{\xi}_f(\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{1 - \tilde{\xi}_C} & \frac{3}{4}\tilde{\xi}_C \leq \tilde{\phi}_C \leq \frac{1 + 2(\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{2\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C} \tilde{\xi}_C \\ 1 - \frac{1 - \tilde{\xi}_f}{2(1 - \tilde{\xi}_C)} (1 - \tilde{\phi}_C) & \frac{1 + 2(\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C)}{2\tilde{\xi}_f - \tilde{\xi}_C} \tilde{\xi}_C < \tilde{\phi}_C \leq 1 \\ \tilde{\phi}_C & \tilde{\phi}_C \notin [0,1] \end{cases} \quad (8.10)$$

Esta função, apesar de ser significativamente mais elaborada que a Eq. (8.9), não acarreta grandes dificuldades de implementação numérica, em particular se for usada a técnica da correcção diferida de Khosla e Rubin (1974) (vide Secção 4.6.2).

Na Figura 8.3 apresentam-se os esquemas de alta resolução CUBISTA, SMART e WACEB no diagrama NVD. Como se pode observar, as transições entre os diversos ramos da função representativa do esquema CUBISTA é menos acentuada, comparativamente aos esquemas SMART e WACEB, reduzindo assim a instabilidade de transição com a consequente melhoria da convergência iterativa. Isto irá ser demonstrado com resultados numéricos, a serem apresentados de seguida.

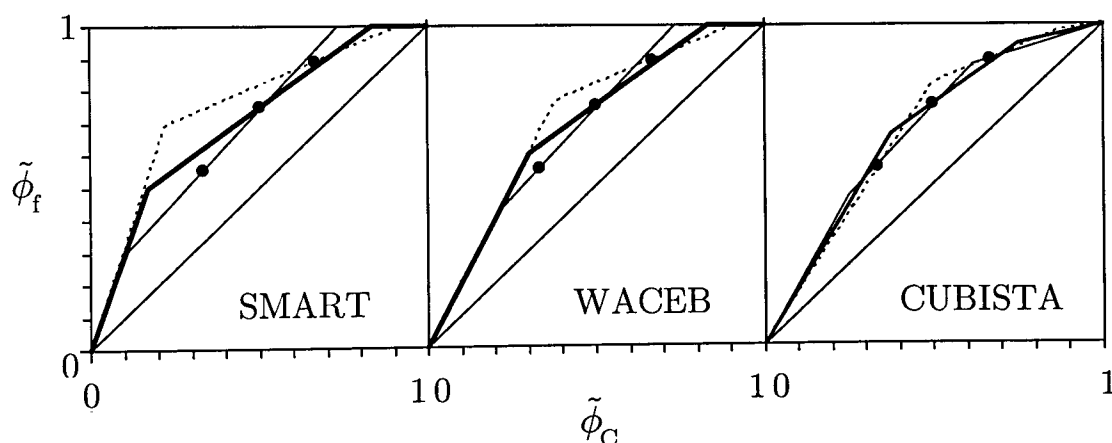


Figura 8.3: Representação dos esquemas de alta resolução SMART, WACEB e CUBISTA no diagrama NVD: malha uniforme (—); malha não uniforme com um factor de expansão 2 (---); malha não uniforme com um factor de compressão 0.5 (-----). Os círculos a negro referem-se às condições de escoamento suave, correspondendo aos pontos de coordenadas $(\tilde{\xi}_C, \tilde{\xi}_f)$.

8.3 Resultados

Foram seleccionadas três classes de problemas de referência para aferir o esquema de resolução proposto em termos de precisão e das suas características de convergência iterativa.

Em primeiro lugar considera-se o teste clássico do transporte advectivo de um escalar num campo de velocidades constante. Segue-se a análise do escoamento de um fluido newtoniano num degrau, em condições de regime laminar, terminando-se a presente secção com a previsão do escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 e em torno de um cilindro colocado transversalmente entre duas placas paralelas.

8.3.1 Advecção pura de um escalar

Neste primeiro exemplo considera-se o escoamento puramente advectivo de um escalar passivo num campo de velocidades constante, oblíquo relativamente ao domínio de cálculo (ângulo θ). Este escoamento já foi considerado na Secção 4.6.2, onde se apresenta um esquema da geometria do escoamento (vide Figura 4.14). A equação de conservação que descreve o transporte advectivo de um escalar ϕ , num domínio cartesiano bidimensional, traduz-se por

$$\frac{\partial(u_x \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y \phi)}{\partial y} = 0 \quad (8.11)$$

sendo u_x e u_y as componentes cartesianas do vector velocidade. São considerados dois valores para o ângulo θ : (i) $\theta = 45^\circ$, obtido para $u_x = u_y$; (ii) $\theta = 30^\circ$, obtido com $u_x = \sqrt{3} u_y$.

São consideradas três condições fronteira distintas, correspondentes a diferentes formas do perfil de ϕ na fronteira de entrada (em $x = 0$, vide Figura 4.14). Para $\theta = 45^\circ$ consideram-se os seguintes perfis (para $\theta = 30^\circ$ as expressões são semelhantes):

- Perfil em forma de um degrau

$$\begin{aligned} \phi(0, y) &= 1 & \text{para } 0 \leq y \leq 1 \\ \phi(x, 0) &= 0 & \text{para } 0 < x \leq 1 \end{aligned} \quad (8.12)$$

- Perfil em forma de um seno quadrado

$$\begin{aligned} \phi(0, y) &= \begin{cases} \text{sen}^2\left(\frac{10}{3}\pi y\right) & \text{para } 0 \leq y \leq \frac{3}{20} \\ 1 & \text{para } 0 \leq y \leq 1 \end{cases} \\ \phi(x, 0) &= 0 & \text{para } 0 < x \leq 1 \end{aligned} \quad (8.13)$$

- Perfil em forma de uma semi-elipse

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{aligned} \phi(0, y) &= \sqrt{1 - [y/(1/6)]^2} & \text{para } |y| < 1/6 \\ \phi(0, y) &= 0 & \text{para } |y| \geq 1/6 \\ \phi(x, 0) &= \sqrt{1 - [x/(1/6)]^2} & \text{para } |x| < 1/6 \\ \phi(x, 0) &= 0 & \text{para } |x| \geq 1/6 \end{aligned} \right. \quad (8.14)$$

Cada um destes perfis tem um objectivo específico: o perfil em forma de um degrau possui gradientes infinitos de ϕ , permitindo testar a capacidade dos esquemas capturarem eficientemente frentes abruptas, sem introduzirem demasiada difusão numérica, e sem conduzirem a oscilações indesejáveis na solução (dispersão numérica). O perfil em forma de um seno quadrado é relativamente suave, permitindo assim determinar a ordem de convergência com o refinamento da malha, para os diversos esquemas de diferenças. O perfil em forma de uma semi-elipse possui simultaneamente zonas com elevados gradientes e regiões suaves, o que o torna particularmente difícil (Leonard, 1991). Permite ainda testar a propriedade de simetria dos esquemas de diferenças.

Teoricamente, os perfis são trasladados segundo a direcção da velocidade sem qualquer distorção, uma vez que o transporte é puramente advectivo. Nas Figuras 8.4 a 8.6 apresentam-se as soluções numéricas obtidas com o esquema UDS, e com diversos esquemas de alta resolução, para os três perfis considerados. Em cada figura apresenta-se a solução calculada num domínio quadrado de lado unitário, sendo usada uma malha uniforme constituída por 59×59 células. Os resultados apresentados nas figuras traduzem os perfis de ϕ calculados ao longo da linha vertical $x = 0.5$, para os casos (a) $\theta = 45^\circ$ e (b) $\theta = 30^\circ$. Note-se que a escala no eixo das abcissas está restringida a uma pequena gama de y , por forma a acentuar as diferenças entre os resultados calculados com os diferentes esquemas de discretização.

As Figuras 8.4 a 8.6 mostram que o esquema SMART é o mais preciso, sobretudo para o perfil em degrau, seguindo-se de perto os esquemas WACEB e CUBISTA. Nos casos de perfis sem descontinuidades de gradientes (Figuras 8.5 e 8.6) existe pouca diferença entre os resultados obtidos com o CUBISTA e o SMART. O esquema UDS é exageradamente difusivo, sendo por essa razão desaconselhável. O esquema MINMOD também conduz a resultados pouco precisos, sendo o mais difusivo de todos os esquemas de alta resolução testados. Para todos os esquemas de diferenças observa-se que a difusão numérica é mais acentuada para $\theta = 45^\circ$, independentemente do perfil de ϕ considerado.

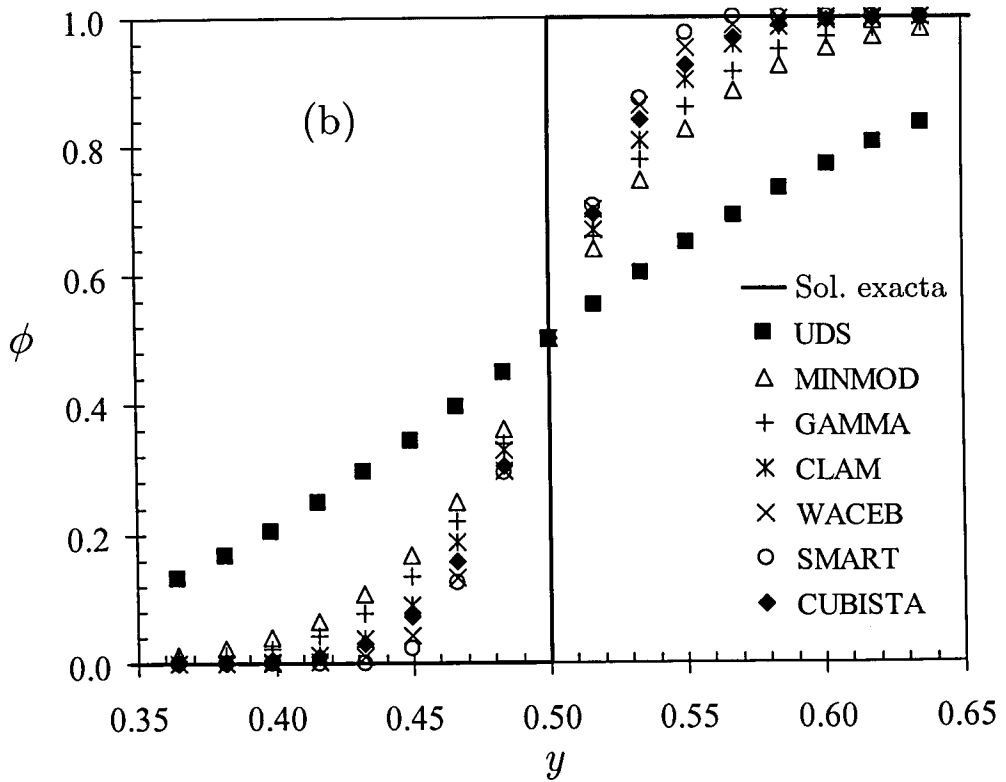
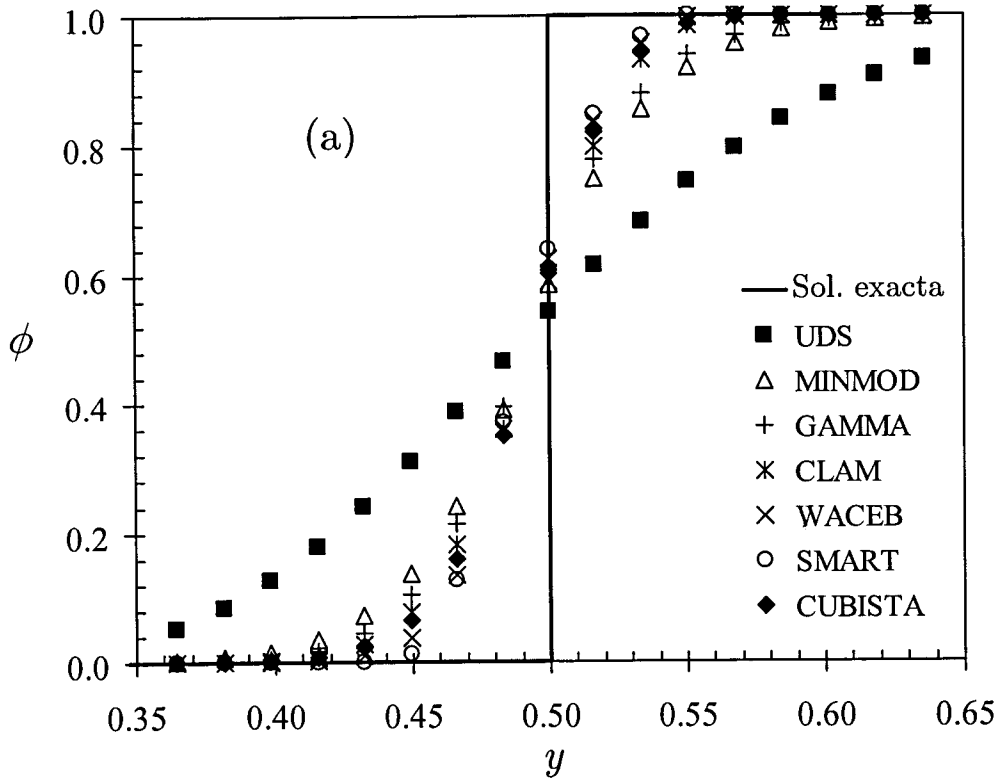


Figura 8.4: Advecção pura de um perfil em forma de degrau numa malha uniforme com 59×59 células. Resultados numéricos ao longo da linha $x=0.5$, obtidos com diversos esquemas de diferenças: (a) $\theta = 30^\circ$; (b) $\theta = 45^\circ$.

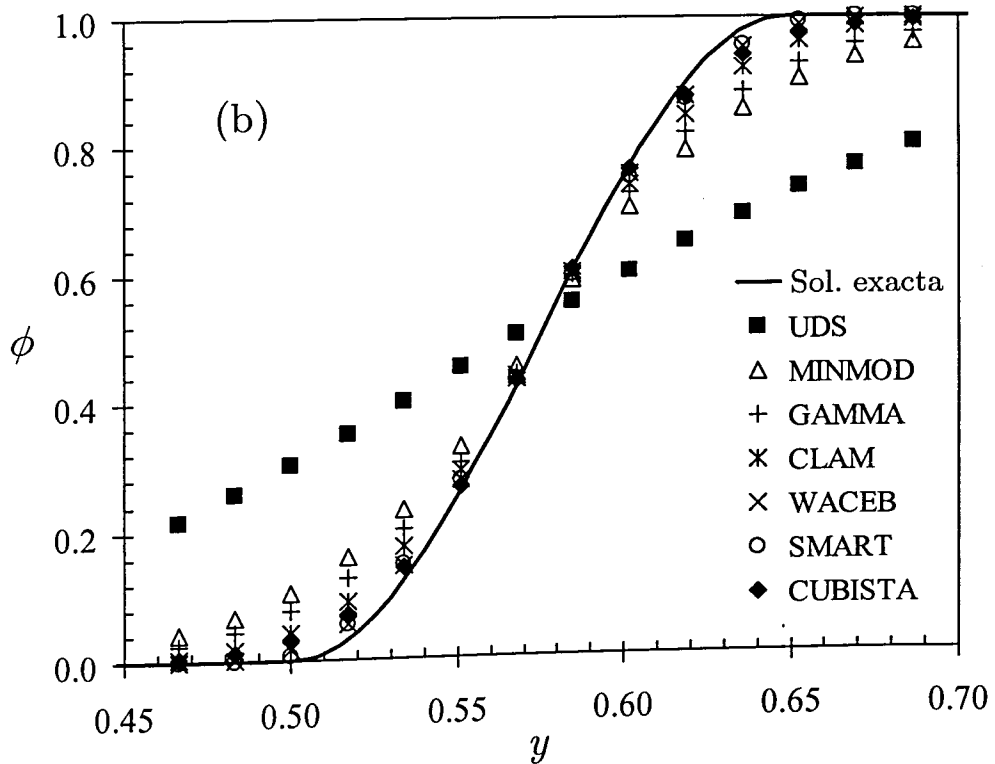
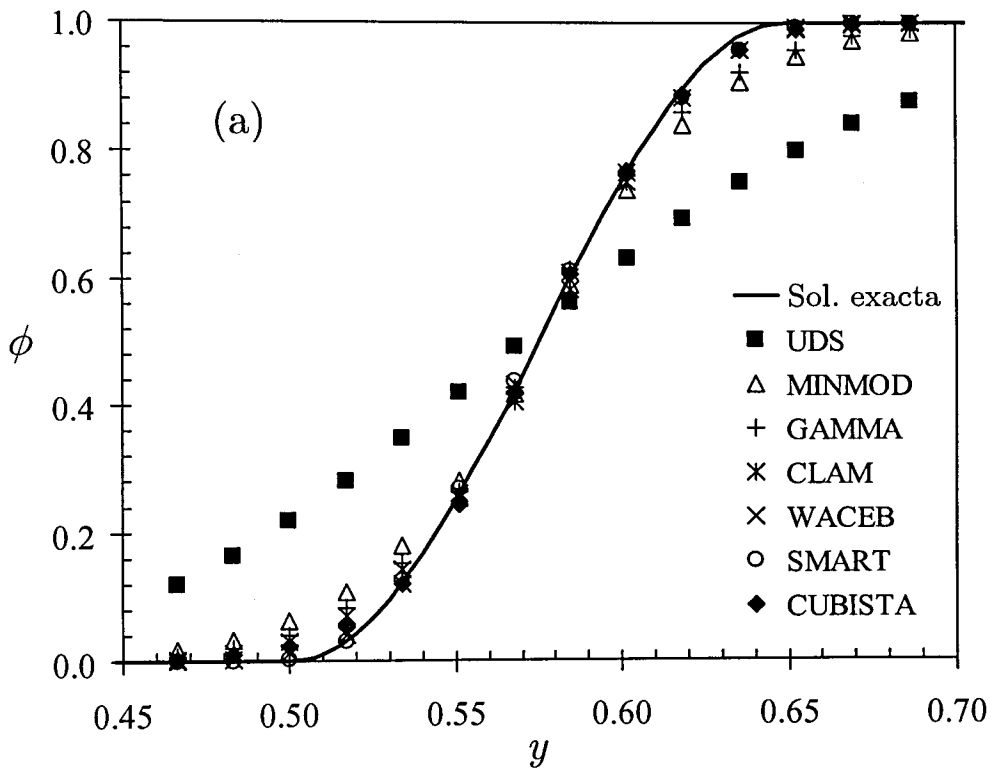


Figura 8.5: Advecção pura de um perfil em forma de seno quadrado numa malha uniforme com 59×59 células. Resultados numéricos ao longo da linha $x=0.5$, obtidos com diversos esquemas de diferenças: (a) $\theta=30^\circ$; (b) $\theta=45^\circ$.

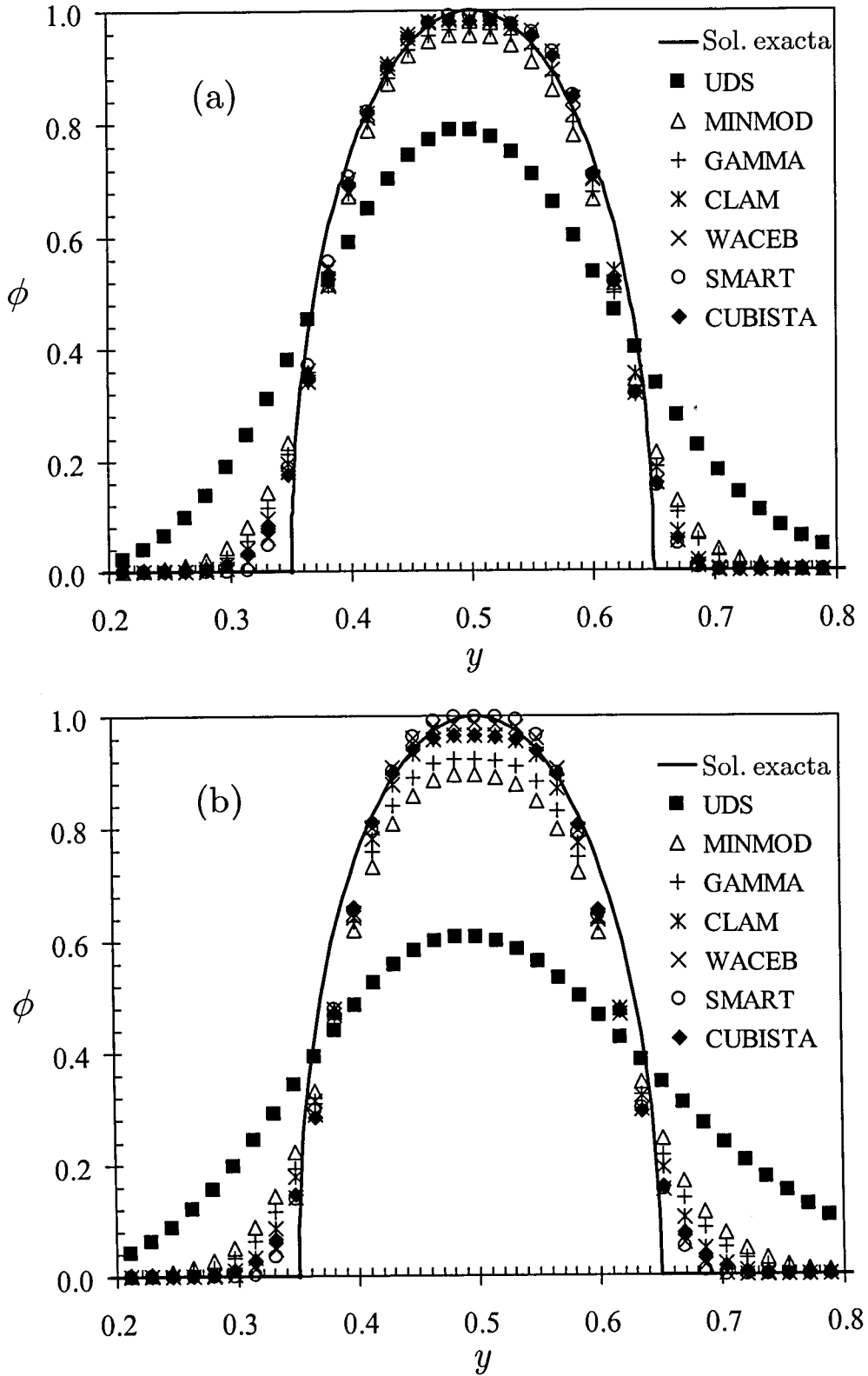


Figura 8.6: Advecção pura de um perfil em forma de uma semi-elipse numa malha uniforme com 59×59 células. Resultados numéricos ao longo da linha $x=0.5$, obtidos com diversos esquemas de diferenças: (a) $\theta=30^\circ$; (b) $\theta=45^\circ$.

Efectuaram-se estudos de convergência com o refinamento da malha para o transporte advectivo do perfil em forma de um seno quadrado. Os resultados obtidos em quatro malhas com diferentes graus de refinamento são apresentados na Figura 8.7, sendo possível estimar a ordem de convergência dos diversos esquemas de diferenças a partir do declive das linhas de ajuste apresentadas nessa figura. Para o esquema SMART obtém-se uma precisão de 3ª ordem, de acordo com o previsto, enquanto que para os esquemas CUBISTA e WACEB obtém-se uma precisão ligeiramente inferior (ordem de convergência de 2.7 e 2.6, respectivamente). Este pequeno decréscimo na ordem de convergência dos esquemas WACEB e CUBISTA resulta da contribuição dos dois pontos nas extremidades do perfil de ϕ , para os quais $\tilde{\phi}_C$ é inferior a 0.375 e superior a 0.75, respectivamente. Nestes pontos o valor de $\tilde{\phi}_f$ não é obtido pelo segmento QUICK do esquema de alta resolução, resultando num ligeiro decréscimo da ordem de convergência. De facto, não se deve avaliar a verdadeira ordem de convergência de um esquema de diferenças em regiões afastadas da zona de escoamento suave, $\tilde{\phi}_C \cong 0.5$, porque nessas condições a expansão em série de Taylor truncada não é válida (cf. Leonard, 1988). Como se irá demonstrar com outros exemplos mais realistas, esta ligeira diminuição na ordem de convergência dos esquemas WACEB e CUBISTA não é tão significativa quanto se poderia depreender da Figura 8.7. Para além disso é preciso ter em mente que o presente problema se destinou a averiguar a precisão do esquema CUBISTA, comparativamente ao SMART; o principal ponto forte do esquema aqui proposto, e que diz respeito à melhoria das propriedades de convergência iterativa, não foi ainda verdadeiramente testado com este problema (vide Secções 8.3.2 e 8.3.3).

Os esquemas de alta resolução CLAM, GAMMA e MINMOD possuem aproximadamente uma precisão de 2ª ordem, contudo os erros obtidos com o esquema CLAM são cerca de uma ordem de grandeza inferiores aos que se obtêm com os esquemas GAMMA e MINMOD, o que demonstra a sua superioridade. O esquema UDS apenas possui precisão de 1ª ordem, o que já era previsto da sua ordem de convergência formal.

Para ilustrar os efeitos indesejáveis causados pela assimetria de alguns esquemas de alta resolução, apresentam-se na Figura 8.8 os perfis calculados para o transporte advectivo de um perfil com a forma de uma semi-elipse, usando-se uma malha uniforme com 29×29 células. Nos perfis calculados com os esquemas

SMART e GAMMA (em particular para $\beta_m = 0.1$) é possível observar uma distorção assimétrica acentuada. Em contrapartida, o perfil previsto com o esquema CUBISTA é praticamente simétrico, de acordo com o previsto, uma vez que a propriedade de simetria foi considerada no design desse esquema de alta resolução.

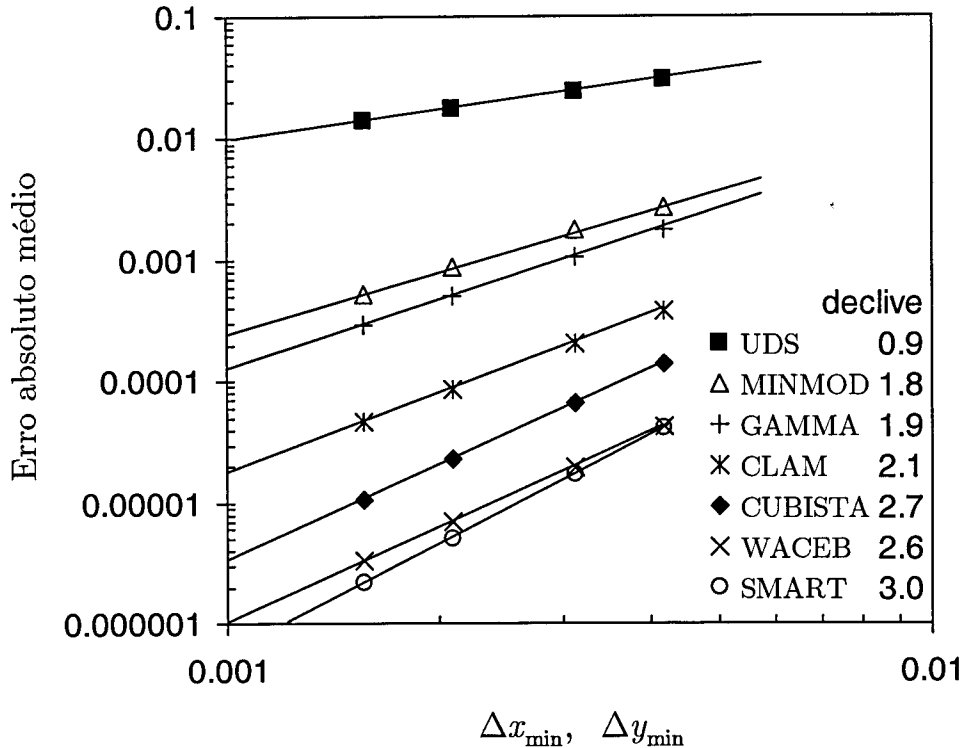


Figura 8.7: Erro absoluto médio entre o perfil teórico e calculado de ϕ , ao longo da linha vertical $x=0.5$, em função do espaçamento mínimo da malha computacional. Os resultados apresentados referem-se ao transporte advectivo de um perfil em forma de um seno quadrado.

8.3.2 Escoamento laminar num degrau

Na Figura 8.9 ilustra-se a geometria referente ao escoamento num degrau (*backward facing step*), e apresentam-se algumas das variáveis relevantes. Este problema foi estudado extensivamente por via experimental e numérica para fluidos newtonianos (e.g., Armaly *et al.*, 1983; Durst e Pereira, 1988), tendo-se tornado num dos problemas de referência para escoamentos em regime laminar (e.g., Gresho *et al.*, 1993; Barton, 1997).

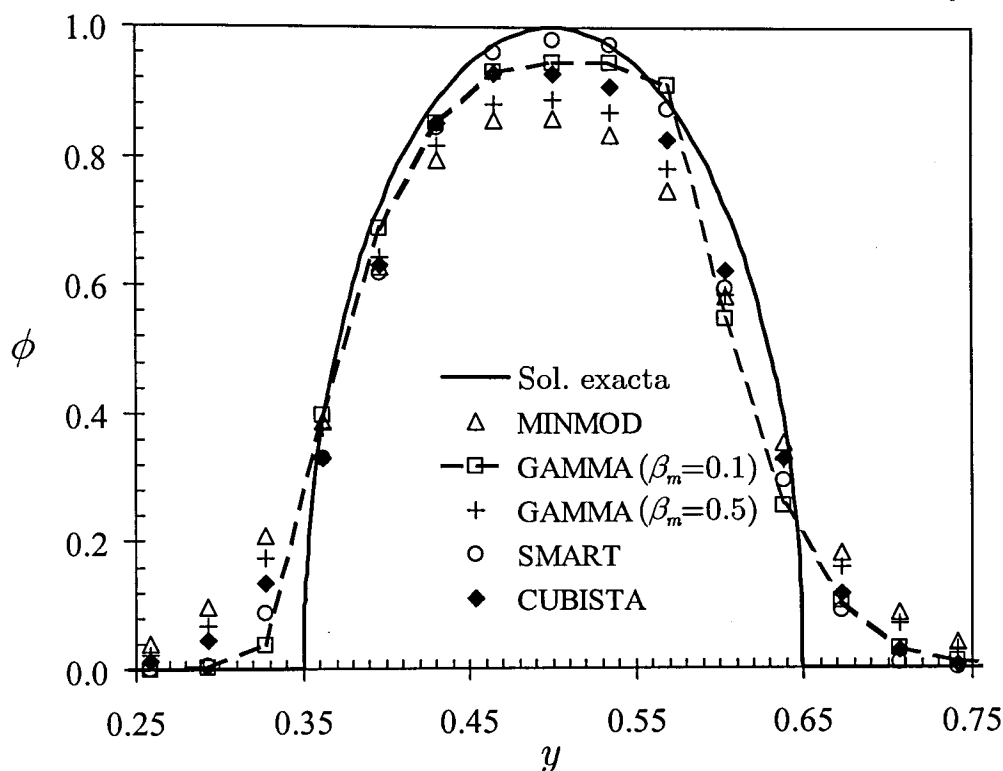


Figura 8.8: Influência da assimetria do esquema de alta resolução: resultados para a semi-elipse transportada por advecção, segundo um ângulo de 30° relativamente a uma malha uniforme com 29×29 células.

O escoamento caracteriza-se por dois grupos adimensionais independentes, sendo habitualmente escolhida a razão entre a altura do degrau e a largura do canal de entrada, s/h , e o número de Reynolds, aqui definido por $Re = 2\rho U_{in} h / \eta$, onde U_{in} é a velocidade média na secção de entrada. Neste exemplo restringe-se a análise para as condições $s/h = 1$ e $Re = 800$, sendo considerados dois tipos de condições de entrada:

- (i) Imposição de escoamento de Poiseuille numa secção afastada do degrau ($x/h = -20$).
- (ii) Imposição de escoamento de Poiseuille exactamente no degrau ($x/h = 0$).

A condição fronteira definida em (ii) conduz a um comprimento de recolamento mais elevado do vórtice principal, contudo o padrão global de escoamento é em tudo semelhante ao obtido com a condição fronteira (i). Em ambas as situações considera-se que a fronteira de saída está localizada em $x/h = 80$, comprimento este suficiente para permitir um desenvolvimento do perfil parabólico da velocidade no canal de jusante. Resultados preliminares efectuados com canais de maior e de

menor dimensão permitiram concluir que esse valor é adequado às condições seleccionadas.

Efectuaram-se simulações num conjunto de malhas sucessivamente refinadas, com o objectivo de se obterem soluções com elevada precisão numérica e para avaliar a ordem de convergência com o refinamento da malha, para os diversos esquemas de diferenças seleccionados.

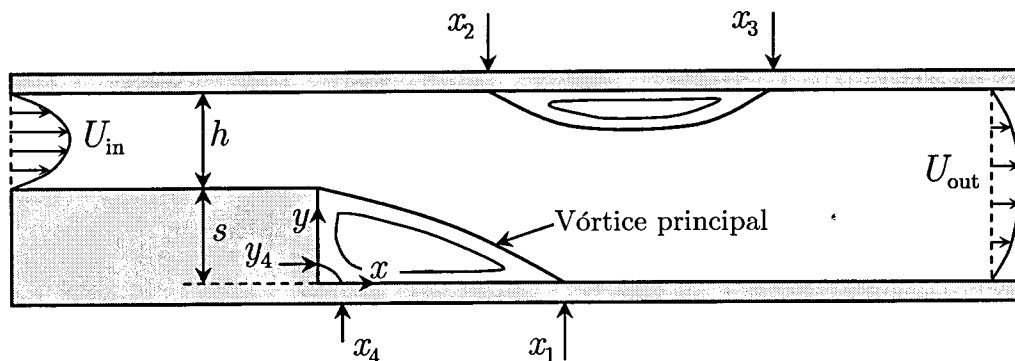


Figura 8.9: Ilustração do escoamento num degrau e definição das variáveis relevantes.

O principal objectivo da proposta do esquema CUBISTA prende-se com a necessidade de se obter um esquema de diferenças de elevada precisão, sem se comprometer a sua estabilidade iterativa e robustez. Na Figura 8.10 apresenta-se a evolução dos resíduos da equação referente ao cálculo de u , ao longo do tempo adimensional, $T = t / (2h / U_{in})$, para diversos esquemas de diferenças. Nessa figura o que se ilustra é, essencialmente, a convergência iterativa dos esquemas de diferenças, uma vez que o tempo representado no eixo das abcissas é proporcional ao número de passos de integração temporal, que podem ser vistos como iterações exteriores. Os resíduos apresentados na Figura 8.10 correspondem à norma L_1 dos resíduos normalizados do sistema de equações algébricas a resolver, devendo tender para zero à medida que o algoritmo de cálculo converge para a solução de estado estacionário. Para este problema admite-se que a solução converge quando os resíduos normalizados das diversas equações tomarem valores inferiores a 10^{-6} . Os resultados apresentados na Figura 8.10 foram obtidos para um passo de integração temporal normalizado de $\delta T = 0.25$. Observando a Figura 8.10 conclui-se que para os esquemas CLAM, WACEB e CUBISTA a convergência iterativa se faz aproximadamente à mesma taxa, enquanto o esquema SMART é incapaz de convergir para a tolerância estipulada. Para o esquema GAMMA usou-se $\beta_m = 0.5$ (um valor superior ao recomendado pelos autores, mas que faz aumentar a sua

estabilidade), verificando-se que a sua convergência iterativa é semelhante à do esquema MINMOD, o que é consistente com as semelhanças existentes entre as funções representativas destes esquemas no diagrama NVD. Estes resultados demonstram o ponto forte do esquema CUBISTA, que é a sua estabilidade iterativa. Relembra-se que, exceptuando o WACEB, todos os outros esquemas que convergem na Figura 8.10 têm precisão significativamente inferior à do esquema proposto.

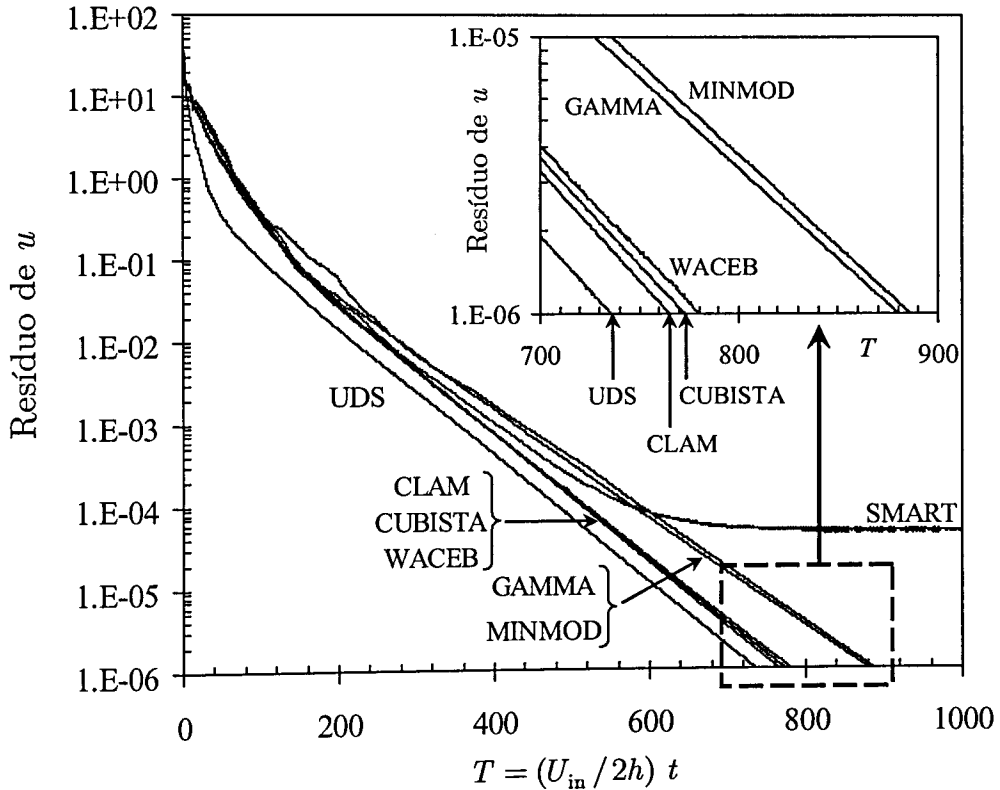


Figura 8.10: Decaimento ao longo do processo iterativo da norma L_1 dos resíduos da equação de conservação de momento segundo x . Comparação entre os diferentes esquemas de diferenças, usando um passo de integração temporal normalizado de $\delta T = 0.25$.

Seguidamente analisa-se a influência do passo de integração temporal na história dos resíduos obtidos com o esquema SMART, que demonstrou dificuldades de convergência iterativa na Figura 8.10. Esses resultados são apresentados na Figura 8.11 para valores normalizados do passo de integração temporal na gama de 0.05 a 0.5, sendo incluída na mesma figura a evolução do comprimento da recirculação principal (x_1 , vide Figura 8.9). Para se obter uma solução convergida, para a tolerância estipulada de 10^{-6} , tem que se usar um passo de integração

temporal baixo (da ordem de $\delta T = 0.05$), reduzindo-se assim a taxa de convergência para a solução de estado estacionário (num factor de 5 vezes comparativamente aos resultados obtidos com o esquema CUBISTA apresentados na Figura 8.10). Observando simultaneamente a evolução temporal dos resíduos e do comprimento da recirculação (por exemplo para $\delta T = 0.5$, vide Figura 8.11), pode concluir-se que o processo iterativo de cálculo continua a fornecer uma solução de estado estacionário adequada, mesmo quando os resíduos não decaem sistematicamente e estabilizam num valor superior ao da tolerância estabelecida. Neste caso é possível alcançar a solução de estado estacionário (representada na Figura 8.11 pelo valor assintótico de x_1 obtido para $\delta T = 0.05$) mesmo quando os resíduos de u não convergem totalmente. Contudo, num problema geral é difícil decidir se a solução convergiu enquanto os resíduos das equações não diminuírem sistematicamente até ao nível estipulado para convergência completa. Numa tal situação não há qualquer garantia de que a solução numérica possa estar a convergir correctamente para a solução pretendida, tornando-se difícil decidir quando se poderá parar o processo de cálculo. Assim, a solução obtida com o esquema SMART para $\delta T = 0.5$, 0.25 ou 0.1 só pode ser considerada válida se forem efectuados testes de verificação adicionais, o que é indesejável e nem sempre viável. Em conclusão, um esquema de discretização com robustez iterativa deverá conduzir a um decaimento dos resíduos das equações de transporte para o nível de resíduo pretendido, por muito baixo que seja o seu valor (desde que, obviamente, seja superior à precisão do instrumento de cálculo; em qualquer dos testes apresentados ao longo desta tese foi usada precisão dupla para todas as variáveis reais).

Na Tabela 8.1 apresentam-se os valores obtidos para o comprimento da recirculação principal em condições de estado estacionário, calculados com os diversos esquemas de diferenças em várias malhas. Usando a técnica da extrapolação de Richardson é possível calcular um valor de referência para o comprimento do vórtice principal, $x_{1,\text{ref}}/2h$, bem como a ordem de convergência com o refinamento da malha para cada um dos esquemas de diferenças, p . Para tal, efectua-se um ajuste não linear do tipo,

$$x_1 = x_{1,\text{ref}} + a(\Delta x_{\min})^p \quad (8.15)$$

em que Δx_{\min} representa a dimensão mínima das células que constituem a malha computacional, e usando os valores obtidos nas malhas mais refinadas. A partir

desse ajuste, podem estimar-se os parâmetros pretendidos ($x_{1,\text{ref}}$ e p), os quais são incluídos na parte inferior da Tabela 8.1. Devido à não uniformidade das malhas computacionais e à existência de outros termos nas equações de transporte, que não apenas os termos convectivos (relembra-se que os termos difusivos são discretizados com diferenças centradas de 2ª ordem), a ordem de convergência obtida para o esquema CUBISTA é ligeiramente superior a 2, sendo idêntica à ordem de convergência estimada com os esquemas WACEB e SMART. Esta observação reforça os comentários feitos na Secção 8.3.1 quanto à ordem de precisão do CUBISTA comparativamente ao esquema SMART.

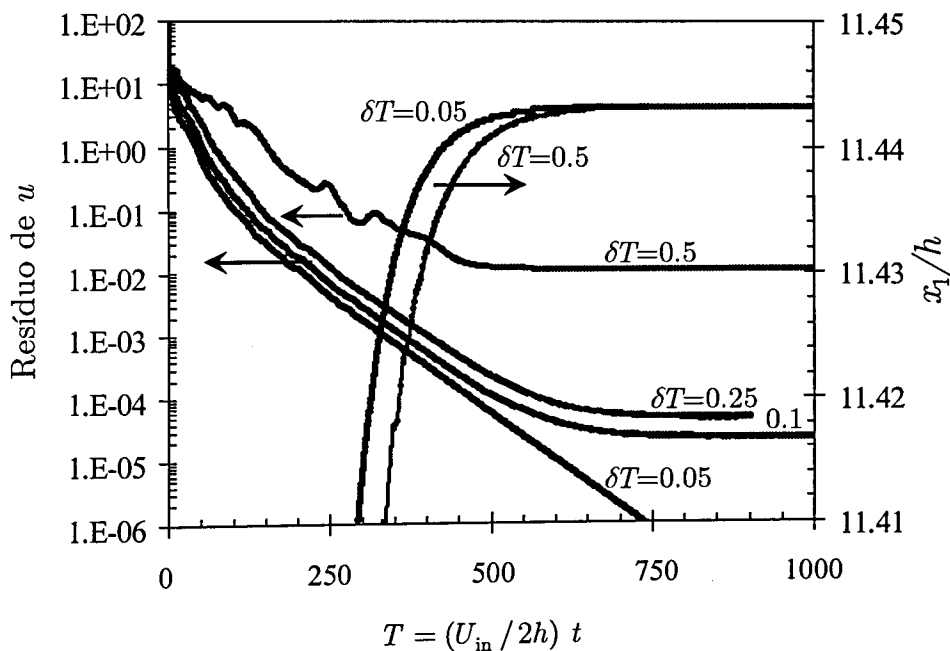


Figura 8.11: Decaimento da norma dos resíduos da equação de conservação de momento segundo x obtido com o esquema SMART. Influência do passo de integração temporal na história dos resíduos e da dimensão da recirculação principal.

Na Figura 8.12 representa-se o erro estimado do comprimento da recirculação principal em função do grau de refinamento da malha, verificando-se uma precisão semelhante para os resultados obtidos com os esquemas WACEB, SMART e CUBISTA. Em termos de convergência iterativa, os esquemas WACEB e CUBISTA são superiores ao esquema SMART, como se ilustrou na Figura 8.10. Para os esquemas CLAM, GAMMA e MINMOD a ordem de convergência é inferior e os erros obtidos nas diversas malhas são significativamente superiores, em particular para o esquema MINMOD. Por exemplo, na segunda malha apresentada na Tabela 8.1 (102×40), que representa uma malha adequada à resolução de um problema prático, o erro do comprimento da recirculação é de 8.8% para o

esquema MINMOD, 4.9% para o esquema CLAM e apenas 3.3% e 3.2% para os esquemas CUBISTA e SMART, respectivamente. Mais uma vez observa-se que o esquema UDS é muito pouco preciso (1ª ordem), sendo por essa razão desaconselhável.

Tabela 8.1- Comprimento do vórtice principal em condições de estado estacionário (com de canal de entrada).

Malha ^(a)	$\Delta x_{\min} / 2h$ ^(b)	UDS	MINMOD	GAMMA	CLAM	WACEB	SMART	CUBISTA
51 × 20	0.0500				4.1380		4.3516	4.1042
102 × 40	0.0250	4.2156	5.3894	5.5546	5.6220	5.7188	5.7216	5.7125
153 × 60	0.0167	4.3532	5.7400	5.7894	5.7998	5.8351	5.8356	5.8338
204 × 80	0.0125	4.5948	5.8205	5.8457	5.8514	5.8701	5.8704	5.8697
306 × 120	0.00833	4.9665	5.8723	5.8835	5.8861	5.8938	5.8938	5.8936
408 × 160	0.00625	5.1968	5.8892	5.8955	5.8970	5.9012	5.9012	5.9012
	$x_{1,\text{ref}} / 2h$			5.9086	5.9086	5.9092	5.9092	5.9092
	p	1.0	2.1	2.2	2.2	2.3	2.3	2.3

^(a) Não considerando o canal de entrada

^(b) $\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min}$

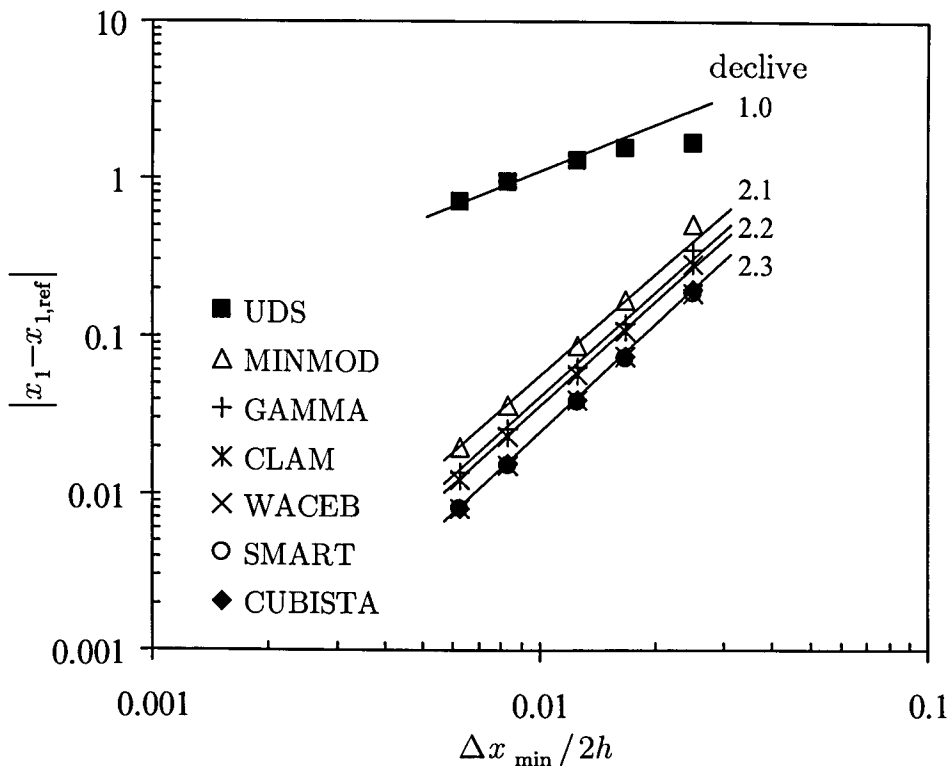


Figura 8.12: Erro estimado no comprimento do vórtice principal em função do espaçamento mínimo da malha.

Como teste adicional ao esquema de alta resolução proposto neste capítulo, e ao processo de cálculo em geral, apresentam-se na Tabela 8.2 os resultados numéricos obtidos por outros autores, bem como as previsões deste trabalho usando o esquema CUBISTA. Os valores tabelados referem-se à condição fronteira do tipo (ii), em que o perfil parabólico de velocidade é imposto exactamente na secção do degrau. Como se pode verificar na Tabela 8.2, existe uma excelente concordância com as soluções de referência obtidas por Gresho *et al.* (1993), o que confirma a boa precisão numérica obtida com o esquema CUBISTA.

Tabela 8.2- Localização dos pontos de estagnação para o escoamento num degrau (caso em que não se utiliza um canal de entrada).

	$x_1/2h$	$x_2/2h$	$x_3/2h$	$x_4/2h$	$y_4/2h$
Este trabalho (CUBISTA)	6.095	4.852	10.481	0.0864	0.0829
Gresho <i>et al.</i> (1993)	6.10	4.85	10.48	---	---
Barton (1997)	6.02	4.82	10.48	---	---

8.3.3 Simulação do escoamento de um fluido viscoelástico

Considere-se o escoamento de um fluido viscoelástico descrito pelo modelo UCM, que é o mais problemático, em termos numéricos, dos modelos viscoelásticos diferenciais. Em linha com os dois capítulos anteriores, nesta secção consideram-se novamente os escoamentos de referência numa contracção plana 4:1, e em torno de um cilindro colocado perpendicularmente entre duas placas planas paralelas.

A geometria e as malhas computacionais usadas na simulação do escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 são as mesmas da Secção 6.2. Neste capítulo o estudo restringe-se ao caso $De = 3$, sendo as simulações efectuadas apenas nas malhas 2 e 3 (vide Tabela 6.1), usando diversos esquemas de diferenças para comparar a precisão e a respectiva convergência iterativa. Para $De = 3$ apresentou-se na Secção 6.3 uma solução de elevada precisão numérica, obtida com o esquema MINMOD numa malha altamente refinada. Essa solução de referência servirá para avaliar a precisão das simulações apresentadas nesta secção, calculadas na malha 2 com diversos esquemas de diferenças. Refira-se que os resultados apresentados na Secção 6.3 foram já usados por outros grupos de investigação como forma de validação numérica (e.g., Aboubacar e Webster, 2001).

Na Figura 8.13 ilustra-se o decaimento do resíduo de τ_{xx} ao longo do tempo adimensional, $T = t/(H_2/U_2)$ (proporcional ao número de passos no tempo ou, de

forma equivalente, ao número de iterações), usando-se a malha 2 e um passo de integração temporal $\delta T = 0.01$. Essa figura mostra que os esquemas MINMOD, GAMMA, WACEB e SMART apresentam dificuldades de convergência, não sendo possível alcançar a tolerância estipulada para garantir convergência do processo iterativo (norma L_1 dos resíduos das equações algébricas inferior a 10^{-4}). Para o esquema GAMMA é possível alcançar convergência para a tolerância estipulada quando se usa $\beta_m = 0.5$, valor que corresponde ao limite superior admissível para garantir boa precisão (Jasak *et al.*, 1999). Na Figura 8.13 também se pode observar que a taxa de decaimento dos resíduos (ou velocidade de convergência) para os esquemas CLAM e CUBISTA é semelhante, sendo um pouco inferior à obtida para o esquema UDS.

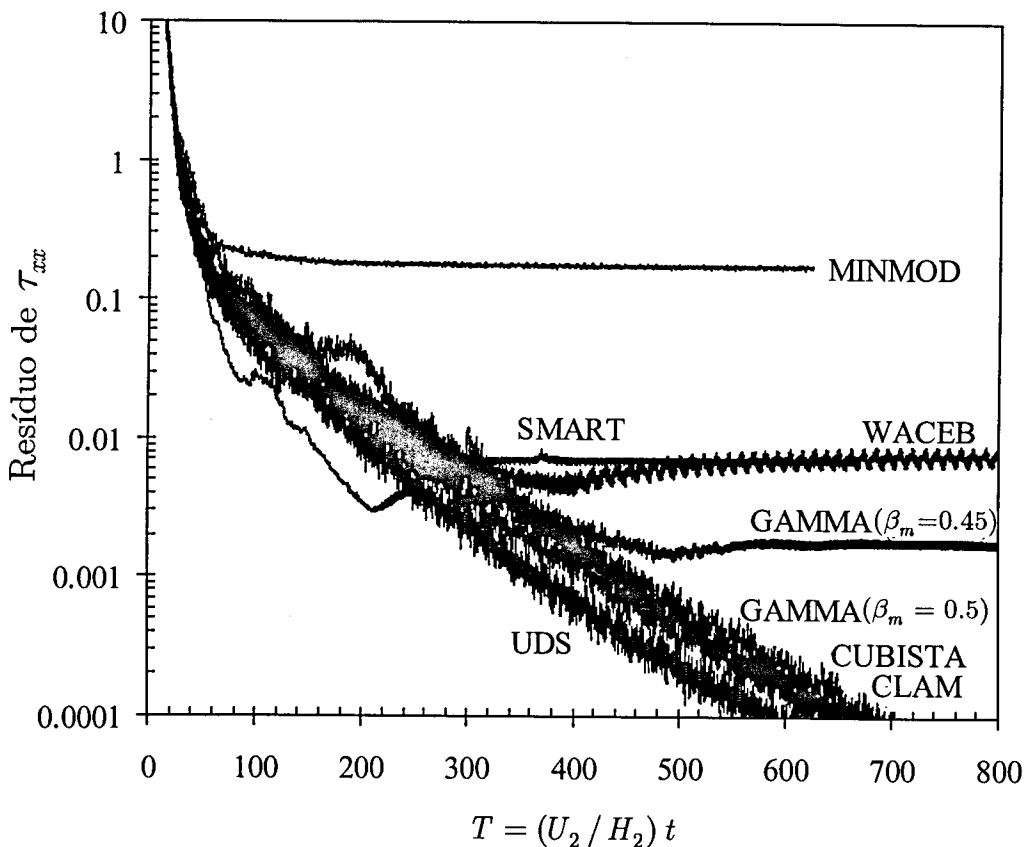


Figura 8.13: Variação dos resíduos da equação para τ_{xz} ao longo do processo de avanço no tempo. Resultados obtidos na malha 2 para o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 a $De = 3$.

Para os esquemas de diferenças em que se alcançou convergência completa analisou-se o efeito do refinamento da malha na respectiva convergência iterativa. Os resultados obtidos na malha 3 são apresentados na Figura 8.14, onde é possível observar que apenas os esquemas UDS e CUBISTA são capazes de alcançar um

resíduo inferior à tolerância estipulada para convergência completa. Fica assim demonstrado que o novo esquema possui propriedades iterativas superiores aos restantes esquemas de alta resolução aqui testados.

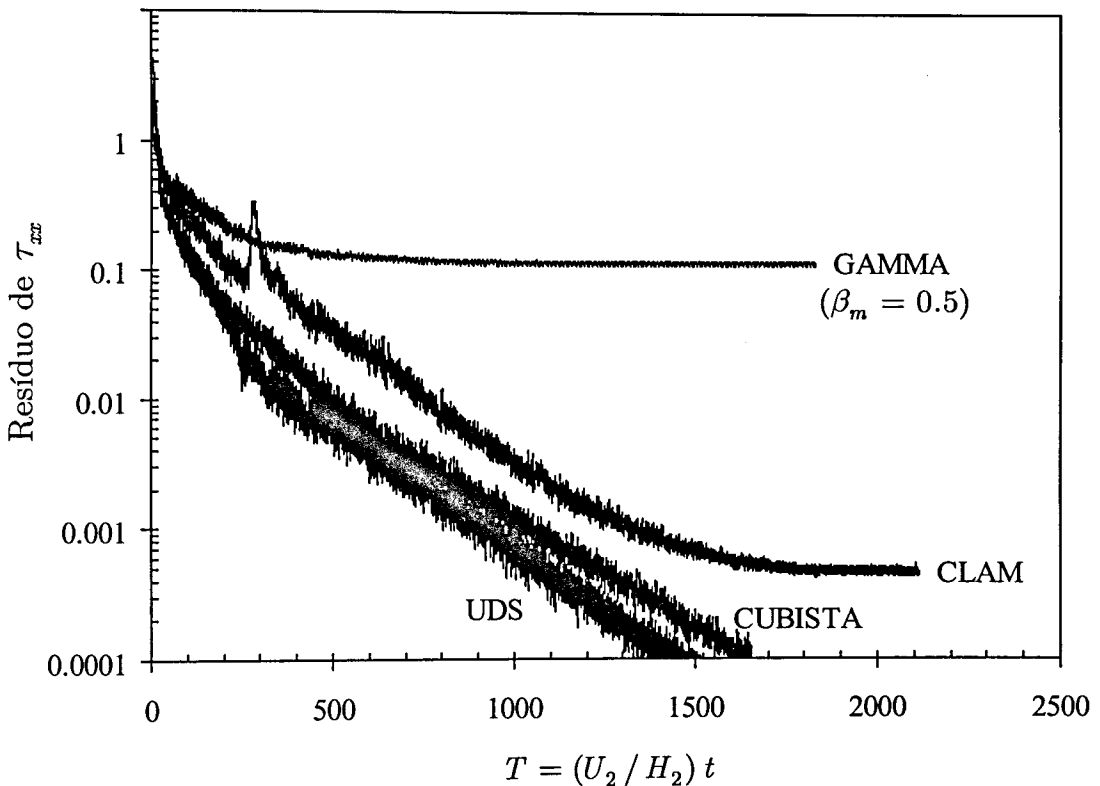


Figura 8.14: Variação dos resíduos da equação para τ_{zz} ao longo do processo de avanço no tempo. Resultados obtidos na malha 3 para o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 a $De=3$.

Para avaliar localmente a precisão do esquema CUBISTA, apresenta-se na Figura 8.15 um mapa de contornos da primeira diferença de tensões normais, normalizada pela tensão de corte na parede da conduta de jusante, $T_w = 3\eta_p U_2 / H_2$. A Figura 8.15 mostra que a precisão do esquema CUBISTA é idêntica à do esquema SMART (os contornos obtidos com ambos os esquemas não são visualmente distinguíveis), sendo claramente superior à do esquema UDS. De facto, foi verificado através de testes de refinamento da malha que as isolinhas de tensão obtidas com o esquema UDS ainda apresentam variações significativas, enquanto que com o CUBISTA as diferenças são imperceptíveis numa figura.

Em termos do padrão de escoamento, na Figura 8.16 apresentam-se as linhas de corrente previstas com os esquemas UDS e CUBISTA. As primeiras são demasiado difusas em comparação com a solução de referência, com o vórtice de canto exageradamente amplificado, e a inexistência do vórtice de entrada, que não é

capturado nesta malha. Em contrapartida, com o esquema CUBISTA prevê-se o padrão de escoamento com boa precisão, não obstante a malha usada na simulação ser pouco refinada. Para avaliar melhor a precisão dos resultados inclui-se na parte inferior da Figura 8.16 uma solução de referência, obtida numa malha muito mais refinada (cf. Tabela 6.1, malha 4).

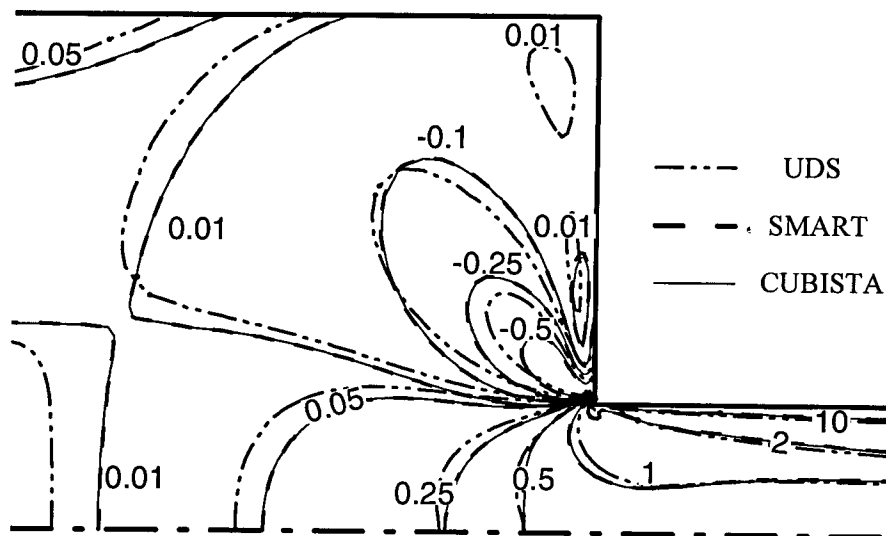


Figura 8.15: Contornos da primeira diferença de tensões normais, $(\tau_{xx} - \tau_{yy}) / (3\eta_p U_2 / H_2)$, calculada com os esquemas UDS, SMART e CUBISTA na malha 2.

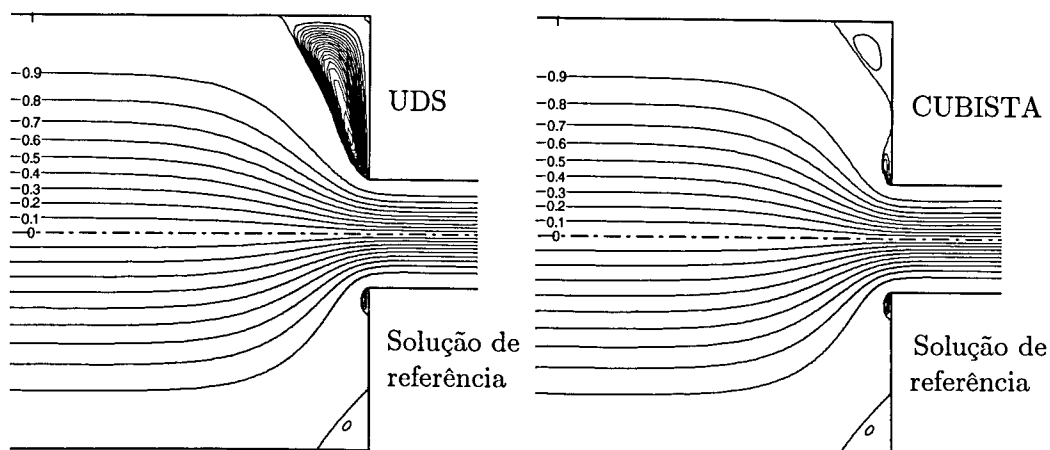


Figura 8.16: Comparação das linhas de corrente previstas com os esquemas UDS e CUBISTA na malha 2. Na parte inferior apresenta-se uma solução de referência calculada numa malha muito mais refinada (malha 4 - vide Tabela 6.1).

Considere-se agora o escoamento de um fluido UCM em torno de um cilindro, colocado transversalmente no centro do espaço criado entre duas placas paralelas. A semi-distância entre placas é dupla do raio do cilindro, $h = 2R$ (vide Figura 7.1), e o número de Débora considerado é $De = \lambda U / R = 0.6$.

Na Figura 8.17 apresenta-se a evolução dos resíduos da equação de τ_{xx} ao longo do processo de avanço no tempo. Novamente, apenas os esquemas UDS e CUBISTA garantem convergência para uma tolerância de 10^{-5} . Qualquer um dos outros esquemas conduz a uma estagnação dos resíduos, pelo que não é possível garantir que os resultados da simulação são adequados, a menos que sejam efectuados testes de convergência adicionais.

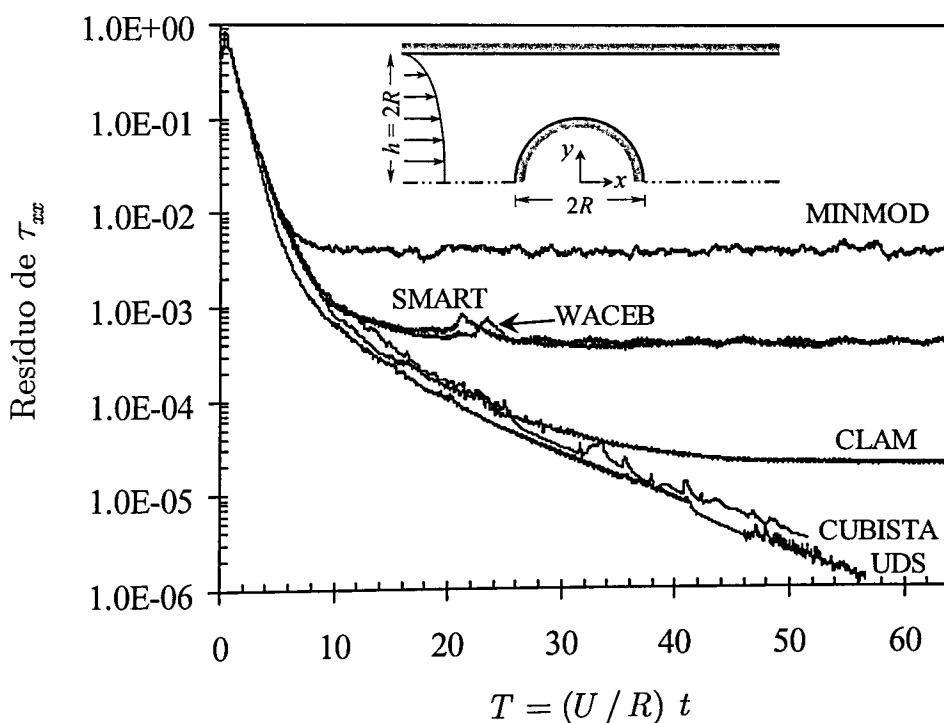


Figura 8.17: Variação dos resíduos da equação para τ_{xx} ao longo do processo de avanço no tempo. Resultados obtidos na malha M30 para o escoamento de um fluido UCM em torno de um cilindro a $De = 0.6$.

A Figura 8.18 compara os resultados das previsões do coeficiente de arrasto sobre o cilindro, C_D , obtidos com os esquemas UDS e CUBISTA na malha M30 (que é relativamente grosseira para este problema - vide Tabela 7.1), com os resultados de elevada precisão obtidos neste trabalho (vide Capítulo 7, Tabela 7.5) e por Fan *et al.* (1999). Para o esquema UDS observa-se que, à medida que a elasticidade do fluido aumenta, o valor de C_D previsto torna-se artificialmente elevado, em particular para $De \geq 0.5$. Em contrapartida, os valores previstos com o esquema CUBISTA são praticamente coincidentes com os resultados de

referência, apesar da malha computacional aqui usada possuir um baixo número de volumes de controle.

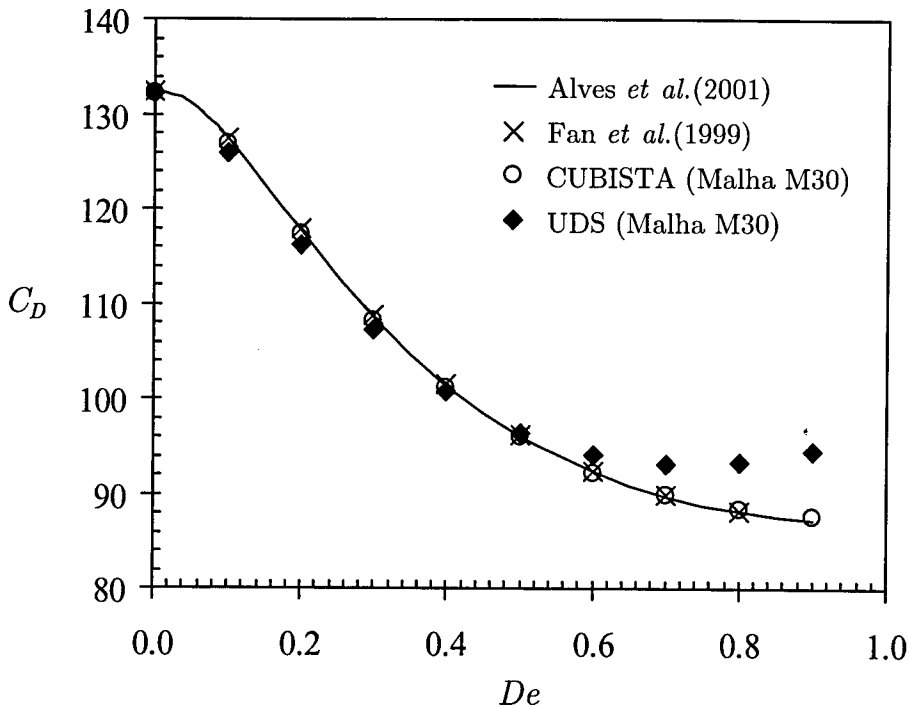


Figura 8.18: Comparação de previsões do coeficiente de arrasto sobre o cilindro.

Algumas conclusões relativas à convergência iterativa dos esquemas de alta resolução podem ser retiradas dos exemplos apresentados. O esquema MINMOD é o mais difusivo dos esquemas de alta resolução considerados e, apesar de verificar as restrições TVD definidas pela Eq. (8.2), apresenta dificuldades de convergência como se pode observar nas Figuras 8.13 e 8.17. Estas dificuldades deverão ter origem no facto da mudança de ramo da função $\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C)$ ocorrer na região de escoamento suave, causando assim uma instabilidade de transição. O esquema SMART viola as restrições TVD para valores de $\tilde{\phi}_C \cong 0$ e $\tilde{\phi}_C \cong 1$, pelo que apresenta problemas de convergência iterativa quando ocorrem gradientes elevados de ϕ nessas regiões. O esquema WACEB segue precisamente as restrições TVD para estado estacionário ($C = 0$), mas os resultados demonstram que essas condições são insuficientes para garantir convergência da solução em certos escoamentos (alguma margem de segurança é necessária, como proposto no esquema CUBISTA). Este facto é particularmente importante para as situações em que $\tilde{\phi}_C \cong 1$, pois o esquema WACEB segue a linha referente ao esquema de diferenças de jusante, que é altamente instável quando se usam algoritmos de solução implícitos.

Na Figura 8.19 apresenta-se o decaimento dos resíduos de τ_{xx} ao longo do tempo (proporcional ao número de passo de integração), para diferentes valores do parâmetro C do esquema de alta resolução proposto (segmento de recta à esquerda do esquema QUICK com declive C , e segmento de recta à direita do esquema QUICK com declive $1-C$, passando pelo ponto (1,1) no diagrama NVD). A Figura 8.19 refere-se ao escoamento em torno de um cilindro confinado a $De = 0.6$, e confirma algumas das conclusões acima apresentadas. Para valores de C na gama 0.2 a 0.3 observa-se uma boa convergência iterativa, justificando-se assim a escolha do parâmetro $C = 0.25$ para o esquema CUBISTA. Para valores de C mais elevados ($C = 0.35, 0.4$ e 0.5) não se obtém convergência para o resíduo pretendido, não obstante o aumento de dissipação introduzido no esquema. Note-se que para o valor $C = 0.5$ recupera-se o esquema MINMOD, pelo que a instabilidade de transição deverá ser a responsável pelas dificuldades de convergência observadas na Figura 8.19. Para baixos valores de C ($C = 0$ a 0.15) não se observa convergência iterativa completa, desta vez causada pela não verificação das restrições TVD (para um valor finito de C). Para $C = 0$ recupera-se o esquema WACEB que também apresenta dificuldades de convergência.

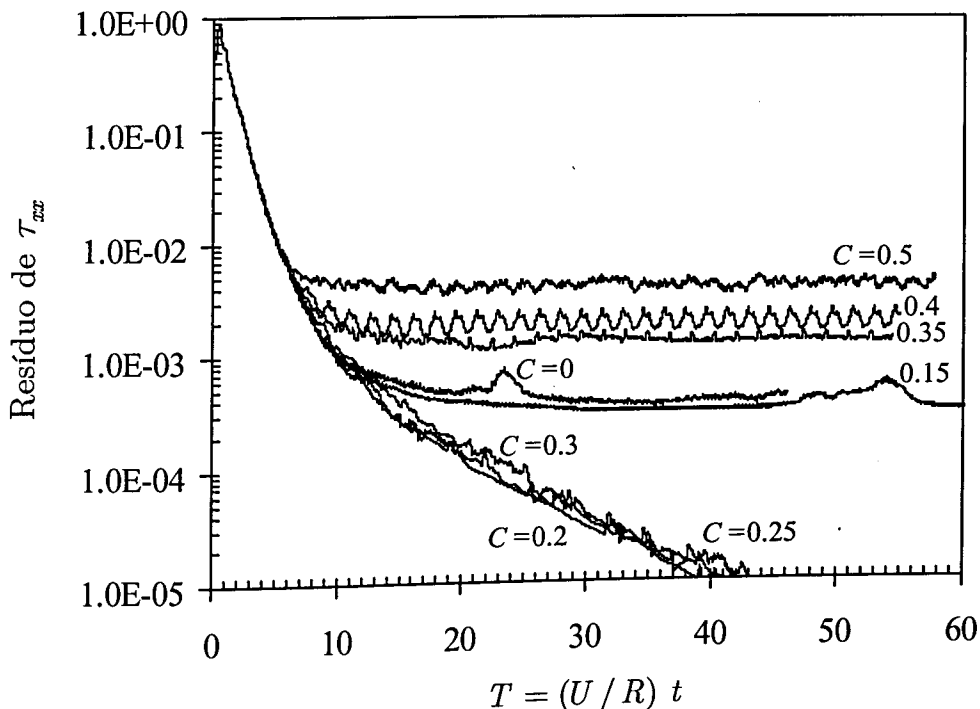


Figura 8.19: Influência do parâmetro C na história dos resíduos da equação para τ_{xx} . Resultados obtidos na malha M30 para o escoamento de um fluido UCM em torno de um cilindro a $De = 0.6$.

8.4 Conclusões

Um novo esquema de alta resolução para o tratamento dos termos convectivos (denominado CUBISTA) é proposto no âmbito das formulações NVA e NVSF. O esquema CUBISTA apresenta uma precisão equivalente à do esquema SMART, melhorando significativamente a sua robustez em termos de convergência iterativa. A precisão e a robustez iterativa do novo esquema são demonstradas com vários problemas lineares e não lineares, envolvendo o escoamento de fluidos newtonianos e de fluidos viscoelásticos. Neste último caso verificou-se que apenas o esquema CUBISTA foi capaz de convergir totalmente a solução numérica para os resíduos estipulados, justificando-se assim plenamente a proposta deste novo esquema de alta resolução.

Capítulo 9

Soluções de referência para o escoamento de fluidos Oldroyd-B e PTT em contracções[§]

Neste capítulo apresentam-se soluções de referência para o escoamento de fluidos Oldroyd-B e PTT numa contracção plana 4:1. Os resultados obtidos incluem a variação com o número de Débora do comprimento e intensidade do vórtice de canto e da correcção de Couette. A precisão dos resultados é quantificada, obtendo-se erros inferiores a 1% (0.3% para a maioria dos resultados). Para o fluido PTT linear foi possível alcançar soluções estáveis para valores do número de Débora acima de 100, enquanto que para o fluido PTT exponencial foram alcançados valores superiores a 10 000. Estes resultados superam claramente a gama de soluções estáveis reportadas na literatura para este escoamento. Analisa-se ainda a influência da razão de contracção no padrão de escoamento, e efectuam-se comparações entre o escoamento numa contracção 4:1 para as geometrias plana e axissimétrica.

9.1 Introdução

No Capítulo 2 foi apresentada a bibliografia relevante para o escoamento de um fluido viscoelástico numa contracção 4:1 (plana ou axissimétrica), o qual é

[§] Este capítulo é baseado nos seguintes trabalhos:

- (i) "Alves, Oliveira e Pinho (2003b). Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **110**: 45-75".
- (ii) "Alves, Oliveira e Pinho (2003c). Numerical simulation of viscoelastic contraction flows. *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*. Ed. Bathe. Elsevier, Amsterdam. **2**: 826-829".
- (iii) "Alves, Oliveira e Pinho (2004). On the effect of contraction ratio in viscoelastic flow through abrupt contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **Aceite para publicação**".

actualmente um dos problemas de referência mais importantes em reologia computacional. Não obstante a enorme atenção que este problema tem suscitado nos últimos anos, a qualidade da generalidade dos resultados apresentados na literatura é questionável, como se ilustrou na Figura 2.4, onde se denota claramente a imprecisão (mesmo em termos qualitativos) de grande parte dos resultados publicados. Assim, tornou-se claro desde o início dos trabalhos conducentes à presente tese que este escoamento de referência deveria ser estudado em detalhe, com o objectivo de se obterem soluções numéricas de elevada precisão. Este tipo de soluções numéricas muito precisas são aqui designadas como “soluções de referência” (*benchmark solutions*) sendo extremamente úteis para avaliar o desempenho de novos métodos de resolução.

Neste capítulo estuda-se numericamente o escoamento em regime de Stokes (a $Re = 0$, precisamente) numa contracção plana 4:1, para fluidos que seguem os modelos Oldroyd-B e PTT simplificado (este nas versões linear e exponencial). O esquema de alta resolução CUBISTA, desenvolvido no capítulo anterior, é usado na discretização dos termos convectivos das equações constitutivas dada a sua robustez e elevada precisão. Analisa-se ainda o escoamento dos fluidos Oldroyd-B e PTT linear numa contracção axissimétrica 4:1, e estuda-se o escoamento de um fluido PTT linear em contracções planas com diversas razões de contracção, na gama 4:1 a 100:1.

9.2 Geometria do escoamento e malhas computacionais

Na Figura 6.1 apresentou-se a geometria para o escoamento numa contracção plana 4:1, pelo que é desnecessário repeti-la. Como existe simetria do escoamento relativamente ao plano central, apenas se considera a metade superior da contracção (o plano central é considerado uma fronteira de simetria), reduzindo-se assim para cerca de metade os tempos de cálculo e os requisitos computacionais em termos de memória. A desvantagem desta simplificação reside na impossibilidade de se preverem eventuais assimetrias no escoamento induzidas por efeitos elásticos, bem como escoamentos não estacionários.

Para o fluido PTT é possível obter soluções numéricas estáveis para valores elevados da elasticidade do fluido com inerente aumento da dimensão longitudinal das condutas, para garantir desenvolvimento completo dos escoamentos, pelo que as malhas consideradas neste capítulo são mais compridas que as usadas nos

capítulos precedentes. A maioria dos cálculos aqui reportados foram efectuados em malhas com comprimentos adimensionais de $L_1/H_2 = 40$ e $L_2/H_2 = 100$, respectivamente para os canais a montante e a jusante do plano de contracção. Para o fluido PTT, para valores de De superiores a 20, foram usadas malhas com comprimentos adimensionais ainda mais elevados ($L_1/H_2 = 500$ e $L_2/H_2 = 1500$), para se garantir um desenvolvimento completo dos perfis de velocidade e tensão, e dessa forma evitar qualquer influência das condições fronteira (quer de entrada, quer de saída) nos resultados junto ao plano da contracção, bem como nas previsões da correcção de Couette.

Na Tabela 9.1 apresentam-se algumas características das malhas usadas na simulação deste escoamento (para as geometrias com menor comprimento), sendo relevante destacar o número elevado de graus de liberdade referentes à malha M6 (superior a 1 milhão). Na Figura 9.9 (a ser discutida posteriormente) apresenta-se um detalhe da malha M6 junto ao canto reentrante, sendo visível o elevado refinamento da malha junto ao ponto singular. Este elevado número de células é necessário para que se consiga prever adequadamente o comportamento assintótico das componentes da velocidade e tensão junto à singularidade, sobretudo quando o fluido segue o modelo reológico Oldroyd-B.

Tabela 9.1- Principais características das malhas computacionais (NC: número de células; DOF: graus de liberdade; Δx e Δy : dimensões das células).

Malha	NC	DOF	$\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min}$
M1	5 282	31 692	0.020
M2	10 587	63 522	0.014
M3	21 128	126 768	0.010
M4	42 348	254 088	0.0071
M5	84 512	507 072	0.0050
M6	169 392	1 016 352	0.0035

9.3 Resultados

Efectuaram-se simulações numéricas nas diversas malhas apresentadas na Tabela 9.1, para valores crescentes do número de Débora ($De = \lambda U_2 / H_2$) em condições de inércia nula ($Re = 0$). Para ambos os modelos constitutivos seleccionou-se uma razão de viscosidades constante, $\beta = \eta_s / (\eta_s + \eta_p) = 1/9$, e um parâmetro $\varepsilon = 0.25$ (valor típico para polímeros fundidos) para o modelo PTT. Estes valores

foram também escolhidos por outros autores (cf. Owens e Phillips, 2002), o que possibilita a comparação directa dos resultados.

9.3.1 Fluido Oldroyd-B

Na Tabela 9.2 e nas Figuras 9.1 a 9.3 apresentam-se os resultados obtidos para o comprimento (X_R) e intensidade (Ψ_R) do vórtice de canto, e para a correcção de Couette (C), a qual traduz de forma adimensional a queda de pressão extra induzida pela contracção (vide Eq. (6.10)). Estes resultados são comparados com os valores recentemente publicados por Aboubacar e Webster (2001) e Aboubacar *et al.* (2002b), que deverão ser talvez os mais precisos até à data deste estudo.

Os resultados foram calculados em três malhas consecutivamente refinadas (M2, M4 e M6), obtidas por duplicação sucessiva do número de volumes de controlo em cada direcção e redução para metade das dimensões das células (i.e., o número total de volumes de controlo da malha M6 é quádruplo da malha M4, que por sua vez é quádruplo da malha M2).

Tabela 9.2- Resultados de referência para o fluido Oldroyd-B ($\beta=1/9$).

De	X_R	Erro (%)	$\Psi_R \times 10^3$	Erro (%)	C	Erro (%)	$\tau_{xx, \max}^{(a)}$	$u_{\max}^{(a)}$
0.0	1.5002	0.02	1.178	0.2	0.3741	0.1	0.360	1.501
0.5	1.4520	0.02	1.006	0.6	-0.0360	1.	0.461	1.511
1.0	1.373	0.1	0.780	2.	-0.505	0.4	0.544	1.525
1.5	1.279	0.2	0.576	3.	-0.995	0.4	0.589	1.537
2.0	1.181	0.2	0.422	4.	-1.492	0.3	0.612	1.546
2.5	1.077	0.3	0.297	6.	-1.996	0.4	0.623	1.554
3.0 ^(b)	0.973	0.6	0.207	9.	-2.501	0.7	0.638	1.562

^(a)Valores máximos na linha central, normalizados por $3\eta_0 U_2 / H_2$ e U_2 .

^(b)Baseado nos resultados obtidos nas malhas M1 a M5.

As Figuras 9.1 a 9.3 mostram que o comprimento e a intensidade do vórtice de canto, bem como a correcção de Couette, diminuem com o aumento da elasticidade. Foi possível obter soluções estáveis até $De = 2.5$ nas malhas M1 a M6, e até $De = 3$ nas malhas M1 a M5. Estes valores limites de elasticidade são semelhantes ao valor máximo alcançado por Aboubacar e Webster (2001) ($De = 2.8$), contudo as simulações reportadas por estes autores foram efectuadas numa malha significativamente menos refinada (note-se que nas malhas M1 e M2 foi possível alcançar $De = 5$ e 4.5 , respectivamente; esses resultados não são

incluídos na Tabela 9.2 por não se terem considerado suficientemente precisos). Os resultados apresentados por Aboubacar e Webster (2001) seguem a tendência dos valores do presente estudo, com uma precisão comparável à dos resultados calculados na malha M2. As excepções referem-se aos resultados obtidos para o valor de De mais elevado, e ao valor *errático* a $De = 0.1$. De uma conversa pessoal com o Prof. M.F. Webster ficou a dúvida se a solução numérica apresentada em Aboubacar e Webster (2001) corresponderia realmente ao resultado de estado estacionário, em particular a $De = 0.1$. Tudo indica que o critério usado nesse estudo, para avaliar a convergência iterativa do processo de cálculo, tenha sido insuficiente para garantir convergência completa para a solução de estado estacionário. Por outro lado, à medida que De tende para zero a solução deverá convergir assintoticamente para o resultado newtoniano. Rogerson e Yeow (1999) efectuaram uma análise semi-analítica do escoamento newtoniano numa contracção plana 4:1, tendo obtido o valor $X_R \cong 1.5$, confirmando-se assim os resultados obtidos no presente estudo.

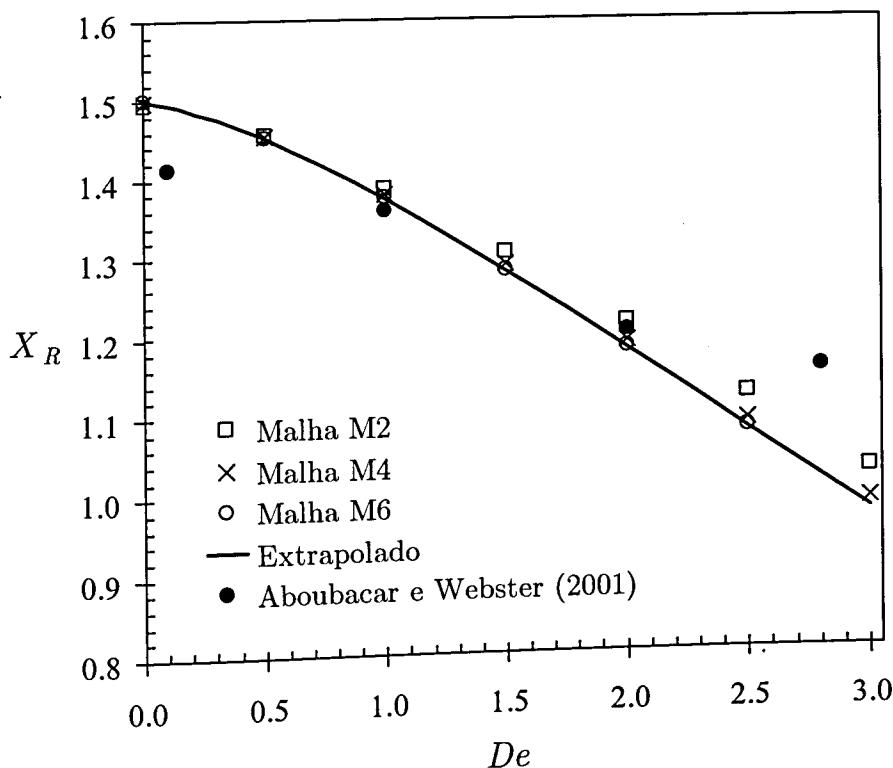


Figura 9.1: Variação do comprimento do vórtice de canto (X_R) com o número de Débora (De) para o fluido Oldroyd-B.

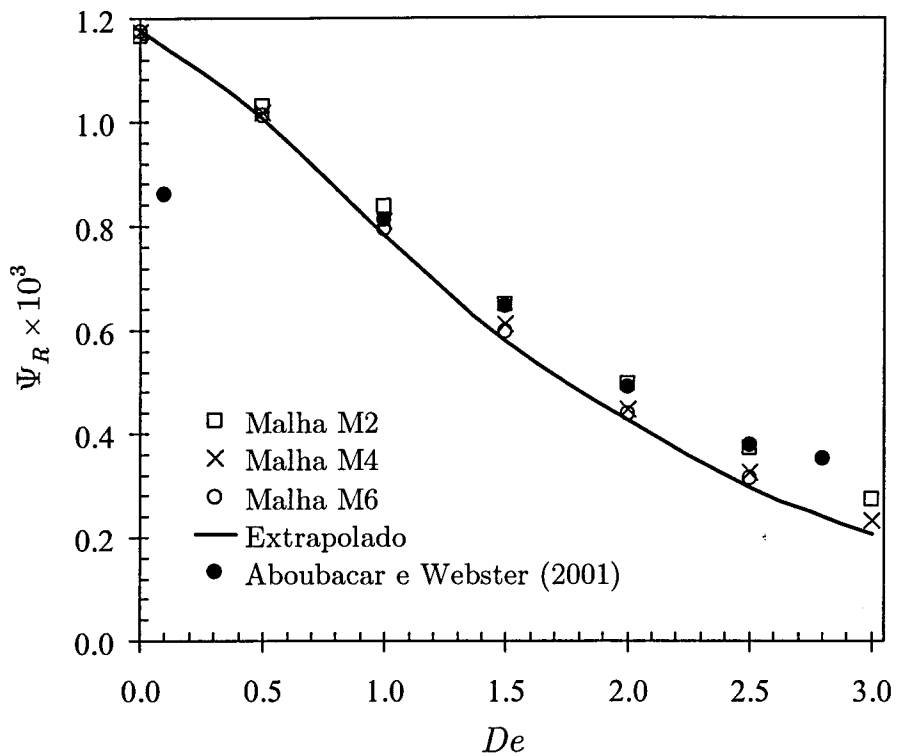


Figura 9.2: Variação da intensidade do vórtice de canto (Ψ_R) com o número de Débora (De) para o fluido Oldroyd-B.

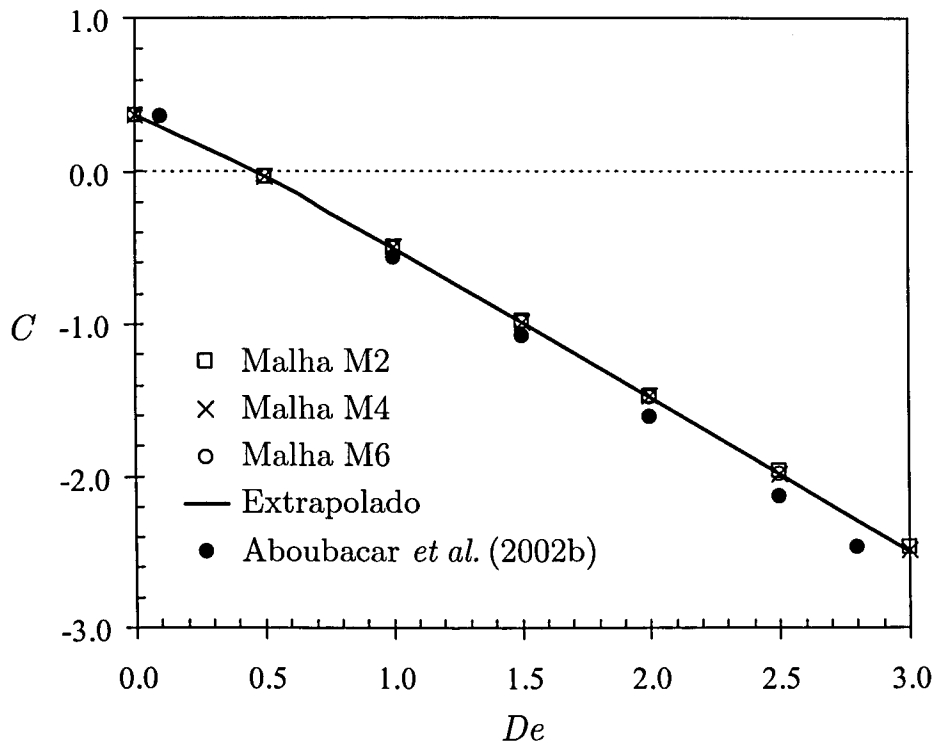


Figura 9.3: Variação da correcção de Couette (C) com o número de Débora (De) para o fluido Oldroyd-B.

Os erros listados na Tabela 9.2 referem-se à diferença relativa entre a solução calculada na malha mais refinada e a solução estimada pela técnica da extrapolação de Richardson, traduzindo uma estimativa da incerteza dos valores tabelados. Os resultados de referência apresentados na Tabela 9.2 correspondem aos valores obtidos por extrapolação de Richardson.

Na Figura 9.4 apresentam-se alguns resultados publicados na literatura para o comprimento do vórtice de canto em função do número de Débora. Os resultados de referência obtidos no presente estudo também são incluídos na Figura 9.4, assim como os valores calculados com o esquema UDS (pouco preciso) numa malha pouco refinada (malha M1). Por um lado, verifica-se que os valores obtidos por Aboubacar e Webster (2001) aproximam-se razoavelmente dos resultados do presente estudo. Por outro lado, observa-se que os resultados calculados no presente estudo, usando uma malha grosseira e um esquema de diferenças pouco preciso, se situam aproximadamente na *média* dos resultados obtidos na generalidade dos outros estudos (para $De \leq 1$), ilustrando dessa forma a imprecisão desses valores.

Para o fluido Oldroyd-B verifica-se que a correcção de Couette é pouco sensível ao grau de refinamento da malha (cf. Figura 9.3), em contraste com o comprimento e a intensidade do vórtice de canto que dependem de forma significativa da malha usada na simulação, e que justificam o recurso a malhas com um elevado número de células.

Na Figura 9.5 apresenta-se a dependência de X_R com o grau de refinamento da malha ($De = 2.5$), observando-se uma convergência quadrática nas malhas M2 a M6. Apesar do esquema CUBISTA, usado na discretização dos termos convectivos das equações constitutivas, ser formalmente de 3ª ordem, já era esperada uma convergência de 2ª ordem, devido à discretização dos termos difusivos das equações ser efectuada com diferenças centradas de 2ª ordem (CDS).

Na Figura 9.6 apresentam-se as linhas de corrente calculadas na malha M6 para diferentes valores de De . Observa-se uma diminuição do comprimento e da intensidade do vórtice de canto com o aumento da elasticidade, surgindo um pequeno vórtice de entrada a $De \approx 1$, o qual tende a aumentar em comprimento e intensidade com a elasticidade do escoamento. Apesar do vórtice de entrada ser de pequena dimensão, na Figura 9.7 demonstra-se a sua existência para $De \geq 1.5$. Para $De = 0.5$ e 1 o vórtice de entrada desaparece com o refinamento da malha,

enquanto que para $De = 1.5$ o vórtice de entrada persiste, mesmo quando a dimensão das células que constituem a malha computacional tende para zero.

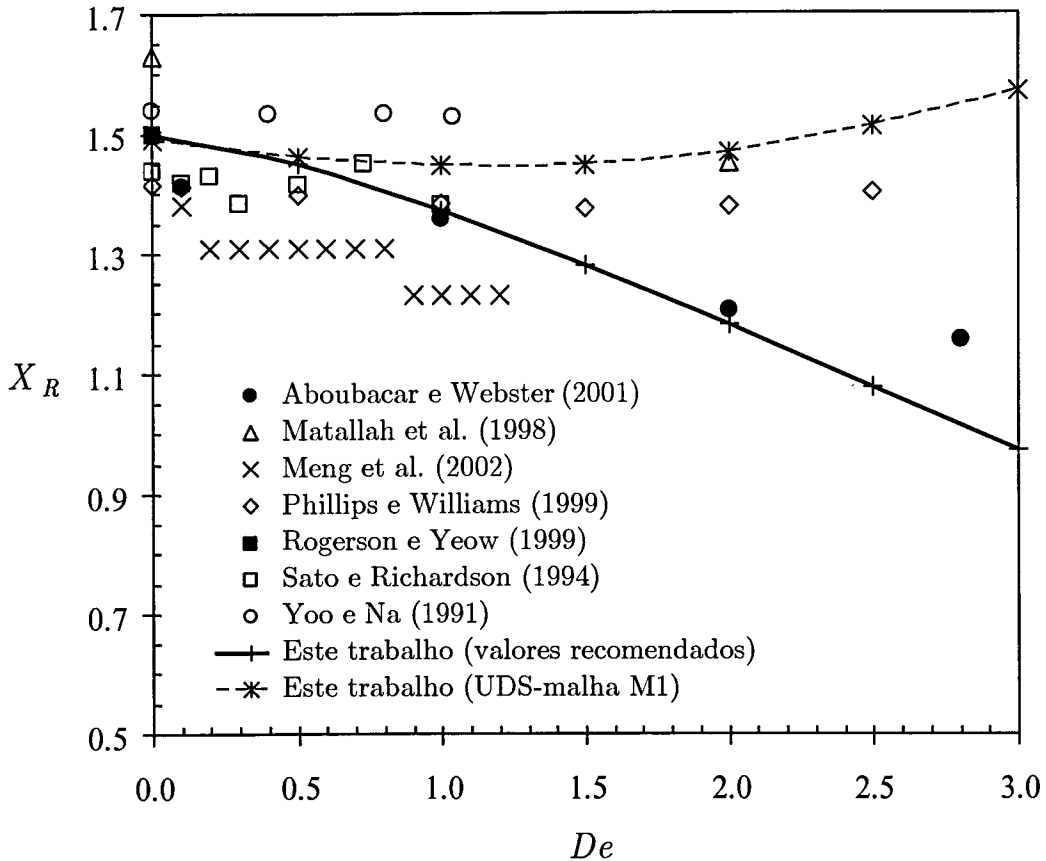


Figura 9.4: Variação do comprimento do vórtice de canto (X_R) com o número de Débora (De) para o fluido Oldroyd-B. Comparação dos resultados obtidos no presente estudo com valores publicados na literatura.

A Figura 9.8 (a) apresenta uma ampliação da região junto ao canto reentrante, ilustrando-se as linhas de corrente do vórtice de entrada, previstas nas malhas M3 a M6. A dimensão do vórtice de entrada diminui com o grau de refinamento da malha, observando-se na Figura 9.8 (b) uma convergência de y_{lip} para um valor finito. Ao contrário do que se observa na Figura 9.5, para a convergência de X_R com o refinamento da malha, neste caso verifica-se uma convergência de 1ª ordem para y_{lip} . Esta diminuição aparente da ordem de convergência resulta de y_{lip} ser um parâmetro local do escoamento, referente à região mais problemática (na vizinhança de um ponto singular), não reflectindo assim a verdadeira ordem global de convergência.

Na Figura 9.9 apresentam-se os mapas de contornos das componentes da tensão e da pressão, junto ao canto reentrante. Os resultados foram obtidos na malha M6,

para o valor de elasticidade mais elevado que foi possível alcançar nessa grelha computacional ($De = 2.5$). Os campos das diversas variáveis são perfeitamente suaves, observando-se uma concentração de tensões elevadas junto à parede do canal, imediatamente a jusante da contração.

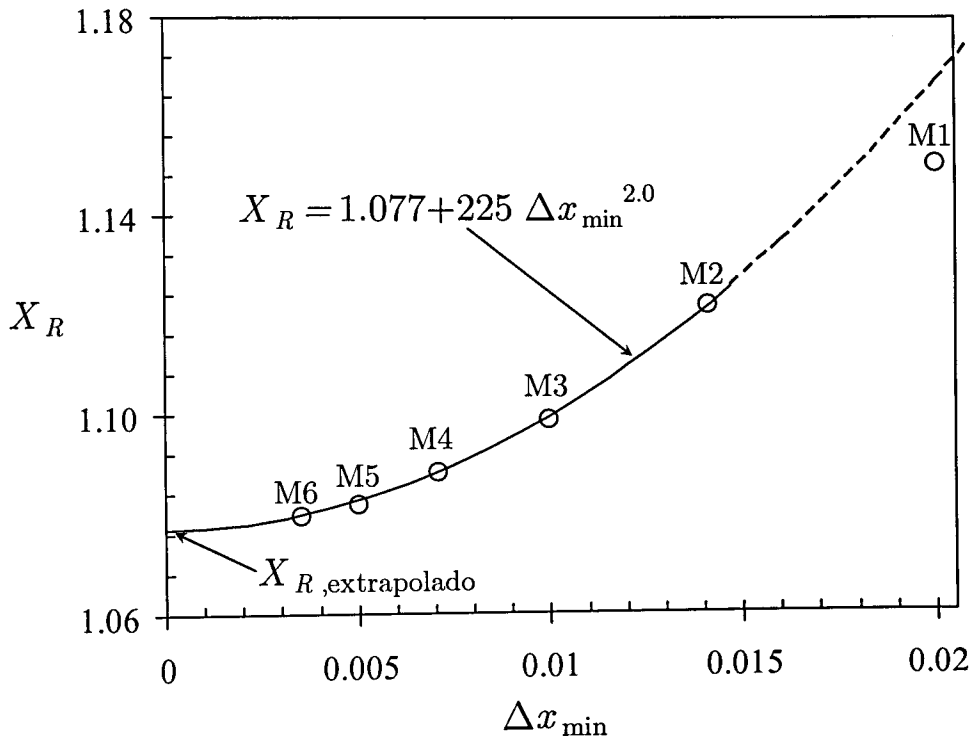


Figura 9.5: Convergência com o refinamento da malha para o comprimento do vórtice de canto. Fluido Oldroyd-B a $De = 2.5$.

Para se quantificar de forma mais adequada a variação das componentes da velocidade e tensão junto ao ponto singular, habitualmente apresentam-se as representações assintóticas dos perfis radiais de velocidade e tensão em coordenadas log-log, num sistema de coordenadas polares centrado no ponto singular (vide Figura 6.1). Tal como descrito na Secção 6.3.1, a análise teórica de Hinch (1993), para o escoamento de um fluido Oldroyd-B num canto, conduz a expressões assintóticas do tipo,

$$u_i \propto r^{5/9}; \quad \tau_{ij} \propto r^{-2/3} \quad (9.1)$$

sendo r a distância ao canto reentrante. Na Figura 9.10 apresentam-se os resultados obtidos nas malhas M3 a M6 para as componentes da velocidade e tensão. Escolheu-se o valor $De = 1$ para evitar a formação de um vórtice de entrada, cuja presença viola um dos pressupostos da teoria desenvolvida por Hinch.

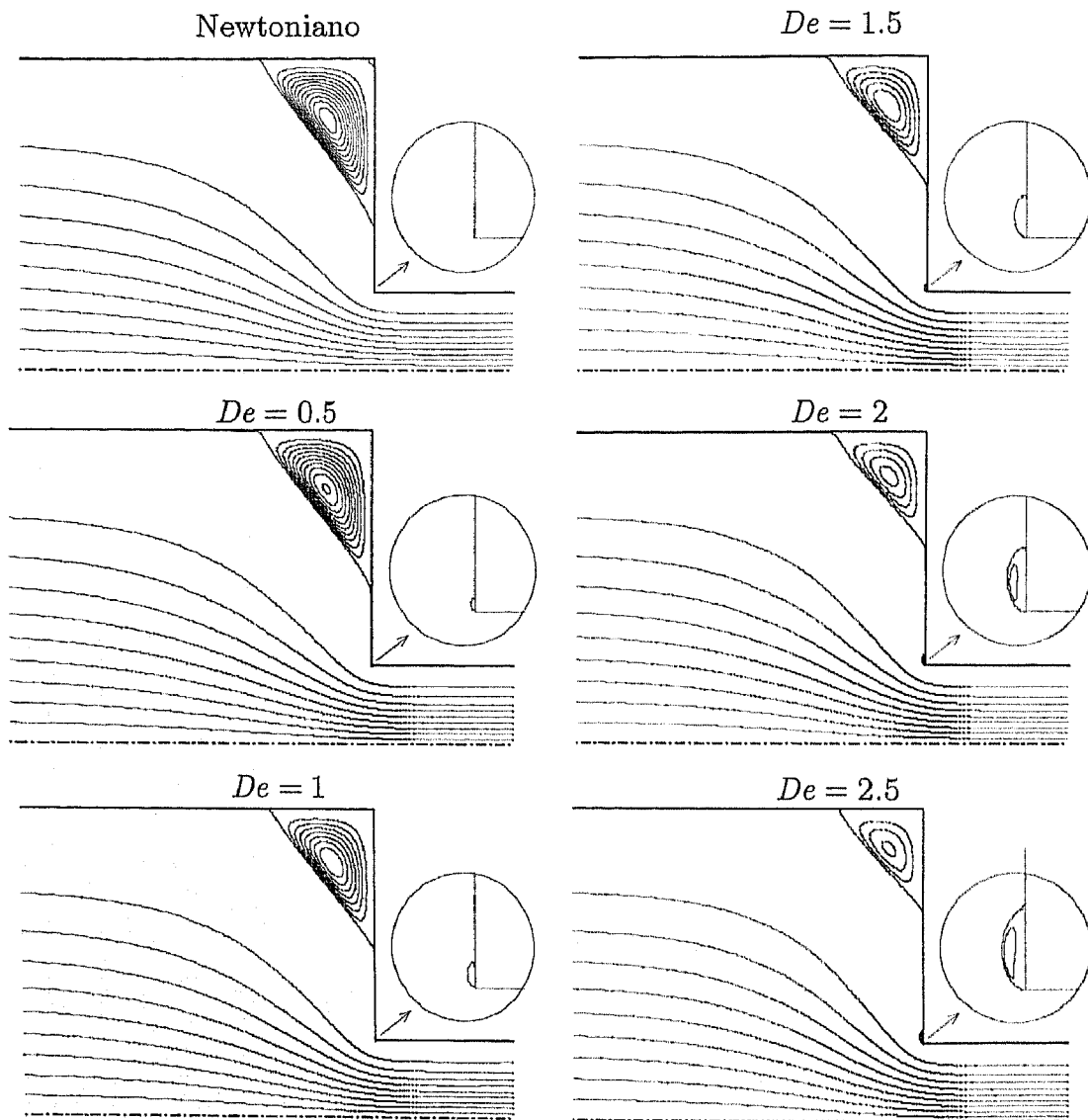


Figura 9.6: Sequência das linhas de corrente para valores de De crescentes (malha M6). As linhas de corrente no interior dos vórtices encontram-se igualmente espaçadas, com $\delta_\psi = 0.1 \times 10^{-3}$.

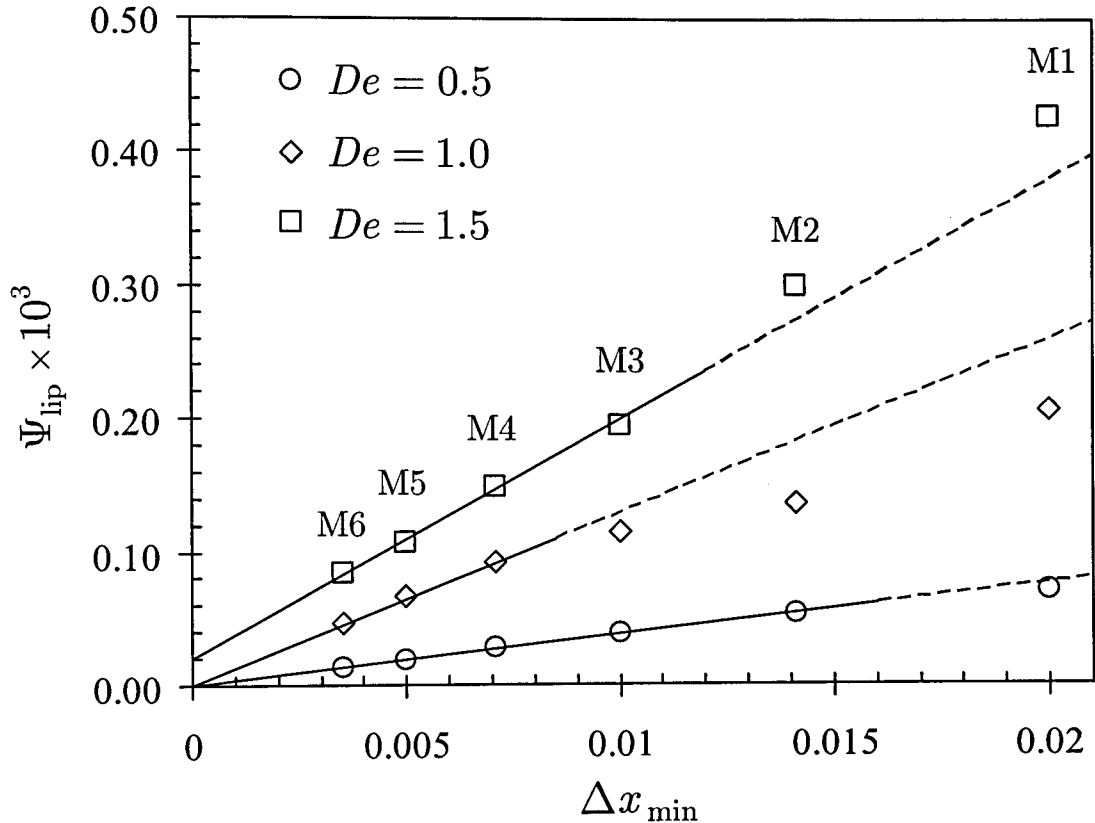


Figura 9.7: Convergência da intensidade do vórtice de entrada com o refinamento da malha. Fluido Oldroyd-B a $De = 0.5, 1.0$ e 1.5 .

Os perfis apresentados na Figura 9.10 demonstram uma boa convergência com o refinamento da malha, observando-se também uma boa concordância com as previsões teóricas de Hinch. Note-se que a componente transversal da velocidade (v) anula-se um pouco mais rapidamente que o previsto, à medida que r tende para zero. As representações assintóticas apresentadas na Figura 9.10 referem-se à linha radial a $\theta = 90^\circ$ (i.e., $x = 0$), obtendo-se comportamentos assintóticos idênticos para outros ângulos θ . Em Alves *et al.* (2001a) analisou-se a influência do número de Débora e do ângulo θ nos perfis radiais da velocidade e tensão na vizinhança do ponto singular, para o escoamento de um fluido UCM numa contracção plana 4:1, tendo sido obtida uma boa concordância com as previsões teóricas de Hinch.

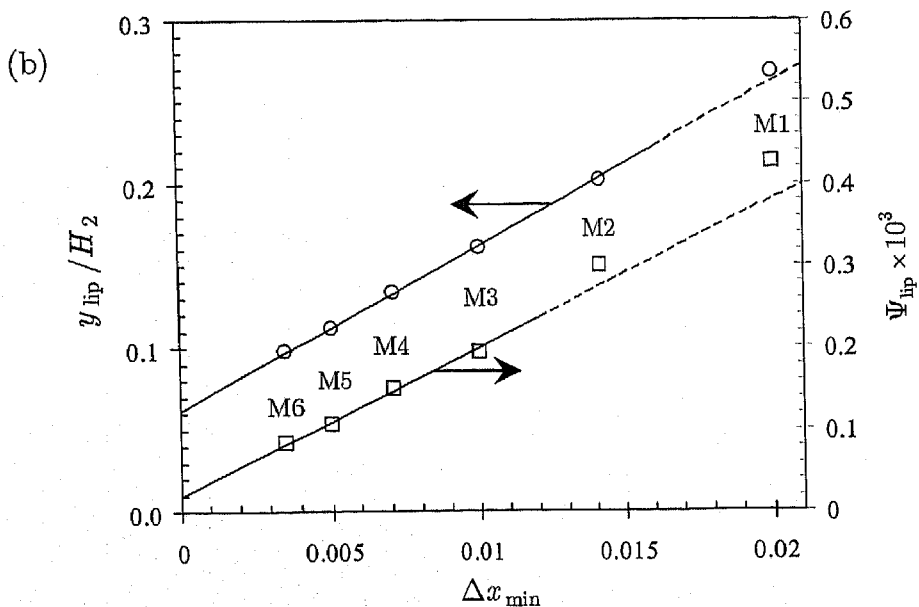
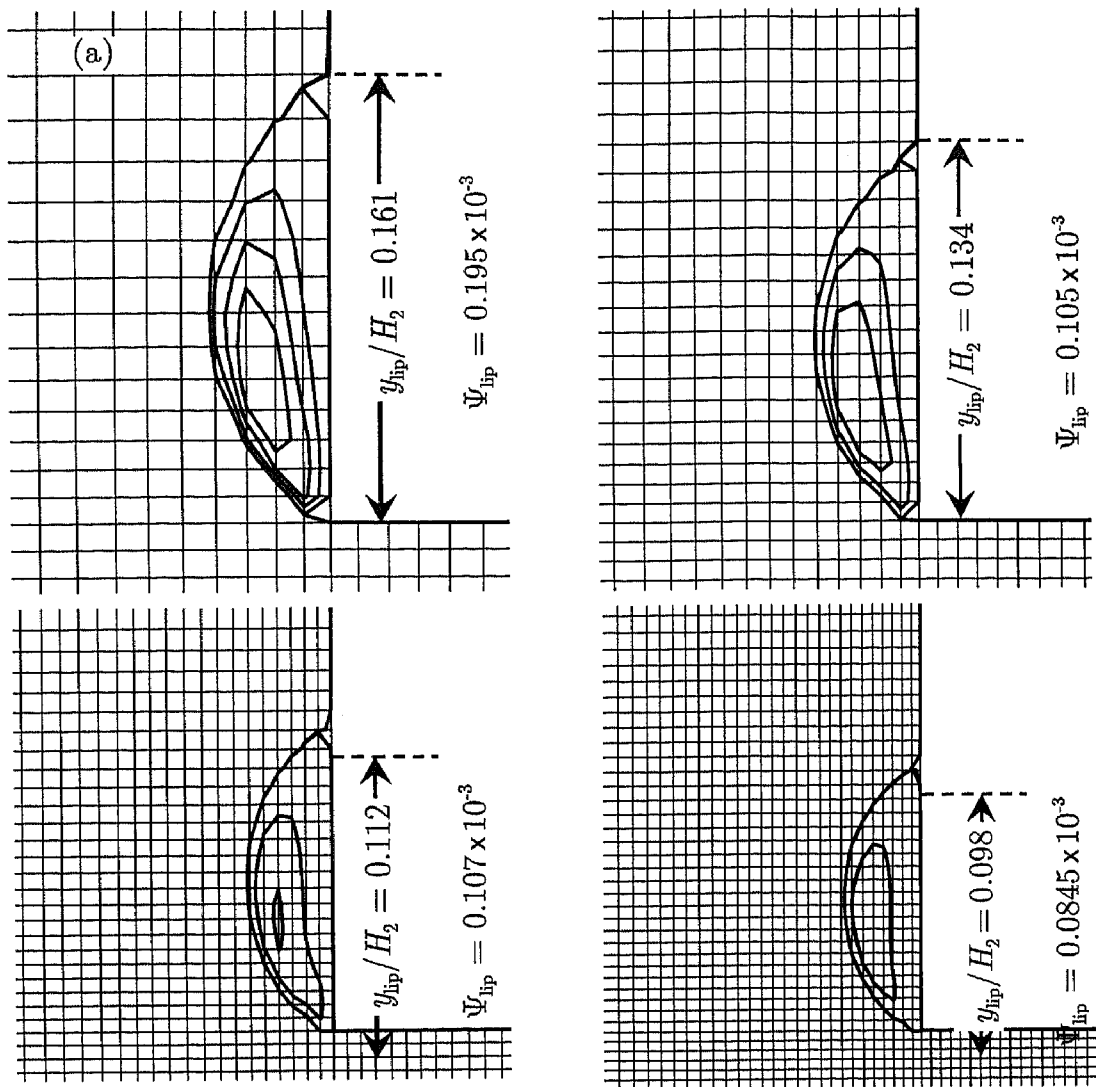


Figura 9.8: Vórtice de entrada para o fluido Oldroyd-B a $De = 1.5$. (a) Vista local das linhas de corrente e da malha. Nota: na recirculação $\Delta\Psi_{lip} = 0.05 \times 10^{-3}$. (b) Variação do comprimento (y_{lip}) e intensidade do vórtice de entrada (Ψ_{lip}) com o refinamento da malha.

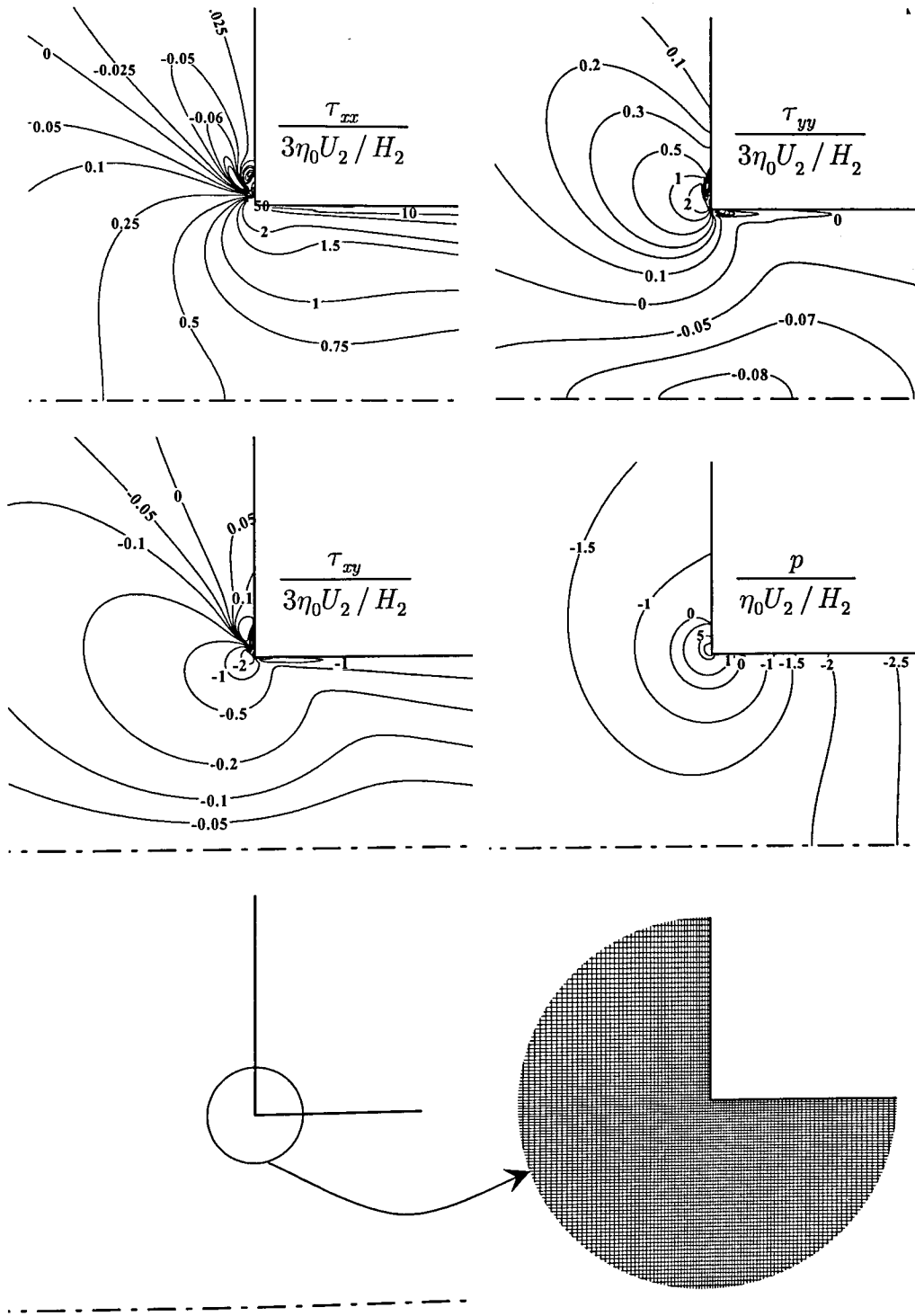


Figura 9.9: Detalhe dos campos de pressão e tensão numa pequena região na vizinhança do canto reentrante. Cálculos efectuados na malha M6 (também ilustrada) para o fluido Oldroyd-B a $De = 2.5$.

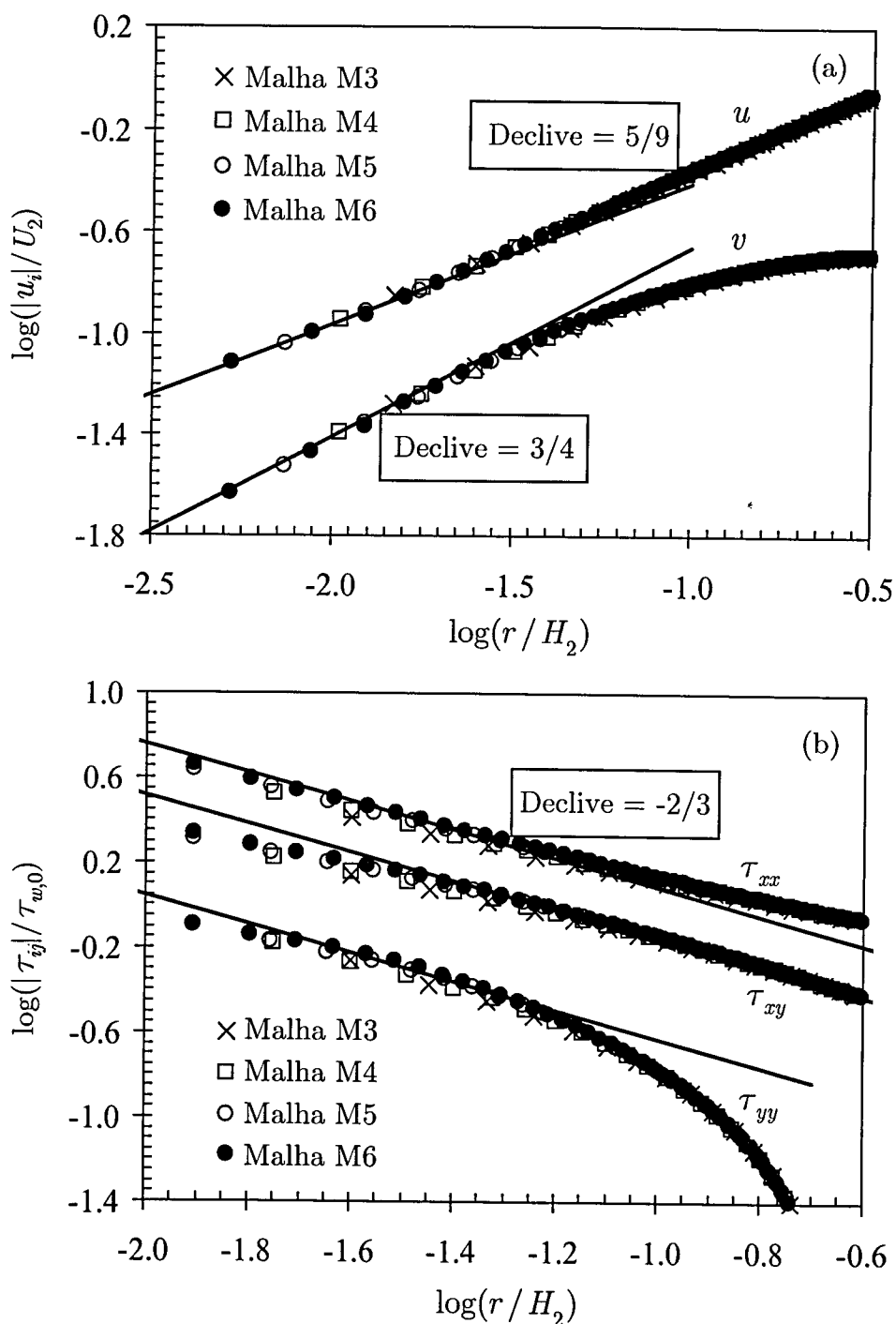


Figura 9.10: Variação assimpótica junto ao canto reentrante, ao longo da linha vertical a $\theta = 90^\circ$ (i.e., $x = 0$), para as componentes da (a) velocidade e (b) tensão. Fluido Oldroyd-B a $De = 1$.

9.3.2 Fluido PTT linear

Este modelo constitutivo apresenta reofluidificação da viscosidade de corte, η , e do coeficiente da primeira diferença de tensões normais, Ψ_1 . Neste capítulo considera-se a versão simplificada do modelo PTT ($\xi = 0$), que é a mais utilizada em estudos numéricos, e em que o coeficiente da segunda diferença de tensões normais, Ψ_2 , é nulo (cf. Tabela 3.1). A viscosidade elongacional é limitada em toda a gama de taxas de extensão, $\dot{\epsilon}$, atingindo um patamar (inversamente proporcional ao parâmetro ε) para valores elevados da taxa de extensão. Selecionou-se o valor $\varepsilon = 0.25$ para o parâmetro elongacional do modelo PTT, de acordo com estudos efectuados por outros autores (e.g., Aboubacar *et al.*, 2002b), que é típico de soluções poliméricas moderadamente concentradas ou mesmo de polímeros fundidos.

Os principais resultados obtidos são incluídos na Tabela 9.3, onde se apresenta a influência do número de Débora nas seguintes variáveis: comprimento (X_R) e intensidade (Ψ_R) do vórtice de canto; correcção de Couette (C); valor máximo da componente polimérica da tensão normal ao longo da linha central ($\tau_{xx,max}$); valor máximo da velocidade ao longo da linha central (u_{max}). A precisão das principais variáveis encontra-se quantificada na Tabela 9.3, para que possam ser usadas como valores de referência. Esta estimativa do erro foi calculada com base nas diferenças entre os valores previstos na malha mais fina e os valores extrapolados.

Contrariamente ao observado no caso do fluido Oldroyd-B, para o modelo PTT linear os resultados mostram um aumento de X_R e de Ψ_R com o número de Débora. Em Aboubacar *et al.* (2002b) observou-se um comportamento semelhante, contudo a precisão dos resultados obtidos nesse estudo não é muito elevada, como se pode constatar nas Figuras 9.11 e 9.12. No presente trabalho alcançaram-se soluções estáveis para valores de Débora superiores a 100, em contraste com o valor limite $De = 9$ em Aboubacar *et al.* (2002b).

Para o modelo constitutivo PTT linear verifica-se um dependência pouco significativa dos resultados numéricos com o grau de refinamento da malha (cf. Figuras 9.11 a 9.13) uma vez que os resultados calculados na malha M6 são praticamente coincidentes com os valores obtidos nas malhas M4 e M2.

A perda de carga localizada foi contabilizada pela correcção de Couette, que está representada na Figura 9.13 em função do número de Débora. Até $De \approx 30$ observa-se uma diminuição de C (sendo a correcção de Couette nesse caso

ligeiramente negativa, i.e., ocorre uma recuperação elástica), seguindo-se um aumento para os valores de De mais elevados.

Tabela 9.3- Resultados de referência para o fluido PTT linear ($\beta=1/9$; $\varepsilon=0.25$).

De	X_R	Erro (%)	$\Psi_R \times 10^3$	Erro (%)	C	Erro (%)	$\tau_{xx,max}^{(a)}$	$u_{max}^{(a)}$
0.0	1.5002	0.02	1.178	0.2	0.3741	0.1	-	1.501
0.1	1.500	0.1	1.178	0.2	0.3092	0.1	0.349	1.495
0.2	1.501	0.1	1.179	0.2	0.2581	0.2	0.368	1.484
0.5	1.506	0.1	1.201	0.1	0.1672	0.2	0.399	1.465
1	1.542	0.1	1.339	0.1	0.0951	0.3	0.415	1.468
2	1.639	0.1	1.781	0.1	0.0261	1.	0.405	1.484
5	1.898	0.1	3.31	0.5	-0.0551	0.9	0.340	1.512
10	2.131	0.1	4.76	0.7	-0.1113	0.6	0.264	1.531
20	2.321	0.1	5.73	1.	-0.1460	0.3	0.183	1.542
50	2.493	0.2	6.34	2.	-0.1444	0.4	0.0920	1.544
100	2.57	0.5	6.48	2.	-0.0917	1.	0.0480	1.540

^(a)Valores máximos na linha central, normalizados por $3\eta_0 U_2 / H_2$ e U_2 .

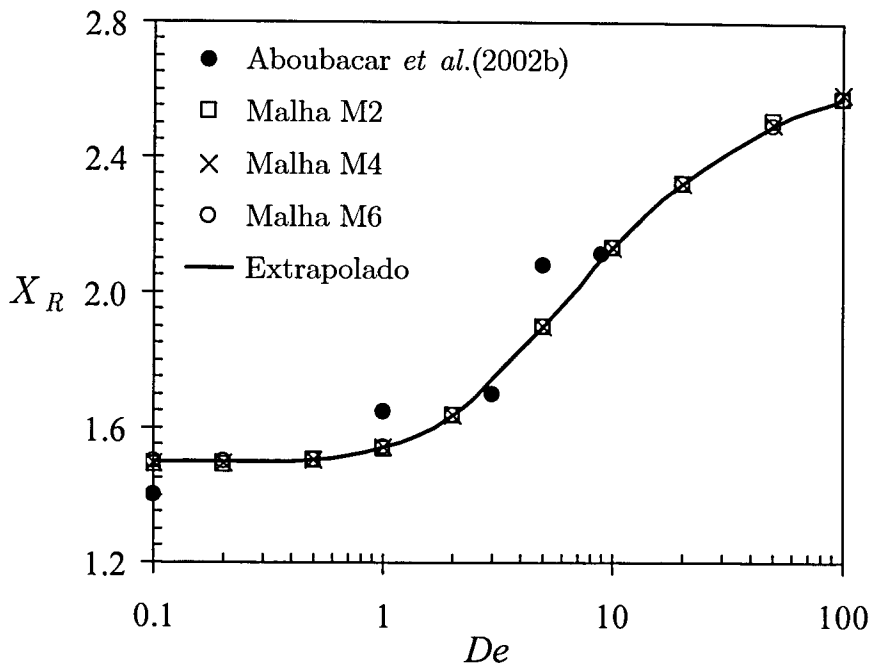


Figura 9.11: Variação do comprimento do vórtice de canto (X_R) com o número de Débora (De) para o fluido PTT linear ($\varepsilon = 0.25$).

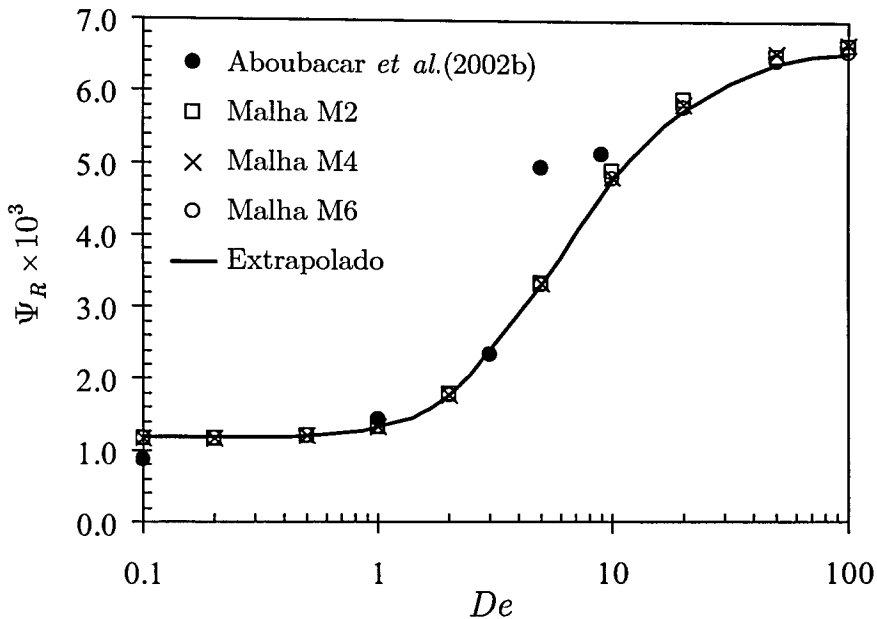


Figura 9.12: Variação da intensidade do vórtice de canto (Ψ_R) com o número de Débora (De) para o fluido PTT linear ($\varepsilon = 0.25$).

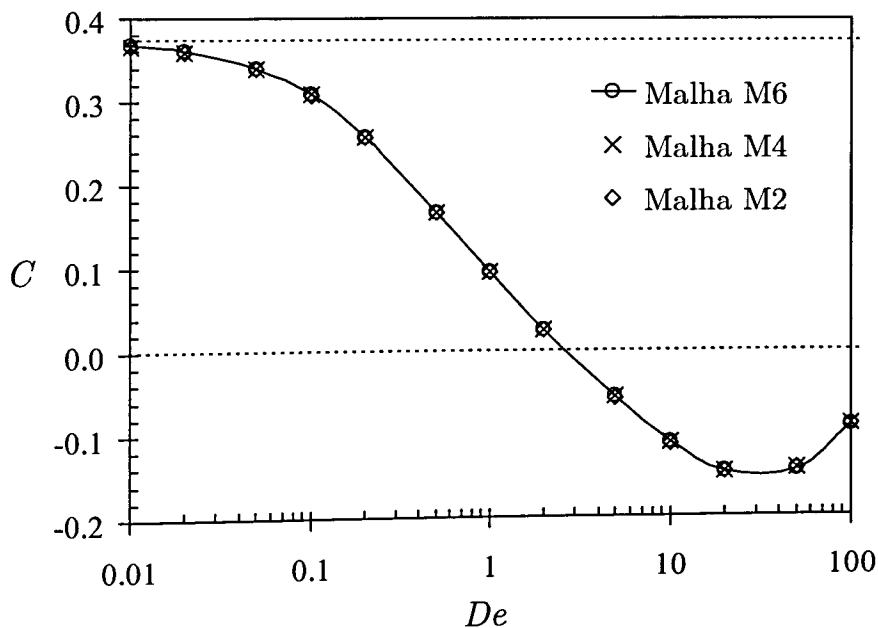


Figura 9.13: Variação da correcção de Couette (C) com o número de Débora (De) para o fluido PTT linear ($\varepsilon = 0.25$).

Na Figura 9.14 ilustra-se o padrão global de escoamento para diferentes valores de De , sendo notório um crescimento significativo do vórtice de canto com o aumento da elasticidade do escoamento. Para valores de De elevados observa-se uma estabilização da dimensão e intensidade do vórtice de canto. Ao contrário do que acontecia com o fluido Oldroyd-B, neste caso não foi detectado qualquer vórtice de entrada, em toda a gama de valores de De analisada.

Na Figura 9.15 apresenta-se o comportamento assintótico das componentes da velocidade e da tensão em função da distância ao canto reentrante, r , para o ângulo $\theta = 90^\circ$ (cf. Figura 6.1). Observa-se um comportamento assintótico do tipo $u_i \propto r^{5/9}$ e $\tau_{ij} \propto r^{-0.329}$, respectivamente para as componentes da velocidade e da tensão, sendo os expoentes obtidos semelhantes aos previstos teoricamente por Renardy (1997), para o escoamento de um fluido PTT em torno de um canto. Note-se que as previsões aqui obtidas nas diversas malhas são mais consistentes que os resultados apresentados por outros autores, para este tipo de escoamento (e.g., Tanner *et al.*, 2000).

Para se compreender melhor o comportamento das tensões junto ao ponto singular, apresentam-se na Figura 9.16 os perfis longitudinais da tensão normal, τ_{xx} , ao longo da primeira linha de volumes de controlo, adjacentes à parede do canal de jusante. Como se utiliza um método de volumes finitos baseado numa malha colocada, os valores de τ_{xx} não são calculados exactamente na parede. Assim, faz todo o sentido escolherem-se as tensões calculadas nos centros das células adjacentes à parede do canal de jusante, para se analisar o comportamento das tensões na parede do canal a jusante da contracção, junto à singularidade. A Figura 9.16 (a) demonstra uma boa convergência do perfil de τ_{xx} com o refinamento da malha, com excepção da região vizinha do ponto onde a tensão normal é máxima ($\tau_{xx,\max}$)-note-se que a figura apresenta apenas uma zona reduzida da coordenada longitudinal (x/H_2 varia de 0 a 0.2). Tal dependência já era esperada, uma vez que à medida que a malha computacional é refinada o centro das células adjacentes à parede aproxima-se progressivamente dessa parede. Assim, junto ao ponto singular ($x/H_2 = 0$, $y/H_2 = 1$) observam-se tensões cada vez mais elevadas, aumentando indefinidamente com os sucessivos refinamentos da malha. Esta observação é quantificada pela Figura 9.16 (b) que representa o valor máximo da tensão normal obtido em cada uma das malhas, $\tau_{xx,\max}$, bem como a localização desse valor máximo da tensão normal, $x(\tau_{xx,\max})/H_2$. Duas conclusões importantes podem ser retiradas dessa figura: por um lado, à medida que o centro das células se aproxima da parede, a posição $x(\tau_{xx,\max})/H_2$ tende para zero, já que no limite deverá obter-se um ponto singular de tensões coincidente com o ponto singular geométrico (canto); por outro lado, os resultados numéricos mostram que o valor de $\tau_{xx,\max}$ tem um comportamento assintótico do tipo $\tau_{xx,\max} \propto (1 - y/H_2)^{-0.337}$ (ou $\tau_{xx,\max} \propto r^{-0.337}$, já que $x(\tau_{xx,\max})/H_2 \propto 1 - y/H_2$), pelo que o expoente

previsto por Renardy (1997) para o crescimento assintótico das tensões junto ao ponto singular ($\propto r^{-0.329}$) é novamente observado usando outra abordagem.

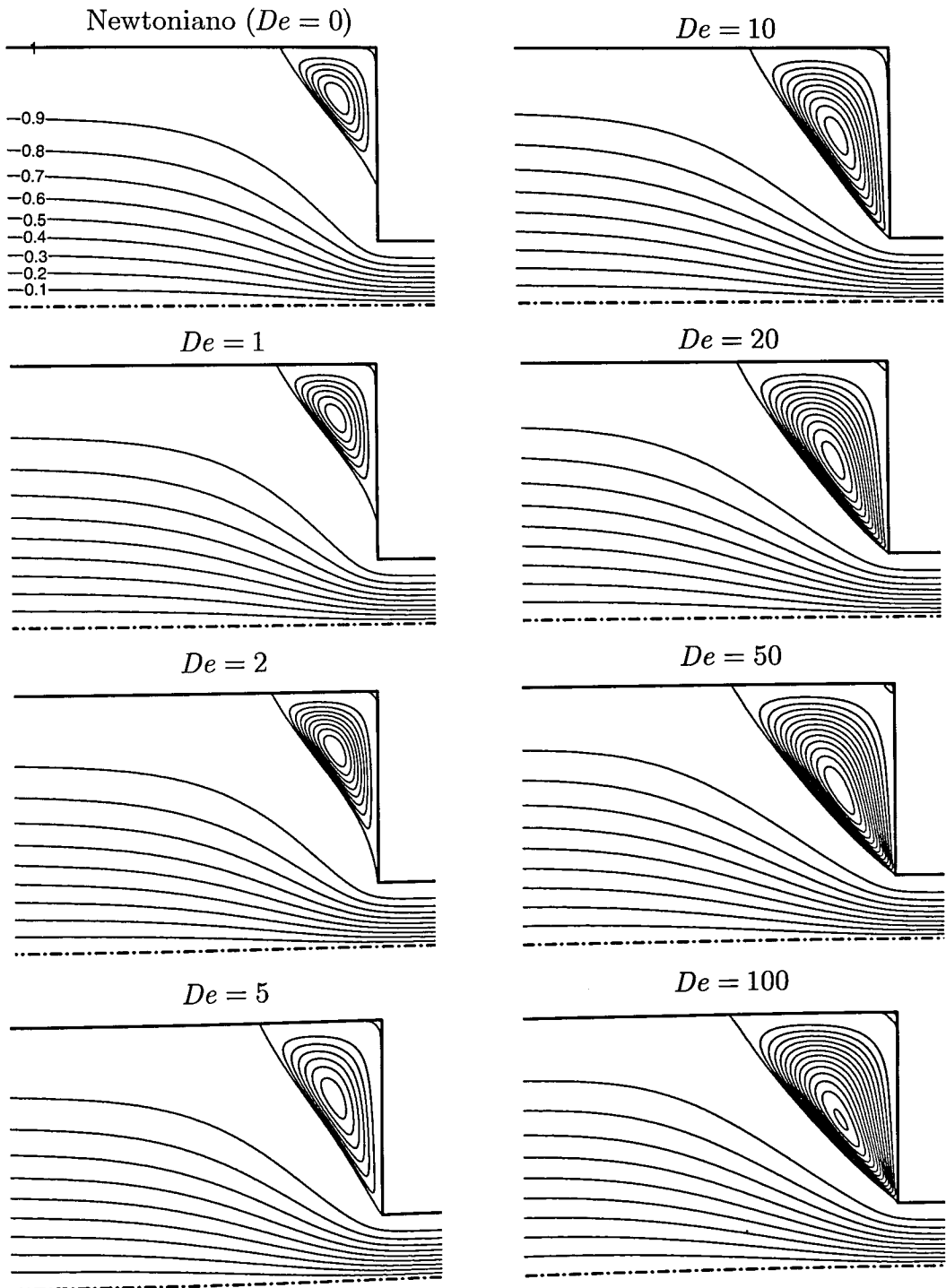


Figura 9.14: Padrão de escoamento obtido com o fluido PTT linear ($\varepsilon = 0.25$, malha M6). As linhas de corrente no interior dos vórtices encontram-se igualmente espaçadas, com $\delta_\psi = 0.2 \times 10^{-3}$ para $De \leq 2$, e $\delta_\psi = 0.5 \times 10^{-3}$ para $De \geq 5$.

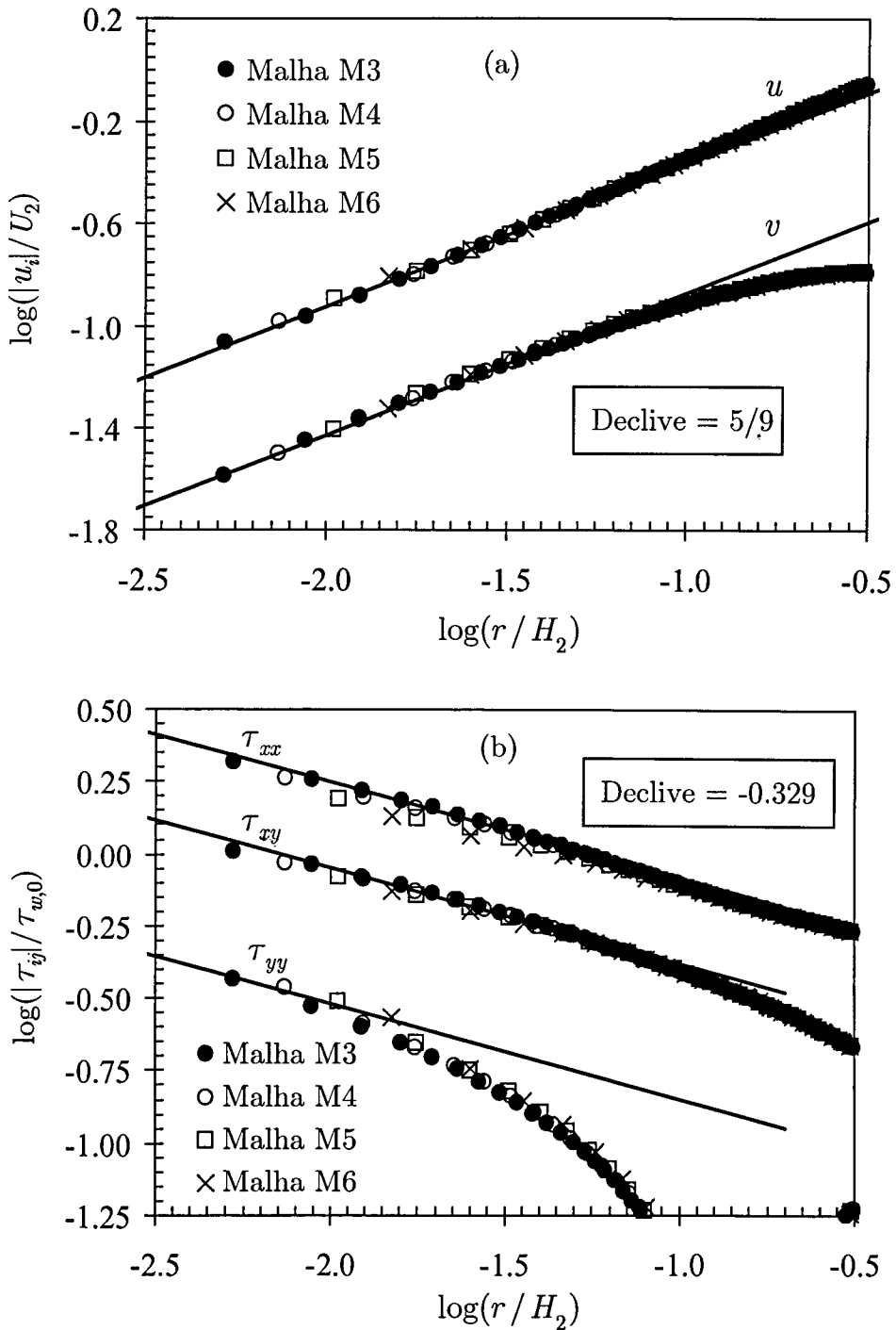


Figura 9.15: Variação assintótica junto ao canto reentrante, ao longo da linha vertical a $\theta = 90^\circ$ (i.e., $x=0$), para as componentes da (a) velocidade e (b) tensão. Fluido PTT linear ($\varepsilon = 0.25$) a $De = 1$.

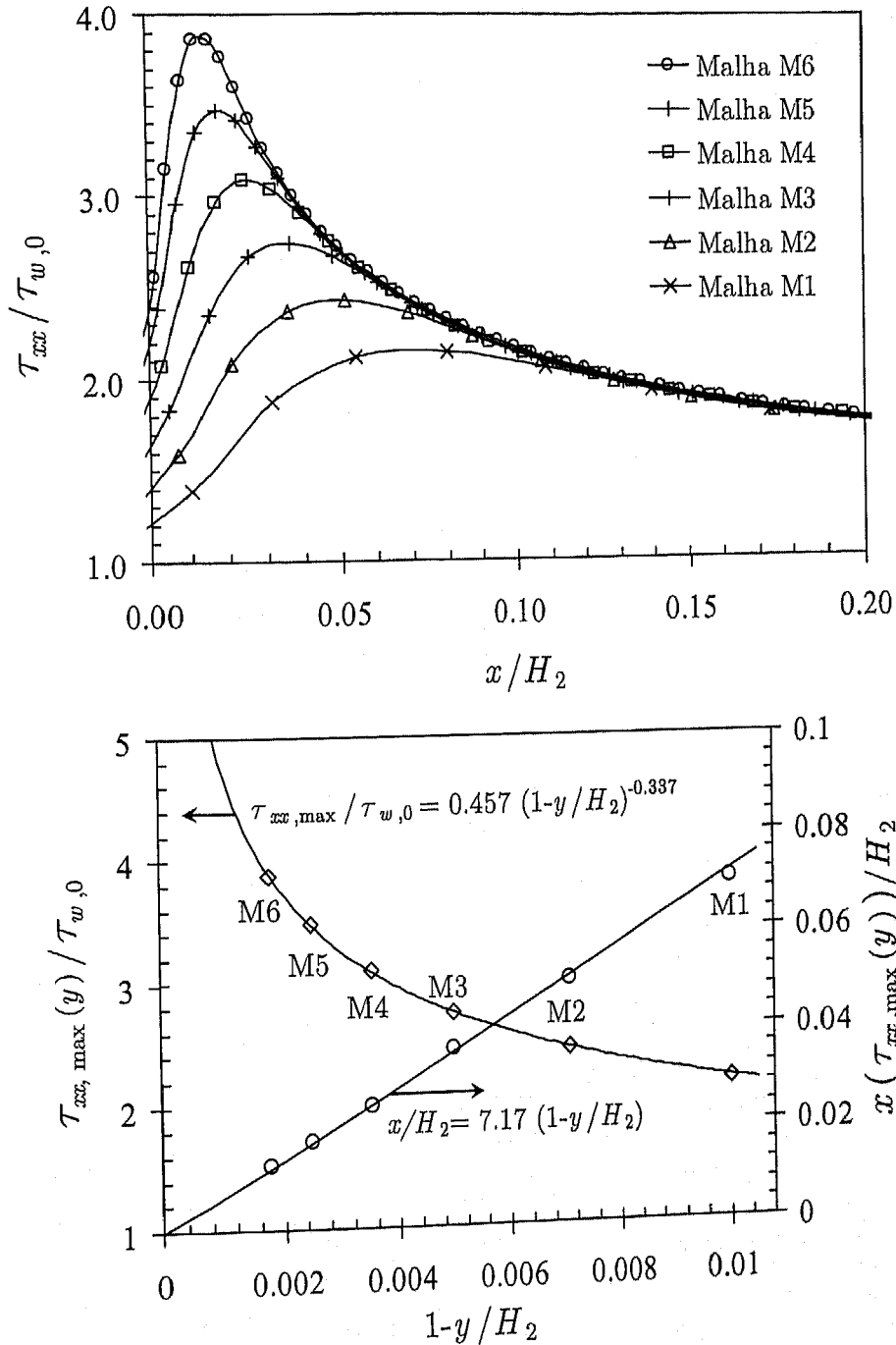


Figura 9.16: Comportamento da tensão normal τ_{xx} junto ao ponto singular, para o fluido PTT linear a $De=1$. (a) Perfis da tensão normal ao longo da primeira linha de células adjacentes à parede do canal de jusante. (b) Valor máximo da tensão normal e respectiva localização axial, em cada malha, em função da distância à parede.

Nas Figuras 9.17 e 9.18 ilustra-se a influência da elasticidade nos perfis da tensão normal τ_{xx} , e da componente longitudinal da velocidade, u , ao longo da linha central, $y=0$. Na parte (a) de ambas as figuras usam-se valores constantes

para normalizar as variáveis ($\tau_{w,0} \equiv 3\eta_0 U_2 / H_2$ para a tensão normal e U_2 para a velocidade). Na parte (b) das figuras normalizam-se os perfis da tensão normal com o valor da tensão de corte completamente desenvolvida na parede a jusante da contracção ($\tau_{w,PTT}$), e os perfis da velocidade com o respectivo valor na linha central, em condições de escoamento de Poiseuille completamente desenvolvido. Na Figura 9.17 (a) observa-se que o valor máximo da tensão normal diminui com o aumento da elasticidade, e a respectiva localização situa-se cada vez mais para jusante do plano de contracção. Uma vez que o número de Débora traduz uma medida da elasticidade do escoamento, era esperado um aumento de $\tau_{xx,max}$ com a elasticidade, pelo que a explicação para esta aparente contradição terá de residir na reofluidificação característica deste fluido. Ao normalizar-se τ_{xx} com a tensão de corte na parede deverão remover-se significativamente os efeitos reofluidificantes, retendo-se essencialmente os efeitos elásticos. De facto, na Figura 9.17 (b) observa-se que para este tipo de normalização, a tensão normal τ_{xx} aumenta até $De \cong 20$, seguindo-se um ligeiro decréscimo para valores de elasticidade mais elevados. Este comportamento pode ser parcialmente explicado com base no comportamento reológico deste fluido em escoamento de corte simples e em escoamento elongacional, cujas funções materiais se apresentam na Figura 9.19, para as versões linear (a) e exponencial (b) do modelo PTT. Como se pode observar na Figura 9.19 (a), o parâmetro S_R (*recoverable shear*, que pode ser visto como um número de Débora variável, dependente de $\dot{\gamma}$) atinge um máximo para $\lambda\dot{\gamma} \cong 20$, pelo que os efeitos de elasticidade deixam de aumentar para $De \cong 20$. No entanto, a viscosidade viscosimétrica a $De = 20$ ainda continua a diminuir, embora de forma menos acentuada, explicando-se assim o abaixamento observado sensivelmente a $De = 20$ para o valor máximo de τ_{xx} (vide Figura 9.17-b) bem como para o *overshoot* de $u/U_{2,max}$ (vide Figura 9.18-b). Estes argumentos também explicam o comportamento observado para o crescimento do comprimento e da intensidade do vórtice de canto (vide Figuras 9.11 e 9.12). Uma explicação alternativa para este comportamento foi avançada por Saramito e Piau (1994), e posteriormente por Aboubacar *et al.* (2002b), os quais correlacionaram os padrões de escoamento observados com a razão de Trouton, $T_R = \eta_E / \eta$ (também incluída na Figura 9.19).

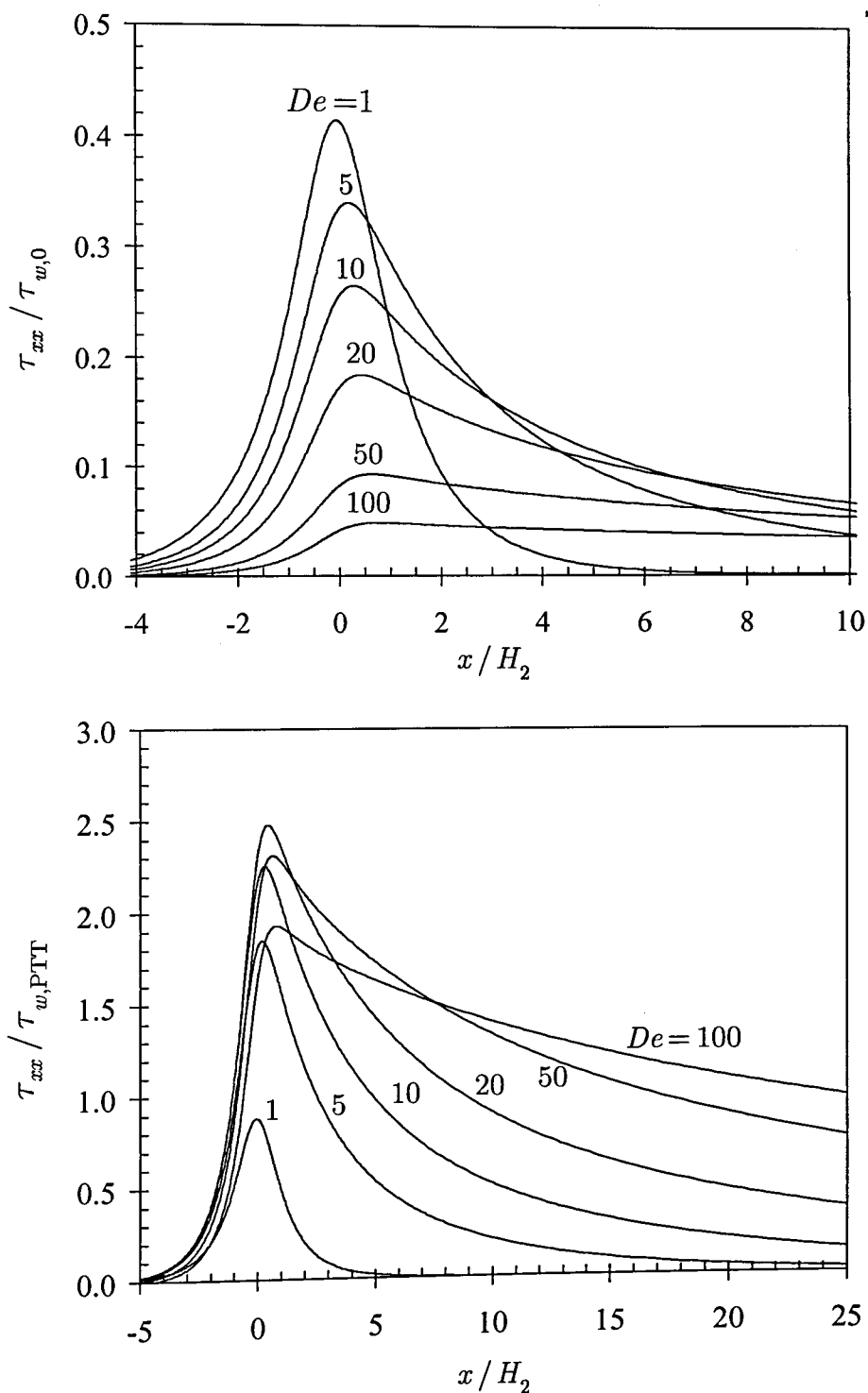


Figura 9.17: Perfis da tensão normal axial ao longo da linha central ($y=0$). Resultados obtidos para o fluido PTT linear a diferentes valores de De : (a) normalização com $\tau_{w,0} = 3\eta_0 U_2 / H_2$; (b) normalização com $\tau_{w,PTT}$.

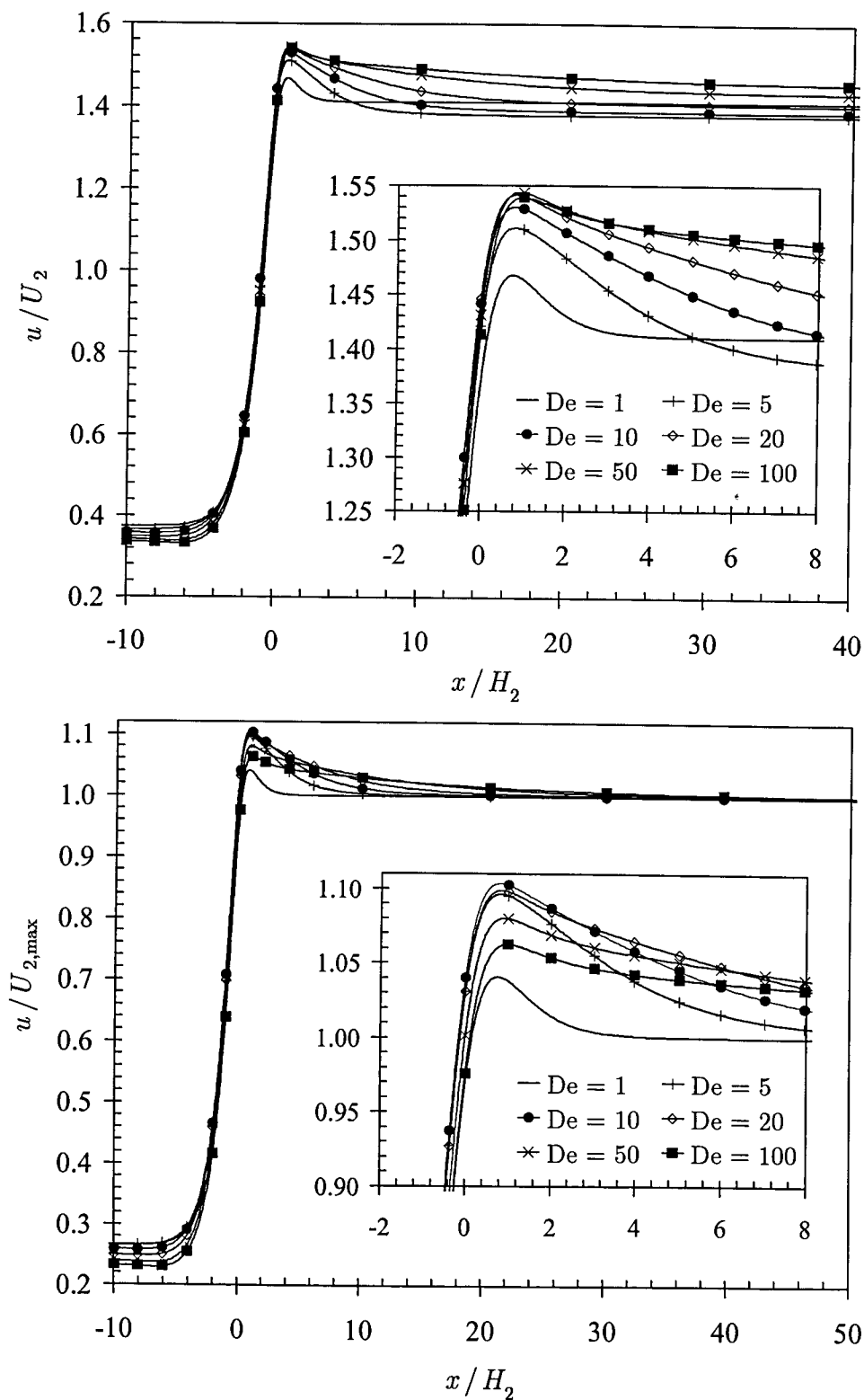


Figura 9.18: Perfis da componente axial da velocidade ao longo da linha central ($y=0$). Resultados obtidos para o fluido PTT linear a diferentes valores de De : (a) normalização com U_2 ; (b) normalização com o valor da velocidade na linha central do canal a jusante do plano de contracção, em condições de escoamento desenvolvido.

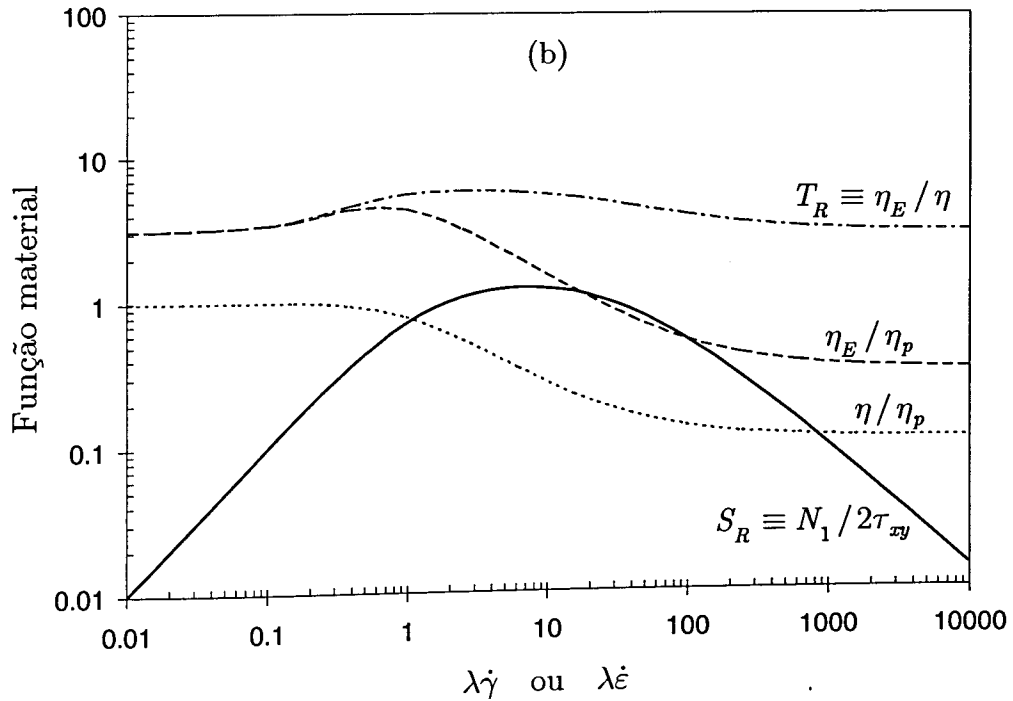
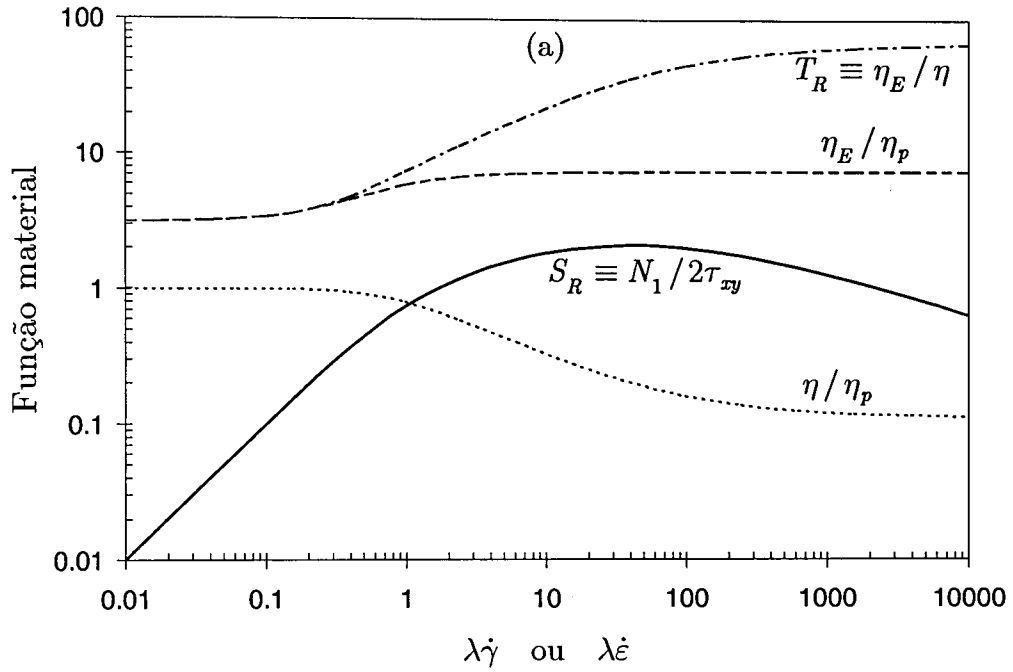


Figura 9.19: Comportamento reológico para o fluido PTT ($\epsilon = 0.25$): (a) versão linear; (b) versão exponencial.

Um parâmetro com grande utilidade prática é o comprimento necessário ao desenvolvimento completo das tensões no canal a jusante da contracção. Este parâmetro é determinante na escolha adequada da dimensão do domínio computacional, particularmente para que seja possível determinar o valor da correcção de Couette com boa precisão. As simulações efectuadas permitiram concluir que a tensão normal τ_{xx} é, de todas as variáveis calculadas, a que necessita um maior comprimento para que ocorra um relaxamento completo da tensão e o respectivo perfil transversal no canal se desenvolva completamente. Assim, analisaram-se os perfis de τ_{xx} ao longo da linha central (junto às paredes, a tensão desenvolve-se mais rapidamente) para diferentes valores de De (vide Figura 9.17) e determinaram-se os comprimentos necessários ($L_{\tau_{xx}}$) para que a tensão normal na linha central decresça até 1% (ou 5%) do valor máximo observado nessa linha, o qual ocorre junto ao plano de contracção. Os valores obtidos para $L_{\tau_{xx}}$ sugerem uma variação aproximadamente linear com De , como se ilustra na Figura 9.20. Em particular, para o critério mais preciso de 1% obtém-se a correlação

$$\frac{L_{\tau_{xx}}}{H_2} = 4.3 De \quad (9.2)$$

sugerindo a utilização de uma conduta de jusante com uma dimensão igual ou superior a $430 H_2$ para $De = 100$, enquanto que para $De = 1$ a 2 uma conduta com um comprimento da ordem de $10 H_2$ é perfeitamente aceitável. Note-se que o método de cálculo desenvolvido não utiliza condições de Dirichlet na fronteira de saída, mas sim condições de Newmann, do tipo $\partial\tau_{ij}/\partial x = 0$. Se o perfil da tensão normal não se encontrar completamente desenvolvido na secção de saída, induz-se uma pequena distorção no escoamento na vizinhança da fronteira de saída, a qual não deverá afectar de forma significativa o padrão de escoamento na região de interesse, nomeadamente junto ao plano de contracção. De qualquer das formas, optou-se por utilizar malhas computacionais longas, que satisfazem o critério (9.2), para calcular a correcção de Couette com boa precisão.

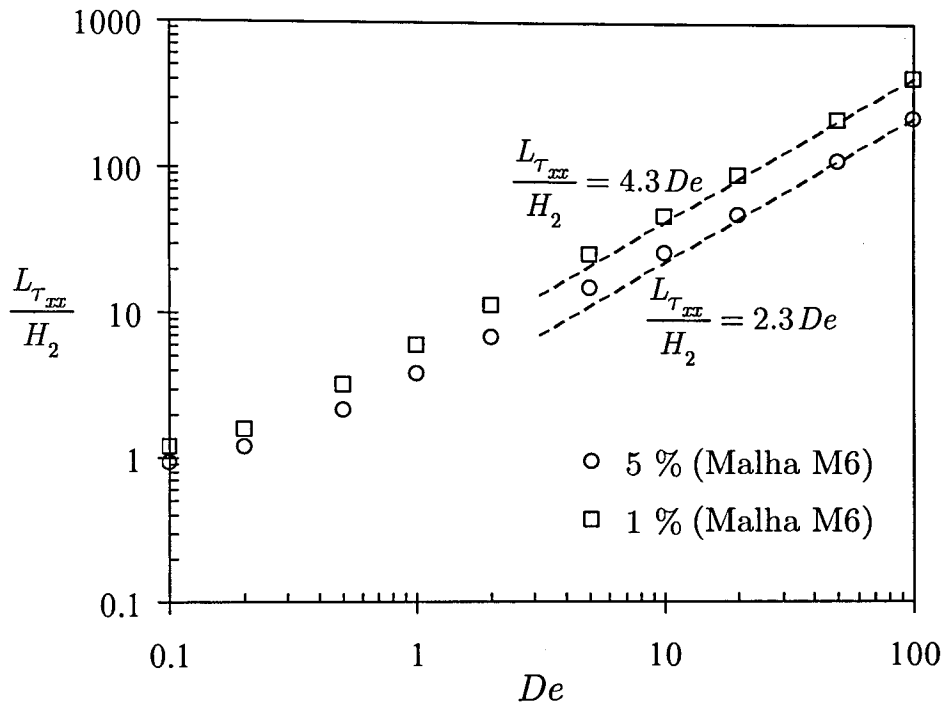


Figura 9.20: Comprimento necessário para relaxamento da tensão normal τ_{xx} ao longo da linha central do canal a jusante da contracção.

9.3.3 Fluido PTT exponencial

Este modelo constitutivo também apresenta refluidificação da viscosidade de corte, e do coeficiente da primeira diferença de tensões normais. A principal diferença relativamente à versão linear do modelo PTT reside na viscosidade elongacional, que diminui para elevadas taxas de extensão, como mostra a Figura 9.19. Novamente foi seleccionado o valor $\varepsilon = 0.25$ para o parâmetro elongacional do modelo PTT, em sintonia com outros estudos (e.g., Aboubacar *et al.*, 2002b).

Os principais resultados obtidos são apresentados na Tabela 9.4, ilustrando-se na Figura 9.21 a variação de X_R com De , na Figura 9.22 a dependência de Ψ_R com De , e na Figura 9.23 a influência de De na correcção de Couette, C . Novamente observa-se uma concordância razoável com os resultados de Aboubacar *et al.* (2002b), excepto nalguns pontos, pelas razões já mencionadas. As incertezas apresentadas na Tabela 9.4 são um pouco superiores às da Tabela 9.3 porque para este fluido apenas se efectuaram simulações nas malhas M2 e M4. Contudo, os erros não são significativos, situando-se geralmente abaixo de 1%, justificando assim a não utilização de malhas mais refinadas.

Para este fluido foi possível variar o número de Débora desde o valor correspondente a um fluido newtoniano ($De = 0$), até ao valor $De = 10\,000$, para o qual a refluidificação é de tal forma intensa que a viscosidade do fluido reduz-se praticamente ao valor correspondente ao solvente newtoniano. Assim, não é de estranhar o facto do comprimento e a intensidade do vórtice de canto passarem por um máximo a $De \cong 6 - 7$, precisamente onde ocorre um pico da razão de Trouton e do número de Débora variável S_R (cf. Figura 9.19), seguindo-se uma redução de X_R e Ψ_R para valores um pouco inferiores aos do fluido newtoniano, ocorrendo para valores de De ainda mais elevados um aumento assintótico para o valor newtoniano. Confirma-se assim que o comportamento do fluido PTT exponencial para valores de De extremamente elevados é semelhante ao de um fluido newtoniano.

Tabela 9.4- Resultados de referência para o fluido PTT exponencial ($\beta = 1/9$; $\varepsilon = 0.25$).

De	X_R	Erro (%)	$\Psi_R \times 10^3$	Erro (%)	C	Erro (%)	$\tau_{xx,\max}^{(a)}$	$u_{\max}^{(a)}$
0.0	1.5002	0.02	1.178	0.2	0.3741	0.1	-	1.501
0.1	1.499	0.2	1.169	0.5	0.310	0.3	0.349	1.495
0.2	1.499	0.2	1.169	0.4	0.259	0.3	0.367	1.483
0.5	1.518	0.3	1.236	0.2	0.188	0.4	0.393	1.457
1	1.579	0.2	1.513	0.7	0.171	0.6	0.400	1.453
2	1.732	0.3	2.345	1.4	0.201	0.8	0.373	1.461
5	1.988	0.2	3.302	0.8	0.288	0.5	0.285	1.472
10	2.017	0.2	2.162	0.6	0.352	0.3	0.206	1.478
20	1.854	0.1	0.935	0.5	0.388	0.4	0.138	1.484
50	1.579	0.3	0.303	1.0	0.398	0.1	0.0716	1.492
100	1.440	0.4	0.173	0.6	0.401	0.3	0.0415	1.496
1 000	1.393	1.2	0.218	0.5	0.387	0.1	0.0071	1.500
10 000	1.436	0.1	0.861	0.3	0.376	0.2	0.0011	1.501

^(a)Valores máximos na linha central, normalizados por $3\eta_0 U_2 / H_2$ e U_2 .

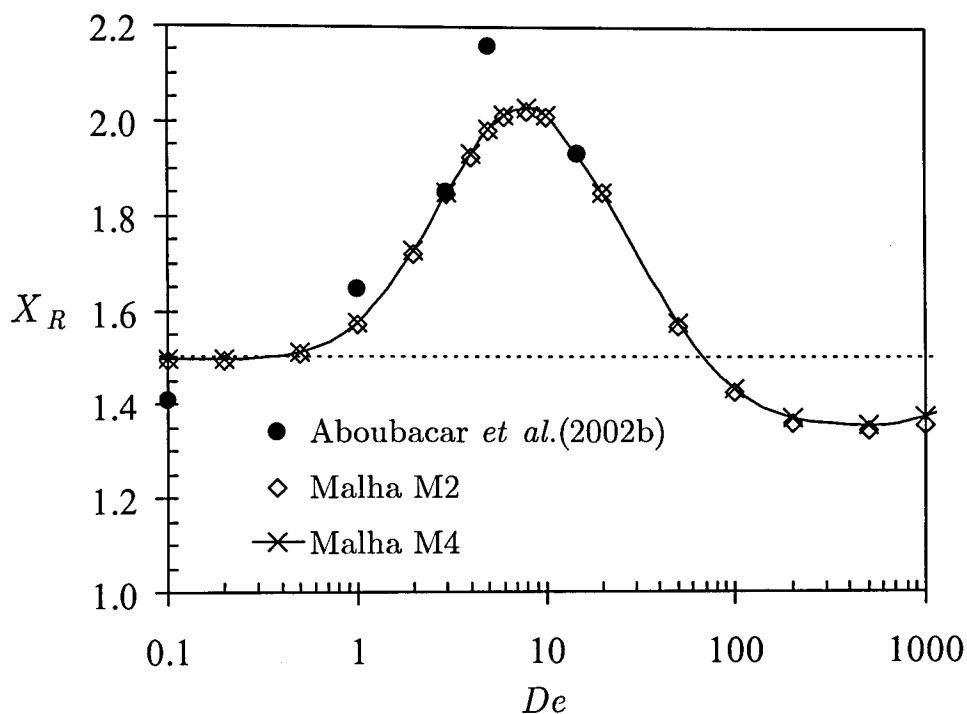


Figura 9.21: Variação do comprimento do vórtice de canto (X_R) com o número de Débora (De) para o fluido PTT exponencial ($\varepsilon = 0.25$).

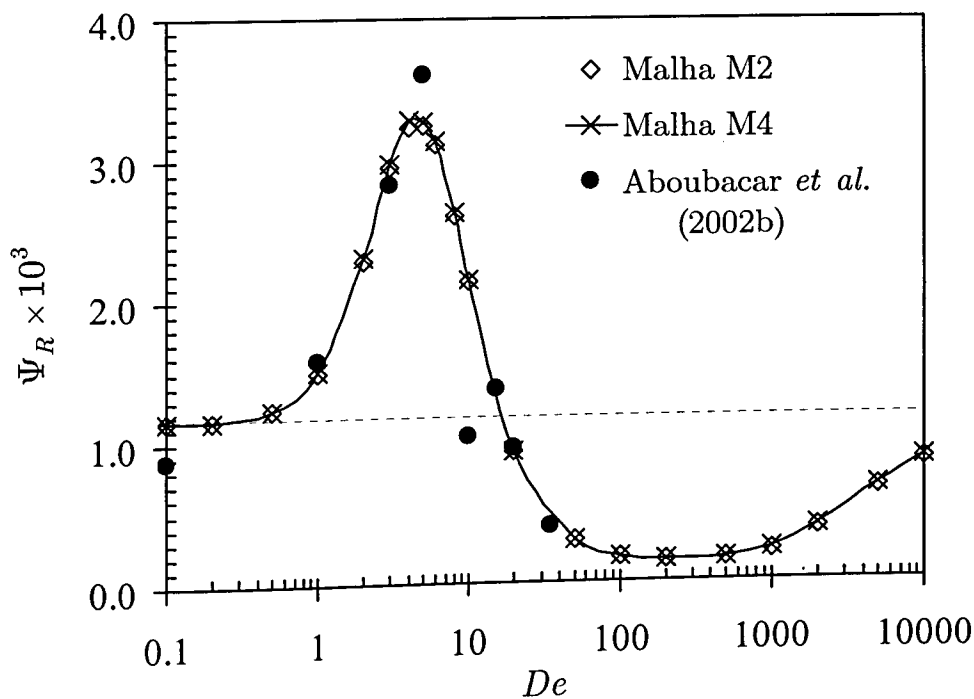


Figura 9.22: Variação da intensidade do vórtice de canto (Ψ_R) com o número de Débora (De) para o fluido PTT exponencial ($\varepsilon = 0.25$).

Em termos da correcção de Couette, na Figura 9.23 observa-se um decréscimo inicial para baixos valores de De , seguida de um aumento de C desde $De = 1$ até 100, seguida de um novo decréscimo para o patamar newtoniano para valores de De muito elevados, de acordo com a explicação anterior.

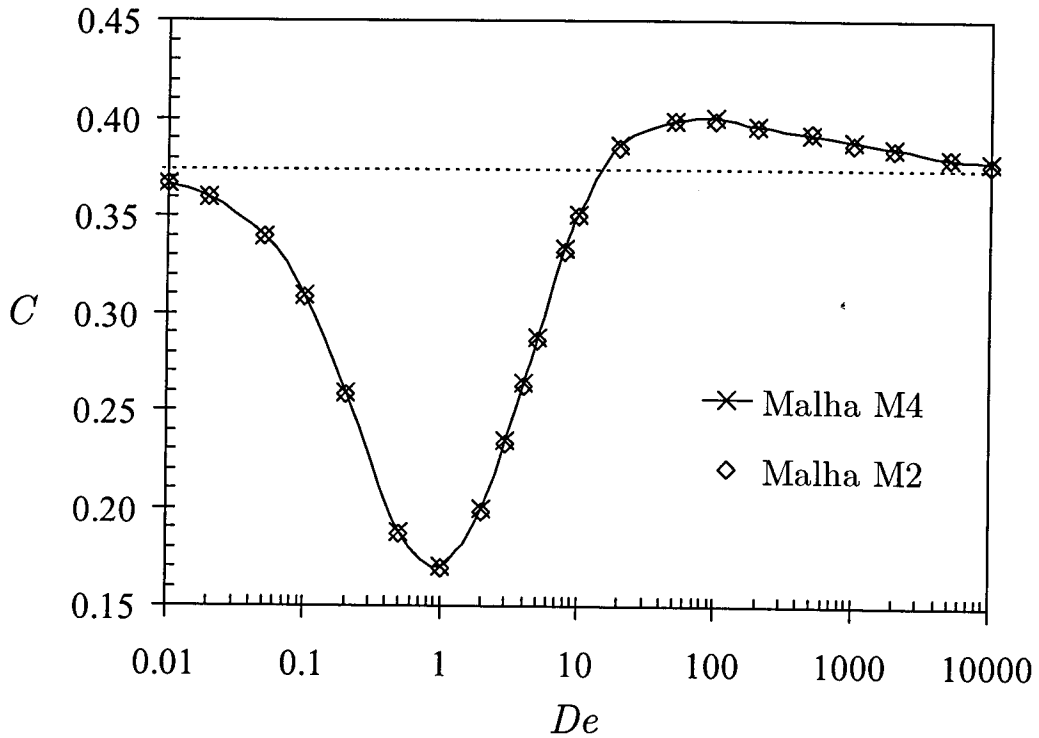


Figura 9.23: Variação da correcção de Couette (C) com o número de Débora (De) para o fluido PTT exponencial ($\varepsilon = 0.25$).

Em termos de padrão global de escoamento, na Figura 9.24 apresentam-se as linhas de corrente previstas com a malha M4, para diferentes valores de De . Comparando esta figura com os resultados apresentados anteriormente para a versão linear do modelo PTT (vide Figura 9.14), neste caso observam-se vórtices menos intensos, possivelmente devido à redução na viscosidade extensional do fluido PTT exponencial, que ocorre a valores elevados da taxa de extensão (cf. Figura 9.19). As linhas de corrente obtidas para $De = 10000$ são idênticas às do fluido newtoniano, de acordo com a explicação anterior (S_R tende para zero quando $\lambda\dot{\gamma}$ aumenta).

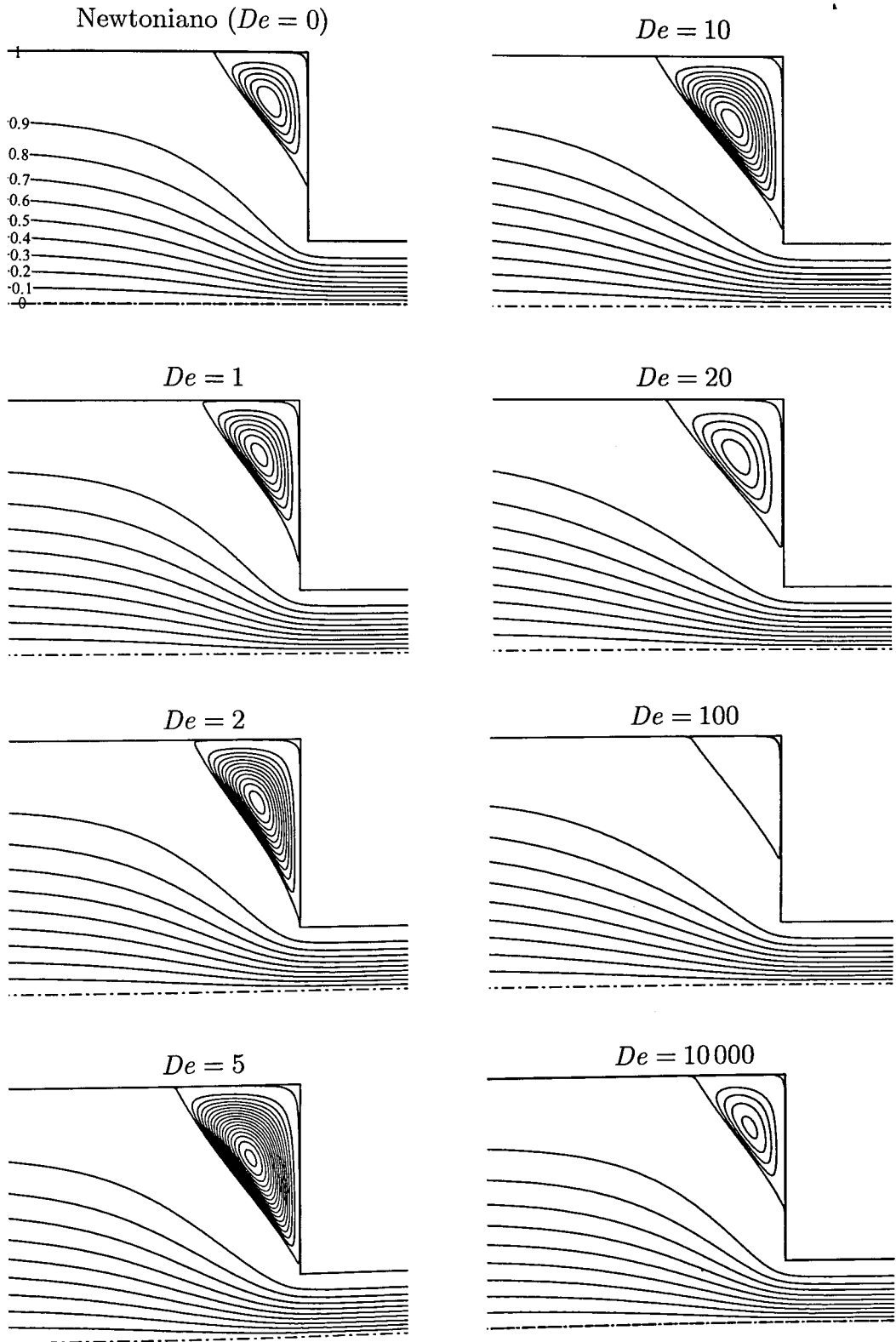


Figura 9.24: Padrão de escoamento obtido com o fluido PTT exponencial ($\varepsilon = 0.25$, malha M4). As linhas de corrente no interior dos vórtices encontram-se igualmente espaçadas com $\delta_\psi = 0.2 \times 10^{-3}$.

9.3.4 Padrões de escoamento numa contracção axissimétrica 4:1

Até este momento apenas foram considerados escoamentos numa contracção plana com razão de contracção de 4:1, tendo-se analisado a influência do comportamento reológico do fluido nas características do escoamento. Nesta secção apresentam-se os padrões de escoamento observados numa contracção axissimétrica 4:1, para ilustrar as diferenças entre as duas configurações. Para tal, efectuaram-se simulações em duas malhas axissimétricas com características geométricas idênticas às das malhas M2 e M4 (vide Tabela 9.1), para os fluidos Oldroyd-B e PTT linear, em condições de inércia desprezável.

Na Figura 9.25 apresentam-se os padrões de escoamento obtidos para o fluido Oldroyd-B na contracção plana (já discutidos na Secção 9.3.1), lado a lado com os padrões previstos na contracção axissimétrica. Na configuração plana observa-se uma forte redução do vórtice de canto e o aparecimento de um pequeno vórtice de entrada à medida que se aumenta a elasticidade do fluido. Em contrapartida, na contracção axissimétrica observa-se um aumento acentuado da dimensão e intensidade do vórtice de canto, de acordo com observações experimentais efectuadas com fluidos de Boger (Nigen e Walters, 2002), e com os resultados numéricos apresentados por Aboubacar *et al.* (2002a), se bem que nesse estudo apenas foi possível alcançar $De = 0.85$, em contraste com o valor $De = 2.5$ atingido no presente trabalho.

Para o fluido PTT linear observa-se na Figura 9.26 um crescimento do vórtice de canto para ambas as configurações, sendo um pouco mais intenso na contracção axissimétrica. Estes resultados são compatíveis com visualizações experimentais do escoamento de fluidos viscoelásticos refluidificantes em contracções, sendo também semelhantes aos resultados apresentados por Aboubacar *et al.* (2002a). Novamente observa-se uma elevada robustez do presente método de cálculo, e em particular do esquema CUBISTA, uma vez que foi possível alcançar soluções estáveis para valores de De superiores a 1000 (para a configuração axissimétrica), em contraste com o valor limite $De = 4$ observado em Aboubacar *et al.* (2002a).

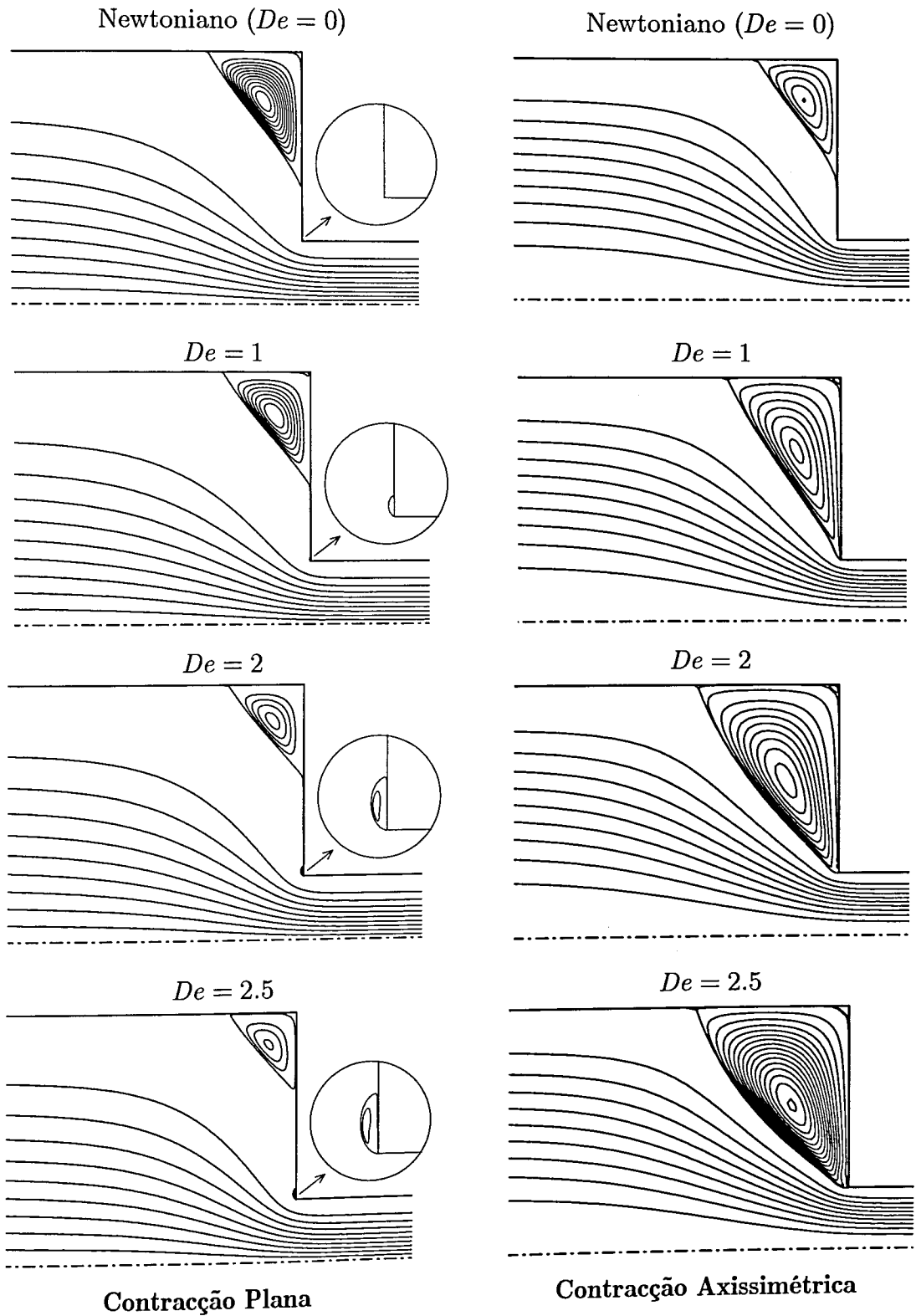


Figura 9.25: Comparação dos padrões de escoamento obtidos com o fluido Oldroyd-B ($\beta = 1/9$) numa contracção 4:1, para as configurações plana (bidimensional) e axissimétrica (circular).

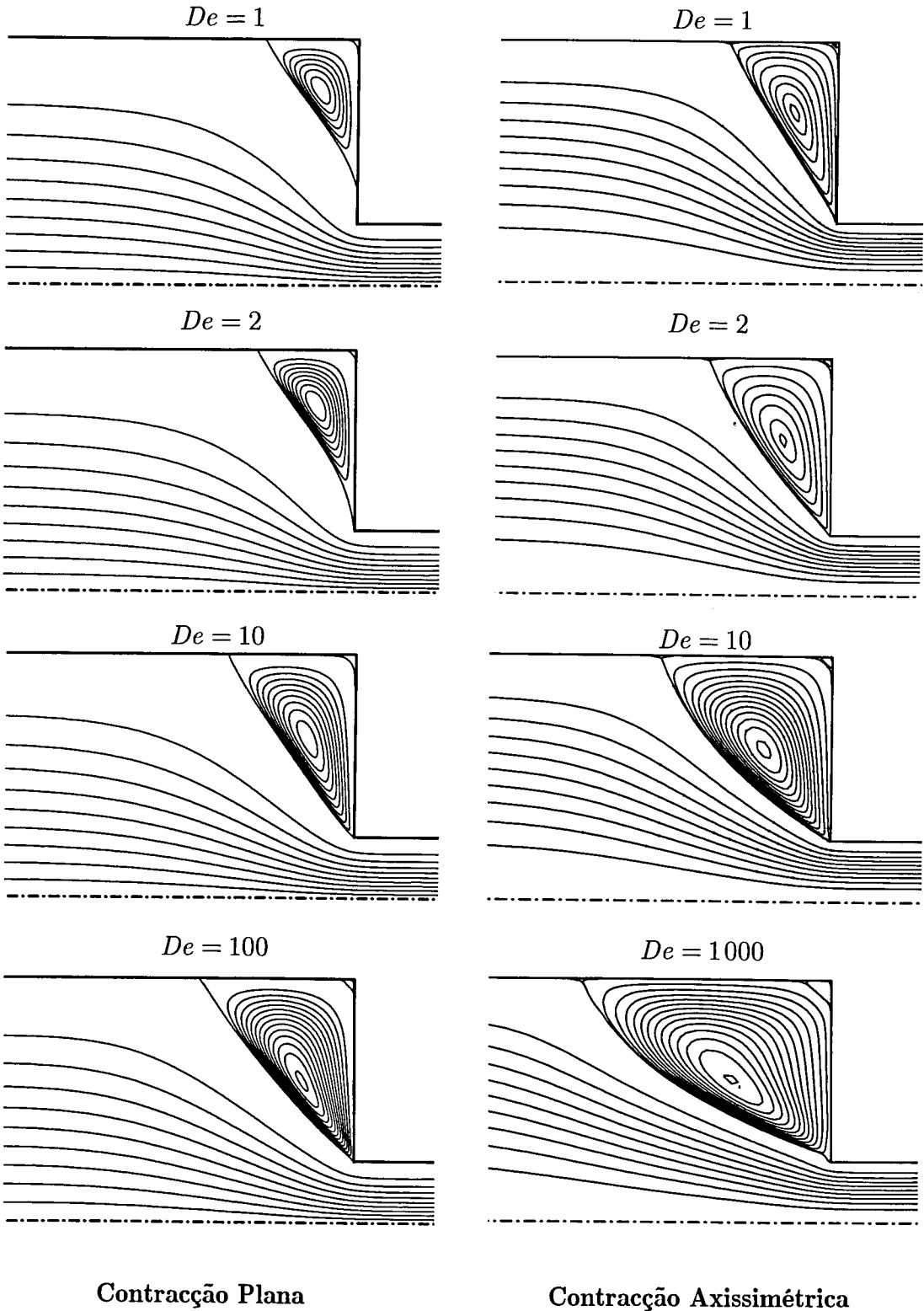


Figura 9.26: Comparação dos padrões de escoamento obtidos com o fluido PTT linear ($\beta = 1/9$; $\varepsilon = 0.25$) numa contração 4:1, para as configurações plana (bidimensional) e axissimétrica (circular).

9.3.5 Influência da razão de contracção no padrão de escoamento

Considere-se agora o efeito da razão de contracção no escoamento do fluido PTT linear em condições de inércia desprezável. Além da contracção plana 4:1, efectuaram-se simulações em contracções planas 10:1, 20:1, 40:1 e 100:1, para se investigar a influência da razão de contracção (CR) e do número de Débora no padrão global de escoamento. O número de Débora é definido em função de variáveis de jusante, como anteriormente: $De = \lambda U_2 / H_2$.

Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 9.27 e 9.28, respectivamente para as razões de contracção $CR = 20$ e 100. O padrão de escoamento obtido para a contracção 4:1 já foi apresentado na Figura 9.14.

Comparando os resultados obtidos para as diferentes razões de contracção verifica-se uma influência decisiva desse parâmetro no padrão de escoamento. Por exemplo, para a contracção 4:1 observa-se um crescimento do vórtice de canto sem ocorrer o aparecimento de um vórtice de entrada. Para as contracções 20:1 e 100:1 também se observa um crescimento do vórtice de canto com o aumento da elasticidade surgindo, para valores de De moderados, um vórtice de entrada que acaba por dominar o escoamento para valores de elasticidade elevados. Estes resultados demonstram que a escolha da contracção 4:1 para problema de referência em reologia computacional talvez não tenha sido a mais acertada, uma vez que foi baseada na suposição (errada) de que a razão de contracção deixaria de ser importante para valores de $CR \geq 4$. Nigen e Walters (2002) também chegaram a esta conclusão com base em visualizações experimentais do escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções planas a diferentes razões de contracção.

Efectuando um número significativo de simulações em contracções planas com diferentes razões de contracção foi possível construir um mapa de padrões de recirculação, em que se identificam as regiões em que apenas existe um vórtice de canto, um vórtice de entrada, ou uma combinação dos dois tipos de recirculação. Esse tipo de mapa é apresentado na Figura 9.29, em função de De/CR e em função de De , ilustrando-se dessa forma que o aparecimento do vórtice de entrada ocorre aproximadamente a um valor constante de De , enquanto que a fusão de ambos os vórtices ocorre a um valor de De/CR constante (para valores de $CR \geq 20$, aproximadamente).

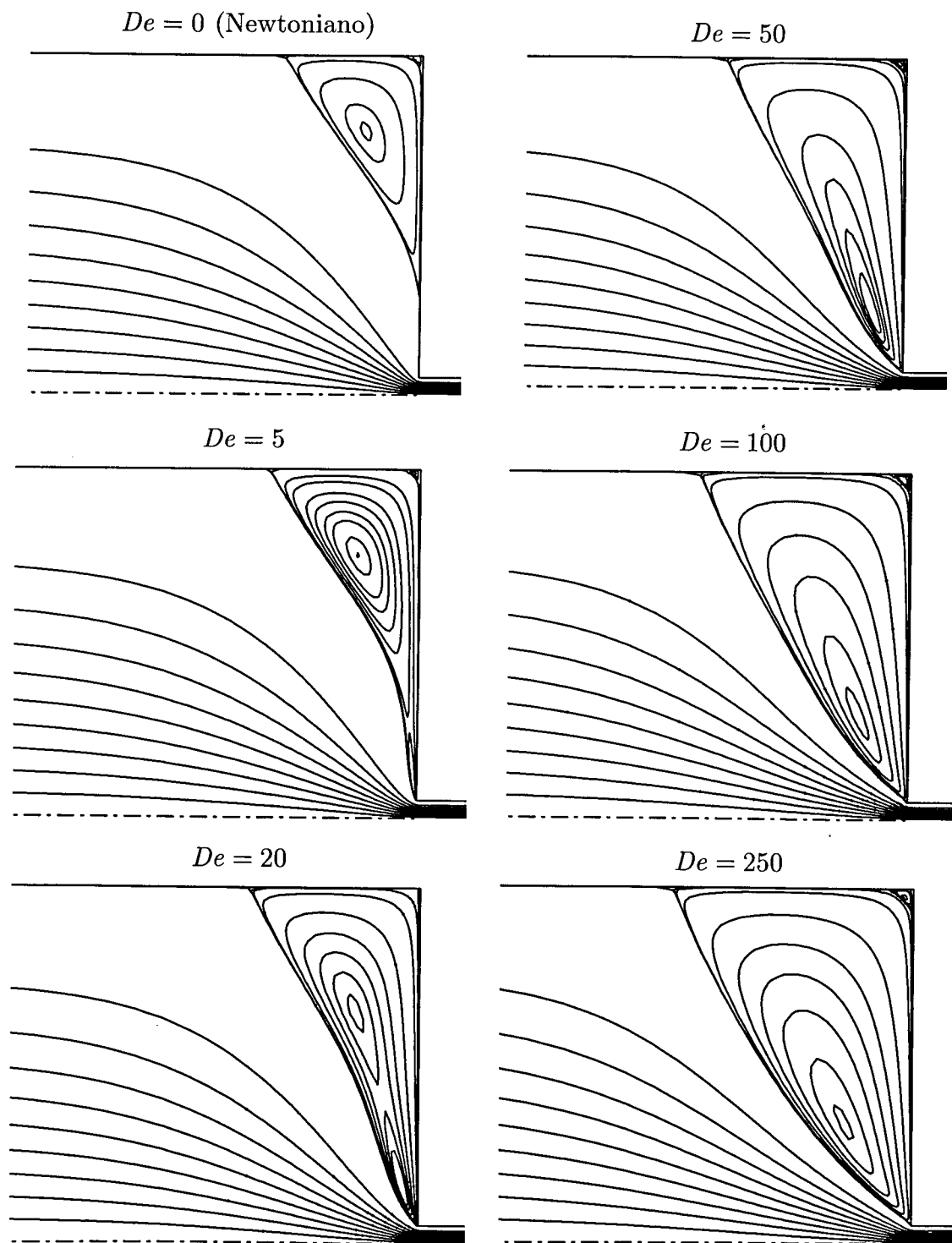


Figura 9.27: Padrão de escoamento para o fluido PTT linear ($\beta = 1/9$; $\varepsilon = 0.25$) numa contracção plana 20:1.

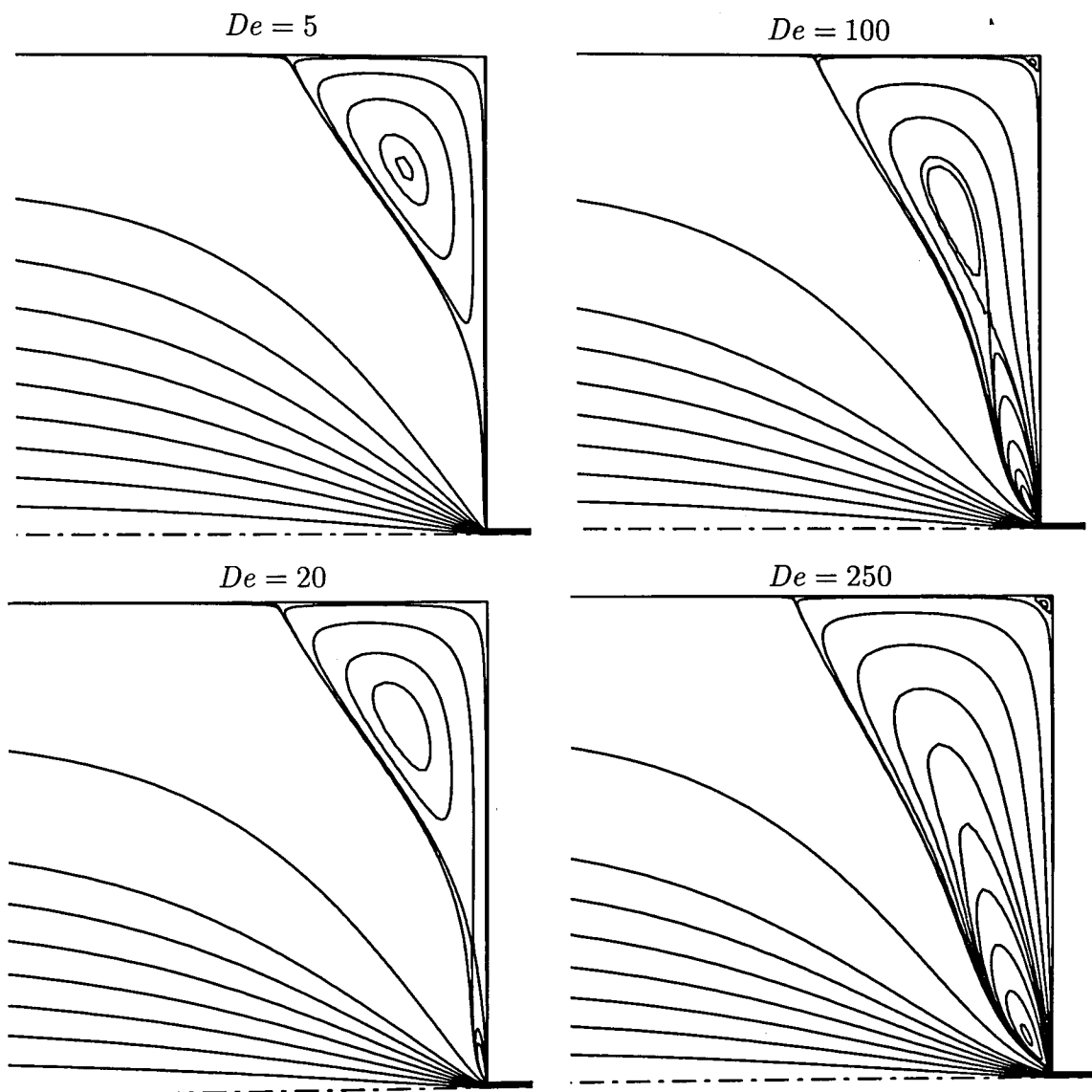


Figura 9.28: Padrão de escoamento para o fluido PTT linear ($\beta = 1/9$; $\varepsilon = 0.25$) numa contracção plana 100:1.

As Figuras 9.14, 9.27 e 9.28, ilustrativas do padrão de escoamento de um fluido PTT linear em contracções planas 4:1, 20:1 e 100:1, respectivamente, demonstram uma elevada (e inesperada) semelhança com as visualizações efectuadas por Evans e Walters (1986) para o escoamento de um fluido viscoelástico refluidificante (solução aquosa de poliacrilamida a 1% w/w) em contracções planas 4:1, 16:1 e 80:1. A escolha dos parâmetros do modelo PTT ($\beta = 1/9$, $\varepsilon = 0.25$) usado nas simulações numéricas foi, tal como já referido, baseada em estudos numéricos anteriores (e.g., Aboubacar *et al.*, 2002b), não tendo havido a intencionalidade de modelar o comportamento reológico de nenhum fluido real em particular. Curiosamente, as principais características observadas experimentalmente por

Evans e Walters (1986) são reproduzidas com boa precisão nas simulações numéricas efectuadas com o fluido PTT linear, nomeadamente:

- (i) Inexistência de um vórtice de entrada para o escoamento na contracção plana 4:1.
- (ii) Mecanismo de crescimento do vórtice de canto intimamente associado ao crescimento do vórtice de entrada, para as razões de contracção mais elevadas.
- (iii) Coexistência de um vórtice de entrada e de um vórtice de canto numa determinada gama de De , apenas para as razões de contracção mais elevadas.
- (iv) Existência de um vórtice de entrada de elevada dimensão; e cujo centro de recirculação se situa junto à entrada do canal a jusante, para razões de contracção elevadas e para valores de De também elevados.

Dada a semelhança observada entre os padrões de escoamento previstos numericamente com o fluido PTT linear e as visualizações efectuadas por Evans e Walters (1986), foram efectuadas simulações numéricas adicionais para as condições das referidas experiências, de forma a permitir uma comparação mais quantitativa. As curvas da viscosidade de corte e da primeira diferença de tensões normais medidas por Evans e Walters (1986) permitiram estimar os seguintes parâmetros para o modelo PTT linear: $\lambda = 2\text{ s}$, $\varepsilon = 0.25$, $\eta_0 = 2.5\text{ Pa}\cdot\text{s}$ e $\beta = 1/120$. A comparação entre as funções materiais do modelo PTT linear e as medições experimentais apresenta-se na parte superior da Figura 9.30, onde também é feita uma comparação entre as linhas de corrente previstas numericamente para o escoamento numa contracção plana 16:1, e as visualizações efectuadas por Evans e Walters (1986). As simulações numéricas reproduzem com óptima precisão os padrões de escoamento observados experimentalmente, demonstrando-se assim a boa aplicabilidade do modelo PTT na previsão de escoamentos viscoelásticos complexos. É de facto notável que a versão simplificada deste modelo, com apenas um modo, possa reproduzir de forma quase quantitativa os escoamentos complexos que se observam nas fotografias da Figura 9.30, com interacções entre vórtices duplos (de canto e de entrada) seguido de crescimento da bolha de recirculação. O uso do termo “quantitativo” deve-se à correcta previsão da dimensão das recirculações, assim como da gama de caudais correspondente à

existência de certas peculiaridades no padrão de escoamento (por exemplo a coexistência dos dois tipos de vórtices).

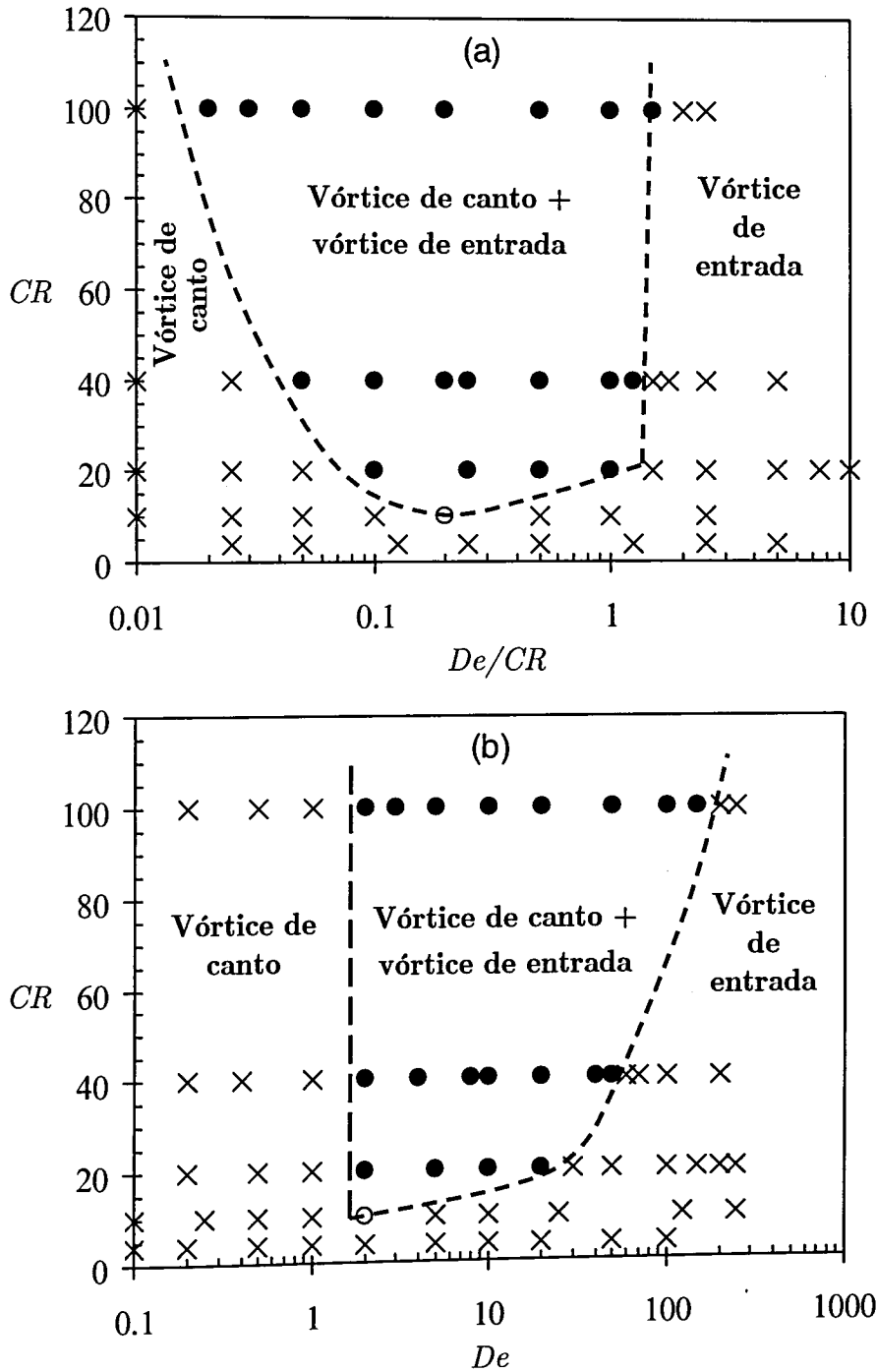


Figura 9.29: Identificação das regiões em que se observam diferentes tipos de vórtices: (a) Mapa $CR-De/CR$; (b) Mapa $CR-De$.

9.4 Conclusões

O principal objectivo do presente capítulo foi a obtenção de soluções numéricas com elevada precisão para o escoamento dos fluidos Oldroyd-B e PTT (nas versões linear e exponencial) numa contracção plana 4:1, em função do número de Débora, para condições de escoamento de Stokes. Nas Tabelas 9.2 a 9.4 apresentam-se esses resultados para os parâmetros X_R , Ψ_R e C , demonstrando-se novamente a elevada robustez e precisão do esquema CUBISTA usado na discretização dos termos convectivos das equações constitutivas.

Foram também efectuadas simulações numéricas numa contracção axissimétrica 4:1, para se ilustrar as diferenças observadas nos padrões de escoamento relativamente à contracção plana 4:1. As diferenças observadas para o fluido PTT não são muito significativas, contudo para o fluido Oldroyd-B observam-se comportamentos opostos à medida que se aumenta a elasticidade do fluido: para a contracção plana prevê-se uma diminuição do vórtice de canto, em contraste com a contracção axissimétrica onde se observa um aumento significativo do vórtice de canto, de acordo com visualizações experimentais do escoamento usando fluidos de Boger.

Também se investigou a influência da razão de contracção no padrão de escoamento em contracções planas, tendo-se previsto com boa precisão o escoamento numa contracção plana 16:1 de uma solução aquosa de PAA a 1% (w/w), usando o modelo PTT linear com os parâmetros ajustados de forma adequada à reologia do fluido.

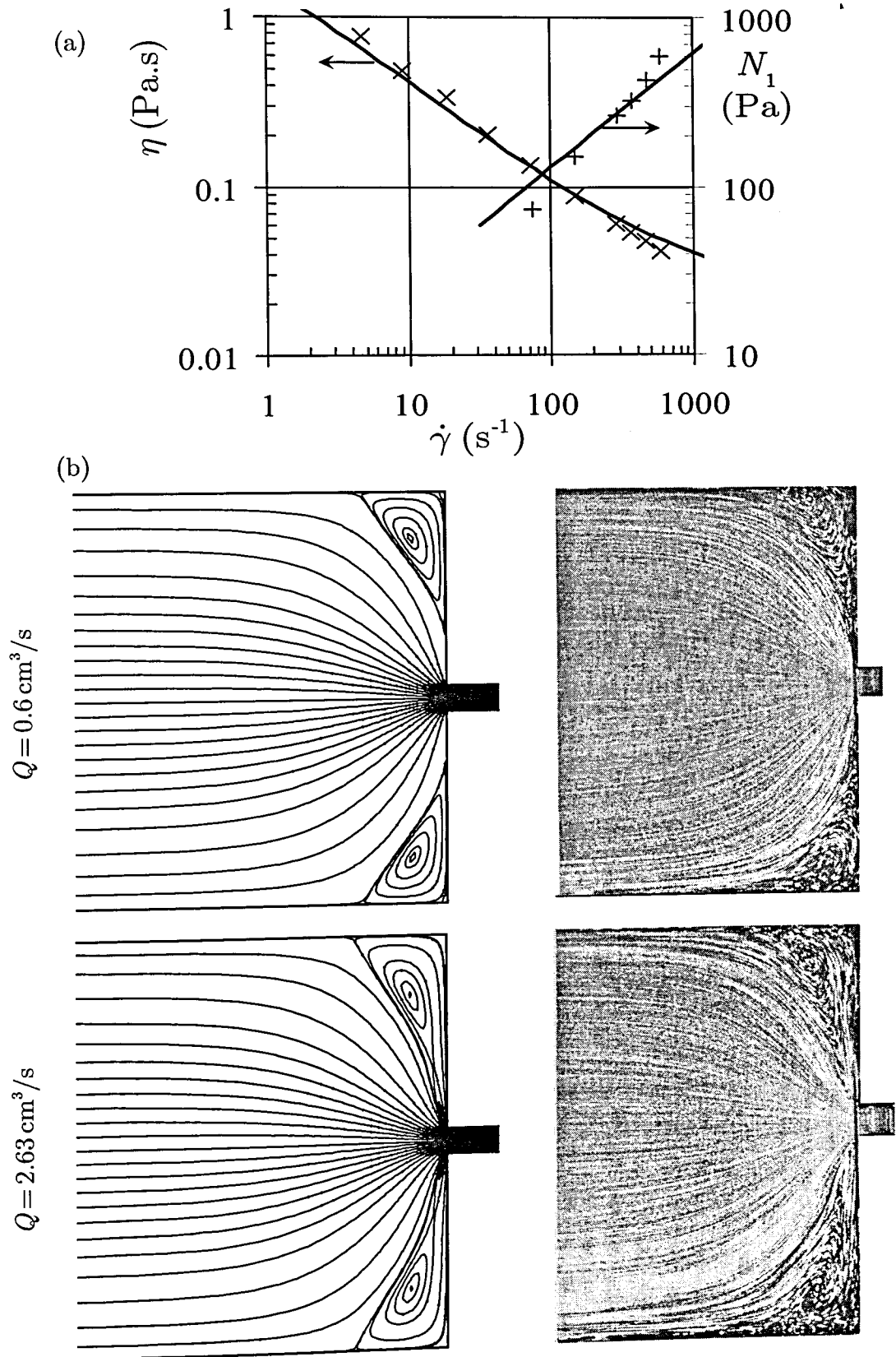


Figura 9.30: Escoamento numa contração plana 16:1 de uma solução aquosa de poliácrilamida a 1% (w/w). (a) Funções materiais em escoamento de corte simples e comparação com a previsão do modelo PTT linear. (b) Comparação entre as linhas de corrente previstas numericamente e visualizações experimentais. (Nota: as fotografias apresentadas são reproduzidas de Evans e Walters (1986) com permissão da Elsevier).

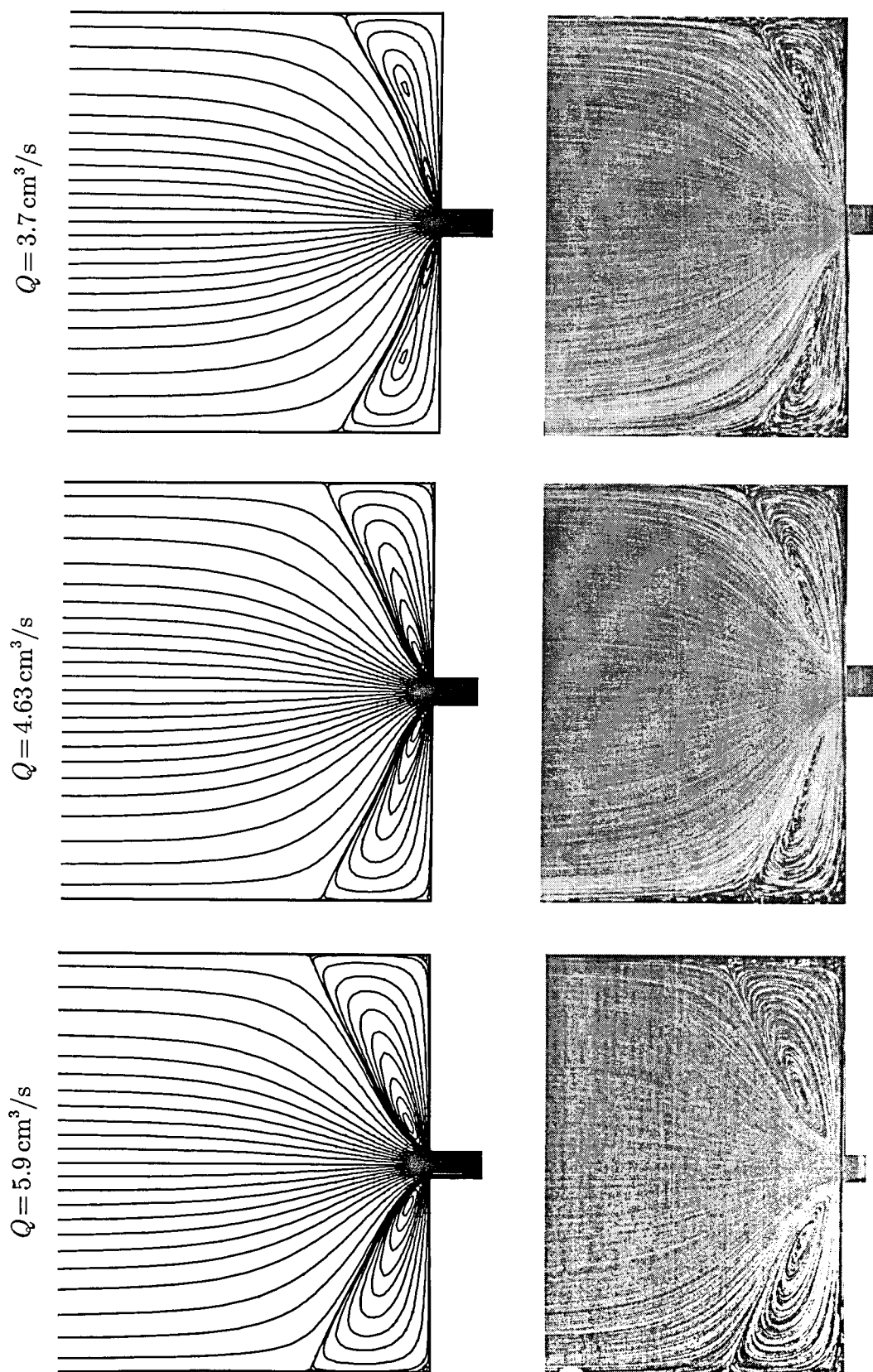


Figura 9.30: Conclusão (Nota: as fotografias apresentadas são reproduzidas de Evans e Walters (1986) com permissão da Elsevier).

“A theory is something nobody believes, except the person who made it. An experiment is something everybody believes, except the person who made it.”

Albert Einstein (1879-1955)

Capítulo 10

Escoamento em contracções e expansões 3D: visualização e simulação numérica[§]

Neste capítulo apresentam-se resultados do estudo experimental do escoamento com diversos fluidos (newtonianos e viscoelásticos) numa contracção e numa expansão quadrada tridimensional. Os fluidos foram caracterizados reologicamente e a visualização destes escoamentos, com forte carácter tridimensional, foi efectuada por iluminação do plano central da contracção/expansão com uma fonte de luz laser visível e fotografia das trajectórias das partículas iluminadas usando tempos de exposição prolongados. Os resultados experimentais obtidos com os fluidos newtonianos e com um dos fluidos viscoelásticos foram simulados numericamente com sucesso, demonstrando-se a ocorrência de uma inversão no sentido do escoamento no interior das recirculações para o escoamento do fluido viscoelástico na contracção 4:1:1.

10.1 Introdução

A visualização de escoamentos tem uma enorme relevância prática no âmbito da mecânica dos fluidos, sendo uma das suas vertentes mais apelativas como se ilustra na obra clássica de van Dyke (1982) “An album of fluid motion”. O recurso a

[§] Este capítulo é parcialmente baseado na referência “Alves, Torres, Gonçalves, Oliveira e Pinho (2003d). *Visualization studies of viscoelastic flow in a 4:1 square/square contraction*. 17th International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2003), São Paulo, Brasil, ABCM”.

técnicas de visualização em mecânica dos fluidos permite compreender uma diversidade de fenómenos físicos, evitando-se em determinados casos o recurso a métodos teóricos e/ou numéricos, de análise muito mais complexa.

Os fluidos não newtonianos geralmente possuem viscosidade elevada, pelo que a generalidade dos escoamentos viscoelásticos processa-se em condições de regime laminar, facilitando a utilização de técnicas de visualização do escoamento. Boger e Walters (1993) efectuaram uma compilação de fotos ilustrativas de uma diversidade de escoamentos com fluidos não newtonianos, sendo uma referência representativa de uma boa parte dos trabalhos publicados neste tópico da mecânica dos fluidos.

Um dos primeiros trabalhos de visualização do escoamento de fluidos viscoelásticos foi efectuado por Cable e Boger (1978a-b, 1979). Estes autores estudaram o escoamento de vários fluidos viscoelásticos em contracções axissimétricas 2:1 e 4:1, tendo observado um aumento significativo do comprimento da recirculação de canto com o aumento do caudal (ou do número de Débora). Contudo, para os caudais mais elevados observou-se uma diminuição da recirculação e o aparecimento de um escoamento divergente junto ao eixo de simetria, sendo a sua origem atribuída a efeitos inerciais. Para caudais ainda mais elevados o escoamento tornava-se oscilatório, tendo sido identificadas as condições críticas em que se observa o aparecimento de instabilidades no escoamento. Num outro estudo muito importante, publicado na mesma altura por Nguyen e Boger (1979), utilizaram-se dois fluidos viscoelásticos de viscosidade constante (soluções diluídas de PAA num xarope de glucose de elevada viscosidade) para separar eficientemente os efeitos elásticos dos efeitos inerciais. Foram efectuados ensaios em diversas contracções axissimétricas, com razões de contracção na gama [7.64, 14.83], tendo sido observado um aumento significativo do comprimento do vórtice de canto com o aumento do caudal (ou do número de Débora), demonstrando-se ainda que esse comportamento se devia unicamente a efeitos elásticos (as experiências foram conduzidas em condições de inércia desprezável, pois $Re \leq 2.9 \times 10^{-2}$). Para caudais sucessivamente crescentes observou-se ainda o aparecimento de um escoamento assimétrico, e para caudais ainda superiores verificou-se uma rotação do vórtice de canto, e o aparecimento posterior de um escoamento helicoidal não estacionário.

Os trabalhos de Muller (1986) e de Lawler *et al.* (1986) correspondem aos primeiros estudos quantitativos do escoamento viscoelástico em contracções, tendo sido usada a velocimetria laser-Doppler na medição detalhada do campo de velocidade para o escoamento de um fluido de Boger (poli-isobutileno/polibuteno, PIB/PB) numa contracção axissimétrica 4:1.

Boger *et al.* (1986) efectuaram visualizações do escoamento em diversas contracções axissimétricas, com razões de contracção entre 4 e 16, usando dois fluidos de Boger (uma solução PIB/PB e uma solução de PAA em xarope de milho) com idênticas propriedades reológicas em escoamento de corte (dinâmico e estacionário). Os padrões de escoamento observados para os dois fluidos apresentavam características distintas, tendo os autores concluído da necessidade de se efectuarem medições reológicas adicionais para se caracterizar convenientemente os fluidos, e perceber a causa das diferenças observadas nos padrões de escoamento nas contracções. Um ano mais tarde, num artigo de revisão Boger (1987) sugere que a propriedade em causa é a viscosidade extensional, como de resto já foi descrito na Secção 2.3.2.

Nos anos subsequentes, o escoamento numa contracção 4:1 (plana ou axissimétrica) foi estudado intensivamente por via numérica e experimental, tendo para tal contribuído decisivamente a sua escolha como problema de referência em 1987 no 5th *International Workshop on Numerical Methods in Non-Newtonian Flows* (Hassager, 1988).

O padrão de escoamento observado em contracções planas e axissimétricas é claramente distinto (como já foi descrito em detalhe no Capítulo 2), tendo sido publicado ao longo dos anos um número significativo de trabalhos versando este tema (vide Boger e Walters, 1993; Nigen e Walters, 2002; Owens e Phillips, 2002 - Capítulo 8). Em contrapartida, as referências bibliográficas escasseiam para o caso de escoamentos em contracções tridimensionais. Walters e Rawlinson (1982) e Evans e Walters (1986) efectuaram visualizações do escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções tridimensionais do tipo SQ/PL e SQ/SQ, representadas esquematicamente na Figura 10.1. Para a geometria SQ/PL o escoamento na conduta de menor dimensão é aproximadamente bidimensional, principalmente para razões de contracção elevadas. Para a geometria SQ/SQ, Evans e Walters (1986) concluem que o escoamento apresenta um comportamento idêntico ao da geometria axissimétrica, i.e., observa-se um crescimento significativo

do vórtice de canto com o aumento da elasticidade do escoamento, contrastando com o padrão habitualmente observado para contracções planas (diminuição do vórtice de canto e eventual aparecimento de um pequeno vórtice de entrada).

Os estudos de simulação numérica de escoamentos em contracções tridimensionais também são escassos, destacando-se os trabalhos de Mompean e Deville (1997) para o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção SQ/PL 4:1:4, de Xue *et al.* (1998a) com fluidos UCM e PTT numa contracção SQ/PL 4:1:4 e de Xue *et al.* (1998b) para o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção SQ/SQ 4:1:1. Em qualquer destes trabalhos a ênfase foi em simulações 2D no plano médio de simetria, tendo sido feitas apenas algumas simulações verdadeiramente 3D, mais como demonstração. Para expansões tridimensionais (planas ou axissimétricas) a escassez de resultados publicados é ainda maior, como se refere em Boger e Walters (1993), onde são apresentadas algumas visualizações do escoamento de um fluido newtoniano e de um fluido viscoelástico (solução aquosa de PAA a 0.15% w/w). Para o escoamento numa expansão verifica-se uma influência da inércia e da elasticidade oposta à observada numa contracção (Boger e Walters, 1993), i.e., a elasticidade tende a diminuir a dimensão do vórtice de canto e a inércia a aumentá-la.

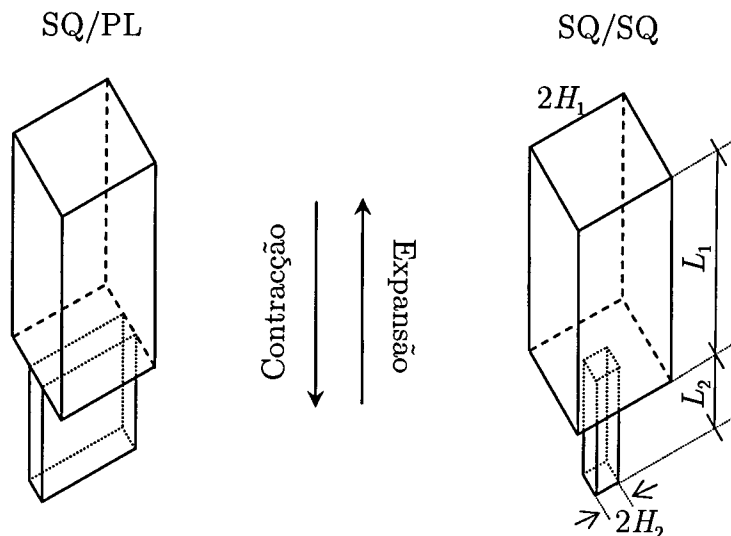


Figura 10.1: Ilustração de dois tipos de contracções/expansões tridimensionais. Na contracção SQ/PL (*square/planar*) o escoamento é aproximadamente bidimensional junto ao plano central do canal inferior. Na geometria SQ/SQ (*square/square*) o escoamento tem uma componente tridimensional muito importante.

Resumidamente, pode concluir-se que o escoamento de fluidos viscoelásticos em contracções (e em expansões) tridimensionais encontra-se ainda pouco estudado,

sendo essa a principal motivação para a selecção da geometria SQ/SQ para efectuar estudos de visualização do escoamento e respectiva previsão numérica.

10.2 Instalação experimental

Na Figura 10.2 apresenta-se um esquema da instalação experimental. A geometria de teste é constituída por duas condutas de secção recta quadrada, com lados internos $2H_1 = 24.0\text{ mm}$ e $2H_2 = 6.0\text{ mm}$, e comprimentos $L_1 = 1000\text{ mm}$ e $L_2 = 300\text{ mm}$, respectivamente. A razão de contracção resultante é $CR = H_1/H_2 = 4.0$. Na Figura 10.3 apresenta-se um detalhe da construção da conduta de secção quadrada e da contracção que se colocou na base da conduta. As principais dimensões são incluídas a título indicativo.

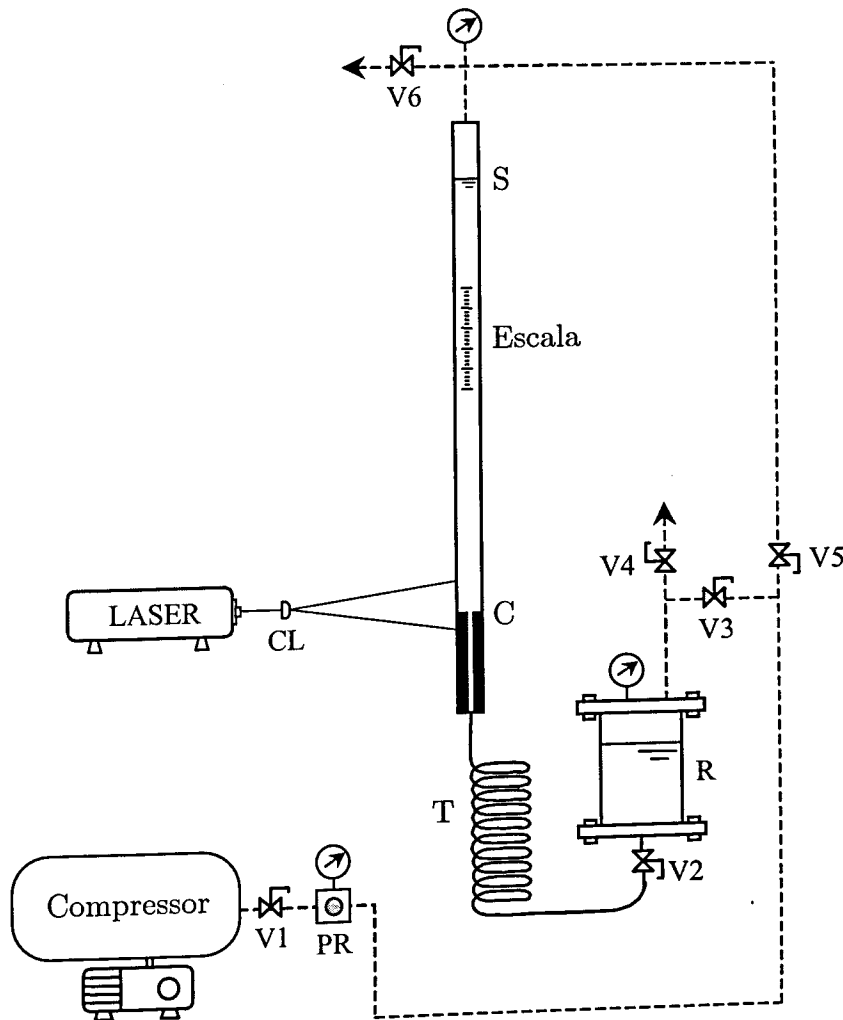


Figura 10.2: Representação esquemática da instalação experimental (CL-lente cilíndrica; PR-mano-reductor; V1 a V6-válvulas de esfera; R-reservatório; T-tubo; S-superfície livre; C-contracção/expansão).

A instalação ilustrada na Figura 10.2 permite gerar um escoamento descendente (contração) ou ascendente (expansão), por regulação adequada das válvulas de esfera V1 a V6. No caso de se pretender estudar o escoamento do fluido de teste na expansão (escoamento ascendente), deverá em primeiro lugar baixar-se o nível de líquido (S) no interior da secção de teste até próximo do ponto C (válvulas V2, V3, V4, V5 e V6 abertas; válvula V1 fechada). Em seguida com as válvulas V1, V2, V3 e V6 abertas, e as válvulas V4 e V5 fechadas, regula-se uma determinada pressão no mano-redutor PR (na gama de 0.5 a 4 bar). Note-se que o caudal de líquido é regulado pela pressão aplicada nas linhas de ar (representadas a traço interrompido na Figura 10.2), e pela escolha de um tubo T com comprimento e diâmetro adequados (para a gama de caudais baixos usou-se uma tubo com 8 m de comprimento e 4 mm de diâmetro interno; para os caudais mais elevados foi usado um tubo de igual comprimento e diâmetro interno 6 mm). A instalação não contém nenhuma válvula reguladora do caudal, nem qualquer outro tipo de restrição acentuada ao escoamento, para se evitar uma eventual degradação mecânica dos fluidos viscoelásticos usados nas experiências.

A medição do caudal é efectuada por cronometragem do tempo necessário à superfície livre do líquido (S) percorrer uma determinada distância, medida directamente na escala (regulável em altura) existente na secção de teste.

Para se promover um escoamento descendente do fluido de teste, deverá em primeiro lugar subir-se o nível de líquido no interior da conduta de maior comprimento até próximo do seu topo (válvulas V1, V2, V3 e V6 abertas; válvulas V4 e V5 fechadas). Seguidamente, com as válvulas V1, V2, V4 e V5 abertas e as válvulas V3 e V6 fechadas, regula-se a pressão no mano-redutor, por forma a obter o caudal pretendido.

Há dois aspectos importantes que foram considerados no projecto da instalação experimental e que devem ser realçados. Por um lado, evitou-se a existência de regiões do escoamento em que sejam alcançadas elevadas taxas de deformação (e.g., válvulas reguladoras do caudal), evitando-se uma eventual degradação mecânica dos fluidos viscoelásticos. Por outro lado, o fluido de teste encontra-se isolado da atmosfera (excepto nas superfícies livres do líquido), aspecto este importante pelo simples facto da generalidade das soluções usadas nas experiências serem higroscópicas.

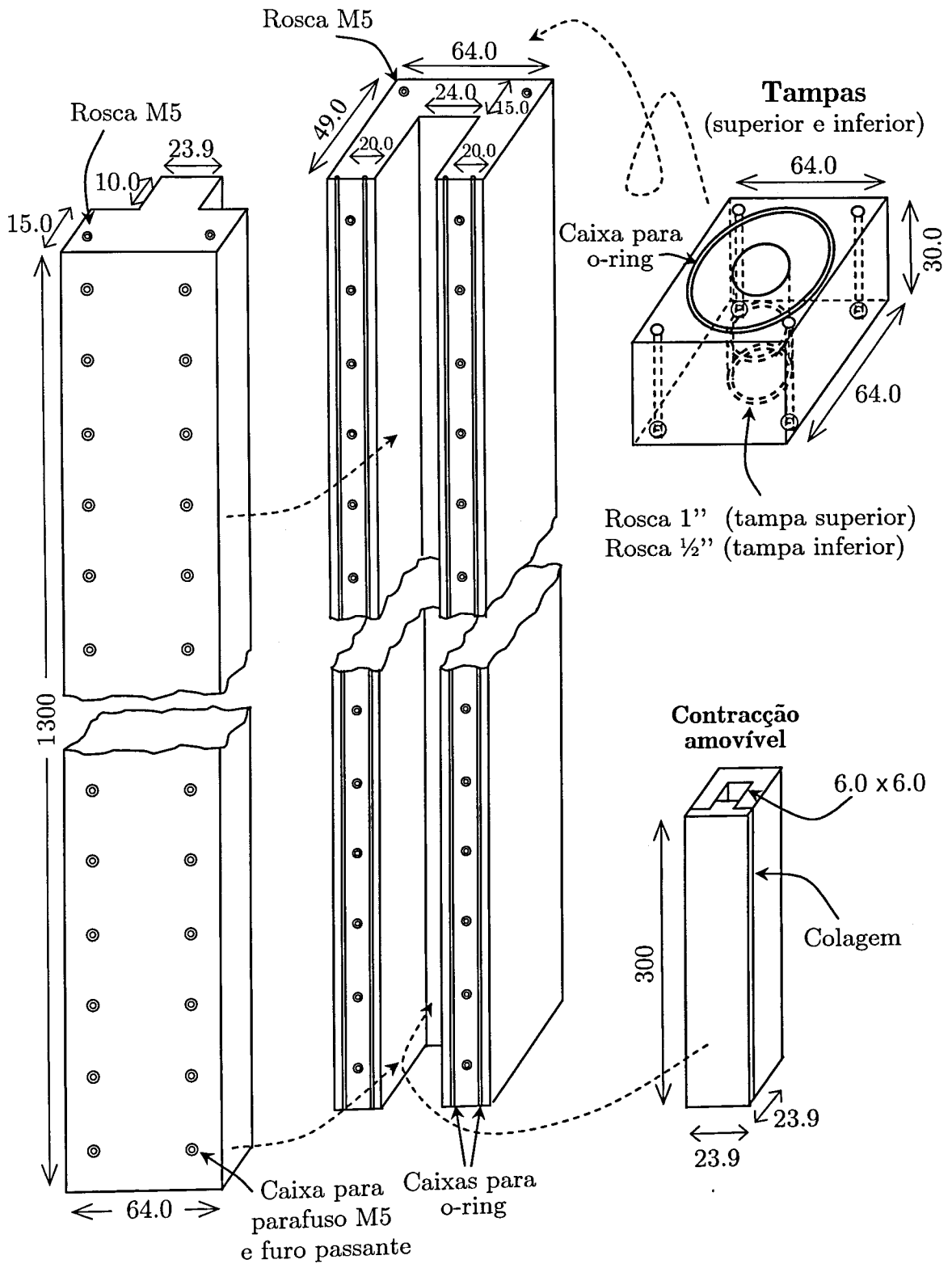


Figura 10.3: Detalhe construtivo da secção de teste e principais dimensões (em mm) das respectivas peças, construídas em *perspex*.

Para se visualizar o escoamento foi utilizada uma fonte de luz laser vermelha de 10 mW (laser de He-Ne com comprimento de onda igual a 632.8 nm). O raio de luz atravessava uma lente cilíndrica, produzindo uma *folha de luz* de pequena espessura (da ordem de 1 mm) que iluminava o escoamento, como se ilustra na Figura 10.4. Durante a preparação dos fluidos foi adicionada uma pequena quantidade de partículas de PVC (cerca de 15 mg de partículas/kg solução) com diâmetro médio de 10 μm . Estas partículas reflectem a luz, permitindo registar as suas trajectórias por fotografia de exposição prolongada. A instalação experimental estava colocada no interior de uma câmara escura, sendo apenas visíveis as partículas em suspensão iluminadas, registando-se assim as respectivas linhas de rasto. Para tal, foi usada uma câmara fotográfica convencional (CANON EOS300) munida com uma lente macro EF100 mm f/2.8. Para uma descrição mais detalhada da técnica fotográfica sugere-se a consulta de Walters e Webster (1982) ou de Boger e Walters (1993).

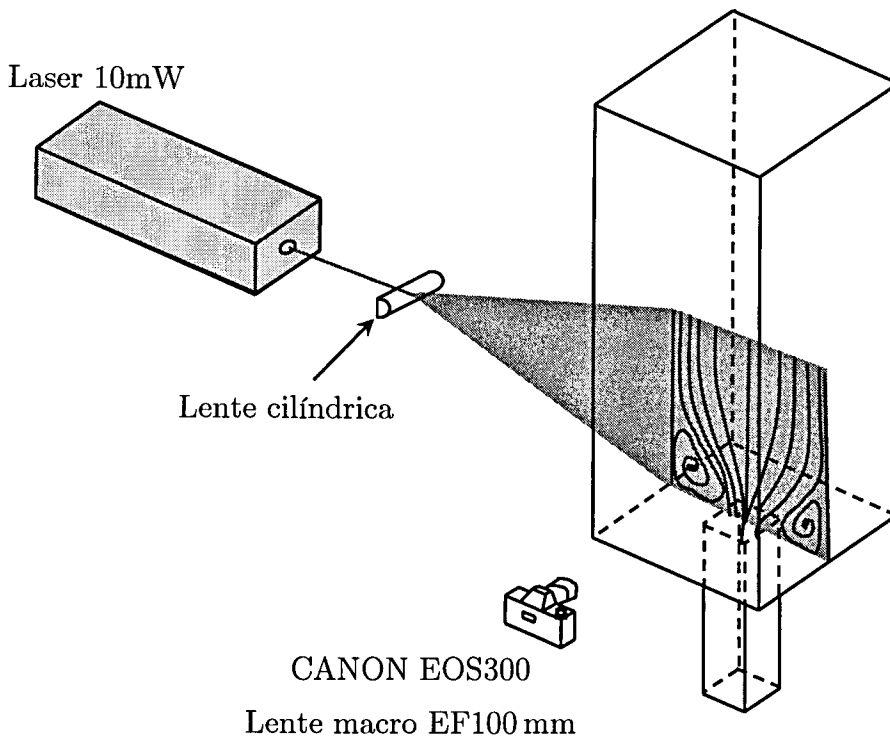


Figura 10.4: Ilustração da técnica usada para a visualização do escoamento.

10.3 Caracterização reológica dos fluidos

As propriedades reológicas dos fluidos foram medidas com um reómetro AR2000, comercializado pela empresa TA Instruments, usando-se uma geometria de cone e prato, semelhante à ilustrada na Figura 10.5. O prato inferior encontra-se fixo, sendo imposta uma rotação ao cone superior. A principal vantagem desta geometria deve-se à controlabilidade do escoamento pois toda a amostra está sujeita à mesma taxa de deformação, $\dot{\gamma} \cong \Omega/\vartheta$, desde que o ângulo ϑ seja pequeno (idealmente igual ou inferior 4°). Foi utilizado um cone com raio $R = 20 \text{ mm}$ e ângulo $\vartheta = 2^\circ$.

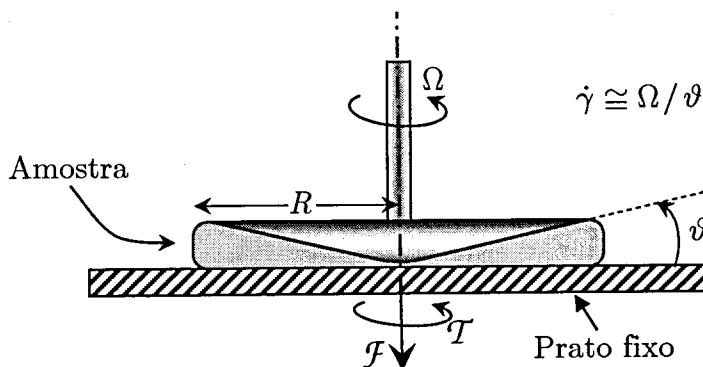


Figura 10.5: Ilustração da geometria de cone e prato usada na caracterização reológica das soluções.

A tensão de corte relaciona-se com o binário, \mathcal{T} , através da expressão (Gomes de Castro *et al.*, 2001)

$$\tau_{xy} = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma} = \frac{3\mathcal{T}}{2\pi R^3} \quad (10.1)$$

e a primeira diferença de tensões normais pode ser obtida a partir de

$$N_1 = \Psi_1(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}^2 = \frac{2\mathcal{F}}{\pi R^2} \quad (10.2)$$

em que a força \mathcal{F} representa uma sollicitação vertical que tende a separar o cone do prato, e que tem origem na componente elástica da tensão dos fluidos viscoelásticos (devido à existência de tensões normais não nulas). Por outro lado, para elevadas velocidades de rotação do cone, as forças de inércia podem ser significativas, originando uma força normal negativa, que pode ser estimada pela equação (Gomes de Castro *et al.*, 2001)

$$N_{1,iner} = -0.15\rho\omega^2 R^2 \quad (10.3)$$

Foram preparados cinco fluidos, cujas composições e características são resumidas na Tabela 10.1. Dois desses fluidos são newtonianos, tendo uma composição igual à dos fluidos viscoelásticos, excepto na ausência de adição de polímero (utilizou-se a poli(acrilamida) Separan AP30, produzida pela empresa SNF Floerger).

Os fluidos de Boger (PAA100 e PAA300) foram preparados por dissolução de uma pequena quantidade de PAA num solvente newtoniano com uma viscosidade moderada ($\simeq 0.4 \text{ Pa}\cdot\text{s}$).

A poli(acrilamida) Separan AP30 comporta-se como um poli-electrólito aniónico em soluções neutras ou alcalinas. Em meio ácido a ionização é reprimida e a macromolécula assume um carácter não ionizado, resultando numa diminuição da viscosidade e da elasticidade da solução. A reologia das soluções de PAA é pois fortemente afectada pelo pH, verificando-se um máximo na elasticidade para $\text{pH} \cong 8$, devido a um elevado grau de ionização da cadeia polimérica (Volk e Friedrich, 1980), que se ilustra na Figura 10.6.

Tabela 10.1- Composição das soluções usadas nas experiências de visualização.

Designação	Concentração mássica					Tipo de fluido	$\rho / \text{g}\cdot\text{cm}^{-3} \text{ }^{(2)}$
	PAA (ppm)	Glicerina (%)	Água (%)	NaCl (%)	Kathon ⁽¹⁾ (ppm)		
N85	---	84.99	15.01	---	25	Newtoniano	1.221
N91	---	90.99	7.51	1.50	25	Newtoniano	1.250
PAA100	100	90.99	7.50	1.50	25	Fluido de Boger	1.249
PAA300	300	90.97	7.50	1.50	25	Fluido de Boger	1.247
PAA500	500	84.97	14.98	---	25	Viscoelástico reofluidificante	1.226

⁽¹⁾ Agente biocida (Kathon LXE), comercializado pela empresa Rohm and Haas. A concentração tabelada refere-se ao princípio activo puro.

⁽²⁾ A massa volúmica foi determinada por picnometria a 21.2°C .

As propriedades dos solventes podem ser escolhidas por forma a alterar a conformação de cadeias poliméricas flexíveis (Flory, 1953). Um “bom solvente” é aquele que apresenta uma forte afinidade com a macromolécula, inibindo a interacção entre os vários segmentos da cadeia polimérica, criando um efeito de volume de exclusão, no qual uma determinada macromolécula inibe a presença de

outras cadeias poliméricas. O solvente usado na preparação das diversas soluções (água+glicerina) pode considerar-se um “bom solvente” (Stokes, 1998). Assim, adicionou-se uma pequena quantidade de sal (NaCl), que serve de “escudo” às cargas negativas da cadeia polimérica, permitindo uma maior aproximação dos diferentes segmentos da macromolécula, o que se traduz numa redução do comprimento hidrodinâmico da macromolécula em solução. Em Stokes (1998) demonstra-se que a adição de uma pequena quantidade de NaCl tem uma influência decisiva no comportamento reológico das soluções de PAA, reduzindo significativamente o seu carácter reofluidificante. Assim, da mesma forma que Boger (1977) criou os primeiros fluidos viscoelásticos de viscosidade constante, mascarando os efeitos de reofluidificação usando uma solução newtoniana de elevada viscosidade, é possível obter um fluido de Boger de média viscosidade adicionando pequenas quantidades de sal, por forma a criar um solvente “pobre” e minimizar o efeito de reofluidificação (Stokes, 1998).

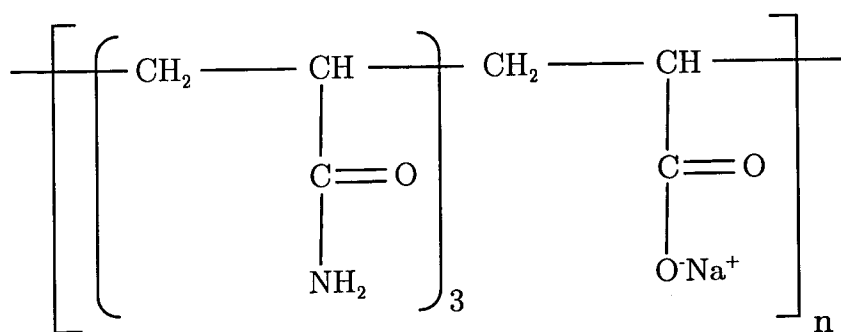


Figura 10.6: Estrutura química da poliacrilamida Separan AP30 (Stokes, 1998).

A composição dos fluidos de Boger usados neste estudo foi inspirada nos trabalhos de Stokes (1998) e Stokes *et al.* (2001a,b), com o objectivo de se obter um fluido com razoável elasticidade e com viscosidade de corte praticamente independente da taxa de deformação. O fluido PAA500 foi criado com o intuito de apresentar um comportamento reofluidificante moderado e elevada elasticidade, daí a ausência de sal e a maior concentração polimérica.

10.3.1 Fluidos newtonianos (N85 e N91)

Para o fluido N85 apenas se mediu a viscosidade a 18.0°C (temperatura a que decorreram as visualizações com esse fluido), usando um viscosímetro do tipo

falling ball (ref^a GV-2200, Gilmont Instruments). O valor obtido para a viscosidade foi $\eta = 0.125 \pm 0.05$ Pa.s.

O fluido N91 foi caracterizado no reómetro AR2000, na gama de temperaturas compreendida entre 15.9 e 25.0 °C. Apesar da viscosidade dos fluidos newtonianos não depender da taxa de deformação, mediu-se uma curva de escoamento para se avaliar as limitações do reómetro com a geometria de cone e prato usada nas medições. Este ensaio, representado na Figura 10.7, tem grande utilidade, uma vez que as viscosidades dos fluidos de Boger PAA100 e PAA300 são semelhantes à viscosidade do fluido N91.

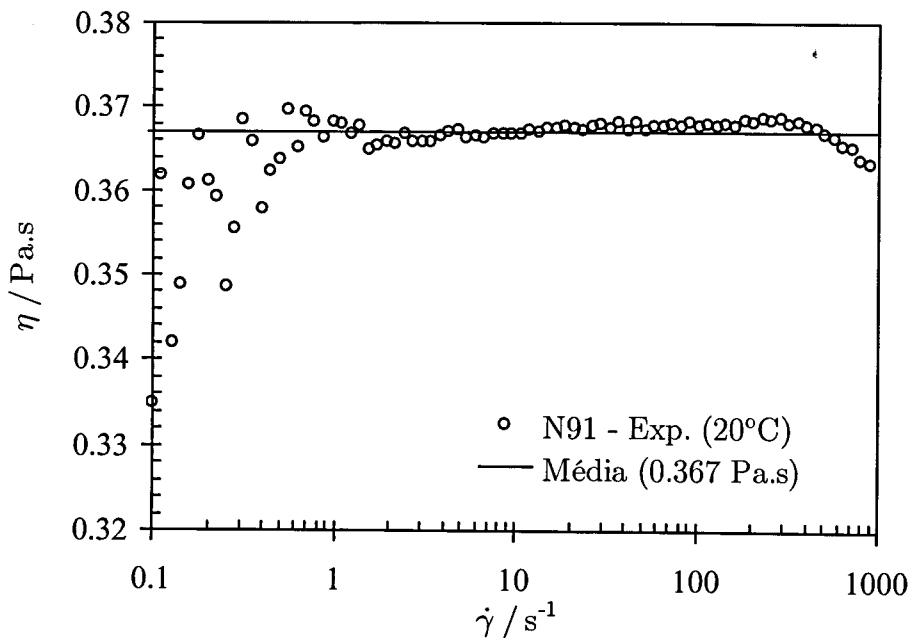


Figura 10.7: Variação da viscosidade de corte com a taxa de deformação para o fluido N91.

A Figura 10.7 demonstra que a viscosidade de corte do fluido N91 é medida correctamente para valores da taxa de deformação compreendidos entre 1 e 100 s⁻¹, aproximadamente (note-se a pequena gama usada no eixo das ordenadas). De forma idêntica, os erros na medição da viscosidade de corte dos fluidos de Boger deverão ser inferiores nessa gama de taxas de deformação. Para o fluido N91 também foram efectuadas medições da primeira diferença de tensões normais para diferentes taxas de deformação, cujos resultados se apresentam na Figura 10.8. Para taxas de deformação inferiores a 100 s⁻¹ verifica-se que os valores de N_1 se aproximam de zero, como deverá ser para um fluido newtoniano. No entanto, a medição da primeira diferença de tensões normais não deverá exceder $\dot{\gamma} = 100$ s⁻¹,

valor a partir do qual os efeitos inerciais começam a ser importantes, conduzindo a uma medição de N_1 por defeito. A previsão da Eq. (10.3) é aceitável, pelo que esta poderá ser usada para corrigir os valores da tensão normal para taxas de deformação elevadas. A Figura 10.8 também demonstra que a sensibilidade do aparelho na medição de N_1 ronda os 10 Pa (para a geometria de cone e prato utilizada), pelo que eventuais medições da tensão normal nesta ordem de grandeza não devem ser consideradas, já que envolvem erros significativos. Este valor está em acordo com as especificações do reómetro, que indicam que a gama de medição de força normal varia entre 1 e 5000 g.f, correspondendo a uma tensão normal compreendida entre 7.8 e 3.9×10^4 Pa, para o cone utilizado nas medições ($R = 2.0$ cm).

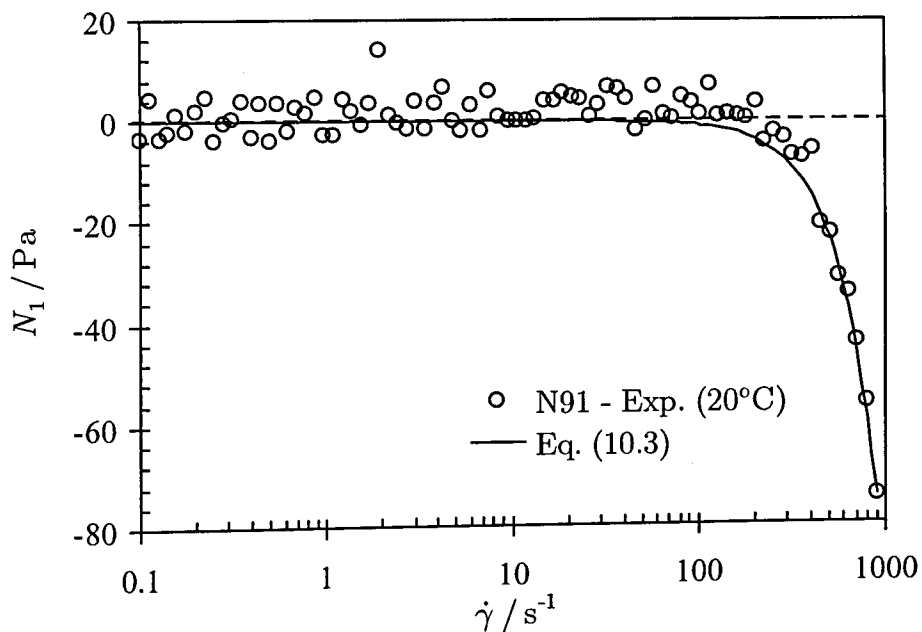


Figura 10.8: Variação da primeira diferença de tensões normais com a taxa de deformação para o fluido N91.

Foram também efectuadas medições em escoamento dinâmico de corte, com o fluido newtoniano N91 e com água destilada. Na Figura 10.9 representa-se o módulo de conservação, G' , em função da frequência angular, ω , para deformações de 0.10 e 0.50. Para um fluido newtoniano o módulo de conservação é nulo, pelo que os valores representados na Figura 10.9 representam a linha de base do reómetro (que idealmente deveria ser nula). Quaisquer medições que se aproximem desta linha de base devem ser analisadas com precaução pois estão afectas de um erro significativo.

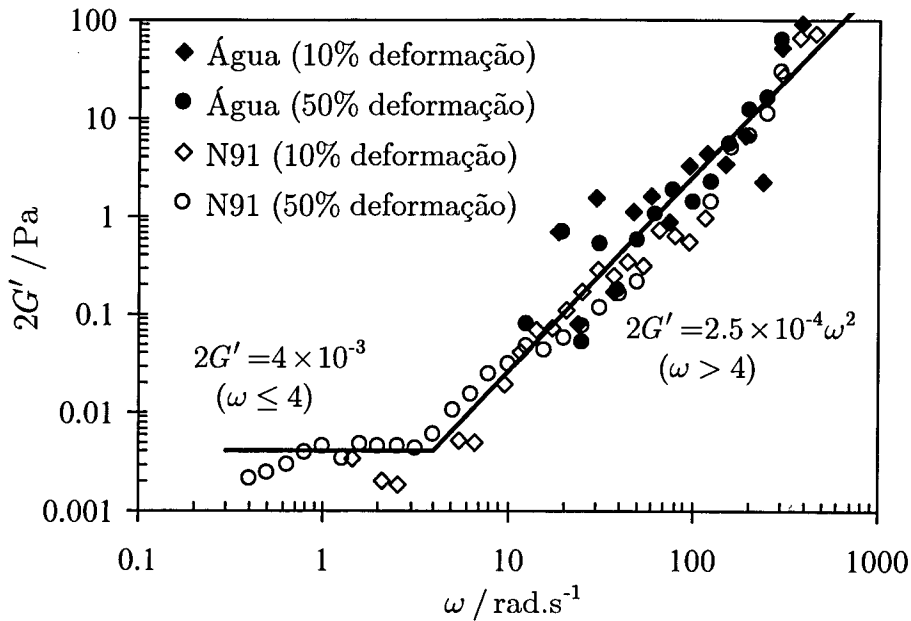


Figura 10.9: Determinação da linha de base de G' em ensaios oscilatórios.

As medições reológicas apresentadas nas Figuras 10.7 a 10.9 referem-se à temperatura de 20.0 °C. Contudo, e dado que as experiências de visualização do escoamento decorreram a uma temperatura inferior, efectuaram-se medições adicionais da viscosidade na gama de temperaturas compreendida entre 15.9 e 25.0 °C. Nessa gama de temperaturas observou-se uma variação na viscosidade entre 0.50 e 0.25 Pa.s, correspondendo a um decréscimo na viscosidade de cerca de 8% por cada grau centígrado. É pois importante medir com rigor a temperatura a que são efectuadas as visualizações, bem como garantir que estas são efectuadas em condições isotérmicas.

A influência da temperatura na viscosidade de um fluido newtoniano geralmente pode ser representada adequadamente pela equação de Andrade (Reid *et al.*, 1988),

$$\ln \eta = A + \frac{B}{T} \quad (10.4)$$

em que as constantes A e B podem ser obtidas por ajuste linear de $\ln \eta$ vs. $1/T$. A Eq. (10.4) pode ser reescrita na forma alternativa (equação de Arrhenius),

$$\ln(a_T) = \ln \frac{\eta}{\eta_0} = \left[\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (10.5)$$

em que η_0 representa a viscosidade à temperatura absoluta de referência, T_0 . Na Figura 10.10 representa-se a influência da temperatura na viscosidade do fluido N91, juntamente com um ajuste à equação de Arrhenius, que se verifica traduzir adequadamente essa dependência na gama estudada (15.9 a 25.0 °C).

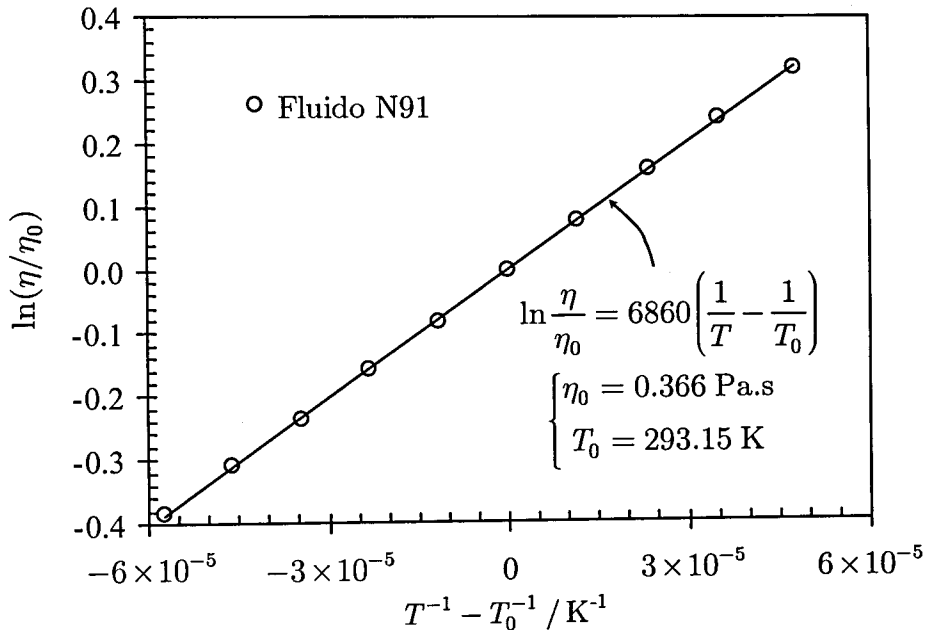


Figura 10.10: Influência da temperatura na viscosidade de corte do fluido N91.

10.3.2 Fluidos de Boger (PAA100 e PAA300)

Na Figura 10.11 apresentam-se as funções materiais medidas em escoamento dinâmico de corte, à temperatura de referência de 20.0 °C, para o fluido de Boger PAA100. Para valores de ω inferiores a 0.1 rad/s e superiores a 50 rad/s, observa-se uma aproximação do módulo de conservação para a linha de base do reómetro, pelo que esses resultados carecem de precisão. Na Figura 10.12 apenas se consideram os valores experimentais de G' que se afastam significativamente da linha de base, os quais foram usados em conjunto com os valores de G'' para determinar o espectro viscoelástico linear. Os parâmetros obtidos são apresentados na Tabela 10.2. A parcela correspondente a cada um dos modos é ilustrada na Figura 10.12, para G' e para G'' .

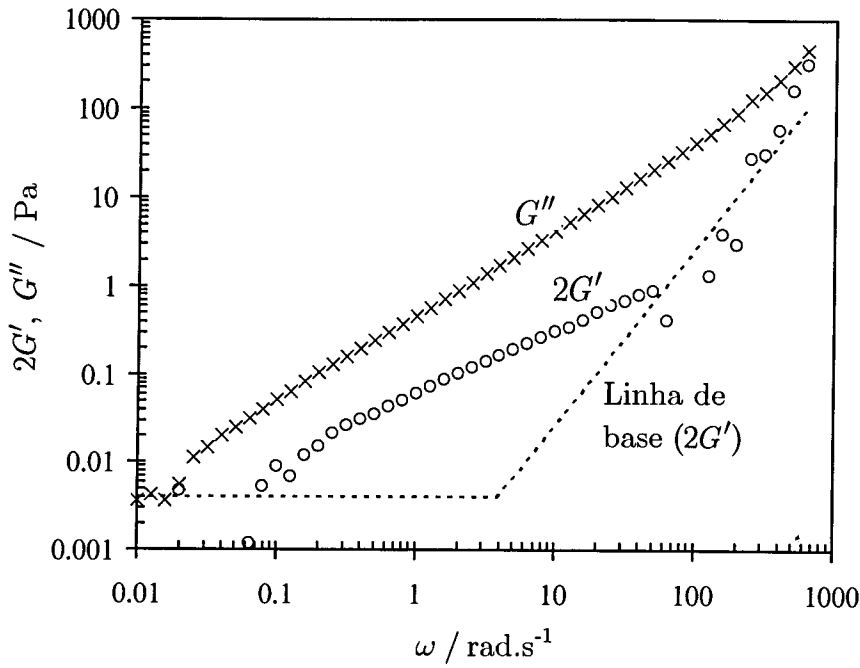


Figura 10.11: Funções materiais do fluido de Boger PAA100 em escoamento dinâmico de corte.

Tabela 10.2 - Espectro viscoelástico linear do fluido PAA100 à temperatura de referência, $T_0 = 293.15$ K.

Modo n°	λ_k (s)	η_k (Pa.s)
1	3.0	0.075
2	0.3	0.027
3	0.03	0.018
Solvente	---	0.40

Para se quantificar o número de Débora nos ensaios experimentais, é conveniente definir apenas um tempo de relaxação. Para tal utiliza-se o modelo de Oldroyd-B, em que a componente polimérica da viscosidade, η_p , e o tempo de relaxação de Oldroyd-B, λ_p , são obtidos a partir do espectro viscoelástico linear com base nas equações,

$$\eta_p = \sum_{k \neq \text{solvente}} \eta_k \quad (10.6)$$

$$\lambda_p = \sum_{k \neq \text{solvente}} \eta_k \lambda_k / \eta_p \quad (10.7)$$

por forma a garantir que para baixos valores da taxa de deformação (ou baixos valores de ω) se obtém um comportamento viscoelástico idêntico ao do modelo multimodo (e.g., $\Psi_{1,0} \equiv \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \Psi_1 = \sum_k 2\eta_k \lambda_k = 2\eta_p \lambda_p$). Os parâmetros do modelo de Oldroyd-B, obtidos para o fluido PAA100 à temperatura de referência ($T_0 = 293.15$ K), são: $\eta_0 = \eta_s + \eta_p = 0.52$ Pa.s; $\beta = \eta_s / \eta_0 = 0.769$; $\lambda_p = 1.947$ s.

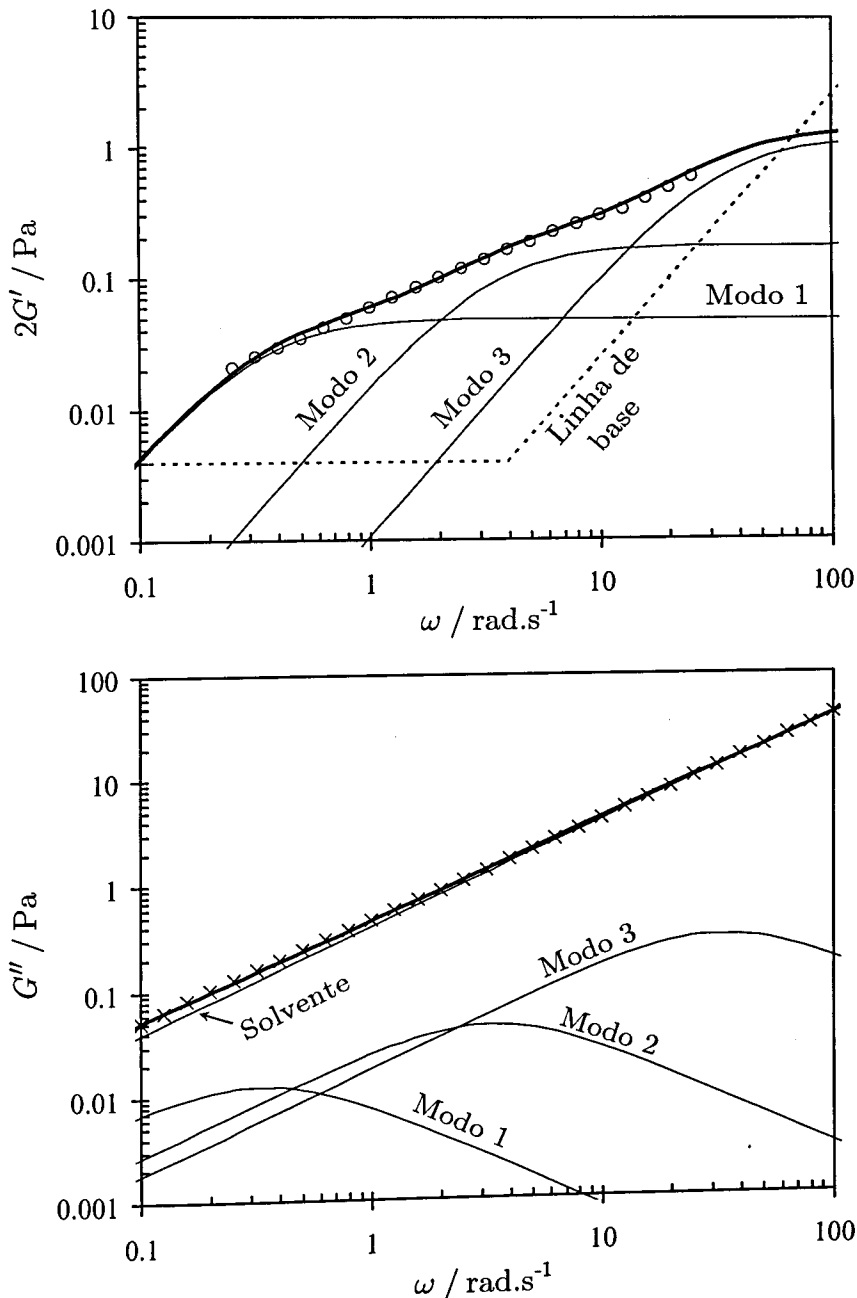


Figura 10.12: Funções materiais do fluido de Boger PAA100 em escoamento dinâmico de corte ($T = 293.15$ K), e comparação com as previsões do modelo multimodo: $\lambda_1 = 3.0$ s, $\lambda_2 = 0.3$ s, $\lambda_3 = 0.03$ s; $\eta_1 = 0.075$ Pa.s, $\eta_2 = 0.027$ Pa.s, $\eta_3 = 0.018$ Pa.s; $\eta_s = 0.40$ Pa.s.



Foram também efectuadas medições em escoamento de corte simples estacionário, para temperaturas compreendidas entre 15.3 e 25.0 °C. Usando o princípio da sobreposição tempo-temperatura (Bird *et al.*, 1987a) é possível conjugar as curvas medidas a diferentes temperaturas numa curva mestra. Para tal, define-se um factor de deslocamento a_T na forma,

$$a_T = \frac{\eta_0(T) T_0 \rho_0}{\eta_0(T_0) T \rho} \quad (10.8)$$

em que ρ representa a massa específica da solução e $\eta_0(T_0)$ traduz a viscosidade de corte a taxa de deformação nula, avaliada à temperatura absoluta de referência, T_0 . Como apenas se efectuaram medições numa gama estreita de temperaturas, o factor de deslocamento pode ser simplificado em

$$a_T = \frac{\eta_0(T)}{\eta_0(T_0)} \quad (10.9)$$

sendo esta a forma adoptada na presente tese. Para um fluido de Boger, o factor de deslocamento pode ser calculado pelo quociente entre a viscosidade de corte a uma determinada temperatura e a viscosidade de corte à temperatura de referência T_0 , avaliado a qualquer taxa de deformação, devido à inexistência de reofluidificação. Na Figura 10.13 apresenta-se a influência da temperatura no factor de deslocamento, verificando-se que a equação de Arrhenius obtida para o fluido newtoniano N91 também ajusta bem os resultados obtidos para o fluido PAA100. Este resultado não é inesperado, já que a viscosidade do fluido PAA100 é praticamente igual à do seu solvente base, que é precisamente o fluido N91.

A conversão dos diferentes parâmetros reológicos medidos à temperatura absoluta T , para a temperatura de referência, T_0 , faz-se por recurso às seguintes expressões (Quinzani *et al.*, 1990):

$$\begin{aligned} \omega(T_0) &= a_T \omega(T) & \dot{\gamma}(T_0) &= a_T \dot{\gamma}(T) \\ \lambda_k(T_0) &= \lambda_k(T) / a_T & \lambda_p(T_0) &= \lambda_p(T) / a_T \\ G'(T_0) &= G'(T) & G''(T_0) &= G''(T) \\ \eta'(T_0) &= \eta'(T) / a_T & \eta''(T_0) &= \eta''(T) / a_T \\ \eta(T_0) &= \eta(T) / a_T & \Psi_1(T_0) &= \Psi_1(T) / a_T^2 \end{aligned} \quad (10.10)$$

Foram efectuados ensaios reológicos em escoamento de corte simples estacionário para as temperaturas de 20.0, 25.0 e 30.0 °C, cujos resultados são apresentados na Figura 10.14 na forma de curvas mestra. Nessa figura também são

incluídas as medições efectuadas em escoamento dinâmico de corte, nomeadamente a variação de $2G'/(a_T\omega^2)$ (note-se que $\Psi_{1,0} = \lim_{\dot{\gamma} \rightarrow 0} \Psi_1 = \lim_{\omega \rightarrow 0} 2G'/\omega^2$, daí a escolha de $2G'$ em vez de G') e de η'/a_T com $a_T\omega$. A viscosidade de corte reduzida, $\eta_r = \eta/a_T$, é aproximadamente constante para valores da taxa de deformação reduzida ($\dot{\gamma}_r = a_T\dot{\gamma}$) compreendidos entre 0.3 e 50 s^{-1} . Para $\dot{\gamma}_r \cong 54 \text{ s}^{-1}$ observa-se um aumento abrupto na viscosidade de corte e no coeficiente da primeira diferença de tensões normais. Este comportamento é típico para o escoamento de fluidos de Boger na geometria de cone e prato (assim como para a geometria de pratos paralelos), tendo origem numa instabilidade elástica (Phan-Thien, 1985; McKinley, 1991). Na Figura 10.15 analisa-se em maior detalhe o comportamento da viscosidade de corte e de Ψ_1 na região instável, num ensaio em que se aumentou lentamente o binário aplicado à amostra (\mathcal{T}) até um valor predefinido, seguido de uma diminuição também gradual de \mathcal{T} . Observa-se a existência de histerese nas curvas de η e Ψ_1 , indicando que o escoamento não é estável para valores de $\dot{\gamma}_r \geq 20 \text{ s}^{-1}$, aproximadamente. Para valores de $\dot{\gamma}_r$ na gama de 20 a 54 s^{-1} o escoamento não é estável, uma vez que se for sujeito a uma perturbação deixará de ser um escoamento de corte simples, resultando num escoamento complexo não estacionário com carácter tridimensional (cf. McKinley, 1991), conduzindo a um aumento acentuado na viscosidade de corte aparente.

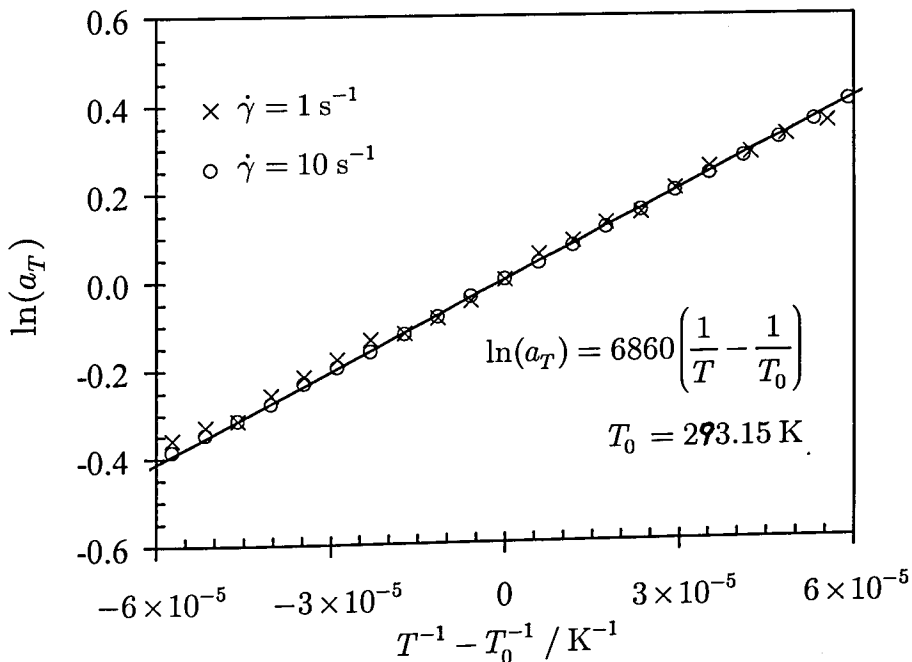


Figura 10.13: Influência da temperatura no factor de deslocamento, a_T , para o fluido PAA100.

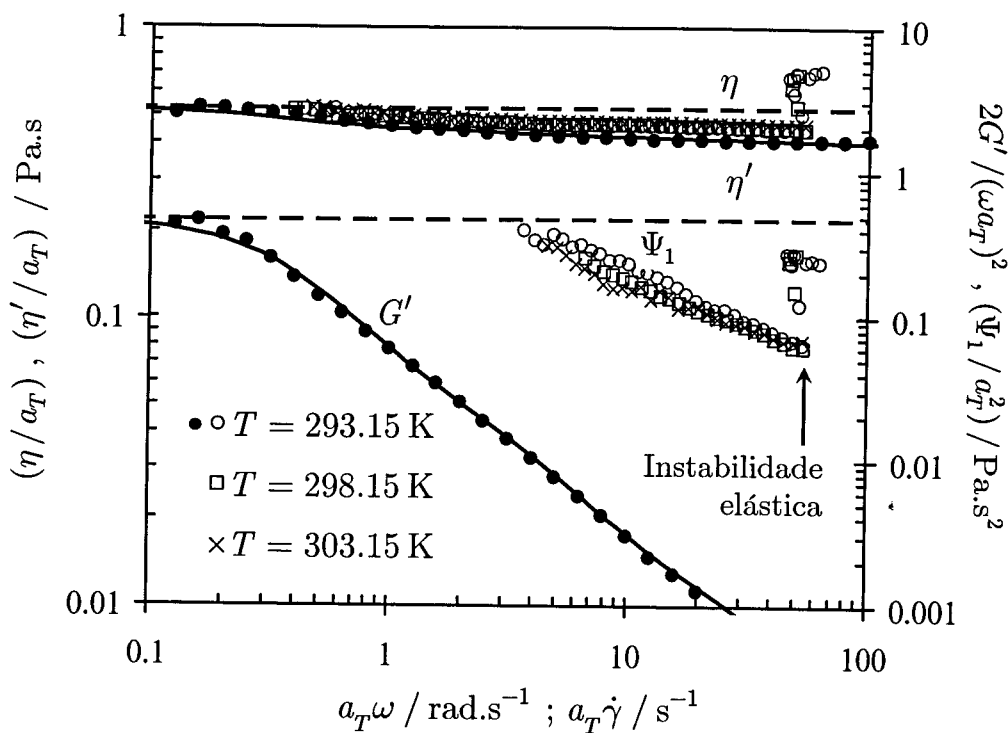


Figura 10.14: Funções materiais obtidas com o fluido PAA100 em escoamento de corte simples (\circ \square \times) e em escoamento dinâmico de corte (\bullet).

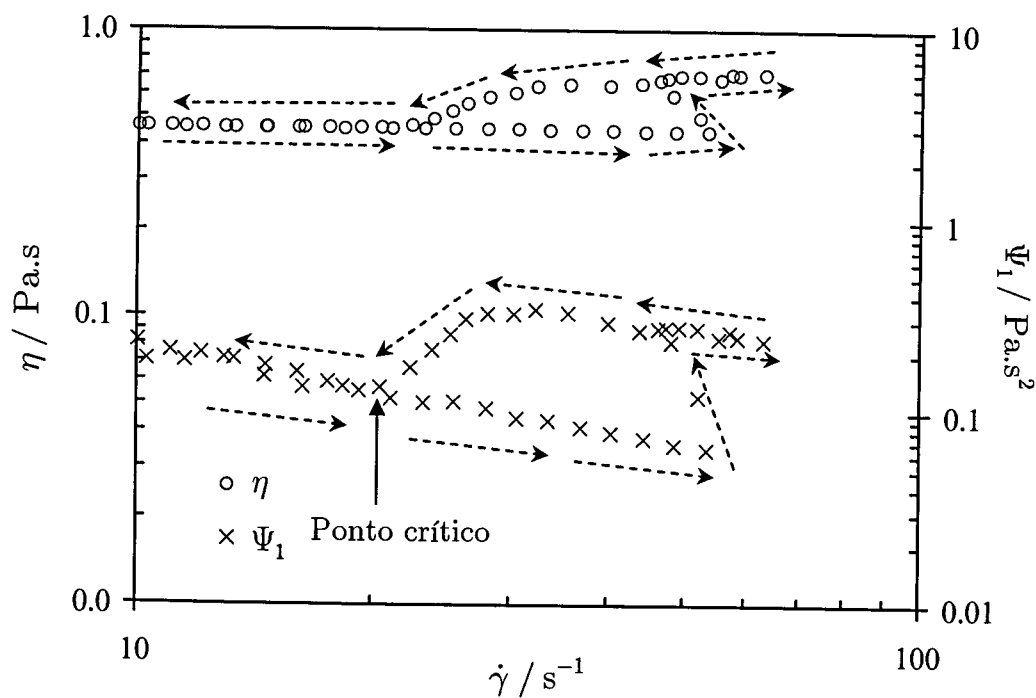


Figura 10.15: Ilustração do fenómeno de histerese obtido na curva de escoamento com o fluido PAA100 para a geometria cone e prato ($T = T_0 = 293.15$ K).

Na Figura 10.16 apresenta-se a influência de $\dot{\gamma}$ na viscosidade de corte e na primeira diferença de tensões normais, até valores elevados da taxa de deformação, $\dot{\gamma}$. A figura demonstra a ocorrência de degradação do fluido, já que a curva obtida para valores decrescentes do binário aplicado à amostra apresenta valores de N_1 muito inferiores aos medidos na curva ascendente. Isso não acontecia anteriormente quando as taxas de deformação máximas eram significativamente inferiores, como na Figura 10.15. Foram efectuados ensaios complementares que permitiram concluir que a degradação do fluido ocorre precisamente à taxa de deformação em que se observa uma diminuição acentuada da primeira diferença de tensões normais. Quando se ultrapassa esse valor de $\dot{\gamma}$, há cisalhamento irreversível da cadeia polimérica que conduz a uma diminuição das propriedades materiais, que é mais acentuada para as que caracterizam a elasticidade do fluido.

Mesmo após se ter esperado diversas horas com a amostra em repouso, verifica-se que o comportamento reológico do fluido não retoma a situação inicial. Assim, deverá evitar-se atingir elevadas taxas de deformação na instalação experimental, caso contrário poderá ocorrer degradação mecânica do fluido, alterando-se irreversivelmente, e de forma não controlada, o seu comportamento reológico. Na construção da instalação experimental (vide Figura 10.2) evitou-se assim o uso de válvulas reguladoras do caudal, bem como quaisquer constrições acentuadas ao escoamento, onde possam ser alcançadas taxas de deformação elevadas.

Para o fluido de Boger PAA300 efectuaram-se medições reológicas semelhantes às descritas para o fluido PAA100. Na Figura 10.17 apresentam-se as funções materiais medidas em escoamento dinâmico de corte, à temperatura de referência de 20.0 °C, a partir das quais se determinou o espectro viscoelástico linear do fluido PAA300, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 10.3. A parcela correspondente a cada um dos modos é ilustrada na Figura 10.17, para G' e para G'' . O tempo de relaxação do modelo Oldroyd-B à temperatura de referência ($T_0 = 293.15$ K) pode ser estimado pela Eq. (10.7), obtendo-se agora $\lambda_p = 1.942$ s, valor este idêntico ao estimado para o fluido PAA100. O parâmetro $\beta = \eta_s / \eta_0$ toma agora o valor 0.50 e a viscosidade do polímero $\eta_p = 0.37$ Pa.s.

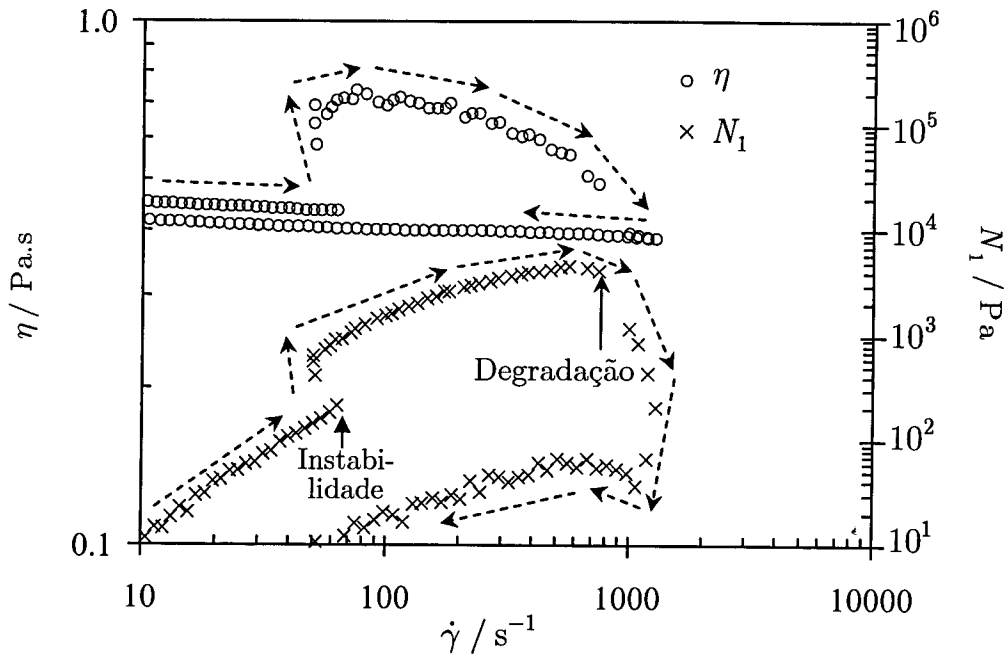


Figura 10.16: Ilustração da degradação do fluido de Boger PAA100 a elevadas taxas de deformação ($T = T_0 = 293.15$ K).

Tabela 10.3 - Espectro viscoelástico linear do fluido PAA300 à temperatura de referência, $T_0 = 293.15$ K.

Modo n°	λ_k (s)	η_k (Pa.s)
1	3.0	0.23
2	0.3	0.09
3	0.03	0.05
Solvente	---	0.37

Na Figura 10.18 apresentam-se os resultados das medições em escoamento de corte simples estacionário, efectuadas às temperaturas de 20.0, 25.0 e 30.0 °C. A figura também inclui as medições em escoamento dinâmico de corte, nomeadamente a variação de $2G'/(a_T\omega^2)$ e de η'/a_T com $a_T\omega$. A viscosidade de corte diminui apenas cerca de 10% por cada década de $\dot{\gamma}_r$, pelo que se pode classificar o fluido PAA300 como um fluido de Boger. Novamente observa-se a existência de uma instabilidade elástica ($\dot{\gamma}_r \cong 28 \text{ s}^{-1}$) que origina um aumento abrupto na viscosidade de corte aparente e em Ψ_1 . Para o fluido PAA300 verificou-se que o factor de deslocamento também era descrito adequadamente com

a mesma equação de Arrhenius obtida para os fluidos N91 e PAA100 ($\ln a_T = 6860(T^{-1} - T_0^{-1})$; $T_0 = 293.15$ K).

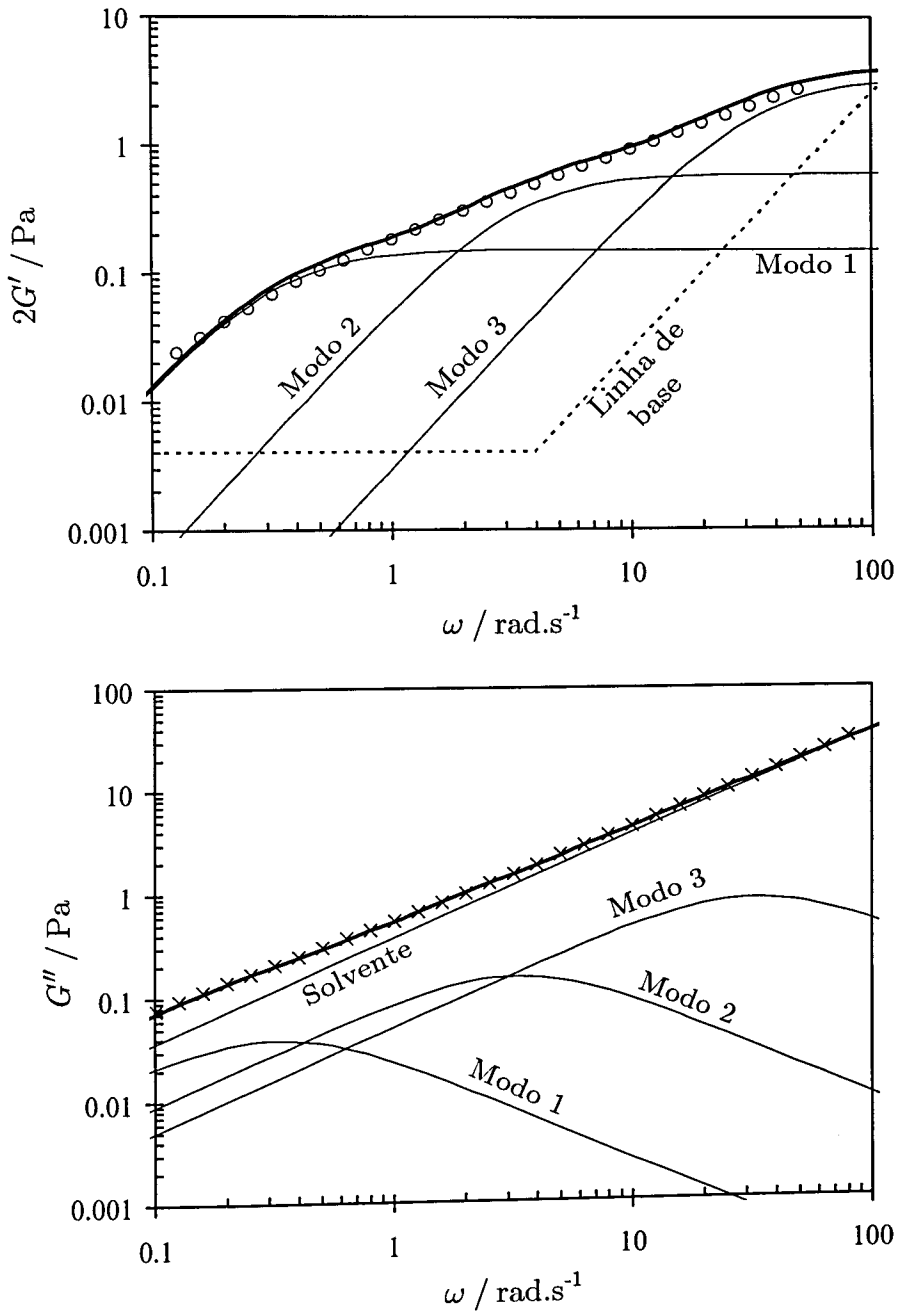


Figura 10.17: Funções materiais do fluido de Boger PAA300 em escoamento dinâmico de corte ($T = T_0 = 293.15$ K), e comparação com as previsões do modelo multimodo: $\lambda_1 = 3.0$ s, $\lambda_2 = 0.3$ s, $\lambda_3 = 0.03$ s; $\eta_1 = 0.23$ Pa.s, $\eta_2 = 0.09$ Pa.s, $\eta_3 = 0.05$ Pa.s; $\eta_s = 0.37$ Pa.s.

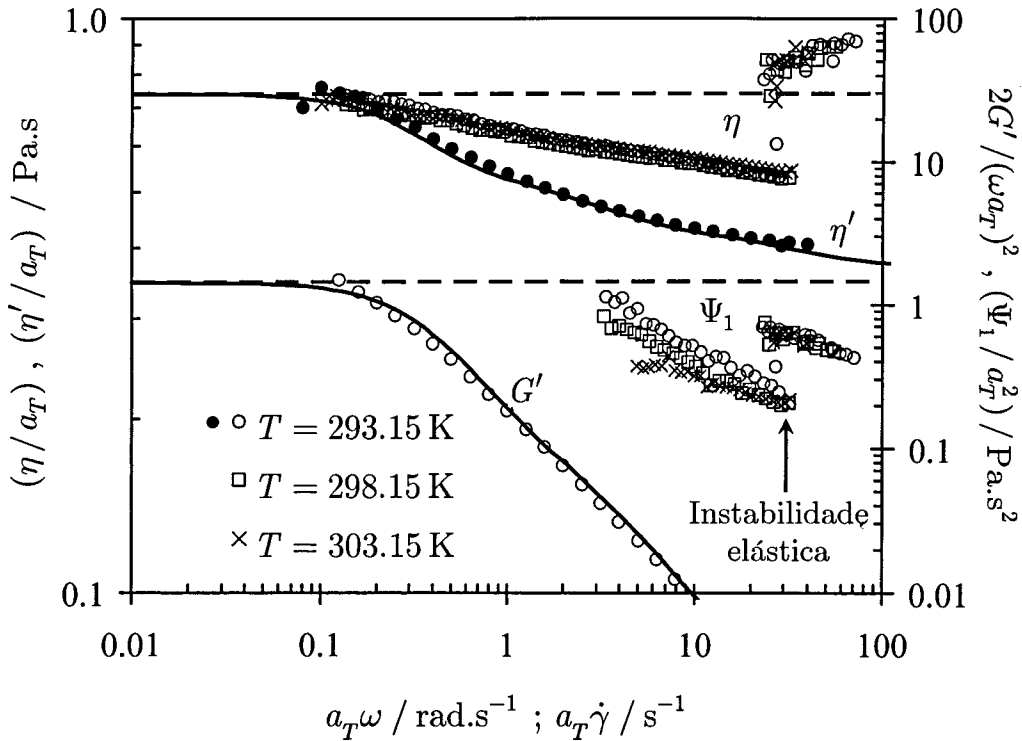


Figura 10.18: Funções materiais obtidas com o fluido PAA300 em escoamento de corte simples (\circ \square \times) e em escoamento dinâmico de corte (\bullet).

10.3.3 Fluido PAA500

O fluido PAA500, cuja composição se apresenta na Tabela 10.1, foi construído por forma a apresentar elevada elasticidade e um comportamento reofluidificante moderado.

Na Figura 10.19 apresentam-se as funções materiais medidas em escoamento dinâmico de corte, à temperatura de referência de 15.0°C . Com base nestas funções materiais determinou-se o espectro viscoelástico linear do fluido PAA500, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 10.4. A parcela correspondente a cada um dos modos é ilustrada na Figura 10.19, para G' e para G'' . O tempo de relaxação a baixas taxas de deformação é igual ao do modelo Oldroyd-B (Eq. 10.7), tomando o valor $\lambda_p = 20.47$ s. Este tempo de relaxação vai ser usado para quantificar o número de Débora nas visualizações experimentais.

O factor de deslocamento foi determinado na gama de temperaturas compreendidas entre 10.0 e 30.0°C , tendo também sido ajustado a uma função de Arrhenius, como se ilustra na Figura 10.20. Para este fluido escolheu-se a temperatura de 15.0°C para referência, ao contrário dos outros fluidos em que se

seleccionou a temperatura de 20.0°C. Tal escolha deve-se às experiências de visualização com o fluido PAA500 terem sido efectuadas precisamente a 15°C.

Tabela 10.4 - Espectro viscoelástico linear do fluido PAA500 à temperatura de referência, $T_0 = 288.15$ K.

Modo n°	λ_k (s)	η_k (Pa.s)
1	30.0	2.50
2	3.0	0.90
3	0.3	0.30
4	0.03	0.10
Solvente	---	0.27

Na Figura 10.21 apresenta-se a curva mestra da viscosidade de corte, obtida a partir de medições em escoamento de corte simples na gama de temperaturas entre 10.0 e 30.0°C. O fluido PAA500 apresenta um comportamento reofluidificante moderado, observando-se uma diminuição de cerca de uma década na viscosidade de corte, desde o primeiro até ao segundo patamar newtoniano. Para modelar o comportamento reológico deste fluido seleccionou-se o modelo PTT linear multimodo, cujas previsões são incluídas na Figura 10.21 para a viscosidade de corte, e na Figura 10.22 para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais e para $2G' / \omega^2$. Além dos parâmetros do espectro viscoelástico linear (vide Tabela 10.4), estimados com base nas medições em escoamento dinâmico de corte, o modelo PTT possui dois parâmetros adicionais (ε e ξ) que foram estimados com base nas curvas mestra de η e Ψ_1 . O modelo PTT linear ajusta adequadamente a curva da viscosidade de corte, mas prevê uma reofluidificação em Ψ_1 mais acentuada que a observada experimentalmente.

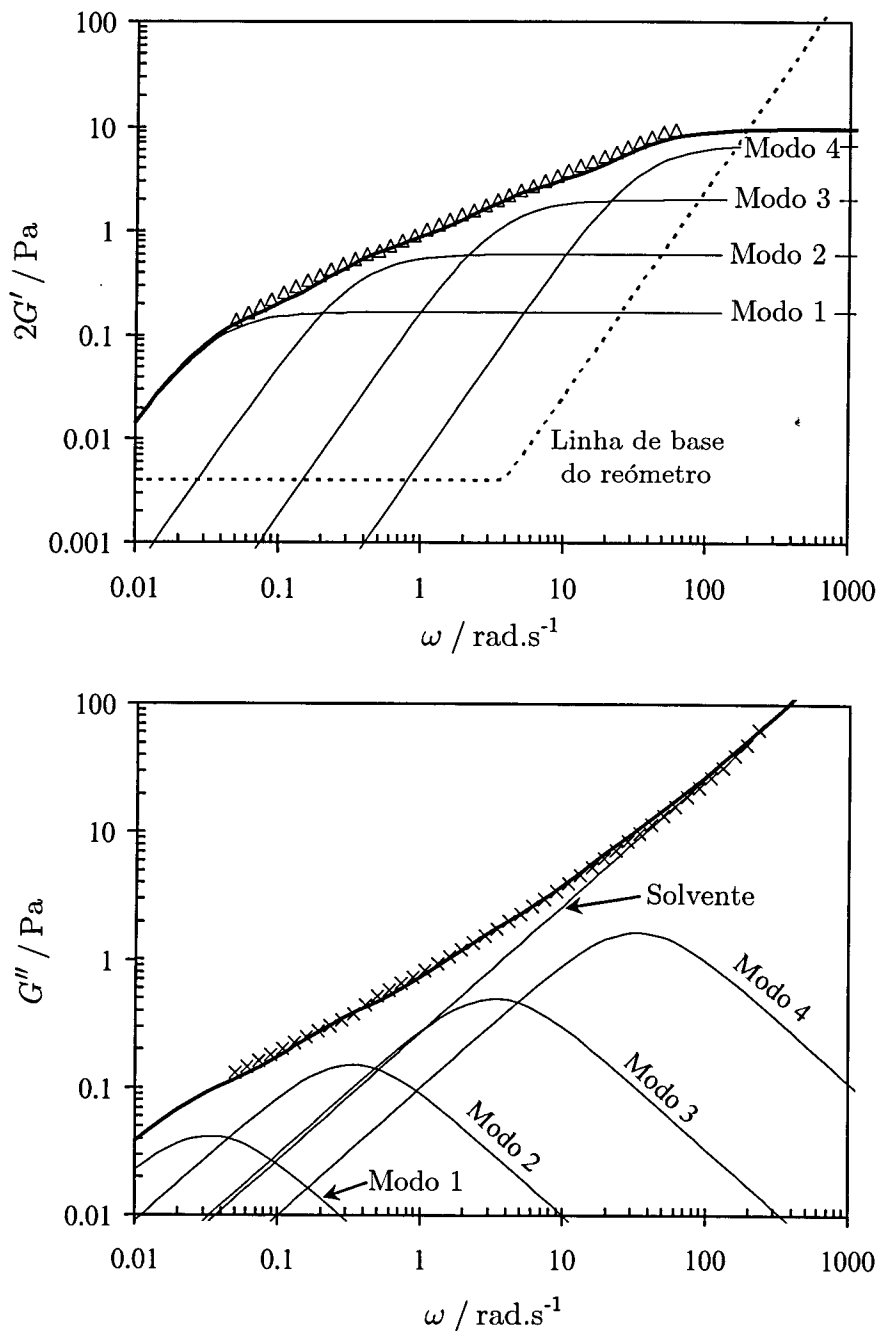


Figura 10.19: Funções materiais do fluido de Boger PAA500 em escoamento dinâmico de corte ($T = T_0 = 288.15 \text{ K}$), e comparação com as previsões do modelo multimodo: $\lambda_1 = 30.0 \text{ s}$, $\lambda_2 = 3.0 \text{ s}$, $\lambda_3 = 0.3 \text{ s}$, $\lambda_4 = 0.03 \text{ s}$; $\eta_1 = 2.5 \text{ Pa.s}$, $\eta_2 = 0.9 \text{ Pa.s}$, $\eta_3 = 0.3 \text{ Pa.s}$, $\eta_4 = 0.1 \text{ Pa.s}$; $\eta_s = 0.27 \text{ Pa.s}$.

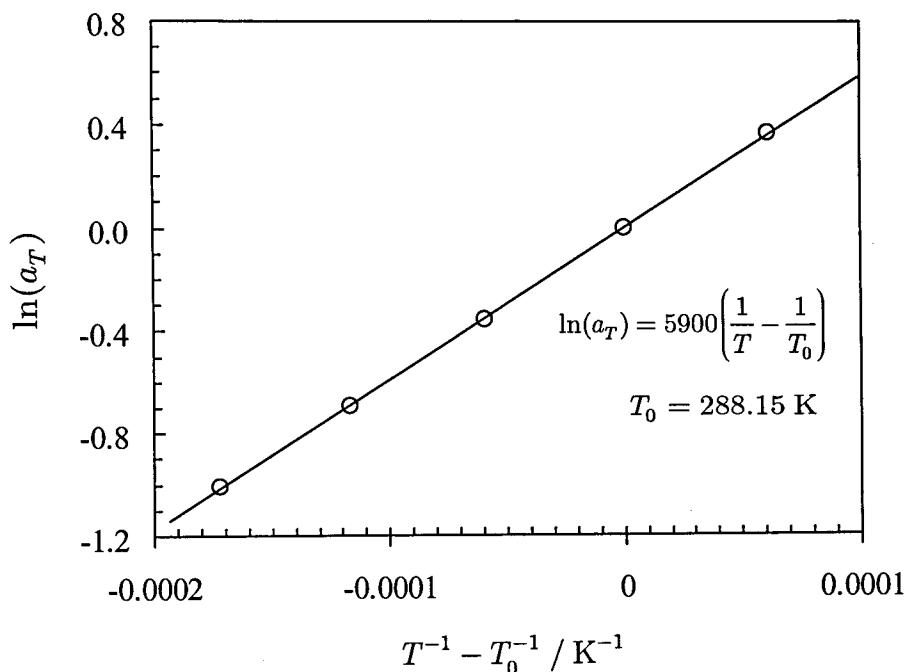


Figura 10.20: Influência da temperatura no factor de deslocamento, a_T , para o fluido PAA500.

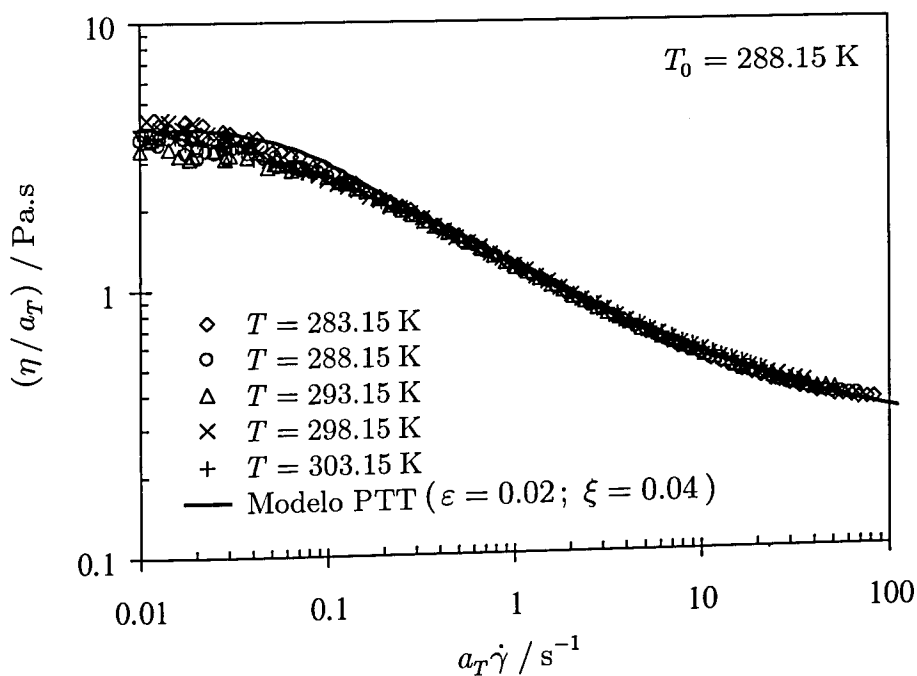


Figura 10.21: Viscosidade de corte reduzida em função da taxa de deformação reduzida para o fluido PAA500. Comparação com as previsões do modelo PTT linear multimodo.

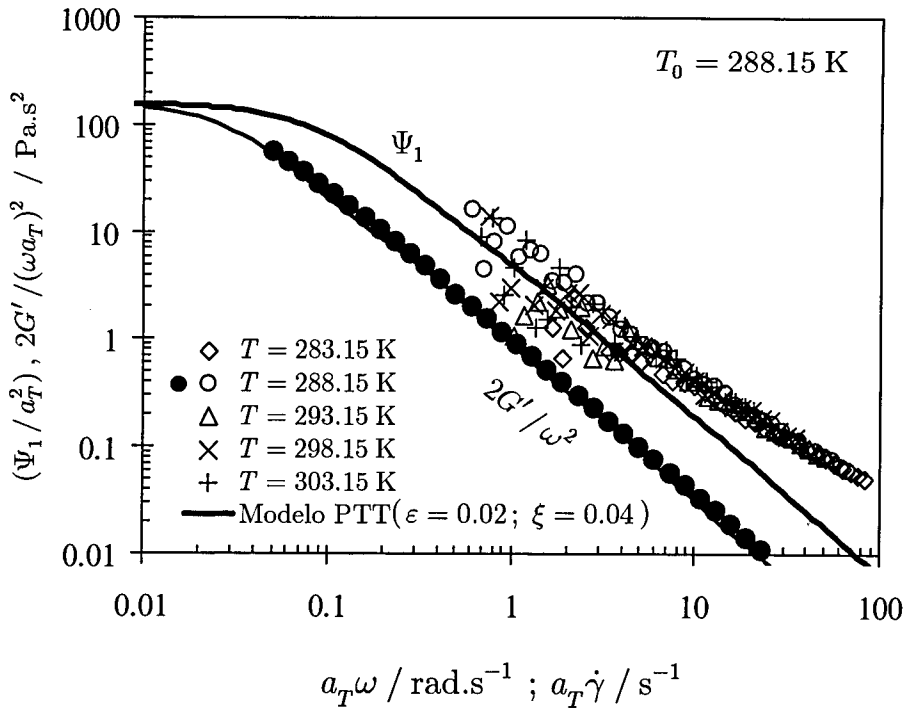


Figura 10.22: Coeficiente da primeira diferença de tensões normais e $2G'/\omega^2$ para o fluido PAA500. Comparação com as previsões do modelo PTT linear multimodo.

10.4 Visualização do escoamento e simulação numérica

10.4.1 Fluidos newtonianos

Foram efectuadas visualizações com os fluidos newtonianos N75 e N91 com o intuito de analisar o efeito da inércia no padrão de escoamento, e comparar com o efeito da elasticidade que será estudado com os fluidos viscoelásticos. Por outro lado, dado que a previsão do escoamento com fluidos newtonianos não oferece grandes dificuldades, é possível testar a adequação da técnica experimental de visualização do escoamento por confrontação com os resultados das simulações numéricas.

Na Figura 10.23 ilustra-se a influência do número de Reynolds no padrão de escoamento no plano central (vide Figura 10.24) para o escoamento na contracção quadrada tridimensional 4:1:1 (ou contracção SQ/SQ de razão de lados 4:1 – vide Figura 10.1). Os resultados numéricos reproduzem com boa precisão as visualizações, ilustrando que a inércia tende a *esmagar* o vórtice contra o canto, resultando numa diminuição da dimensão da recirculação com o aumento do número de Reynolds, aqui definido por

$$Re_1 = \frac{\rho U_1 H_1}{\eta} \quad (10.11)$$

Note-se que a recirculação não é fechada, contrariamente ao que acontece numa contracção plana ou axissimétrica. Na contracção tridimensional o padrão de escoamento é bastante complexo, como se ilustra na Figura 10.24, para condições de escoamento de Stokes. Todas as fotos apresentadas neste capítulo referem-se ao plano central (ilustrado na Figura 10.24 a amarelo, passando nos pontos A, B, C e D), uma vez que a visualização do escoamento no plano de simetria diagonal (ilustrado a azul na Figura 10.24) era mais complicada do ponto de vista experimental.

A Figura 10.24 mostra que as partículas de fluido provenientes da vizinhança do canto H entram na recirculação do plano diagonal (junto ao canto F), sendo depois conduzidas num movimento em espiral até ao centro da recirculação do plano central. Seguidamente, o fluido roda em direcção à periferia desta recirculação, acabando por sair em direcção à conduta de jusante. Na Figura 10.25 é possível confirmar que a recirculação do plano central é aberta, observando-se uma deslocação do fluido do centro da recirculação em direcção à sua periferia, acabando por escapar-se em direcção à conduta de jusante. Na recirculação do plano diagonal o padrão de escoamento é oposto: o fluido entra na recirculação pela sua periferia, e roda em direcção ao seu centro, de onde se escapa rumo à recirculação do plano central.

Na Figura 10.26 ilustra-se a influência do número de Reynolds no padrão de escoamento de um fluido newtoniano no plano central da expansão quadrada tridimensional. Novamente, verifica-se que os resultados numéricos reproduzem com boa precisão as visualizações experimentais, observando-se um crescimento significativo da dimensão da recirculação com o número de Reynolds.

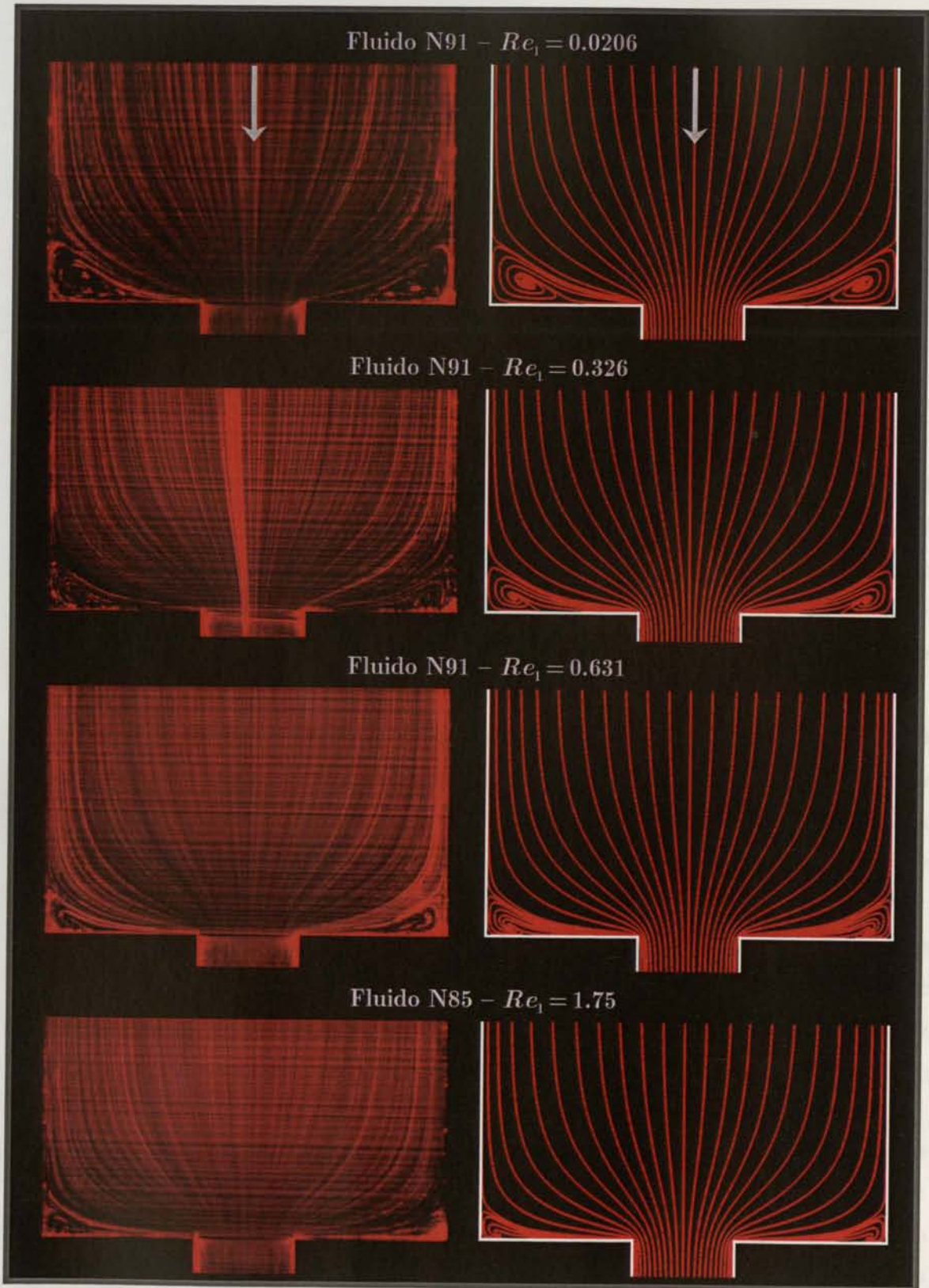


Figura 10.23: Linhas de rasto observadas experimentalmente (coluna da esquerda) e comparação com as simulações numéricas (coluna da direita) para o escoamento dos fluidos newtonianos N91 e N85 na contracção 4:1:1. Influência do número de Reynolds no padrão de escoamento observado no plano central da contracção. As visualizações decorreram à temperatura de $18.0 \pm 0.2^\circ\text{C}$.

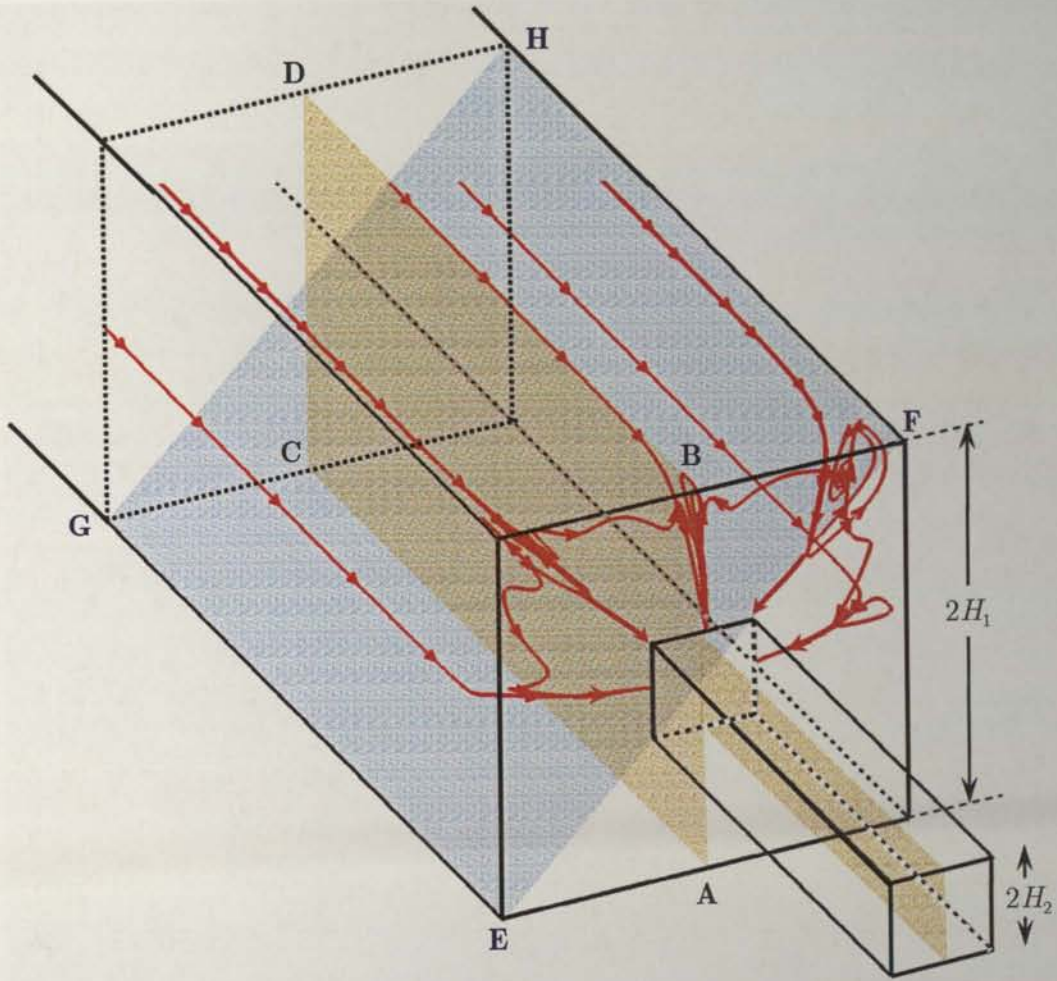


Figura 10.24: Escoamento de um fluido newtoniano na contração tridimensional 4:1:1, em condições de inércia desprezável ($Re_1 = 0$). Ilustração de algumas trajetórias que atravessam a recirculação do plano central (representado a amarelo, passando nos pontos ABCD) e a recirculação do plano diagonal (a azul, passando nos pontos EFGH).

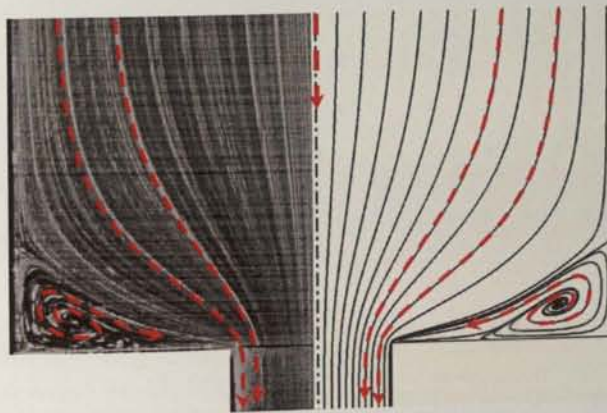


Figura 10.25: Escoamento do fluido newtoniano N91 no plano central da contração tridimensional 4:1:1, em condições de inércia desprezável ($Re_1 = 0.0085$). Comparação com as linhas de corrente previstas numericamente.

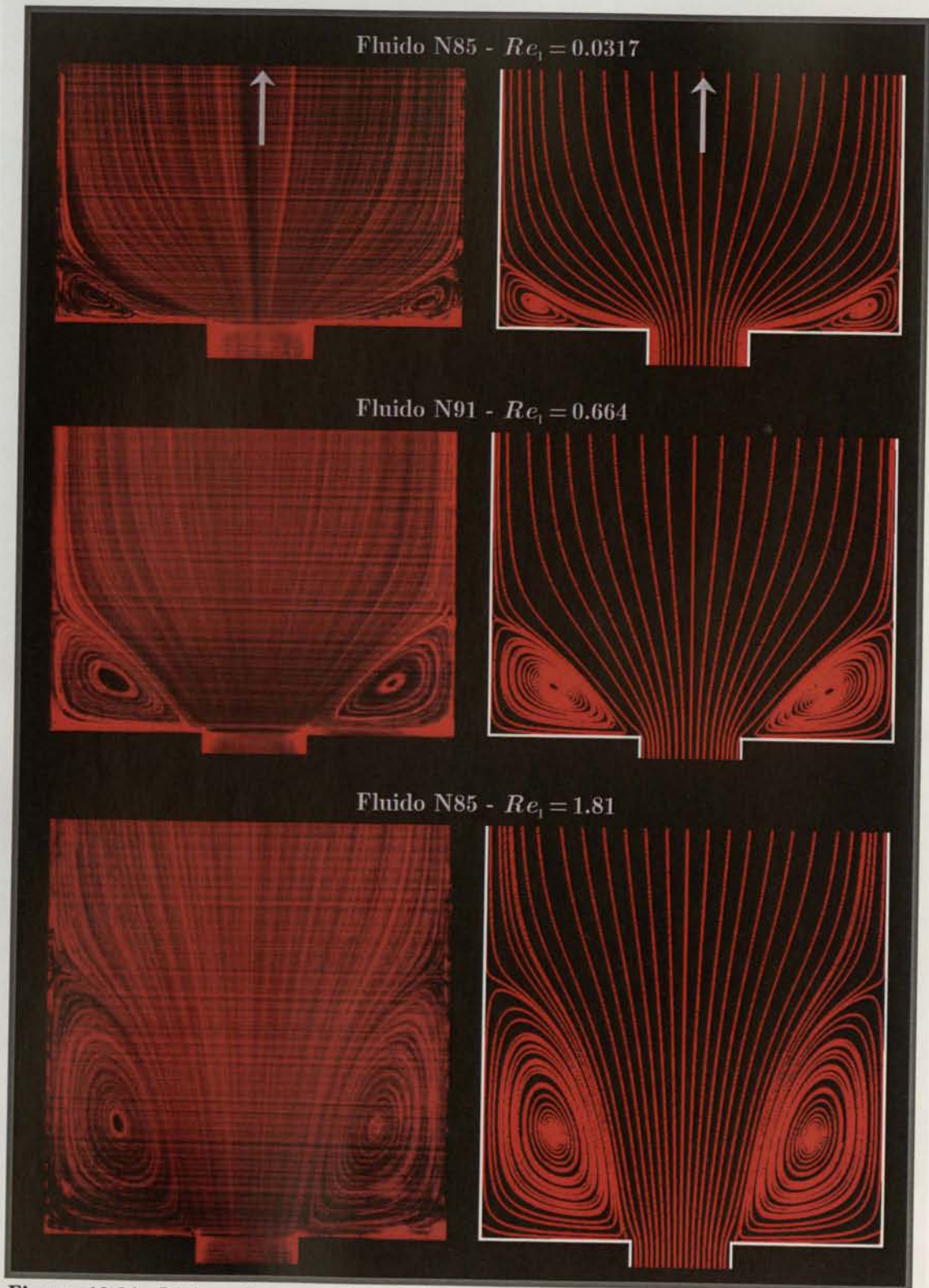


Figura 10.26: Linhas de rasto observadas experimentalmente (coluna da esquerda) e comparação com as simulações numéricas (coluna da direita) para o escoamento dos fluidos newtonianos N91 e N85 na expansão tridimensional. Influência do número de Reynolds no padrão de escoamento observado no plano central da contracção. As visualizações decorreram à temperatura de 18.0 ± 0.2 °C.

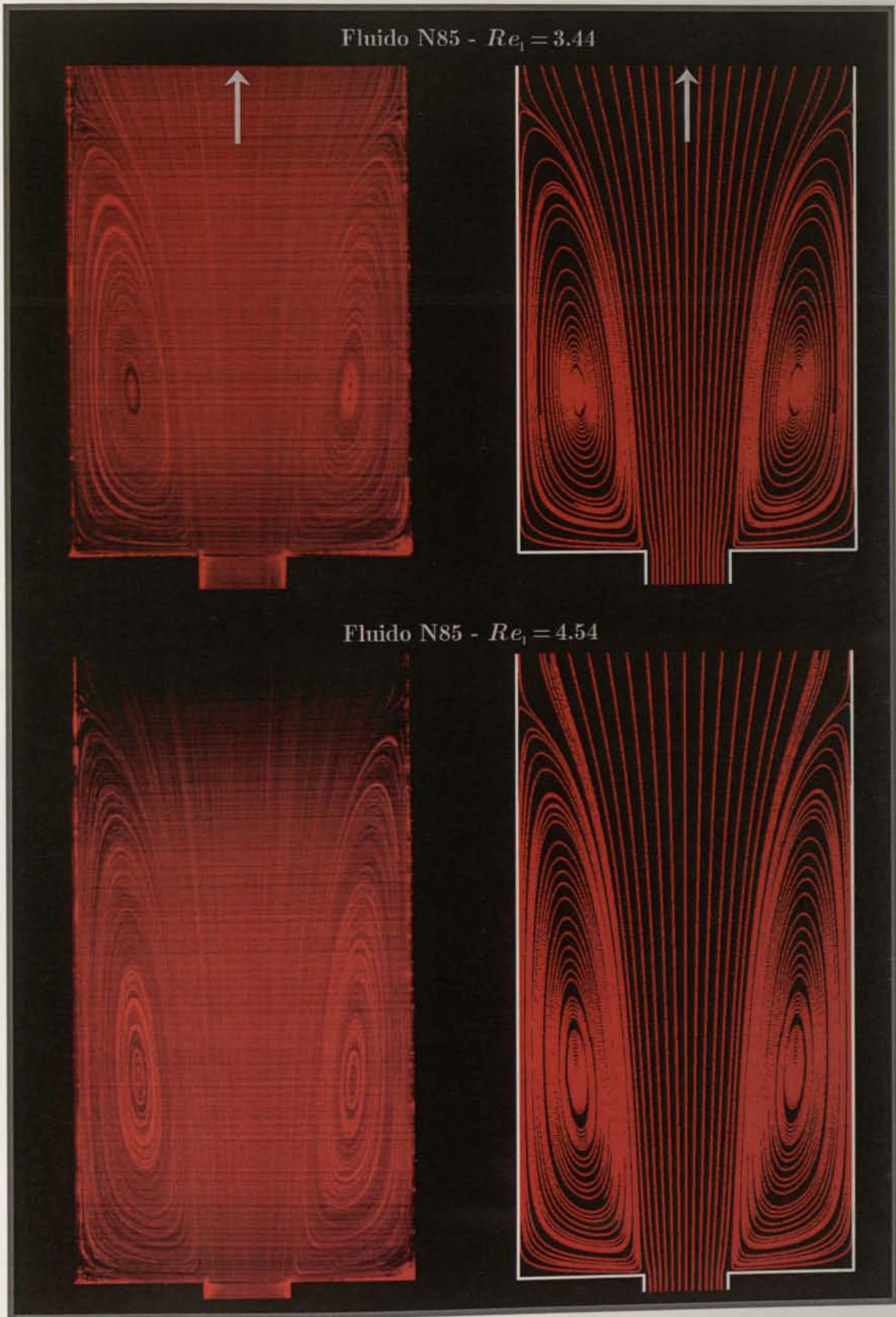


Figura 10.26: Conclusão.

Na Figura 10.27 ilustram-se algumas trajetórias para o escoamento de um fluido newtoniano na expansão, para $Re_1 = 0.021$ e $Re_1 = 1.17$. No primeiro caso, dado que a inércia ainda é desprezável verifica-se que as trajetórias são simétricas às ilustradas na Figura 10.24, para o escoamento na contracção em regime de Stokes. Tal observação deve-se aos escoamentos newtonianos a baixo número de Reynolds serem reversíveis (Acheson, 1990), o que faz com que as linhas de corrente para o escoamento na contracção e na expansão sejam coincidentes. A Figura 10.26 dá a falsa ideia que a recirculação no plano central é fechada para os valores mais elevados do número de Reynolds. Contudo, tal facto não corresponde à realidade como se pode observar na Figura 10.27 para o caso $Re_1 = 1.17$. Na realidade, o aumento de Re faz com que o escoamento seja mais espiralado entre a recirculação no plano central e no plano diagonal, mas não evita a deslocação do fluido de uma recirculação para a outra e a sua subsequente libertação para jusante.

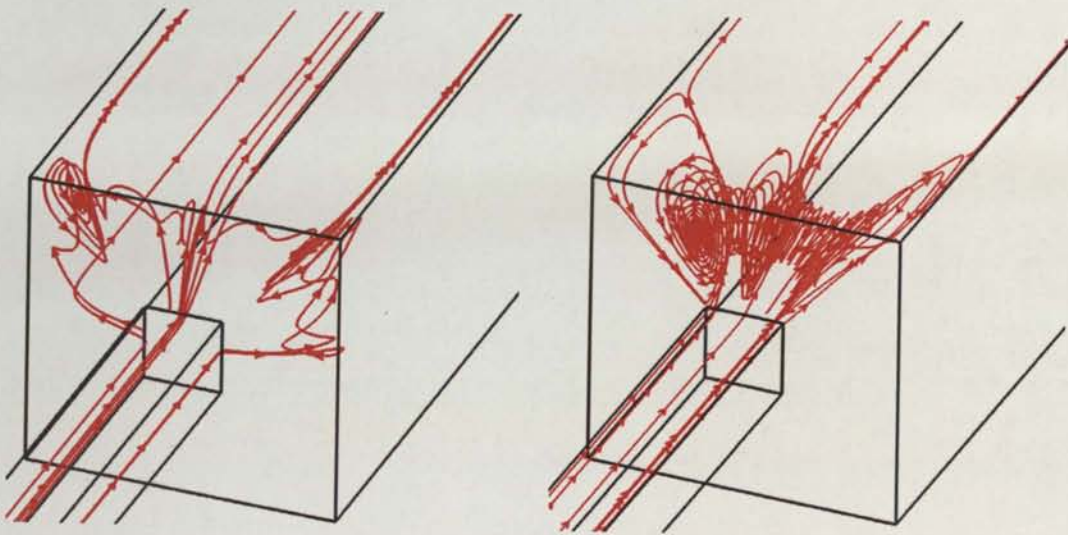


Figura 10.27: Escoamento de um fluido newtoniano na expansão tridimensional a $Re_1 = 0.021$ (inércia desprezável) e $Re_1 = 1.17$.

Na Figura 10.28 apresentam-se os resultados numéricos do comprimento da recirculação do plano central, x_R , em função do número de Reynolds. Os cálculos foram efectuados em duas malhas computacionais, M40 e M80, que se reproduzem na Figura 10.29. A malha M40 possui 40 células em ambas as direcções perpendiculares ao escoamento (na conduta 1, de maior lado), totalizando 51 000 células. A malha M80 possui 80 células em ambas as direcções perpendiculares ao

escoamento (na conduta 1), totalizando 408 000 células. Os resultados obtidos em ambas as malhas são praticamente coincidentes (cf. Figura 10.28), o que demonstra que a malha M40 é já adequada para resolver este escoamento.

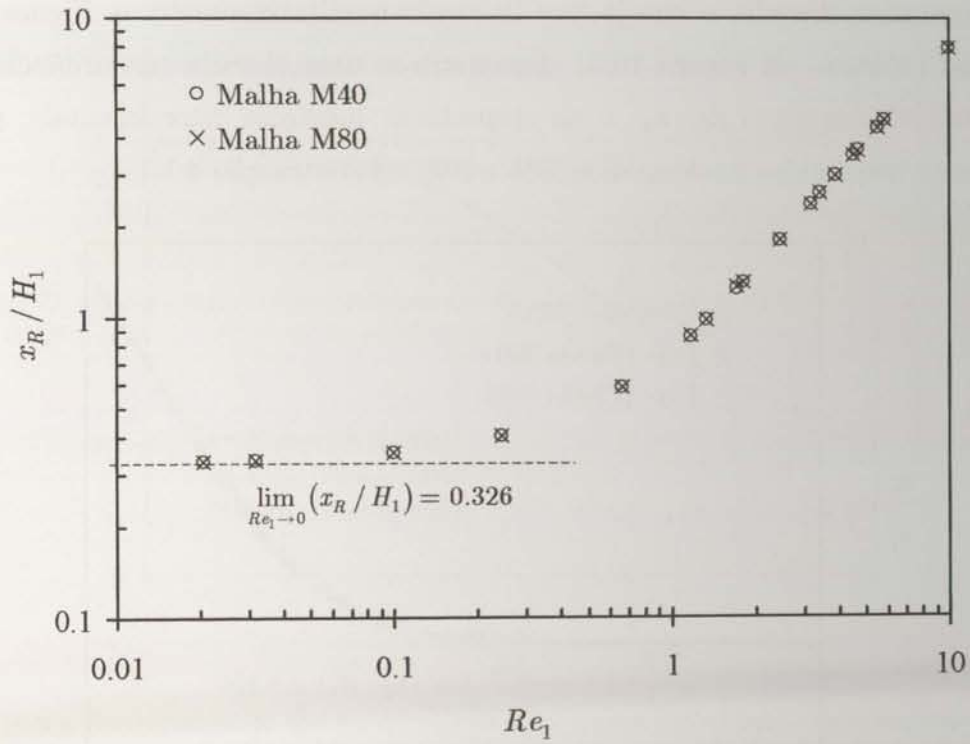


Figura 10.28: Escoamento de um fluido newtoniano numa expansão tridimensional 1:4:4. Influência do número de Reynolds no comprimento da recirculação do plano central, x_R . Resultados obtidos em duas malhas computacionais, M40 e M80, ilustradas na Figura 10.29.

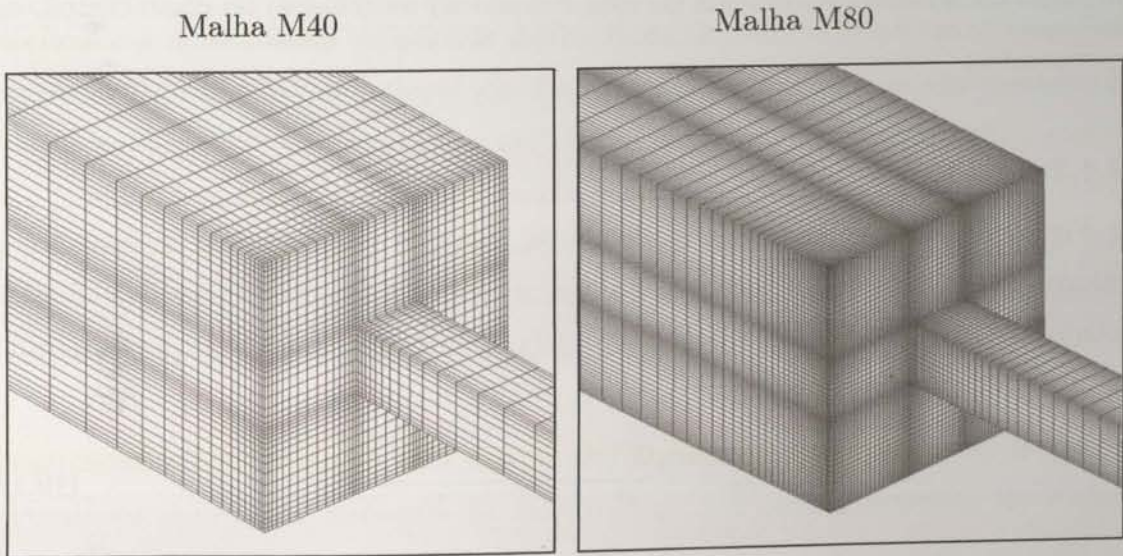


Figura 10.29: Vista local das malhas computacionais usadas na simulação do escoamento de um fluido newtoniano numa contracção e numa expansão tridimensional.

Na Figura 10.30 comparam-se os resultados numéricos do comprimento da recirculação com os valores experimentais, determinados por medição nas fotografias. A concordância entre os resultados numéricos e as medições experimentais é elevada, o que já fora ilustrado qualitativamente na Figura 10.26. De forma idêntica, na Figura 10.31 demonstra-se uma elevada concordância entre as previsões numéricas de x_R e as respectivas medições experimentais, para o escoamento dos fluidos newtonianos N85 e N91 na contracção 4:1:1.

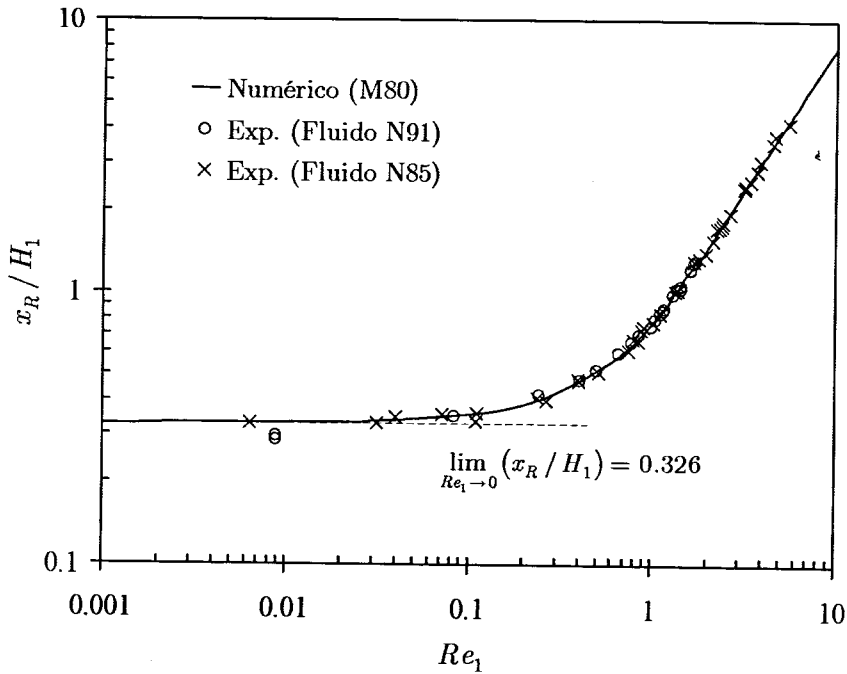


Figura 10.30: Escoamento de um fluido newtoniano numa expansão tridimensional 1:4:4. Influência do número de Reynolds no comprimento da recirculação do plano central, x_R . Comparação entre os resultados obtidos nas simulações numéricas e as medições experimentais.

10.4.2 Fluido PAA100

Na Figura 10.32 apresentam-se as linhas de rasto no plano central da contracção, obtidas com o fluido PAA100 para valores sucessivamente crescentes do caudal de escoamento. Os valores do número de Débora incluídos nessa figura são obtidos por,

$$De_1 \equiv \frac{\lambda_p(T) U_1}{H_1} = \frac{a_T \lambda_p(T_0) U_1}{H_1} \quad (10.12)$$

em que o tempo de relaxação do modelo Oldroyd-B à temperatura de referência, $\lambda_p(T_0)$, é calculado pela Eq. (10.7), usando os parâmetros da Tabela 10.2. O

número de Reynolds é obtido a partir da Eq. (10.11), com $\eta(T) = a_T \eta_0(T_0) = a_T [\eta_s(T_0) + \eta_p(T_0)]$.

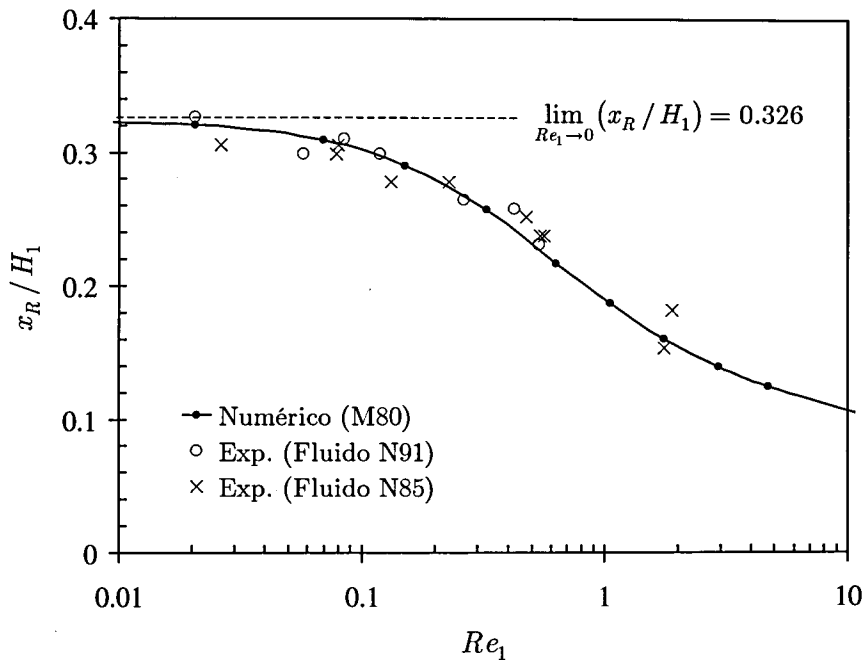


Figura 10.31: Escoamento de um fluido newtoniano numa contracção tridimensional 4:1:1. Influência do número de Reynolds no comprimento da recirculação do plano central, x_R . Comparação entre os resultados obtidos nas simulações numéricas e as medições experimentais.

O padrão de escoamento observado com o fluido de Boger PAA100 é algo complexo, estando em jogo predominantemente efeitos elásticos, uma vez que a inércia não é ainda muito significativa ($Re_1 \leq 0.11$), como se pode confirmar pela Figura 10.31. Para baixos valores de De_1 observa-se um padrão de escoamento idêntico ao de um fluido newtoniano em condições de inércia desprezável, o que de resto já era esperado. Aumentando o caudal verifica-se uma diminuição progressiva do comprimento da recirculação, acabando esta por desaparecer a $De_1 \cong 0.2$. Apesar deste comportamento ser idêntico ao observado com os fluidos newtonianos (diminuição do comprimento da recirculação com o aumento do caudal), deve-se salientar que a causa é distinta em ambas os tipos de fluidos. A diminuição do comprimento da recirculação com o aumento do caudal observada com os fluidos newtonianos deve-se ao aumento da inércia, que nos casos ilustrados na Figura 10.32 com o fluido PAA100 é praticamente desprezável. Assim, a diminuição do comprimento da recirculação observada para o fluido PAA100 a baixos caudais deverá ter uma origem elástica.

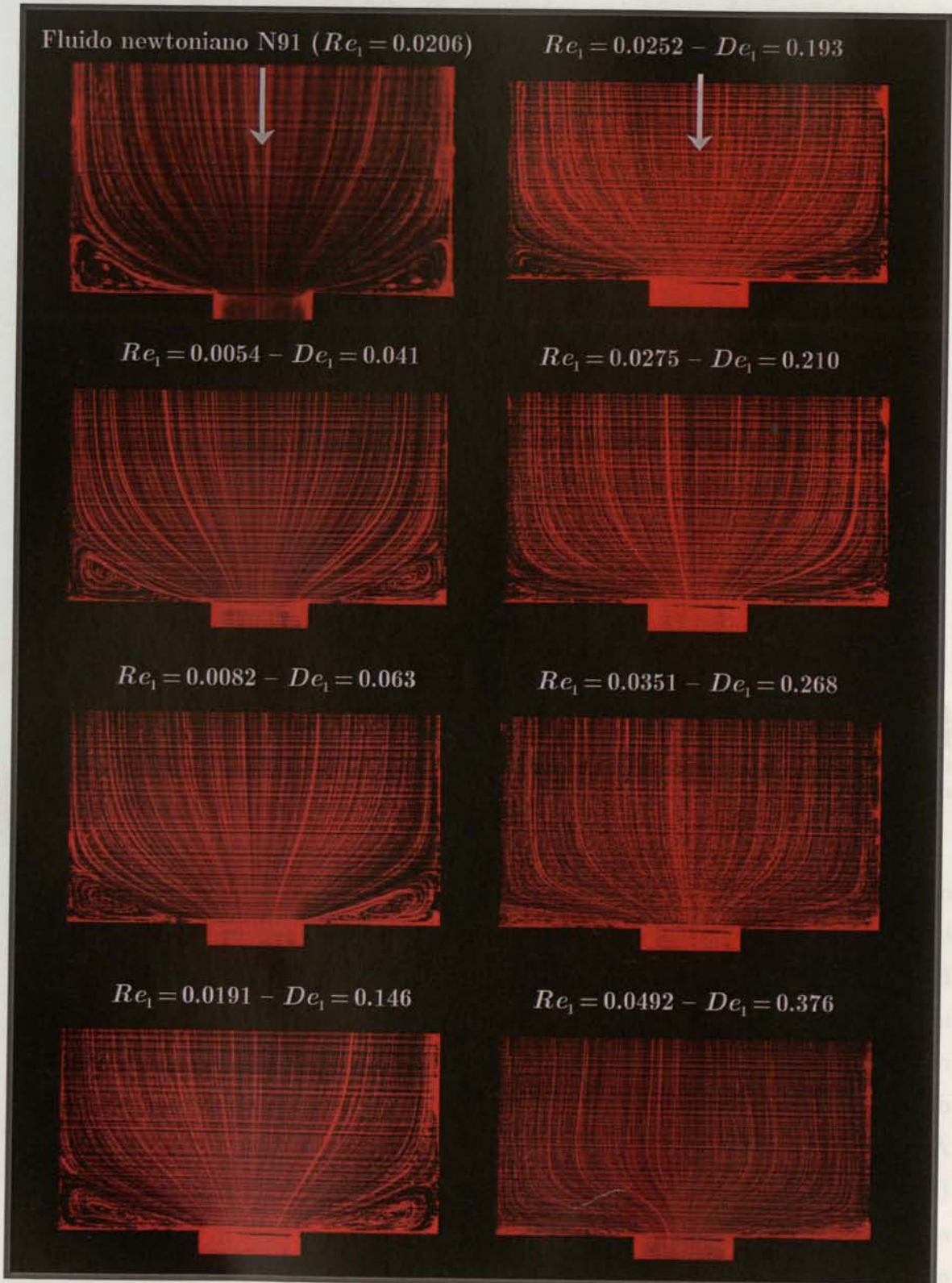


Figura 10.32: Linhas de rasto observadas experimentalmente para o escoamento do fluido de Boger PAA100 na contracção 4:1:1. Influência do número de Débora no padrão de escoamento observado no plano central da contracção. As visualizações decorreram à temperatura de $18.1 \pm 0.2^\circ\text{C}$. A fotografia apresentada no canto superior esquerdo foi obtida com o fluido newtoniano N91, servindo para comparar com o padrão de escoamento obtido com o fluido PAA100 a baixos valores de De_1 .

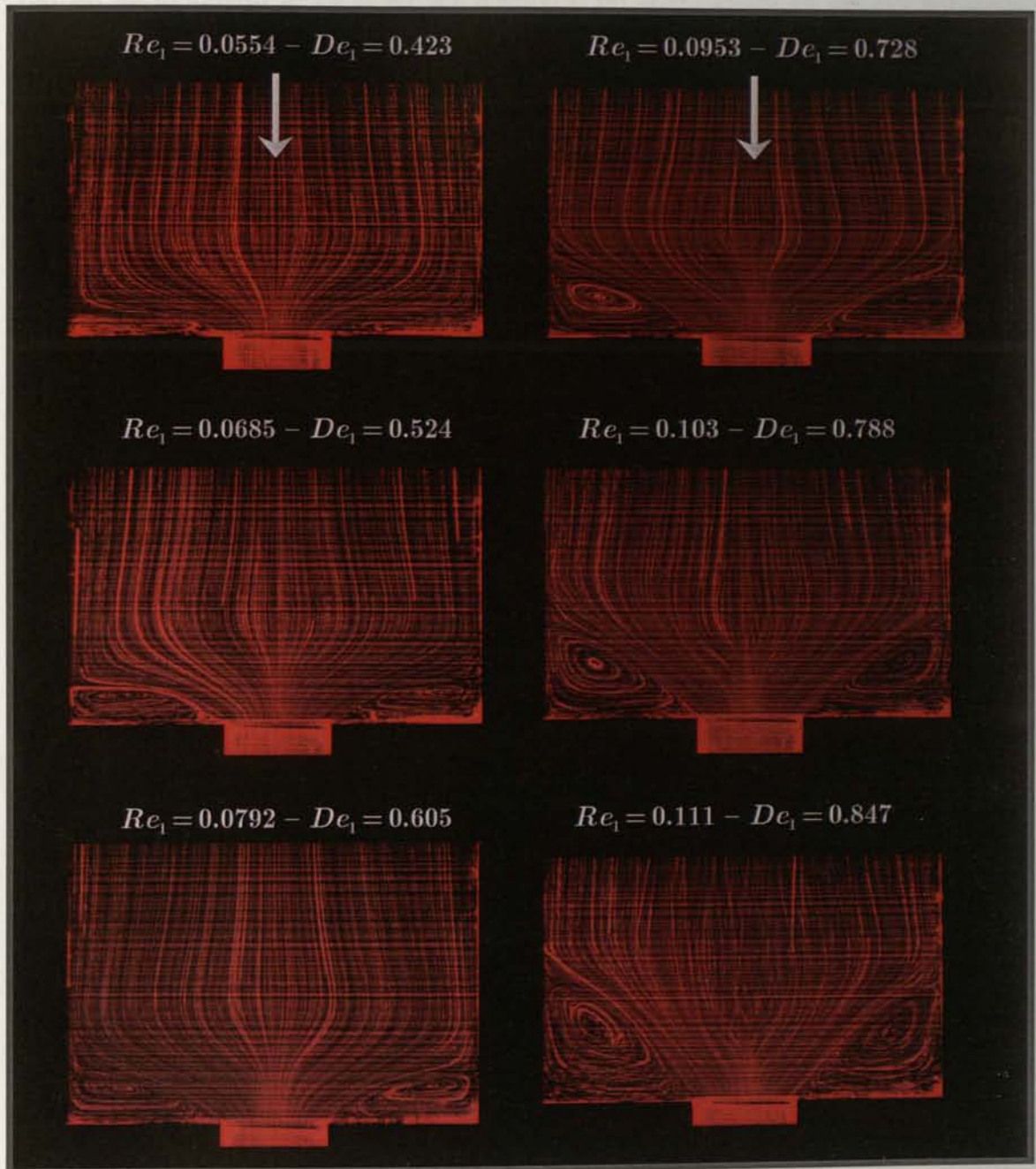


Figura 10.32: Conclusão.

Para valores de De_1 superiores a 0.2 observa-se uma inversão no padrão de escoamento, ocorrendo um crescimento da recirculação com o aumento do caudal (ou, mais correctamente, com De_1). Para $De_1 \geq 0.423$ observa-se um padrão divergente das linhas de corrente a montante da contracção, que se acentua com o aumento da elasticidade. Este fenómeno *anómalo* foi previsto numericamente na Secção 6.3.2, para o escoamento de um fluido de Boger numa contracção plana 4:1

a elevados valores da elasticidade (cf. Figura 6.5 a $De = 5$). A origem deste padrão divergente das linhas de corrente a montante da contracção poderá ser causada por um aumento acentuado da viscosidade elongacional do fluido (para os fluidos UCM e Oldroyd-B observa-se uma singularidade na viscosidade elongacional a $\lambda\dot{\epsilon} = 1/2$ - vide Tabela 3.1), conduzindo a uma maior resistência ao escoamento na região central da conduta imediatamente a montante da contracção, onde o escoamento tem um carácter predominantemente elongacional, originando um desaceleramento do fluido nessa região com a consequente divergência das linhas de corrente.

Para $De_1 = 0.847$ verifica-se que o escoamento já não tem carácter permanente (observa-se o cruzamento de alguns rastos de partículas), possivelmente devido a uma instabilidade elástica, que origina um escoamento variável, com carácter oscilatório. Aumentando ainda mais o caudal a amplitude das oscilações do escoamento acentua-se, como se ilustra na Figura 10.33. Efectuaram-se filmagens do escoamento no plano central da contracção que permitiram confirmar que nestas condições supercríticas, o escoamento apresenta um comportamento oscilatório perfeitamente ordenado, que se reproduz na Figura 10.33 em três “instantes” característicos do ciclo.

Também se efectuaram visualizações do escoamento do fluido PAA100 na expansão tridimensional, que se reproduzem na Figura 10.34. Contrariamente ao observado com os fluidos newtonianos, em que o aumento do caudal (inércia) conduz a um crescimento progressivo da recirculação do plano central, com o fluido de Boger PAA100 observa-se uma diminuição significativa da recirculação para baixos valores de De_1 , seguida de uma aparente estagnação da dimensão da recirculação para valores sucessivamente crescentes de De_1 .



Figura 10.33: Linhas de rasto observadas experimentalmente com o fluido PAA100 no plano central da contração 4:1 em condições de escoamento variável. Ilustração de três fases do ciclo de oscilação do escoamento. As visualizações decorreram à temperatura de 18.1 °C.

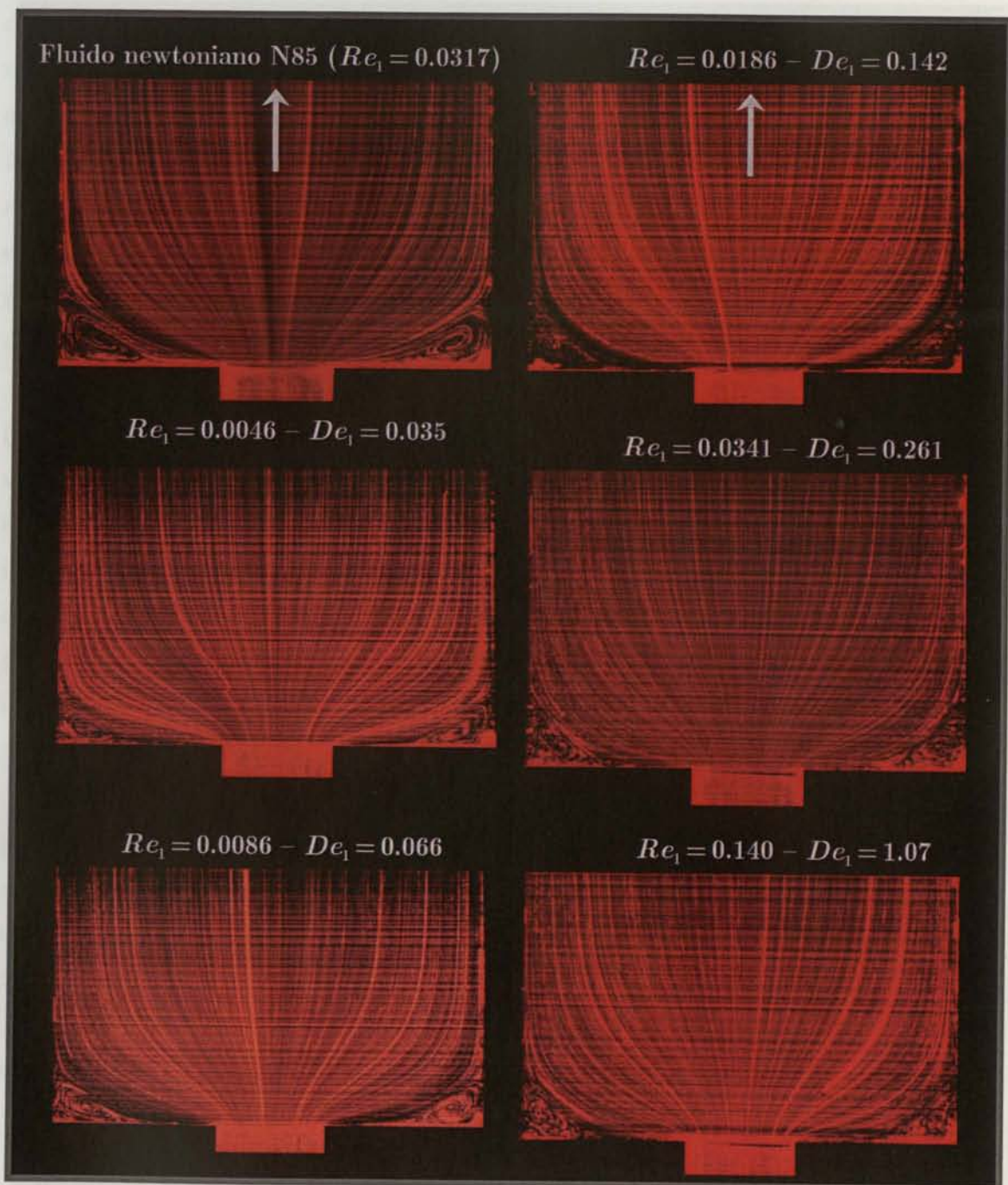


Figura 10.34: Linhas de rasto observadas experimentalmente para o escoamento do fluido de Boger PAA100 na expansão 1:4:4. Influência do número de Débora no padrão de escoamento observado no plano central da contracção. As visualizações decorreram à temperatura de $18.1 \pm 0.2^\circ\text{C}$. A fotografia apresentada no canto superior esquerdo foi obtida com o fluido newtoniano N85, servindo para comparar com o padrão de escoamento obtido com o fluido PAA100 a baixos valores de De_1 .

10.4.3 Fluido PAA300

Tal como para o fluido PAA100, efectuaram-se visualizações do escoamento do fluido PAA300 na contracção 4:1:1 para diferentes caudais, que se apresentam nas Figuras 10.35 e 10.36 para as temperaturas de 21.0 e 17.5 °C, respectivamente. Os ensaios foram efectuados em períodos distintos, com 3 meses de interregno, ilustrando a reprodutibilidade dos resultados e a não degradação do fluido, que por precaução foi mantido num frigorífico no período em que não foi usado, evitando assim a ocorrência de degradação biológica por possível crescimento de microorganismos (note-se que a solução também possui um forte agente biocida).

Globalmente, a influência da elasticidade no padrão de escoamento do fluido PAA300 é semelhante à observada com o fluido PAA100, existindo pequenas diferenças que releva destacar. Inicialmente, para baixos valores da elasticidade do escoamento, observa-se um ligeiro aumento do comprimento da recirculação do plano central com De_1 . Seguidamente, para valores de De_1 compreendidos entre 0.1 e 0.2, verifica-se uma diminuição acentuada de x_R com De_1 , como se demonstra quantitativamente na Figura 10.37. Para $De_1 = 0.135$ a recirculação do plano central passa a ser uma recirculação de entrada, e não de canto como ocorre para valores inferiores de De_1 . Em particular, para $De_1 = 0.149$ verifica-se que a recirculação principal é claramente de entrada, em analogia com a tendência prevista para o escoamento de fluidos de Boger numa contracção plana 4:1 (cf. Figura 6.5 para um fluido UCM; Figura 9.6 para um fluido Oldroyd-B). Para o escoamento de um fluido de Boger numa contracção plana 4:1 existem evidências experimentais e numéricas (e.g., Nigen e Walters, 2002; Walters e Webster, 2003) que apontam para o aparecimento de um vórtice de entrada a valores baixos a moderados da elasticidade, e que acaba por dominar o vórtice de canto que é característico do escoamento a baixos valores de Débora. Em contrapartida, para o escoamento de fluidos de Boger numa contracção axissimétrica 4:1, é frequente observar-se um mecanismo de crescimento do vórtice de canto com o aumento da elasticidade do escoamento, sem ocorrer a existência de qualquer vórtice de entrada. Dada a maior analogia da contracção tridimensional 4:1:1 com a contracção axissimétrica 4:1 (a velocidade na conduta de jusante aumenta apenas 4 vezes na contracção plana 4:1, em contraste com um aumento de 16 vezes nas contracções axissimétrica 4:1 e SQ/SQ 4:1:1), seria previsível a inexistência de uma recirculação de entrada na contracção 3D 4:1:1. Na realidade, em Evans e Walters

(1986) observou-se um mecanismo de crescimento do vórtice de canto com o aumento da elasticidade, para o escoamento de um fluido de Boger numa contracção SQ/SQ 16:1:1. Em contraste, no presente trabalho para o escoamento do fluido de Boger PAA300 na contracção 4:1:1 observa-se um mecanismo completamente distinto, com o aparecimento de uma recirculação de entrada claramente definida, em analogia com o escoamento de um fluido de Boger numa contracção plana. Assim, a Figura 10.35 (e em particular a fotografia referente a $De_1 = 0.149$) tem uma importância acrescida, no sentido em que traduz o primeiro estudo experimental em que se observa a presença de uma recirculação de entrada para o escoamento de um fluido de Boger numa contracção tridimensional do tipo SQ/SQ.

Para valores de $De_1 > 0.2$ observa-se uma inversão do padrão de escoamento ocorrendo um aumento do comprimento da recirculação com o aumento do número de Débora, como se ilustra na Figura 10.37. Para os valores de De_1 mais elevados, as Figuras 10.35 e 10.36 mostram o aparecimento do escoamento divergente no eixo central, de forma idêntica ao observado com o fluido PAA100.

Na fotografia referente a $De_1 = 0.726$, apresentada na Figura 10.36, já é visível o cruzamento de algumas linhas de rasto, o que sugere que a instabilidade elástica deverá ocorrer a $De_1 \cong 0.7$, valor este ligeiramente inferior ao observado com o fluido PAA100.

Nas Figuras 10.38 e 10.39 apresentam-se as linhas de rasto em três “instantes” característicos do ciclo de oscilação do escoamento do fluido PAA300 em condições super-críticas, respectivamente para $De_1 = 0.857$ e 0.956 . A Figura 10.38 corresponde a uma situação próxima das condições críticas, sendo visível um mecanismo de oscilação do escoamento semelhante ao ilustrado na Figura 10.39 para um valor de De_1 mais elevado (note-se a similaridade entre as fotografias no topo das Figuras 10.38 e 10.39). Em condições super-críticas observa-se um aumento da amplitude e frequência das oscilações à medida que se aumenta o caudal (ou De_1), como se constatou nas filmagens efectuadas com este fluido.

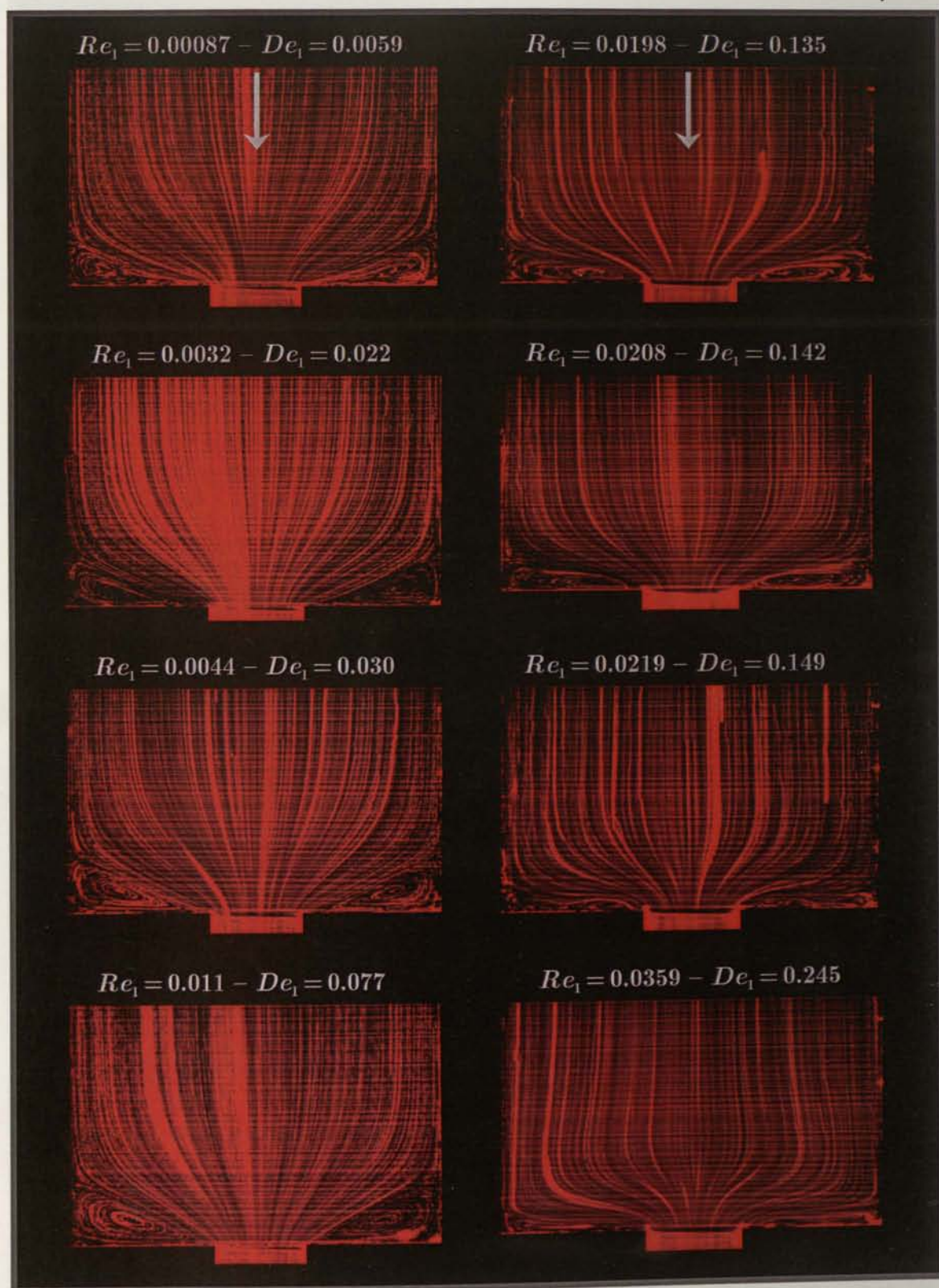


Figura 10.35: Linhas de rasto observadas experimentalmente para o escoamento do fluido de Boger PAA300 na contracção 4:1:1. Influência do número de Débora no padrão de escoamento observado no plano central da contracção. As visualizações decorreram à temperatura de $21.0 \pm 0.2^\circ\text{C}$.

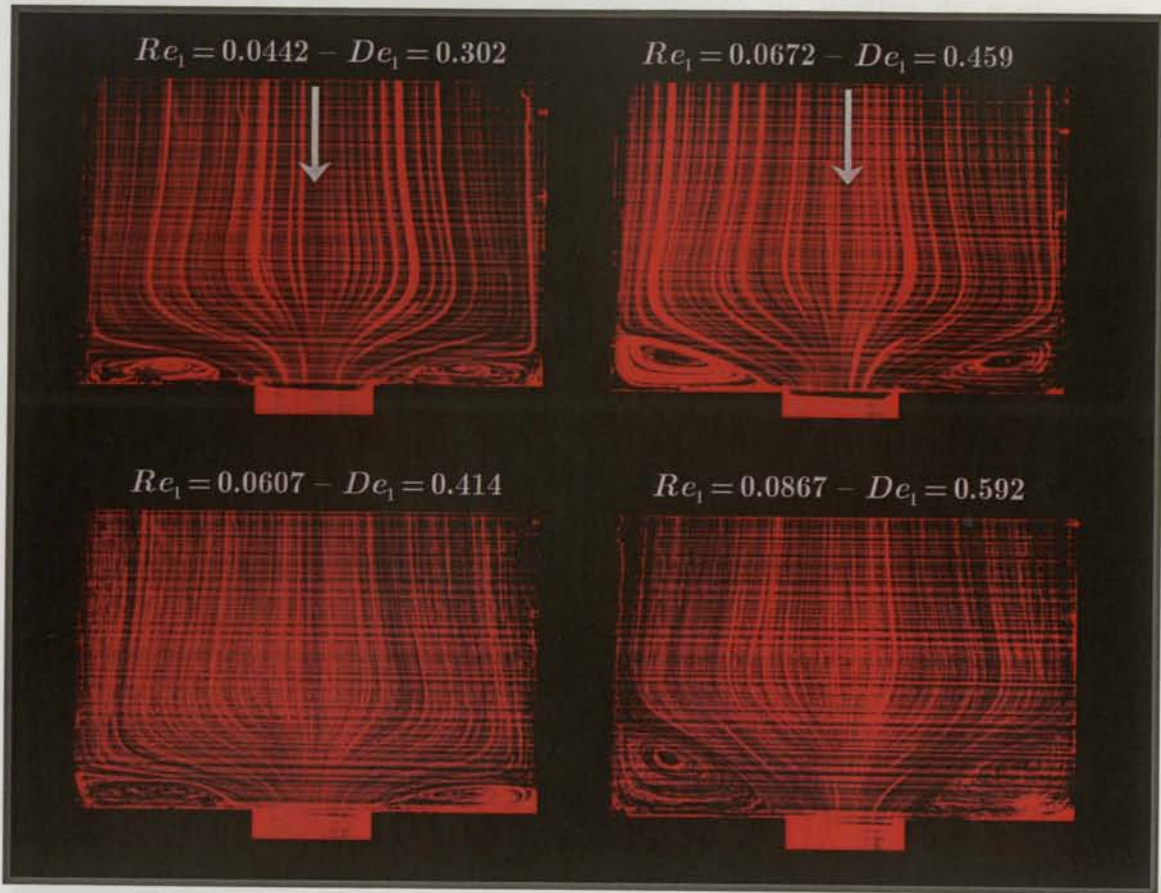


Figura 10.35: Conclusão.

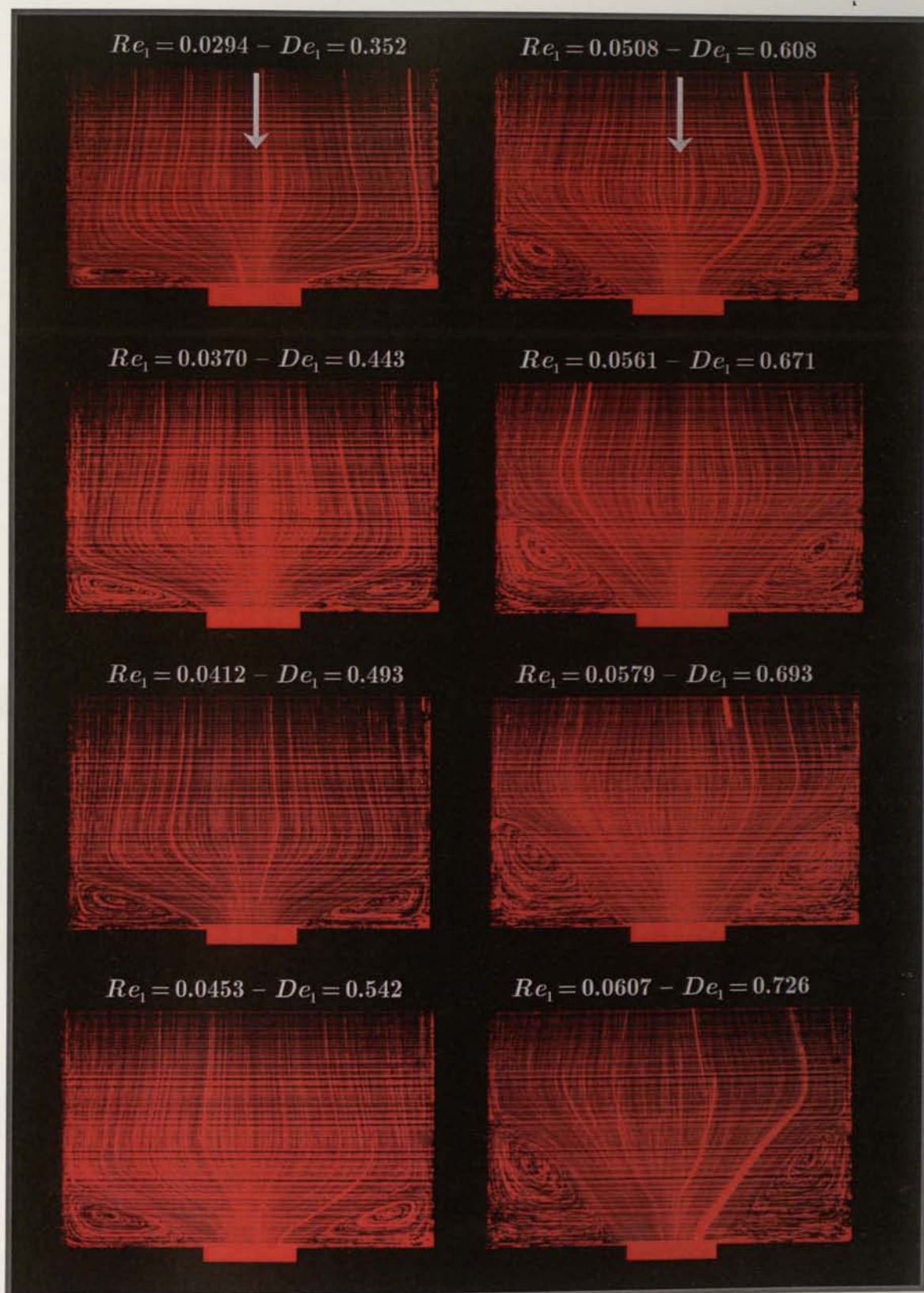


Figura 10.36: Linhas de rasto observadas experimentalmente para o escoamento do fluido de Boger PAA300 na contração 4:1:1. Influência do número de Débora no padrão de escoamento observado no plano central da contração. As visualizações decorreram à temperatura de $17.5 \pm 0.2^\circ\text{C}$.

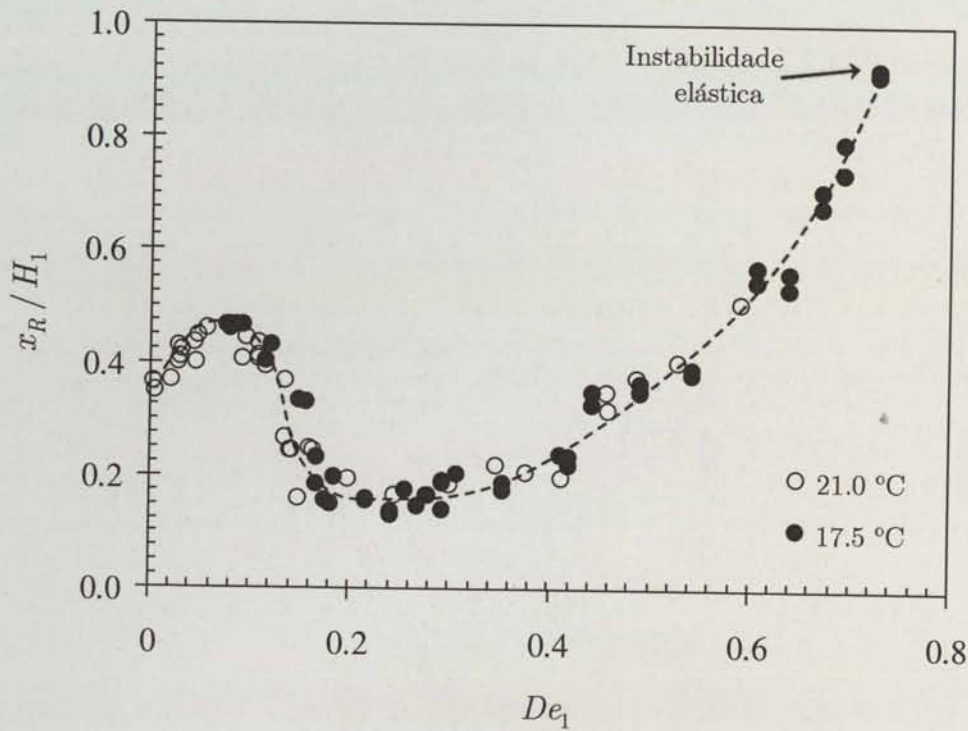


Figura 10.37: Escoamento do fluido de Boger PAA300 na contração tridimensional 4:1:1. Influência do número de Débora no comprimento da recirculação do plano central, x_R .

Também foram efectuadas visualizações do escoamento do fluido PAA300 na expansão 1:4:4, que permitiram confirmar as observações efectuadas com o fluido PAA100, nomeadamente a diminuição da recirculação de canto com o aumento da elasticidade, como se vê na Figura 10.40.

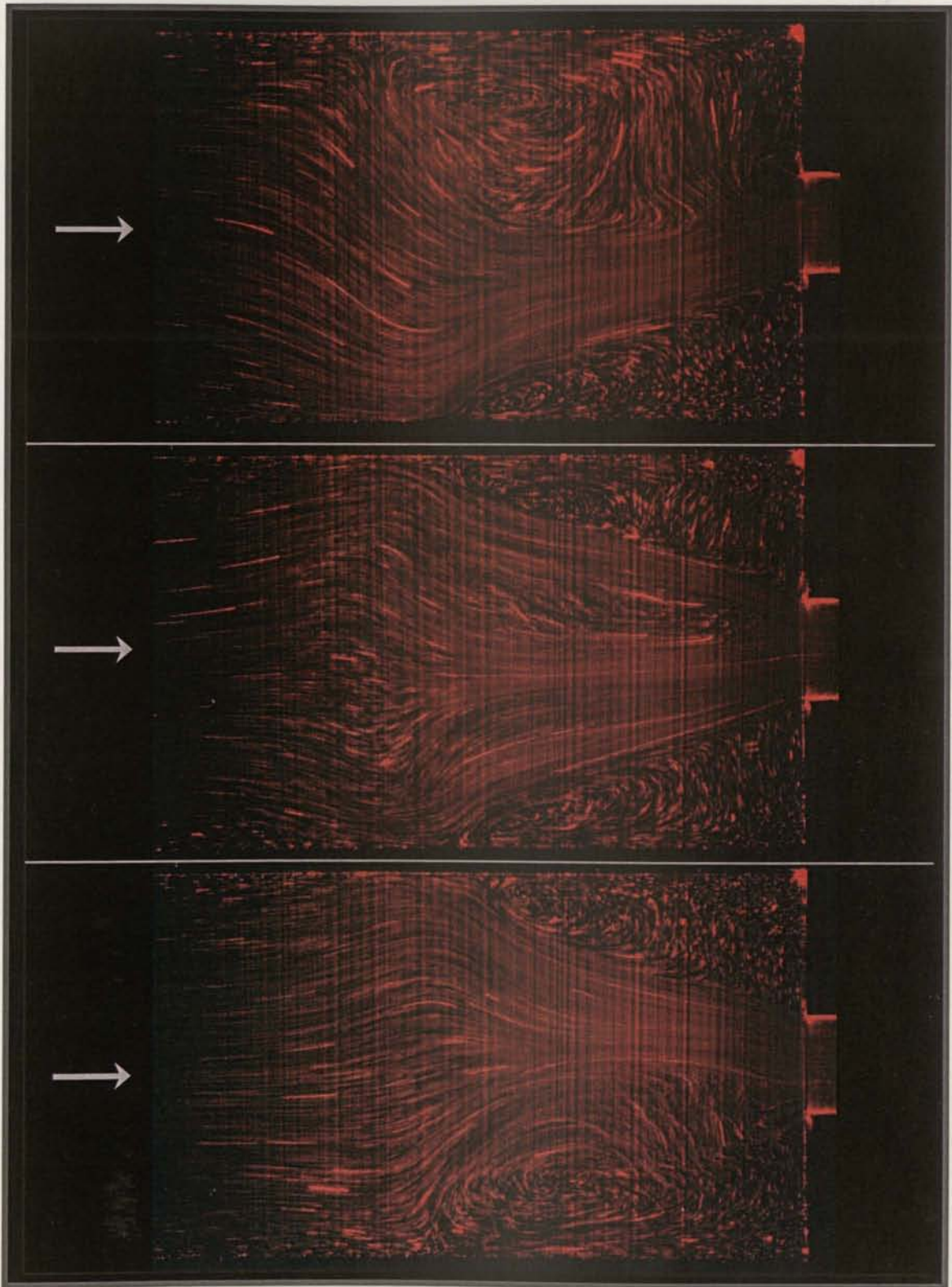


Figura 10.38: Linhas de rasto observadas experimentalmente com o fluido PAA300 no plano central da contracção 4:1:1 em condições de escoamento variável ($De_1 = 0.857$; $Re_1 = 0.0716$). Ilustração de três fases do ciclo de oscilação do escoamento. As visualizações decorreram à temperatura de 17.5 °C.

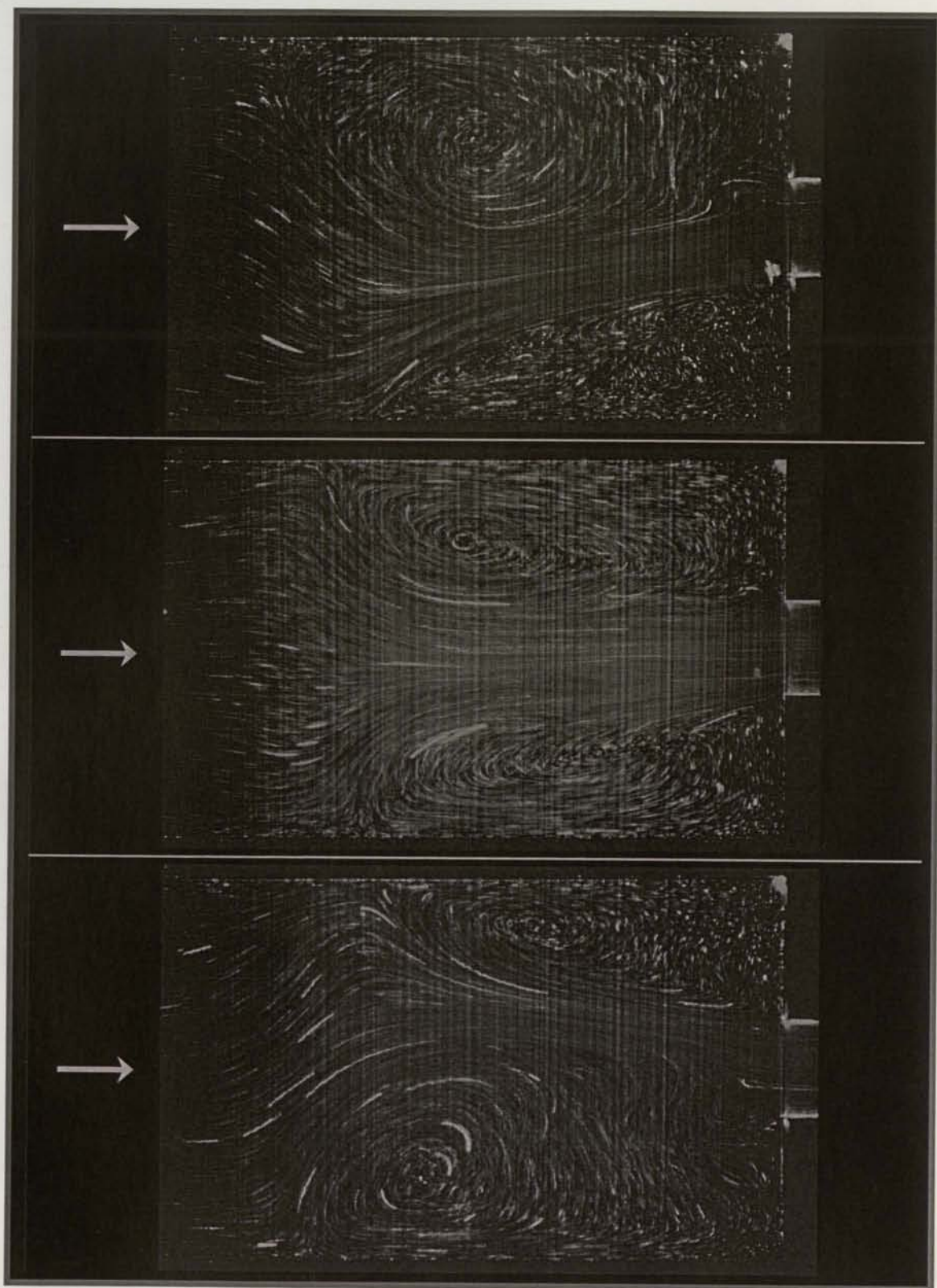


Figura 10.39: Linhas de rasto observadas experimentalmente com o fluido PAA300 no plano central da contracção 4:1:1 em condições de escoamento variável ($De_1 = 0.956$; $Re_1 = 0.0799$). Ilustração de três fases do ciclo de oscilação do escoamento. As visualizações decorreram à temperatura de 17.5 °C.

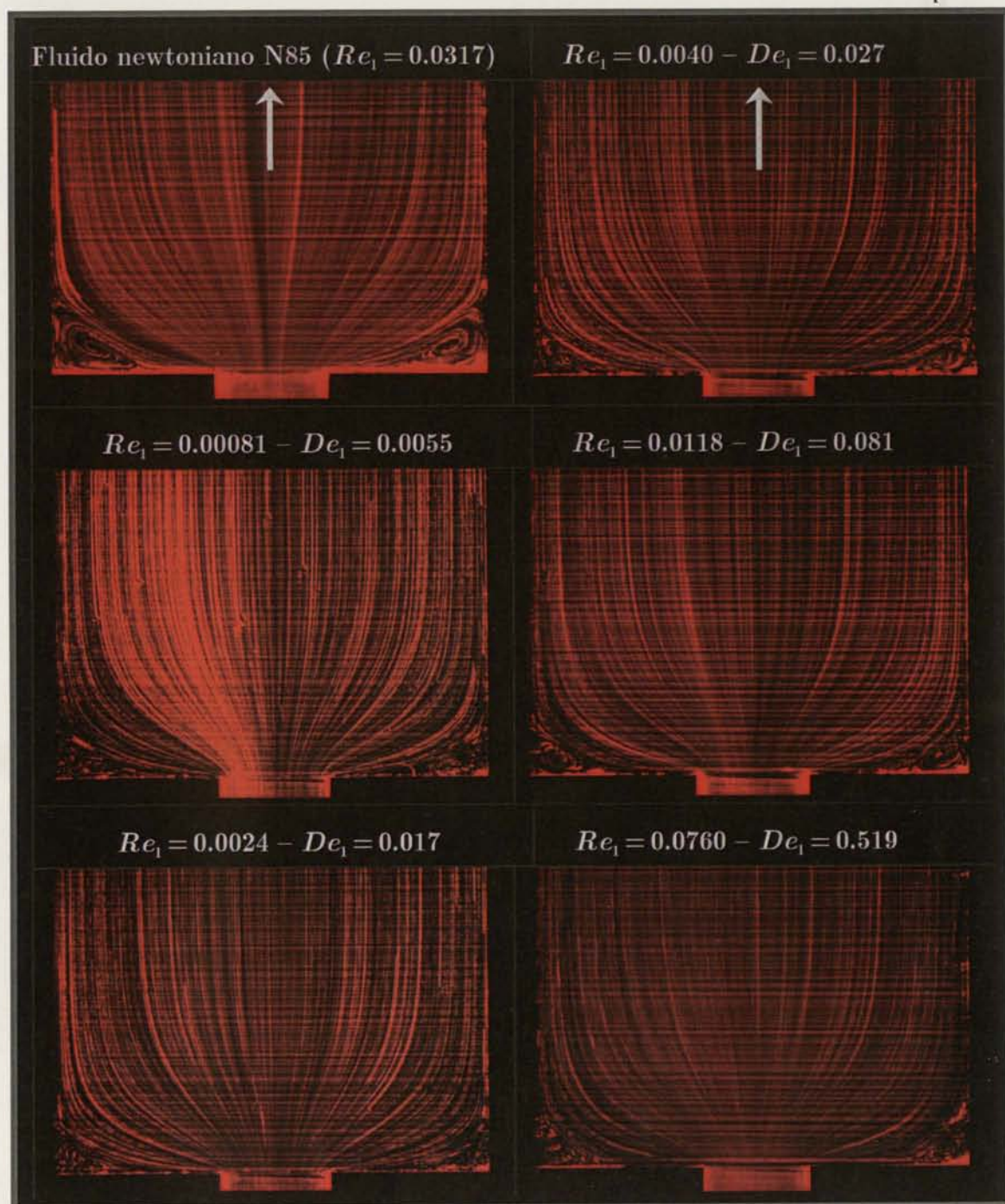


Figura 10.40: Linhas de rasto observadas experimentalmente para o escoamento do fluido de Boger PAA300 na expansão 1:4:4. Influência do número de Débora no padrão de escoamento observado no plano central da contracção. As visualizações decorreram à temperatura de $21.0 \pm 0.2^\circ\text{C}$. A fotografia apresentada no canto superior esquerdo foi obtida com o fluido newtoniano N85, servindo para comparar com o padrão de escoamento obtido com o fluido PAA100 a baixos valores de De_1 .

10.4.4 Fluido PAA500

O fluido PAA500 é mais elástico que os fluidos de Boger PAA100 e PAA300, e apresenta um grau de reofluidificação moderado, como se ilustrou nas Figuras 10.21 e 10.22.

Na Figura 10.41 apresenta-se a variação da dimensão da recirculação do plano central da contracção, x_R , com o número de Débora (proporcional à velocidade média na conduta de montante, U_1 , também representada na figura) calculado a partir do tempo de relaxação de Oldroyd-B (de forma idêntica ao efectuado com os fluidos de Boger). Para este fluido viscoelástico reofluidificante observa-se um crescimento intenso da recirculação com o aumento do número de Débora (ou do caudal), de forma semelhante às observações experimentais de Evans e Walters (1986). De resto, os fluidos viscoelásticos reofluidificantes tipicamente apresentam um crescimento da recirculação de canto com o aumento da elasticidade, tanto em contracções planas como axissimétricas (cf. Figura 9.26).

Apesar do carácter reofluidificante do fluido, e da ambiguidade no cálculo do número de Reynolds, é relativamente fácil demonstrar que a inércia é pouco significativa. Por exemplo, para a velocidade mais elevada da Figura 10.41, $U_1 \cong 0.1$ cm/s, pode estimar-se um valor representativo da taxa de deformação na conduta de montante, $\dot{\gamma}_1 = U_1/H_1 \cong 0.1/1.2 \cong 0.083$ s⁻¹, para a qual se obtém uma viscosidade de cerca de 3 Pa.s (vide Figura 10.21), e um correspondente número de Reynolds na conduta de montante de $Re_1 \cong 0.005$, ilustrando claramente que a inércia é pouco significativa.

Na Figura 10.42 apresentam-se quatro fotografias das linhas de rasto no plano central, para diferentes velocidades na conduta de montante. Na mesma figura incluem-se as linhas de corrente previstas numericamente usando o modelo PTT linear multimodo (4 modos+solvente), com os parâmetros da Tabela 10.4, $\varepsilon = 0.02$ e $\xi = 0.04$. As simulações foram efectuadas em duas malhas computacionais, M40U e M56, que se ilustram na Figura 10.43. Para os casos $De_1 = 0.355$ ($U_1 = 0.0208$ cm/s) e $De_1 = 0.720$ ($U_1 = 0.0422$ cm/s), as diferenças nas linhas de corrente previstas em ambas as malhas não são significativas, devendo ainda ser menores para valores de U_1 inferiores. Os resultados numéricos apresentados na Figura 10.42 estão de acordo com as visualizações experimentais até $De_1 = 0.720$ ($U_1 = 0.0422$ cm/s), observando-se uma previsão do comprimento da recirculação por defeito para valores de De_1 superiores (vide Figura 10.41). É

necessário efectuar uma análise detalhada em termos de convergência com o refinamento da malha para os valores de De_1 mais elevados, tarefa essa que ficará para trabalho futuro dados os elevados tempos de CPU necessários. Note-se que as simulações na malha M56 são bastante demoradas, dado o elevado refinamento das malhas e o elevado tempo de relaxação do modo 1 do modelo PTT linear. Por exemplo, para a obtenção da solução numérica correspondente a $De_1 = 0.720$ na malha M56 é necessário um tempo de CPU de 16 dias usando um computador pessoal equipado com um processador AMD Athlon XP 2400+® (2.4 GHz) e com 1 GHz de memória RAM. Estes valores de tempo de CPU não são exagerados dado o elevado número de variáveis em jogo, totalizando 8 758 848 graus de liberdade na malha M56 (312 816 células) e 3 550 400 na malha M40U (126 800 células), valores estes claramente superiores a qualquer estudo numérico envolvendo fluidos viscoelásticos publicado até à presente data.

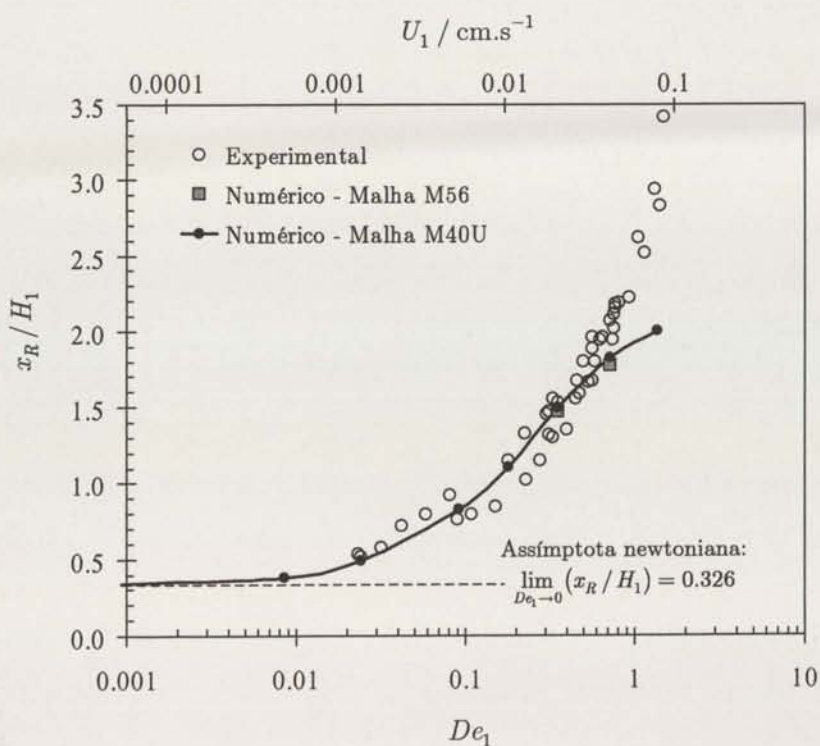


Figura 10.41: Escoamento do fluido PAA500 na contracção tridimensional 4:1:1. Influência do número de Débora, De_1 , no comprimento da recirculação do plano central, x_R .

Como já foi referido, para o fluido PAA500 verifica-se que o aumento da elasticidade origina um crescimento do vórtice de canto, que pode tomar elevadas proporções como no caso ilustrado na Figura 10.44, obtido para $De_1 = 1.34$ ($U_1 = 0.0783$ cm/s). Aumentando ainda mais o caudal observa-se a transição para um escoamento variável a $De_1 \cong 1.7$ ($U_1 \cong 0.1$ cm/s).

Uma outra particularidade importante deste escoamento, e que resulta da elevada elasticidade do fluido PAA500, refere-se à inversão no sentido das trajectórias das partículas de fluido nas recirculações do planos central e diagonal da contracção, comparativamente ao escoamento newtoniano. A inversão das trajectórias no interior da recirculação do plano central é facilmente observável na Figura 10.42, em particular para as velocidades mais elevadas (maior elasticidade do escoamento), quer nas visualizações experimentais quer nos resultados das simulações numéricas. Na Figura 10.45 ilustram-se algumas trajectórias que passam pelo interior das recirculações, previstas numericamente para o fluido PAA500 a $De_1 = 0.0909$ ($U_1 = 0.00533$ cm/s). Ao contrário do observado com os fluidos newtonianos (cf. Figura 10.24), para o escoamento do fluido PAA500 verifica-se que as partículas provenientes da vizinhança da parede do plano central entram para a recirculação do plano central pela sua periferia, rodando em direcção ao seu centro. Seguidamente são transferidas para o centro da recirculação do plano diagonal num movimento em espiral, entrando pelo seu centro e rodando posteriormente, rumo à sua periferia, de onde saem em direcção à conduta de jusante pelo plano diagonal. Fica assim identificado um novo padrão de escoamento na contracção SQ/SQ que não tinha ainda sido descrito, e que resulta certamente da pouca atenção que tem sido dedicada ao estudo do escoamento em contracções deste tipo.

Como já foi referido, para $De_1 \cong 1.7$ o escoamento do fluido PAA500 na contracção SQ/SQ passa a ser variável no tempo, apresentando um padrão cíclico semelhante ao descrito para os fluidos PAA100 e PAA300. Na Figura 10.46 ilustram-se três “instantes” característicos de um ciclo de oscilação, para o caso $De_1 = 1.94$ ($U_1 = 0.114$ cm/s). Efectuaram-se filmagens em condições de escoamento super-crítico, a partir das quais foi possível medir a frequência de oscilação, f , para diferentes valores de U_1 . Verificou-se uma relação aproximadamente linear entre f e U_1 , o que conduz a um valor constante do número de Strouhal, $St = 2fH_1/U_1 \cong 0.5$.

Foram também efectuadas visualizações do escoamento na expansão tridimensional, que se reproduzem na Figura 10.47 para três velocidades distintas. De forma semelhante ao observado com os fluidos de Boger PAA100 e PAA300, verificou-se uma ligeira diminuição do comprimento da recirculação do plano

central, comparativamente ao escoamento de um fluido newtoniano em condições de inércia desprezável.

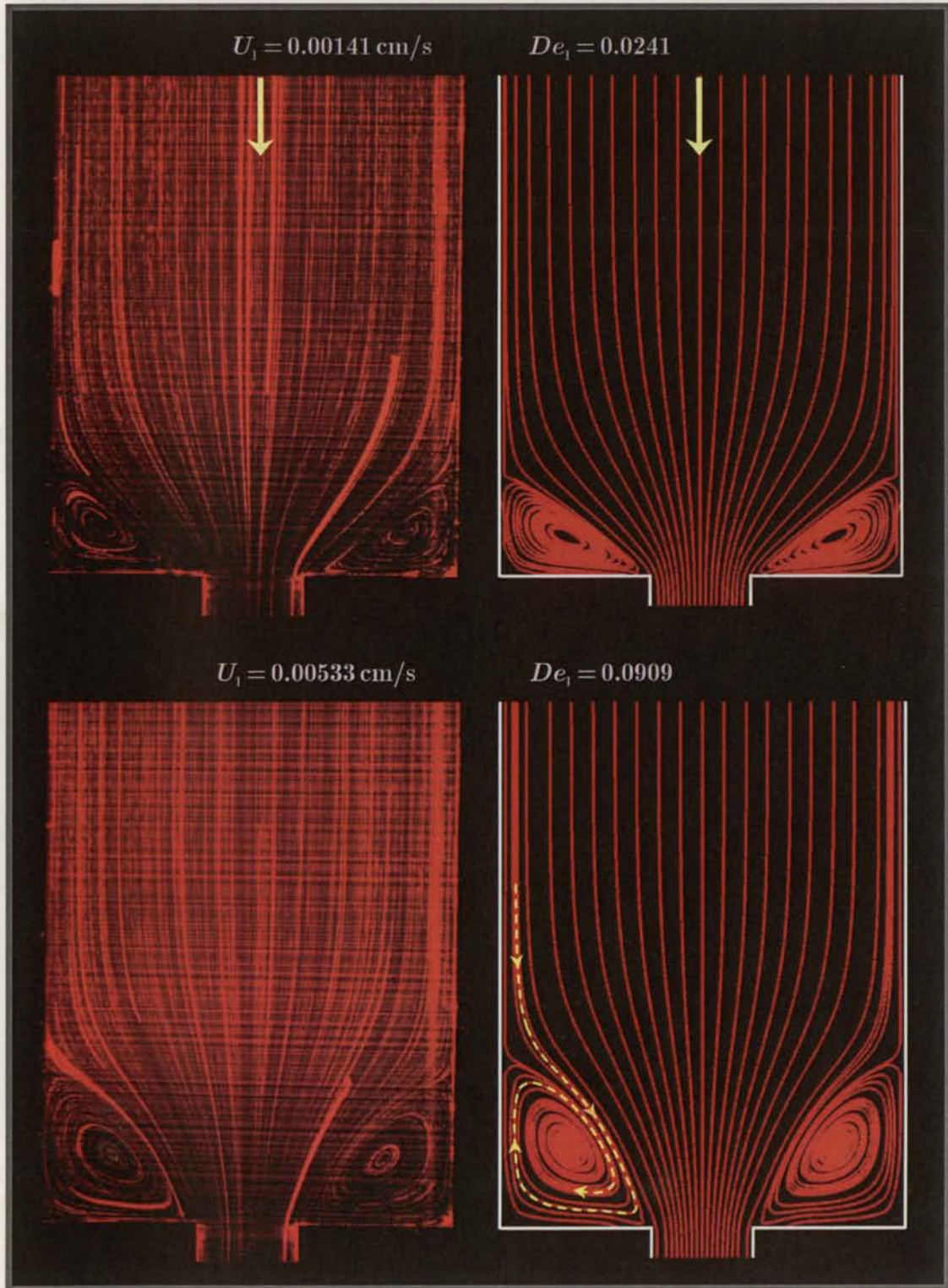


Figura 10.42: Linhas de rasto observadas experimentalmente (coluna da esquerda) e comparação com as simulações numéricas (coluna da direita) para o escoamento do fluido PAA500 na contracção 4:1:1.

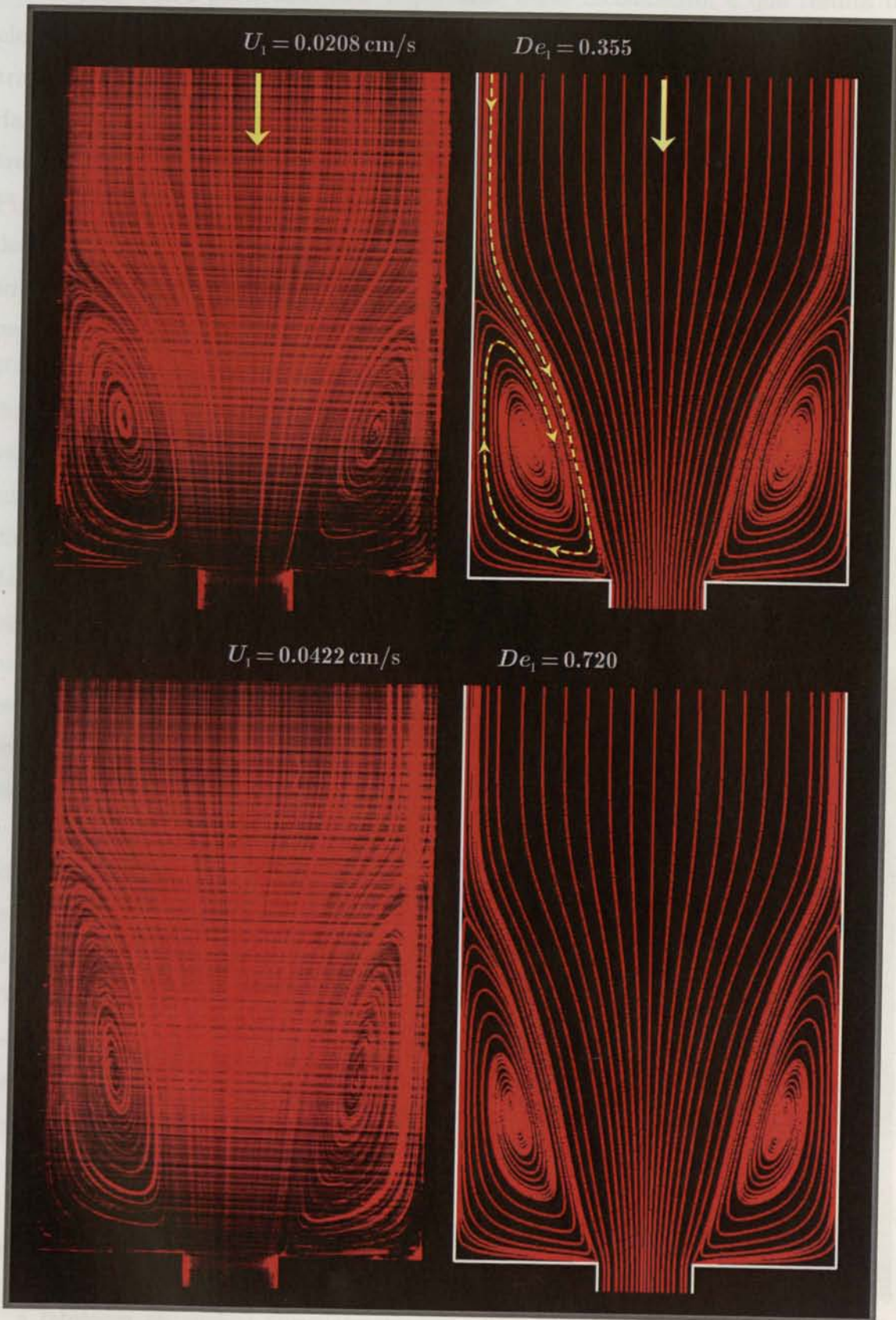


Figura 10.42: Conclusão.

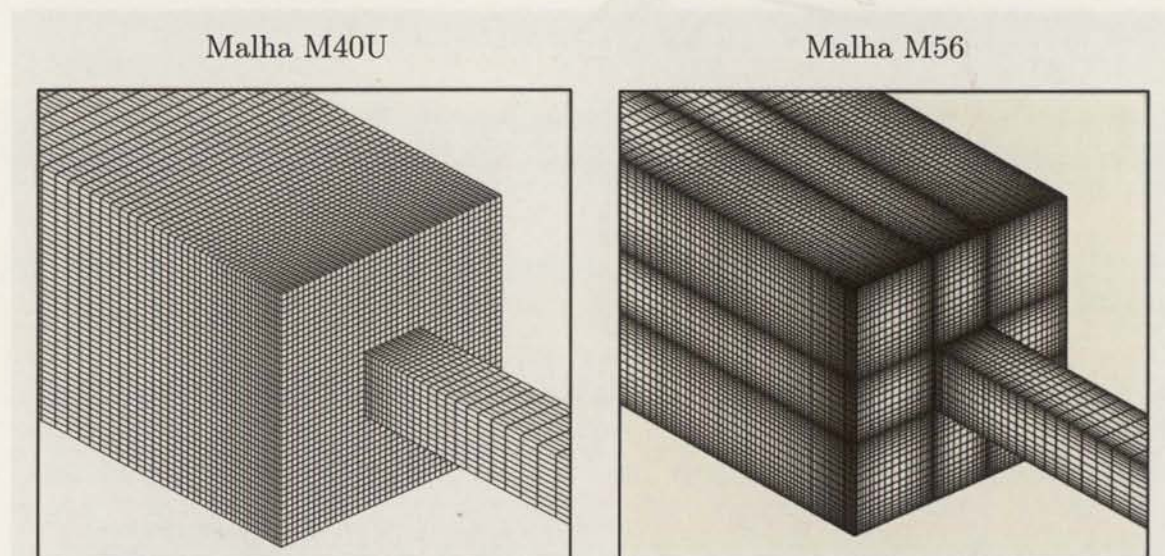


Figura 10.43: Ilustração das malhas computacionais usadas na simulação do escoamento do fluido viscoelástico reofluidificante (PAA500) na contração tridimensional 4:1:1.

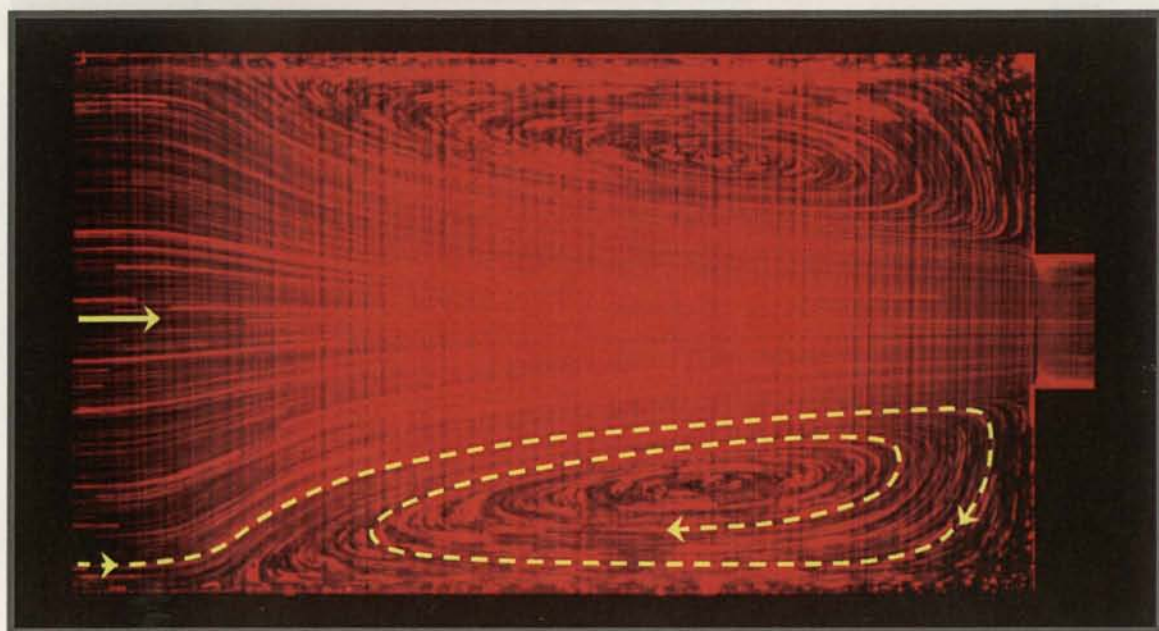


Figura 10.44: Ilustração do elevado crescimento do vórtice de canto observado para o escoamento do fluido PAA500 na contração 4:1:1 a $De_1 = 1.34$ ($U_1 = 0.0783$ cm/s).

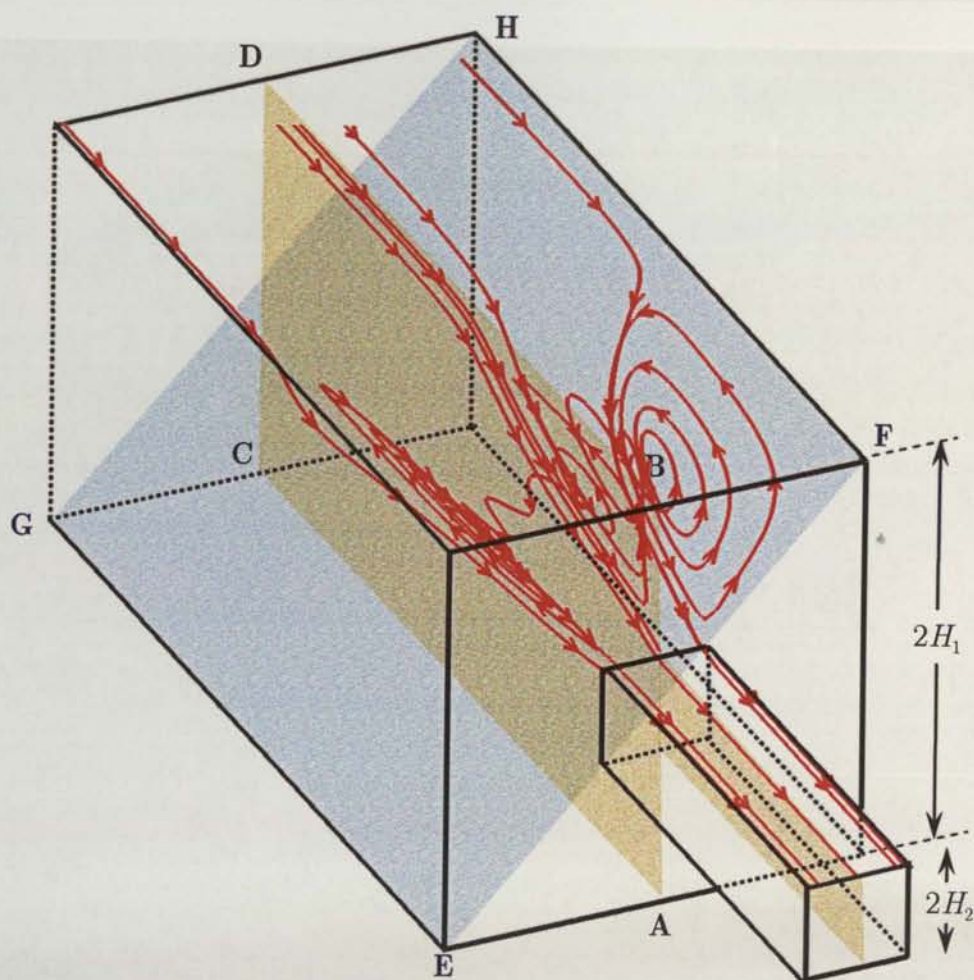


Figura 10.45: Previsão do escoamento do fluido PAA500 na contração tridimensional 4:1:1, a $De_1 = 0.0909$ ($U_1 = 0.00533$ cm/s). Ilustração de algumas trajetórias que atravessam a recirculação do plano central (representado a amarelo, passando nos pontos ABCD) e a recirculação do plano diagonal (a azul, passando nos pontos EFGH).

10.5 Conclusões

Efectuaram-se visualizações do escoamento numa contração tridimensional 4:1:1 e numa expansão tridimensional 1:4:4 para dois fluidos newtonianos, dois fluidos de Boger e um fluido viscoelástico refluidificante, tendo-se observado uma influência contrária da inércia e da elasticidade nos padrões de escoamento na contração e na expansão tridimensional.

Para os fluidos newtonianos efectuaram-se simulações numéricas que reproduzem os resultados experimentais com elevada precisão, nomeadamente a diminuição da recirculação com o aumento da inércia, no caso do escoamento na contração 4:1:1, e um aumento significativo da recirculação com o aumento da inércia para o escoamento na expansão 1:4:4.

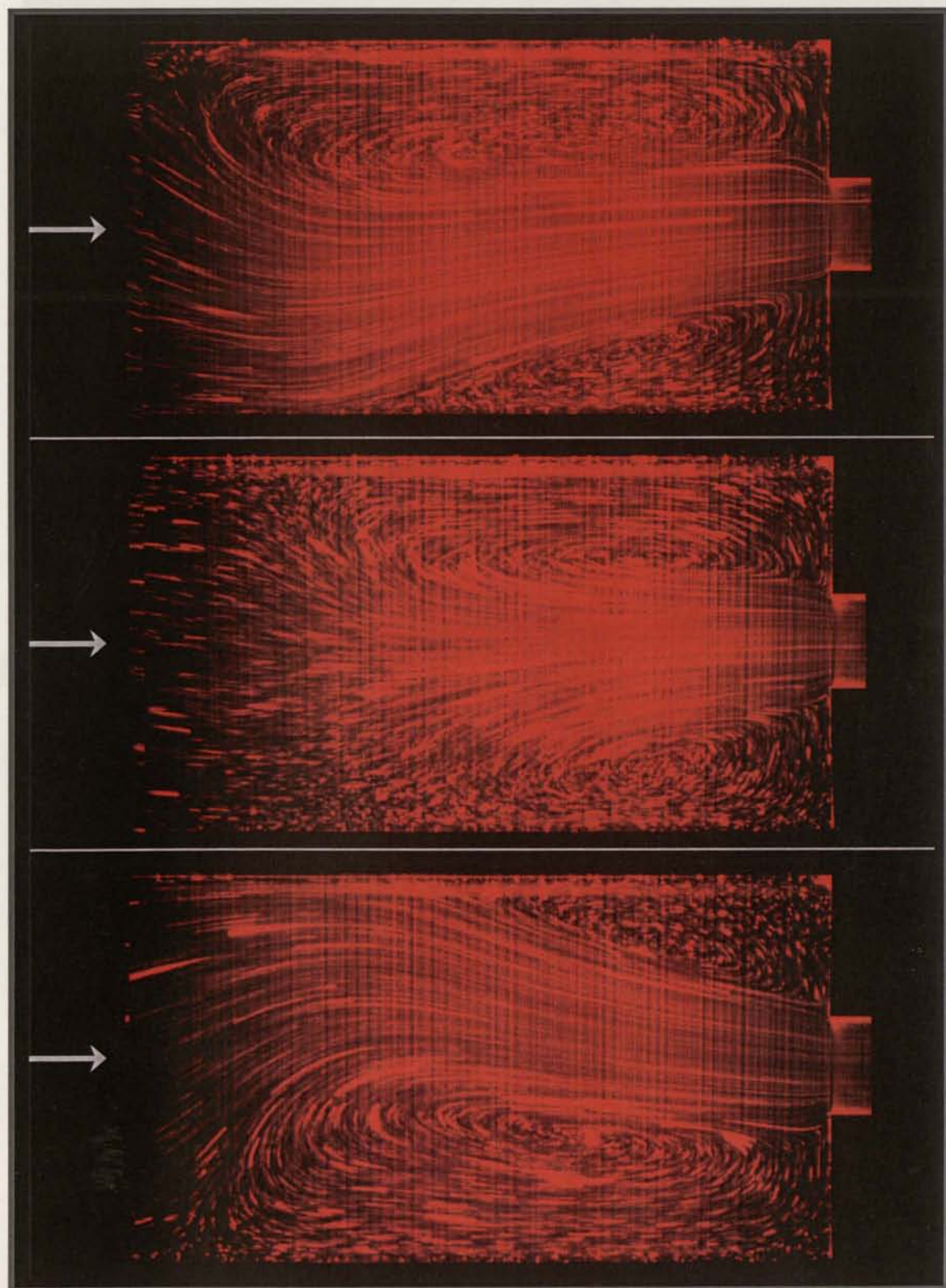


Figura 10.46: Linhas de rasto observadas experimentalmente com o fluido PAA500 no plano central da contracção 4:1:1 em condições de escoamento variável ($De_1 = 1.94$; $U_1 = 0.114$ cm/s). Ilustração de três fases do ciclo de oscilação do escoamento. As visualizações decorreram à temperatura de 15.0 °C.

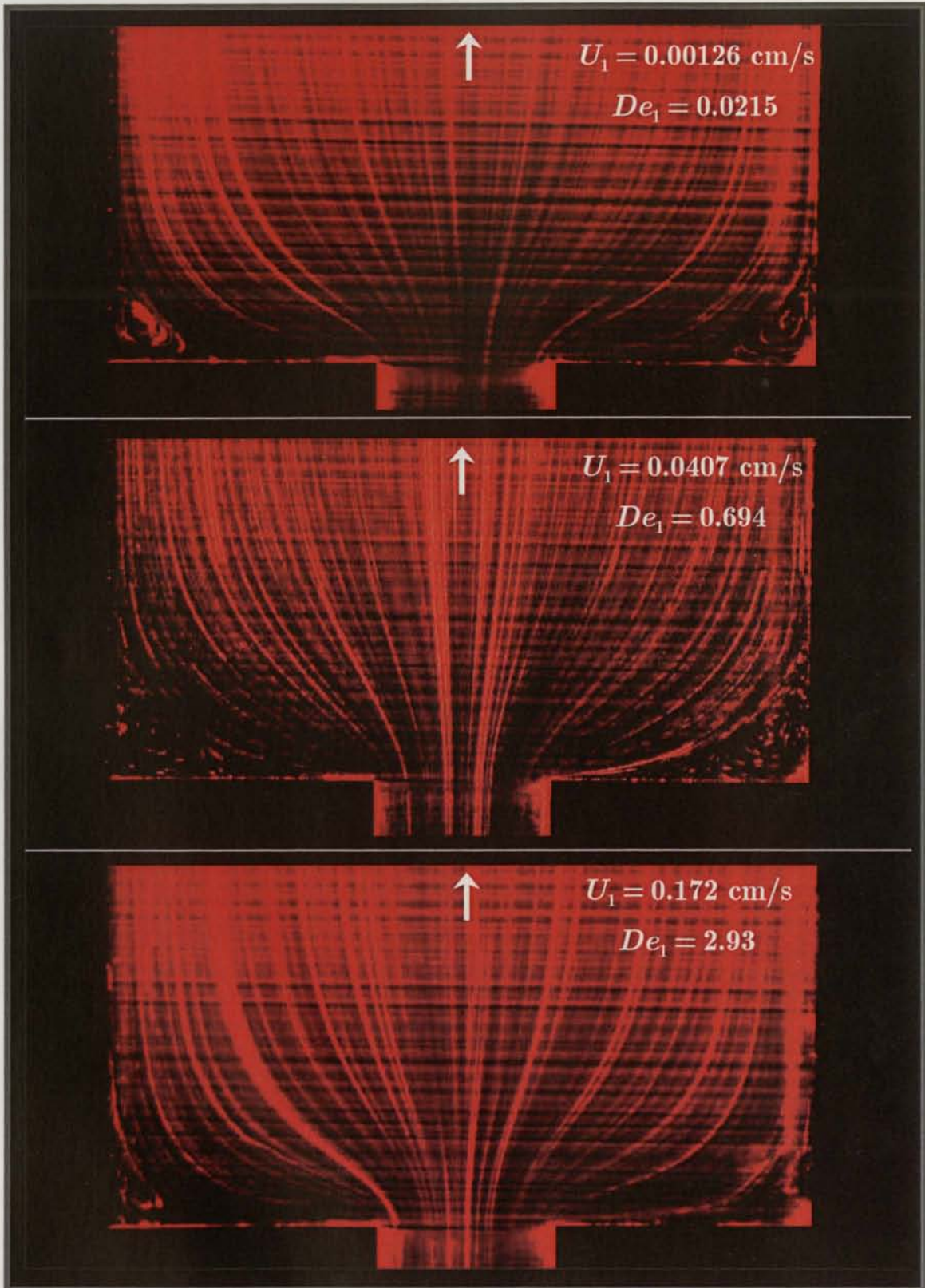


Figura 10.47: Linhas de rasto observadas experimentalmente para o escoamento do fluido PAA500 na expansão 1:4:4. As visualizações decorreram à temperatura de $15.0 \pm 0.2^\circ\text{C}$.

Para o fluido viscoelástico reofluidificante também foram efectuadas simulações numéricas, usando um modelo PTT linear multimodo, tendo sido obtida uma boa concordância com os resultados experimentais, para uma gama alargada das condições experimentais de escoamento em regime permanente.

Para os fluidos de Boger observou-se experimentalmente um padrão de escoamento algo complexo, tendo sido identificada a presença de uma recirculação de entrada no escoamento do fluido PAA300 na contracção SQ/SQ. Para valores de Débora baixos observa-se um crescimento inicial da recirculação, seguida de uma diminuição acentuada. Para caudais mais elevados observa-se uma inversão no padrão de escoamento com um crescimento da recirculação com o aumento do número de Débora.

Para o fluido viscoelástico reofluidificante verificou-se um crescimento acentuado da recirculação com o aumento do caudal na contracção, observando-se também uma inversão no sentido de escoamento nas recirculações localizadas nos planos central e diagonal, relativamente ao caso newtoniano. Para os diversos fluidos viscoelásticos estudados observou-se a existência de um caudal crítico, a partir do qual o escoamento na contracção apresenta um comportamento oscilatório.

Na expansão 3D os fluidos viscoelásticos exibiram um comportamento contrário ao dos fluidos newtonianos, nomeadamente a diminuição da recirculação com o aumento do caudal. Na gama de caudais estudados não foi observada qualquer instabilidade no escoamento dos fluidos viscoelásticos na expansão tridimensional.

“Now this is not the end. It is not even the beginning of the end. But it is, perhaps, the end of the beginning.”

Sir Winston Churchill (1874-1965)

Capítulo 11

Conclusões e sugestões para trabalho futuro

Este capítulo encerra a presente dissertação, resumindo as principais conclusões e identificando algumas direcções interessantes para trabalho futuro.

11.1 Conclusões

O âmbito desta tese relacionou-se com o estudo do escoamento de fluidos viscoelásticos, em regime laminar de baixo número de Reynolds, em algumas das geometrias de referência usadas em reologia computacional. A análise deste tipo de escoamentos pode ser efectuada por via teórica, experimental, numérica, ou por uma combinação destes tipos de abordagens fundamentais. No presente trabalho foram seguidas as três vias, cujas principais conclusões passam a ser enunciadas.

Análise teórica

Do ponto de vista teórico estudaram-se os escoamentos de Couette e de Poiseuille de um fluido viscoelástico descrito pelo modelo PTT completo, na sua versão linear. Para o escoamento de Poiseuille deduziram-se as expressões analíticas para a pressão, viscosidade, velocidade, e para as componentes do tensor das tensões.

Demonstrou-se a existência de possíveis instabilidades no escoamento de Poiseuille deste fluido viscoelástico, tendo sido identificadas as condições críticas de estabilidade em função dos parâmetros do modelo PTT, que se demonstrou estarem relacionadas com a existência de um máximo na curva da tensão de corte em função da taxa de deformação, para o escoamento de Couette.

Alguns dos resultados desta análise teórica foram utilizados na definição das condições fronteira de parede a utilizar no estudo numérico.

Análise experimental

Do ponto de vista experimental estudou-se o comportamento de dois fluidos newtonianos e de três fluidos viscoelásticos em escoamento laminar numa contracção quadrada tridimensional 4:1, e numa expansão quadrada tridimensional 1:4. Para os fluidos newtonianos observou-se que o aumento da inércia conduz a uma redução da dimensão da recirculação para o escoamento na contracção, ocorrendo o efeito contrário para o escoamento na expansão.

Para os fluidos de Boger o padrão de escoamento é mais complexo, e para condições de inércia desprezável observou-se um aumento da dimensão da recirculação para baixos valores do número de Débora, seguida de uma diminuição acentuada do seu comprimento com o aumento da elasticidade, até se observar um desaparecimento da recirculação para um dos fluidos de Boger, e o aparecimento de uma pequena recirculação de entrada para o outro. Para valores da elasticidade ainda mais elevados observou-se um aumento da recirculação até um valor crítico do caudal, a partir do qual o escoamento na contracção tridimensional apresenta um comportamento oscilatório. Para o escoamento do fluido viscoelástico reofluidificante na contracção tridimensional observou-se um crescimento bastante acentuado da recirculação com o aumento do caudal, ocorrendo simultaneamente uma inversão no sentido do escoamento no interior da recirculação. Para os caudais mais elevados o escoamento na contracção também se tornou oscilatório, como observado com os fluidos de Boger.

Na expansão tridimensional observou-se uma diminuição da dimensão da recirculação com o aumento do caudal, para os diversos fluidos viscoelásticos. Este comportamento é oposto ao obtido com os fluidos newtonianos, demonstrando-se que a elasticidade induz um efeito contrário à inércia no padrão de escoamento.

Análise numérica

A principal contribuição do presente trabalho consiste no desenvolvimento de novos métodos numéricos robustos e precisos, particularmente aplicáveis à discretização dos termos convectivos das equações de transporte. Demonstrou-se que a discretização do termo convectivo das equações constitutivas é fulcral, quer

em termos de precisão numérica, quer da estabilidade global da metodologia de cálculo.

Nesta tese usou-se o método dos volumes finitos na discretização das equações de balanço, demonstrando-se a sua adequação à simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos. Recentemente tem-se observado um interesse crescente na utilização de algoritmos baseados no método dos volumes finitos em reologia computacional, onde ainda é notório um domínio dos trabalhos que utilizam o método dos elementos finitos. Neste estudo demonstra-se que é possível obter soluções numéricas com precisão semelhante à alcançada pelos métodos de elementos finitos, obtendo-se reduções consideráveis nos recursos computacionais necessários.

Na parte inicial do trabalho conducente a esta dissertação implementaram-se diversos métodos de alta resolução clássicos, para a discretização dos termos advectivos das equações reológicas. Usando estes esquemas de discretização foi possível obter soluções numéricas com elevada precisão para os escoamentos de referência de um fluido UCM numa contracção plana 4:1, e dos fluidos UCM e Oldroyd-B em torno de um cilindro confinado entre duas placas planas, ambos em condições de inércia desprezável. Apesar da elevada precisão obtida, e da estabilidade demonstrada pelos esquemas de alta resolução clássicos, observaram-se alguns problemas de convergência iterativa do método de cálculo, em particular para valores elevados do número de Débora. Para colmatar esta limitação desenvolveu-se um novo esquema de alta resolução, que se denominou por CUBISTA. Este novo esquema de alta resolução demonstrou possuir propriedades de convergência iterativa melhoradas e uma precisão numérica equivalente à do esquema de alta resolução SMART.

A utilização do esquema CUBISTA permitiu obter soluções com elevada precisão numérica para o escoamento dos fluidos Oldroyd-B e PTT numa contracção plana 4:1. Em particular, para a versão exponencial do modelo PTT foi possível alcançar soluções numéricas precisas para valores do número de Débora da ordem de 10000, muito superiores aos alcançados em estudos semelhantes anteriormente publicados. Finalmente, no Capítulo 10, demonstraram-se as potencialidades da metodologia de cálculo desenvolvida na previsão dos padrões de escoamento visualizados experimentalmente na contracção quadrada tridimensional. As simulações numéricas permitiram demonstrar inequivocamente a

existência de uma inversão no sentido do escoamento no interior da recirculação. Este fenómeno, causado apenas por efeitos elásticos, ainda não havia sido descrito nem previsto numericamente para este escoamento, que é particularmente adequado ao teste de códigos numéricos desenvolvidos para geometrias tridimensionais.

11.2 Sugestões para trabalho futuro

O estudo do escoamento de fluidos viscoelásticos em regime laminar continua a ser um desafio interessante, sob os pontos de vista teórico, experimental e numérico. Apesar de hoje em dia já ser possível modelar com rigor alguns dos fenómenos induzidos por efeitos elásticos, nem sempre a modelação de escoamentos de fluidos viscoelásticos é bem sucedida. As dificuldades devem-se quer a limitações dos métodos de cálculo numérico, quer a imprecisões das equações constitutivas usadas para modelar o comportamento reológico dos fluidos viscoelásticos, quer ainda a limitações na caracterização reológica dos fluidos, o que tem implicações nos modelos constitutivos seleccionados.

Em termos experimentais sugere-se que seja efectuada uma caracterização reológica mais completa dos fluidos viscoelásticos usados nas experiências de visualização, envolvendo medições em escoamento extensional, dada a importância desta propriedade material no mecanismo de crescimento dos vórtices em contracções. Também se sugere a visualização do escoamento dos fluidos viscoelásticos estudados no presente trabalho, usando uma geometria com uma maior razão de contracção. A instalação experimental utilizada contemplou este ponto, tendo sido inicialmente projectada e construída uma contracção/expansão quadrada 12:1. Devido a limitações de tempo não foi possível efectuar a visualização do escoamento nesta geometria, sugerindo-se este estudo para trabalho futuro com vista a compreender o efeito da razão de contracção no padrão de escoamento dos fluidos viscoelásticos. Também será interessante estudar com mais profundidade a origem dos fenómenos de instabilidade elástica observados para os caudais mais elevados, que invariavelmente conduziram a escoamentos não estacionários.

Do ponto de vista numérico, a curto prazo, sugere-se a simulação do escoamento dos fluidos de Boger na contracção e na expansão quadrada tridimensional, que foram objecto de estudo de visualização neste trabalho. Como

ponto de partida poderá ser usado o modelo de Oldroyd-B ou, em alternativa, um modelo de Maxwell multimodo (usando os parâmetros estimados na presente tese). Contudo, dado o carácter reofluidificante observado para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais dos fluidos de Boger, talvez seja necessário recorrer a equações constitutivas mais realistas, tais como os modelos FENE-P ou FENE-CR, para se conseguir modelar adequadamente o padrão de escoamento observado experimentalmente. A médio prazo sugere-se a implementação de modelos constitutivos integrais, em substituição dos modelos reológicos do tipo diferencial usados nesta tese. Tal tarefa conduzirá a alterações significativas na estratégia de cálculo.

Ao longo da última década têm sido desenvolvidas metodologias híbridas de cálculo numérico, conhecidas pela designação *micro-macro*. Segundo esta estratégia, as equações da continuidade e de conservação da quantidade de movimento são discretizadas na sua forma habitual. No entanto, o tensor das tensões é avaliado a partir de simulações estocásticas à escala molecular (daí a designação *micro*). Como as estratégias de cálculo baseadas no método dos volumes finitos são significativamente menos dispendiosas, em termos de recursos computacionais, que os métodos de elementos finitos, parece ser de explorar a curto prazo a sua utilização em simulações do tipo *micro-macro*.



Referências Bibliográficas

- Aboubacar, M., H. Matallah, H.R. Tamaddon-Jahromi e M.F. Webster (2002a). Numerical prediction of extensional flows in contraction geometries: hybrid finite volume/element method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **104**: 125-164.
- Aboubacar, M., H. Matallah e M.F. Webster (2002b). Highly elastic solutions for Oldroyd-B and Phan-Thien/Tanner fluids with a Finite Volume/Element Method: planar contraction flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **103**: 65-103.
- Aboubacar, M. e M.F. Webster (2001). A cell-vertex finite volume/element method on triangles for abrupt contraction viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **98**: 83-106.
- Acheson, D.J. (1990). *Elementary Fluid Dynamics*. Oxford University Press, Oxford.
- Al Moatassime, H., D. Esselaoui, A. Hakim e S. Raghay (2001). Finite volume multigrid method of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **36**: 885-902.
- Al Moatassime, H. e C. Jouron (2001). A multigrid method for solving steady viscoelastic fluid flow. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **190**: 4061-4080.
- Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2001a). Numerical simulations of viscoelastic flow around sharp corners. *Computational Fluid and Solid Mechanics*. Ed. Bathe, K.J. Elsevier, Amsterdam. **2**: 772-775.
- Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2003a). A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **41**: 47-75.
- Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2003b). Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **110**: 45-75.
- Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2003c). Numerical simulation of viscoelastic contraction flows. *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*. Ed. Bathe, K.J. Elsevier, Amsterdam. **2**: 826-829.
- Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2004). On the effect of contraction ratio in viscoelastic flow through abrupt contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **Aceite para publicação**.
- Alves, M.A., F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2000). Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **93**: 287-314.
- Alves, M.A., F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2001b). The flow of viscoelastic fluids past a cylinder: finite-volume high-resolution methods. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **97**: 207-232.
- Alves, M.A., F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2001c). Study of steady pipe and channel flows of a single-mode Phan-Thien-Tanner fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **101**: 55-76.
- Alves, M.A., D. Torres, M.P. Gonçalves, P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2003d). *Visualization studies of viscoelastic flow in a 4:1 square/square contraction*. 17th International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2003), São Paulo, Brasil, ABCM.

- Apelian, M.R., R.C. Armstrong e R.A. Brown (1988). Impact of the constitutive equation and singularity on the calculation of stick-slip flow: The modified upper-convected Maxwell model (MUCM). *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **27**: 299-321.
- Arigo, M.T., D. Rajagopalan, N. Shapley e G.H. McKinley (1995). The Sedimentation of a Sphere through an Elastic Fluid .1. Steady Motion. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **60**: 225-257.
- Armaly, B.F., F. Durst, J.C.F. Pereira e B. Schonung (1983). Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow. *J. Fluid Mech.* **127**: 473-496.
- Armstrong, R.C., R.A. Brown, L.M. Quinzani, G.H. McKinley e J.A. Byars (1992). *Measurement of velocity and stress fields in complex polymer flows*. XI International Congress on Rheology, Brussels, Elsevier, Amsterdam.
- Baaijens, F.P.T. (1993). Numerical-analysis of start-up planar and axisymmetrical contraction flows using multimode differential constitutive models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **48**: 147-180.
- Baaijens, F.P.T. (1998a). An iterative solver for the DEVSS/DG method with application to smooth and non-smooth flows of the upper convected Maxwell fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **75**: 119-138.
- Baaijens, F.P.T. (1998b). Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**: 361-385.
- Baaijens, F.P.T., H.P.W. Baaijens, G.W.M. Peters e H.E.H. Meijer (1994). An experimental and numerical investigation of a viscoelastic flow around a cylinder. *J. Rheol.* **38**: 351-376.
- Baaijens, F.P.T., S.H.A. Selen, H.P.W. Baaijens, G.W.M. Peters e H.E.H. Meijer (1997). Viscoelastic flow past a confined cylinder of a low density polyethylene melt. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **68**: 173-203.
- Baaijens, H.P.W. (1994). *Evaluation of constitutive equations for polymer melts and solutions in complex flows*. PhD Thesis, Eindhoven University of Technology, The Netherlands.
- Baaijens, H.P.W., G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens e H.E.H. Meijer (1995). Viscoelastic flow past a confined cylinder of a polyisobutylene solution. *J. Rheol.* **39**: 1243-1277.
- Barakos, G. e E. Mitsoulis (1995). Numerical simulation of viscoelastic flow around a cylinder using an integral constitutive equation. *J. Rheol.* **39**: 1279-1292.
- Barton, I.E. (1997). The entrance effect of laminar flow over a backward-facing step geometry. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **25**: 633-644.
- Bernstein, B., M.K. Kadivar e D.S. Malkus (1981). Steady flow of memory fluids with finite elements: Two test problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **27**: 279-302.
- Bird, R.B., R.C. Armstrong e O. Hassager (1987a). *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol. 1- Fluid Mechanics*. 2nd Ed. John Wiley & Sons, New York.
- Bird, R.B., C.F. Curtiss, R.C. Armstrong e O. Hassager (1987b). *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol. 2- Kinetic Theory*. 2nd Ed. John Wiley & Sons, New York.
- Bird, R.B., W.E. Stewart e E.N. Lightfoot (2002). *Transport Phenomena*. 2nd. Ed. John Wiley & Sons, New York.
- Bird, R.B. e J.M. Wiest (1985). Anisotropic effects in dumbbell kinetic-theory. *J. Rheol.* **29**: 519-532.

- Bird, R.B. e J.M. Wiest (1995). Constitutive equations for polymeric liquids. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **27**: 169-193.
- Bodart, C. e M.J. Crochet (1994). The Time-Dependent Flow of a Viscoelastic Fluid around a Sphere. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **54**: 303-329.
- Boger, D.V. (1977). Highly elastic constant-viscosity fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **3**: 87-91.
- Boger, D.V. (1987). Viscoelastic flows through contractions. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **19**: 157-182.
- Boger, D.V., M.J. Crochet e R.A. Keiller (1992). On Viscoelastic Flows through Abrupt Contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **44**: 267-279.
- Boger, D.V., D.U. Hur e R.J. Binnington (1986). Further observations of elastic effects in tubular entry flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 31-49.
- Boger, D.V. e K. Walters (1993). *Rheological phenomena in focus*. Elsevier, Amsterdam.
- Brown, R.A., R.C. Armstrong, A.N. Beris e P.-W. Yeh (1986). Galerkin finite element analysis of complex viscoelastic flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **58**: 201-226.
- Brown, R.A. e G.H. McKinley (1994). Report on the VIIIth International Workshop on Numerical Methods in Viscoelastic Flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **52**: 407-413.
- Bush, M.B. (1993). The Stagnation Flow Behind a Sphere. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **49**: 103-122.
- Cable, P.J. e D.V. Boger (1978a). A comprehensive experimental investigation of tubular entry flow of viscoelastic fluids. Part I - Vortex characteristics in stable flow. *AIChE J.* **24**: 869-879.
- Cable, P.J. e D.V. Boger (1978b). A comprehensive experimental investigation of tubular entry flow of viscoelastic fluids. Part II - The velocity field in stable flow. *AIChE J.* **24**: 992-999.
- Cable, P.J. e D.V. Boger (1979). A comprehensive experimental investigation of tubular entry flow of viscoelastic fluids. Part III - Unstable flow. *AIChE J.* **25**: 152-159.
- Caola, A.E., Y.L. Joo, R.C. Armstrong e R.A. Brown (2001). Highly parallel time integration of viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **100**: 191-216.
- Carew, E.O.A. e P. Townsend (1988). Non-Newtonian flow past a sphere in a long cylindrical tube. *Rheol. Acta* **27**: 125-129.
- Carreau, P.J. (1972). Rheological equations from molecular network theories. *Trans. Soc. Rheol.* **16**: 99-127.
- Caswell, B. e M. Viriyayuthakorn (1983). Finite-Element simulation of die swell for a Maxwell fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **12**: 13-29.
- Chang, P.-W., T.W. Patten e B.A. Finlayson (1979). Collocation and Galerkin finite element methods for viscoelastic fluid flow. II. Die swell problems with a free surface. *Comput. Fluids* **7**: 285-293.
- Chauvière, C. e R.G. Owens (2000). How accurate is your solution? Error indicators for viscoelastic flow calculations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **95**: 1-33.
- Chauvière, C. e R.G. Owens (2001). A new spectral element method for the reliable computation of viscoelastic flow. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **190**: 3999-4018.
- Chilcott, M.D. e J.M. Rallison (1988). Creeping Flow of Dilute Polymer-Solutions Past Cylinders and Spheres. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 381-432.

- Choi, H.C., J.H. Song e J.Y. Yoo (1988). Numerical-Simulation of the Planar Contraction Flow of a Giesekus Fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 347-379.
- Coates, P.J., R.C. Armstrong e R.A. Brown (1992). Calculation of steady-state viscoelastic flow through axisymmetric contractions with the EEME formulation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **42**: 141-188.
- Cochrane, T., K. Walters e M.F. Webster (1981). On Newtonian and non-Newtonian flow in complex geometries. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **A301**: 163-181.
- Coleman, C.J. (1981). A Finite-Element routine for analyzing non-Newtonian flows. 2. The extrusion of a Maxwell fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **8**: 261-270.
- Courant, R., E. Isaacson e M. Rees (1952). On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by Finite Differences. *Comm. Pure Appl. Math.* **5**: 243-255.
- Crochet, M.J. (1982). The flow of a Maxwell fluid around a sphere. *Finite elements in fluids*. Ed. Gallagher, R.H. Wiley, New York. 4.
- Crochet, M.J. (1989). Numerical simulation of viscoelastic flow: a review. *Rubber Chemistry and Technology* **62**: 426-455.
- Crochet, M.J. (1994). Numerical simulation of viscoelastic flow. *VKI Lecture Series 1994-03*. VKI, Brussels.
- Crochet, M.J. e M. Bezy (1979). Numerical solution for the flow of viscoelastic fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **5**: 201-218.
- Crochet, M.J., A.R. Davies e K. Walters (1984). *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*. Elsevier, Amsterdam.
- Crochet, M.J., V. Delvaux e J.M. Marchal (1990). On the convergence of the Streamline-Upwind Mixed Finite-Element. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **34**: 261-268.
- Crochet, M.J. e R. Keunings (1980). Die swell of a Maxwell fluid - Numerical prediction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **7**: 199-212.
- Crochet, M.J. e R. Keunings (1982). Finite-Element analysis of die swell of a highly elastic fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **10**: 339-356.
- Crochet, M.J. e V. Legat (1992). The consistent streamline upwind Petrov-Galerkin method for viscoelastic flow revisited. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **42**: 283-299.
- Crochet, M.J. e K. Walters (1983). Numerical methods in non-Newtonian fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **15**: 241-260.
- Cross, M.M. (1965). Rheology of non-Newtonian fluids - a new flow equation for pseudoplastic systems. *J. Colloid Sci.* **20**: 417-437.
- Darwish, M.S. e F. Moukalled (1994). Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes. *Numer. Heat Transfer B* **26**: 79-96.
- Darwish, M.S., J.R. Whiteman e M.J. Bevis (1992). Numerical Modeling of Viscoelastic Liquids Using a Finite- Volume Method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **45**: 311-337.
- Davies, A.R. e J. Devlin (1993). On Corner Flows of Oldroyd-B Fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **50**: 173-191.
- Davies, J.M. e K. Walters (1972). The behaviour of lubricants in journal bearings - a theoretical study. *Rheology of lubricants*. Ed. Davenport, T.C. Appl. Sci. Pub., Barking, England: 13-51.

- Dean, W.R. e P.E. Montagnon (1949). On the steady motion of viscous liquid in a corner. *Proc. Camb. Phil. Soc.* **45**: 389-394.
- Debbaut, B. e M.J. Crochet (1986). Further Results on the Flow of a Viscoelastic Fluid through an Abrupt Contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 173-185.
- Debbaut, B., J.M. Marchal e M.J. Crochet (1988). Numerical simulation of highly viscoelastic flows through an abrupt contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 119-146.
- Deiber, J.A. e A.S.M. Santa Cruz (1984). On non-Newtonian fluid flow through a tube of circular cross-section. *Lat. Am. J. Chem. Eng. Appl. Chem.* **14**: 19-38.
- Doraiswamy, D. (2002). The origins of Rheology: a short historical excursion. *Rheology Bulletin* **71**: 7-17.
- Dou, H. e N. Phan-Thien (1998). Parallelisation of an unstructured finite volume code with PVM: viscoelastic flow around a cylinder. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **77**: 21-51.
- Dou, H.-S. e N. Phan-Thien (1999). The flow of an Oldroyd-B fluid past a cylinder in a channel: Adaptive viscosity vorticity (DAVSS-omega) formulation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **87**: 47-73.
- Dou, H.-S. e N. Phan-Thien (2001). Numerical difficulties at high elasticity for viscoelastic flow past a confined cylinder. *Int. J. Comput. Eng. Sci.* **2**: 249-266.
- Duda, J.L. e J.S. Vrentas (1973). Entrance flows of non-Newtonian fluids. *Trans. Soc. Rheol.* **17**: 89-108.
- Dupret, F. e J.M. Marchal (1986). Loss of Evolution in the Flow of Viscoelastic Fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 143-171.
- Durst, F. e J.C.F. Pereira (1988). Time -dependent backward-facing step flow in a two-dimensional duct. *ASME J. Fluids Eng.* **110**: 289-296.
- Español, P., X.F. Yuan e R.C. Ball (1996). Shear banding flow in the Johnson-Segalman fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **65**: 93-109.
- Evans, R.E. e K. Walters (1986). Flow Characteristics Associated with Abrupt Changes in Geometry in the Case of Highly Elastic Liquids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 11-29.
- Evans, R.E. e K. Walters (1989). Further Remarks on the Lip-Vortex Mechanism of Vortex Enhancement in Planar-Contraction Flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **32**: 95-105.
- Fan, Y., R.I. Tanner e N. Phan-Thien (1999). Galerkin/least-square finite-element methods for steady viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **84**: 233-256.
- Faxén, H. (1923). Die bewegung einer starren Kugel längs der Achse eines mit zäher Flüssigkeit gefüllten Rhoes. *Arkiv. Matem. Astron. Fysik* **17**: 1-28.
- Ferziger, J.H. e M. Peric (1996). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin.
- Flory, P.J. (1953). *Principles in polymer chemistry*. Cornell University Press, New York.
- Fortin, M. e A. Fortin (1989). A new approach for the FEM simulation of viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **32**: 295-310.
- Freitas, C.J. (1993). Editorial policy statement on the control of numerical accuracy. *ASME J. Fluids Eng.* **115**: 339-340.
- Gaskell, P.H. e A.K.C. Lau (1988). Curvature compensated convective transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **8**: 617-641.

- Gatski, T.B. e J.L. Lumley (1978). Non-Newtonian flow characteristics in a steady two-dimensional flow. *J. Fluid Mech.* **86**: 623-639.
- Georgiou, G.C. e D. Vlassopoulos (1998). On the stability of the simple shear flow of a Johnson-Segalman fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **75**: 77-97.
- Gervang, B., A.R. Davies e T.N. Phillips (1992). On the Simulation of Viscoelastic Flow Past a Sphere Using Spectral Methods. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **44**: 281-306.
- Giesekus, H. (1982). A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **11**: 69-109.
- Godunov, S.K. (1959). A difference scheme for numerical computations of discontinuous solution of hydrodynamic equations. *Math. Sbornik* **47**: 271-306, em Russo, Tradução US Joint Publ. Res. Service, JPRS (1969) 7226.
- Gomes de Castro, A., J.A. Covas e A.C. Diogo, Eds. (2001). *Reologia e suas aplicações industriais*. Ciência e Técnica. Instituto Piaget, Lisboa.
- Gresho, P.M., D.K. Gartling, J.R. Torczynski, K.A. Cliffe, K.H. Winters, T.J. Garratt, A. Spence e J.W. Goodrich (1993). Is the steady viscous incompressible two-dimensional flow over a backward-facing step at $Re=800$ stable? *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **17**: 501-541.
- Griffiths, D.F., D.T. Jones e K. Walters (1969). A flow reversal due to edge effects. *J. Fluid Mech.* **36**: 161-175.
- Griffiths, D.F. e K. Walters (1970). On edge effects in rheometry. *J. Fluid Mech.* **42**: 379-399.
- Grillet, A.M., A.C.B. Bogaerds, G.W.M. Peters e F.P.T. Baaijens (2002). Numerical analysis of flow mark surface defects in injection molding flow. *J. Rheol.* **46**: 651-669.
- Harlow, F.H. e J.E. Welch (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow with free surface. *Phys. Fluids* **8**: 2182-2189.
- Harten, A. (1983). High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.* **49**: 357-393.
- Hassager, O. (1988). Working group on numerical techniques. Fifth international workshop on numerical methods in non-Newtonian flows, Lake Arrowhead, USA. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 2-5.
- Hayase, T., J.A.C. Humphrey e R. Greif (1992). A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using Finite-Volume iterative calculation procedures. *J. Comput. Phys.* **98**: 108-118.
- Hinch, E.J. (1993). The flow of an Oldroyd fluid around a sharp corner. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **50**: 161-171.
- Hirsch, C. (1990). *Numerical computation of internal and external flows. Volume 2- Computational methods for inviscid and viscous flows*. Wiley, Chichester.
- Hu, H.H. e D.D. Joseph (1990). Numerical simulation of viscoelastic flow past a cylinder. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **37**: 347-377.
- Huang, P.Y. e J. Feng (1995). Wall effects on the flow of viscoelastic fluids around a circular-cylinder. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **60**: 179-198.
- Hulsen, M.A., A.P.G. van Heel e B.H.A.A. Van den Brule (1997). Simulation of viscoelastic flows using Brownian configuration fields. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **70**: 79-101.
- Issa, R.I. e P.J. Oliveira (1994). Numerical predictions of phase separation in two-phase flow through T-junctions. *Comput. Fluids* **23**: 347-372.

- Jackson, N.R. e B.A. Finlayson (1982). Calculation of hole pressure. 2- Viscoelastic fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **10**: 71-84.
- Jasak, H., H.G. Weller e A.D. Gosman (1999). High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **31**: 431-449.
- Jeffreys, H. (1924). *The Earth*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Jin, H., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1991). A finite element analysis of the flow past a sphere in a cylindrical tube: PTT fluid model. *Comp. Mech.* **8**: 409-422.
- Joseph, D.D. e J.C. Saut (1986). Change of Type and Loss of Evolution in the Flow of Viscoelastic Fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 117-141.
- Josse, S.L., K.C. Lee e B.A. Finlayson (1986). False bifurcations and instability of a Maxwell fluid in fully developed flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 257-269.
- Kawahara, M. e N. Takeuchi (1977). Mixed finite element method for analysis of viscoelastic fluid flow. *Comput. Fluids* **5**: 33-45.
- Keiller, R.A. (1993). Entry flow calculations for the Oldroyd-B and FENE equations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **46**: 143-178.
- Keunings, R. (1986). On the High Weissenberg Number Problem. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 209-226.
- Keunings, R. (1989). Simulation of viscoelastic fluid flow. *Computer modeling for polymer processing*. Ed. Tucker, C.L. Hanser, Munich: 404-469.
- Keunings, R. (2000). *A survey of computational rheology*. XIII International Congress on Rheology, Cambridge, U.K., British Society of Rheology.
- Keunings, R. e M.J. Crochet (1984). Numerical simulation of the flow of a viscoelastic fluid through an abrupt contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **14**: 279-299.
- Khosla, P.K. e S.G. Rubin (1974). A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. *Comput. Fluids* **2**: 207-209.
- King, R.C., M.R. Apelian, R.C. Armstrong e R.A. Brown (1988). Numerically stable Finite-Element techniques for viscoelastic calculations in smooth and singular geometries. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 147-216.
- Kolkka, R.W., D.S. Malkus, M.G. Hansen, G.R. Ierley e R.A. Worthing (1988). Spurt phenomena of the Johnson Segalman fluid and related models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 303-335.
- Larson, R.G. (1988). Analytic Results for Viscoelastic Flow in a Porous Tube. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **28**: 349-371.
- Lawler, J.V., S.J. Muller, R.A. Brown e R.C. Armstrong (1986). Laser Doppler velocimetry measurements of velocity fields and transitions in viscoelastic fluids. *J. Non-Newt. Fluid Mech.* **20**: 51-92.
- Lax, P.D. e B. Wendroff (1960). Systems of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.* **13**: 217-237.
- Leonard, B.P. (1979). A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **19**: 59-98.
- Leonard, B.P. (1988). Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **8**: 1291-1318.
- Leonard, B.P. (1991). The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **88**: 17-74.

- Leonard, B.P. (1996). Bounded higher-order upwind multidimensional finite-volume convection-diffusion algorithms. *Advances in Numerical Heat Transfer*. Ed. Minkowycz, W.J. e E.M. Sparrow. Taylor and Francis. **1**: 1-57.
- Leonard, B.P. e J.E. Drummond (1995). Why You Should Not Use Hybrid, Power-Law or Related Exponential Schemes for Convective Modeling - There Are Much Better Alternatives. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **20**: 421-442.
- Lim, F.J. e W.R. Schowalter (1987). Pseudo-spectral analysis of the stability of pressure-driven flow of a Giesekus fluid between parallel planes. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **26**: 135-142.
- Liu, A.W., D.E. Bornside, R.C. Armstrong e R.A. Brown (1998). Viscoelastic flow of polymer solutions around a periodic, linear array of cylinders: comparisons of predictions for microstructure and flow fields. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **77**: 153-190.
- Lunsmann, W.J., L. Genieser, R.C. Armstrong e R.A. Brown (1993). Finite-Element Analysis of Steady Viscoelastic Flow around a Sphere in a Tube - Calculations with Constant Viscosity Models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **48**: 63-99.
- Luo, X.L. (1996). Operator splitting algorithm for viscoelastic flow and numerical analysis for the flow around a sphere in a tube. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **63**: 121-140.
- Luo, X.L. e R.I. Tanner (1986). A Streamline Element Scheme for Solving Viscoelastic Flow Problems .1. Differential Constitutive-Equations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **21**: 179-199.
- Luo, X.L. e R.I. Tanner (1989). A Decoupled Finite-Element Streamline-Upwind Scheme for Viscoelastic Flow Problems. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **31**: 143-162.
- Madureira, A. (1948). *Licções de Álgebra Superior e Geometria Analítica. Tomo I - Álgebra*. 2ª Ed. Porto Editora, Porto.
- Marchal, J.M. e M.J. Crochet (1986). Hermitian Finite-Elements for Calculating Viscoelastic Flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 187-207.
- Marchal, J.M. e M.J. Crochet (1987). A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **26**: 77-114.
- Matallah, H., P. Townsend e M.F. Webster (1998). Recovery and stress-splitting schemes for viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **75**: 139-166.
- Maxwell, J.C. (1867). On the dynamical theory of gases. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **A157**: 49-88.
- McKinley, G.H. (1991). *Nonlinear dynamics of viscoelastic flows in complex geometries*. PhD Thesis. Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge.
- McKinley, G.H. (2002). Steady and transient motion of spherical particles in viscoelastic liquids. *Transport Processes in Bubbles, Drops and Particles*. Ed. De Kee, D. e R.P. Chhabra. Taylor & Francis, New York.
- McKinley, G.H., R.C. Armstrong e R.A. Brown (1993). The Wake Instability in Viscoelastic Flow Past Confined Circular Cylinders. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **A344**: 265-304.
- Meijerink, J.A. e H.A. van der Vorst (1977). An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix. *Math. of Comp.* **31**: 148-162.
- Mendelson, M.A., P.W. Yeh, R.A. Brown e R.C. Armstrong (1982). Approximation error in Finite-Element calculation of viscoelastic fluid flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **10**: 31-54.

- Meng, S., X.K. Li e G. Evans (2002). Numerical Simulation of Oldroyd-B Fluid in a Contraction Channel. *Journal of Supercomputing* **22**: 29-43.
- Menon, R.K., M.E. Kime, R.C. Armstrong, R.A. Brown e J.R. Brady (1988). Injection and Suction of an Upper-Convected Maxwell Fluid through a Porous-Walled Tube. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **27**: 265-297.
- Mitsoulis, E. (1993). Numerical simulation of planar entry flow for a polyisobutylene solution using an integral constitutive equation. *J. Rheol.* **37**: 1029-1040.
- Mitsoulis, E. (1998). Numerical simulation of confined flow of polyethylene melts around a cylinder in a planar channel. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **76**: 327-350.
- Moffatt, H.K. (1964). Viscous and resistive eddies near a sharp corner. *J. Fluid Mech.* **18**: 1-18.
- Mompean, G. e M. Deville (1997). Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **72**: 253-279.
- Muller, S.J. (1986). *Experimental analysis of flow through an axisymmetric sudden contraction: Rheological characterization and LDV measurements*. PhD Thesis, MIT, Cambridge, MA.
- Nguyen, H. e D.V. Boger (1979). Kinematics and stability of die entry flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **5**: 353-368.
- Nigen, S. e K. Walters (2002). Viscoelastic contraction flows: comparison of axisymmetric and planar configurations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **102**: 343-359.
- Oldroyd, J.B. (1950). On the formulation of rheological equations of state. *Proc. Roy. Soc. London A* **200**: 523-541.
- Oldroyd, J.G. (1984). An approach to non-Newtonian fluid mechanics. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **14**: 9-46.
- Oliveira, P.J. (1992). *Computer Modelling of Multidimensional Multiphase Flow and Applications to T-Junctions*. PhD Thesis, Imperial College, Univ. of London.
- Oliveira, P.J. (2000). A traceless stress tensor formulation for viscoelastic fluid flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **95**: 55-65.
- Oliveira, P.J. (2001). On the numerical implementation of nonlinear viscoelastic models in a finite-volume method. *Numer. Heat Transfer B* **40**: 283-301.
- Oliveira, P.J. (2002). An exact solution for tube and slit flow of a FENE-P fluid. *Acta Mechanica* **158**: 157-167.
- Oliveira, P.J. e F.T. Pinho (1999a). Analytical Solution for Fully-Developed Channel and Pipe Flow of Phan-Thien-Tanner Fluids. *J. Fluid Mech.* **387**: 271-280.
- Oliveira, P.J. e F.T. Pinho (1999b). Plane contraction flows of Upper Convected Maxwell and Phan-Thien-Tanner fluids as predicted by a finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **88**: 63-88.
- Oliveira, P.J. e F.T. Pinho (1999c). Numerical procedure for the computation of fluid flow with arbitrary stress-strain relationships. *Numer. Heat Transfer B* **35**: 295-315.
- Oliveira, P.J., F.T. Pinho e G.A. Pinto (1998). Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**: 1-43.

- Olsson, F. (1994). A solver for time-dependent viscoelastic fluid flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **51**: 309-340.
- Oseen, C.W. (1910). Über die Stokes'sche Formel und über eine verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik. *Arkiv. Matem. Astron. Fysik* **6**: 1-20.
- Owens, R.G., C. Chauviere e T.N. Phillips (2002). A locally-upwinded spectral technique (LUST) for viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **108**: 49-71.
- Owens, R.G. e T.N. Phillips (2002). *Computational Rheology*. Imperial College Press, London.
- Papanastasiou, A.C., L.E. Scriven e C.W. Macosko (1983). An integral constitutive equation for mixed flows: Viscoelastic characterization. *J. Rheol.* **27**: 387-410.
- Pascau, A. e C. Pérez (1993). *A well-behaved scheme to model strong convection in a general transport equation*. Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, UK.
- Patankar, S.V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation.
- Patera, A.T. (1984). A spectral element method for fluid dynamics: laminar flow in a channel expansion. *J. Comput. Phys.* **54**: 468-488.
- Perera, M.G.N. e K. Strauss (1979). Direct numerical solutions of the equations for viscoelastic fluid flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **5**: 269-283.
- Perera, M.G.N. e K. Walters (1977a). Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. 1-Flows associated with L-shaped and T-shaped geometries. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **2**: 49-81.
- Perera, M.G.N. e K. Walters (1977b). Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. 2-Expansion-contraction-expansion problem. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **2**: 191-204.
- Peric, M. (1985). *A finite volume method for the prediction of three-dimensional fluid flow in complex ducts*. PhD Thesis. Mech. Eng. Dep., Imperial College, London.
- Phan-Thien, N. (1978). A nonlinear network viscoelastic model. *J. Rheol.* **22**: 259-283.
- Phan-Thien, N. (1984). Squeezing a viscoelastic liquid from a wedge - an exact solution. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **16**: 329-345.
- Phan-Thien, N. (1985). Cone-and-plate flow of the Oldroyd-B fluid is unstable. *J. Non-Newt. Fluid Mech.* **17**: 37-44.
- Phan-Thien, N. e H.-S. Dou (1999). Viscoelastic flow past a cylinder: drag coefficient. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **180**: 243-266.
- Phan-Thien, N. e R.I. Tanner (1977). A new constitutive equation derived from network theory. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **2**: 353-365.
- Phillips, T.N. e A.J. Williams (1999). Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-Lagrangian finite volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **87**: 215-246.
- Phillips, T.N. e A.J. Williams (2002). Comparison of creeping and inertial flow of an Oldroyd B fluid through planar and axisymmetric contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **108**: 25-47.
- Pilate, G. e M.J. Crochet (1977). Plane flow of a 2nd-order fluid past submerged boundaries. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **2**: 323-341.
- Pina, H. (1995). *Métodos Numéricos*. McGraw-Hill, Lisboa.

- Proudman, I. e J.R. Pearson (1957). Expansions at small Reynolds numbers for the flow past a sphere and a circular cylinder. *J. Fluid Mech.* **2**: 237-262.
- Quinzani, L.M., R.C. Armstrong e R.A. Brown (1994). Birefrigerence and laser-Doppler velocimetry (LDV) studies of viscoelastic flow through a planar contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **52**: 1-36.
- Quinzani, L.M., G.H. McKinley, R.A. Brown e R.C. Armstrong (1990). Modeling the rheology of polyisobutylene solutions. *J. Rheol.* **34**: 705-748.
- Rajagopalan, D., M.T. Arigo e G.H. McKinley (1996). The sedimentation of a sphere through an elastic fluid. 2. Transient motion. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **65**: 17-46.
- Rajagopalan, D., R.C. Armstrong e R.A. Brown (1990). Finite element methods for calculations of steady viscoelastic flow using constitutive equations with a Newtonian viscosity. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **36**: 159-192.
- Rao, R.R. e B.A. Finlayson (1990). On the quality of viscoelastic flow solutions: an adaptive refinement study of a Newtonian and a Maxwell fluid. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **11**: 571-585.
- Rao, R.R. e B.A. Finlayson (1991). Adaptive Refinement of a Viscoelastic Flow Problem with the Explicitly Elliptic Momentum Equation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **38**: 223-246.
- Raviart, P.A. e P. Lesaint (1974). *On a Finite Element method for solving the neutron transport equation*. Academic Press, New York.
- Reid, R.C., J.M. Prausnitz e B.E. Poling (1988). *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill, New York.
- Reiner, M. (1964). The Deborah number. *Phys. Today* **17**: 62.
- Renardy, M. (1993). The Stresses of an Upper Convected Maxwell Fluid in a Newtonian Velocity-Field near a Reentrant Corner. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **50**: 127-134.
- Renardy, M. (1997). Re-entrant corner behavior of the PTT fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **69**: 99-104.
- Renardy, M. (2000a). Asymptotic structure of the stress field in flow past a cylinder at high Weissenberg number. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **90**: 13-23.
- Renardy, M. (2000b). Current issues in non-Newtonian flows: a mathematical perspective. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **90**: 243-259.
- Rhie, C.M. e W.L. Chow (1983). Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation. *AIAA J.* **21**: 1525-1532.
- Richards, G.D. e P. Townsend (1981). A Finite Element computer model of the hole pressure problem. *Rheol. Acta* **20**: 261-269.
- Richardson, L.F. (1910). The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations with an application to the stresses in a masonry dam. *Trans. Roy. Soc. London, Ser. A* **210**: 307-357.
- Roache, P.J. (1997). Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **29**: 123-160.
- Roe, P.L., Ed. (1985). *Large Scale Computations in Fluid Mechanics, Pt. 2. Lectures in Applied Mathematics, Vol. 22*. American Mathematical Society, Providence R.I.
- Rogerson, M.A. e Y.L. Yeow (1999). Representation of Stokes flow through a planar contraction by Papkovitch-Fadle Eigenfunctions. *J. Appl. Mech. - Trans. ASME* **66**: 940-944.

- Rosenberg, J.R. e R. Keunings (1988). Further results on the flow of a Maxwell fluid through an abrupt contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 295-302.
- Saramito, P. e J.M. Piau (1994). Flow characteristics of viscoelastic fluids in an abrupt contraction by using numerical modeling. *J. Non-Newt. Fluid Mech.* **52**: 263-288.
- Sasmal, G.P. (1995). A Finite-Volume Approach for Calculation of Viscoelastic Flow- through an Abrupt Axisymmetrical Contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **56**: 15-47.
- Sato, T. e S.M. Richardson (1994). Explicit numerical simulation of time-dependent viscoelastic flow problems by a finite element/finite volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **51**: 249-275.
- Schleiniger, G. e R.J. Weinacht (1991). Steady Poiseuille flows for a Giesekus fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **40**: 79-102.
- Shah, R.K. e A.L. London (1978). *Laminar Forced Convection in Ducts*. Academic Press, New York.
- Sisko, A.W. (1958). The flow of lubricating greases. *Ind. Eng. Chem.* **50**: 1789-1792.
- Skelland, A.H.P. (1967). *Non-Newtonian Flow and Heat Transfer*. Wiley, New York.
- Song, B., G.R. Liu, K.Y. Lam e R.S. Amano (2000). On a higher-order bounded discretization scheme. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **32**: 881-897.
- Spalding, D.B. (1972). A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **4**: 551-559.
- Stokes, G.G. (1851). On the effect of the internal friction of fluids on pendulums. *Trans. Camb. Phil. Soc.* **9**: 8-106.
- Stokes, J.R. (1998). *Swirling flow of viscoelastic fluids*. PhD Thesis. Department of Chemical Engineering, University of Melbourne, Parkville, Victoria, Australia.
- Stokes, J.R., L.J.W. Graham, N.J. Lawson e D.V. Boger (2001a). Swirling flow of viscoelastic fluids. Part 1-Interaction between inertia and elasticity. *J. Fluid Mech.* **429**: 67-115.
- Stokes, J.R., L.J.W. Graham, N.J. Lawson e D.V. Boger (2001b). Swirling flow of viscoelastic fluids. Part 2-Elastic effects. *J. Fluid Mech.* **429**: 117-153.
- Sun, J., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1996). An adaptive viscoelastic stress splitting scheme and its applications: AVSS/SI and AVSS/SUPG. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **65**: 75-91.
- Sun, J., M.D. Smith, R.C. Armstrong e R.A. Brown (1999). Finite element method for viscoelastic flows based on the discrete adaptative viscoelastic stress splitting and the discontinuous Galerkin method: DAVSS-G/DG. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **86**: 281-307.
- Sureshkumar, R., M.D. Smith, R.C. Armstrong e R.A. Brown (1999). Linear stability and dynamics of viscoelastic flows using time- dependent numerical simulations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **82**: 57-104.
- Sweby, P.K. (1984). High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.* **21**: 995-1011.
- Tadmor, Z. e C.G. Gogos (1979). *Principles of Polymer Processing*. 1st Ed. Wiley, New York.
- Tanner, R.I. (2000). *Macromolecules, Megacomputers and the Millenium*. XIII International Congress on Rheology, Cambridge, U.K., British Society of Rheology.

- Tanner, R.I., A. Jabbarzadeh e S.-C. Xue (2000). *Computations at sharp corners*. XIII International Congress on Rheology, Cambridge, U.K., British Society of Rheology.
- Tanner, R.I. e H. Jin (1991). A study of some numerical viscoelastic schemes. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **41**: 171-196.
- Tanner, R.I., R.E. Nickell e R.W. Bilger (1975). Finite element methods for the solution of some incompressible non-Newtonian fluid mechanics problems with free surfaces. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **6**: 155-174.
- Tanner, R.I. e S.-C. Xue (2002). Computing transient flows with high elasticity. *Korea-Australia Rheology Journal* **14**: 143-159.
- Tiefenbruck, G. e L.G. Leal (1982). A numerical study of the motion of a viscoelastic fluid past rigid spheres and spherical bubbles. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **10**: 115-155.
- Townsend, P. (1980). Numerical simulation of Newtonian and viscoelastic flow past stationary and rotating cylinders. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **6**: 219-243.
- Tsai, T.P. e D.S. Malkus (2000). Numerical breakdown at high Weissenberg number in non-Newtonian contraction flows. *Rheol. Acta* **39**: 62-70.
- van Doormal, J.P. e G.D. Raithby (1984). Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numer. Heat Transfer* **7**: 147-163.
- van Dyke, M. (1982). *An album of fluid motion*. The Parabolic Press, Stanford, California.
- van Leer, B. (1974). Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *J. Comput. Phys.* **14**: 361-370.
- van Schaftingen, J.J. e M.J. Crochet (1985). Analytical and numerical solution of the Poiseuille flow of a Johnson-Segalman fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **18**: 335-351.
- Verhelst, J.M. (2001). *Model evaluation and dynamics of a viscoelastic fluid in a complex flow*. PhD Thesis, Delft University, The Netherlands.
- Vinokur, M. (1989). An analysis of finite-difference and finite-volume formulations of conservation laws. *J. Comput. Phys.* **81**: 1-52.
- Viriayayuthakorn, M. e B. Caswell (1980). Finite-Element simulation of viscoelastic flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **6**: 245-267.
- Volk, H. e R.E. Friedrich (1980). Polyacrylamide. *Handbook of water-soluble gums and resins*. Ed. Davidson, R.L. McGraw-Hill, New York.
- Wachs, A. e J.R. Clermont (2000). Non-isothermal viscoelastic flow computations in an axisymmetric contraction at high Weissenberg numbers by a finite volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **95**: 147-184.
- Walters, K. e D.M. Rawlinson (1982). On some contraction flows for Boger fluids. *Rheol. Acta* **21**: 547-555.
- Walters, K. e N.D. Waters (1968). On the use of a rheogoniometer. Part I. Steady shear. *Polymer systems: Deformation and flow*. Ed. Wetton, R.E. e R.W. Whorlow. Macmillan, London: 212-235.
- Walters, K. e M.F. Webster (1982). On dominating elastico-viscous response in some complex flows. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **A308**: 199-218.
- Walters, K. e M.F. Webster (2003). The distinctive CFD challenges of computational rheology. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **43**: 577-596.

- Wapperom, P. e M.F. Webster (1998). A second-order hybrid finite-element/volume method for viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**: 405-431.
- Wapperom, P. e M.F. Webster (1999). Simulation of viscoelastic flow by a finite volume/element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **180**: 281-304.
- Warichet, V. e V. Legat (1997). Adaptive high-order prediction of the drag correction factor for the upper-convected Maxwell fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **73**: 95-114.
- Warming, R.F. e R.M. Beam (1976). Upwind second order difference schemes and applications in aerodynamics. *AIAA J.* **14**: 1241-1249.
- Waterson, N.P. e H. Deconinck (1995). *A unified approach to the design and application of bounded higher-order convection schemes*. Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Swansea, UK.
- White, J.L. e A.B. Metzner (1963). Development of constitutive equations for polymeric melts and solutions. *J. Appl. Polym. Sci.* **7**: 1867-1889. ⁴
- White, S.A. e D.G. Baird (1986). The Importance of Extensional Flow Properties on Planar Entry Flow Patterns of Polymer Melts. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **20**: 93-101.
- White, S.A. e D.G. Baird (1988a). Flow Visualization and Birefringence Studies on Planar Entry Flow Behavior of Polymer Melts. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **29**: 245-267.
- White, S.A. e D.G. Baird (1988b). Numerical simulation studies of the planar entry flow of polymer melts. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **30**: 47-71.
- White, S.A., A.D. Gotsis e D.G. Baird (1987). Review of the Entry Flow Problem - Experimental and Numerical. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **24**: 121-160.
- Xue, S.-C., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1995). Numerical study of secondary flows of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **59**: 191-213.
- Xue, S.-C., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1998a). Three dimensional numerical simulations of viscoelastic flows through planar contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **74**: 195-245.
- Xue, S.-C., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1998b). Numerical investigations of Lagrangian unsteady extensional flows of viscoelastic fluids in 3-D rectangular ducts with sudden contractions. *Rheol. Acta* **37**: 158-169.
- Yasuda, K., R.C. Armstrong e R.E. Cohen (1981). Shear-flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes. *Rheol. Acta* **20**: 163-178.
- Yoo, J.Y. e Y. Na (1991). A numerical study of the planar contraction flow of viscoelastic fluids using the SIMPLER algorithm. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **39**: 89-106.
- Yuran, F. e M.J. Crochet (1995). High-Order Finite-Element Methods for Steady Viscoelastic Flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **57**: 283-311.
- Zheng, R., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1990). On the flow past a sphere in a cylindrical tube - Limiting Weissenberg number. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **36**: 27-49.
- Zheng, R., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1991). The flow past a sphere in a cylindrical tube: effects of inertia, shear-thinning and elasticity. *Rheol. Acta* **30**: 499-510.
- Zhu, J. (1991). A low-diffusive and oscillation-free convection scheme. *Comm. Appl. Numer. Meth.* **7**: 225-232.

-
- Zhu, J. e W. Rodi (1991). A low dispersion and bounded convection scheme. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **92**: 89-96.



FACULDADE DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE DO PORTO BIBLIOTECA



0000079770