

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ANÁLISE DO DESEMPENHO NUMÉRICO DO *SOLVER*
VISCOELASTICFLUIDFOAM

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

GUSTAVO NICKNICH

PORTO ALEGRE, RS

2014

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ANÁLISE DO DESEMPENHO NUMÉRICO DO *SOLVER*
VISCOELASTICFLUIDFOAM

GUSTAVO NICKNICH

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

Orientador:

Prof. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo, D.Sc.

Co-orientadores:

Prof. Álvaro Luiz de Bortoli, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Porto Alegre, RS

2014

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Análise do Desempenho Numérico do Solver viscoelasticFluidFoam*, elaborada por Gustavo Nicknich, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:



Profa. Isabel Cristina Tessaro, Dra.Sc.



Prof. Jorge Rodolfo Silva Zabadal, D.Sc.



Prof. Marcelo Farenzena, D.Sc.

Nossa maior fraqueza está em desistir. O caminho mais certo de vencer é tentar mais uma vez.

Thomas Edison

Agradecimentos

Aos professores Nilo Sérgio Medeiros Cardozo, Álvaro Luiz de Bortoli e Argimiro Resende Secchi, pela orientação e apoio durante o desenvolvimento deste trabalho.

À minha doce Rachel, pelo seu apoio e dedicação em todos os momentos.

Aos meus pais, Vitor e Lizane, e à minha irmã Daniela, pelo apoio e compreensão.

Aos colegas do Laboratório de Simulação – LASIM, e aos demais colegas de mestrado, pelo apoio mútuo e pela descontração durante este curso.

Aos colegas do Ministério da Pesca e Aquicultura – MPA, que sempre acreditaram na conclusão deste trabalho.

Resumo

Polímeros sintéticos ocupam uma posição de grande importância no estilo de vida moderno, servindo como matérias-primas para a construção de uma variedade de utensílios. Apesar do grande número de operações de processamento e produtos disponíveis, o planejamento de produtos e a otimização dos processos de produção raramente constituem-se de tarefas triviais. Isso deve-se ao fato da maioria das operações aplicadas na indústria de processamento de polímeros envolverem geometrias e padrões de escoamento complexos, além da dificuldade intrínseca relacionada ao comportamento reológico complexo de polímeros fundidos ou soluções poliméricas. Devido a estes fatores, o desenvolvimento de técnicas de dinâmica de fluido computacional (*computational fluid dynamics* – CFD) para a simulação de escoamentos de fluidos poliméricos e etapas de operações de processamento tem sido assunto de numerosos estudos durante as últimas décadas. Sob esta perspectiva, o *solver* viscoelasticFluidFoam, merece destaque. Ele é capaz de resolver simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos utilizando diferentes equações constitutivas. Contudo, apesar de resultados existentes na literatura apresentarem um bom potencial de aplicação, uma análise extensiva de seu desempenho numérico ainda não foi realizada. Neste contexto, a proposta do presente trabalho é a análise da influência de parâmetros de malha, numéricos e constitutivos no comportamento do *solver*. As bases para os testes compreendem uma geometria simples – escoamento laminar entre duas placas paralelas – o modelo constitutivo de Oldroyd-B e respectivas soluções analíticas para os campos de velocidade e tensão. Mesmo os testes demonstrando a inegável versatilidade do *solver*, eles revelam limitações em lidar com algumas configurações de malha e parâmetros constitutivos, principalmente com relação ao refinamento na direção perpendicular ao escoamento, diminuição do número de Reynolds e aumento do número de Weissenberg. Estas limitações podem ser parcialmente contornadas com escolha adequada de parâmetros de relaxação das variáveis e da razão de aspecto dos volumes de controle. Tais dificuldades não estão presentes em simulações de escoamentos de fluidos newtonianos em condições semelhantes, sugerindo que trabalhos futuros devem focar em implementações mais robustas do *solver* viscoelasticFluidFoam.

Palavras-chave: viscoelasticFluidFoam, fluido viscoelástico, OpenFOAM, Oldroyd-B, solução analítica.

Abstract

Synthetic polymers hold a position of great importance in modern lifestyle, serving as raw materials for the construction of a wide variety of appliances. Despite the large number of processing operations and products available, product planning and optimization of production processes rarely constitute a trivial task. This is due to the fact of operations applied in polymer processing industry involve complex geometries and flow patterns, plus the intrinsic difficulty related to the molten polymers or polymer solutions complex rheological behavior. Because of these factors, the development of techniques of computational fluid dynamics (CFD) for the simulation of flows of polymeric fluids and stages of processing operations has been the subject of numerous studies during the last decades. From this perspective, the `viscoelasticFluidFoam` solver deserves mention. The solver is capable of resolving simulations of viscoelastic fluid flows using different constitutive equations. However, despite the existing results in the literature present a great potential for application, an extensive analysis of their numerical performance has not been performed yet. The purpose of this paper is to examine the influence of mesh, numerical and constitutive parameters in the behavior of the solver. Bases for the tests comprise a simple geometry – laminar flow between two parallel plates – the constitutive model of Oldroyd-B and its analytical solutions for the velocity and stress fields. Although the tests show the undeniable versatility of the solver, they also reveal limitations in dealing with some mesh settings and constitutive parameters, particularly with respect to refinement in the direction perpendicular to the flow, decreasing in the Reynolds number and increasing in the Weissenberg number. This limitation can be partially circumvented with proper choice of variables relaxation parameters and aspect ratio of the control volumes. Such difficulties are not present in simulations of Newtonian fluids flows under similar conditions, suggesting that future works should focus on more robust implementations of the `viscoelasticFluidFoam` solver.

Keywords: `viscoelasticFluidFoam`, viscoelastic fluid, OpenFOAM, Oldroyd-B, analytical solution

Sumário

Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xix
Lista de Símbolos	xxi
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivos.....	3
1.3 Estrutura da dissertação	4
2 Conceitos fundamentais e revisão bibliográfica	5
2.1 Simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos	5
2.1.1 Técnicas numéricas mais usadas	5
2.1.2 Dificuldades numéricas encontradas e parâmetros numéricos mais influentes.....	7
2.1.2.1 Esforço computacional	7
2.1.2.2 Problema do Alto Número de Weissenberg (High Weissenberg Number Problem – HWNP)	7
2.1.2.3 Número de Courant (C)	9
2.1.2.4 Acoplamento pressão-(velocidade-tensão) – PISO	10
2.1.2.5 Relaxação das variáveis	13
2.1.2.6 Tolerâncias na resolução dos sistemas linearizados	14
2.1.3 Estudos de validação de simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos.....	15
3 Metodologia	19
3.1 Equações governantes.....	19
3.2 Ferramentas computacionais	21
3.2.4 Pacote de CFD OpenFOAM.....	21
3.2.5 Solvers	22
3.2.6 Esquemas de discretização	23
3.2.7 Resolução dos sistemas lineares	24
3.2.8 Simulação em paralelo.....	25
3.2.9 Pacote PyFoam	25
3.3 Testes numéricos preliminares	26
3.4 Solução analítica para o escoamento de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas	30
3.5 Testes com o modelo constitutivo de Oldroyd-B e fluido newtoniano em condições similares às utilizadas na seção 3.3	32
3.5.1 Testes com o modelo de Oldroyd-B	33
3.5.2 Testes com fluido newtoniano.....	35
3.6 Análise da influência dos parâmetros e especificações numéricas na convergência da solução	35
3.6.1 Influência do refinamento da malha e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$	36

3.6.2 Acoplamento pressão-(velocidade-tensão) - PISO	36
3.6.3 Uso de relaxação das variáveis e aumento da tolerância na resolução dos sistemas lineares.....	37
3.6.4 Cálculo do campo de tensões a partir de uma solução newtoniana	39
3.6.5 Refinamento de malha direcionado à entrada	40
3.7 Tempo de relaxação λ	41
3.8 Testes com perfil parabólico de entrada	43
3.9 Testes com geometria de contração plana.....	44
3.10 Testes com geometria tridimensional com $W \gg H$	45
4 Resultados e Discussão.....	47
4.1 Testes numéricos preliminares.....	47
4.2 Testes com o modelo constitutivo de Oldroyd-B e fluido newtoniano.....	50
4.2.3 Testes com o modelo de Oldroyd-B	50
4.2.4 Testes com fluido newtoniano	53
4.3 Testes variando parâmetros constitutivos e numéricos.....	54
4.3.10 Influência do refinamento da malha e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$	54
4.3.11 Acoplamento pressão-(velocidade-tensão) - PISO	56
4.3.12 Uso de relaxação das variáveis e aumento da tolerância na resolução dos sistemas lineares.....	57
4.3.13 Cálculo explícito do campo de tensões a partir de uma solução newtoniana	61
4.3.14 Refinamento de malha direcionado à entrada	61
4.4 Testes com variação do tempo de relaxação λ	62
4.5 Testes com perfil parabólico de entrada	63
4.6 Testes com geometria de contração plana.....	64
4.7 Resultados dos testes com geometria tridimensional com $W \gg H$	68
5 Conclusões	71
Referências Bibliográficas.....	75
Anexo I.....	79
Anexo II.....	81
Anexo III.....	85
Anexo III.....	85
Anexo IV	87
Anexo IV	87
Anexo V	88
Anexo V	89
Anexo VI	91
Anexo VI	93

Anexo VII	94
Anexo VII	95
Anexo VIII	95
Anexo VIII	97
Anexo IX	101
Apêndice I	103
Apêndice II	104
Apêndice II	105

Lista de Figuras

Figura 3.1: Geometria utilizada para testes preliminares e respectivas condições de contorno ..	27
Figura 3.2: Viscosidade dependente da taxa de deformação para a parte viscosa de Herschel-Bulkley (contínuo) e Carreau-Yasuda (tracejado) comparando (a) conjuntos de parâmetros WM1 e HB01 e (b) conjuntos de parâmetros WM2 e HB02.	28
Figura 3.3: Malha com refinamento direcionado na entrada, foco no refinamento	41
Figura 3.4: Perfil de velocidade próximo à entrada para os casos (a) TL_OB_11 (em que não houve problemas de convergência) e (b) TL_OB_08 (divergiu em 0,42 s).....	43
Figura 3.5: Geometria utilizada nos testes de contração plana	44
Figura 4.1: Comportamento do erro em função do refinamento na direção do eixo y.....	55
Figura 4.2: Comportamento dos resíduos normalizados em função do tempo simulado para os casos (a) TR_OB_01 e (b) TR_OB_02.....	57
Figura 4.3: Comportamento dos resíduos normalizados em função do tempo simulado para os casos (a) TR_OB_03, (b) TR_OB_04 e (c) TR_OB_05.....	58
Figura 4.4: Comportamento dos resíduos normalizados em função do tempo simulado para os casos (a) TR_OB_06 e (b) TR_OB_07.	59
Figura 4.5: Perfis de velocidade próximos à entrada dos casos (a) TPP_OB_1 e (b) TPP_OB_2. No primeiro, vê-se a presença de uma região de maior velocidade, enquanto que no segundo estão presentes oscilações na magnitude da velocidade.	64
Figura 4.6: Visão global do campo de velocidade para a geometria de contração plana, caso TCP_OB_1.	64
Figura 4.7: Perfil de velocidade U_x medido ao longo do centro da geometria, da entrada até a saída para o teste TCP_OB_1.....	65
Figura 4.8: Perfis de velocidade para o caso TCP_OB_1 medido nas distâncias de $x = 0,01, 0,05, 0,1, 0,15$ e $0,19$ m após a contração.....	66
Figura 4.9: Campo de velocidade para a geometria de contração plana, caso com fluido newtoniano.	67
Figura 4.10: Perfil de velocidade U_x medido ao longo do centro da geometria, da entrada até a saída, para o caso com fluido newtoniano.	67
Figura A.1: Estrutura de arquivos e diretórios de um caso genérico do OpenFOAM	79

Lista de Tabelas

Tabela 3.2: Parâmetros da parte viscosa do modelo de Herschel-Bulkley (Wander, 2011).	28
Tabela 3.3: Parâmetros para testes com a equação constitutiva de White-Metzner.....	29
Tabela 3.4: Parâmetros constitutivos para testes com o modelo de Oldroyd-B.....	33
Tabela 3.5: Parâmetros para os testes TCS_OB_11 a TCS_OB_18	33
Tabela 3.6: Parâmetros de geometria para os testes comparativos entre a solução numérica e analítica para o modelo de Oldroyd-B.....	34
Tabela 3.7: Parâmetros para testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 5$ Pa.s.	34
Tabela 3.8: Parâmetros para testes com viscosidade polimérica $\eta = 0,05$ Pa.s.....	35
Tabela 3.9: Parâmetros para testes com fluido newtoniano.	35
Tabela 3.10: Malhas utilizadas para os testes de convergência	36
Tabela 3.11: Parâmetros para testes com variação de iterações do algoritmo PISO.....	36
Tabela 3.12: Parâmetros numéricos para testes com relaxação das variáveis p , U e τ	37
Tabela 3.13: Parâmetros para testes com tolerâncias de 10^{-5} e relaxação das variáveis p , U e τ . ..	38
Tabela 3.14: Testes com tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s variando o parâmetro de relaxação da variável tensão	42
Tabela 3.15: Parâmetros para os testes realizados com geometrias tridimensionais com $W \gg H$	46
Tabela 4.1: Resultados para os casos simulados com o modelo de White-Metzner, com η_P e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM1 ($\eta_0 = 26,87$ Pa.s, $\lambda_0 = 10^{-5}$ s, $k = 10^3$ s, $m = 0,8$, $a = 0,2$, $l = 0$, $n = 6,42 \times 10^{-2}$, $b = 2.32 \times 10^{-1}$).	48
Tabela 4.2: Resultados para os casos simulados com o modelo de White-Metzner, com η_P e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM2 ($\eta_0 = 48,81$ Pa.s, $\lambda_0 = 10^{-5}$ s, $k = 10^3$ s, $m = 0,76$, $a = 0,2$, $l = 0$, $n = 6,42 \times 10^{-2}$, $b = 2.32 \times 10^{-1}$).	48
Tabela 4.3: Valores de viscosidade polimérica calculada em função da taxa de deformação para os conjuntos de parâmetros WM1 e WM2.	49
Tabela 4.4: Resultados dos testes preliminares com o modelo constitutivo de Oldroyd-B.	50
Tabela 4.5: Resultados para testes comparativos entre a solução numérica e analítica para o modelo constitutivo de Oldroyd-B ($\eta_P = 0,585$ Pa.s, $\lambda = 10^{-5}$ s).	51
Tabela 4.6: Parâmetros para testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 5$ Pa.s ($\lambda = 10^{-5}$ s).....	52
Tabela 4.7: Resultados para testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 0,05$ Pa.s ($\lambda = 10^{-5}$ s).	52
Tabela 4.8: Resultados para testes com fluido newtoniano.....	53

Tabela 4.9: Resultados dos testes para verificação da influência de refinamento da malha e razão de aspecto	55
Tabela 4.10: Resultados dos testes com variação de iterações do algoritmo PISO	56
Tabela 4.11: Resultados para testes com relaxação das variáveis p , U e τ ($\eta_P = 5 \text{ Pa.s}$, $\lambda = 10^{-5} \text{ s}$).....	58
Tabela 4.12: Resultados para testes com relaxação das variáveis p , U e τ ($\lambda = 10^{-5} \text{ s}$).....	60
Tabela 4.13: Tempo simulado até a falha do método para casos com $\lambda = 10^{-4}$ e variação do parâmetro de relaxação da variável τ ($\eta_P = 5 \times 10^6 \text{ Pa.s}$).....	62
Tabela 4.14: Resultados para os testes com geometria em três dimensões com $W \gg H$ ($\eta_P = 5 \times 10^6 \text{ Pa.s}$).....	68
Tabela 4.15: Resultados para testes com geometria em duas dimensões ($\eta_P = 5 \times 10^6 \text{ Pa.s}$, $\lambda = 10^{-4} \text{ s}$).....	68

Lista de Símbolos

α	Coeficiente de difusão	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
α_φ	Parâmetro de sub-relaxação da variável φ	-
$\underline{\underline{\delta}}$	Tensor matriz unidade	-
Δt	Passo de tempo	s
Δx	Tamanho do volume de controle na direção do eixo x	m
Δy	Tamanho do volume de controle na direção do eixo y	m
$\dot{\underline{\underline{\gamma}}}$	Tensor taxa de deformação	s^{-1}
$\underline{\underline{\gamma}} = \left \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \right $	Módulo do tensor taxa de deformação	s^{-1}
η_P	Viscosidade polimérica	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
η_S	Viscosidade do solvente	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
η_0	Viscosidade à taxa de deformação nula	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
λ	Tempo de relaxação	s
λ_0	Tempo de relaxação à taxa de deformação nula	s
μ	Viscosidade newtoniana	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ν	Viscosidade cinemática	$m^2.s^{-1}$
ρ	Massa específica	$kg.m^{-3}$
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor das tensões viscoelásticas	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_y	Tensão de fluência	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{xx}	Componente do tensor das tensões viscoelásticas na direção xx	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{xy}	Componente do tensor das tensões viscoelásticas na direção xy	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{yy}	Componente do tensor das tensões viscoelásticas na direção yy	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
$\frac{\partial}{\partial x}$	Derivada parcial com relação ao eixo x	m^{-1}
$\underline{\nabla}$	Vetor operador nabla	m^{-1}
$\underline{\underline{\tau}}^{\nabla}$	Derivada convectiva superior do tensor das tensões viscoelásticas	-
a	Constante das equações de Carreau-Yasuda	-

b	Constante das equações de Carreau-Yasuda	-
C	Número de Courant	-
D	Número de difusão	-
De	Número de Deborah	-
e	Vetor erro	-
E	Número de elasticidade	-
g	Vetor aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
H	Contribuição dos fluxos advectivo e difusivo de momento	-
K_H	Constante de Herschel-Bulkley	-
k	Constante das equações de Carreau-Yasuda	-
l	Constante das equações de Carreau-Yasuda	-
m	Constante das equações de Carreau-Yasuda	-
n	Constante das equações de Carreau-Yasuda	-
p	Pressão	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
r	Vetor resíduo	-
Re	Número de Reynolds	-
S	Contribuição dos termos-fonte de momento	-
t	Tempo	s
T	Temperatura	K
\underline{U}	Vetor velocidade	$m.s^{-1}$
U_x	Componente do vetor velocidade na direção do eixo x	$m.s^{-1}$
U_y	Componente do vetor velocidade na direção do eixo y	$m.s^{-1}$
We	Número de Weissenberg	-

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo será apresentada uma breve introdução do trabalho. Primeiramente, será exposta a importância do estudo da simulação de fluidos viscoelásticos, que se constitui na motivação da realização deste estudo. Em seguida, serão apresentados os objetivos a serem alcançados e a estrutura da dissertação.

1.1 Motivação

A observação de nossos arredores traz a constatação de que polímeros sintéticos ocupam uma posição de importância no estilo de vida moderno. Materiais de origem polimérica são as principais matérias-primas para a construção de uma grande variedade de artefatos, desde utensílios de cozinha, brinquedos, material de escritório, produtos eletroeletrônicos, até sofisticadas próteses utilizadas na medicina e odontologia.

A humanidade utiliza polímeros naturais há séculos. A borracha natural, as fibras têxteis como algodão e lã, couro e madeira são apenas alguns dos exemplos. Através dos séculos, o conhecimento adquirido com o uso desses materiais já os levou a um patamar tão alto de qualidade e desempenho, que qualquer substituto direto para estes materiais necessita ser relativamente especializado e, em consequência disso, pode se tornar relativamente caro.

O grande crescimento vivenciado desde o fim da Segunda Guerra Mundial na produção de polímeros se deve, principalmente, ao seu uso como substituto dos materiais acima citados, praticamente revolucionando o campo da ciência dos materiais (Callister Jr., 2001). Suas principais vantagens se devem ao seu baixo custo e à facilidade de sua produção. Outras vantagens incluem sua singular baixa reatividade química (exceto a temperatura muito acima da ambiente), sua plasticidade, que permite que eles sejam moldados em formas bastante complexas, a sua boa resistência mecânica e a transparência à luminosidade. Essas duas últimas qualidades são apresentadas por alguns exemplares de polímeros (Pearson, 1985).

A indústria de processamento de polímeros baseou a maior parte de sua existência em processos empíricos da melhoria do custo/benefício, e também na qualidade e quantidade de produção de seus produtos. Na maioria dos casos, o processamento de polímeros se desenvolveu acerca de outras tecnologias como, por exemplo, no processamento de vidro e de metais, assemelhando-se mais a uma arte do que uma ciência. Isto decorre, principalmente, ao fato de que, no princípio da indústria de processamento, o escoamento de materiais poliméricos não era compreendido e a taxa de aumento de uso desses materiais era muito maior do que os avanços na tecnologia associada ao seu processamento. Atualmente, esta situação está mudando. Conforme a demanda tende a crescer sobre os materiais e o maquinário envolvido em seu processamento, torna-se essencial ser capaz de efetuar predições quantitativas confiáveis sobre o seu desempenho (Crawford, 1998).

Uma ferramenta cujo uso é crescente no estudo de etapas de processamento de polímeros é a Dinâmica de Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*). Técnicas de CFD permitem a análise de sistemas que envolvam escoamento de fluidos, transferência de calor, reações químicas e fenômenos associados através de simulações baseadas em recursos computacionais.

O crescimento no uso de recursos de CFD na indústria de polímeros se deve principalmente às suas vantagens frente à realização de testes físicos. As principais vantagens do uso de técnicas de CFD sobre a abordagem baseada em experimentos são (Versteeg e Malalasekera, 2007):

- redução substancial no tempo e custo de desenvolvimento de novos projetos;
- capacidade de estudar sistemas onde experimentos controlados são difíceis ou impossíveis de serem realizados;
- capacidade de estudar sistemas sob condições perigosas, trabalhando além de seu limite normal de operação;
- nível de detalhamento de resultados praticamente ilimitado.

Trazendo essas vantagens para a realidade da indústria de polímeros, o uso eficiente de um pacote de CFD confiável pode complementar testes com extrusoras e matrizes de linhas de produção, que apresentam um custo muito superior de aquisição e operação. A análise de dados de simulações pode prover, com facilidade, informações de difícil obtenção nos testes físicos, em qualquer ponto da geometria, com uma precisão muito maior.

Existem atualmente no mercado inúmeros pacotes de CFD de distribuição comercial. Alguns poucos contam com modelos que podem ser utilizados para simular processos típicos da indústria de processamento de polímeros. *Softwares* que se enquadram nesta última categoria são o *Polyflow*, *Flow 2000*, *Phoenix CFD*, *Moldex3d* e *Moldflow Plastics Insight* (Favero, 2009).

Contudo, o uso de pacotes comerciais como os citados traz algumas desvantagens, como custos de aquisição e, em muitos casos, manutenção de licenças. Além disso, apresentam código fechado, que oculta do usuário o esquema de funcionamento do *software*, e impede a modificação dele para a análise de problemas específicos de interesse do usuário.

A fim de contornar essa dificuldade, ocorre, principalmente dentro de grupos de pesquisas em universidades, o desenvolvimento de pacotes de código livre, direcionados ao estudo do comportamento de fluidos viscoelásticos. Dentro dessa categoria, merece destaque o *solver* viscoelasticFluidFoam, desenvolvido em nosso grupo de pesquisa (Favero *et al.*, 2010a; b) e atualmente distribuído com o pacote de CFD de código aberto OpenFOAM, na sua versão para desenvolvedores (OpenFOAM, 2012). O *solver* viscoelasticFluidFoam é capaz de resolver uma grande variedade de escoamentos de fluidos viscoelásticos para variadas geometrias, sendo o escoamento por cisalhamento simples, elongacional, ou uma combinação de ambos.

O trabalho que deu origem ao viscoelasticFluidFoam (Favero, 2009) foi, em sua maioria, focado no desenvolvimento e implementação do *solver*, no qual algumas das dificuldades numéricas encontradas na etapa de desenvolvimento, em alguns casos de estudo específicos, foram deixadas para uma etapa posterior. Assim, ainda existem situações em que resoluções numéricas de escoamentos de fluidos viscoelásticos pelo viscoelasticFluidFoam falham.

1.2 Objetivos

Com base no que foi discutido na seção anterior, os objetivos deste estudo são:

- verificar se as dificuldades numéricas encontradas na simulação de escoamento de fluidos viscoplásticos presentes no trabalho de Wander (2011) estão presentes também no *solver* viscoelasticFluidFoam.
- desenvolver testes que possibilitem a estimativa do erro da solução numérica para os campos de velocidade e tensão em comparação à solução analítica para o modelo constitutivo de Oldroyd-B;
- analisar as condições de malha, de escoamento, de parâmetros de modelos viscoelásticos, e numéricos que levam às dificuldades observadas em alguns escoamentos resolvidos pelo *solver* viscoelasticFluidFoam;
- aplicar métodos que possibilitem contornar as limitações em simulações de escoamento de fluidos viscoelásticos inerentes ao *solver* na versão atual.

1.3 Estrutura da dissertação

No Capítulo 2 serão apresentados os conceitos fundamentais e revisão bibliográfica que servirão de base para o desenvolvimento deste estudo. Será feita uma breve descrição das técnicas numéricas mais utilizadas para a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, apresentando as principais características do método das diferenças finitas (MDF), método dos elementos finitos (MEF) e método dos volumes finitos (MVF). Em seguida, serão apresentadas as principais dificuldades encontradas durante a resolução numérica de escoamentos de fluidos viscoelásticos, assim como os parâmetros considerados como mais influentes no sucesso da resolução do problema. Também será apresentada uma breve revisão sobre os estudos de validação de simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos, com os primeiros trabalhos desenvolvidos nesta área, a evolução dos métodos de resolução dos problemas e trabalhos recentemente desenvolvidos merecedores de destaque.

No Capítulo 3 será apresentada a metodologia de desenvolvimento deste trabalho, com as equações governantes para o escoamento de fluidos viscoelásticos e as ferramentas computacionais utilizadas. Em seguida, serão mostrados testes numéricos preliminares, baseados na observação do comportamento do *solver* em condições semelhantes às utilizadas em outro estudo, no qual não foi utilizada uma formulação viscoelástica. Na sequência, haverá a demonstração da obtenção da solução analítica para os campos de tensão e velocidade para o escoamento entre placas paralelas de um fluido viscoelástico que obedece ao modelo constitutivo de Oldroyd-B, para fins de determinação da acurácia das soluções numéricas fornecidas pelo *solver* viscoelasticFluidFoam. Serão apresentados testes que exploram o comportamento do *solver* através da variação de diversos parâmetros, como refinamento da malha computacional, acoplamento pressão-(velocidade-tensão), relaxação das variáveis e tolerâncias na resolução dos sistemas lineares, sozinhos ou em conjunto com outros parâmetros, como tempo de relaxação e viscosidade polimérica. Também serão apresentados testes complementares, como o uso de perfil parabólico de velocidade na entrada da geometria, testes com geometria de contração plana e em geometria tridimensional.

No Capítulo 4 estarão presentes os resultados dos testes realizados no Capítulo 3, comparação com a respectiva solução analítica (quando disponível) e comentários acerca do desempenho do *solver* nas condições testadas. Também estão presentes testes realizados em função dos resultados obtidos de testes do Capítulo 3, onde se julgou que a variação de parâmetros poderia contribuir com potencial explicativo acerca do comportamento do *solver*.

Por fim, no Capítulo 5 serão apresentadas as conclusões acerca deste estudo e algumas sugestões para eventuais trabalhos futuros.

Capítulo 2

Conceitos fundamentais e revisão bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados os conceitos fundamentais que estão relacionados com a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, e também uma breve revisão de alguns estudos já realizados sobre o assunto.

2.1 Simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos

2.1.1 Técnicas numéricas mais usadas

Historicamente, o *método das diferenças finitas* (MDF) foi bastante utilizado para a resolução de escoamentos de fluidos, enquanto que o *método dos elementos finitos* (MEF) era utilizado para resolver problemas estruturais envolvendo sólidos elásticos. Do ponto de vista físico, estes problemas são completamente diferentes. Os escoamentos de fluidos precisam lidar com a grande não-linearidade presente nos termos advectivos das equações de Navier-Stokes e de equações constitutivas para fluidos viscoelásticos, enquanto que problemas de elasticidade não possuem tais termos, assemelhando-se a problemas de difusão de calor, que são basicamente lineares. Assim, até o início da década de 1970, tinha-se o MDF, com boas propriedades para resolução de escoamentos de fluidos em geometrias simples, e o MEF, que se adaptava bem a geometrias complexas, apesar de ter um tratamento ruim de termos não-lineares (Maliska, 2010).

Esses e outros problemas motivaram pesquisas a fim de promover o aprimoramento do método dos volumes finitos (MVF), no qual as equações aproximadas são obtidas através de balanços de conservação no volume elementar. Esse fato mostra uma clara vantagem sobre o MDF e MEF, já que ambos os métodos trabalham com a discretização da geometria através de pontos (e não volumes), não garantindo a conservação de alguma propriedade a nível local. Atualmente, um grande esforço está sendo aplicado ao uso do MVF com malhas não-estruturadas, garantindo a preferência desse método no uso em *software* comercial com

aplicabilidade industrial. Esta preferência se dá, principalmente, devido à robustez proporcionada pelas propriedades conservativas do MVF (Maliska, 2010).

No método dos elementos finitos, a solução do problema discretizado é assumida *a priori* como possuindo uma forma prescrita. A solução necessita pertencer a uma “função espaço”, que é construída variando a função de forma linear ou quadrática em valores que se encontrem entre pontos nodais da malha. O uso de funções de ordens mais elevadas possibilita melhor precisão no cálculo (Bhavikatti, 2007). Esse método não busca uma solução para o sistema de equações diferenciais do problema, mas sim para a solução de uma formulação integral desse sistema. A formulação integral generalizada é obtida por meio de uma formulação de resíduos ponderados, que naturalmente possui a habilidade de incorporar condições de contorno do tipo diferencial, e facilmente possibilita a construção de métodos de alta ordem de acurácia (Wendt, 2009). Trabalhos que merecem destaque no uso do MEF na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos são os de Guénette e Fortin (1995), de Marchal e Crochet (1987), dentre outros.

O método das diferenças finitas substitui as derivadas espaciais e temporais do sistema de equações diferenciais parciais por diferenças finitas, resultando em um sistema algébrico. Essas diferenças finitas são obtidas através de representações de séries de Taylor. Quando for desejado aprofundar o conhecimento no uso do MDF na resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos recomenda-se consultar os trabalhos de Tomé *et al.* (2002) e Yu e Kawaguchi (2004).

No método dos volumes finitos existem duas maneiras de se obter as equações que irão ditar o comportamento do fluido. A primeira envolve realizar balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos. A segunda é integrar sobre o volume elementar as equações na forma conservativa. Esses dois processos são equivalentes, pois uma maneira de deduzir as equações diferenciais que representam os fenômenos físicos é realizar, primeiro, um balanço em um volume finito, fazendo-se, em seguida, o processo de limites para obter a equação diferencial (Maliska, 2010).

A etapa seguinte consiste em determinar a maneira que será feita a discretização do domínio. No MVF, o domínio é subdividido em um conjunto de células que não se sobrepõem, e cobrem todo o domínio. As leis de conservação são aplicadas a fim de determinar o fluxo das variáveis em pontos discretos nas células, chamados de *nós*, tipicamente localizados nos centros, vértices ou centro de faces das células. Células podem ter formatos variados, como triangular, quadrilateral, etc. e podem formar uma malha estruturada ou não-estruturada (Wendt, 2009).

O pacote de CFD OpenFOAM é totalmente baseado no MVF. Consequentemente, esta metodologia será discutida com maior ênfase ao longo do trabalho. A maneira como ocorre o uso do MVF pelo OpenFOAM será explicada com detalhes na seção dirigida ao programa.

2.1.2 Dificuldades numéricas encontradas e parâmetros numéricos mais influentes

Simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos são propensas a certas dificuldades numéricas bastante particulares a este tipo de problema. As principais dificuldades encontram-se no esforço computacional envolvido na resolução numérica das equações discretizadas e no problema de alto número de Weissenberg (*High Weissenberg Number Problem* – HWNP).

Além disso, a resolução desse tipo de problema também necessita de atenção especial tocante à configuração de certos parâmetros numéricos que podem ser críticos para o sucesso da simulação. Exemplos são as limitações impostas pelo número de Courant, as técnicas de acoplamento entre pressão, velocidade e tensão, a relaxação das variáveis e as tolerâncias adotadas na resolução dos sistemas linearizados.

2.1.2.1 Esforço computacional

Problemas envolvendo o escoamento isotérmico de fluidos viscoelásticos necessitam resolver três equações simultaneamente: conservação de massa, de movimento e a equação constitutiva do modelo viscoelástico adotado.

Tomando como exemplo um escoamento bidimensional utilizando formulação incompressível, têm-se seis incógnitas por volume de controle que necessitam ser definidas para cada passo de tempo: os dois componentes do vetor velocidade (U_x e U_y), os três componentes do tensor das tensões viscoelásticas (τ_{xx} , τ_{xy} e τ_{yy}) e a pressão p . Se for considerada uma malha computacional de 5×10^5 volumes de controle (bastante modesta em termos de aplicações reais), é necessária a resolução de 3×10^6 variáveis por passo de tempo.

Considerando um tempo de simulação hipotético de 1 segundo, e adotando um passo de tempo de 10^{-5} segundo, a simulação irá consistir em 10^5 passos de tempo. Desta forma, deverão ser resolvidas 3×10^{11} variáveis para toda a simulação. Este exemplo serve para mostrar que a resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos por métodos de CFD está longe de ser um problema trivial. De fato, a abordagem de tais problemas na presente forma só se fez possível devido ao grande aumento da capacidade de processamento e armazenamento dos computadores.

2.1.2.2 Problema do Alto Número de Weissenberg (High Weissenberg Number Problem – HWNP)

O Número de Weissenberg (We) é definido como o produto da constante de tempo de relaxação das moléculas do material (λ), um escalar que governa o início do comportamento não-linear, e a taxa de deformação do escoamento ($\dot{\gamma}$). Para um escoamento a cisalhamento simples, We pode ser definido como:

$$We = \lambda \dot{\gamma} \quad (2.1)$$

Para fluidos com baixa massa molar e apenas uma fase, a constante de tempo do material é bastante pequena, fazendo com que We também o seja. Contudo, para polímeros de alta massa molar, λ pode ser bastante alto. Para polímeros fundidos, We também indica o grau de anisotropia gerada pela deformação. No caso de cisalhamento estacionário simples, as diferenças de tensões normais são manifestações de anisotropia e, assim, de viscoelasticidade não-linear. Dessa forma, We também governa o grau em que as tensões normais diferem de zero (Dealy e Larson, 2006).

Geralmente, existe um limite superior para We , acima do qual os métodos numéricos tendem a falhar (Tanner e Walters, 1998), dando origem ao chamado problema de alto número de Weissenberg – HWNP, sendo talvez a maior dificuldade numérica encontrada na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

Especula-se que tais dificuldades numéricas sejam intrínsecas à estrutura de alguns modelos viscoelásticos. Para tais modelos, quando certas regiões são submetidas a uma taxa de cisalhamento significativa, componentes do tensor das tensões crescem exponencialmente, o que torna a aplicação de métodos numéricos para alto We bastante difíceis (Cullen, 2009).

Uma revisão de trabalhos sobre este assunto (Crochet *et al.* 1984) leva às seguintes observações:

- Um limite superior para We é encontrado em todos os trabalhos publicados;
- Pequenas modificações na equação constitutiva e/ou algoritmos aplicados podem levar a limites maiores de We . Contudo, estas melhorias não fazem mais do que atrasar a falha no método;
- Quando We aproxima-se de seu valor crítico, frequentemente (mas não sempre) observam-se oscilações artificiais nos campos das variáveis;
- O refinamento da malha pode afetar o valor crítico de We , apesar de ser difícil observar uma concordância geral nos trabalhos publicados.

Ao leitor que desejar uma descrição mais detalhada dos fatores que afetam o surgimento do HWNP e eventuais maneiras de contorná-lo, é recomendada a leitura dos trabalhos de Keunings (1986), Alves *et al.* (2000), Rajagopalan *et al.* (1990) e Ceniceros e Fisher (2012).

Como pode ser observado nos trabalhos acima mencionados, e em muitos outros que compõem a vasta literatura que trata sobre o assunto, o problema de alto número de Weissenberg ainda consiste em uma limitação severa na resolução numérica de escoamentos de fluidos viscoelásticos. O HWNP não parece ocorrer com maior frequência ou intensidade em um método de discretização em particular. De fato, ocorre resolvendo escoamentos

através do MEF, MDF ou MVF. Também não é possível eliminar sua ocorrência em nenhum modelo constitutivo viscoelástico conhecido.

Os avanços obtidos no uso de métodos numéricos nas últimas décadas (desenvolvimento de esquemas de alta ordem, por exemplo) contribuíram para aumentar o limite de We alcançado. Contudo, as soluções numéricas de escoamentos de fluidos viscoelásticos continuam limitadas por este fator, mostrando que ainda há muito trabalho a ser realizado nesta área.

2.1.2.3 Número de Courant (C)

Segundo Schäfer (2006), dois números importantes para a estabilidade de problemas de transporte, não só para o escoamento de fluidos viscoelásticos, são o número de difusão D e o número de Courant C , definidos como:

$$D = \frac{\alpha \Delta t}{\rho \Delta x^2} \quad (2.2)$$

$$C = \frac{v \Delta t}{\Delta x} \quad (2.3)$$

O número de difusão D também é mencionado na literatura como número de Fourier (Rauwendaal, 2002). Esses números representam as razões do tamanho do passo de tempo com relação ao transporte difusivo e advectivo, respectivamente. Nos casos especiais em que há somente difusão ($v = 0$) ou somente advecção ($\alpha = 0$), as limitações no tamanho do passo de tempo serão tais que, respectivamente:

$$\Delta t < \frac{\rho \Delta x^2}{2\alpha} \quad (2.4)$$

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{v} \quad (2.5)$$

A Eq. (2.5) é conhecida na literatura como condição de CFL (Courant, Friedrichs e Levi). Fisicamente, tais condições podem ser interpretadas da seguinte maneira: o passo de tempo deve ser pequeno o suficiente tal que, devido ao transporte difusivo ou advectivo, a informação da distribuição de uma variável genérica em um passo de tempo não avance mais do que o próximo ponto nodal. Estas condições devem ser satisfeitas em todo o domínio computacional, sob o risco do caso não convergir.

O critério adotado para a dedução destas condições é baseado na análise de estabilidade de problemas lineares. Para este tipo de problema, Wendt (2009) recomenda o uso de C como sendo o mais próximo possível da unidade. Contudo, as equações utilizadas

para a resolução de escoamentos geralmente são altamente não-lineares. Assim, não se espera que a condição de C próximo da unidade se aplique fielmente a estes casos. Ao invés disso, C fornece uma estimativa razoável do tamanho do passo de tempo para um dado problema não-linear. Seu valor pode ser considerado como um parâmetro ajustável a fim de compensar tais não-linearidades.

A fim de garantir que tais critérios sejam satisfeitos em todo domínio, para todo tempo de simulação, é possível fazer uso da Eq. (2.3), rearranjando os termos da seguinte forma:

$$\Delta t = \frac{C\Delta x}{v} \quad (2.6)$$

Assim, o tamanho do passo de tempo é dado em função do número de Courant, do tamanho do volume de controle e da velocidade do fluido neste volume de controle. Isso permite que, para um determinado C , o passo de tempo se ajuste às condições de tamanho do volume de controle e da velocidade, satisfazendo este critério de estabilidade para todo domínio e tempo de simulação. O aspecto negativo desta técnica de passo de tempo adaptativo é que, mesmo que a geometria possua poucos volumes de controle pequenos e com velocidade de escoamento alta (condição mais crítica para a convergência), o passo de tempo resultante, que será menor do que o necessário para os outros volumes de controle, deverá ser aplicado a toda geometria, resultando em um tempo de simulação maior.

A condição de CFL, dada pela Eq. (2.5), é comumente associada a esquemas de integração explícita. Para esquemas de integração implícita, não há a limitação da condição de CFL. O passo de tempo apenas precisa ser adaptado à taxa de evolução temporal do escoamento, podendo ser muito maior do que em métodos explícitos (Magoulès, 2011).

2.1.2.4 Acoplamento pressão-(velocidade-tensão) – PISO

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), o transporte advectivo de uma variável genérica φ depende da magnitude e da direção do campo de velocidade local. Em geral, o campo de velocidade não é conhecido, surgindo como parte do processo de obtenção da solução geral, juntamente com as outras variáveis do escoamento.

Considerando um escoamento bidimensional em estado estacionário de um fluido, as equações que governam os campos de velocidade u e v podem ser derivadas da equação de transporte de uma variável genérica φ e escritas como:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (2.9)$$

sendo as Eqs. (2.7) e (2.8), respectivamente, as equações de movimento nas direções x e y e a Eq. (2.9) é a equação da continuidade.

A solução desse sistema de equações apresenta dois problemas principais:

- Os termos advectivos das equações de movimento contêm termos não-lineares como, por exemplo, a derivada em x de ρu^2 da Eq. (2.7);
- As três equações são intricadamente acopladas, pois cada componente da velocidade aparece em cada equação de movimento e na equação da continuidade. A questão mais complexa surge devido à pressão. Ela aparece em ambas as equações de movimento, mas não há outra equação somente para a pressão.

Na maioria dos problemas de CFD, o gradiente da pressão não é conhecido, sendo calculado como parte da solução. Se o escoamento for compressível, a equação da continuidade pode ser utilizada como uma equação de transporte para a massa específica e , juntamente com as Eqs. (2.7) a (2.9), a equação da energia pode ser usada como a equação de transporte da temperatura, proporcionando o fechamento do sistema. A pressão pode ser obtida a partir da massa específica e temperatura, usando uma equação de estado do tipo $p = p(\rho, T)$.

Porém, se o fluido for incompressível, a massa específica é constante e, por definição, não está relacionada à pressão. Neste caso, o acoplamento entre pressão e velocidade introduz uma limitação na solução do escoamento: se o campo de pressão correto é aplicado nas equações de movimento, o campo de velocidade resultante deve satisfazer a continuidade.

Os problemas associados com as não-linearidades do conjunto de equações e a ligação entre pressão e velocidade podem ser resolvidos adotando uma estratégia de solução iterativa, como o algoritmo PISO.

O algoritmo PISO (*Pressure Implicit-Split Operator*) (Issa, 1986) utiliza a divisão de operações na solução das equações do movimento e pressão discretizadas, de forma que os campos obtidos a cada passo de tempo são aproximações da solução exata das equações diferenciais. Os erros presentes tendem a diminuir rapidamente com o refinamento no passo de tempo e, em certos casos, até mais rapidamente do que os erros decorrentes do esquema de discretização. Este fato, juntamente com o de que a estabilidade do esquema é pouco afetada pelo procedimento de divisão de operações, permite que o sistema mantenha as vantagens da diferenciação implícita, principalmente a capacidade de lidar com passos de tempo grandes, fazendo com que o procedimento seja útil, tanto para cálculos estacionários, como transientes.

O método baseia-se em uma sequência de operações de predição e correção. Para uma formulação isotérmica, considerando os sobrescritos $*$, $**$ e $***$ como representando valores

intermediários das variáveis obtidos durante o processo, o algoritmo do método PISO é composto das seguintes etapas:

1. *Etapa de predição*: O campo de pressão no tempo t^n é usado na resolução da equação de movimento implícita

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (u_i^{n+1} - u_i^n) = H(u_i^{n+1}) - \frac{\partial}{\partial x_i} p^{n+1} + S_i \quad (2.10)$$

resultando no campo de velocidade u_i^*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (u_i^* - u_i^n) = H(u_i^*) - \frac{\partial}{\partial x_i} p^n + S_i \quad (2.11)$$

onde o operador H representa a contribuição dos fluxos advectivo e difusivo de momento

$$H(u_i) = A_m u_{i,m} \quad (2.12)$$

Resolver o campo de velocidade u_i^* na Eq. (2.11) geralmente não satisfaz a equação da continuidade.

2. *Primeiro passo de correção*: um novo campo de velocidade u_i^{**} , juntamente com o novo campo de pressão correspondente, p^* , são procurados de modo que a equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial x} u_i^{**} = 0 \quad (2.13)$$

seja satisfeita. Para isso, a equação de movimento (2.10) será

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (u_i^{**} - u_i^n) = H(u_i^*) - \frac{\partial}{\partial x_i} p^* + S_i \quad (2.14)$$

As Eq. (2.13) e (2.14) são usadas para derivar a equação da pressão

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} p^* = \frac{\partial}{\partial x_i} H(u_i^*) + \frac{\partial}{\partial x_i} S_i + \frac{\partial \rho}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i^n \quad (2.15)$$

que é calculada diretamente, pois o lado direito da igualdade contém termos do campo u_i^* que é conhecido. O campo de pressão p^* obtido da resolução da equação acima pode ser inserido na Eq. (2.14) para fornecer o campo u_i^{**} , que satisfaz a equação da continuidade.

3. *Segundo passo de correção*: um novo campo de velocidade u_i^{***} , juntamente com seu campo de pressão correspondente, p^{**} , são formulados de forma que satisfaçam a equação da continuidade. A equação de movimento toma a forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (u_i^{***} - u_i^n) = H(u_i^{**}) - \frac{\partial}{\partial x_i} p^{**} + S_i \quad (2.16)$$

A equação da pressão correspondente será

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} p^{**} = \frac{\partial}{\partial x_i} H(u_i^{**}) + \frac{\partial}{\partial x_i} S_i + \frac{\partial \rho}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i^n \quad (2.17)$$

A partir da equação acima, o campo p^{**} pode ser prontamente determinado pelo fato dos termos do lado direito da igualdade serem conhecidos. Com esta nova pressão, o campo u_i^{***} pode ser calculado por meio da Eq. (2.16).

Mais passos de correção podem ser executados. Contudo, a acurácia com a qual u_i^{***} e p^{**} se aproximam das soluções exatas u_i^{n+1} e p^{n+1} é suficiente para a maioria dos casos, fazendo com que mais passos de correção sejam supérfluos.

2.1.2.5 Relaxação das variáveis

O conceito de relaxação de variáveis está intimamente ligado aos métodos de acoplamento entre pressão e velocidade. Segundo Schäfer (2006), para problemas estacionários (ou transientes com passos de tempo grandes), métodos de correção da pressão possuem difícil convergência. Isso se dá pelo acoplamento entre as equações, e ao fato de que uma variação forte de uma variável pode influenciar de maneira exagerada às outras, comprometendo a estabilidade da simulação. O uso de sub-relaxação pode ajudar a obter um esquema iterativo convergente, podendo ser introduzida de diversas maneiras no procedimento de solução.

Geralmente, o objetivo da sub-relaxação é reduzir a taxa de mudança de uma variável de uma iteração para a próxima. Como exemplo, pode ser utilizado o transporte de uma determinada quantidade escalar ϕ . O ponto de partida é a equação discretizada do problema contínuo em volumes finitos:

$$a_p^\phi \phi_p = \sum_c a_c^\phi \phi_c + b^\phi \quad (2.18)$$

Um processo iterativo é utilizado para calcular ϕ_p^{k+1} a partir de valores conhecidos ϕ_p^k . O novo valor ϕ_p^{k+1} não é mais calculado diretamente pelo processo iterativo, mas através de uma combinação linear com uma fração do valor da k -ésima iteração:

$$\phi_p^{k+1} = \alpha_\phi \frac{\sum_c a_c^\phi \phi_c^{k+1} + b^\phi}{a_p^\phi} + (1 - \alpha_\phi) \phi_p^k \quad (2.19)$$

A constante $\alpha_\phi \in (0, 1)$ é chamada de parâmetro de sub-relaxação.

Dependendo da forma em que é feita a aproximação da soma de certos termos no algoritmo de acoplamento pressão-velocidade, pode ser necessário introduzir também uma sub-relaxação para a pressão, com o objetivo de assegurar a convergência do método. O novo valor da pressão p^{k+1} é corrigido com uma fração da correção da pressão p' , calculada no segundo passo de correção do algoritmo PISO:

$$p^{k+1} = p^* + \alpha_p p' \quad (2.20)$$

em que $0 < \alpha_p < 1$ e p^* é um campo de pressão conhecido, podendo ser o campo p^k da k -ésima iteração, ou simplesmente $p^* = 0$. Este tipo de relaxação se faz necessária se na derivação da equação de correção da pressão foram efetuadas simplificações significativas como, por exemplo, negligenciar termos relacionados a não-ortogonalidade da malha.

As técnicas de relaxação de variáveis alteram a solução final a ser obtida apenas quando o caso diverge. No caso do problema convergir, ele sempre tende para a mesma solução, não importando os valores adotados para os parâmetros de relaxação. Apenas a forma como o algoritmo se aproxima desta solução será diferente.

A escolha correta do fator de relaxação é essencial para simulações com custo computacional eficiente. Valores de α grandes demais podem levar a soluções que não irão convergir. Valores muito pequenos farão com que a convergência seja bastante lenta. Infelizmente, valores ótimos para os fatores de relaxação dependem do escoamento, e devem ser escolhidos conforme o caso (Versteeg e Malalasekera, 2007).

2.1.2.6 Tolerâncias na resolução dos sistemas linearizados

O avanço da resolução do sistema linear deve ser interrompido em determinado momento, quando se considera que eventuais melhorias na qualidade da solução não possuem valor prático. Uma medida do avanço da qualidade da solução para o sistema convergido se dá através da avaliação dos resíduos gerados durante a resolução do sistema linear.

Em um sistema linear $Ax = b$, considera-se a sua solução exata como sendo x . Contudo, os métodos iterativos chegam à solução intermediária y após determinado número de iterações. Esta solução não satisfaz de forma exata o sistema $Ax = b$. Assim, é possível definir o vetor resíduo r como sendo (Versteeg e Malalasekera, 2007):

$$Ay = b - r \quad (2.21)$$

Também é possível definir o vetor erro como sendo a diferença entre a solução exata e a solução intermediária:

$$e = x - y \quad (2.22)$$

Subtraindo a Eq. 2.21 de $Ax = b$ obtém-se a seguinte relação entre o erro e o resíduo:

$$Ae = r \quad (2.23)$$

Os resíduos são calculados em todos os volumes, e podem ser tanto positivos, quanto negativos. Dessa forma, o progresso da sequência de cálculos é avaliado através da soma dos valores absolutos dos resíduos. Esta soma evita a falsa indicação de convergência pelo cancelamento de contribuições positivas e negativas. Se aceita a solução quando a soma dos resíduos absolutos é menor do que um valor pequeno, pré-determinado (por exemplo, 10^{-5}) (Versteeg e Malalasekera, 2007). Este valor constitui-se na tolerância da resolução de uma variável do problema. Os resíduos são também normalizados, a fim de torná-los independentes da escala do problema a ser analisado.

Contudo, o acompanhamento dos resíduos vindos apenas do sistema linear é uma técnica insuficiente na determinação de quando o procedimento iterativo pode ser interrompido e a solução possa ser considerada satisfatória. Após k iterações do método de resolução do problema, a substituição do valor obtido para uma variável genérica φ na respectiva equação de conservação resultará em diferença entre os valores obtidos no lado direito e esquerdo da igualdade. Ao valor absoluto desta diferença em determinado volume de controle é dado o nome de resíduo local. Para obter uma indicação da evolução da convergência para o problema, é definido o resíduo global como sendo a soma dos resíduos locais para todos os volumes de controle que formam o domínio computacional.

Devido ao fato de o resíduo global ser maior em simulações em que a magnitude da variável φ é maior, é necessário efetuar a normalização do mesmo, para que possua uma escala compatível à variável φ . Uma forma de normalização é a divisão do resíduo global pelo valor do resíduo na primeira iteração do método. Conforme o método numérico se aproxima da solução, o resíduo global normalizado tende a zero.

2.1.3 Estudos de validação de simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos

O estudo da simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos em geometrias simples remete ao trabalho de Porteous e Denn (1972), no qual equações constitutivas de um fluido de segunda ordem e de Maxwell foram utilizadas para a análise das instabilidades numéricas que surgem com o escoamento de Poiseuille bidimensional de fluidos com elasticidade pronunciada, através do método das perturbações.

Para fluidos com elasticidade pouco pronunciada há uma concordância do modelo de segunda ordem e de Maxwell, com as respectivas soluções analíticas, ambas se aproximando da solução para um fluido newtoniano, conforme a elasticidade tende a zero. Contudo, com o aumento da elasticidade do fluido, os efeitos de relaxação começam a se tornar mais importantes, impedindo a convergência satisfatória quando o número de Deborah (De) se aproxima da unidade, para ambos os modelos constitutivos, mesmo a um Re relativamente baixo. O número De surge da razão entre o tempo de relaxação do polímero e o tempo de observação do experimento, e governa o grau de manifestação da elasticidade em resposta à deformação transiente.

Uma abordagem interessante para a resolução numérica de escoamentos de fluidos viscoelásticos é apresentada por Mompean *et al.* (1998). Os autores apresentam uma metodologia que deriva soluções algébricas aproximadas para a equação diferencial constitutiva do modelo viscoelástico de Oldroyd-B. A vantagem deste método está diretamente relacionada ao custo computacional, pois somente uma equação diferencial de transporte necessita ser resolvida (apenas para o traço da matriz do tensor das tensões). A distribuição entre os diferentes componentes do tensor é especificada através de representação algébrica explícita derivada da equação constitutiva. Outro atrativo do modelo algébrico de tensor das tensões é que as tensões são dadas explicitamente de forma instantânea em termos do campo de velocidade, permitindo que o tensor seja eliminado da equação de movimento por substituição da equação explícita para o tensor. Dessa forma, o número de variáveis primitivas é reduzido aos componentes da velocidade, a pressão e o traço do tensor. Testes realizados envolvendo escoamentos unidirecionais por cisalhamento mostram que esta metodologia leva à solução exata do modelo constitutivo de Oldroyd-B. Comparações entre o modelo algébrico de tensões e a equação constitutiva diferencial no caso da contração plana 4:1 para $Re = 0,01$ e $De = 0,13$ mostram que o modelo algébrico leva a uma excelente aproximação da equação original a custo computacional muito inferior.

Em um trabalho, envolvendo a análise de estabilidade de escoamentos de Poiseuille e Couette de fluidos viscoelásticos, Atalik e Keunings (2002) fazem uso de métodos espectrais para obtenção das soluções para os modelos de UCM, Oldroyd-B e Giesekus. É investigado o comportamento das soluções para fluidos com crescente caráter elástico em regimes de Re baixo e alto. É definido o número de elasticidade E , que representa a razão entre We e Re e que determina o tipo de forças que predominam no escoamento (elásticas ou de inércia). Testes com o escoamento de Poiseuille para o modelo de Oldroyd-B, com predominância do regime inercial ($Re = 2400$) e E variando entre zero e 6×10^{-4} revelam a existência de dois valores críticos para E ($E_1 \approx 3 \times 10^{-4}$ e $E_2 \approx 6 \times 10^{-4}$) em que, para $E < E_1$, perturbações infinitesimais no escoamento geram oscilações periódicas na solução, que eventualmente decaem com o tempo. Para $E_1 < E < E_2$, surgem oscilações (previstas na teoria) de amplitude determinada, que crescem com o aumento de E até um valor $E^* \approx 5 \times 10^{-4}$, onde um eventual aumento em E faz com que a amplitude das oscilações diminua. Para $E > E_2$, há uma restabilização da solução, em que as oscilações tendem a decair com o avanço da solução.

Para o escoamento de Couette realizados com os mesmos parâmetros dos testes com o escoamento de Poiseuille, eventuais perturbações iniciais na solução sempre decaem em uma maneira oscilatória, de forma semelhante ao que acontece com fluidos newtonianos.

É interessante salientar que os autores reportam que o aumento de We é mais crítico para a solução do que o aumento de E , uma vez que a convergência fica seriamente prejudicada para valores de $We \geq 2$, sendo remediada com o aumento de modos espectrais do método de solução. Contudo, para $We \geq 3$, é impossível obter convergência, mesmo com aumento de modos espectrais e diminuição de passo de tempo. A adição de difusão artificial contorna o problema, apesar de afetar a qualidade das soluções.

Para testes em que predomina o regime elástico, $Re = 0,1$ e $0,5 \leq We \leq 1,5$, o escoamento de Poiseuille com o modelo de Oldroyd-B apresenta oscilações muito mais pronunciadas do que as observadas no regime inercial, que tendem a crescer com o aumento de We . É introduzida uma pequena difusão numérica, sem a qual o método numérico não se sustenta a longo prazo. Para o escoamento de Couette realizado com os mesmos parâmetros, as perturbações introduzidas na solução inicial sempre decaem de maneira oscilatória.

Fiétier e Deville (2003) utilizam métodos espectrais para o cálculo do escoamento de Poiseuille transiente e estacionário para o modelo de Oldroyd-B. Para o escoamento transiente, há plena concordância com a solução analítica ($We = 0,5$). Para o escoamento estacionário, o erro da velocidade (com relação à solução analítica) cresce de forma exponencial para $We > 0,8$. Um fator interessante neste trabalho é que o crescimento do erro é maior para $We > 5$ com uso de malhas com refinamento uniforme, enquanto que para $We < 5$ o crescimento do erro é maior com malha com refinamento direcionado aos maiores gradientes da velocidade.

Em outro trabalho (Muniz *et al.*, 2008) é estudado o problema do tipo *slip-stick* bidimensional com um fluido de Oldroyd-B e a presença de um solvente newtoniano, através do método dos volumes finitos com arranjo co-localizado das variáveis e uso de esquemas de alta ordem. O problema *slip-stick* consiste em um escoamento entre placas paralelas com a mudança da condição de contorno de deslizamento (*slip*) para não-deslizamento (*stick*), onde se configura uma singularidade. Este tipo de geometria, apesar de simples, é amplamente utilizado no teste de esquemas numéricos, e representa adequadamente diversos processos na indústria polimérica.

Os testes foram realizados com $Re = 1$ e $We = 0,2$. Eventuais oscilações no campo de velocidade e tensão próximas à singularidade são eliminadas com a escolha adequada do esquema de discretização (neste trabalho, do tipo WENO – *Weighted Essentially Non-Oscillatory*). A solução em pontos afastados da singularidade se mostrou independente do refinamento da malha. Porém, este fator torna-se importante nas proximidades da singularidade, sendo necessárias malhas muito refinadas para capturar os picos existentes nos valores das variáveis. As soluções obtidas se mostraram livres de oscilações e com boa acurácia, devido à escolha adequada do refinamento da malha e esquema de discretização, além do conjunto de parâmetros do fluido utilizado impor condições pouco severas ao escoamento, como We bastante baixo.

Em um trabalho mais recente (Khorasani e Mirzalou, 2012) é estudado o escoamento de uma solução de um solvente newtoniano e um fluido cuja equação constitutiva é derivada

do modelo de Oldroyd-B (fluido de Johnson-Segalman) entre duas placas paralelas através de um gradiente de pressão. A viscosidade é calculada através das contribuições do solvente (η_S) e do polímero (η_P), de forma que $\eta = \eta_S + \eta_P$. Soluções transientes e estacionárias foram obtidas para diferentes Re e We , através do método de projeção de Galerkin.

No trabalho supracitado são encontrados dois valores de We críticos em que há a mudança da inclinação da curva de tensão de cisalhamento em função de We ($We_{c1} \approx 0,4$ e $We_{c2} \approx 1,4$), coincidindo com os extremos da curva de tensão de cisalhamento em função da taxa de cisalhamento. Estes dois valores críticos geram três intervalos de We : pré-crítico, crítico e pós-crítico, sendo que somente o intervalo pré-crítico é investigado. Para este intervalo, a convergência é rápida para qualquer $We < We_{c1}$ e baixo Re (da ordem de 0,1), apesar de haver um pequeno *overshoot* com a presença de oscilações na velocidade no início do escoamento. O aumento de Re diminui este problema, apesar de aumentar o tempo de convergência, levando à conclusão de que quanto mais viscoso o fluido, mais rapidamente ele tende a relaxar.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo é mostrado como foram realizados os testes com o *solver* viscoelasticFluidFoam.

3.1 Equações governantes

As equações governantes para o escoamento isotérmico de um fluido qualquer são a equação da continuidade e a equação de movimento (Bird *et al.*, 2006).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \underline{U}) \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \underline{U})}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \underline{U} \underline{U}) - \nabla p - (\nabla \cdot \underline{\tau}) + \rho \underline{g} \quad (3.2)$$

onde ρ representa a massa específica do fluido, \underline{U} é o vetor velocidade, p é a pressão, $\underline{\tau}$ é o tensor das tensões totais, e \underline{g} é o vetor aceleração da gravidade.

No caso de fluidos incompressíveis, ρ mantém-se constante, permitindo que se simplifique a Eq. (3.1) para a seguinte forma:

$$\nabla \cdot \underline{U} = 0 \quad (3.3)$$

Para que haja o fechamento do sistema, faz-se necessária a adoção de uma equação constitutiva que relacione a velocidade com o tensor das tensões totais.

No caso de fluidos newtonianos, há uma relação direta entre o tensor taxa de deformação e o tensor das tensões (Bird *et al.*, 2006):

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \quad (3.4)$$

onde μ é a viscosidade newtoniana (constante) e o tensor taxa de deformação é definido por:

$$\underline{\underline{\dot{\gamma}}} = \left(\underline{\underline{\nabla U}} + [\underline{\underline{\nabla U}}]^T \right) \quad (3.5)$$

Tratando-se de fluidos poliméricos, a sua natureza mais complexa faz com que as relações entre a velocidade e o tensor das tensões sejam menos triviais. Os testes com fluidos poliméricos realizados neste trabalho utilizam-se dos modelos de White-Metzner e Oldroyd-B.

O modelo viscoelástico de White-Metzner (Macosko, 1994) é descrito pela seguinte expressão:

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda \left(\underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right) \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = \eta_P \left(\underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right) \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \quad (3.6)$$

onde $\underline{\underline{\dot{\gamma}}} = \left| \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right|$ e $\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}$ representa a derivada convectiva superior do tensor das tensões, definida por:

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = \frac{\partial \underline{\underline{\tau}}}{\partial t} + \underline{\underline{U}} \cdot \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{\tau}} - [\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{U}}] - [\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{U}}]^T \quad (3.7)$$

Neste modelo, a viscosidade polimérica η_P e o tempo de relaxação λ podem ser representados por diferentes relações. Para os testes realizados neste trabalho, η_P e λ são dados pelas equações de Carreau-Yasuda (Larson, 1988):

$$\eta_P \left(\underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right) = \eta_0 \left[1 + \left(k \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right)^a \right]^{\frac{m-1}{a}} \quad (3.8)$$

$$\lambda \left(\underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right) = \lambda_0 \left[1 + \left(l \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \right)^b \right]^{\frac{n-1}{b}} \quad (3.9)$$

Nas equações de Carreau-Yasuda, os parâmetros η_0 , λ_0 , k , m , a , l , n e b são ajustados por meio de dados experimentais. A possibilidade de a viscosidade polimérica variar com a taxa de deformação permitirá que sejam realizados testes comparativos entre este modelo e o modelo viscoplástico adotado no trabalho de Wander (2011).

Também será utilizado o modelo viscoelástico de Oldroyd-B (Macosko, 1994), que possui a seguinte equação constitutiva:

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = \eta_P \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (3.10)$$

O uso deste modelo se justifica pelo fato de a viscosidade polimérica se manter constante, independente da taxa de deformação aplicada ao fluido, o que permite que se invista em soluções analíticas para os campos de tensão e velocidade deste modelo.

3.2 Ferramentas computacionais

A seguir, encontra-se uma breve descrição das ferramentas computacionais utilizadas no desenvolvimento deste trabalho. Os testes foram realizados em um computador Intel Core2 Quad Q6600, com processador de núcleo quádruplo de 2,4 GHz e memória RAM de 8 GB.

3.2.1 Pacote de CFD OpenFOAM

O OpenFOAM é, em sua essência, uma biblioteca escrita na linguagem C++. A finalidade primária é a construção de aplicativos executáveis, sendo eles *solvers* ou utilitários. Os *solvers* destinam-se à resolução de problemas específicos dentro do campo da mecânica do contínuo, e os utilitários são destinados às tarefas envolvendo manipulação de dados e cálculos algébricos, principalmente nas etapas de pré- e pós-processamento.

O presente estudo foi desenvolvido utilizando a versão 1.5-dev, contendo algumas funcionalidades que vão além da distribuição convencional, sendo destinada principalmente a desenvolvedores.

O pacote OpenFOAM possui inúmeras vantagens que justificam seu uso como ferramenta de estudo de problemas de dinâmica de fluidos computacional. As principais vantagens consistem em ser um pacote de CFD gratuito, de código aberto (estando sob a Licença Pública Geral da GNU – GNU GPL) e sintaxe relativamente amigável. É capaz de tratar malhas estruturadas e não estruturadas, e suporta a importação de malhas provenientes de outros pacotes de CFD. Possui uma grande variedade de *solvers* disponíveis, abrangendo os mais diversos tipos de problemas encontrados em CFD e uma grande comunidade de usuários ao redor do mundo, principalmente em instituições de ensino, organizada em fóruns destinados à colaboração mútua entre usuários.

Contudo, o OpenFOAM também possui algumas desvantagens, sendo as principais a ausência de uma interface gráfica com o usuário integrada ao programa direcionada às etapas de pré-processamento, e uma documentação relativamente pobre sobre o pacote, se comparado à sua complexidade e potencial de uso.

Os problemas a serem resolvidos pelo pacote OpenFOAM são dispostos em diretórios que obedecem, em geral, a estrutura disposta no Anexo I.

Para mais informações sobre o pacote, o leitor é incentivado a consultar a sua documentação, disponível em www.openfoam.com, através dos guias *User Guide* e *Programmers Guide* (OpenFOAM, 2012).

3.2.2 Solvers

Os *solvers* utilizados neste trabalho são o `viscoelasticFluidFoam` (Favero, 2009) e o `icoFoam` (OpenFOAM, 2012).

O `icoFoam` é o *solver* distribuído juntamente com o pacote OpenFOAM para a resolução de escoamentos transientes laminares de fluidos newtonianos incompressíveis.

O *solver* `viscoelasticFluidFoam` (Favero, 2009) é utilizado na resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos incompressíveis transientes. Possui um grande número de modelos viscoelásticos implementados, como Maxwell, UCM, Oldroyd-B, Giesekus, modelos do tipo FENE e do tipo PTT.

O código principal do *solver* `viscoelasticFluidFoam` encontra-se no arquivo `viscoelasticFluidFoam.C`, apresentado no Anexo II. Recomenda-se a leitura do trabalho que deu origem ao *solver* para uma descrição detalhada.

A biblioteca `createFields.H` é utilizada na leitura e criação dos campos iniciais das variáveis do problema e propriedades físicas relativas ao caso, sendo específica para cada *solver*. O código da biblioteca `createFields.H` é apresentado no Anexo III. Da mesma forma que o código do arquivo `viscoelasticFluidFoam.C`, recomenda-se a leitura do trabalho que deu origem ao *solver* para uma descrição detalhada deste arquivo.

A implementação da equação da conservação do momento é dividida entre os arquivos `viscoelasticFluidFoam.C` e o arquivo correspondente à implementação do modelo viscoelástico adotado. No presente trabalho, trata-se do arquivo `Oldroyd_B.C` ou `White_Metzner_CY.C`, dependendo do modelo viscoelástico. O código do arquivo `Oldroyd_B.C` encontra-se no Anexo IV, e do arquivo `White_Metzner_CY.C` no Anexo V.

Uma breve explicação sobre como é realizada a resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos através do *solver* `viscoelasticFluidFoam` adotando o modelo constitutivo de Oldroyd-B é dada no Anexo VI. Novamente, recomenda-se a leitura do trabalho que deu origem ao *solver* para uma descrição mais detalhada. A resolução de escoamentos adotando o modelo de White-Metzner possui uma sequência de etapas semelhante e por isso não será descrita aqui.

Uma representação dos principais operadores matemáticos e respectiva porção de código no modelo de Oldroyd-B é apresentada no Anexo VII.

3.2.3 Esquemas de discretização

No presente trabalho, foram utilizados os seguintes esquemas de discretização dos operadores presentes nas equações da continuidade, do movimento e equações constitutivas:

- Discretização temporal: método de Crank-Nicholson. A derivada temporal é resolvida em um passo de tempo intermediário entre os tempos n (passo de tempo atual) e o (passo de tempo anterior), podendo ser chamado de $(n+o)/2$. A integração no volume de controle e discretização são realizadas da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t_{(n+o)/2}} \int_V \rho \phi dV = \frac{(\rho_P \phi_P V)^n - (\rho_P \phi_P V)^o}{\Delta t} \quad (3.11)$$

Este método corresponde a uma aproximação por diferenças centrais da derivada temporal no tempo $t_{(n+o)/2}$, possuindo acurácia de segunda ordem (Schäfer, 2006).

- Operadores gradiente, divergente e laplaciano: interpolação linear (diferenças centrais). Este esquema é obtido através da expansão em séries de Taylor de $\phi(x + \Delta x)$ a partir de uma função $\phi(x)$ em um ponto genérico i . Denotando ϕ_P como o valor da variável genérica ϕ no ponto de interesse P , ϕ_W como o valor de ϕ no volume de controle à esquerda de P e ϕ_E como o valor de ϕ no volume de controle à direita de P , obtém-se uma aproximação no ponto P para a derivada espacial com relação a x em um domínio de espaçamento uniforme Δx a seguinte relação (Versteeg e Malalasekera, 2007):

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P = \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x} \quad (3.12)$$

- Termo advectivo: diferenciação *upwind*. O método *upwind* mais simples possível resulta da aproximação de ϕ por uma função-degrau. Dessa forma, ϕ_e (valor de ϕ na face e entre os volumes de controle P e E) é determinado dependendo da direção do fluxo de massa (Schäfer, 2006):

$$\begin{aligned} \phi_e &= \phi_P, & \text{se } m_e > 0; \\ \phi_e &= \phi_E, & \text{se } m_e < 0. \end{aligned}$$

O esquema *upwind* possui erro de interpolação de primeira ordem, independente da malha. A desvantagem da baixa acurácia é compensada pelo fato da diferenciação *upwind* levar a uma solução incondicionalmente limitada.

3.2.4 Resolução dos sistemas lineares

No pacote OpenFOAM, a resolução dos sistemas lineares gerados pela discretização das equações que governam o problema difere entre as variáveis. Para a pressão é utilizado o método do gradiente conjugado preconditionado (PCG) e para velocidade e tensão é utilizado o gradiente biconjugado preconditionado (PBiCG).

O OpenFOAM utiliza o PCG na resolução de sistemas lineares onde a matriz $[A]$ dos coeficientes é simétrica, ou seja, $a_{ij} = a_{ji}$. Este método foi desenvolvido simultaneamente e independentemente por E. Stiefel e M. R. Hestenes (1952). Considerando um sistema linear do tipo $[A][x] = [k]$, sendo $[h]$ a solução deste sistema, a aplicação do método dos gradientes conjugados consiste nas seguintes etapas:

- *Passo inicial:* Selecionar uma estimativa x_0 para h e calcular o resíduo r_0 e a direção p_0 pela fórmula $p_0 = r_0 = k - Ax_0$;
- *Rotina geral:* Calcular a estimativa x_i de h através da fórmula $x_{i+1} = x_i + a_i p_i$, onde $a_i = \frac{|r_i|^2}{(p_i, Ap_i)}$ e $(p_i, Ap_i) = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} p_i p_j$. Calcular a direção p_i através de $p_{i+1} = r_{i+1} + b_i p_i$ onde $r_{i+1} = r_i - a_i Ap_i$ e $b_i = \frac{|r_{i+1}|^2}{|r_i|^2}$. Calcula-se sucessivamente os x_{i+1} , r_{i+1} e p_{i+1} para todos os n elementos;
- Assim que for obtido o conjunto de n vetores mutuamente conjugados p_0, \dots, p_{n-1} , a solução de $[A][x] = [k]$ pode ser obtida pela fórmula $x = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(p_i, k)}{(Ap_i, p_i)} p_i$.

Os resíduos r_0, r_1, \dots são mutuamente ortogonais e os vetores-direção p_0, p_1, \dots são mutuamente conjugados, ou seja, $(r_i, r_j) = 0$ e $(p_i, Ap_j) = 0$ com $(i \neq j)$. Estas relações podem ser usadas como condições para encontrar a solução. Caso não sejam satisfeitas, executa-se a rotina novamente utilizando como estimativa inicial o resultado do passo anterior.

O método de gradientes biconjugados é utilizado pelo OpenFOAM na resolução de sistemas lineares que possuem a matriz $[A]$ dos coeficientes assimétrica. O algoritmo foi primeiramente proposto por Lanczos em 1952 e em uma forma diferente (versão semelhante ao gradiente conjugado) por Fletcher em 1974. De forma implícita, o algoritmo soluciona não apenas o sistema original $[A][x] = [b]$, mas também o sistema $[A^T][x^*] = [b^*]$, com $[A^T]$ representando a matriz transposta da matriz dos coeficientes $[A]$. Apesar disso, a resolução desse último sistema geralmente é ignorada na maioria das formulações do algoritmo (Saad, 2003).

O método dos gradientes biconjugados consiste no seguinte algoritmo:

1. Calcule $r_0 = b - Ax_0$; escolher r_0^* de forma que $(r_0, r_0^*) \neq 0$;

2. Fazer $p_0 = r_0$, $p_0^* = r_0^*$;
3. Para $j = 0, 1, \dots$, até a convergência, fazer
 4. $\alpha_j = (r_j, r_j^*) / (Ap_j, p_j^*)$;
 5. $x_{j+1} = x_j + \alpha_j p_j$;
 6. $r_{j+1} = r_j - \alpha_j Ap_j$;
 7. $r_{j+1}^* = r_j^* - \alpha_j A^T p_j^*$;
 8. $\beta_j = (r_{j+1}, r_{j+1}^*) / (r_j, r_j^*)$;
 9. $p_{j+1} = r_{j+1} + \beta_j p_j$;
 10. $p_{j+1}^* = r_{j+1}^* + \beta_j p_j^*$;
11. Fim

Os vetores produzidos por este algoritmo satisfazem duas propriedades de ortogonalidade, que podem ser utilizadas para fins de verificação da evolução do cálculo feito pelo algoritmo:

$$(r_j, r_j^*) = 0 \quad \text{para } i \neq j$$

$$(Ap_j, p_i^*) = 0 \quad \text{para } i \neq j$$

3.2.5 Simulação em paralelo

O pacote OpenFOAM disponibiliza ao usuário a possibilidade de executar a resolução de problemas em paralelo. Isto significa dividir as tarefas que envolvem a resolução do problema entre os processadores presentes em um computador, ou entre os processadores de diversos computadores conectados em rede, geralmente resultando em um tempo de computação significativamente menor do que a resolução do problema sem o uso desta técnica. As etapas que compõem a simulação em paralelo realizada através do pacote OpenFOAM são descritas no Anexo VIII.

3.2.6 Pacote PyFoam

O PyFoam (OpenFOAM Wiki, 2012) é uma biblioteca escrita em linguagem *Python* para a manipulação de dados gerados pelo pacote OpenFOAM, que permite:

- analisar os arquivos de *log* produzidos por *solvers* do OpenFOAM;
- executar *solvers* e utilitários do OpenFOAM e analisar seus dados de saída, simultaneamente;
- manipular arquivos de parâmetros e condições iniciais de um caso de maneira não-destrutiva;
- plotagem dos resíduos de *solvers* do OpenFOAM.

Os gráficos de resíduos da resolução dos sistemas linearizados e de erros da equação da continuidade utilizados neste estudo são gerados pelo comando `pyFoamPlotwatcher.py log`, realizado a partir do terminal, após a conclusão da simulação, com base em informações disponíveis no arquivo *log* do diretório do caso, e através do aplicativo *Gnuplot*, nativo do sistema operacional Linux.

3.3 Testes numéricos preliminares

Conforme discutido anteriormente, uma das motivações para este trabalho foi verificar se os problemas numéricos encontrados por Wander (2011) na aplicação do pacote OpenFOAM na análise do escoamento de fluidos viscoplásticos estão presentes também no *solver* viscoelasticFluidFoam. Assim, nesta etapa, utiliza-se condições de geometria, de malha e de modelo de fluido semelhantes às utilizadas no trabalho supracitado.

A geometria utilizada consiste no espaço entre duas placas de dimensões $0,1 \times 0,1$ m, afastadas a uma distância pequena, de 10^{-3} m na geometria mais fina e de 5×10^{-3} m na mais espessa, estando sujeita à condição de entrada de fluido em uma das extremidades, saída de fluido na extremidade oposta e de parede nas faces superior, inferior, frontal e traseira. No interior da geometria foi adotada a condição de fluido estagnado. A Figura 3.1 apresenta uma representação em duas dimensões da geometria e das respectivas condições iniciais e de contorno aplicadas.

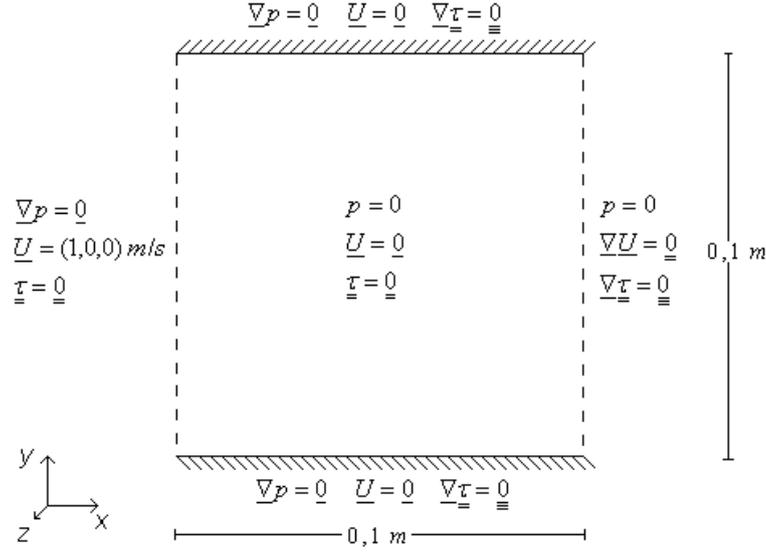


Figura 3.1: Geometria utilizada para testes preliminares e respectivas condições de contorno

As geometrias e malhas computacionais utilizadas são semelhantes às utilizadas no trabalho de Wander (2011), que estudou as validações das aproximações do tipo Hele-Shaw aplicadas ao escoamento de fluidos viscoplásticos em cavidades delgadas.

As dimensões da geometria e resolução da malha computacional utilizadas nos diferentes testes estão representadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Dimensões da geometria e resolução da malha computacional para testes preliminares

Geom.	Dim. (mm)			Divisões			$\Delta x/\Delta z$	Geom.	Dim. (mm)			Divisões			$\Delta x/\Delta z$
	x	y	z	x	y	z			x	y	z	x	y	z	
1	100	100	5	40	40	10	5	8	100	100	1	200	200	10	5
2	100	100	1	500	500	5	1	9	100	100	1	240	240	12	5
3	100	100	2	50	50	11	11	10	100	100	1	167	167	10	6
4	100	100	1	171	171	12	7	11	100	100	1	200	200	12	6
5	100	100	2	80	80	11	6,9	12	100	100	1	142	142	10	7
6	100	25	2	400	100	10	1,25	13	100	100	1	171	171	12	7
7	100	25	1	400	100	10	2,5								

A descrição da geração da malha computacional no OpenFOAM é dada pelo Anexo VIII.

Num primeiro momento, estas geometrias foram testadas com o modelo viscoelástico de White-Metzner, com η_p e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda. Para fins de comparação de resultados, utilizaram-se valores de viscosidade que se assemelhassem aos utilizados por Wander (2011) para a parte viscosa do modelo viscoplástico de Herschel-Bulkley:

$$\underline{\underline{\tau}} = \tau_y \underline{\underline{\delta}} + K_H \left| \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \right|^{m-1} \dot{\underline{\underline{\gamma}}}, \quad |\underline{\underline{\tau}}| \geq \tau_y \quad (3.13)$$

em que τ_y é a tensão de fluência (tensão mínima necessária para o que o fluido comece a escoar), $\underline{\delta}$ é o tensor matriz unidade e K_H é a constante de Herschel-Bulkley. O segundo termo da soma à direita da igualdade representa o comportamento viscoso do modelo. Os parâmetros deste termo foram extraídos dos testes realizados por Wander (2011), conforme a Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Parâmetros da parte viscosa do modelo de Herschel-Bulkley (Wander, 2011).

Teste	K_H	m
HB01	6,75	0,80
HB02	9,30	0,76

Para os valores de viscosidade das equações de Carreau-Yasuda se assemelharem aos da parte viscosa do modelo de Herschel-Bulkley, procedeu-se um ajuste dos parâmetros destas equações. Para isto, foi considerada a hipótese de que sempre haverá $k\dot{\gamma} \gg 1$ na Eq. (3.8), o que possibilita suprimir o efeito da soma do algarismo um na equação mencionada. Isto também permite eliminar o expoente a da equação, resultando em:

$$\eta_P(\dot{\gamma}) = \eta_0 \left[k \dot{\gamma} \right]^{m-1} \quad (3.14)$$

Igualando η_P da equação acima com a parte viscosa do modelo de Herschel-Bulkley, obtém-se:

$$\eta_0 = \frac{K_H}{k^{(m-1)}} \quad (3.15)$$

Substituindo esta nova definição de η_0 na Eq. 3.12, e adotando um valor suficientemente alto para a constante k de forma que a condição $k\dot{\gamma} \gg 1$ seja sempre obedecida (no caso, $k = 10^3$ s), chega-se a uma aproximação razoável dos valores de viscosidade utilizados por Wander (2011) para uma ampla faixa de valores de taxas de cisalhamento, conforme pode ser visualizado na Figura 3.2.

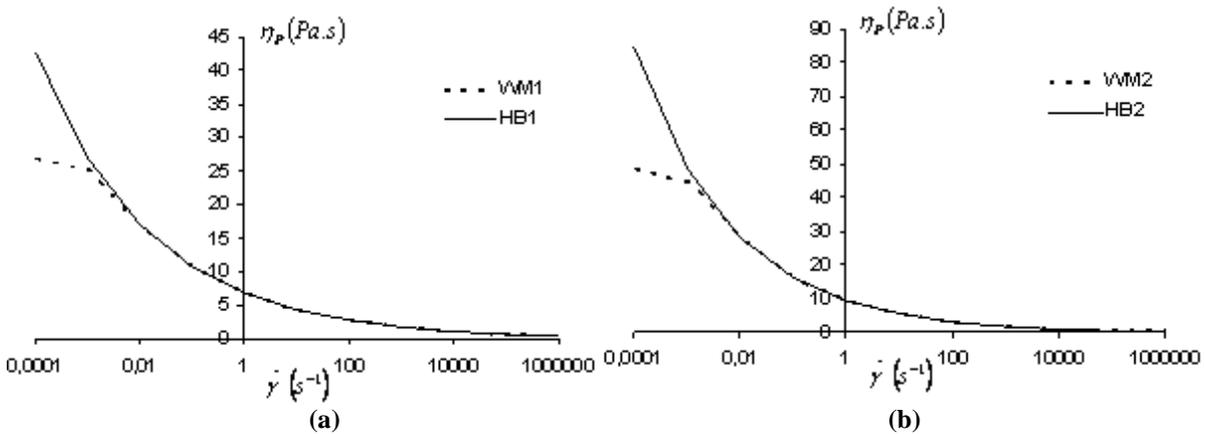


Figura 3.2: Viscosidade dependente da taxa de deformação para a parte viscosa de Herschel-Bulkley (contínuo) e Carreau-Yasuda (tracejado) comparando (a) conjuntos de parâmetros WM1 e HB01 e (b) conjuntos de parâmetros WM2 e HB02.

Como o modelo de Herschel-Bulkley destina-se a fluidos puramente viscosos, é necessário minimizar o efeito elástico proveniente da definição de λ pela Eq. (3.9). Testes preliminares indicaram que o uso de $\lambda = 0$ causa a falha do método numérico de solução do problema, apresentando exceção de ponto flutuante durante a execução do OpenFOAM. Como não se mostrou possível anular o efeito elástico na equação constitutiva de White-Metzner, tenta-se minimizar o valor de λ , a fim de que o efeito elástico seja pouco pronunciado. Adotando os valores de $l = 0$ e $\lambda_0 = 10^{-5}$ s na Eq. (3.9), é possível fazer com que λ seja constante e igual a 10^{-5} s.

De maneira análoga aos testes HB01 e HB02 da Tabela 3.2, os parâmetros constitutivos foram agrupados em dois conjuntos, denominados WM1 e WM2. Estes dois conjuntos utilizam os valores de K_H e m dos testes HB01 e HB02, respectivamente, além dos demais parâmetros inerentes ao modelo viscoelástico de White-Metzner, conforme previamente especificado. Os conjuntos de valores WM1 e WM2 especificados na Tabela 3.3 foram utilizados para resolver o escoamento para as 13 variações da geometria da Tabela 3.1, gerando 26 casos. Os casos que foram simulados utilizando o conjunto de parâmetros WM1 receberam nomes que vão de TP_WM1_01 a TP_WM1_13. Os que foram simulados utilizando o conjunto de parâmetros WM2 receberam nomes que vão de TP_WM2_01 a TP_WM2_13, conforme a Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Parâmetros para testes com a equação constitutiva de White-Metzner.

Parâmetros	η_0	λ (s)	k (s)	m	a	l (s)	n	b
WM1	26,87	10^{-5}	10^3	0,80	2	0	$6,42 \times 10^{-2}$	$2,32 \times 10^{-1}$
WM2	48,81	10^{-5}	10^3	0,76	2	0	$6,42 \times 10^{-2}$	$2,32 \times 10^{-1}$

Os parâmetros constitutivos não são introduzidos de maneira adimensional (por exemplo, através de Re e We) pelo fato das equações implementadas no pacote OpenFOAM não estarem em sua forma adimensional. Contudo, eles serão calculados e apresentados para os resultados de cada escoamento. Os parâmetros constitutivos são introduzidos no dicionário `viscoelasticProperties`, localizado no diretório `constant`.

Nestas simulações, o passo de tempo foi estipulado em 10^{-5} s, e a velocidade do fluido entrando na cavidade foi estimada em 1 m/s, com um perfil uniforme. O número de Weissenberg varia de $We = 2 \times 10^{-3}$ para o escoamento com distância entre placas de 5 mm até $We = 10^{-2}$ para o escoamento com distância entre placas de 1 mm, o que determina um comportamento elástico pouco pronunciado.

Em um caso, os resultados de um conjunto de parâmetros de uma malha menos refinada foram utilizados como condição inicial em uma malha mais refinada, a fim de determinar se a condição inicial de fluido estagnado ($\underline{U} = \underline{0}$) para a malha mais refinada constitui-se como causa de instabilidades na solução numérica. Este teste usou o resultado do caso TP_WM1_04 (malha pouco refinada) como condição inicial para o caso TP_WM1_02 (malha bastante refinada), gerando o caso TP_WM1_MAP. O mapeamento de resultados é realizado através do comando `mapFields <caso_origem> <caso_destino>` do

OpenFOAM. Com isto, os campos de variáveis do caso de origem (malha menos refinada) serão copiados para o caso de destino (malha mais refinada).

Em alguns testes em que não houve convergência (TP_WM1_02, TP_WM1_03 e TP_WM1_05), foram realizados novos testes utilizando a metodologia *multigrid*. Técnicas *multigrid* se baseiam na alternância do uso de malhas finas e grossas na resolução de um determinado problema de CFD. Sabe-se que o comportamento da convergência dos problemas resolvidos numericamente usando malhas finas é pior do que para malhas grossas. Dessa forma, alternando corretamente a resolução do problema entre malhas finas e grossas permite que as frequências baixas do erro da solução nas malhas finas sejam transformadas em altas frequências nas malhas grossas, onde podem ser amortecidas (Bortoli, 2000). O OpenFOAM utiliza o *multigrid* geométrico-algébrico generalizado (GAMG – *geometric algebraic multi-grid*). O funcionamento do *solver* GAMG no pacote OpenFOAM é explicado brevemente no Anexo VIII. O presente trabalho adota o valor da *keyword* `mergeLevels` igual a 2 no dicionário `fvSolution`. Os testes com o *solver* GAMG geraram os casos TP_WM1_02_MG, TP_WM1_03_MG e TP_WM1_05_MG.

Pelo fato dos casos TP_WM1_03 e TP_WM1_05 apresentarem problemas na convergência (ambos possuindo um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento) e para possibilitar uma comparação com os resultados obtidos por Wander (2011), as geometrias referentes a estes casos foram modificadas para conterem um número par de células na direção do eixo z . A geometria do caso TP_WM1_03 foi modificada de uma resolução de $50 \times 50 \times 11$ células para duas geometrias de $50 \times 50 \times 10$ e $50 \times 50 \times 12$ células (gerando os casos TP_WM1_03_a e TP_WM1_03_b) e a geometria do caso TP_WM1_05 foi modificada de $80 \times 80 \times 11$ células para duas geometrias de $80 \times 80 \times 10$ e $80 \times 80 \times 12$ células (gerando os casos TP_WM1_05_a e TP_WM1_05_b). Nestes testes, todos os outros parâmetros numéricos e do modelo constitutivo permaneceram inalterados com relação aos testes previamente realizados.

Também foram realizados testes com o *solver* newtoniano `icoFoam` com algumas geometrias que apresentaram problemas na convergência, TP_WM1_02 ($500 \times 500 \times 5$), TP_WM1_03 ($50 \times 50 \times 11$) e TP_WM1_05 ($80 \times 80 \times 11$ divisões) com uma velocidade de entrada do fluido de 1 m/s, a fim de verificar a influência do número ímpar de células na direção do escoamento em um escoamento resolvido por um *solver* não-viscoelástico, gerando os casos TP_FN_01, TP_FN_02 e TP_FN_03.

3.4 Solução analítica para o escoamento de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas

A comparação com soluções analíticas permite avaliar a acurácia da solução numérica do problema. Escoamentos laminares com geometrias simples possuem soluções analíticas bastante conhecidas, como é o caso das geometrias aqui estudadas.

Considerando o modelo constitutivo de Oldroyd-B, chega-se a uma solução analítica para o escoamento entre duas placas fixas para os campos de velocidade e tensão.

Para este tipo de escoamento, usam-se algumas hipóteses que resultam em simplificações das equações da continuidade, de movimento e da equação constitutiva para o modelo em questão.

1. O escoamento ocorre em estado estacionário.
2. O escoamento ocorre em regime laminar.
3. As propriedades do fluido se mantêm constantes.
4. O escoamento é bidimensional. As equações não são resolvidas na direção do eixo z .
5. Todos os efeitos de entrada e saída podem ser desprezados; o escoamento pode ser considerado completamente desenvolvido. As derivadas com relação ao eixo x para velocidade e tensão são nulas.

Assim, substituindo a expressão da derivada convectiva (Eq. 3.7) na Eq. (3.10), obtém-se:

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda(\underline{v} \cdot \underline{\nabla} \underline{\underline{\tau}} - [\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\nabla} \underline{v}] - [\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\nabla} \underline{v}]^T) = \eta(\underline{\nabla} \underline{v} + [\underline{\nabla} \underline{v}]^T) \quad (3.16)$$

A resolução da Eq. (3.16) para os componentes do tensor das tensões τ_{xx} , τ_{yx} e τ_{yy} (detalhada no Apêndice I) fornece as seguintes expressões:

$$\tau_{xx} = 2\eta\lambda \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 \quad (3.17)$$

$$\tau_{yx} = \eta \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (3.18)$$

$$\tau_{yy} = 0 \quad (3.19)$$

Por outro lado, levando em consideração que a viscosidade de um fluido de Oldroyd-B é independente da taxa de deformação e que os escoamentos de fluidos poliméricos se dão geralmente em regime laminar, chega-se ao perfil de velocidade para o problema em estudo, dado pela equação de Hagen e Poiseuille (Glasgow, 2010):

$$v_x(y) = -\frac{(\partial p / \partial x)H^2}{2\mu} \left(1 - \left(\frac{y}{H} \right)^2 \right) \quad (3.20)$$

substituindo a viscosidade Newtoniana μ pela viscosidade polimérica η_p .

A substituição do gradiente da velocidade nas equações que definem os componentes do tensor das tensões τ_{xx} e τ_{yx} é demonstrada no Apêndice II, e fornece as seguintes expressões:

$$\tau_{xx} = \frac{18y^2\eta_p\lambda v_{med}^2}{H^4} \quad (3.21)$$

$$\tau_{yx} = \frac{-3y\eta_p v_{med}}{H^2} \quad (3.22)$$

Assim, a Eq. (3.20) fornece a solução analítica para o perfil de velocidades e as Eqs. (3.21), (3.22) e (3.19) das três componentes do tensor das tensões relevantes para este tipo de escoamento (τ_{xx} , τ_{xy} e τ_{yy}), tornando possível efetuar comparações entre as soluções numéricas e analíticas, e avaliar a qualidade das primeiras.

3.5 Testes com o modelo constitutivo de Oldroyd-B e fluido newtoniano em condições similares às utilizadas na seção 3.3

As geometrias utilizadas nestes testes, em condições similares às utilizadas na seção 3.3, partem de modificações da geometria 08 (Tabela 3.1) dos testes realizados com o modelo constitutivo de White-Metzner.

A fim de tornar as simulações mais rápidas e também possibilitar eventuais comparações da solução numérica com a solução analítica obtida na seção anterior, optou-se, inicialmente, por não resolver o escoamento na direção do eixo z , tornando a simulação bidimensional.

Além disso, aumentou-se o número de células na direção perpendicular ao escoamento para 20, a fim de captar com mais fidelidade os gradientes que existem na proximidade das paredes. Não havendo problemas de convergência para 20 divisões na direção perpendicular ao escoamento, aumentou-se este número para 30. Um maior número de células na direção perpendicular ao escoamento possibilita um número maior de pontos e um perfil de velocidade mais suave, o que facilita a comparação da solução numérica com a solução analítica. Não encontrando dificuldades numéricas com 30 células na direção perpendicular ao escoamento, utilizou-se este valor para os próximos testes.

3.5.1 Testes com o modelo de Oldroyd-B

Os parâmetros utilizados nos testes com o modelo de Oldroyd-B foram escolhidos de forma a testar a situação limite onde há convergência da solução numérica do problema. Assim, os testes iniciaram com valores baixos de viscosidade polimérica η_P e tempo de relaxação λ . Para cada teste subsequente, aumenta-se o valor da viscosidade polimérica por um fator de 10, até chegar ao valor de $\eta_P = 10^3$ Pa.s. Em seguida, aumenta-se o valor do tempo de relaxação, até chegar a $\lambda = 1$ s, conforme a Tabela 3.4. A geometria possui dimensões de $0,10 \times 10^{-3}$ m com 200×30 divisões.

Tabela 3.4: Parâmetros constitutivos para testes com o modelo de Oldroyd-B

Caso	η_P (Pa.s)	λ (s)	Caso	η_P (Pa.s)	λ (s)
TCS_OB_01	1,6955	10^{-5}	TCS_OB_06	10^3	10^{-4}
TCS_OB_02	1,6955	10^{-5}	TCS_OB_07	10^3	10^{-3}
TCS_OB_03	10	10^{-5}	TCS_OB_08	10^3	10^{-2}
TCS_OB_04	10^2	10^{-5}	TCS_OB_09	10^3	10^{-1}
TCS_OB_05	10^3	10^{-5}	TCS_OB_10	10^3	1

A fim de determinar se o comprimento de entrada do escoamento estava tendo alguma influência nos resultados dos casos simulados, duplicou-se e, em seguida, quadruplicou-se o comprimento de algumas geometrias utilizadas dos casos TCS_OB_01 a TCS_OB_10, gerando mais oito casos, relacionados na Tabela 3.5.

Tabela 3.5: Parâmetros para os testes TCS_OB_11 a TCS_OB_18

Caso	η_P (Pa.s)	λ (s)	Dim. (m) Divisões			
			x	x	x	y
TCS_OB_11	1,6955	10^{-3}	0,2	10^{-3}	400	30
TCS_OB_12	1,6955	10^{-2}	0,2	10^{-3}	400	30
TCS_OB_13	10	10^{-1}	0,2	10^{-3}	400	30
TCS_OB_14	10^2	1	0,2	10^{-3}	400	30
TCS_OB_15	10^3	10^{-3}	0,4	10^{-3}	800	30
TCS_OB_16	10^3	10^{-2}	0,4	10^{-3}	800	30
TCS_OB_17	10^3	10^{-1}	0,4	10^{-3}	800	30
TCS_OB_18	10^3	1	0,4	10^{-3}	800	30

Os testes utilizados para determinar a qualidade da solução numérica, comparando-a com a solução analítica para este tipo de escoamento foram realizados com $\eta_P = 0,585$ Pa.s e $\lambda = 10^{-5}$ s. Tais valores foram escolhidos por representarem propriedades viscoelásticas semelhantes às utilizadas nos testes apresentados na seção 3.3. Esta faixa de valores de viscosidade polimérica e tempo de relaxação é relativamente baixa e, dessa forma, menos crítica para a convergência dos testes. Os testes estão relacionados na Tabela 3.6.

Tabela 3.6: Parâmetros de geometria para os testes comparativos entre a solução numérica e analítica para o modelo de Oldroyd-B

Caso	Dim. (m)		Divisões		$\Delta x/\Delta y$
	x	y	x	y	
TCS_OB_19	0,20	0,01	200	40	4
TCS_OB_20	0,20	0,01	200	30	3
TCS_OB_20_B	0,20	0,01	200	26	2,6
TCS_OB_21	0,20	0,01	200	20	2
TCS_OB_22	0,40	0,01	400	30	3
TCS_OB_27	0,40	0,01	400	28	2,8
TCS_OB_26	0,40	0,01	400	26	2,6
TCS_OB_25	0,40	0,01	400	24	2,4
TCS_OB_24	0,40	0,01	400	22	2,2
TCS_OB_23	0,40	0,01	400	20	2

Utiliza-se somente malhas com um número par de divisões na direção perpendicular ao escoamento, a fim de evitar eventuais problemas de convergência encontrados ao se utilizar malhas com um número ímpar de divisões em testes previamente realizados.

Foram utilizadas, primeiramente, geometrias de 0,2 m e, em seguida, de 0,4 m de comprimento. O uso das primeiras geometrias se justifica pelo seu menor custo computacional. Em seguida, foram utilizadas geometrias de 0,4 m, a fim de determinar se um comprimento maior poderia influenciar de maneira significativa os resultados.

Após, foram efetuados testes com valores de viscosidade polimérica $\eta_P = 5$ Pa.s. Ao aumentar a viscosidade, percebeu-se que a convergência começa a ficar prejudicada. Assim, os testes com $\eta_P = 5$ Pa.s foram realizados aumentando-se o número de iterações do acoplamento PISO do solver viscoelástico para 10 e diminuindo a tolerância das variáveis p de 10^{-9} para 10^{-11} e das variáveis U e τ de 10^{-6} para 10^{-8} . Estas alterações são realizadas no dicionário `fvSolution` no diretório `system`. A geometria destes casos possui $0,4 \times 0,01$ m. O tempo de relaxação utilizado é $\lambda = 10^{-5}$ s. Os casos estão relacionados na Tabela 3.7.

Tabela 3.7: Parâmetros para testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 5$ Pa.s.

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	Nº iter. PISO
	x	y		
TCS_OB_28	400	20	2	2
TCS_OB_29	400	10	1	2
TCS_OB_30	400	10	1	10
TCS_OB_31	400	20	2	20

Também foram realizados testes com um valor de viscosidade polimérica de $\eta_P = 0,05$ Pa.s. Para estes testes foram utilizados valores de tolerância de 10^{-9} para p e 10^{-6} para U e τ . Foi especificado o número de cinco iterações do PISO. A geometria possui as mesmas dimensões do caso anterior. O tempo de relaxação utilizado também é o mesmo. Os casos estão relacionados na Tabela 3.8.

Tabela 3.8: Parâmetros para testes com viscosidade polimérica $\eta = 0,05$ Pa.s.

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$
	x	y	
TCS_OB_32	400	20	2
TCS_OB_33	400	26	2,6
TCS_OB_34	400	28	2,8
TCS_OB_35	400	30	30

3.5.2 Testes com fluido newtoniano

Devido a alguns dos casos da seção anterior apresentarem problemas de convergência e a fim de obter resultados numéricos no limite newtoniano escoando sob condições de malha e geometria semelhantes às testadas na seção 3.5.1, procedeu-se com uma série de testes usando o *solver* icoFoam, que é nativo do pacote OpenFOAM e utilizado para resolver escoamentos laminares de fluidos newtonianos incompressíveis.

Os testes foram realizados com viscosidade cinemática de $\nu = 0,05$ m²/s até $\nu = 5 \times 10^8$ m²/s sendo aumentado por um fator de 10 a cada teste realizado. O número de iterações do método de acoplamento pressão-velocidade por passo de tempo aumenta de 5 para 10, quando a viscosidade utilizada é igual ou maior do que 5 m²/s, a fim de contornar eventuais problemas de convergência, conforme a Tabela 3.9. Decidiu-se por testar valores de viscosidade até $\nu = 5 \times 10^8$ m²/s para abranger uma ampla faixa de valores. A geometria destes casos possui 0,40×0,01 m.

Tabela 3.9: Parâmetros para testes com fluido newtoniano.

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	ν (m ² /s)	PISO	Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	ν (m ² /s)	PISO
	x	y					x	y			
TCS_FN_01	400	10	1	5	5	TCS_FN_08	400	30	3	50	10
TCS_FN_02	400	20	2	5	5	TCS_FN_09	400	30	3	500	10
TCS_FN_03	400	26	2,6	0,05	5	TCS_FN_10	400	30	3	5000	10
TCS_FN_04	400	28	2,8	0,05	5	TCS_FN_11	400	30	3	5×10^4	10
TCS_FN_05	400	30	3	0,05	5	TCS_FN_12	400	30	3	5×10^5	10
TCS_FN_06	400	30	3	0,585	5	TCS_FN_13	400	30	3	5×10^6	10
TCS_FN_07_B	400	30	3	5	5	TCS_FN_14	400	30	3	5×10^7	10
TCS_FN_07	400	30	3	5	10	TCS_FN_15	400	30	3	5×10^8	10

3.6 Análise da influência dos parâmetros e especificações numéricas na convergência da solução

Após os testes realizados baseados na variação de características de geometria, malha, modelos viscoelásticos e respectivos parâmetros, explora-se variações de características de resolução do problema numérico em si. Nos casos nos quais se julgou adequado, com base no potencial explicativo da informação gerada, considerou-se, conjuntamente, a variação dos parâmetros constitutivos, conforme explicitado em alguns dos casos descritos a seguir.

3.6.1 Influência do refinamento da malha e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$

Com a finalidade de verificar a influência de parâmetros de malha nos resultados das simulações, realizaram-se testes em que se variou o refinamento nas direções x e y e o valor da razão de aspecto do volume de controle $\Delta x/\Delta y$.

A razão $\Delta x/\Delta y$ assumiu valores de 5, 4 e 3. Para cada valor, foram realizados testes com sete malhas, com diferentes níveis de refinamento. A relação das malhas utilizadas encontra-se na Tabela 3.10. A geometria utilizada possui $0,20 \times 0,01$ m. Os parâmetros constitutivos e numéricos para estes testes são $\eta_P = 0,585$ Pa.s, $\lambda = 10^{-5}$ s, $Re = 13,74$ e $We = 10^{-3}$. Foram usadas cinco iterações do algoritmo PISO por passo de tempo.

Tabela 3.10: Malhas utilizadas para os testes TCM_OB_01 a TCM_OB_21

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$
	x	y			x	y	
TCM_OB_01	16	4	5	TCM_OB_12	120	24	4
TCM_OB_02	32	8	5	TCM_OB_13	140	28	4
TCM_OB_03	48	12	5	TCM_OB_14	160	32	4
TCM_OB_04	64	16	5	TCM_OB_15	26	4	3
TCM_OB_05	96	24	5	TCM_OB_16	52	8	3
TCM_OB_06	112	28	5	TCM_OB_17	80	12	3
TCM_OB_07	128	32	5	TCM_OB_18	106	16	3
TCM_OB_08	20	4	4	TCM_OB_19	160	24	3
TCM_OB_09	40	8	4	TCM_OB_20	186	28	3
TCM_OB_10	60	12	4	TCM_OB_21	212	32	3
TCM_OB_11	80	16	4				

3.6.2 Acoplamento pressão-(velocidade-tensão) - PISO

Nos testes desta seção, altera-se o número de iterações do método de acoplamento pressão-(velocidade-tensão) PISO que atua na resolução do problema, a fim de verificar sua influência nos resultados.

Foram utilizados como caso-base os testes TCS_OB_32 a TCS_OB_35, que foram testados com cinco iterações do algoritmo PISO por passo de tempo na seção 3.5.1. Foi testada a influência de uma e três iterações no PISO nos casos acima citados, gerando mais oito casos, mostrados na Tabela 3.11. Para estes testes, $\eta_P = 0,05$ Pa.s, $\lambda = 10^{-5}$ s, $Re = 160$ e $We = 10^{-3}$.

Tabela 3.11: Parâmetros para testes com variação de iterações do algoritmo PISO

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	PISO	Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	PISO
	x	y				x	y		
TCS_OB_32_B	400	20	2	1	TCS_OB_34_B	400	28	2,8	1
TCS_OB_32_D	400	20	2	3	TCS_OB_34_D	400	28	2,8	3
TCS_OB_32	400	20	2	5	TCS_OB_34	400	28	2,8	5
TCS_OB_33_B	400	26	2,6	1	TCS_OB_35_B	400	30	3	1
TCS_OB_33_D	400	26	2,6	3	TCS_OB_35_D	400	30	3	3
TCS_OB_33	400	26	2,6	5	TCS_OB_35	400	30	3	5

O valor do número de correções de não-ortogonalidade dentro da iteração do PISO, cujo padrão no pacote é de um, foi alterado para zero em todas as simulações. Todas as malhas utilizadas neste trabalho são ortogonais, o que elimina a necessidade de correções de não-ortogonalidade.

No OpenFOAM, as entradas correspondentes ao sistema de acoplamento pressão-velocidade encontram-se no dicionário `fvSolution`. A sintaxe dos fatores determinantes no acoplamento PISO é dada no Anexo VIII.

3.6.3 Uso de relaxação das variáveis e aumento da tolerância na resolução dos sistemas lineares

Os testes descritos nas seções anteriores não exploraram o efeito do uso de relaxação das variáveis na convergência. A partir deste momento, passa-se a explorar este recurso, a fim de superar as limitações impostas pelo número de volumes de controle na direção perpendicular à do escoamento e valor da viscosidade polimérica para a estabilidade numérica da solução.

Primeiramente, optou-se por relaxar somente a variável τ , pois acredita-se que a sua evolução possa ser crítica para a estabilidade do problema. Foram testados valores de relaxação para a variável τ de 0,3 (70% do valor do passo de tempo anterior e 30% do valor do passo de tempo atual) e 0,5, gerando os casos TR_OB_01 e TR_OB_02. Em ambos os casos a geometria possui dimensões de 0,4×0,01 m com 400×10 divisões. Os valores dos parâmetros do modelo viscoelástico são $\eta_P = 5$ Pa.s e $\lambda = 10^{-5}$ s. As tolerâncias para resolução dos sistemas lineares são de 10^{-11} para a pressão e 10^{-8} para velocidade e tensão. O modelo viscoelástico utilizado nos testes foi o de Oldroyd-B.

Por acreditar-se que a relaxação das variáveis U e p também possa ter influência significativa na estabilidade numérica do problema, realizaram-se testes com relaxação destas variáveis também. Em alguns momentos esta relaxação será realizada isoladamente, outras em conjunto com a variável τ , gerando três testes, conforme Tabela 3.12. Os demais parâmetros de geometria, numéricos e constitutivos se mantêm inalterados com relação aos testes anteriores.

Tabela 3.12: Parâmetros numéricos para testes com relaxação das variáveis p , U e τ

Caso	Relaxação		
	p	U	τ
TR_OB_03	-	0,3	0,3
TR_OB_04	0,3	0,3	0,3
TR_OB_05	0,1	0,7	0,7
TR_OB_05_B	0,1	0,3	0,3
TR_OB_05_C	0,3	0,7	0,7

No OpenFOAM, os parâmetros de relaxação são selecionados no dicionário `fvSolution`, conforme exemplificado no Anexo VIII.

Além dos testes com relaxação, foram testados também valores de 10^{-6} para a tolerância da pressão e de 10^{-5} para a da velocidade e tensão, em lugar dos valores de 10^{-11} e 10^{-8} , respectivamente, utilizados na maioria dos testes. O objetivo, neste caso, foi verificar se valores menores de tolerância poderiam estar prejudicando a convergência dos casos analisados, por estar impondo condições muito rígidas para a convergência das variáveis. Estes valores de tolerância foram utilizados em conjunto com novos valores de relaxação: 0,1 para a pressão e 0,7 para a velocidade e tensão, gerando os testes TR_OB_06 e TR_OB_07. Ambos os testes possuem geometria de $0,4 \times 0,01$ m com valores dos parâmetros viscoelásticos de $\eta_p = 5$ Pa.s e $\lambda = 10^{-5}$ s. Os casos diferem somente no número de divisões na direção perpendicular ao escoamento, sendo de 10 para TR_OB_06 e 20 para TR_OB_07. Nos dois casos, o número de divisões na direção do escoamento é de 400.

O valor de 10^{-6} para a tolerância do sistema linear para a solução da variável p ainda pode ser muito baixo. Este valor foi aumentado para 10^{-5} nos testes seguintes, assim igualando-o ao valor de tolerância adotado para a resolução dos sistemas lineares para as variáveis U e τ . Os testes utilizam geometria de $0,4 \times 0,01$ m e tempo de relaxação $\lambda = 10^{-5}$ s. Os parâmetros que variam são o número de divisões na direção do eixo y , a viscosidade polimérica η_p e a relaxação das variáveis, conforme Tabela 3.13.

Tabela 3.13: Parâmetros para testes com tolerâncias de 10^{-5} e relaxação das variáveis p , U e τ

Caso	Divisões		η_p (Pa.s)	Relaxação		
	x	y		p	U	τ
TR_OB_08	400	10	5	0,03	0,7	0,7
TR_OB_09	400	20	5	0,03	0,7	0,7
TR_OB_10	400	30	5	0,03	0,7	0,7
TR_OB_11	400	30	50	0,03	0,7	0,7
TR_OB_12	400	30	500	0,03	0,7	0,7
TR_OB_13	400	30	500	0,01	0,7	0,7
TR_OB_14	400	30	5×10^3	0,01	0,7	0,7
TR_OB_15	400	30	5×10^4	0,01	0,7	0,7
TR_OB_16	400	30	5×10^5	0,01	0,7	0,7

Foi efetuado um teste onde todas as tolerâncias foram ajustadas para 10^{-6} , gerando o caso TR_OB_17. O objetivo foi verificar se o uso de tolerâncias menores para as variáveis leva a uma maior acurácia na resolução do problema. Neste caso, a geometria possui $0,4 \times 0,01$ m com 400×30 divisões. Os valores dos parâmetros viscoelásticos são de $\eta_p = 5 \times 10^6$ Pa.s e $\lambda = 10^{-5}$ s. A relaxação aplicada é de 0,01 para a pressão e 0,7 para velocidade e tensão.

O número de divisões na direção perpendicular ao escoamento tem se mostrado um fator limitante na convergência dos casos em estudo. Apesar disso, foram realizados testes em que o número de divisões na direção perpendicular ao escoamento foi aumentado de 30 para 40. O objetivo foi verificar se o aumento de divisões melhora a concordância entre resultados numéricos e analíticos, sem comprometer a convergência. Nos dois casos testados

(TR_OB_18 e TR_OB_19) os parâmetros viscoelásticos são $\eta_P = 5 \times 10^6$ e $\lambda = 10^{-5}$. As tolerâncias para a resolução dos sistemas lineares foram mantidas em 10^{-6} para todas as variáveis e a relaxação em 0,01 para a pressão e 0,7 para velocidade e tensão. No caso TR_OB_19, o comprimento na direção do eixo x foi aumentado para 0,8 m, e o número de divisões passou para 800. Os casos possuem 40 divisões na direção do eixo y .

No OpenFOAM, o *solver* de sistema linear interrompe sua execução se uma das condições a seguir for alcançada:

- o resíduo cai para valores menores do que a tolerância do *solver* linear, *keyword tolerance*;
- a razão dos resíduos atuais com relação aos iniciais cai para valores menores do que a tolerância relativa do solver linear, *keyword relTol*.

A tolerância e a tolerância relativa precisam ser determinadas para todos os *solvers* de sistemas lineares no dicionário `fvSolution` localizado no diretório `system`.

3.6.4 Cálculo do campo de tensões a partir de uma solução newtoniana

Foram realizados testes para verificar a consistência do cálculo da contribuição viscoelástica da equação do movimento pelo modelo de Oldroyd-B, realizado pelo arquivo `Oldroyd_B.C`.

Para isto, em uma primeira etapa, foi investigado o cálculo dos componentes do tensor das tensões pelo modelo de Oldroyd-B, a partir de um campo de velocidade de um fluido newtoniano. Estes testes permitiram a comparação entre a acurácia do cálculo dos campos de velocidade e tensão deste método e dos demais testes previamente realizados com o *solver* inalterado.

A obtenção de uma solução para os campos de pressão e de velocidade de um escoamento de um fluido newtoniano é feita modificando-se o arquivo `viscoelasticFluidFoam.C`, conforme descrito no Anexo IX.

O cálculo do campo de tensões continuou sendo efetuado pelo modelo de Oldroyd-B. A diferença é que, com esta nova metodologia, o campo de tensões calculado não alimenta a etapa de predição de momento na próxima iteração do método de acoplamento PISO.

Foram realizados dois testes com esta metodologia. Ambos os testes, TD_OB_1 e TD_OB_2, possuem geometria de $0,4 \times 0,01$ m com 400×30 divisões, relaxação de 0,01 para a pressão e 0,1 para a velocidade, sem relaxamento da tensão. As tolerâncias para resolução dos

sistemas lineares são de 10^{-6} para todas as variáveis. A viscosidade polimérica é de $\eta_p = 5 \times 10^6$. Os casos diferem apenas no tempo de relaxação, que é de 10^{-4} s para o caso TD_OB_1 e 10^{-3} s para TD_OB_2. Os testes foram ajustados para tempo simulado de 1 s.

Em uma segunda etapa, após estes casos chegarem ao estado estacionário, tais resultados foram utilizados como condições iniciais para dois casos, sendo eles TD_OB_3 e TD_OB_4, respectivamente. Nestes dois últimos casos, o cálculo da equação de movimento é realizado com o *solver* viscoelasticFluidFoam inalterado. Ou seja, o campo de velocidade gerado na etapa de predição de momento é utilizado no cálculo do campo de tensões e este, por sua vez, alimenta a etapa de predição de momento da próxima iteração do algoritmo PISO. Os parâmetros numéricos, constitutivos e de malha utilizados são os mesmos dos casos TD_OB_1 e TD_OB_2.

A segunda etapa de testes com esta metodologia foi realizada com a intenção de investigar a diferença entre o uso de condições iniciais de fluido estagnado e campo de tensões interno nulo (utilizadas na maioria dos testes) e condições iniciais de campo de velocidade desenvolvido e respectivo campo de tensões calculado pelo modelo de Oldroyd-B. Os casos TD_OB_3 e TD_OB_4, que utilizaram como condições iniciais campos de velocidade e tensão desenvolvidos, utilizam os mesmos parâmetros numéricos, constitutivos e de malha de casos previamente testados. Ambos diferem somente no tempo de relaxação λ , que tem se mostrado como parâmetro crítico na convergência em testes previamente realizados, uma vez que casos com $\lambda = 10^{-3}$ ($We = 10^{-1}$) têm apresentado problemas na convergência, o que geralmente não acontece com casos com $\lambda = 10^{-4}$ ($We = 10^{-2}$) e demais parâmetros inalterados com relação aos testes TD_OB_1 e TD_OB_2. Os casos também foram ajustados para tempo simulado de 1 s.

3.6.5 Refinamento de malha direcionado à entrada

Os maiores gradientes no campo de velocidade, para os escoamentos estudados neste trabalho, acontecem próximos à extremidade de entrada do fluido no domínio. Tal fato acontece principalmente pela necessidade do campo de velocidade, que é uniforme na entrada, se adaptar a um perfil parabólico, tipo de escoamento que predomina pelo restante da geometria.

Uma malha computacional com um refinamento adequado na direção da entrada do fluido pode ajudar a captar tais gradientes, evitando problemas de estabilidade, e chegando a um resultado mais condizente com o problema real.

A malha testada com refinamento na direção de entrada possui $0,4 \times 0,01$ m de comprimento e 412×30 células. Exatamente na entrada, as células possuem razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$ igual à unidade. Esta razão cresce em um fator de 10% por célula até alcançar uma razão $\Delta x/\Delta y = 3$. Após 0,02 m de comprimento, esta razão se mantém constante até a extremidade de saída do duto. A porção da malha próxima à entrada do fluido pode ser visualizada na Figura 3.3.

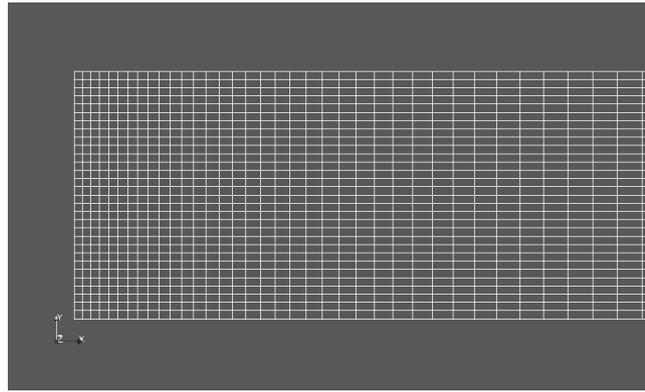


Figura 3.3: Malha com refinamento direcionado na entrada, foco no refinamento

Foram realizados dois testes com esta malha. Os testes TREF_OB_1 e TREF_OB_2 possuem relaxação de 0,01 para a pressão e 0,1 para a velocidade. As tolerâncias para resolução dos sistemas lineares são de 10^{-6} para todas as variáveis. A viscosidade polimérica é de $\eta_P = 5 \times 10^6$ para ambos. Os casos diferem somente no tempo de relaxação, sendo de $\lambda = 10^{-4}$ s para TREF_OB_1 e $\lambda = 10^{-3}$ s para TREF_OB_2. Os testes foram ajustados para um tempo simulado de 1 s.

3.7 Tempo de relaxação λ

Além de ser possível trabalhar com uma grande faixa de valores de viscosidade polimérica, é interessante dispor de um código que possibilite trabalhar também com uma ampla faixa de tempos de relaxação. Estas duas características são altamente desejáveis, já que possibilita adequar o código utilizado a uma grande variedade de processos existentes na indústria de processamento de polímeros.

Os testes seguintes foram realizados para encontrar condições que possibilitem o funcionamento do *solver* viscoelasticFluidFoam para tempos de relaxação de $\lambda = 10^{-4}$, 10^{-3} , 10^{-2} , 10^{-1} e 1 s. Nestes testes, a geometria utilizada será de $0,4 \times 0,01$ m com 400×30 divisões. As tolerâncias para resolução dos sistemas lineares são de 10^{-6} e a viscosidade polimérica $\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s, salvo quando especificado o contrário.

Primeiramente foram testadas malhas com 30 e 40 divisões na direção perpendicular ao escoamento (eixo y), gerando os casos TL_OB_01 e TL_OB_02. As relaxações aplicadas foram de 0,01 para a pressão e de 0,7 para velocidade e tensão. O tempo de relaxação foi de $\lambda = 10^{-4}$ s. Também foi efetuado um teste com tempo de relaxação $\lambda = 10^{-3}$ s, gerando o caso TL_OB_03.

A fim de verificar os efeitos da relaxação de variáveis na convergência de casos com tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s, foram realizados testes variando o fator de relaxação de τ , sendo que nestes testes este parâmetro assume os valores de 0,1, 0,3, 0,5, 0,7 (já testado), 0,8,

0,9 e 0,01. O fator de relaxação da pressão é mantido em 0,01 e o da velocidade em 0,7, conforme Tabela 3.14.

Tabela 3.14: Testes com tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s variando o parâmetro de relaxação da variável tensão

Caso	Relaxação		
	p	U	τ
TL_OB_04	0,01	0,7	0,1
TL_OB_05	0,01	0,7	0,3
TL_OB_06	0,01	0,7	0,5
TL_OB_07	0,01	0,7	0,7
TL_OB_08	0,01	0,7	0,8
TL_OB_09	0,01	0,7	0,9
TL_OB_04_B	0,01	0,7	0,01

Casos que apresentam viscosidade polimérica e tempo de relaxação elevados podem apresentar problemas de convergência. Acredita-se que isto seja devido à existência de duas forças que podem ser bastante pronunciadas quando as condições acima estão presentes, e que contribuem para dificultarem a propagação do momento linear. Tais forças seriam o atrito, causado pela viscosidade polimérica e a resistência elástica, causada pelo tempo de relaxação. Decidiu-se, então, realizar um teste com viscosidade polimérica $\eta_P = 5 \times 10^5$ Pa.s (uma ordem de magnitude menor do que os testes anteriores, a fim de diminuir a influência do atrito) e tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s a fim de testar esta hipótese, gerando o caso TL_OB_10, com relaxação de 0,01 para pressão e de 0,7 para velocidade e tensão.

Foi realizado um teste a fim de determinar se os parâmetros de relaxação utilizados para a variável τ podem ser causas de instabilidades numéricas. Assim, foi utilizado em um teste um parâmetro que causa uma relaxação mais severa na variável (0,1) em um teste que previamente não foram encontrados problemas de convergência (caso TR_OB_17) para um tempo de simulação de $t = 1$ s, gerando o caso TL_OB_11. Os demais parâmetros são mantidos os mesmos do caso TR_OB_17.

Pelo fato da tensão ser calculada para cada passo de tempo em função do campo de velocidade, acredita-se que a relaxação da tensão não tenha grandes efeitos na estabilidade do problema. Assim, com a relaxação da velocidade, espera-se que seja feita também uma relaxação indireta na tensão, pelo fato do cálculo da segunda ser dependente da primeira. Devido a isso, e pelo fato da relaxação da tensão não causar mudanças significativas nos resultados dos casos previamente testados, foram realizados testes em que foram relaxados somente a pressão e a velocidade. Os casos TL_OB_12 e TL_OB_13 possuem tempo de relaxação de $\lambda = 10^{-4}$ s. com relaxação da pressão de 0,01. Ambos diferem somente na relaxação da velocidade, sendo de 0,3 no primeiro caso e 0,1 no segundo.

Também foi realizado um teste mantendo todos os parâmetros iguais ao caso TL_OB_13, apenas aumentando o tempo de relaxação para 10^{-3} s, gerando o caso TL_OB_14.

Decidiu-se por testar uma redução no parâmetro de relaxação da pressão de 0,01 para 0,001 no caso TL_OB_14, gerando o caso TL_OB_15.

Por entender que não existe sentido em aumentar ainda mais a relaxação das variáveis pressão e velocidade, sob o risco de tornar a convergência extremamente lenta, foram explorados outros recursos numéricos nos testes subsequentes.

3.8 Testes com perfil parabólico de entrada

Nos testes previamente realizados, em que o perfil de entrada é uniforme observa-se, próximo à extremidade de entrada, a ocorrência de oscilações na magnitude da velocidade, comportamento que não é esperado para este tipo de problema. Este fenômeno é observado tanto em casos que divergiram como em casos em que não foram observados problemas na convergência, como pode ser visto na Figura 3.4.

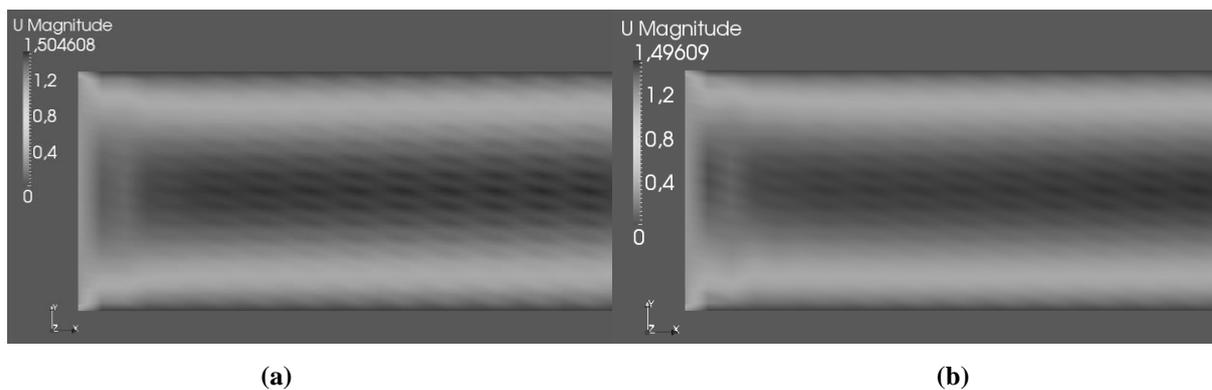


Figura 3.4: Perfil de velocidade próximo à entrada para os casos (a) TL_OB_11 (em que não houve problemas de convergência) e (b) TL_OB_08 (divergiu em 0,42 s).

Acredita-se que estas perturbações resultem de uma incapacidade inerente do método numérico em tratar adequadamente o perfil de entrada uniforme e constante. Contudo, elas tendem a desaparecer ao longo da geometria em direção à extremidade de saída do fluido. É possível que estas perturbações possam causar instabilidades numéricas que levem à falha do método.

Supõe-se que um perfil de velocidade de entrada parabólico seja capaz de reduzir a ocorrência destas perturbações, permitindo que o método funcione por mais tempo e em condições mais severas como, por exemplo, um We maior.

Para que seja possível estabelecer uma função parabólica como condição de contorno para a entrada de fluido foi usada a biblioteca **groovyBC** (OpenFOAM Wiki, 2012). Esta biblioteca permite usar condições de contorno do tipo mista, onde a *keyword value*, que determina o valor da variável, é especificado como uma expressão ao invés de um campo.

A função parabólica a ser estabelecida como condição de contorno é facilmente encontrada através de um dos pontos em que a velocidade é nula (junto à parede) e o ponto médio entre as paredes, na qual a solução analítica do problema fornece o valor da velocidade na direção do eixo x como sendo de 1,5 m/s, valor máximo da função. A função procurada é $x = -6 \times 10^4 y^2 + 6 \times 10^2 y$.

A sintaxe da função como condição de contorno para a entrada é feita da seguinte forma:

```
inlet
{
  type          groovyBC;
  variables      "yp=pos().y;para=(6e4*pow(yp,2)-6e2*yp)*normal()";
  valueExpression "para";
}
```

O tipo de condição de contorno na entrada é estabelecido como **groovyBC**. Em **variables** é definida a variável **yp**, que armazena a coordenada y de cada ponto presente na face correspondente à entrada da geometria. A variável **para** assumirá o valor da função em cada ponto. A multiplicação pelo vetor normal a cada face, representado por **normal()** é efetuada a fim de garantir um campo vetorial. Em **valueExpression** o valor de **para** é passado como condição de contorno para cada ponto da entrada.

Foram escolhidos dois casos a fim de testar esta abordagem. Os casos TPP_OB_1 e TPP_OB_2 possuem geometria de $0,4 \times 0,01$ m com 400×30 divisões. As tolerâncias para resolução dos sistemas lineares são de 10^{-6} e a viscosidade polimérica $\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s. A relaxação das variáveis é de 0,01 para a pressão e 0,1 para a velocidade. Os casos diferem somente no tempo de relaxação, em que o caso TPP_OB_1 possui $\lambda = 10^{-4}$ s ($We = 10^{-2}$) e o caso TPP_OB_2 possui $\lambda = 10^{-3}$ s ($We = 10^{-1}$).

3.9 Testes com geometria de contração plana

Foram realizados testes com o modelo de Oldroyd-B numa geometria de contração plana 4:1. A altura após a contração é de $h = 0,01$ m, mantendo a altura da maioria dos testes previamente realizados. A altura H antes da contração é de 0,04 m, quatro vezes a altura após a contração. O comprimento l antes da contração é de 0,1 m e o comprimento L após a contração é de 0,2 m. A Figura 3.5 representa esta geometria.

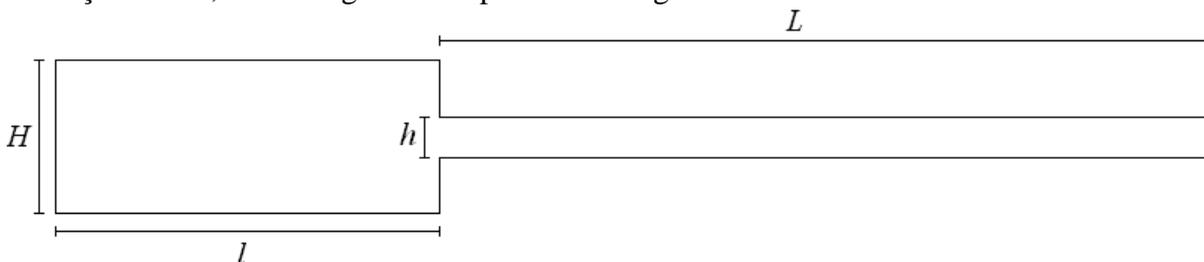


Figura 3.5: Geometria utilizada nos testes de contração plana

Para esta geometria foi utilizada uma malha com refinamento uniforme. Antes da contração existem 100 volumes de controle na direção x e 120 na direção y . Após a contração existem 200 volumes de controle na direção x e 30 na direção y , totalizando 18000 volumes de controle em toda geometria.

Estes testes foram realizados para examinar a influência de um valor maior de H na região próxima à entrada do fluido. Acredita-se que esta altura maior permite que o escoamento desenvolva-se melhor na região mais crítica à estabilidade do escoamento, onde ocorrem os maiores gradientes do campo de velocidade e onde foram observadas oscilações em testes realizados.

Os testes com a geometria de contração plana foram realizados com tolerância de 10^{-6} na resolução dos sistemas lineares e relaxação de 0,01 para a pressão e 0,1 para a velocidade. A viscosidade polimérica é de $\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s. Os casos diferem somente no tempo de relaxação, que será de $\lambda = 10^{-5}$ s. para o caso TCP_OB_1, $\lambda = 10^{-4}$ s. para o caso TCP_OB_2, e $\lambda = 10^{-3}$ s. para o caso TCP_OB_3.

A fim de dispor de resultados no limite newtoniano para comparação com o fluido viscoelástico, foi realizado um teste com a mesma geometria e o escoamento de um fluido newtoniano a uma viscosidade cinemática de $\nu = 10^{-2}$ m²/s, gerando o caso TCP_FN_1.

3.10 Testes com geometria tridimensional com $W \gg H$

Na maioria dos casos simulados até o momento, considera-se que largura W do canal (na direção do eixo z) é muito maior do que a altura H do mesmo (na direção do eixo y), de forma que torna possível considerar a largura W como sendo infinita. Essa hipótese resulta na simplificação de resolver o escoamento em apenas duas dimensões: a direção do escoamento (eixo x) e uma direção perpendicular a esta (eixo y).

Contudo, em situações reais de processamento de polímeros, dificilmente são observadas situações em que a largura W do canal é muito maior do que a altura H do mesmo, dificultando a aplicação da simplificação acima sem nenhum tipo de correção.

Assim, foram realizados testes para avaliar a qualidade de soluções de escoamentos envolvendo geometrias tridimensionais em que a largura W é consideravelmente maior do que a altura H , porém menor do que permita a simplificação para um caso bidimensional, a fim de verificar a influência das paredes situadas no plano xy na qualidade da solução do perfil de velocidade e na estabilidade do problema.

Foram realizados testes com o modelo de Oldroyd-B envolvendo duas geometrias. A direção do escoamento continua sendo no sentido positivo do eixo x .

As geometrias possuem dimensões de $0,4 \times 0,01 \times 0,05$ m contendo $400 \times 30 \times 150$ divisões na primeira geometria e de $0,2 \times 0,01 \times 0,1$ m, contendo $200 \times 30 \times 300$ divisões na segunda geometria totalizando $1,8 \times 10^6$ volumes de controle para ambos os casos. A segunda geometria possui a metade do comprimento da primeira por limitação de recursos computacionais disponíveis e por entender que $0,2$ m seja o suficiente para que o fluido seja considerado completamente desenvolvido e que tal redução não deve comprometer os resultados.

Foi realizado o teste TWH_OB_1 utilizando a primeira geometria e os testes TWH_OB_2 e TWH_OB_3 utilizando a segunda geometria. A tolerância na resolução dos sistemas lineares é de 10^{-6} para todas as variáveis. A relaxação é de $0,01$ para a pressão e de $0,1$ para a velocidade. A viscosidade polimérica é de $\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s. Os testes diferem com relação ao tempo de relaxação, conforme a Tabela 3.15.

Tabela 3.15: Parâmetros para os testes realizados com geometrias tridimensionais para $W \gg H$

Caso	Dim (m)			Divisões			λ (s)
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	
TWH_OB_1	0,4	0,01	0,05	400	30	150	10^{-4}
TWH_OB_2	0,2	0,01	0,1	200	30	300	10^{-4}
TWH_OB_3	0,2	0,01	0,1	200	30	300	10^{-3}

Capítulo 4

Resultados e Discussão

4.1 Testes numéricos preliminares

São apresentados os resultados obtidos com os testes que utilizaram condições de geometria, de malha e de modelo de fluido semelhantes ao trabalho de Wander (2011).

As simulações apresentaram resultados bastante distintos entre si, variando dentro de um mesmo conjunto de parâmetros e entre diferentes malhas. As simulações foram interrompidas ao chegarem ao estado estacionário. O critério de estado estacionário adotado foi o acompanhamento da evolução do módulo da velocidade em função do tempo no centro da geometria, na extremidade mais afastada da entrada do fluido.

Para os testes com a equação constitutiva de White-Metzner, com η_P e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM1, foram encontrados problemas de convergência em três das variações de geometria utilizadas. Os resultados dos casos encontram-se na Tabela 4.1. Nestes testes, foram utilizadas duas iterações do método de acoplamento PISO por passo de tempo.

Nas simulações em que a solução não alcançou um estado estacionário (casos TP_WM1_02, TP_WM1_03 e TP_WM1_05) o módulo da velocidade medida tendeu a crescer indefinidamente, causando a falha do método. Como todos os casos da Tabela 4.1 correspondem a um valor pequeno de λ e, desta forma, acredita-se que a não convergência nos três testes mencionados pode ser atribuída à influência de parâmetros da malha. De fato, problemas de convergência estiveram presentes somente nas simulações em que há um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento (eixo z).

Tabela 4.1: Resultados para os casos simulados com o modelo de White-Metzner, com η_P e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM1 ($\eta_0 = 26,87$ Pa.s, $\lambda_0 = 10^{-5}$ s, $k = 10^3$ s, $m = 0,8$, $a = 0,2$, $l = 0$, $n = 6,42 \times 10^{-2}$, $b = 2,32 \times 10^{-1}$).

Caso	Dim. (mm)			Divisões			$\Delta x/\Delta y$	$\Delta x/\Delta z$	EE*	t EE** (s)	Re	We
	x	y	z	x	y	z						
TP_WM1_01	100	100	5	40	40	10	1	5	Sim	0,10	1,80	2×10^{-3}
TP_WM1_02	100	100	1	500	500	5	1	1	Não	-	0,50	10^{-2}
TP_WM1_03	100	100	2	50	50	11	1	11	Não	-	0,87	5×10^{-3}
TP_WM1_04	100	100	1	171	171	12	1	7	Sim	0,015	0,50	10^{-2}
TP_WM1_05	100	100	2	80	80	11	1	6,87	Não	-	0,87	5×10^{-3}
TP_WM1_06	100	25	2	400	100	10	1	1,25	Sim	0,008	0,87	5×10^{-3}
TP_WM1_07	100	25	1	400	100	10	1	2,50	Sim	0,006	0,50	10^{-2}
TP_WM1_08	100	100	1	200	200	10	1	5	Sim	0,015	0,50	10^{-2}
TP_WM1_09	100	100	1	240	240	12	1	5	Sim	0,10	0,50	10^{-2}
TP_WM1_10	100	100	1	167	167	10	1	6	Sim	0,01	0,50	10^{-2}
TP_WM1_11	100	100	1	200	200	12	1	6	Sim	0,01	0,50	10^{-2}
TP_WM1_12	100	100	1	142	142	10	1	7	Sim	0,015	0,50	10^{-2}
TP_WM1_13	100	100	1	171	171	12	1	7	Sim	0,015	0,50	10^{-2}

* teste alcançou estado estacionário; ** tempo decorrido para alcançar estado estacionário.

Para os testes com a equação constitutiva de White-Metzner, com η_P e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM2, foram encontrados problemas de convergência em duas das geometrias utilizadas, conforme a Tabela 4.2. Nestes testes, foram utilizadas duas iterações do método de acoplamento PISO por passo de tempo. Nas simulações em que houve problemas com a convergência (TP_WM2_03 e TP_WM2_05), observou-se comportamento semelhante aos casos TP_WM1_03 e TP_WM1_05: o módulo da velocidade tende a crescer indefinidamente. Novamente os testes que tiveram problemas de convergência foram aqueles com um número ímpar de divisões na direção do eixo z, apesar do caso TP_WM2_02, que possui a mesma malha do caso TP_WM1_02, ter convergido, enquanto o último não.

Tabela 4.2: Resultados para os casos simulados com o modelo de White-Metzner, com η_P e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM2 ($\eta_0 = 48,81$ Pa.s, $\lambda_0 = 10^{-5}$ s, $k = 10^3$ s, $m = 0,76$, $a = 0,2$, $l = 0$, $n = 6,42 \times 10^{-2}$, $b = 2,32 \times 10^{-1}$).

Caso	Dim. (mm)			Divisões			$\Delta x/\Delta y$	$\Delta x/\Delta z$	EE*	t EE** (s)	Re	We
	x	y	z	x	y	z						
TP_WM2_01	100	100	5	40	40	10	1	5	Sim	0,1	1,63	2×10^{-3}
TP_WM2_02	100	100	1	500	500	5	1	1	Sim	0,0003	0,48	10^{-2}
TP_WM2_03	100	100	2	50	50	11	1	11	Não	-	0,81	5×10^{-3}
TP_WM2_04	100	100	1	171	171	12	1	7	Sim	0,02	0,48	10^{-2}
TP_WM2_05	100	100	2	80	80	11	1	6,87	Não	-	0,81	5×10^{-3}
TP_WM2_06	100	25	2	400	100	10	1	1,25	Sim	0,02	0,81	5×10^{-3}
TP_WM2_07	100	25	1	400	100	10	1	2,50	Sim	0,02	0,48	10^{-2}
TP_WM2_08	100	100	1	200	200	10	1	5	Sim	0,015	0,48	10^{-2}
TP_WM2_09	100	100	1	240	240	12	1	5	Sim	0,02	0,48	10^{-2}
TP_WM2_10	100	100	1	167	167	10	1	6	Sim	0,03	0,48	10^{-2}
TP_WM2_11	100	100	1	200	200	12	1	6	Sim	0,02	0,48	10^{-2}
TP_WM2_12	100	100	1	142	142	10	1	7	Sim	0,03	0,48	10^{-2}
TP_WM2_13	100	100	1	171	171	12	1	7	Sim	0,03	0,48	10^{-2}

* teste alcançou estado estacionário; ** tempo decorrido para alcançar estado estacionário.

Uma explicação para os problemas de convergência destas simulações pode estar na variação da viscosidade polimérica com a taxa de deformação, dada pela Eq. (3.8), e os diferentes comportamentos desta variação ao se usar o conjunto de parâmetros WM1 e WM2 da Tabela 3.3 no cálculo de η_p . Para valores baixos da taxa de deformação, o valor da viscosidade polimérica tende a ser maior para o conjunto de parâmetros WM2. Contudo, com o aumento da taxa de deformação, o valor da viscosidade polimérica tende a ser maior para o conjunto de parâmetros WM1, conforme Tabela 4.3. As maiores taxas de deformação tendem a se desenvolver em casos testados com as geometrias de menor espessura como, por exemplo, a geometria 02. Por conseguinte, a viscosidade polimérica na região do domínio com as maiores taxas de deformação tende a ser ligeiramente maior para o caso TP_WM1_02 do que para o caso TP_WM2_02. A diferença na viscosidade polimérica entre estes casos pode ser pequena, mas suficiente para desestabilizar um caso que sofra a influência negativa de parâmetros de malha ou do método numérico de resolução do problema.

Tabela 4.3: Valores de viscosidade polimérica calculada em função da taxa de deformação para os conjuntos de parâmetros WM1 e WM2.

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	η_p WM1 (Pa.s)	η_p WM2 (Pa.s)	$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	η_p WM1 (Pa.s)	η_p WM2 (Pa.s)
10 ⁻⁴	16,47	27,14	10 ²	2,44	2,75
10 ⁻³	13,43	21,24	10 ³	1,59	1,65
10 ⁻²	10,39	15,62	10 ⁴	1,03	0,97
10 ⁻¹	7,65	10,81	10 ⁵	0,66	0,57
1	5,39	7,11	10 ⁶	0,42	0,33
10	3,68	4,48			

No teste TP_WM1_MAP, em que o resultado do caso TP_WM1_04 (malha pouco refinada, em que não houve nenhum problema de convergência) foi utilizado como condição inicial para o teste TP_WM1_02 (malha bastante refinada, na qual houve problema com a convergência), também houve problema com a convergência, ocorrendo de forma semelhante à observada sem o uso de mapeamento de resultados de uma malha para outra. Isto pode significar que o resultado TP_WM1_04 é uma aproximação insuficiente do resultado esperado do caso TP_WM1_02 para que seja usada como condição inicial deste último, ou há a influência de outros fatores numéricos, desconhecidos até o momento, prejudicando a convergência.

Nos problemas que foram resolvidos utilizando o *solver multigrid* GAMG (TP_WM1_02_MG, TP_WM1_03_MG e TP_WM1_05_MG) não foi observada melhora na convergência com relação aos respectivos casos base (TP_WM1_02, TP_WM1_03 e TP_WM1_05).

Nos testes com as quatro geometrias modificadas para conterem um número par de células na direção perpendicular ao escoamento (TP_WM1_02_a, TP_WM1_02_b, TP_WM2_05_a, TP_WM2_05_b) não houve problema com a convergência, levantando a hipótese de haver algum erro com relação ao tratamento de malhas com um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento no *solver* viscoelasticFluidFoam, ou até

mesmo no pacote OpenFOAM. Nos resultados apresentados por Wander (2011), problemas semelhantes são encontrados na malha de $50 \times 50 \times 11$ divisões (equivalente à geometria 03 da Tabela 3.1), mesmo sem a utilização de uma formulação viscoelástica. No entanto, os testes realizados com escoamento de fluido newtoniano utilizando geometrias de casos viscoelásticos que apresentaram problemas de convergência e resolvidos com o *solver* icoFoam (TP_FN_01, TP_FN_02 e TP_FN_03) não apresentaram problemas, reforçando a hipótese de dificuldades do *solver* viscoelástico no tratamento de um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento.

4.2 Testes com o modelo constitutivo de Oldroyd-B e fluido newtoniano

Nesta seção são apresentados e discutidos os resultados das simulações realizadas, utilizando o modelo constitutivo de Oldroyd-B e fluido newtoniano em condições similares às utilizadas na Seção 3.3.

4.2.1 Testes com o modelo de Oldroyd-B

Os resultados dos testes realizados utilizando o modelo constitutivo de Oldroyd-B encontram-se na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Resultados dos testes preliminares com o modelo constitutivo de Oldroyd-B.

Caso	Dim. (m)		Divisões		$\Delta x/\Delta y$	η_P (Pa.s)	λ (s)	EE*	Re	We
	x	y	x	y						
TCS_OB_01	0,1	10^{-3}	200	20	10	1,6955	10^{-5}	sim	0,50	10^{-2}
TCS_OB_02	0,1	10^{-3}	200	30	15	1,6955	10^{-5}	sim	0,50	10^{-2}
TCS_OB_03	0,1	10^{-3}	200	30	15	10	10^{-5}	sim	$8,5 \times 10^{-2}$	10^{-2}
TCS_OB_04	0,1	10^{-3}	200	30	15	10^2	10^{-5}	sim	$8,5 \times 10^{-3}$	10^{-2}
TCS_OB_05	0,1	10^{-3}	200	30	15	10^3	10^{-5}	sim	$8,5 \times 10^{-4}$	10^{-2}
TCS_OB_06	0,1	10^{-3}	200	30	15	10^3	10^{-4}	sim	$8,5 \times 10^{-4}$	10^{-1}
TCS_OB_07	0,1	10^{-3}	200	30	15	10^3	10^{-3}	não	$8,5 \times 10^{-4}$	1

* caso alcançou estado estacionário.

Os casos TCS_OB_08 a TCS_OB_18, que apresentam $We > 10^{-1}$, não convergiram. Observando estes resultados, infere-se que existe uma relação entre a viscosidade polimérica η_P , o tempo de relaxação λ e a convergência ou não do caso. Nos testes em que os valores testados vão até $\eta_P = 10^3$ Pa.s e $\lambda = 10^{-4}$ s (casos TCS_OB_01 a TCS_OB_06), os casos apresentaram comportamento bastante similar, atingindo rapidamente o estado estacionário.

Para os casos restantes, em que $We > 10^{-1}$, observa-se que existe um valor crítico para λ a partir do qual os testes não convergem. Passando do TCS_OB_06 para o TCS_OB_07, verifica-se que o aumento de uma ordem de grandeza no valor de λ já é suficiente para que se

passa de um caso em que foi alcançado estado estacionário para outro em que o campo de velocidade alcança valores altos em poucos décimos de segundo, fazendo com que o método numérico falhe e a simulação pare com aviso de “exceção de ponto flutuante”.

Na tentativa de contornar a limitação encontrada no teste TCS_OB_07, foi realizado o teste TCS_OB_07_B, que contém todos os parâmetros de malha, numéricos e constitutivos iguais ao caso TCS_OB_07, apenas diferenciando na velocidade de entrada do fluido na geometria, que é de 0,1 m/s, uma ordem de grandeza menor do que nos demais casos. Desta forma, foi mantido o mesmo valor de We . Não foram observados problemas de convergência, levando a crer que a sua dependência com η_P e λ não é direta, podendo estar ligada a We , Re ou outro número adimensional, ou a alguma relação entre eles.

Os resultados das primeiras simulações comparando a solução numérica com a solução analítica estão relacionados na Tabela 4.5. Para estes casos, $Re = 14,53$ e $We = 10^{-3}$. O cálculo do erro de U_{max} é realizado da seguinte forma:

$$Erro_{U_{max}} (\%) = 100 * \frac{|U_{max}^{analítico} - U_{max}^{numérico}|}{U_{max}^{analítico}} \quad (4.1)$$

O erro das componentes do tensor das tensões é calculado com relação ao módulo do tensor, da seguinte forma:

$$Erro_{\tau_{ij}} (\%) = 100 * \frac{|\tau_{ij}^{analítico} - \tau_{ij}^{numérico}|}{|\underline{\tau}^{analítico}|} \quad (4.2)$$

Tabela 4.5: Resultados para testes comparativos entre a solução numérica e analítica para o modelo constitutivo de Oldroyd-B ($\eta_P = 0,585$ Pa.s, $\lambda = 10^{-5}$ s).

Caso	Dim. (m)		Divisões		$\Delta x / \Delta y$	Erro %		
	x	y	x	y		U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TCS_OB_19	0,20	0,01	200	40	4	Não convergiu		
TCS_OB_20	0,20	0,01	200	30	3	0,67	0,12	4,44
TCS_OB_20_B	0,20	0,01	200	26	2,6	0,67	0,03	0,37
TCS_OB_21	0,20	0,01	200	20	2	2,00	0,06	2,59
TCS_OB_22	0,40	0,01	400	30	3	0,67	0,48	4,81
TCS_OB_27	0,40	0,01	400	28	2,8	1,33	0,05	1,66
TCS_OB_26	0,40	0,01	400	26	2,6	0,67	0,01	0,28
TCS_OB_25	0,40	0,01	400	24	2,4	1,33	0,03	1,23
TCS_OB_24	0,40	0,01	400	22	2,2	0,67	0,04	1,95
TCS_OB_23	0,40	0,01	400	20	2	2,00	0,06	2,57

Observando a Tabela 4.5 percebe-se que os melhores resultados provêm do teste TCS_OB_26, que possui 26 divisões na direção perpendicular ao escoamento. Nesse caso, o refinamento na direção perpendicular ao escoamento não melhora a qualidade do resultado. O caso TCS_OB_27, com 28 divisões apresenta erros para a velocidade medida no centro da

geometria e tensões medidas na parede maiores do que o teste com 26 divisões. O caso TCS_OB_22, com 30 divisões, apresenta erro para a velocidade semelhante ao caso com 26 divisões. Contudo, os erros para as componentes do tensor das tensões são muito mais pronunciados no teste com 30 divisões do que no teste com 26 divisões. Claramente, o erro tende a variar com parâmetros da malha, apesar de não ser possível encontrar uma relação direta. Os casos TCS_OB_20_B e TCS_OB_26, que possuem razão de aspecto $\Delta x/\Delta y = 2,6$, apresentam os melhores resultados dentre as malhas com 200 e 400 divisões na direção do eixo x , respectivamente, podendo apontar que esta razão favorece a melhora na qualidade da solução em simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos resolvidos pelo viscoelasticFluidFoam. Esta hipótese necessita de mais testes e será investigada em etapa posterior deste estudo.

Percebe-se também que a convergência é prejudicada com o refinamento na direção perpendicular ao escoamento. Por exemplo, ao adotar um número de divisões igual a 40, o módulo da velocidade tende a crescer indefinidamente, causando a falha do método (caso TCS_OB_19).

Os testes realizados com viscosidade polimérica de $\eta_P = 5$ Pa.s forneceram os resultados apresentados na Tabela 4.6. Para este conjunto de testes, $Re = 1,7$ e $We = 10^{-3}$.

Tabela 4.6: Parâmetros para testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 5$ Pa.s ($\lambda = 10^{-5}$ s).

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	PISO	Erro %		
	x	y			U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TCS_OB_28	400	20	2	2	Caso não convergiu		
TCS_OB_29	400	10	1	2	Caso não convergiu		
TCS_OB_30	400	10	1	10	4,00	0,24	10,48
TCS_OB_31	400	20	2	20	2,67	0,14	0,71

Aparentemente, o aumento do valor de η_P tende a prejudicar a convergência, sendo que, em alguns casos, pode inclusive comprometê-la. Constatou-se que com o aumento do número de iterações do método de acoplamento PISO é possível contornar este problema. Isto pode ser visto na Tabela 4.7, que mostra os resultados obtidos nos testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 0,05$ Pa.s ($Re = 170$ e $We = 10^{-3}$) e número de iterações do método PISO igual a 5.

Tabela 4.7: Resultados para testes com viscosidade polimérica $\eta_P = 0,05$ Pa.s ($\lambda = 10^{-5}$ s).

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	Erro %		
	x	y		U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TCS_OB_32	400	20	2	2,00	0	2,78
TCS_OB_33	400	26	2,6	0,67	0	1,65
TCS_OB_34	400	28	2,8	0,67	0	1,41
TCS_OB_35	400	30	3	0,67	0	1,27

Não foram encontrados problemas de convergência nestas simulações, inclusive quando são utilizadas 30 divisões na direção perpendicular ao escoamento. Acredita-se que isso se deve ao uso de 5 iterações do PISO por passo de tempo, o que garantiria maior estabilidade na obtenção da solução numérica.

Observa-se que o erro em τ_{xy} teve um comportamento oposto ao observado nas tabelas anteriores. Neste caso, o refinamento na direção do eixo y fez com que o erro em τ_{xy} diminuísse, enquanto que nos resultados presentes na Tabela 4.5 tende a crescer com o refinamento em y . Contudo, ainda não é possível apontar a causa.

4.2.2 Testes com fluido newtoniano

Os testes realizados com a simulação de escoamento de fluidos newtonianos geraram os resultados presentes na Tabela 4.8.

Tabela 4.8: Resultados para testes com fluido newtoniano.

Caso	Dim. (m)		Divisões		$\Delta x/\Delta y$	ν (m ² /s)	PISO	Erro U_{max} %	Re
	x	y	x	y					
TCS_FN_01	0,40	0,01	400	10	1	5	5	1,96	2×10^{-3}
TCS_FN_02	0,40	0,01	400	20	2	5	5	0,49	2×10^{-3}
TCS_FN_03	0,40	0,01	400	26	2,6	0,05	5	0,29	2×10^{-1}
TCS_FN_04	0,40	0,01	400	28	2,8	0,05	5	0,25	2×10^{-1}
TCS_FN_05	0,40	0,01	400	30	3	0,05	5	0,22	2×10^{-1}
TCS_FN_06	0,40	0,01	400	30	3	0,585	5	0,22	$1,7 \times 10^{-2}$
TCS_FN_07_B	0,40	0,01	400	30	3	5	5	Não convergiu	2×10^{-3}
TCS_FN_07	0,40	0,01	400	30	3	5	10	0,22	2×10^{-3}
TCS_FN_08	0,40	0,01	400	30	3	50	10	0,22	2×10^{-4}
TCS_FN_09	0,40	0,01	400	30	3	500	10	0,22	2×10^{-5}
TCS_FN_10	0,40	0,01	400	30	3	5000	10	0,22	2×10^{-6}
TCS_FN_11	0,40	0,01	400	30	3	5×10^4	10	0,22	2×10^{-7}
TCS_FN_12	0,40	0,01	400	30	3	5×10^5	10	0,22	2×10^{-8}
TCS_FN_13	0,40	0,01	400	30	3	5×10^6	10	0,22	2×10^{-9}
TCS_FN_14	0,40	0,01	400	30	3	5×10^7	10	0,22	2×10^{-10}
TCS_FN_15	0,40	0,01	400	30	3	5×10^8	10	0,22	2×10^{-11}

Ao contrário dos casos envolvendo o escoamento de fluidos viscoelásticos próximos ao limite newtoniano, o refinamento na direção perpendicular ao escoamento não se mostrou como fator limitante à convergência da solução numérica dos escoamentos de fluidos newtonianos, quando ele não excede 30 divisões.

Contudo, percebe-se que a viscosidade exerce grande influência na convergência destes problemas. Quanto maior a viscosidade, mais prejudicada a convergência. De fato, simulações com viscosidade cinemática maior do que $\nu = 5$ m²/s só chegaram a um estado estacionário ao se aumentar o número de iterações do método PISO para cada passo de tempo de 5 para 10, sendo que este último valor mostra-se suficiente para impedir a divergência de casos testados cuja viscosidade cinemática seja de até 10^8 m²/s. Apesar da elevada

viscosidade, obtém-se boa concordância entre a solução numérica e analítica para o campo de velocidade.

A concordância com a solução analítica para o campo de velocidade mostrou-se melhor do que para fluidos viscoelásticos atuando no limite newtoniano. Enquanto os testes com fluido newtoniano chegaram a um erro de 0,22% no perfil de velocidade (casos TCS_FN_05 a TCS_FN_15), os testes viscoelásticos realizados até então, o valor chega a 0,67% nos casos que apresentaram melhor concordância (TCS_OB_20, TCS_OB_22, TCS_OB_24, TCS_OB_26, TCS_OB_33, TCS_OB_34 e TCS_OB_35). Nos testes viscoelásticos restantes, a concordância variou entre 1,33 e 2 por cento. Uma provável explicação para isso baseia-se na maior dimensão do problema, exigindo um maior número de iterações do algoritmo PISO. Conseqüentemente seria mais conveniente trabalhar em um critério de convergência baseado neste parâmetro.

4.3 Testes variando parâmetros constitutivos e numéricos

Nesta seção serão mostrados os resultados dos testes realizados com variações no refinamento da malha computacional e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$, relaxação das variáveis, tolerâncias na resolução dos sistemas lineares e o cálculo explícito do campo de tensões, a partir de uma solução newtoniana.

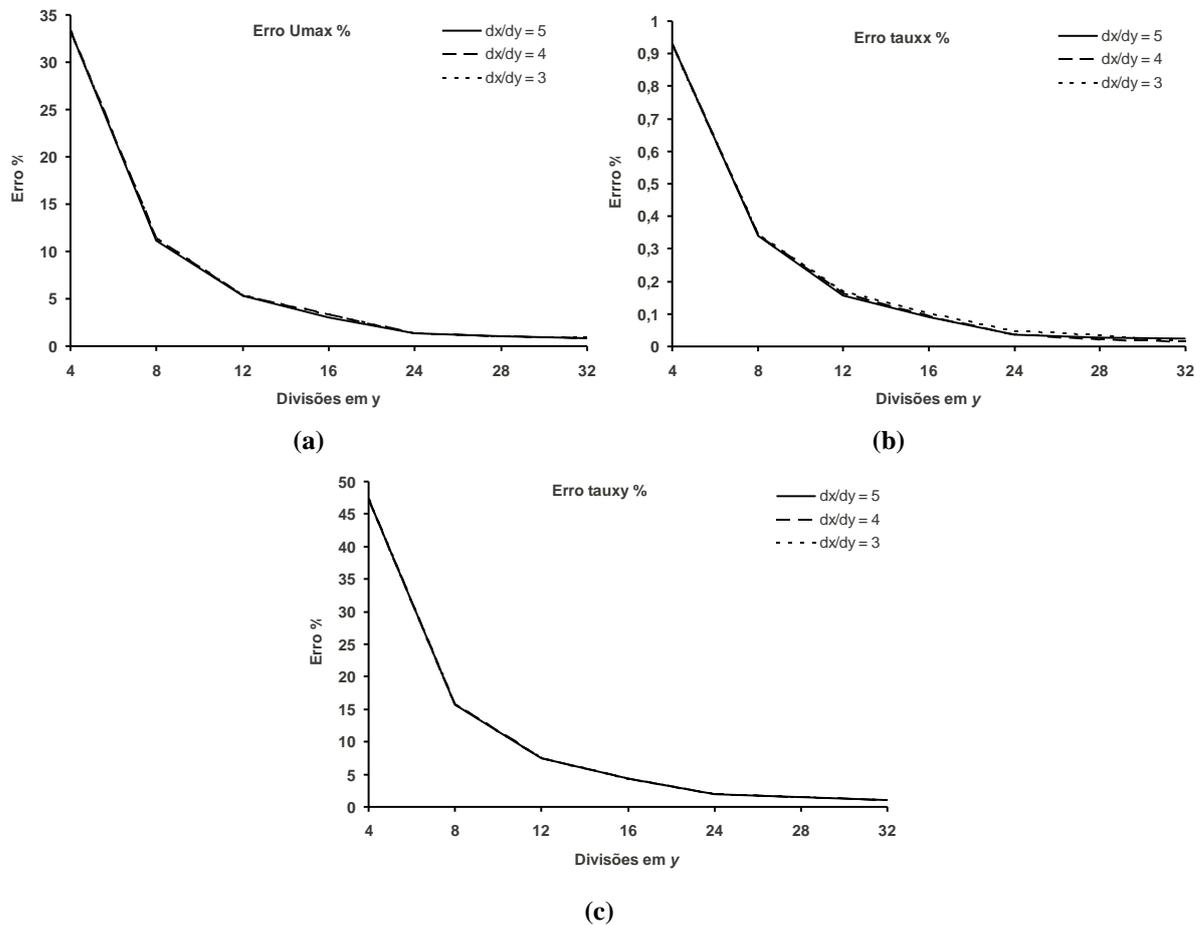
4.3.1 Influência do refinamento da malha e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$

Os testes realizados para análise dos efeitos de refinamento de malha e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$ forneceram os resultados presentes na Tabela 4.9. A geometria utilizada possui dimensões de 0,20×0,01 m. Para estes testes, $\eta_P = 0,585$ Pa.s, $\lambda = 10^{-5}$ s, $Re = 13,74$ e $We = 10^{-3}$.

Percebe-se que o refinamento da malha promove a melhora na qualidade da solução. Contudo, as diferentes razões de aspecto de volume de controle testadas não apresentam diferenças aparentes nas soluções obtidas. A Figura 4.1 mostra o valor do erro para a velocidade e as componentes do tensor das tensões em função do refinamento na direção do eixo y.

Tabela 4.9: Resultados dos testes para verificação da influência de refinamento da malha e razão de aspecto

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	Erro %		
	x	y		U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TCM_OB_01	16	4	5	33,33	0,93	47,34
TCM_OB_02	32	8	5	11,13	0,34	15,75
TCM_OB_03	48	12	5	5,27	0,16	7,46
TCM_OB_04	64	16	5	3,07	0,09	4,29
TCM_OB_05	96	24	5	1,40	0,04	1,94
TCM_OB_06	112	28	5	1,00	0,02	1,43
TCM_OB_07	128	32	5	0,80	0,02	1,10
TCM_OB_08	20	4	4	33,33	0,93	47,34
TCM_OB_09	40	8	4	11,33	0,34	15,73
TCM_OB_10	60	12	4	5,33	0,16	7,44
TCM_OB_11	80	16	4	3,33	0,09	4,29
TCM_OB_12	120	24	4	1,4	0,04	1,94
TCM_OB_13	140	28	4	1	0,02	1,43
TCM_OB_14	160	32	4	0,80	0,01	1,09
TCM_OB_15	26	4	3	33,33	0,93	47,25
TCM_OB_16	52	8	3	11,33	0,34	15,72
TCM_OB_17	80	12	3	5,33	0,17	7,44
TCM_OB_18	106	16	3	3,33	0,10	4,28
TCM_OB_19	160	24	3	1,40	0,048	1,93
TCM_OB_20	186	28	3	1	0,03	1,42
TCM_OB_21	212	32	3	0,80	0,01	1,09

**Figura 4.1:** Comportamento do erro em função do refinamento na direção do eixo y.

Nada impede que resultados de melhor qualidade para as variáveis medidas sejam obtidos para razões de aspecto diferentes destas testadas, inclusive para razões decimais. Porém, testes semelhantes utilizando malhas com razão de aspecto inferior a três possuem maior custo computacional, e não serão realizados em função do prazo para conclusão deste trabalho.

Os testes desta seção não apresentaram problemas de convergência, apesar do nível de refinamento utilizado. Acredita-se que isto se deve aos valores pequenos de η_P e λ adotados para estes testes, que refletiram em valores de Re e We que não são críticos para a convergência.

4.3.2 Acoplamento pressão-(velocidade-tensão) - PISO

Para os testes em que se variou o número de iterações do método PISO, foram obtidos os resultados presentes na Tabela 4.10. Para estes testes, $Re = 160$ e $We = 10^{-3}$.

Tabela 4.10: Resultados dos testes com variação de iterações do algoritmo PISO

Caso	Divisões		$\Delta x/\Delta y$	PISO	Erro %		
	x	y			U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TCS_OB_32_B	400	20	2	1	2	0,05	2,78
TCS_OB_32_D	400	20	2	3	2	0	1,18
TCS_OB_32	400	20	2	5	2	0	2,78
TCS_OB_33_B	400	26	2,6	1	0,6	0,01	1,65
TCS_OB_33_D	400	26	2,6	3	0,87	0,047	1,13
TCS_OB_33	400	26	2,6	5	0,67	0	1,65
TCS_OB_34_B	400	28	2,8	1	1	0,01	1,43
TCS_OB_34_D	400	28	2,8	3	1,4	0,05	2,03
TCS_OB_34	400	28	2,8	5	0,67	0	1,41
TCS_OB_35_B	400	30	3	1	0,46	0,01	1,25
TCS_OB_35_D	400	30	3	3	0,87	0,11	2,83
TCS_OB_35	400	30	3	5	0,67	0	1,27

Observa-se que o número de iterações no algoritmo PISO não está diretamente relacionado à qualidade da solução na faixa de valores testada. Para alguns casos, há soluções que tendem a piorar com o aumento do número de iterações. Isto é particularmente verdadeiro para os testes desta seção, em que três iterações produzem uma solução de pior qualidade para os casos TCS_OB_34_D e TCS_OB_34_D do que para testes semelhantes com somente uma iteração (TCS_OB_34_B e TCS_OB_35_B). Contudo, ao aumentar o número de iterações para cinco, melhora-se a qualidade dos resultados.

Desta forma, conclui-se que o número de iterações do algoritmo PISO por passo de tempo possui papel crítico na estabilidade do problema, pois permite que casos que apresentaram problemas na convergência venham a convergir com mais iterações por passo de tempo, conforme pôde ser observado em testes realizados nas seções anteriores (TCS_FN_07 e TCS_OB_30). Porém, ao mesmo tempo em que possui papel crítico na

estabilidade do problema, o aumento do número de iterações do algoritmo PISO por passo de tempo não parece contribuir para melhorar a qualidade da solução obtida. A melhora na qualidade das soluções dos testes da Tabela 4.10 resulta do aumento do refinamento da malha na direção do eixo y .

4.3.3 Uso de relaxação das variáveis e aumento da tolerância na resolução dos sistemas lineares

A relaxação aplicada apenas na variável τ (testes TR_OB_01 e TR_OB_02) não apresentou alterações se comparado ao caso TCS_OB_30, que possui as mesmas configurações de malha, parâmetros numéricos e constitutivos dos casos testados (erro de 4% para U_{max} , 0,24% para τ_{xx} e 10,48% para τ_{xy}). Para estas simulações, $Re = 1,7$ e $We = 10^{-3}$. O comportamento dos resíduos da resolução dos sistemas lineares para estes dois casos está representado na Figura 4.2. No pacote OpenFOAM, a normalização dos resíduos é efetuada através da divisão pelo valor do resíduo na primeira iteração do método.

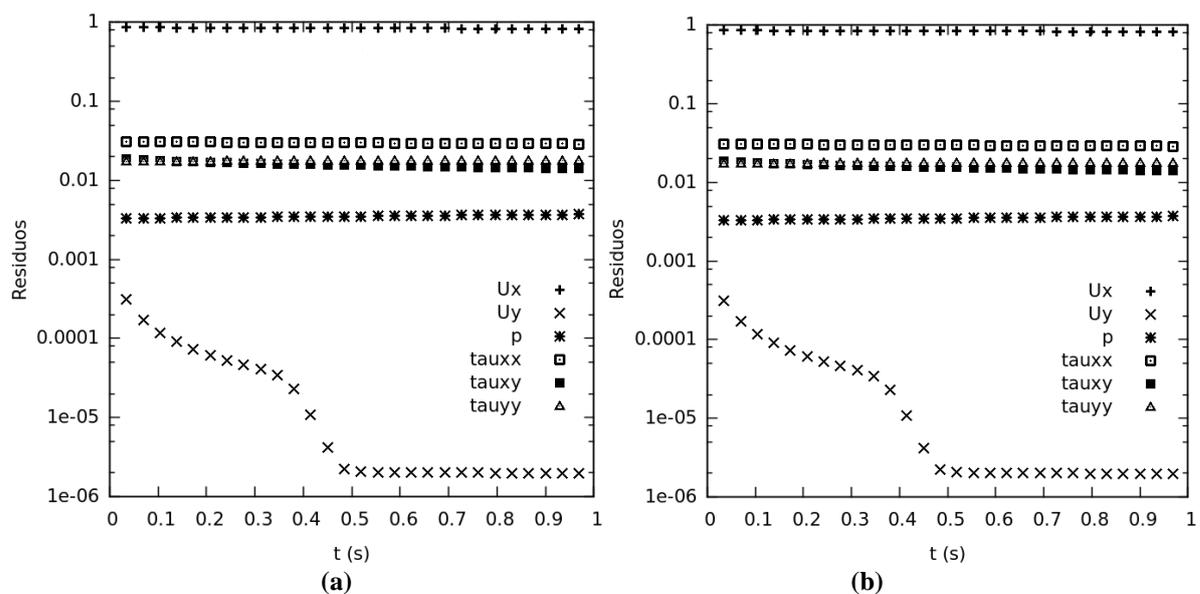


Figura 4.2: Comportamento dos resíduos normalizados em função do tempo simulado para os casos (a) TR_OB_01 e (b) TR_OB_02.

Para ambas as simulações, vê-se que o comportamento dos resíduos, em comparação aos valores de tolerâncias adotados (10^{-11} para a pressão e 10^{-8} para velocidade e tensão), é bastante ruim, principalmente para a componente da velocidade U_x , que é de especial interesse nestes casos.

Nos testes com relaxação das variáveis p e U , e naqueles em que foi realizada relaxação de todas as variáveis em conjunto, os resultados foram positivos somente para os testes TR_OB_05 e TR_OB_05_D. Nestes casos alcançou-se o estado estacionário e um comportamento dos resíduos de qualidade muito superior em comparação a casos semelhantes

previamente simulados, conforme a Figura 4.3-c. Os resultados para estas simulações encontram-se na Tabela 4.11. Para estes casos, $Re = 1,7$ e $We = 10^{-3}$.

Tabela 4.11: Resultados para testes com relaxação das variáveis p , U e τ ($\eta_p = 5$ Pa.s, $\lambda = 10^{-5}$ s).

Caso	Relaxação			Erro %		
	p	U	τ	U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TR_OB_03	-	0,3	0,3	Não convergiu		
TR_OB_04	0,3	0,3	0,3	Não convergiu		
TR_OB_05	0,1	0,7	0,7	4,00	0,24	10,48
TR_OB_05_B	0,1	0,3	0,3	3,73	1,64	141,4
TR_OB_05_C	0,3	0,7	0,7	3,67	1,63	141,4
TR_OB_05_D	0,1	-	-	4,00	0,24	10,48

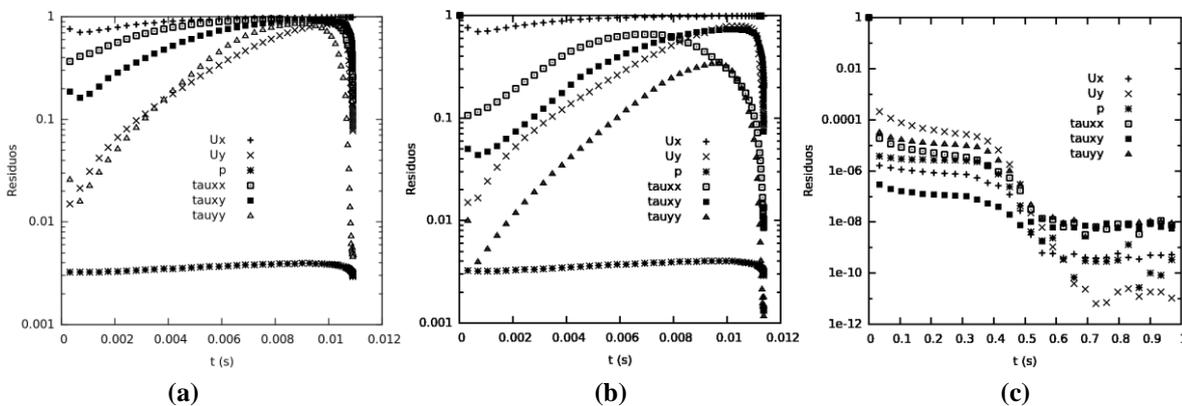


Figura 4.3: Comportamento dos resíduos normalizados em função do tempo simulado para os casos (a) TR_OB_03, (b) TR_OB_04 e (c) TR_OB_05.

Acredita-se que a visível melhora no comportamento dos resíduos dos casos TR_OB_05 e TR_OB_05_D em comparação aos demais testes semelhantes deve-se principalmente à relaxação aplicada à pressão. Com um fator de relaxação de 0,1, o valor da pressão é calculado como uma contribuição de 90% do passo de tempo anterior e 10% do passo de tempo atual. Esta metodologia impede que a variação das variáveis atinja valores que poderiam levar à falha da simulação.

Contudo, o caso TR_OB_05_B, que também possui relaxação de 0,1 para a pressão, apresenta resultados muito ruins para os componentes do tensor das tensões, apesar do comportamento dos resíduos da resolução dos sistemas lineares ser semelhante ao do caso TR_OB_05. O caso TR_OB_05_C possui comportamento semelhante ao TR_OB_05_B, apesar de usar parâmetros de relaxação diferentes para todas as variáveis. A causa deste comportamento ainda não pode ser esclarecida.

Nas simulações em que foram adotados valores maiores para as tolerâncias dos sistemas lineares de solução das variáveis (10^{-6} para a pressão e de 10^{-5} para a velocidade e tensão) não houve melhora visível na qualidade da solução, se comparado a casos semelhantes. Para o teste TR_OB_06, o erro obtido foi de 4% para U_{max} , 0,24% para τ_{xx} e

10,48% para τ_{xy} . O teste TR_OB_07 forneceu erro de 2% para U_{max} , 0,07% para τ_{xx} e 2,77% para τ_{xy} . Para estes testes, $Re = 1,7$ e $We = 10^{-3}$.

O comportamento dos resíduos difere ligeiramente do caso semelhante em que foram usadas tolerâncias menores (por exemplo, o teste TR_OB_05 na Tabela 4.11 e Figura 4.3-c). No caso atual, os resíduos estão entre 2 e 3 ordens de grandeza maiores do que nos casos em que foram usadas tolerâncias menores. Os resíduos da componente U_x da velocidade, por exemplo, nas simulações em que a tolerância era menor, possuem valores da ordem de 10^{-9} – 10^{-10} quando estabilizados. Os resíduos da componente U_x da velocidade em casos onde a tolerância é maior, alcançaram valores da ordem de 10^{-6} – 10^{-7} quando estabilizados, conforme Figura 4.4.

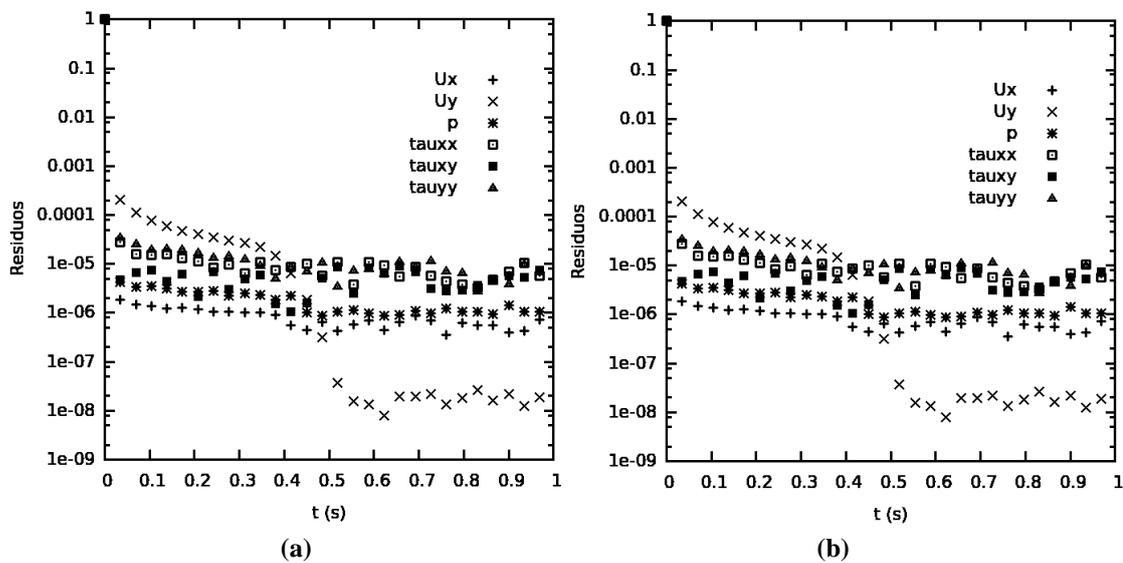


Figura 4.4: Comportamento dos resíduos normalizados em função do tempo simulado para os casos (a) TR_OB_06 e (b) TR_OB_07.

Por outro lado, o uso de tolerâncias maiores permitiu alcançar a solução desejada em um tempo de simulação menor. Tolerâncias maiores fazem com que os *solvers* de sistemas lineares necessitem iterar um número menor de vezes para alcançar a tolerância desejada. Assim, foi possível alcançar uma economia de tempo de simulação de cerca de 60% em média. Este comportamento pode se mostrar bastante vantajoso em etapas futuras do trabalho, quando se pretende obter soluções numéricas para escoamentos em geometrias em três dimensões, onde o tempo de simulação aumenta com o número de volumes de controle na terceira dimensão. O ganho em tempo de simulação compensa a perda de acurácia, pois, na precisão atualmente adotada, não há mudança significativa na qualidade dos resultados ao se usar tolerâncias maiores.

O uso de uma tolerância de 10^{-5} para a pressão, mesmo valor para as tolerâncias da velocidade e tensão, juntamente com a relaxação das três variáveis simultaneamente, gerou os resultados presentes na Tabela 4.12. Para estes testes, $We = 10^{-3}$.

Tabela 4.12: Resultados para testes com relaxação das variáveis p , U e τ ($\lambda = 10^{-5}$ s).

Caso	Dim. (m)		Divisões		$\Delta x/\Delta y$	η_P (Pa.s)	Relaxação			Erro %			Re
	x	y	x	y			p	U	τ	U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}	
TR_OB_08	0,4	0,01	400	10	1	5	0,03	0,7	0,7	4,00	0,24	10,48	1,70
TR_OB_09	0,4	0,01	400	20	2	5	0,03	0,7	0,7	2,00	0,07	2,77	1,70
TR_OB_10	0,4	0,01	400	30	3	5	0,03	0,7	0,7	0,67	0,03	1,25	1,70
TR_OB_11	0,4	0,01	400	30	3	50	0,03	0,7	0,7	0,67	0,03	1,25	$1,7 \times 10^{-1}$
TR_OB_12	0,4	0,01	400	30	3	500	0,03	0,7	0,7	Não convergiu			$1,7 \times 10^{-2}$
TR_OB_13	0,4	0,01	400	30	3	500	0,01	0,7	0,7	0,67	0,03	1,41	$1,7 \times 10^{-2}$
TR_OB_14	0,4	0,01	400	30	3	5×10^3	0,01	0,7	0,7	0,67	0,03	1,41	$1,7 \times 10^{-3}$
TR_OB_15	0,4	0,01	400	30	3	5×10^4	0,01	0,7	0,7	0,67	0,03	1,41	$1,7 \times 10^{-4}$
TR_OB_16	0,4	0,01	400	30	3	5×10^5	0,01	0,7	0,7	0,67	0,03	1,41	$1,7 \times 10^{-5}$

Vê-se que a relaxação de 0,03 para a pressão permitiu o uso de uma viscosidade polimérica maior nos testes TR_OB_08 a TR_OB_12, fator relacionado a instabilidades numéricas nos testes realizados. O uso destes parâmetros de relaxação também permitiu aumento do refinamento na direção perpendicular ao escoamento, outro fator relacionado a instabilidades numéricas. Este aumento no refinamento possibilitou melhora na qualidade da velocidade e tensões quando comparadas à solução analítica, como percebe-se nos casos TR_OB_11 e TR_OB_13 a TR_OB_16, em que o campo de velocidade possui erro de 0,67 % se comparado à solução analítica.

Contudo, o uso deste conjunto de parâmetros de relaxação encontra limitações ao lidar com o teste TR_OB_12, que possui 30 volumes de controle na direção perpendicular ao escoamento e viscosidade polimérica $\eta_P = 500$ Pa.s. Nesta simulação, o módulo da velocidade tendeu a crescer indefinidamente, interrompendo a simulação. Para lidar com esta dificuldade, optou-se pelo uso de uma relaxação para a pressão de 0,01. O coeficiente de relaxação para velocidade e tensão continua sendo de 0,7. O uso deste conjunto de parâmetros de relaxação permitiu que se ultrapassasse a limitação de viscosidade polimérica $\eta_P = 500$ Pa.s, possibilitando alcançar valores de 5×10^6 Pa.s.

Para a simulação realizada utilizando tolerância de 10^{-6} para as variáveis p , U e τ (TR_OB_17_B), não foi percebida diferença significativa na concordância com a solução analítica em comparação ao teste semelhante que utiliza tolerância de 10^{-5} (TR_OB_16), além de acompanhar um custo computacional muito maior para tempo simulado de 1 segundo. Para o teste TR_OB_17_B, foi necessário tempo de simulação de $13,87 \times 10^4$ s, enquanto que para o teste TR_OB_16 o tempo de simulação foi de $1,70 \times 10^4$ s. Para estes testes, $We = 10^{-3}$ e $Re = 1,70 \times 10^{-5}$.

As simulações com maior comprimento na direção do escoamento (de 0,40 para 0,80 m no eixo x , casos TR_OB_18 e TR_OB_19) forneceram resultados bastante semelhantes, com erros de aproximadamente 0,49% em U_{max} , 0,02 em τ_{xx} e 0,47% em τ_{xy} . Este aumento de comprimento não contribuiu para melhora na qualidade da solução. Para estes testes, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$ e $We = 10^{-3}$.

4.3.4 Cálculo explícito do campo de tensões a partir de uma solução newtoniana

Para as simulações em que foi utilizada uma predição de quantidade de movimento característica de um fluido newtoniano e cálculo do campo de tensões pelo modelo de Oldroyd-B, não foram encontrados problemas de convergência. Os testes TD_OB_1 ($We = 10^{-2}$) e TD_OB_2 ($We = 10^{-1}$) apresentaram resultados bastante semelhantes, com erro de 0,22% para U_{max} e 1,17% para τ_{xx} . Para ambos, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$.

Nota-se que o erro no campo de velocidade é menor do que o de soluções em que a predição de momento é feita levando em conta um fluido viscoelástico. Contudo, os erros nos componentes do tensor das tensões são maiores.

Para a simulação que utilizou a solução do caso TD_OB_1 como condição inicial (TD_OB_3, $We = 10^{-2}$), o erro fornecido é de 0,44% em U_{max} , 0,28% em τ_{xx} e 1,41 em τ_{xy} . Para o teste que utilizou a solução do caso TD_OB_2 como condição inicial (TD_OB_4, $We = 10^{-1}$), não houve convergência. Ou seja, não houve melhora na qualidade dos resultados ao se comparar com casos previamente testados em condições semelhantes de malha, numéricas e de parâmetros constitutivos.

O fato de fornecer uma solução como condição inicial não contribuir para a convergência de um caso pode indicar duas situações. Na primeira situação, pode-se considerar que a solução fornecida não é próxima o suficiente à solução do problema que se deseja resolver. Na segunda, a solução usada como condição inicial pode até se aproximar da solução do caso. Porém, o método de resolução não está dando tratamento adequado às equações que constituem o problema, fazendo com que o uso de uma aproximação razoável como condição inicial não traga nenhum benefício visível. Acredita-se que estejamos presenciando a segunda hipótese, dado que as condições iniciais fornecidas constituem a solução analítica de um problema bastante semelhante ao que se deseja resolver.

4.3.5 Refinamento de malha direcionado à entrada

Os testes realizados com a malha com refinamento direcionado à entrada com razão de aspecto próxima à unidade na extremidade de entrada divergiram. O caso TREF_OB_1 divergiu aos 0,04 s e o caso TREF_OB_2 aos 0,017 s. Tais fatos levam a crer que uma razão de aspecto do volume de controle $\Delta x/\Delta y$ próxima da unidade não se constitui na melhor escolha para a resolução de escoamentos elongacionais com o uso do *solver* viscoelasticFluidFoam.

Devido aos bons resultados obtidos com testes utilizando uma razão de aspecto $\Delta x/\Delta y = 2,6$ (TCS_OB_20_B e TCS_OB_26, seção 4.2.1), optou-se por realizar mais dois testes envolvendo malhas com esta razão de aspecto nos volumes de controle próximos à entrada da geometria. A geometria possui dimensões de $0,40 \times 0,01$ m. A malha possui 30 divisões na direção do eixo y com razão de aspecto $\Delta x/\Delta y = 2,6$ até um comprimento de

0,03 m na direção do eixo x . No restante da geometria é adotada uma razão $\Delta x/\Delta y = 3$. Para ambos os testes $\eta_p = 5 \times 10^6$ Pa.s e relaxação de 0,01 para a pressão e 0,1 para a velocidade.

O teste realizado com razão de aspecto de 2,6 próximo à entrada (TREF_OB_03) não apresentou problemas de convergência. O erro em U_x é de 0,47% e nas componentes do tensor das tensões é de 0,3% para τ_{xx} e 1,22% para τ_{xy} , apresentando uma concordância muito boa com a solução analítica. Para este teste, $Re = 1,6 \times 10^{-6}$ e $We = 0,01$.

O caso TREF_OB_04, que difere somente com relação a We do teste anterior, divergiu aos 0,2 s. Assim, a malha computacional com razão de aspecto de 2,6 próxima à entrada não contribui para a convergência do caso em que $We = 0,1$.

4.4 Testes com variação do tempo de relaxação λ

Os primeiros testes realizados com tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s, resultando em $We = 0,01$ (TL_OB_01 e TL_OB_02) não convergiram. O primeiro caso foi interrompido pelo aumento da velocidade em 0,95 e o segundo em 0,42 segundo de tempo simulado. Para a simulação em que foi utilizado tempo de relaxação $\lambda = 10^{-3}$ s, resultando em $We = 0,1$ (TL_OB_03) também não houve convergência, com o módulo da velocidade crescendo indefinidamente em tempo menor (0,06 s).

Nos testes em que foi utilizado tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s e variou-se o fator de relaxação da variável τ (casos TL_OB_04 a TL_OB_09), em nenhum dos casos houve convergência. As simulações foram interrompidas pelo sistema em tempos similares, conforme Tabela 4.13. Para estes testes, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$ e $We = 10^{-2}$.

Tabela 4.13: Tempo simulado até a falha do método para casos com $\lambda = 10^{-4}$ e variação do parâmetro de relaxação da variável τ ($\eta_p = 5 \times 10^6$ Pa.s).

Caso	Relaxação			tempo sim. (s)
	p	U	τ	
TL_OB_04_B	0,01	0,7	0,01	0,58
TL_OB_04	0,01	0,7	0,1	0,44
TL_OB_05	0,01	0,7	0,3	0,43
TL_OB_06	0,01	0,7	0,5	0,42
TL_OB_07	0,01	0,7	0,7	0,42
TL_OB_08	0,01	0,7	0,8	0,42
TL_OB_09	0,01	0,7	0,9	0,42

Como pode ser visto, a variação do fator de relaxação para a variável τ somente causa mudanças significativas quando é utilizado o valor de 0,01, prolongando o tempo de simulação para 0,58 s antes da falha do método. Contudo, não foi possível alcançar tempo de simulação maior variando somente este parâmetro.

No teste em que se diminui uma ordem de magnitude da viscosidade polimérica (de $\eta_P = 5 \times 10^6$ para 5×10^5 Pa.s, caso TL_OB_10) a fim de facilitar a convergência do problema com $\lambda = 10^{-4}$ s, não foram obtidos resultados satisfatórios. A velocidade cresceu indefinidamente com tempo simulado de 0,42 s, resultado bastante semelhante àqueles obtidos em testes com viscosidade polimérica de $\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s.

O teste realizado a fim de determinar se a relaxação utilizada na variável τ poderia ser causa de instabilidades numéricas (TL_OB_11) forneceu erro de 0,67% para U_{max} , 0,03% para τ_{xx} e 1,41% para τ_{xy} . Para este teste, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$ e $We = 10^{-3}$.

Para os testes TL_OB_12 e TL_OB_13, realizados com relaxação somente das variáveis p e U , não houve convergência para o primeiro, em que foi usada relaxação de 0,01 para p e de 0,3 para U . O segundo, no qual foi usada relaxação de 0,01 para p e 0,1 para U forneceu erro de 0,44% para U_{max} , 0,30% para τ_{xx} e 1,24 para τ_{xy} . Para estes testes, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$ e $We = 10^{-2}$.

Como pode ser visto, somente com relaxação bastante severa na pressão e velocidade foi possível convergir problemas com 30 divisões na direção perpendicular ao escoamento, viscosidade polimérica $\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s e tempo de relaxação $\lambda = 10^{-4}$ s ($We = 10^{-2}$).

Para a simulação com relaxação das variáveis pressão e velocidade e tempo de relaxação $\lambda = 10^{-3}$ s (caso TL_OB_14) a mesma não convergiu, sendo que o módulo da velocidade cresceu sem limitação, causando a falha do método no tempo simulado de 0,33 s. O mesmo ocorreu no teste em que foi aplicada uma relaxação na pressão de 0,001 e mantida a relaxação da velocidade de 0,1 com tempo de relaxação $\lambda = 10^{-3}$ s (caso TL_OB_15).

4.5 Testes com perfil parabólico de entrada

Para os testes que utilizaram perfil parabólico da velocidade na entrada (TPP_OB_1 e TPP_OB_2), o primeiro resultou em erro de 0,38% para U_{max} , 0,28% para τ_{xx} e 1,16% para τ_{xy} , com $We = 10^{-2}$. Já o segundo, com $We = 10^{-1}$, não convergiu. Para estes testes, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$.

Estes resultados pouco diferem de testes semelhantes em que foi usado um perfil de entrada uniforme de $U_x = 1$ m/s. O caso com $We = 10^{-2}$ não apresentou problemas de convergência para um tempo simulado de 1 s, enquanto que no caso com $We = 10^{-1}$ o módulo da velocidade cresceu indefinidamente, causando a falha do método em um tempo simulado de 0,21 s.

No caso TPP_OB_1 (sem problemas de convergência) nota-se que as oscilações no campo da velocidade próximo à entrada, presentes nos casos em que o perfil de entrada é uniforme, estão ausentes, conforme Figura 4.5-a. Contudo, observa-se, próximo à entrada, a ocorrência de uma região em que o módulo da velocidade é sensivelmente maior do que no restante da geometria. Já no caso TPP_OB_2 (simulação que não convergiu) observa-se que

as oscilações na magnitude do campo de velocidade estão presentes, de forma semelhante aos casos que possuem perfil de entrada uniforme, conforme Figura 4.5-b.

Uma possível causa pode consistir na influência das condições de contorno que atuam no restante da geometria. A influência da condição de perfil parabólico na entrada torna-se cada vez menos significativa conforme se avança no domínio na direção do escoamento, perdendo influência para as condições de contorno que atuam no resto da geometria.

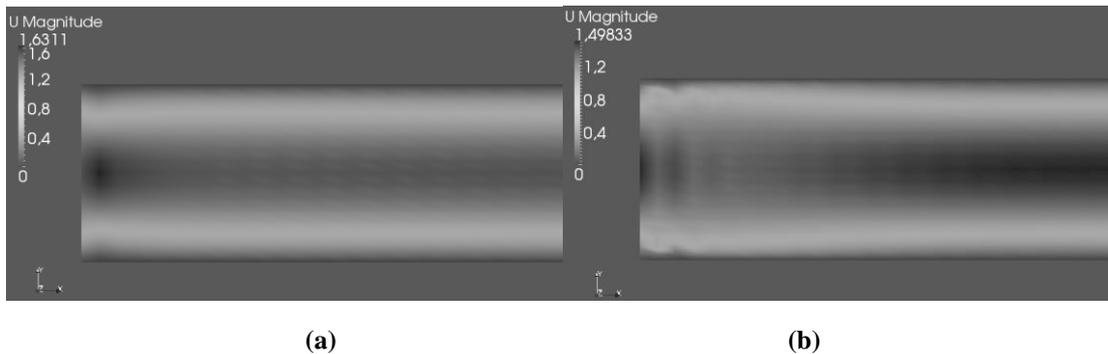


Figura 4.5: Perfis de velocidade próximos à entrada dos casos (a) TPP_OB_1 e (b) TPP_OB_2. No primeiro, vê-se a presença de uma região de maior velocidade, enquanto que no segundo estão presentes oscilações na magnitude da velocidade.

4.6 Testes com geometria de contração plana

Uma visão global da magnitude do campo de velocidade para a geometria de contração plana para o caso TCP_OB_1 ($\lambda = 10^{-5}$ s) encontra-se na Figura 4.6.

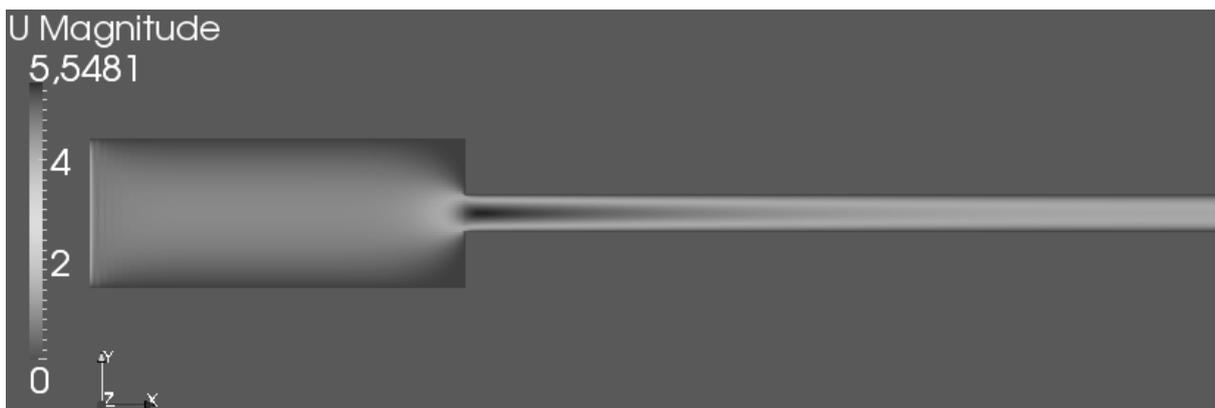


Figura 4.6: Visão global do campo de velocidade para a geometria de contração plana, caso TCP_OB_1.

O valor da velocidade na direção x medido através do centro da geometria desde a extremidade de entrada até a de saída gera o perfil mostrado na Figura 4.7.

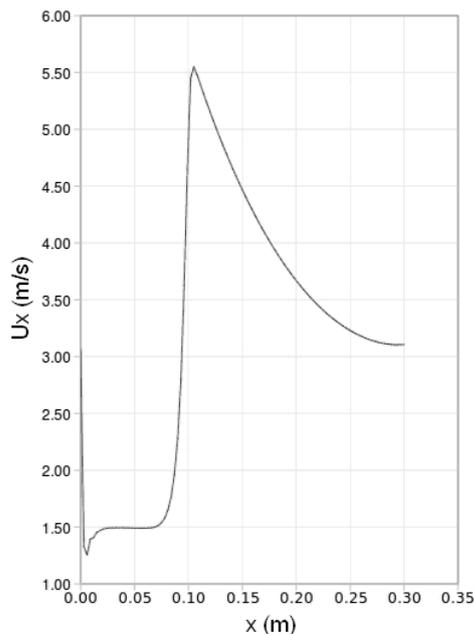


Figura 4.7: Perfil de velocidade U_x medido ao longo do centro da geometria, da entrada até a saída para o teste TCP_OB_1.

Percebe-se que o componente U_x da velocidade inicia com valor próximo a 3 m/s, e sofre uma queda, estabilizando em aproximadamente 1,5 m/s até a região da contração, onde sofre um pico. Após a contração, seu valor decai na direção da saída do fluido. Este comportamento é inesperado por três motivos. Primeiramente, o valor da velocidade estipulada na entrada da geometria é de 1 m/s na direção do eixo x e o valor apresentado na Figura 4.9 é três vezes maior. Segundo, houve decréscimo na velocidade no centro da geometria, logo após a entrada, quando o esperado seria um aumento da velocidade pela adaptação do perfil parabólico à geometria. Por último, obteve-se declínio da velocidade após a contração, quando o esperado seria que a velocidade fosse mantida constante até o final da geometria.

O valor da velocidade na direção x , medido nas distâncias após a contração de 0,01, 0,05, 0,1, 0,15 e 0,19 m, fornece os perfis de velocidade mostrados na Figura 4.8.

Os resultados para o teste TCP_OB_2 ($\lambda = 10^{-4}$ s) são bastante semelhantes aos do caso anterior. A visão geral do perfil de velocidade para toda a geometria praticamente não difere entre os dois casos.

O teste TCP_OB_3 ($\lambda = 10^{-3}$ s) divergiu em poucos passos de tempo, acompanhando a tendência de casos previamente testados com este valor de tempo de relaxação.

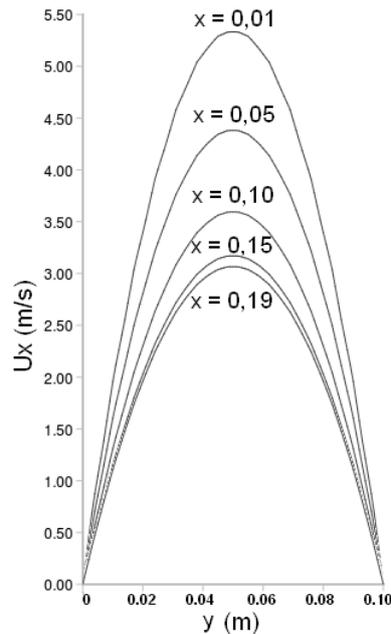


Figura 4.8: Perfis de velocidade para o caso TCP_OB_1 medido nas distâncias de $x = 0,01, 0,05, 0,1, 0,15$ e $0,19$ m após a contração.

Observando os perfis de velocidade gerados nos dois primeiros testes, percebe-se que existe um desvio muito grande entre o resultado numérico e a solução analítica para o problema. Em ambos os casos, a velocidade do fluido entrando na geometria é de 1 m/s. Utilizando a Eq. A.19 (Apêndice II), que apresenta uma relação entre a velocidade média e máxima para este tipo de escoamento, é possível calcular a velocidade máxima para este tipo de escoamento como sendo de $U_{max} = 1,5$ m/s. Como a geometria é composta de uma contração plana do tipo 4:1, espera-se que a velocidade máxima na porção da geometria após a contração seja de 6 m/s, ocorrendo no seu centro, para que não seja violada a conservação de quantidade de movimento.

Entretanto, um resultado diferente é observado. Para ambos os casos, o perfil de velocidade medido em $0,01$ m após a contração fornece uma velocidade máxima de aproximadamente $5,5$ m/s. Esse valor tende a discordar ainda mais com a solução esperada nas medições realizadas a $0,05, 0,1, 0,15$ e $0,19$ m após a contração, chegando a um valor $U_{max} = 3,1$ m/s nesta última.

O campo de tensões se mantém consistente na porção da geometria anterior à contração. Contudo, a magnitude da tensão tende a decair exponencialmente após a contração, comportamento que não é esperado para este tipo de escoamento.

O perfil de velocidade do teste com o fluido newtoniano é representado pela Figura 4.9.

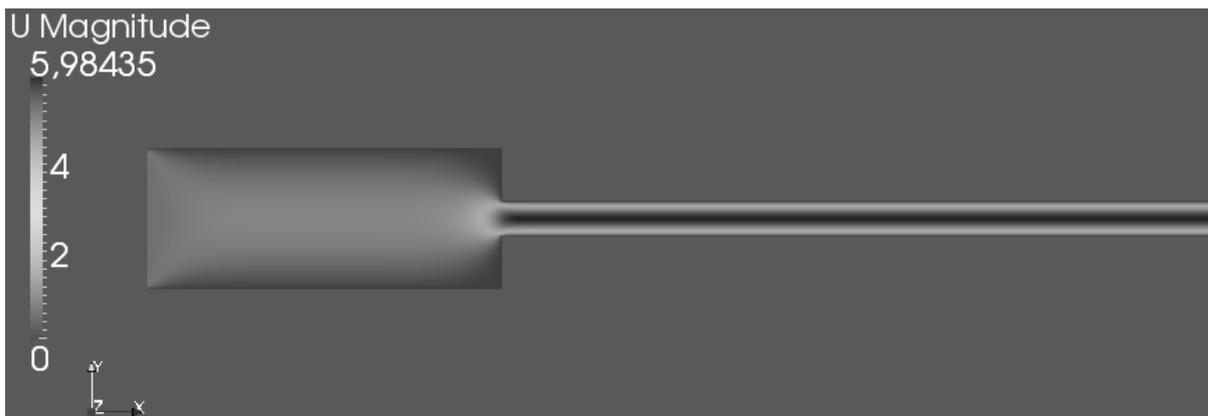


Figura 4.9: Campo de velocidade para a geometria de contração plana, caso com fluido newtoniano.

O valor da velocidade na direção x medido ao longo do centro da geometria desde a extremidade de entrada até a de saída gera o perfil mostrado na Figura 4.10.

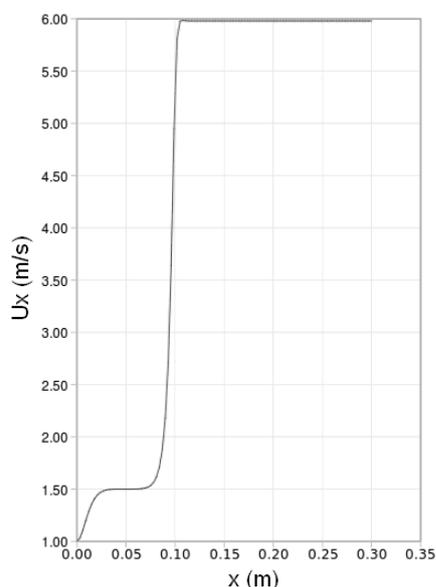


Figura 4.10: Perfil de velocidade U_x medido ao longo do centro da geometria, da entrada até a saída, para o caso com fluido newtoniano.

Verifica-se que o problema de conservação de quantidade de movimento ao longo da geometria, que afeta os casos viscoelásticos, não afeta o caso newtoniano, cuja velocidade máxima após a contração é a esperada, de 6 m/s, e a mesma é mantida ao longo da geometria.

A análise dos resíduos da resolução dos sistemas lineares não indica a presença de problemas de convergência nos testes viscoelásticos. Para o caso TCP_OB_1, os resíduos de todas as variáveis caem para valores inferiores a 10^{-5} ao longo da simulação, o que indica que os sistemas lineares foram resolvidos adequadamente. O erro global na equação da continuidade varia na ordem de 10^{-11} . Por se tratar de um valor pequeno, considera-se que a continuidade está sendo obedecida. Um comportamento semelhante de resíduos de sistemas lineares e da continuidade é observado no caso TCP_OB_2. Até o momento, tem-se admitido que os problemas de conservação de propriedades nestas simulações se originam em alguma falha no código do *solver*, que precisa ser verificada com mais detalhes.

4.7 Resultados dos testes com geometria tridimensional com $W \gg H$

Os testes realizados com geometria em três dimensões com a largura aumentada forneceram os resultados dispostos na Tabela 4.14. Para estes testes, $Re = 1,7 \times 10^{-6}$.

Tabela 4.14: Resultados para os testes com geometria em três dimensões com $W \gg H$ ($\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s)

Caso	Dim (m)			Divisões			$\Delta x/\Delta y$	$\Delta x/\Delta z$	λ (s)	Erro %			We
	x	y	z	x	y	z				U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}	
TWH_OB_1	0,4	0,01	0,05	400	30	150	3	3	10^{-4}	13,60	4,74	18,30	10^{-2}
TWH_OB_2	0,2	0,01	0,1	200	30	300	3	3	10^{-4}	6,13	1,98	8,03	10^{-2}
TWH_OB_3	0,2	0,01	0,1	200	30	300	3	3	10^{-3}	4,66	1,22	5,75	10^{-1}

Verifica-se que o aumento da largura W promoveu uma melhora significativa na qualidade da solução do campo de velocidade e dos componentes do tensor das tensões. Supõe-se que isto seja devido à menor influência das paredes frontal e traseira do plano xy no escoamento acontecendo no centro da geometria, onde as medidas foram efetuadas.

Em comparação com os casos bidimensionais testados previamente, em condições semelhantes de parâmetros numéricos e constitutivos, percebe-se que a concordância da solução é pior para todos os testes, conforme Tabela 4.15. Nos problemas bidimensionais em questão, o erro na velocidade sempre é inferior à unidade, enquanto que para o melhor resultado obtido para os casos tridimensionais o mesmo está em 4,66%. De forma análoga, o erro nos componentes da tensão tende a estar entre zero e 2% para os casos bidimensionais, enquanto que nos casos tridimensionais o melhor resultado tende a apresentar erro entre 1 e 6%.

Tabela 4.15: Resultados para testes com geometria em duas dimensões ($\eta_P = 5 \times 10^6$ Pa.s, $\lambda = 10^{-4}$ s)

Caso	Erro %		
	U_{max}	τ_{xx}	τ_{xy}
TPP_OB_1	0,38	0,28	1,16
TL_OB_13	0,44	0,30	1,24
TL_OB_11	0,67	0,03	1,41
TD_OB_3	0,44	0,28	1,41

Rauwendaal (2002) afirma que na maioria das roscas de extrusoras a razão H/W varia entre 0,1 e 0,03, resultando em um fator de correção na vazão volumétrica usualmente menor do que 2% e, essencialmente, sempre inferior a 5%. Dentre os testes realizados, TWH_OB_3 é o que concorda com essa afirmação, possuindo uma razão H/W de 0,1 e erro no perfil de velocidade medido no centro da geometria de 4,66%.

O caso com λ igual a 10^{-3} s apresentou melhor concordância com a solução analítica do que os casos com λ igual a 10^{-4} s, contrariando o fato da maioria dos testes realizados com λ igual a 10^{-3} s apresentarem sérios problemas de convergência. Isto pode se dar pela malha

tridimensional possibilitar melhor difusão dos erros originados pelo avanço do método numérico do que se dá na malha bidimensional. Contudo, seria necessária a realização de mais testes a fim de confirmar a relação entre uma melhor concordância dos resultados numéricos de escoamentos tridimensionais com a solução analítica e tempo de relaxação de λ igual a 10^{-3} s.

Capítulo 5

Conclusões

A proposta deste trabalho foi a verificação da ocorrência de dificuldades observadas em testes com simulação de escoamento de fluidos viscoplásticos em simulações que utilizam uma formulação viscoelástica em condições de escoamento semelhantes. Também foi proposto o desenvolvimento de testes que possibilitassem estimar a qualidade das soluções fornecidas por simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos para o modelo constitutivo de Oldroyd-B. Juntamente com a realização destes testes foi proposta a identificação de condições de malha, de escoamento, de parâmetros de modelos viscoelásticos e numéricos que levam às dificuldades observadas em algumas simulações e a aplicação de métodos que permitissem contornar tais limitações. Foi apresentada uma breve revisão sobre simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos, abordando as técnicas numéricas mais utilizadas, dificuldades encontradas e trabalhos relevantes publicados na área de validação de simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

Os testes realizados envolveram uma grande variedade de parâmetros de malha, numéricos e constitutivos. Os primeiros testes foram realizados em condições semelhantes aos testes realizados em outro estudo, no qual foram encontradas dificuldades numéricas, apesar de não ser usada formulação viscoelástica (Wander, 2011). Nestes testes preliminares também foram observadas limitações bastante semelhantes às observadas no trabalho supracitado, servindo como exemplo a geometria 03 ($50 \times 11 \times 11$ células), que apresentou problemas de convergência em ambas as situações. Problemas semelhantes observados em outras geometrias com número ímpar de divisões na direção perpendicular ao escoamento sugerem dificuldades do *solver* viscoelasticFluidFoam em lidar com este tipo de geometria. Testes realizados com o *solver* newtoniano nas mesmas condições de malha não apresentam tais limitações, reforçando esta ideia.

Para que fosse possível avaliar a qualidade das soluções numéricas, foram buscadas soluções analíticas para o campo de velocidade e de tensões do escoamento entre placas paralelas para o fluido que obedece a equação constitutiva de Oldroyd-B. Partindo desta equação e realizando as simplificações condizentes com o tipo de escoamento em questão, foi

possível encontrar tais soluções, que foram utilizadas para determinar a acurácia das soluções numéricas obtidas no restante do trabalho.

Os testes realizados com o modelo constitutivo de Oldroyd-B exploraram ampla faixa de valores de Re e We , a fim de verificar o comportamento do *solver* em condições semelhantes às encontradas na indústria de processamento de polímeros. Ao mesmo tempo em que foram variados os parâmetros do modelo constitutivo, também foram testadas muitas configurações de malha computacional, número de iterações do algoritmo PISO, relaxação das variáveis e aumento das tolerâncias nas resoluções dos sistemas lineares, individualmente ou em conjunto. No decorrer dos testes, foram identificadas limitações para a convergência das soluções de alguns casos relacionadas, principalmente, com o refinamento da direção perpendicular ao escoamento, aumento em We e diminuição em Re . O uso de refinamento adequado e relaxação considerável das variáveis permitiu que tais limitações fossem, em parte, contornadas.

Outras alternativas, além da relaxação das variáveis, foram testadas a fim de superar as limitações que surgem para simulações com $We > 10^{-2}$. Foi utilizada como condição inicial a solução de um caso com cálculo explícito do campo de tensões a partir de um campo de velocidade newtoniano, com a intenção de que uma estimativa mais próxima da solução contribuísse para a estabilidade do problema. Também foi utilizada malha computacional com refino direcionado à região de entrada da geometria, para que fosse possível captar de maneira mais eficiente os gradientes de velocidade e tensão que ocorrem nesta região em decorrência da mudança do perfil uniforme para parabólico no campo de velocidade. Por fim, foram realizadas simulações com um perfil parabólico de velocidade na entrada da geometria, a fim de diminuir as flutuações observadas nesta região e contribuir com a estabilidade do problema. Estas metodologias se mostraram ineficientes para garantir a estabilidade numérica de problemas em que $We > 10^{-2}$.

Foram realizados testes complementares com a finalidade de avaliar o comportamento do *solver* em uma geometria de contração plana e em uma geometria tridimensional. Para a geometria de contração plana foram encontrados problemas na consistência dos campos de velocidade e tensão, que tendem a decair exponencialmente após a contração, para todos os valores de We testados. O comportamento dos resíduos dos sistemas lineares e o erro da equação da continuidade são consistentes com os de um caso sem problemas de convergência. Por este fato, e por este problema não ser observado em simulações com escoamento de fluido newtoniano em condições semelhantes, supõe-se que existem problemas relacionados ao código do *solver* viscoelasticFluidFoam. Porém, com os testes realizados neste trabalho, não foi possível precisar a causa destes problemas.

Os testes com geometria tridimensional com $W \gg H$ apresentaram bons resultados, com uma concordância entre as soluções numérica e analítica semelhante à encontrada na literatura (Rauwendaal, 2002). Em um dos testes foi possível alcançar estabilidade com $We = 0,1$, condição que não foi observada no restante dos testes. Acredita-se que isso se deva ao uso de uma malha tridimensional, que possibilitaria a melhor dissipação de erros numéricos. Testes adicionais com We maiores não foram realizados pelo significativo custo

computacional envolvido na simulação utilizando tais malhas e prazo para conclusão deste trabalho.

Como conclusão geral, indica-se que o *solver* viscoelasticFluidFoam é capaz de realizar simulações de escoamentos viscoelásticos com o modelo de Oldroyd-B para uma ampla faixa de valores de Re e We . As dificuldades numéricas que surgem com o decréscimo de Re e aumento de We podem ser parcialmente contornadas com relaxação adequada das variáveis pressão e velocidade e uso de uma malha computacional adequada (refinamento na direção perpendicular ao escoamento e razão de aspecto $\Delta x/\Delta y$ se mostraram como parâmetros importantes). O número de iterações do algoritmo PISO por passo de tempo pode ser importante para a convergência em casos com Re muito baixo e We relativamente alto, apesar de não ter papel importante na acurácia de casos que convergiram. Os valores de tolerâncias na resolução dos sistemas lineares não se mostraram importantes para a estabilidade e acurácia dos problemas na precisão adotada e se mostraram influentes somente no custo computacional das simulações. O *solver* viscoelasticFluidFoam é uma ferramenta amplamente utilizada no grupo de trabalho, inclusive servindo de base para o desenvolvimento de outros trabalhos, como análise de escoamentos viscoelásticos de superfície livre (Favero *et al.*, 2010) e de escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos (Oliveira, 2012). O presente estudo mostra-se importante por explorar o comportamento do *solver* em grande variedade de combinações de parâmetros numéricos e viscoelásticos, e por apontar algumas de suas limitações de operação e como contorná-las, mesmo que parcialmente. Este estudo pode servir de referência para trabalhos futuros, cuja proposta poderá ser a melhora na flexibilidade e robustez da operação do *solver*, ou com o intuito de adequá-lo às condições de operação presentes na indústria de processamento de polímeros, por exemplo.

Planeja-se realizar, em trabalhos futuros, testes envolvendo malhas com uma maior variedade de razões de aspecto $\Delta x/\Delta y$, devido aos resultados obtidos ao utilizar malhas com $\Delta x/\Delta y = 2,6$, valor que não havia sido testado nas simulações da seção específica envolvendo variação de refinamento e razão de aspecto, mas forneceu resultados de boa acurácia em testes posteriores. Também deverão ser realizados mais testes envolvendo geometrias tridimensionais do tipo $W \gg H$, devido aos bons resultados obtidos e sua importância para a indústria de processamento de polímeros. Também deverá ser o foco de trabalhos futuros a implementação de uma versão do *solver* que permita o acompanhamento dos erros numéricos na equação do movimento e na equação constitutiva viscoelástica, servindo estes como parâmetros para controle da convergência. Pretende-se, também, implementar as equações na sua forma adimensional, de forma que os parâmetros do escoamento sejam inseridos diretamente como Re e We , eliminando questionamentos acerca da influência na estabilidade de parâmetros como viscosidade polimérica, tempo de relaxação e taxa de deformação.

Referências Bibliográficas

- ALVES, M. A.; PINHO, F. T.; OLIVEIRA, P. J. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 93, n. 2–3, p. 287-314, 2000. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037702570000121X>>.
- ATALIK, K.; KEUNINGS, R. Non-linear temporal stability analysis of viscoelastic plane channel flows using a fully-spectral method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 102, n. 2, p. 299-319, 2002. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025701001847>>.
- BHAVIKATTI, S. S. *Finite Element Analysis*. New Age International (P) Ltd., 2007. ISBN 9788122415896.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. Wiley, 2006. ISBN 9780470115398.
- BORTOLI, A. L. *Introdução à dinâmica de fluidos computacional*. Porto Alegre: Editora da Universidade/UFRGS, 2000.
- CALLISTER JR., W. D. *Fundamentals of Materials Science and Engineering*. John Willey & Sons Inc, 2001.
- CENICEROS, H. D.; FISHER, J. E. Peristaltic pumping of a viscoelastic fluid at high occlusion ratios and large Weissenberg numbers. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 171–172, p. 31-41, 2012. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025712000031>>.
- CRAWFORD, R. J. *Plastics Engineering*. Third Edition. Butterworth-Heinemann, 1998.
- CROCHET, M. J.; DAVIES, A. R.; WALTERS, K. *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*. Elsevier, 1984.
- CULLEN, P. J. *Food Mixing: Principles And Applications*. John Wiley & Sons, 2009.
- DEALY, J. M.; LARSON, R. G. *Structure and Rheology of Molten Polymers: From Structure to Flow Behavior and Back Again*. Hansel Verlag, 2006.
- FAVERO, J. L. *Simulação de escoamentos viscoelásticos: desenvolvimento de uma metodologia de análise utilizando o software OpenFOAM e equações constitutivas diferenciais*. Porto Alegre, 127 p. Dissertação de Mestrado – Programa de Pós-Graduação

em Engenharia Química – PPGEQ, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, 2009. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/16306>>.

FAVERO, J. L.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M.; JASAK, H. Viscoelastic flow analysis using the software OpenFOAM and differential constitutive equations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 165, n. 23–24, p. 1625-1636, 2010a. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025710002417>>.

FAVERO, J. L.; SECCHI, A. R. CARDOZO, N. S. M.; JASAK, H. Viscoelastic fluid analysis in internal and in free surface flows using the software OpenFOAM. *Computers & Chemical Engineering*, v. 34, n. 12, p. 1984-1993, 2010b. ISSN 0098-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135410002589>>.

GLASGOW, L. A. *Transport Phenomena: An Introduction to Advanced Topics*. John Wiley & Sons, 2010. ISBN 9780470381748.

GUÉNETTE, R.; FORTIN, M. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 60, n. 1, p. 27-52, 1995. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025795013723>>.

HESTENES, M. R.; STIEFEL, E. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, v. 49, p. 409-436, 1952.

ISSA, R. I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, v. 62, n. 1, p. 40-65, 1986. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999186900999>>.

KEUNINGS, R. On the high Weissenberg number problem. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 20, p. 209-226, 1986. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025786800222>>.

KHORASANI, N.; MIRZALOU, B. Numerical analysis of the viscoelastic fluid in plane Poiseuille flow. *International Journal of Advances in Engineering and Technology*, v. 3, n. 1, p. 572-580, 2012. ISSN 22311963. Disponível em: <<http://www.doaj.org/doi/func=abstract&id=963085&recNo=24&toc=1&uiLanguage=en>>.

LARSON, R. G. *Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*. Butterworths, 1988. ISBN 9780409901191.

MACOSKO, C. W. *Rheology: principles, measurements, and applications*. New York: VCH, 1994. ISBN 1560815795 9781560815792 0471185752 9780471185758.

MAGOULÈS, F. *Computational Fluid Dynamics*. CRC Press, 2011. ISBN 9781439856611.

- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC, 2010. ISBN 8521613962 9788521613961.
- MARCHAL, J. M.; CROCHET, M. J. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 26, n. 1, p. 77-114, 1987. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025787850486>>.
- MOMPEAN, G; JONGEN, T.; DEVILLE, M. O.; GATSKI, T. B. On algebraic extra-stress models for the simulation of viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 79, n. 2-3, p. 261-281, 1998. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025798001116>>.
- MUNIZ, A. R.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M. High-order finite volume method for solving viscoelastic fluid flows. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 25, p. 153-166, 2008. ISSN 0104-6632. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0104-66322008000100016&nrm=iso>.
- OLIVEIRA, J. A. P. D. *Análise numérica de tensões induzidas pelo escoamento não isotérmico de um polímero no preenchimento de cavidades de paredes finas*. Porto Alegre, 108 p. Tese de Doutorado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – PPGEQ, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, 2002. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/75762>>.
- OPENFOAM. OpenFOAM® - The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox. 2012. Disponível em: <<http://www.openfoam.com/>>. [Acessado em 22 de setembro de 2013].
- OPENFOAM WIKI. *The Unnofficial OpenFOAM Wiki*. 2012. Disponível em: <http://openfoamwiki.net/index.php/Main_Page>. [Acessado em 22 de setembro de 2013].
- PEARSON, J. R. A. *Mechanics of Polymer Processing*. Elsevier Applied Science Publishers Ltd, 1985.
- PORTEOUS, K. C.; DENN, M. M. Linear Stability of Plane Poiseuille Flow of Viscoelastic Liquids. *Transactions of the Society of Rheology*, v. 16, n. 2, p. 295-308, 1972. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1122/1.549279>>.
- RAJAGOPALAN, D.; ARMSTRONG, R. C.; BROWN, R. A. Calculation of steady viscoelastic flow using a multimode Maxwell model: application of the explicitly elliptic momentum equation (EEME) formulation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 36, p. 135-157, 1990. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037702579085007L>>.

- RAUWENDAAL, C. *Polymer Extrusion*. Hanser, 2002. ISBN 9781569903216.
- SAAD, Y. *Iterative methods for sparse linear systems*. Philadelphia, Pa.: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003. ISBN 0898715342 9780898715347.
- SCHÄFER, M. *Computational Engineering - Introduction to Numerical Methods*. Springer, 2006.
- TANNER, R. G.; WALTERS, K. *Rheology: An Historical Perspective*. Elsevier, 1998.
- TOMÉ, M. F.; MANGIAVACCHI, N.; CUMINATO, J. A.; CASTELO, A.; MCKEE, S. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 106, n. 2–3, p. 61-106, 2002. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025702000642>>.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The finite volume method*. Second Edition. Prentice Hall, 2007.
- WANDER, A. P. *Validação das aproximações do tipo Hele-Shaw aplicadas ao escoamento de fluidos viscoplásticos em uma cavidade simétrica*. Porto Alegre, 31 p. Trabalho de Conclusão de Curso. Departamento de Engenharia Química – DEQUI, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, 2011. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/handle/10183/36894>>.
- WENDT, J. F. *Computational Fluid Dynamics – An Introduction*. Third Edition. Springer, 2009.
- YU, B.; KAWAGUCHI, Y. Direct numerical simulation of viscoelastic drag-reducing flow: a faithful finite difference method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 116, n. 2–3, p. 431-466, 2004. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025703002556>>.

Anexo I

Estrutura de arquivos e diretórios de um caso do pacote OpenFOAM.

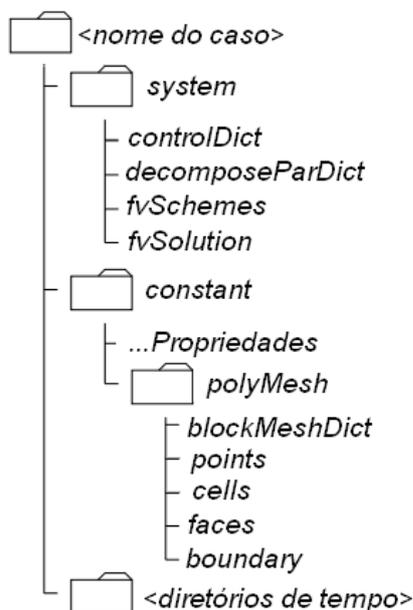


Figura A.1: Estrutura de arquivos e diretórios de um caso genérico do OpenFOAM

- *<nome do caso>*: diretório-raiz do caso. Seu nome não obedece a nenhum critério específico;
- *system*: diretório que contém os arquivos responsáveis pelas características numéricas de resolução do problema;
 - *controlDict*: dicionário que determina a duração da simulação, tamanho do passo de tempo utilizado, intervalo de escrita dos resultados, entre outras opções;
 - *decomposeParDict*: dicionário que contém os parâmetros que controlam simulações efetuadas em paralelo;
 - *fvSchemes*: contém parâmetros que determinam o esquema de discretização/interpolação utilizados na resolução dos termos que compõem as equações do problema de CFD;
 - *fvSolution*: contém parâmetros que determinam como será feita a resolução do sistema linear $[A][x] = [B]$ que surge da discretização do sistema de equações diferenciais parciais. Determina as configurações do algoritmo de acoplamento pressão-velocidade utilizado na resolução do problema. Também é responsável pelo nível de relaxação aplicado às variáveis presentes no problema;

- *constant*: diretório que contém os parâmetros responsáveis pelas configurações de malha e propriedades materiais inerentes ao fluido estudado;
 - *Propriedades*: dicionário que contém as propriedades materiais do fluido, como viscosidade, densidade, tempo de relaxação, etc. Nos casos estudados e aqui apresentados, este dicionário recebe o nome de *viscoelasticProperties*;
 - *polyMesh*: diretório que contém os arquivos que determinam as propriedades da geometria e respectiva malha computacional.
 - *<diretórios de tempo>*: armazenam as informações referentes às variáveis resolvidas para toda a geometria em intervalos de tempo determinados no dicionário *controlDict*.
-

Anexo II

Código do arquivo viscoelasticFluidFoam.C

```
2 // Description
3 // Transient solver for incompressible, laminar flow of viscoelastic fluids.

5 \*-----*/

7 #include "fvCFD.H"
8 #include "viscoelasticModel.H"

10 // * * * * *

12 int main(int argc, char *argv[])
13 {

15 # include "setRootCase.H"

17 # include "createTime.H"
18 # include "createMesh.H"
19 # include "createFields.H"
20 # include "initContinuityErrs.H"

22 // * * * * *

24 Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

26 while (runTime.run())
27 {

29 # include "readPISOControls.H"
30 # include "readTimeControls.H"
31 # include "CourantNo.H"
32 # include "setDeltaT.H"

34 runtime++;

36 Info<< "Time = " <<runTime.timeName() << n1 << endl;

38 // Pressure-velocity PISO corrector loop
39 for (int corr = 0; corr < nCorr; corr++)
40 {
41 // Momentum predictor
```

```

42     tmp<fvVectorMatrix> UEqn
43     (
44         fvm::ddt(U)
45         + fvm::div(phi,U)
46         - visco.divTau(U)
47     );

49     UEqn().relax();

51     solve(UEqn() == -fvc::grad(p));

53     p.boundaryField().updateCoeffs();
54     volScalarField rUA = 1.0/UEqn().A();
55     U = rUA*UEqn().H();
56     UEqn.clear();
57     phi = fvc::interpolate(U) & mesh.Sf();
58     adjustPhi(phi,U,p);

60     // store pressure for under-relaxation
61     p.storePrevIter();

63     // Non-orthogonal pressure corrector loop
64     for (int nonOrth = 0; nonOrth<=nNonOrthCorr; nonOrth++)
65     {
66         fvScalarMatrix pEqn
67         (
68             fvm::laplacian(rUA,p) == fvc::div(phi)
69         );

71         pEqn.setReference(pRefCell, pRefValue);
72         pEqn.solve();
73         if (nonOrth==nNonOrthCorr)
74         {
75             phi -= pEqn.flux();
76         }
77     }

80 #     include "continuityErrs.H"

82     // Explicitly relax pressure for momentum corrector
83     p.relax();

85     // Momentum corrector
86     U -= rUA*fvc::grad(p);
87     U.correctBoundaryConditions();

```

```
89         visco.correct();
90     }

92     runTime.write();

94     Info<< "ExecutionTime = "
95         << runTime.elapsedCpuTime()
96         << " s\n\n" << endl;
97     }

99     Info<< "End\n" << endl;

101     return(0);
102 }

104 // ***** //
```

Anexo III

Código da biblioteca createFields.H

```
2   Info << "Reading field p\n" << endl;
3   volScalarField p
4   (
5       IObject
6       (
7           "p",
8           runtime.timeName(),
9           mesh,
10          IObject::MUST_READ,
11          IObject::AUTO_WRITE
12      ),
13      mesh
14  );

16  Info << "Reading field u\n" << endl;
17  volVectorField U
18  (
19      IObject
20      (
21          "U",
22          runtime.timeName(),
23          mesh,
24          IObject::MUST_READ,
25          IObject::AUTO_WRITE
26      ),
27      mesh
28  );

30 # include "createPhi.H"

32  label pRefCell = 0;
33  scalar pRefValue = 0.0;
34  setRefCell(p, mesh.solutionDict().subDict("PISO"), pRefCell, pRefValue);

36  // Create viscoelastic model
37  viscoelasticModel visco(U, phi);
```

Anexo IV

Código do arquivo Oldroyd_B.C

```
2  #include "Oldroyd_B.H"
3  #include "addToRunTimeSelectionTable.H"

5  namespace Foam
6  {

8  defineTypeNameAndDebug(Oldroyd_B, 0);
9  addToRunTimeSelectionTable(viscoelasticLaw, oldroyd_B, dictionary);

11  oldroyd_B::Oldroyd_B
12  (
13      const word& name,
14      const volVectorField& U,
15      const surfaceScalarField& phi,
16      const dictionary& dict
17  )
18  :
19  viscoelasticLaw(name, U, phi),
20  tau_
21  (
22      IOobject
23      (
24          "tau" + name,
25          U.time().timeName(),
26          U.mesh(),
27          IOobject::MUST_READ,
28          IOobject::AUTO_WRITE
29      ),
30      U.mesh()
31  ),
32  rho_(dict.lookup("rho")),
33  etaS_(dict.lookup("etaS")),
34  etaP_(dict.lookup("etaP")),
35  lambda_(dict.lookup("lambda"))
36  {}

38  tmp<fvVectorMatrix> oldroyd_B::divTau(volVectorField& U) const
39  {

41      dimensionedScalar etaPEff = etaP_;
```

```
43     return
44     (
45     fvc::div(tau_/rho_, "div(tau)")
46     - fvc::laplacian(etaPEff/rho_, U, "laplacian(etaPEff,U)")
47     + fvm::laplacian( (etaPEff + etaS_)/rho_, U, "laplacian(etaPEff+etaS,U)")
48     );

50 }

52 void oldroyd_B::correct()
53 {

55     // velocity gradient tensor
56     volTensorField L = fvc::grad( U() );

58     // convected derivate term
59     volTensorField C = tau_ & L;

61     // Twice the rate of deformation tensor
62     volSymmTensorField twoD = twoSymm( L );

64     // stress transport equation
65     tmp<fvSymmTensorMatrix> tauEqn
66     (
67         fvm::ddt(tau_)
68         + fvm::div(phi(), tau_)
69         ==
70         etaP_ / lambda_ * twoD
71         + twoSymm( C )
72         - fvm::Sp( 1/lambda_, tau_ )
73     );

75     tauEqn().relax();
76     solve(tauEqn);
77 }
```

Anexo V

Código do arquivo `white_Metzner_CY.C`

```
2  #include "white_Metzner_CY.H"
3  #include "addToRunTimeSelectionTable.H"

5  namespace Foam
6  {

8  defineTypeNameAndDebug(white_Metzner_CY, 0);
9  addToRunTimeSelectionTable(viscoelasticLaw, white_Metzner_CY, dictionary);

11 // from components
12 white_Metzner_CY::White_Metzner_CY
13 (
14     const word& name,
15     const volVectorField& U,
16     const surfaceScalarField& phi,
17     const dictionary& dict
18 )
19 :
20     viscoelasticLaw(name, U, phi),
21     tau_
22     (
23         IOobject
24         (
25             "tau" + name,
26             U.time().timeName(),
27             U.mesh(),
28             IOobject::MUST_READ,
29             IOobject::AUTO_WRITE
30         ),
31         U.mesh()
32     ),
33     rho_(dict.lookup("rho")),
34     etaS_(dict.lookup("etaS")),
35     etaP_(dict.lookup("etaP")),
36     lambda_(dict.lookup("lambda")),
37     m_(dict.lookup("m")),
38     n_(dict.lookup("n")),
39     K_(dict.lookup("K")),
40     L_(dict.lookup("L")),
41     a_(dict.lookup("a")),
```

```

42     b_(dict.lookup("b"))
43     {}

45     tmp<fvVectorMatrix> white_Metzner_CY::divTau(volVectorField& U) const
46     {

48         dimensionedScalar etaPEff = etaP_;

50         return
51         (
52             fvc::div(tau_/rho_, "div(tau)")
53             - fvc::laplacian(etaPEff/rho_, U, "laplacian(etaPEff,U)")
54             + fvm::laplacian((etaPEff+etaS_)/rho_, U, "laplacian(etaPEff+etaS,U)")
55         );

57     }

59     void white_Metzner_CY::correct()
60     {

62         // velocity gradient tensor
63         volTensorField L = fvc::grad( U() );

65         // convected derivate term
66         volTensorField C = tau_ & L;

68         // twice the rate of deformation tensor
69         volSymmTensorField twoD = twoSymm( L );

71         // Effective viscosity and relaxation time
72         volScalarField etaPValue = etaP_ * Foam::pow( 1 + \
73             Foam::pow( K_* sqrt(2.0)*mag(symm(L)),a_), (m_- 1)/a_ );
74         volScalarField lambdaValue = lambda_ * Foam::pow( 1 + \
75             Foam::pow( L_* sqrt(2.0)*mag(symm(L)),b_), (n_- 1)/b_ );

77         // Stress transport equation
78         tmp<fvSymmTensorMatrix> tauEqn
79         (
80             fvm::ddt(tau_)
81             + fvm::div(phi(), tau_)
82             ==
83             etaPValue / lambdaValue * twoD
84             + twoSymm( C )
85             - fvm::Sp( 1/lambdaValue, tau_ )
86         );

87         tauEqn().relax();

```

```
88     solve(tauEqn);  
89 }
```

Anexo VI

Procedimento para resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos através do *solver* viscoelasticFluidFoam utilizando o modelo constitutivo de Oldroyd-B.

O procedimento para resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos através do *solver* viscoelasticFluidFoam resume-se a quatro etapas principais (Favero, 2009):

1. Considerando os valores conhecidos dos campos de velocidade U , pressão p e tensão τ , resolve-se a equação da quantidade de movimento de forma implícita, fornecendo U^* . O gradiente da pressão e o divergente da tensão são calculados de forma explícita utilizando valores disponíveis do passo de tempo anterior;
2. A partir de U^* , calcula-se um novo campo de pressão p^* e, em seguida, corrige-se a velocidade, resultando em U^{**} , que satisfaz a equação da continuidade. O acoplamento entre o campo de pressão e velocidade é realizado pelo algoritmo PISO;
3. Calcula-se cada componente do tensor das tensões τ^* através da equação constitutiva escolhida para o problema;
4. Para obter soluções mais precisas em um regime transiente, itera-se mais vezes dos passos 1 a 3 dentro do mesmo passo de tempo. Desta forma, os valores de U , p e τ são atualizados com os valores de U^{**} , p^* e τ^* .

No trabalho que deu origem ao *solver* viscoelasticFluidFoam (Favero, 2009), a implementação da equação da conservação de momento é efetuada conforme a metodologia DEVSS (Guénette e Fortin, 1995), introduzindo um termo difusivo adicional em cada lado da equação. Seguindo a metodologia DEVSS, a equação de conservação de momento possui a seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho \underline{U})}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho \underline{U} \underline{U}) - (\eta_s + \kappa) \underline{\nabla} \cdot (\underline{\nabla} \underline{U}) = -\underline{\nabla} p + \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}}_p - \kappa \underline{\nabla} \cdot (\underline{\nabla} \underline{U}) \quad (\text{A.1})$$

Também é característico desta formulação considerar o tensor das tensões poliméricas como possuindo uma contribuição viscosa e uma elástica. Considerando o caso em que existe uma solução de polímero em um solvente newtoniano, a contribuição viscosa será dada pela equação constitutiva dos fluidos newtonianos

$$\underline{\underline{\tau}}_s = \dot{\underline{\underline{\eta}}}_s \quad (\text{A.2})$$

e a contribuição elástica será dada pela equação constitutiva polimérica adotada.

Nesta metodologia, κ é um número positivo, sendo que seu valor está relacionado com os parâmetros do modelo constitutivo. Fazer este valor igual à viscosidade polimérica à taxa nula de deformação ($\kappa = \eta_P$) tem se mostrado uma boa escolha (Guénette e Fortin, 1995).

No código do arquivo `Oldroyd_B.C` tem-se a biblioteca `Oldroyd_B.H`. Esta biblioteca é exclusiva do modelo de Oldroyd-B e contém instruções para construção do mesmo. Na linha 11 é construída a classe `Oldroyd_B` e são declarados todos os parâmetros e incógnitas pertinentes ao modelo, como a incógnita τ e os parâmetros ρ , λ , η_S e η_P . Também são declaradas funções importantes como `correct()` e `divTau(volVectorField& U)`, por exemplo.

Em seguida, é criado o objeto `tau` de leitura obrigatória e salvamento automático. Também é feita a leitura dos parâmetros necessários ao modelo. Na linha 38 é feita a implementação da função dada por `divTau(volVectorField& U)`. Esta função retorna o valor de $\nabla \cdot \tau$, no qual τ inclui as contribuições da tensão do solvente, da tensão polimérica e dos termos da formulação DEVSS. A variável `etaPeff` armazena o valor de η_P . Dessa forma, por exemplo, o código compreendido entre as linhas 45 e 47 irá retornar o valor da seguinte expressão:

$$\nabla \cdot \frac{\tau_P}{\rho} - \frac{\eta_P}{\rho} \nabla \cdot (\nabla U) + \frac{\eta_S + \eta_P}{\rho} \nabla \cdot (\nabla U) \quad (\text{A.3})$$

A função `divTau(volVectorField& U)` é implementada dentro da função principal `main()`, permitindo que os dados de tensão calculados usando o modelo viscoelástico sejam repassados para a equação de conservação de momento implementada em `viscoelasticFluidFoam.C`.

Na linha 52 está definida a função `correct()`, que implementa o modelo constitutivo. A fim de tornar mais claras a implementação e a compreensão do código foram declarados os parâmetros `L`, `C` e `twOD`. `L` armazena o valor do gradiente da velocidade calculado explicitamente. `C` armazena o valor do produto escalar entre `L` e `tau` (o produto escalar é definido por `&` no OpenFOAM). Dessa forma, $C = L \cdot \tau$ ou $C = \nabla U \cdot \tau$, termo que faz parte do cálculo da derivada convectiva superior de τ . O parâmetro `twOD` aplica a operação `twoSymm()` sobre o tensor `L`, retornando duas vezes o valor da parte simétrica do tensor taxa de deformação, ou seja, $\text{twOD} = 2D = 2(1/2)(L + L^T)$. `fvm::Sp()` introduz um termo fonte de forma implícita na equação.

Para finalizar, é utilizado o comando `tauEqn.relax()` a fim de aplicar uma relaxação da variável `tau` através de valores definidos pelo usuário. `solve(tauEqn)` resolve o sistema discretizado contido em `tauEqn`.

Anexo VII

Representação dos operadores matemáticos e respectivo código do modelo viscoelástico de Oldroyd-B.

Operação	Código correspondente
$\frac{D}{Dt}\tau$	<code>fvm::ddt(tau_) + fvm::div(phi(), tau_)</code>
$2\frac{\eta_P}{\lambda}D$	<code>etaP_ / lambda_ * twoD</code>
$[\tau \cdot \nabla U] + [\tau \cdot \nabla U]^T = 2\left(\frac{1}{2}\right)(C + C^T)$	<code>twoSymm(C)</code>
$\frac{1}{\lambda}\tau$	<code>fvm::Sp(1/lambda_, tau_)</code>

Anexo VIII

Simulação em paralelo, geração da malha computacional, funcionamento do *solver* GAMG, uso do passo de tempo adaptativo, sintaxe dos fatores determinantes do acoplamento PISO e relaxação das variáveis no pacote OpenFOAM.

Simulação em paralelo

A malha e campos de variáveis são fracionados através do utilitário `decomposePar`. A geometria e campos de variáveis são decompostos com relação a um conjunto de parâmetros especificado no dicionário `decomposeParDict`, que deve estar localizado no diretório `system` do caso.

Após a execução de `decomposePar`, um conjunto de subdiretórios é criado, um para cada processador, no diretório do caso. Os diretórios recebem nomes do tipo `processor n`, onde `n` assume valores de 0, 1, 2, ... e representa o número de um processador. Cada um dos diretórios possui um diretório de tempo, que contém descrições do campo de variáveis decomposto e um diretório `constant/polyMesh` que contém a descrição da malha decomposta.

O caso decomposto é resolvido através da execução do *solver* pelo terminal, da mesma forma que seria feito para um caso não-decomposto. Ao fim da simulação, o usuário deverá executar o utilitário `reconstructPar` a fim de reconstruir a malha e campos de variáveis. O caso pode ser pós-processado normalmente em seguida.

Geração da malha computacional

A geração da malha computacional no OpenFOAM é realizada pelo utilitário `blockMesh`, que lê o conteúdo do dicionário `blockMeshDict` localizado no diretório `<nome_do_caso>/constant/polyMesh` e gera a malha, escrevendo os dados referentes em arquivos chamados `points`, `faces`, `cells` e `boundary` (pontos, faces, células e contorno) no mesmo diretório.

Funcionamento do solver GAMG

No *solver* GAMG do pacote OpenFOAM primeiramente é gerada uma solução rápida em uma malha com um pequeno número de células. Em seguida, esta é mapeada pelo pacote para uma malha mais refinada, usando-a como uma tentativa inicial para obter a solução na malha mais fina. Na prática, começa-se com a malha especificada pelo usuário e procede-se com o aglomeramento/refinamento da malha em estágios. O usuário necessita especificar o número aproximado de células da malha no nível mais grosseiro através da *keyword* `nCoarsestCells` em `fvSolution`. A velocidade em que se dá o aglomeramento ou refinamento da malha é definida pela *keyword* `mergeLevels`. Por exemplo, se o usuário

deseja efetuar o refinamento ou aglomeramento um nível de cada vez, irá selecionar `mergeLevels 2` em `fvSolution`.

Uso de passo de tempo adaptativo

A fim de utilizar um passo de tempo adaptativo, deve-se editar o dicionário `controlDict` da seguinte forma

```
runtimeModifiable yes;  
adjustTimeStep yes;  
maxCo 0.8;  
maxDeltaT 0.001;
```

No caso acima, a *keyword* `runtimeModifiable` indica se o dicionário `controlDict` será lido a cada novo passo de tempo da simulação ou não. Isto é necessário se o passo de tempo adaptativo for usado na resolução do problema.

A *keyword* `adjustTimeStep` indica se o passo de tempo adaptativo será utilizado na resolução do problema.

A *keyword* `maxCo` determina qual o valor máximo do número de Courant que poderá ser utilizado. `maxDeltaT` restringe o valor máximo do passo de tempo da simulação.

Fatores determinantes no acoplamento PISO

A sintaxe dos fatores determinantes no acoplamento pressão-velocidade PISO pode variar de caso para caso, mas em geral obedece a seguinte estrutura:

```
PISO  
{  
    momentumPredictor yes;  
    nCorrectors 2;  
    nNonOrthogonalCorrectors 0;  
}
```

A primeira *keyword* refere-se ao sistema de acoplamento pressão-velocidade utilizado na resolução do problema (neste caso, PISO). Cada *solver* utiliza apenas um método de acoplamento. Se o usuário desejar, por exemplo, utilizar o algoritmo PISO em um *solver* cujo acoplamento se dá por meio de outro algoritmo, terá que desenvolver uma nova implementação para o *solver*.

A segunda *keyword* `momentumPredictor` refere-se à execução da etapa de predição de momento, equivalente ao primeiro item na descrição do algoritmo PISO.

A terceira *keyword* `nCorrectors` indica o número de iterações completas para o método de acoplamento realizadas dentro do mesmo passo de tempo.

A quarta *keyword* `nNonOrthogonalCorrectors` indica o número de correções de não-ortogonalidade a serem realizadas dentro de uma iteração do método de acoplamento. Uma malha é considerada ortogonal quando, para cada face, o vetor normal à face é paralelo ao vetor entre os centros das células que a face conecta. Exemplos são malhas de células hexaédricas cujas faces são alinhadas a um sistema de coordenadas cartesiano. O número de correções será zero neste tipo de malha, aumentando com o grau de não-ortogonalidade da mesma.

Relaxação das variáveis

No OpenFOAM, os parâmetros de relaxação são selecionados no dicionário `fvSolution`. Em um caso onde as variáveis a serem resolvidas sejam a pressão e a velocidade, a sintaxe será a seguinte:

```
relaxationFactors
{
    p            0.2;
    U            0.8;
}
```

No caso acima, a sub-relaxação aplicada à pressão será feita por um fator $\alpha_p = 0,2$. Já a velocidade será relaxada por um fator $\alpha_U = 0,8$.

Anexo IX

Modificações no arquivo `viscoelasticFluidFoam.C` para a obtenção de uma solução para os campos de pressão e velocidade de um escoamento de um fluido newtoniano.

A obtenção de uma solução para os campos de pressão e velocidade de um escoamento de um fluido newtoniano é feita modificando-se no arquivo `viscoelasticFluidFoam.C` a porção do código que faz o cálculo da predição de momento (linhas 42-47):

```
tmp<fvVectorMatrix> UEqn
(
    fvm::ddt(U)
  + fvm::div(phi, U)
  - visco.divTau(U)
);
```

que implementa a operação:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla(\phi U) - \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{A.4})$$

e substituindo por:

```
tmp<fvVectorMatrix> UEqn
(
    fvm::ddt(U)
  + fvm::div(phi, U)
  - fvm::laplacian(nu, U)
);
```

que implementa a operação:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla(\phi U) - \nabla \cdot (\nu \nabla U) \quad (\text{A.5})$$

As siglas `fvm` e `fvc` significam *finiteVolumeMethod* e *finiteVolumeCalculus*, classes que representam a maneira que se dará a discretização dos termos que precedem. `fvm` é utilizada para cálculos implícitos de operações como a derivada espacial, enquanto `fvc` é utilizada para cálculos explícitos. Funções do tipo `fvm` calculam derivadas implícitas e retornam uma matriz de coeficientes. Já funções do tipo `fvc` calculam derivadas explícitas e outros cálculos explícitos, retornando um campo geométrico de escalares, vetores ou tensores.

Apêndice I

Resolução da Eq. (3.16) para os componentes do tensor das tensões τ_{xx} , τ_{yx} e τ_{yy}

Resolvendo a Eq. (3.16) para o componente do tensor das tensões τ_{xx} :

$$\underbrace{\tau_{xx}}_{(a)} + \lambda \left[\underbrace{v_x \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}}_{(b)} + \underbrace{v_y \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial y}}_{(c)} - \left(\underbrace{\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x}}_{(d)} + \underbrace{\tau_{xy} \frac{\partial v_x}{\partial y}}_{(e)} \right) - \left(\underbrace{\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x}}_{(d)} + \underbrace{\tau_{xy} \frac{\partial v_x}{\partial y}}_{(e)} \right) \right] = \underbrace{2\eta_P \frac{\partial v_x}{\partial x}}_f \quad (\text{A.1})$$

Considerando as hipóteses de simplificação da seção 3.4, pode-se simplificar esta solução. Segundo as hipóteses 2 e 5, é possível anular os termos b , c , d e f da equação acima. A solução simplificada irá resultar em:

$$\tau_{xx} - 2\lambda \tau_{xy} \frac{\partial v_x}{\partial y} = 0 \quad (\text{A.2})$$

Resolvendo a Eq. (3.16) para o componente τ_{yx} :

$$\underbrace{\tau_{yx}}_a + \lambda \left[\underbrace{v_x \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x}}_b + \underbrace{v_y \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y}}_c - \left(\underbrace{\tau_{xx} \frac{\partial v_y}{\partial x}}_d + \underbrace{\tau_{xy} \frac{\partial v_y}{\partial y}}_e \right) - \left(\underbrace{\tau_{yx} \frac{\partial v_x}{\partial x}}_f + \underbrace{\tau_{yy} \frac{\partial v_x}{\partial y}}_g \right) \right] = \eta_P \left(\underbrace{\frac{\partial v_x}{\partial y}}_h + \underbrace{\frac{\partial v_y}{\partial x}}_i \right) \quad (\text{A.3})$$

Segundo as hipóteses 2 e 5, é possível anular os termos b , c , d , e , f e i da equação acima. A solução simplificada irá resultar em:

$$\tau_{yx} - \lambda \tau_{yy} \frac{\partial v_x}{\partial y} = \eta_P \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (\text{A.4})$$

Resolvendo a Eq. (3.16) para o componente τ_{yy} :

$$\underbrace{\tau_{yy}}_a + \lambda \left[\underbrace{v_x \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial x}}_b + \underbrace{v_y \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y}}_c - \left(\underbrace{\tau_{yx} \frac{\partial v_y}{\partial x}}_d + \underbrace{\tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y}}_e \right) - \left(\underbrace{\tau_{yx} \frac{\partial v_x}{\partial x}}_f + \underbrace{\tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y}}_g \right) \right] = \underbrace{2\eta_P \frac{\partial v_y}{\partial y}}_h \quad (\text{A.5})$$

Novamente, segundo as hipóteses 2 e 5, é possível anular todos os termos da equação acima, com exceção do termo a , fazendo com que a solução simplificada resulte em:

$$\tau_{yy} = 0 \quad (\text{A.6})$$

Considerar a hipótese 4 dispensa o cálculo dos demais componentes do tensor das tensões, que apresentam algum componente na direção do eixo z .

Pode ser verificado que, para escoamentos operando sob as condições acima propostas, o componente τ_{yy} do tensor das tensões sempre será nulo. A única tensão normal não-nula é devida ao componente τ_{xx} .

Para resolver o componente τ_{yx} , substitui-se a Eq. (A.6) na Eq. (A.4):

$$\tau_{yx} = \eta_P \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (\text{A.7})$$

Para resolver o componente τ_{xx} , substitui-se a Eq. (A.7) na (Eq. A.2):

$$\tau_{xx} = 2\eta_P \lambda \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 \quad (\text{A.8})$$

Apêndice II

Substituição do gradiente da velocidade nas equações que definem os componentes do tensor das tensões τ_{xx} e τ_{yx}

Derivando o perfil de velocidade (Eq. 3.20) com relação ao eixo y :

$$\frac{\partial v_x}{\partial y} = -\frac{H^2}{2\mu} \frac{\partial^2 p}{\partial y \partial x} \left(1 - \left(\frac{y}{H} \right)^2 \right) - \frac{(\partial p / \partial x) H^2}{2\mu} \left(-\frac{2y}{H^2} \right) \quad (\text{A.9})$$

Considerando-se que não há variação da pressão com relação ao eixo y :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial y \partial x} = 0 \quad (\text{A.10})$$

Substituindo a Eq. (A.10) na Eq. (A.9), rearranjando os termos e considerando-se $\mu = \eta_P$, obtém-se:

$$\frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{y(\partial p / \partial x)}{\eta_P} \quad (\text{A.11})$$

Substituindo o resultado obtido na Eq. (A.11) na Eq. (A.7), obtém-se:

$$\tau_{yx} = y \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (\text{A.12})$$

O componente do tensor das tensões τ_{xy} é função somente da distância com relação ao eixo x e da variação da pressão com relação ao eixo x .

Substituindo o resultado obtido na Eq. (A.11) na Eq. (A.8), obtém-se:

$$\tau_{xx} = \frac{2\lambda y^2 \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2}{\eta_P} \quad (\text{A.13})$$

O componente do tensor das tensões τ_{xx} é função da distância com relação ao eixo x , da variação da pressão com relação ao eixo x , do tempo de relaxação λ e da viscosidade polimérica η_P .

Para que seja possível a comparação entre resultados numéricos e analíticos, é necessário encontrar uma função que descreva a variação da pressão com relação ao eixo x $\partial p/\partial x$.

Considerando-se a equação da velocidade (Eq. 3.20), nota-se que ela possui um máximo relativo quando $\partial v_x/\partial y = 0$, ou seja, $y = 0$, centro da geometria. Fazendo $y = 0$ na Eq. (3.20), chega-se ao valor máximo da velocidade para este tipo de escoamento, que será:

$$v_{\max}(y) = -\frac{(\partial p/\partial x)H^2}{2\eta_p} \quad (\text{A.14})$$

Obtém-se a velocidade média do escoamento integrando a Eq. (3.20) no intervalo entre paredes $(-H, H)$.

$$v_{\text{med}}(y) = \frac{1}{H} \int_0^H v_x(y) dy = -\frac{(\partial p/\partial x)H^2}{3\eta_p} \quad (\text{A.15})$$

Combinando a Eq. (A.14) e Eq. (A.15) resulta na seguinte relação:

$$v_{\max} = \frac{3}{2} v_{\text{med}} \quad (\text{A.16})$$

Para esse tipo de escoamento, a velocidade máxima alcançada pelo fluido (no centro da geometria) será 1,5 vezes maior do que a velocidade média. Para os testes realizados, considera-se como v_{med} o valor da velocidade ao entrar na geometria (1 m/s).

Substituindo v_{\max} na Eq. (A.14) fornece uma expressão para $(\partial p/\partial x)$:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right) = \frac{-3\eta_p v_{\text{med}}}{H^2} \quad (\text{A.17})$$

Substituído a Eq. (A.17) na Eq. (A.13) e Eq. (A.14) fornece as seguintes expressões para os componentes do tensor das tensões τ_{yx} e τ_{xx} :

$$\tau_{xx} = \frac{18y^2\eta_p\lambda v_{\text{med}}^2}{H^4} \quad (\text{A.18})$$

$$\tau_{yx} = \frac{-3y\eta_p v_{\text{med}}}{H^2} \quad (\text{A.19})$$