

**CÁLCULO DE ESCOAMENTOS DE FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS EM REGIME  
LAMINAR**

**“Desenvolvimentos e aplicações recentes da metodologia dos volumes finitos”**

Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho

**Lição de Síntese Apresentada para as Provas de Agregação**

**Dezembro de 2003**



## Sumário

O cálculo numérico de escoamentos e outros fenómenos de transporte envolvendo fluidos não newtonianos é cada vez mais frequente, constituindo um método muito poderoso de projecto e diagnóstico em engenharia. Por razões históricas, os métodos de cálculo numérico usados em Reologia Computacional, nome por que é conhecida a disciplina quando estão envolvidos fluidos viscoelásticos de elevada viscosidade, baseiam-se sobretudo na metodologia dos elementos finitos. No entanto, esta tem custos computacionais elevados quando comparada com a metodologia dos volumes finitos.

A metodologia dos volumes finitos tem uma grande tradição na Mecânica dos Fluidos clássica e por outro lado é menos exigente em recursos computacionais, sendo por isso uma alternativa viável e interessante no âmbito da Mecânica dos Fluidos Computacional com fluidos não newtonianos e da Reologia Computacional. Nos últimos 10 anos assistiu-se a um grande desenvolvimento na aplicação desta metodologia à Reologia Computacional, mas não está ainda disponível um texto que englobe o conhecimento existente sobre esta técnica. Achei por isso que este seria um bom momento para iniciar tal desiderato e que esta lição poderia servir de esqueleto para tal esforço.

Esta lição, para uma audiência com uma formação mínima ao nível da licenciatura, faz uma abordagem geral às actuais capacidades, e problemas específicos, dos métodos de cálculo para fluidos não newtonianos usando a metodologia dos volumes finitos e privilegiando as contribuições do autor e seus colaboradores. A lição começa por apresentar a problemática deste tipo de simulações, definindo sucintamente as principais características reológicas dos fluidos e algumas das equações constitutivas que estão à nossa disposição. Sem entrar profundamente no método de cálculo, explicado detalhadamente em anexo, apresentam-se as equações a resolver e a metodologia dos volumes finitos.

Na segunda parte da lição apresentam-se resultados típicos obtidos com programas de cálculo baseados nos volumes finitos, começando pelos fluidos não-elásticos (ou inelásticos) e passando depois aos fluidos viscoelásticos. Para os fluidos elásticos os resultados referem-se a alguns dos casos típicos de referência, nomeadamente o escoamento numa contracção súbita e em torno de um cilindro confinado entre placas paralelas. Aborda-se ainda o cálculo de escoamentos transitórios e apresentam-se resultados obtidos com uma ferramenta em desenvolvimento para o projecto automático de feiras de extrusão.

Os resultados apresentados foram, na sua generalidade, obtidos pelo autor e seus colaboradores usando um código para malhas colocadas não-ortogonais do tipo estruturado por blocos. Naturalmente que existem outras metodologias de implementação dos volumes finitos, por exemplo para malhas não estruturadas ou malhas ortogonais desfasadas. Embora sejam referidos esses casos, não se apresentarão esses resultados em detalhe.

A lição termina com uma descrição breve e genérica dos desafios que se esperam para o futuro. A maior parte desses desafios não são exclusivos da metodologia dos volumes finitos, mas esta irá certamente desempenhar um papel relevante dada a sua economia de recursos computacionais.



## **Agradecimentos**

Esta lição é dedicada aos meus familiares mais próximos que me acompanharam nos últimos 13 anos e em particular à Luísa e à Sara. A elas agradeço a companhia, a amizade e a paciência que tiveram e as muitas horas em que não as acompanhei.

Em segundo lugar quero também dedicar esta lição, e ao mesmo tempo agradecer, a todos os meus colaboradores passados e presentes; sem eles, o trabalho aqui exposto não teria sido possível. A este propósito, e relativamente ao tema específico desta lição, merecem um agradecimento muito especial os meus amigos e colegas Prof. Paulo Oliveira da Universidade da Beira Interior e Eng. Manuel Alves da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto. Finalmente, um agradecimento também muito especial ao meu irmão, Professor Carlos Pinho, pela amizade e companheirismo.

Porto, 15 de Dezembro de 2003



**Índice**

Sumário	3
Agradecimentos	5
Índice	7
Notação	9
1. Introdução	11
1.1 Presença e Relevância dos fluidos não newtonianos	11
1.2 Objectivo da lição	13
1.3 Organização da lição	15
2. Equações fundamentais	17
2.1 Equação de conservação da massa	17
2.2 Equação de conservação da quantidade de movimento	18
2.3 Equação de conservação da energia térmica	18
3 Algumas propriedades reológicas de fluidos não newtonianos	19
3.1 Viscosidade de corte, viscosimétrica ou de cisalhamento	19
3.2 Tensão de cedência	20
3.3 Coeficiente da primeira diferença de tensões normais	22
3.4 Módulos de conservação e dissipação	23
3.5 Viscosidade extensional ou elongacional	24
3.6 Outras propriedades reológicas	26
4 Alguns modelos constitutivos reológicos	27
4.1 Modelo do fluido de Newton	28
4.2 Modelo do fluido newtoniano generalizado	29
4.3 Modelos para fluidos com tensão de cedência	31
4.4 Modelos viscoelásticos explícitos	32
4.5 Modelos implícitos na tensão para fluidos viscoelásticos	33
4.6 Modelos multimodo	39
5 Resolução de um problema de Mecânica dos Fluidos: diferença entre as estratégias newtoniana e não newtoniana	41
6 Métodos de cálculo numérico	43
6.1 Um pouco de história	44
7 Resultados, discussão e alguns problemas	53
7.1 Fluidos newtonianos generalizados	53
7.1.1 Problemas específicos e solução	53
7.1.2 Escoamento axial numa conduta anelar com rotação do cilindro interior	56
7.1.3 Perda de carga localizada numa expansão súbita axissimétrica	61
7.1.4 Projecto automático de feiras de extrusão	62
7.2 Fluidos com tensão de cedência	64
7.3 Fluidos viscoelásticos	68

7.3.1	Contração súbita plana	68
7.3.1.1	Observações experimentais	69
7.3.1.2	Simulações numéricas	71
7.3.1.2.1	Fluido de Maxwell contravariante	71
7.3.1.2.2	Fluido de Oldroyd-B	75
7.3.1.2.3	Fluido PTT linear	80
7.3.1.2.4	Fluido PTT exponencial	84
7.3.2	Escoamento em torno de um cilindro confinado	87
7.3.2.1	Breve descrição de resultados experimentais	87
7.3.2.2	Simulações numéricas	89
7.3.2.2.1	Fluido de Maxwell contravariante	90
7.3.2.2.2	Fluido de Oldroyd-B	92
7.3.3	Ejecção de vórtices	95
8	Cálculos de escoamentos em regime turbulento com fluidos viscoelásticos	101
9	Desenvolvimentos futuros	105
Anexo:	Método dos volumes finitos para malhas colocadas e coordenadas não-ortogonais	107
1	Transformação de coordenadas	107
2	Método numérico	111
2.1	Introdução e notação	111
2.2	Discretização das equações	113
2.2.1	Equação da continuidade	113
2.2.2	Equação de conservação de quantidade de movimento	114
2.3	Equação constitutiva	118
2.4	Um esquema de alta resolução para a convecção: CUBISTA	119
2.5	Formulação dos caudais mássicos nas faces das células	122
2.6	Formulação das tensões nas faces das células	124
2.7	Algoritmo de resolução	127
2.8	Cálculos em regime transitório	129
2.9	Condições de fronteira	133
	Notação suplementar	139
	Referências	141



## Notação

### Romana

$A_{ij}$	tensor conformação molecular
$c$	calor específico do fluido
$C$	correção de Couette para escoamento em torno de um cilindro
$C_D$	coeficiente de arrasto
$C_L$	coeficiente de sustentação
$De$	número adimensional de Débora
$f$	frequência de fenómeno periódico
$g_i$	componente $i$ do vector aceleração da gravidade no sistema cartesiano, $x_i$
$G'$	módulo de conservação
$G''$	módulo de dissipação
$k$	condutividade térmica do fluido
$K$	índice de consistência das leis de potência e de Herschel-Bulkley da viscosidade
$L$	extensibilidade molecular no modelo FENE-P
$n$	índice de potência das leis de potência e de Herschel-Bulkley da viscosidade
$N_1$	primeira diferença de tensões normais
$N_2$	segunda diferença de tensões normais
$p$	pressão
$Re$	número adimensional de Reynolds
$Re_{gen}$	número adimensional de Reynolds generalizado
$St$	número adimensional de Strouhal
$S_{ij}$	componente $ij$ do tensor gradiente de deformação, ou velocidade de deformação, de um fluido
$t$	tempo
$T$	temperatura do fluido
$u$	componente do vector velocidade no sistema cartesiano, na direcção $x$
$u_i$	componente $i$ do vector velocidade no sistema cartesiano, $x_i$
$U$	velocidade média do escoamento
$v$	componente do vector velocidade no sistema cartesiano, na direcção $y$
$x$	coordenada do sistema cartesiano
$x_i$	coordenada $i$ no sistema cartesiano
$x_R$	comprimento de zona de recirculação
$X_R$	comprimento de zona de recirculação adimensional
$w$	componente do vector velocidade no sistema cartesiano, na direcção $z$
$We$	número adimensional de Weissenberg
$y$	coordenada do sistema cartesiano
$z$	coordenada do sistema cartesiano

**Grega**

$\alpha$	parâmetro do modelo constitutivo não linear de Giesekus
$\delta$	desfasamento entre tensão aplicada e deformação de um fluido num escoamento oscilatório de corte
$\delta_{ij}$	delta de Kronecker
$\varepsilon$	parâmetro do modelo constitutivo não linear de Phan-Thien—Tanner (PTT)
$\phi$	grandeza escalar genérica
$\gamma$	deformação de um fluido em escoamento de corte
$\gamma_0$	amplitude de deformação num ensaio oscilatório de corte
$\dot{\gamma}$	taxa de deformação de um fluido em escoamento de corte
$\Gamma$	coeficiente de difusão do fluido para processo de convecção-difusão genérico
$\lambda$	tempo de relaxação de um fluido viscoelástico ou constante de tempo nalguns modelos de viscosidade viscosimétrica
$\lambda'$	coeficiente da equação constitutiva de um fluido relacionado com expansão volumétrica
$\eta$	viscosidade viscosimétrica, ou de corte, de um fluido
$\eta_E$	viscosidade extensional, ou elongacional, de um fluido
$\mu$	coeficiente de viscosidade plástica em modelos de viscosidade para fluidos com tensão de cedência
$\mu'$	viscosidade de dilatação ou dilatacional
$\mu_0$	coeficiente quantificando a viscosidade no limite de taxas de deformação nulas
$\mu_\infty$	coeficiente quantificando a viscosidade no limite de taxas de deformação muito elevadas
$\rho$	massa específica do fluido
$\Psi_1$	coeficiente da primeira diferença de tensões normais
$\Psi_2$	coeficiente da segunda diferença de tensões normais
$\Psi_R$	Intensidade de região de recirculação adimensional (função de corrente adimensional)
$\tau_{ij}$	componente $ij$ do tensor das tensões no sistema cartesiano, $x_i$
$\tau_Y$	tensão de cedência de um fluido viscoplástico
$\tau_0$	amplitude de tensão aplicada num escoamento oscilatório de corte
$\omega$	frequência angular de oscilação
$\xi$	parâmetro do modelo constitutivo não linear de Phan-Thien—Tanner (PTT)
$\Omega_{ij}$	componente $ij$ do tensor velocidade de distorção ou vorticidade

**Subíndices**

0	referente a taxas de deformação muito baixas
$\infty$	referente a taxas de deformação muito elevadas
$p$	referente ao polímero ou ao aditivo polimérico
$s$	referente ao solvente newtoniano

## 1. Introdução

### *1.1 Presença e relevância dos fluidos não newtonianos*

Quando se fala em Mecânica dos Fluidos, a maioria dos engenheiros associa a disciplina a escoamentos de fluidos de características newtonianas, de que os exemplos mais comuns são o ar e a água. É indiscutível que estes representam, em massa e volume, mais de 99% dos fluidos na biosfera, para além da sua frequente presença na indústria e na nossa vida diária. Esta presença esmagadora leva muitas pessoas, inclusivé cientistas e engenheiros, a pensar que os fluidos de características não newtonianas são irrelevantes, uma raridade e uma curiosidade académica. Nada é mais incorrecto: a maioria dos fluidos sintéticos industriais, inúmeros fluidos de relevância biológica e a massa magnética do planeta, entre outros, apresentam características claramente não newtonianas. A breve descrição que se segue pretende dar uma ideia da diversidade e relevância dos fluidos com estas características.

Se alargarmos o nosso universo observacional ao interior do planeta, veremos que a maior parte da massa da terra se encontra no estado líquido sob a forma de magmas que apresentam características não newtonianas (Griffiths, 2000; Chistiansen et al, 2002). A geologia tem também demonstrado que o movimento do gelo glacial, o escoamento de lava dos vulcões e a sua posterior solidificação são fenómenos só correctamente descritos, quando se assumem modelos de comportamento reológico não newtoniano. Em suma, mesmo em termos absolutos a supremacia dos fluidos newtonianos no planeta terra não é afinal tão grande como se pensava até há tão pouco tempo (Day, 2002 e Fahnstock et al, 2001).

Na biosfera os fluidos não newtonianos também desempenham papéis fundamentais e para o ilustrar é suficiente observarmos o corpo humano: o sangue é um fluido de constituição físico-química complexa, formado por moléculas de grandes dimensões e elevado peso molecular em solução num fluido de baixo peso molecular e estruturalmente simples. Estes são também os ingredientes para um fluido com características viscoelásticas. Em suspensão no sangue encontram-se ainda partículas deformáveis, os glóbulos vermelhos, com dimensões da ordem do diâmetro das veias capilares (dimensões micrométricas, Fung 1997).

Outro exemplo comum da biologia envolvendo fluidos não newtonianos é o processamento de alimentos que se caracteriza por três etapas fundamentais: a alimentação, a digestão dos produtos ingeridos e a evacuação dos produtos residuais. Aqui, embora estejamos na presença de fluidos de constituição complexa as suas características são eminentemente inelásticas ou fracamente elásticas, já que esta propriedade não é desejada pelo organismo: a título de exemplo, veja-se a nossa dificuldade em deglutir pastilha elástica, o que só se consegue se nos concentrarmos no acto, mas repare-se no automatismo da deglutição automática dos "bons" alimentos (inelásticos). No entanto, isto não quer dizer que os fluidos elásticos estejam ausentes do aparelho digestivo: a saliva apresenta um elevado grau de elasticidade extensional como pode ser facilmente comprovado através de uma experiência simples de tracção de saliva entre dois dedos. Outros fluidos corporais apresentam também características fortemente não newtonianas,

como o fluido sinovial, que lubrifica as juntas ósseas, ou os fluidos do aparelho reprodutor humano.

Ao longo dos anos, o homem foi criando múltiplos e variadíssimos fluidos para diversas aplicações práticas. Na sua maioria, eles apresentam características reológicas não newtonianas com graus diferentes de elasticidade, plasticidade, tixotropia e reofluidificação (ou fluidificação regressiva). São fluidos tão diversos como as tintas decorativas, as tintas de impressão, as colas, os produtos de cosmética e beleza, os medicamentos, os produtos alimentares no estado líquido (ketchup, iogurtes, molhos), inúmeros produtos alimentares que, apresentando-se aos consumidores no estado sólido ou em pó, passaram em processo por uma fase líquida (sorvetes, produtos de confeitaria, massa de panificação), os sabões e detergentes, alguns óleos com aditivos de massa molecular elevada ou contendo partículas no estado sólido (óleo multigrade, por exemplo), fluidos lubrificantes utilizados na perfuração de poços de petróleo e gás natural, petróleo bruto, plásticos no estado líquido (polímero fundido), alguns fluidos térmicos, lamas de estações de tratamento de águas residuais, todo o tipo de lamas provenientes da indústria extractiva, fluidos abrasivos, alcatrão, etc. A lista de fluidos não newtonianos é muito extensa, de facto muito mais extensa do que uma lista de fluidos com características newtonianas.

Há também fluidos que nos habituamos a considerar como newtonianos, mas que são de facto fluidos de características não newtonianas. É o caso, por exemplo, das suspensões de partículas em líquidos: suspensões aquosas de carvão pulverizado ou fluidos de corte abrasivos. Como o cálculo de escoamentos e processos envolvendo estes fluidos é frequentemente efectuado com base em teorias modificadas para fluidos newtonianos, esquecemo-nos frequentemente, que eles são de facto fluidos de características não newtonianas.

Em suma, se os fluidos de Newton constituem uma larga percentagem dos fluidos presentes na biosfera, não há também qualquer dúvida que os fluidos não newtonianos são igualmente relevantes em variadíssimos contextos.

A relevância que damos aos fluidos de Newton é de facto também uma consequência da nossa visão antropocêntrica, já que de facto eles constituem uma minoria no Universo. Para percebermos o alcance desta afirmação observemos o que se passa com um gás como o ar. Em condições normais de pressão e temperatura o ar encontra-se muito concentrado e tem um tempo de relaxação de fenómenos elásticos da ordem dos  $10^{-13}$  s. Como a maioria dos fenómenos que observamos na biosfera terrestre tem tempos característicos significativamente superiores, o ar encontra-se em equilíbrio e as suas propriedades reológicas podem assim ser consideradas como newtonianas. Contudo, se um gás se encontrar rarefeito, e até no estado de plasma, os fenómenos de dinâmica gasosa terão tempos característicos da mesma ordem de grandeza dos tempos de relaxação e colisão inter-molecular, não sendo neste caso já possível considerar essa matéria como tendo propriedades newtonianas, nem válida a hipótese do meio-contínuo. Ora, a matéria nesse estado rarefeito, dito de plasma, constitui a quase totalidade da matéria do universo. Claro que para um engenheiro mecânico esta realidade é basicamente irrelevante.

Numa perspectiva de engenharia mecânica, os inúmeros exemplos de fluidos não newtonianos mencionados anteriormente, mostra-nos a diversidade de aplicações e de sistemas em que este tipo de fluidos opera e que tendem a aumentar de importância com o desenvolvimento de aparelhos e sistemas cada vez mais especializados. Três exemplos ilustram esta última afirmação:

- (1) Para o desenvolvimento de sistemas passivos de amortecimento de vibrações, começam a ser utilizados fluidos de características não newtonianas cujas propriedades reagem à intensidade dos campos magnéticos, os chamados fluidos magneto-reológicos;
- (2) Um segundo exemplo na área térmica prende-se com os sistemas de aquecimento/arrefecimento comunitários, onde o recurso a fluidos térmicos viscoelásticos traz enormes vantagens na redução dos custos associados às perdas de calor e por fricção;
- (3) Finalmente, a tendência para a miniaturização dos sistemas, as chamadas nanotecnologias, conduz-nos a situações onde o comportamento dos fluidos em escoamento só pode ser correctamente compreendido se abandonarmos a hipótese do meio contínuo e atendermos ao comportamento cinético molecular dos fluidos. Se os fluidos estiverem no estado líquido as suas propriedades dependerão fortemente da conformação molecular e as hipóteses simplificativas como a isotropia, normalmente associadas ao conceito de fluido newtoniano, deixarão de ser válidas.

## *1.2 Objectivo da lição*

A Mecânica dos Fluidos pode e deve ser estudada em diversas perspectivas que não são mutuamente exclusivas, mas que, pelo contrário, se complementam. Em primeiro lugar, os estudos de carácter experimental constata e identificam os comportamentos reais que devem ser compreendidos pelos cientistas e engenheiros. Para o efeito, estes criam modelos teóricos que permitem desenvolver ferramentas de diagnóstico e projecto que tanto podem ser analíticos, mas mais frequentemente requerem uma solução elaborada por via do cálculo numérico. Em todos os casos, os modelos criados deverão sempre passar pelo crivo da validação por comparação com resultados experimentais.

Nos últimos 30 anos assistiu-se ao desenvolvimento ímpar de técnicas de computação numérica e capacidades de cálculo para a resolução de problemas de Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor. Naturalmente, e pelas razões apontadas anteriormente, a maior parte desse esforço dirigiu-se ao cálculo de escoamentos de fluidos newtonianos. A Mecânica dos Fluidos Computacional oferece hoje inúmeras vantagens em engenharia, sobretudo ao nível da análise paramétrica, permitindo assim a investigação e o estudo de soluções construtivas a um preço significativamente inferior ao de antigamente.

Também nos anos setenta do século XX se iniciaram desenvolvimentos de técnicas numéricas específicas para escoamentos de fluidos não newtonianos e é hoje possível efectuar inúmeros cálculos rigorosos com este tipo de fluidos. Contudo, a sua grande diversidade e algumas das suas propriedades colocam problemas muito específicos que ainda não estão resolvidos, embora o progresso tenha sido imenso, sobretudo a partir de meados dos anos oitenta do século

passado. De qualquer das formas, também a Mecânica de Fluidos Computacional para fluidos não newtonianos atingiu um elevado grau de maturidade e tornou-se indispensável em projecto de engenharia, pelo que uma breve panorâmica destes métodos e sobretudo de alguns dos seus resultados, mas também de problemas e limitações, constitui a essência desta lição.

A resolução numérica das equações de balanço e constitutiva reológica para escoamentos de fluidos não newtonianos apresenta características muito próprias e de solução de dificuldade francamente superior às equivalentes equações ou problemas envolvendo fluidos newtonianos, sobretudo quando os fluidos apresentam elasticidade. Assim, a solução numérica destas equações requer estratégias específicas, algumas das quais são abordadas nesta lição. Elas não serão exaustivamente apresentadas, serão sobretudo identificadas, e descritas em linhas gerais. Será dada ênfase nesta lição mais às actuais capacidades de cálculo, através do recurso a escoamentos de referência e sempre que se torne necessário especificar com detalhe as técnicas numéricas utilizadas na resolução de problemas será privilegiada a metodologia dos volumes finitos, que é aquela que tem sido usada pelo autor e seus colaboradores.

À semelhança do que acontece com os fluidos newtonianos, os escoamentos de fluidos não newtonianos podem processar-se nos regimes laminar e turbulento, sendo o regime de escoamento laminar muito mais comum do que com fluidos newtonianos: por exemplo, os escoamentos de polímero fundido caracterizam-se por números de Reynolds bastante inferiores a 0.01. Embora o cálculo de escoamentos de fluidos de Newton em regime laminar seja hoje um assunto resolvido, e sem dificuldades de maior, o cálculo de escoamentos laminares de fluidos não newtonianos viscoelásticos apresenta inúmeras dificuldades devido à elasticidade dos fluidos e a algumas propriedades dos complexos modelos constitutivos reológicos, nomeadamente ao facto destas equações apresentarem características hiperbólicas e mistas e definirem por vezes propriedades ilimitadas.

Quando avançamos para o regime turbulento, as dificuldades são de outro tipo. Embora não haja ainda métodos de cálculo absolutamente universais para a previsão de todo o tipo de escoamentos turbulentos de fluidos newtonianos, nos últimos 30 anos assistiu-se a um enorme progresso no desenvolvimento de modelos de turbulência e há variadíssimas estratégias que fornecem resultados satisfatórios em inúmeras situações práticas (Pope, 2000). Pelo contrário, quando os fluidos são viscoelásticos e o regime de escoamento é turbulento, os modelos e estratégias a utilizar estão claramente ainda em estado embrionário e a sua formulação tem colocado enormes dificuldades (Pinho, 2003; Cruz e Pinho, 2003). Daí que esta lição se concentre exclusivamente em escoamentos em regime laminar, embora a problemática do escoamento turbulento seja abordado de forma breve no final.

Pela especificidade e nível do tema abordado, esta lição tem como audiência um público com uma formação mínima ao nível da licenciatura.

### *1.3 Organização da lição*

Esta lição está organizada em duas partes: numa primeira parte, constituída pelos capítulos 2 a 5, apresentam-se as equações que devem ser resolvidas por métodos numéricos e faz-se a distinção entre fluidos newtonianos e não newtonianos. Esta distinção será feita quer em termos de propriedades reológicas, quer na perspectiva dos modelos constitutivos reológicos necessários à previsão dessas propriedades, e cuja resolução numérica é sempre necessária para o cálculo de escoamentos com fluidos não newtonianos. Esta primeira parte termina ainda com a distinção entre as metodologias de resolução de problemas, envolvendo fluidos newtonianos e não newtonianos no capítulo 5.

A segunda e última parte desta lição apresenta vários exemplos de cálculo de escoamentos de fluidos com diferentes características reológicas, especialmente em geometrias de referência, abordando assim os problemas específicos de cada um e as formas de os resolver e termina com uma perspectiva dos desenvolvimentos e desafios futuros na área. Os escoamentos analisados, sobretudo para fluidos elásticos, são escoamentos de referência da literature que, embora geometricamente simples, apresentam enormes dificuldades de convergência, sobretudo quando se procura obter resultados com elevada precisão.

Ao longo desta lição, assume-se que o leitor tem conhecimentos de Mecânica dos Fluidos Computacional na perspectiva do método dos volumes finitos. São também assumidos conhecimentos de álgebra vectorial e tensorial e o texto debruçar-se-á essencialmente nos aspectos específicos ao cálculo de escoamentos de fluidos não newtonianos e viscoelásticos.

A terminologia usada na lição segue, na medida do possível, as recomendações da Sociedade Portuguesa de Reologia que estão expostas na obra de Castro et al (2001). Aliás, esta obra apresenta no final um pequeno dicionário de reologia, mas a consulta do livro é indispensável para encontrar muitos dos termos.





## 2. Equações fundamentais

O cálculo numérico de um escoamento passa sempre pela resolução de duas equações de conservação e uma equação de estado. As equações de conservação são as da massa e da quantidade de movimento e a equação de estado é a equação constitutiva reológica. Se o problema envolver transferência de calor ou efeitos como a dissipação viscosa (que não pode ser desprezada quando os fluidos são muito viscosos, caso dos polímeros fundidos), haverá que juntar a este conjunto uma equação de conservação da energia térmica. Se estivermos perante um problema de extrusão pode haver ainda a necessidade de acrescentar uma equação de transporte de uma quantidade escalar relacionada com a posição de uma superfície livre, que vai depender da metodologia específica adoptada para seguir a posição dessa superfície. Para o cálculo da pressão é necessário resolver uma equação constitutiva termodinâmica, mas dado que os fluidos aqui estudados são considerados incompressíveis, a equação termodinâmica fica desacoplada das restantes e é utilizada para se determinar a massa específica do fluido. O escoamento é basicamente independente da pressão, mas variações de pressão são calculadas por intermédio da equação da conservação da massa, como se descreve detalhadamente mais adiante e no anexo.

Finalmente, pode ser necessária ainda a resolução de uma equação constitutiva térmica, mas conhecendo-se ainda muito pouco da ligação entre a cinética molecular de fluidos viscoelásticos e os fenómenos térmicos envolvendo fluidos de reologia complexa, ou então porque o tratamento adequado deste fenómeno é extremamente complexo (Bird e Curtiss, 1998; Curtiss and Bird, 1997), é prática corrente adoptar a lei de Fourier da condução, que aparece implicitamente na equação da energia. É também esta a filosofia aqui adoptada.

### 2.1. Equação de conservação da massa

Os fluidos não newtonianos são, regra geral, líquidos considerados incompressíveis pelo que a equação de conservação da massa é escrita em notação indicial como

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

onde  $u_i$  representa a componente do vector velocidade no sistema cartesiano,  $x_i$ . A notação indicial será usada ao longo deste texto aplicando-se também a regra da soma de índices de Einstein, o que significa que podemos expandir a Eq. (1) em

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

i.e., as direcções 1, 2 e 3 identificam-se com  $x$ ,  $y$  e  $z$  onde as componentes de velocidade são, respectivamente  $u$ ,  $v$ , e  $w$ . Para uma explicação mais desenvolvida de álgebra tensorial, o leitor poderá consultar as obras de Sedov (1971) e os apêndices de Bird et al (1987a, 2002).

Para determinados problemas transitórios, o comportamento do fluido pode depender da sua compressibilidade e a equação da conservação da massa deve então ser escrita na forma mais geral, mas esses casos são excluídos desta lição.

## 2.2. Equação de conservação da quantidade de movimento

A equação de conservação de quantidade de movimento para um fluido genérico apresenta-se em muitos textos (ex. Bird et al, 1987a) como sendo

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3)$$

Nesta equação vectorial para a componente de velocidade  $u_i$ ,  $t$  representa o tempo,  $p$  a pressão,  $\rho$  a massa específica do fluido,  $g_i$  é a aceleração da gravidade e  $\tau_{ij}$  é a componente  $ij$  do tensor das tensões, que é dado por uma das equações constitutivas reológicas a apresentar mais adiante.

## 2.3. Equação de conservação da energia térmica

A equação da energia para fluidos obedecendo à lei de Fourier da condução é dada pela Eq. (4)

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} S_{ij} + S \quad (4)$$

onde  $k$  é a condutibilidade térmica,  $c$  o calor específico e  $T$  a temperatura do fluido.  $S_i$  representa o termo fonte, que inclui qualquer outra parcela (por exemplo a geração interna de calor por acção de uma reacção química), sendo que se extraíu desse termo a interacção entre os tensores da tensão ( $\tau_{ij}$ ) e gradiente de deformação ( $S_{ij}$ ), representado pelo segundo termo do membro da direita. Para o caso de fluidos puramente viscosos, essa interacção representa a dissipação viscosa, mas no caso de fluidos viscoelásticos pode incluir armazenamento ou cedência elástica de energia (Bird et al, 2002). Em aplicações de engenharia envolvendo fluidos elásticos, como é a extrusão de polímero fundido, é frequente a dissipação viscosa ser responsável por mais de 50% da energia total fornecida ao fluido.

Esta equação, bem como a equação de conservação de quantidade de movimento, é uma equação de convecção-difusão, podendo ser reescrita de uma forma genérica para a grandeza  $\phi$ , como é recomendado por Patankar (1980)

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \quad (5)$$

onde  $\Gamma$  representa a difusividade molecular da quantidade transportada  $\phi$ .

### 3. Algumas propriedades reológicas de fluidos não newtonianos

Para melhor se perceberem os comportamentos dos modelos constitutivos reológicos referidos nesta lição é útil observar o comportamento de fluidos reais em escoamentos simples e de cinemática controlável ou quasi-controlável, que são aqueles normalmente implementados na reologia e que conduzem às propriedades reológicas dos fluidos. Esta observação permite-nos assim perceber facilmente o que distingue os fluidos newtonianos dos não newtonianos, identificando-se assim os comportamentos típicos.

#### 3.1. Viscosidade de corte, viscosimétrica ou de cisalhamento

A viscosidade de corte, viscosimétrica ou de cisalhamento define-se como o cociente entre a tensão de corte e a respectiva velocidade de deformação num escoamento de Couette (ver Figura 1), i.e.

$$\eta \equiv \frac{\tau_{12}}{dU_1/dx_2} = \frac{\tau_{12}}{\gamma} \quad (6)$$

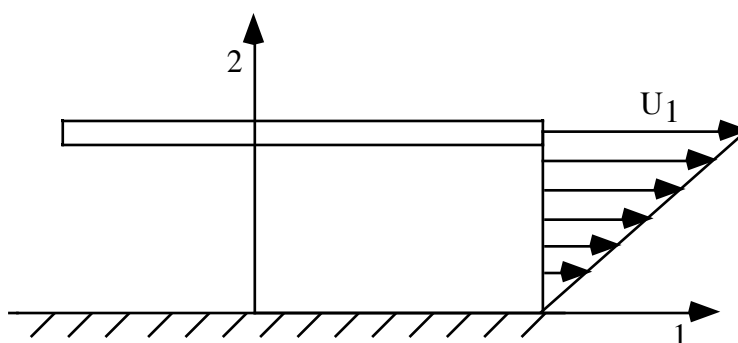


Figura 1- Um escoamento de Couette plano

Tipicamente, os fluidos mais comuns apresentam um comportamento reofluidificante no que diz respeito à viscosidade de corte, com um patamar de viscosidade constante e elevada a baixas velocidades de deformação, como se ilustra na Figura 2. Para alguns fluidos é possível encontrarmos ainda um segundo patamar de viscosidade constante a elevadas velocidades de deformação e para determinadas suspensões de partículas de formas irregulares a viscosidade pode também apresentar um comportamento reoespessante. Todos estes comportamentos estão ilustrados na Figura 2.

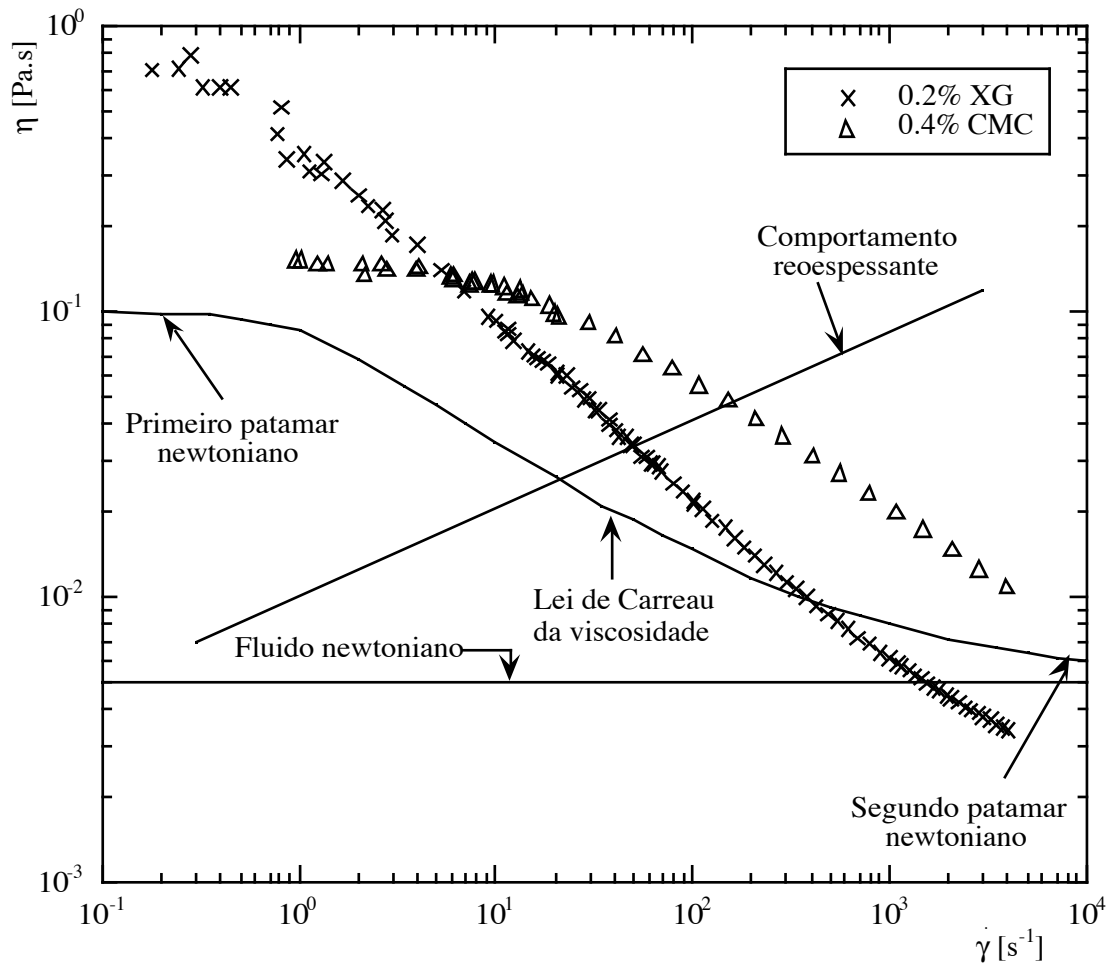


Figura 2- Comportamento viscoso de soluções poliméricas e sua comparação com modelos newtoniano e de Carreau. Concentrações em massa de XG (goma de xantano) e CMC (cellulose carboxi-metílica).

### 3.2. Tensão de cedência

Há fluidos em que não se observa o primeiro patamar newtoniano de viscosidade, mas pelo contrário a viscosidade a baixas velocidades de deformação tende a aumentar indefinidamente. Este caso configura fluidos que apresentam uma estrutura interna com alguma rigidez e que por isso dão origem ao aparecimento de uma tensão crítica mínima, que é necessário vencer para a ocorrência de escoamento — a tensão de cedência. Tais materiais apresentam assim um comportamento ambíguo, pois só se comportam como fluidos quando a tensão de cedência é excedida, comportando-se como sólidos no caso contrário. Exemplos destes fluidos são, por exemplo, a pasta dentífrica, a maionese, o sangue ou ainda várias suspensões de partículas, sobretudo se os solventes possuírem moléculas de elevado peso molecular.

O comportamento típico de um fluido com tensão de cedência está ilustrado na Figura 3: a Figura 3-a) mostra ainda o ajuste de um modelo de Herschel-Bulkley (HB, Eq. 7) à viscosidade de corte de uma suspensão de uma argila (a laponite), enquanto que a Figura 3-b) mostra a res-

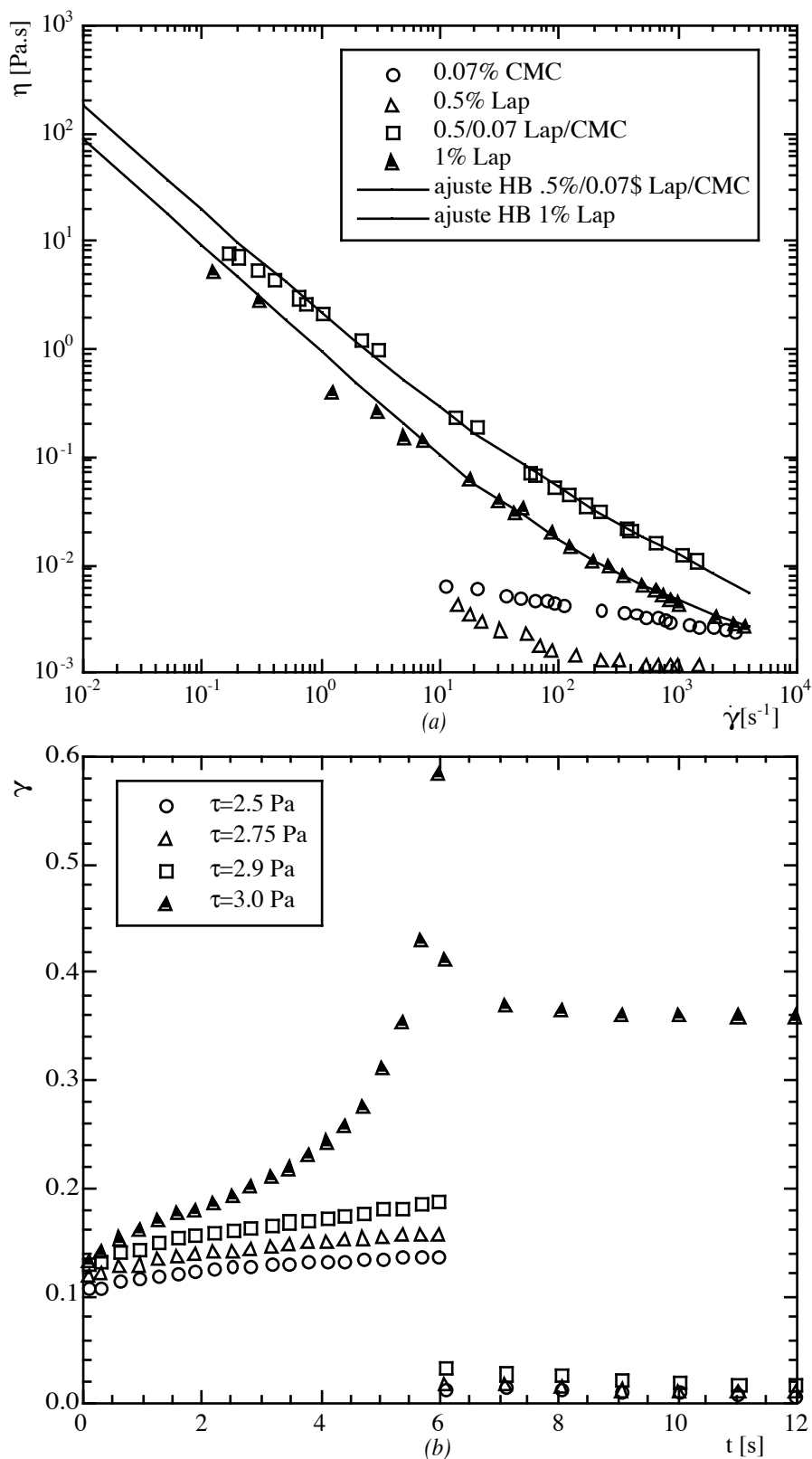


Figura 3- Comportamento de suspensões de laponite (Lap): (a) viscosidade viscométrica de equilíbrio; (b) Comportamento em ensaio de fluência de suspensão de 1% de laponite.

posta desse fluido a um ensaio de fluência, que constitui um dos métodos directos de medição da tensão de cedência

$$\tau = \tau_Y + K\dot{\gamma}^n \quad (7)$$

Como as suspensões de laponite são também fluidos de propriedades dependentes do tempo (neste caso fluidos tixotrópicos) cada ponto da Figura 3(a) corresponde de facto a condições de equilíbrio que se obtém ao fim de muito tempo, i.e. após solicitar o fluido a uma velocidade de deformação  $\dot{\gamma}$  constante, durante um tempo suficientemente longo para que a viscosidade de corte deixe de variar no tempo.

A determinação experimental da tensão de cedência pode fazer-se de forma indirecta ou directa. No método indirecto, ilustrado na Figura 3-a), a tensão de cedência obtém-se a partir do ajuste de uma equação, por exemplo o modelo de Herschel-Bulkley da Eq. (7), aos valores medidos da viscosidade de corte.

Uma das formas de medir directamente a tensão de cedência é através de um ensaio de fluência: neste caso aplica-se uma tensão de corte a uma amostra de fluido durante um intervalo de tempo e monitoriza-se a respectiva resposta em deformação. Se a tensão aplicada fôr inferior à tensão de cedência do material, após remoção da tensão, a deformação final do fluido é nula, mas haverá uma deformação residual quando a tensão excede o valor crítico. A Figura 3-b) mostra a resposta em fluência de uma suspensão aquosa de 1% de laponite em que a tensão crítica é da ordem de 2.9 Pa.

### 3.3. Coeficiente da primeira diferença de tensões normais

Se um fluido é elástico, no escoamento de Couette da Figura 1 podem desenvolver-se tensões normais que tendem a afastar as duas placas. Surge assim a definição da propriedade material  $\Psi_1$  designada por coeficiente da primeira diferença de tensões normais

$$\Psi_1 \equiv \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\gamma}^2} \quad (8)$$

O aparecimento desta diferença resulta da invariância do tensor das tensões que faz com que só duas das tensões normais sejam realmente independentes entre si. O coeficiente da segunda diferença das tensões normais relaciona as outras duas componentes da tensão normal ( $N_2 \equiv \tau_{22} - \tau_{33}$  é a segunda diferença das tensões normais).  $N_2$  é normalmente muito baixo, podendo atingir valores máximos da ordem dos 20% de  $N_1$ , mas de sinal contrário.

O comportamento típico de um fluido viscoelástico, no que diz respeito a  $\Psi_1$ , apresenta-se na Figura 4-a), onde se observa que no limite das baixas taxas de deformação o fluido apresenta um coeficiente constante a que corresponde um  $N_1 \rightarrow 0$ .

$N_1$  é responsável por alguns fenómenos espectaculares como o efeito de Weissenberg (Figura 4-b), que se observa num recipiente com um varão em rotação.

Embora o comportamento representado na Figura também seja do tipo reofluidificante, as tensões normais aumentam rapidamente porque  $N_1$  varia com o quadrado de  $\dot{\gamma}$ .

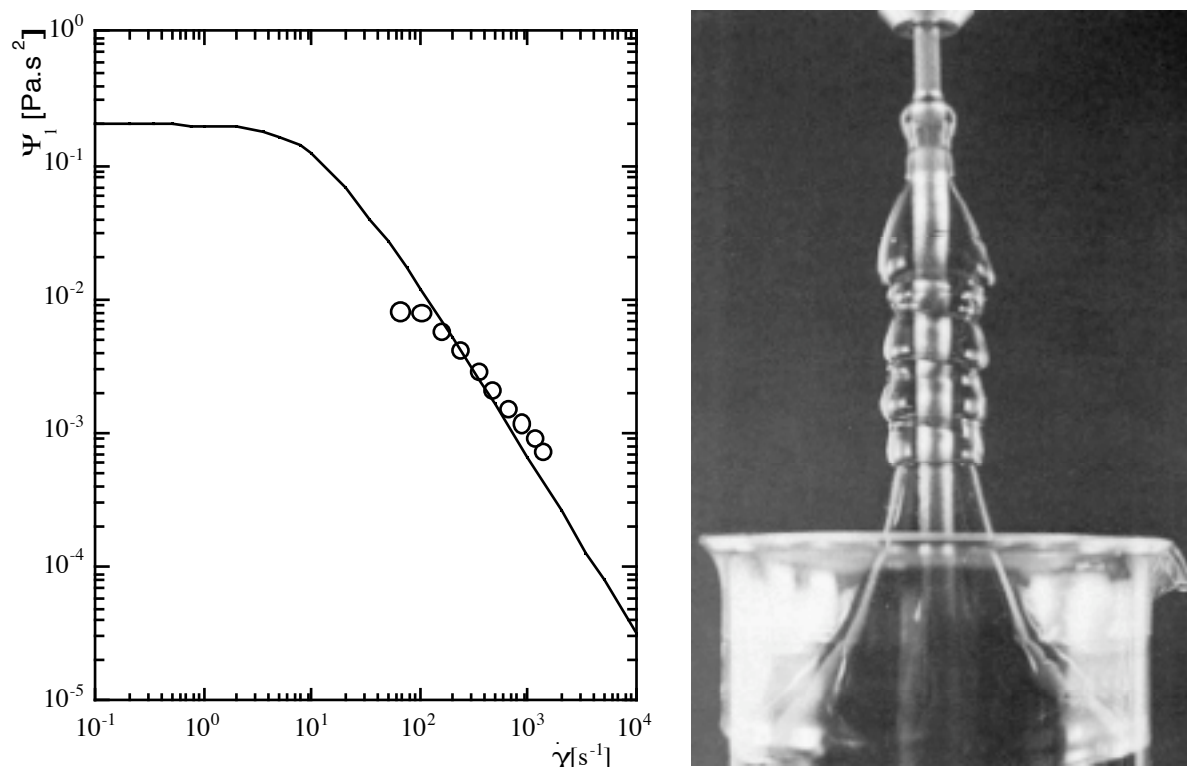


Figura 4- a) Variação de  $\Psi_1$  em função de  $\dot{\gamma}$  para fluidos viscoelásticos aqui representado pelo modelo Phan-Thien—Tanner com  $\varepsilon = 0.25$ ,  $\lambda = 0.1$  s,  $\eta = 1$  Pa.s e  $\xi = 0$ , Solução aquosa de 0.4% poliácrilamida (de Poole e Escudier, 2002): O. b) Efeito de Weissenberg (de Boger e Walters, 1993).

### 3.4. Módulos de conservação e dissipação

Se aplicarmos uma tensão oscilatória de baixa amplitude ( $\tau = \tau_0 \sin \omega t$ ) à placa superior da geometria da Figura 1, a deformação do fluido  $\gamma(t)$  não estará em fase nem com a tensão nem com a sua taxa de deformação  $\dot{\gamma}(t)$  se o fluido for viscoelástico, mostrando assim que o comportamento do fluido apresenta simultaneamente características viscosas e elásticas. A deformação do fluido é quantificada por  $\gamma(t) = \gamma_0 \sin(\omega t + \delta)$ , estando por isso desfasada de  $\delta$  em relação à tensão aplicada. Surgem assim os conceitos de módulo de dissipação ( $G''$ ) e conservação ( $G'$ ) definidos como

$$G' \equiv \frac{\tau_0}{\gamma_0} \cos \delta \quad (9-a)$$

$$G'' \equiv \frac{\tau_0}{\gamma_0} \sin \delta \quad (9-b)$$

que medem a quantidade de energia de deformação armazenada reversivelmente ( $G'$ ) e por isso recuperável, e a energia de deformação irreversivelmente perdida por efeito viscoso ( $G''$ ).

A Figura 5 mostra o comportamento de um fluido viscoelástico, no caso vertente uma solução aquosa diluída de goma de xantano. A resposta de um fluido newtoniano a um ensaio deste tipo é óbvia porque não sendo elástico se caracteriza por um ângulo de perdas máximo,  $\delta = \pi/2$ .

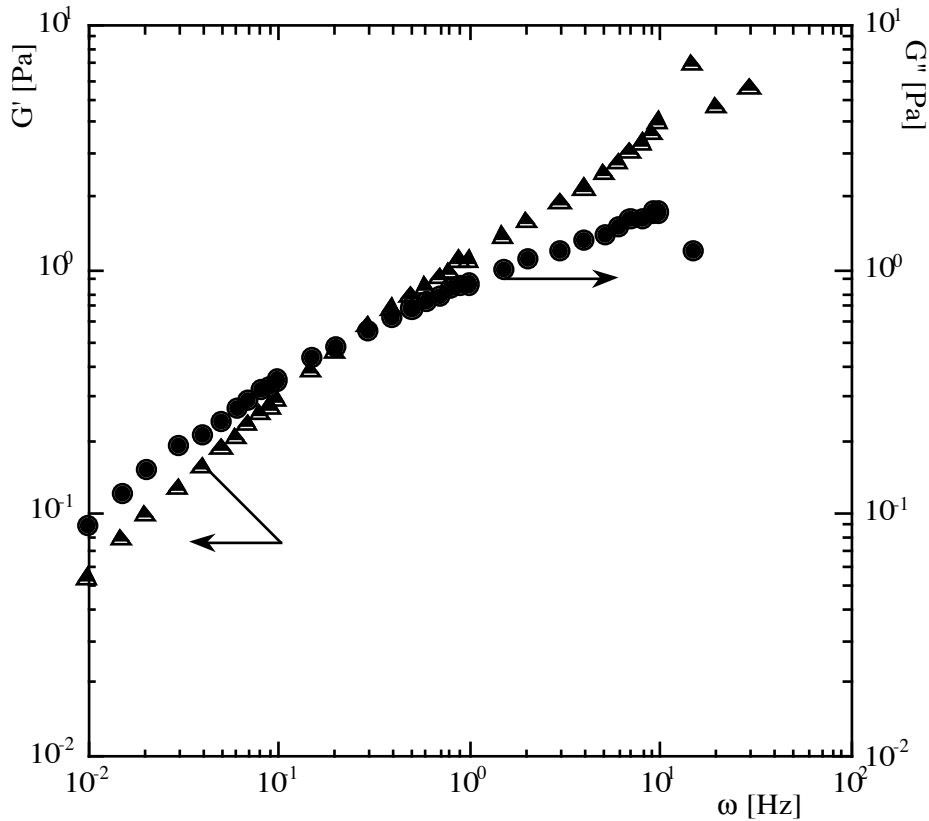


Figura 5- Resposta a um ensaio oscilatório de uma solução aquosa de 0.25% de goma de xantano.

### 3.5. Viscosidade extensional ou elongacional

Se sujeitarmos uma amostra de fluido a um escoamento extensional, como por exemplo o que se verifica numa contracção ou num ensaio de tracção (ver Figura 6), o cociente entre a diferença de tensões normais e a velocidade de deformação normal longitudinal designa o que se convencionou chamar de viscosidade extensional ou elongacional,  $\eta_E$ .

$$\eta_E \equiv \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\frac{\partial u_1}{\partial x_1}} = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\epsilon} \quad (10)$$



Figura 6- Representação esquemática de um escoamento com forte deformação extensional a velocidade de deformação ( $\epsilon$ ) constante : a) Escoamento numa contracção gradual b) Extensão uniaxial.



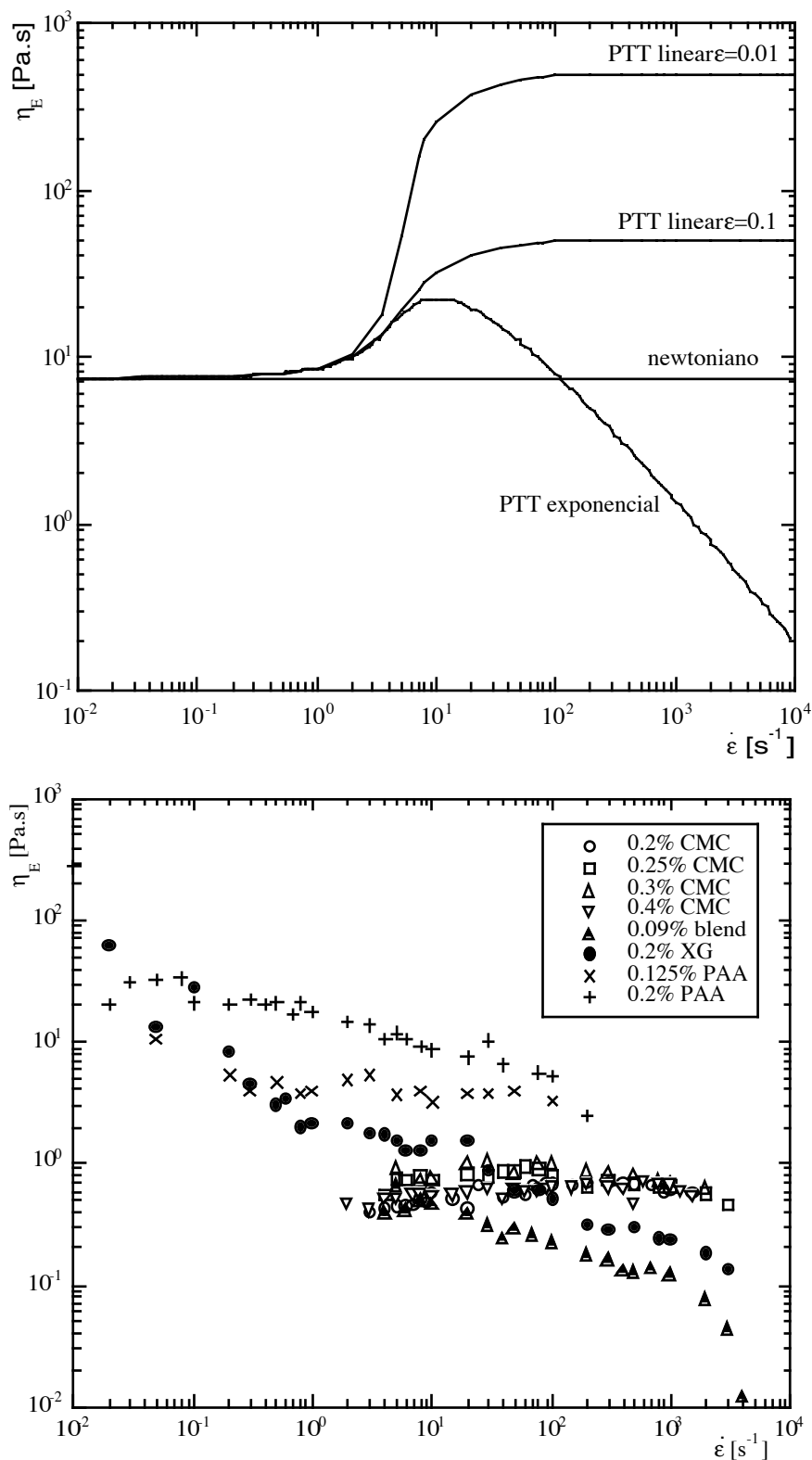


Figura 7- Variação da viscosidade extensional de vários fluidos: (a) Modelo newtoniano e de Phan-Thien—Tanner; (b) Várias soluções aquosas diluídas e semi diluídas de polímero, medida pelo reômetro de jactos opostos (de Escudier et al, 1999).

É importante notar que todos os fluidos possuem uma viscosidade elongacional, que no caso do fluido puramente viscoso (também designado de fluido de Stokes) é igual a três vezes a

viscosidade de corte. Aquilo que caracteriza inúmeros fluidos viscoelásticos é o facto dessa razão de viscosidades poder exceder largamente o valor de 3 e também a sua dependência da velocidade de deformação normal,  $\dot{\epsilon}$ . A Figura 7-a) ilustra alguns comportamentos típicos da viscosidade elongacional de fluidos viscoelásticos.

Não é fácil medir esta propriedade dada a dificuldade em garantir que as partículas de fluido sintam uma velocidade de deformação constante durante um intervalo de tempo suficientemente longo para eliminar efeitos transitórios. Este problema é especialmente agudo para fluidos de baixa consistência em que  $\eta_E$  só pode ser medido normalmente em escoamento do tipo contracção súbita, ou jacto oposto, tratando-se por isso de uma viscosidade extensional que não é pura. É para esse tipo de fluidos pouco consistentes que a Figura 7-b) mostra alguns resultados de medições da viscosidade extensional de soluções aquosas diluídas e semi-diluídas de polímero, obtidas com o indexador de jactos opostos.

Há outras variantes da viscosidade elongacional, relacionadas com diferentes tipos de escoamento extensional, que não serão aqui abordadas, mas que apresentam o mesmo tipo de comportamento de um ponto de vista qualitativo (por exemplo, as viscosidades extensionais biaxial e plana). O leitor interessado poderá consultar a obra de Bird et al (1987), para uma apresentação mais exhaustiva desta propriedade.

### *3.6. Outras propriedades reológicas*

Esta apresentação de propriedades reológicas de fluidos foi propositadamente simples e restrita por razões óbvias de espaço e tempo. No entanto, há que referir outras propriedades igualmente importantes como o coeficiente da segunda diferença de tensões normais ( $\Psi_2$ ), a resposta de fluidos a testes de fluência e relaxação de tensões e a tixotropia dos fluidos.

Finalmente, é cada vez mais importante atender à resposta dos fluidos e modelos reológicos a escoamentos de corte e extensional em regime não-estacionário. A literatura da especialidade (Lielens et al, 1999) mostra claramente que modelos constitutivos reológicos adequados a prever correctamente as propriedades dos fluidos em ensaios em regime permanente falham por vezes na resposta desses mesmos fluidos se os ensaios decorrerem em regime transitório.

#### 4. Alguns modelos constitutivos reológicos

A tensão  $\tau_{ij}$  na equação de conservação de quantidade de movimento (Eq. 3) exprime o comportamento do fluido através de uma equação constitutiva reológica adequada. Esta deverá ser capaz de prever, o mais correctamente possível, a reologia do fluido que é relevante para o escoamento em estudo. Nem sempre é fácil identificar tal equação, nem mesmo a totalidade das propriedades reológicas relevantes numa situação em que o escoamento não é simples, sendo esta uma das dificuldades da mecânica dos fluidos não newtonianos que abordaremos no capítulo 5. Neste capítulo, faremos simplesmente uma breve descrição de alguns dos modelos constitutivos reológicos mais utilizados.

A equação constitutiva reológica relaciona o campo de tensões num ponto do espaço e num instante de tempo com a história das deformações e velocidades de deformação desse fluido. Esta relação pode ser mais ou menos complexa, envolvendo ou não quantidades cinemáticas no próprio instante de tempo ou ao longo de tempos do passado dependendo do tipo de equação adoptada. Nesta lição concentrar-nos-emos essencialmente em modelos não-integrais, eliminando-se por isso as equações que integram a história da deformação ao longo do tempo. Esta é uma família de modelos importante que o método dos volumes finitos ainda não manipula correctamente, mas que constituirão certamente uma área de trabalho futuro.

Nesta breve descrição concentrar-nos-emos assim em modelos do tipo diferencial e distinguiremos duas grandes famílias a saber: os modelos explícitos e os modelos implícitos na tensão. Esta distinção é importante não só de um ponto de vista físico, pois alguns efeitos de elasticidade de fluidos implicam necessariamente um modelo implícito (como o efeito de memória), mas também na perspectiva da metodologia a adoptar para a resolução numérica dos problemas.

No grupo dos modelos explícitos enquadram-se os modelos do tipo newtoniano generalizado e as expansões em série de potência e seus derivados, como o modelo Criminale- Eriksen- Filbey (CEF). Por razões exclusivamente numéricas, nos modelos newtonianos generalizados devemos ainda distinguir os modelos com e sem tensão de cedência.

No grupo dos modelos implícitos surgem os modelos diferenciais quasi-lineares e não-lineares, onde a relação constitutiva é uma equação às derivadas parciais da tensão. Estes modelos são actualmente utilizados na grande maioria dos cálculos com fluidos viscoelásticos.

Finalmente, mas só no final da lição, falaremos dos modelos do tipo integral na perspectiva de futuros desenvolvimentos e trabalhos. Os modelos integrais também são modelos explícitos na tensão, mas requerem um grande esforço de cálculo e só muito recentemente foram dados passos importantes, que permitem a sua utilização em formulações de tipo Euleriana. Os modelos integrais actualmente utilizados com alguma frequência em cálculos de fluidos viscoelásticos são versões simplificadas, que não requerem tanto esforço computacional como o modelo separável K-BKZ. Os modelos integrais serão certamente utilizados a médio prazo em inúmeras simulações numéricas, mas o seu uso necessita ainda de avanços ao nível dos métodos

numéricos e das capacidades informáticas para que os respectivos custos se tornem comportáveis.

#### 4.1. Modelo de fluido de Newton

Antes de prosseguir, vale a pena definir o que é um fluido não newtoniano. Isso não é fácil, dada a grande variedade de características, e por isso, a definição mais simples de um fluido não newtoniano é a negação da definição de fluido newtoniano, já que este constitui de facto um caso muito particular.

Um fluido de Newton não apresenta qualquer tipo de memória, é puramente viscoso e tem uma viscosidade constante, excepto no que diz respeito ao efeito da temperatura e pressão. As suas propriedades não têm qualquer tipo de dependência do tempo ou de estados de deformação anteriores e a tensão desviatória (ou tensor das extratensões) para o fluido newtoniano obedece à relação linear

$$\tau_{ij} = 2\eta S_{ij} + \lambda' \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad \text{ou} \quad \tau_{ij} = 2\eta S_{ij} + \left( \mu' - \frac{2}{3}\eta \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (11)$$

onde  $\eta$  é o coeficiente de viscosidade, que é constante, e  $S_{ij}$  é o tensor velocidade de deformação que se define como

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (12)$$

Como os fluidos a estudar aqui se apresentam no estado líquido, o vector velocidade é um solenóide e torna-se irrelevante a quantificação do coeficiente  $\lambda'$ , que está relacionado com a expansão volumétrica (ou dilatação do fluido), reduzindo-se a equação (11) a

$$\tau_{ij} = 2\eta S_{ij} \quad (13)$$

No entanto, em situações em que haja fenómenos de compressibilidade ou por razões de estabilidade numérica, é necessário ou há vantagens em manter o termo de dilatação. Para que a tensão seja desviatória,  $\lambda' = -\frac{2}{3}\eta$ . Como vemos na Eq. (11), por vezes prefere-se utilizar uma outra propriedade, designada de viscosidade de dilatação ou dilatacional  $\mu'$ , mas a sua quantificação é ainda assunto de alguma discussão e controvérsia (ver Schlichting e Gersten, 1999), sendo no entanto prática corrente a adopção da hipótese de Stokes ( $\mu' = 0$ ), que garante que a tensão seja desviatória. A viscosidade dilatacional define-se a partir da relação entre pressão termodinâmica ( $p$ ) e pressão mecânica (simétrico de  $\bar{\sigma} = -p + \mu' \partial u_i / \partial x_i$  com  $\mu' = \lambda' + \frac{2}{3}\eta$ ), considerando ainda o conceito de tensão total (ver White (1991) ou Schlichting e Gersten (1999)).

Um fluido não newtoniano pode agora definir-se como todo aquele que não obedece às equações (11) ou (13).

#### 4.2- Modelo do fluido newtoniano generalizado

O modelo não newtoniano mais simples é explícito na tensão e é uma extensão do modelo newtoniano, com a viscosidade a ser uma função da velocidade de deformação local do fluido. Por esta razão designa-se este modelo como fluido newtoniano generalizado (sigla GNF do inglês “Generalized Newtonian Fluid”), cuja equação constitutiva se escreve como

$$\tau_{ij} = \eta(\dot{\gamma}) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (14)$$

já que se usou novamente a hipótese de Stokes.

A viscosidade viscosimétrica  $\eta$  é agora uma função de invariantes do tensor velocidade de deformação  $S_{ij}$  (Eq. 12), de que o exemplo mais conhecido é a lei de potência da viscosidade ou modelo de Ostwald-De Waele

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (15)$$

sendo  $\dot{\gamma}$  definido com base no segundo invariante de  $S$ ,  $\dot{\gamma} \equiv \sqrt{2 \text{tr} S^2}$  (note-se que  $II_S \equiv \frac{1}{2} [\text{tr} S^2 - (\text{tr} S)^2]$ ,  $\text{tr} S = 0$  (fluido incompressível) e  $\text{tr} S^2 = S_{ij} S_{ij}$ ). Na Eq. (15),  $K$  e  $n$  representam os índices de consistência e de lei de potência, respectivamente.

No modelo newtoniano generalizado são possíveis outras funções para  $\eta(\dot{\gamma})$ , como o modelo de viscosidade de Carreau

$$\eta(\dot{\gamma}) = (\eta_0 - \eta_\infty) \left[ 1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} + \eta_\infty \quad (16)$$

onde  $\eta_0$ ,  $\eta_\infty$ ,  $\lambda$  e  $n$  são parâmetros, o modelo de Carreau simplificado

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 \left[ 1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (17)$$

Nas Eqs. (16) e (17)  $\lambda$  representa o inverso da velocidade de deformação que marca a transição entre as regiões de viscosidade constante e de lei de potência. O parâmetro  $a$  determina a taxa a que a viscosidade do modelo muda da região de lei de potência para a região de viscosidade constante na vizinhança de  $\dot{\gamma} = 1/\lambda$ . O valor mais comum é  $a=2$ , caso em que se recupera o modelo de Carreau simplificado. Para valores mais elevados a transição entre essas duas regiões será mais brusca.

O modelo de Sisko é

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 + K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (18)$$

e o de Cross é

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + \frac{\eta_0 - \eta_\infty}{1 + \alpha \dot{\gamma}^n} \quad (19)$$

entre outros. A Figura 8 compara o comportamento destes vários modelos no que diz respeito à viscosidade viscosimétrica. De notar que só os modelos com pelo menos 3 parâmetros são capazes de prever o primeiro patamar newtoniano de viscosidade.

Estes vários modelos podem de facto escrever-se de forma compacta através de um única equação

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left[ 1 + (\lambda \dot{\gamma})^a \right]^{\frac{(n-1)}{a}} \quad (20)$$

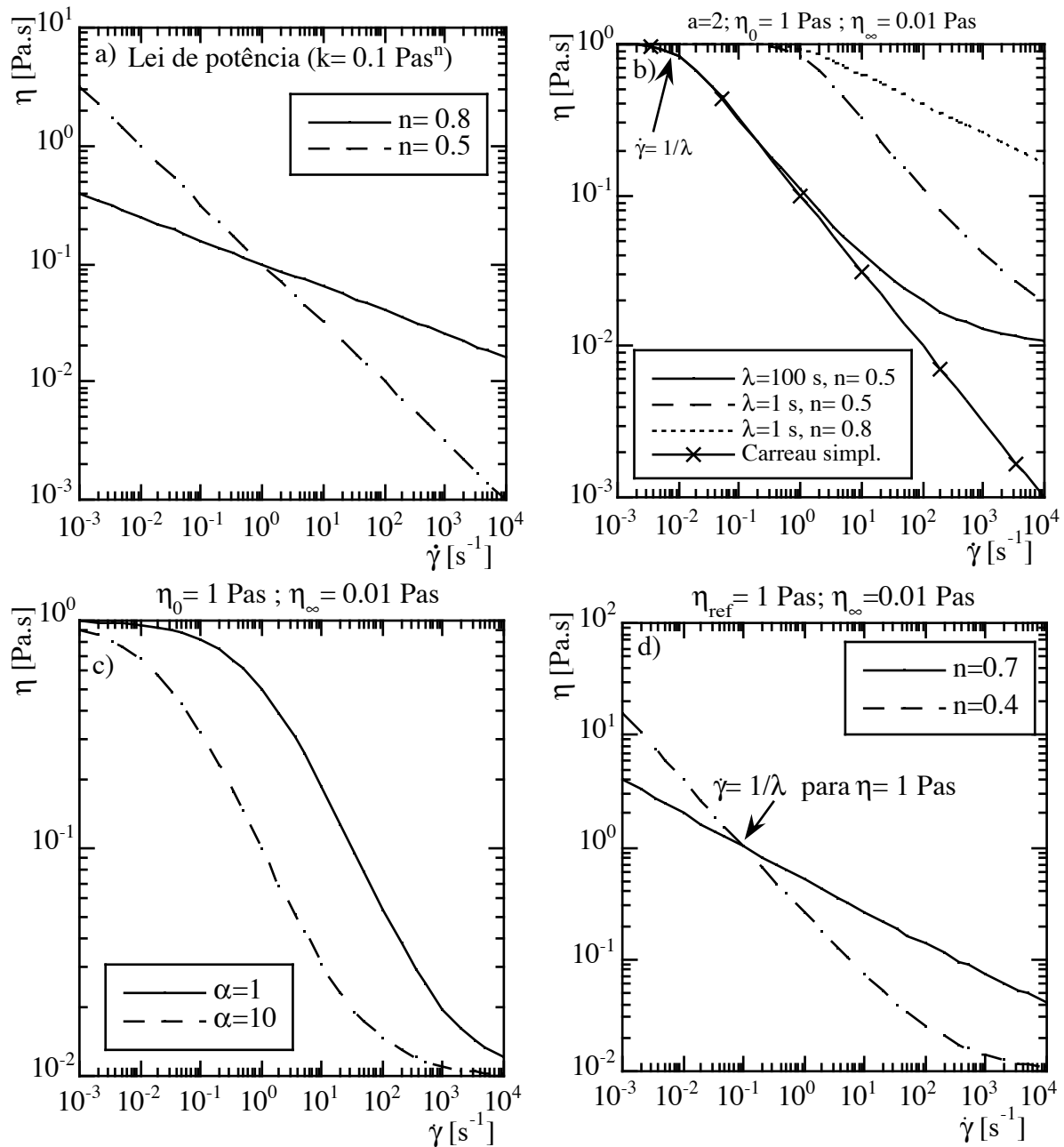


Figura 8- Variação da viscosidade de corte em função da velocidade de deformação para alguns modelos de viscosidade típicos: a) Lei de potência; b) Carreau- Yasuda e de Carreau simplificado; c) Cross; d) Sisko.

A metodologia de cálculo para fluidos GNF é independente da função adoptada para a viscosidade, já que ela é tratada de uma forma semelhante à formulação newtoniana com viscosidade variável (devido ao efeito da temperatura e pressão ou à turbulência), desde que o fluido não apresente tensão de cedência, como se verá no capítulo 6. De facto, do ponto de vista

da resolução numérica das equações de conservação da quantidade de movimento, uma viscosidade variável como a que ocorre com fluidos GNF, é em tudo semelhante à viscosidade turbulenta aparente de alguns modelos clássicos de turbulência para fluidos newtonianos (por exemplo o modelo  $k-\epsilon$ ). Por isso, desde muito cedo, o cálculo de fluidos newtonianos generalizados tornou-se trivial e os seus resultados relativamente extensos (Shin e Cho, 1994), estando este tipo de modelos constitutivos reológicos implementados na grande maioria dos códigos comerciais. A exceção, como veremos, é a dos escoamentos de fluidos com tensão de cedência.

Quando se usam modelos newtonianos generalizados é necessário, apesar de tudo, ter o cuidado especial de iniciar o campo de viscosidades moleculares sempre que o modelo de viscosidade adoptado seja o da lei de potência, para evitar o aparecimento de singularidades matemáticas quando  $\dot{\gamma} = 0$ . Outra solução deste problema é o recurso a um modelo de viscosidade com um limitador, que é equivalente a um modelo com um patamar newtoniano de viscosidade a baixas velocidades de deformação.

#### 4.3. Modelos para fluidos com tensão de cedência

Os fluidos newtonianos generalizados sem tensão de cedência caracterizam-se por apresentarem velocidades de deformação não-nulas, desde que as tensões aplicadas sejam também não-nulas. Contudo, como se viu no capítulo 3, há materiais que apresentam características intermédias de sólido e fluido, só se escoando quando as tensões aplicadas excedem um valor crítico, a que se convencionou chamar tensão de cedência  $\tau_y$  (ver Figura 9). Nos fluidos com tensão de cedência a viscosidade é infinita quando  $\tau < \tau_y$ . Isso introduz problemas numéricos nas regiões do escoamento em que a tensão seja inferior ao valor crítico. A solução deste problema discute-se no capítulo 6.

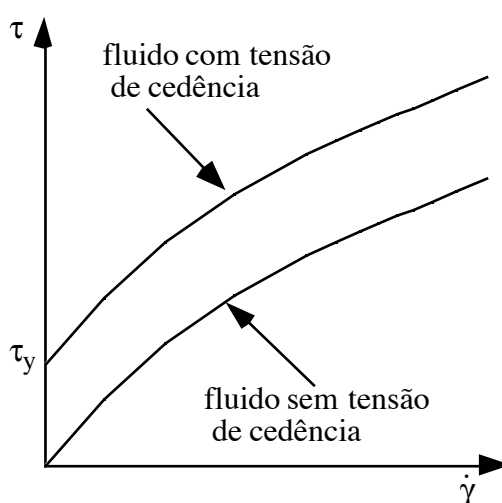


Figura 9- Distinção entre o comportamento de um fluido sem e com tensão de cedência.

O modelo mais simples para fluidos com tensão de cedência é o modelo do plástico de Bingham dado pela equação

$$\tau_{ij} = \eta(\dot{\gamma}) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad \text{com} \quad \eta(\dot{\gamma}) = \mu + \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} \quad \text{para} \quad \tau > \tau_Y$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} = 0 \quad \text{para} \quad \tau < \tau_Y \quad (21)$$

onde  $\tau$  também está relacionado com o segundo invariante do tensor das tensões que é definido como  $\tau = \sqrt{\frac{1}{2} tr \tau^2} = \sqrt{\frac{1}{2} \tau_{ij} \tau_{ij}}$ , porque o tensor  $\tau_{ij}$  é desviatório.

Outros modelos para a função viscosidade típicos de fluidos com tensão de cedência são o modelo de Herschel-Bulkley, que combina a tensão de cedência e a lei de potência

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} + \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} \quad (22)$$

ou o modelo de Casson, muito utilizado para o sangue e que só possui 2 parâmetros numéricos

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \quad \text{com} \quad \sqrt{\tau} = \sqrt{\tau_Y} + \sqrt{\mu_\infty \dot{\gamma}} \quad (23)$$

Também é possível generalizar todos estes modelos com uma única equação, a equação (24)

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} + \mu_\infty + (\mu_0 - \mu_\infty) \left[ 1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{\frac{(n-1)}{2}} \quad (24)$$

#### 4.4. Modelos viscoelásticos explícitos

Os modelos apresentados nas Secções 4.2 e 4.3 são capazes de prever o comportamento puramente viscoso dos fluidos não newtonianos com o grau de precisão desejável, mas são incapazes de prever qualquer característica elástica.

Ora, no domínio dos modelos explícitos na tensão, há equações capazes de prever algumas das características dos escoamentos de fluidos viscoelásticos. Um desses modelos só deve ser utilizado para estudo de escoamentos do tipo viscosimétrico estacionários, mas neste caso permite obter resultados precisos (Bird et al, 1987a). Trata-se do modelo constitutivo de Criminale-Eriksen-Filbey (CEF), que é escrito indiferentemente nas duas formas da Eq. (25)

$$\tau_{ij} = 2\eta(\dot{\gamma}) S_{ij} + [2\Psi_1(\dot{\gamma}) + 4\Psi_2(\dot{\gamma})] S_{ik} S_{kj} - \Psi_1(\dot{\gamma}) \frac{DS_{ij}}{Dt} \quad (25-a)$$

$$\tau_{ij} = 2\eta(\dot{\gamma}) S_{ij} - \Psi_1(\dot{\gamma}) S_{ij}^\nabla + 4\Psi_2(\dot{\gamma}) S_{ik} S_{kj} \quad (25-b)$$

Nestas equações  $D/Dt$  representa a derivada de Jaumann e  $S_{ij}^\nabla$  indica a derivada convectiva superior, ambas definidas nas Eqs. (26-a,b)

$$\frac{DS_{ij}}{Dt} \equiv \frac{\partial S_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_k} + (\Omega_{ik} S_{kj} - S_{ik} \Omega_{kj}) \quad (26-a)$$

$$S_{ij}^\nabla \equiv \frac{\partial S_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_k} - S_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - S_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \quad (26-b)$$

O tensor velocidade de distorção ou vorticidade  $\Omega_{ij}$  é definido por



$$\Omega_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (27)$$

Outros modelos explícitos na tensão para fluidos viscoelásticos podem ser obtidos a partir da Eq. (25), tornando todos os seus coeficientes constantes e independentes de  $\dot{\gamma}$  (fluido de segunda ordem) e anulando  $\Psi_2$  (equação de Reiner-Rivlin). Estes modelos, que fazem parte da família dos modelos em série de potência da velocidade de deformação e suas derivadas convectivas, são de aplicação limitada a fluidos levemente elásticos, que pouco se desviam do fluido newtoniano e para escoamentos de baixo número de Débora. De facto, a sua aplicação deve limitar-se a escoamentos lentos, aqueles em que os tensores cinemáticos variam muito lentamente. A sua utilização fora destes limites resulta em respostas fisicamente incorrectas. Por isso são sobretudo usados para investigar perturbações e tendências de comportamento devido ao efeito da elasticidade e em relação ao comportamento de um fluido de Stokes.

#### 4.5. Modelos implícitos na tensão para fluidos viscoelásticos

Os modelos viscoelásticos actualmente mais utilizados são do tipo diferencial implícito, e neste grupo a equação mais simples é a do modelo convectivo superior de Maxwell ou Maxwell contravariante<sup>1</sup> (sigla UCM do inglês “Upper Convected Maxwell”), que é dado pela equação

$$\tau_{ij} + \lambda \left( \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} \right) = \eta_p \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \left( \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (28)$$

onde  $\lambda$  representa o tempo de relaxação do fluido. O modelo UCM apresenta uma viscosidade viscosimétrica constante e igual a  $\eta_p$ , uma primeira diferença de tensões normais ( $N_1$ ) não nula, mas de coeficiente constante  $\Psi_1 = 2\eta_p\lambda$ , e a segunda diferença de tensões normais ( $N_2$ ) é nula.

Embora o modelo de Maxwell contravariante seja simples do ponto de vista reológico, ele é o modelo numericamente mais problemático devido à sua tendência para tensões normais ilimitadas quando a taxa de deformação tende para  $1/(2\lambda)$  o que invariavelmente origina a divergência dos métodos de cálculo. Isto acontece porque a viscosidade extensional do modelo de Maxwell contravariante é dada por

$$\eta_E = 3\eta_p \frac{1}{(1 + \lambda\dot{\epsilon})(1 - 2\lambda\dot{\epsilon})} \quad (29)$$

Por esta razão é típico o recurso ao modelo UCM aquando do desenvolvimento de métodos de cálculo numérico, já que uma metodologia robusta no cálculo de escoamentos destes fluidos é também robusta com qualquer outra equação constitutiva reológica, excepto se este possuir também outras singularidades matemáticas.

O modelo de Maxwell convectivo e outros modelos quase-lineares e não-lineares, surgiram pela necessidade de obrigar as equações de estado constitutivas lineares a serem objectivas, i.e. a serem independentes do movimento dos eixos dos sistemas de coordenadas utilizados. Esse

<sup>1</sup> Existe também um modelo de Maxwell covariante ou convectivo inferior que prevê características físicas irrealistas, nomeadamente  $\Psi_2 = -\Psi_1$ . Por essa razão esse modelo caiu em desuso e o termo modelo convectivo refere-se invariavelmente à versão contravariante ou convectiva superior.

desiderato é conseguido substituindo a simples derivada no tempo dos modelos lineares, e que só são válidos no limite de gradientes de deformação infinitesimalmente pequenos, pelas derivadas de Oldroyd ou convectivas (Eq. 26-b). O exemplo mais conhecido desta substituição resulta exactamente no modelo de Maxwell contravariante a partir do modelo de Maxwell.

Apesar desta transformação, o modelo de Maxwell convectivo e outros modelos quasi-lineares e não-lineares, comportam-se como o modelo viscoelástico linear de Maxwell, no que diz respeito às propriedades no escoamento oscilatório de corte (módulos de conservação  $G'$  e de dissipação  $G''$ ) que são dados por

$$G' = \frac{\eta_p \lambda \omega^2}{1 + (\lambda \omega)^2} \quad (30-a)$$

$$G'' = \frac{\eta_p \omega}{1 + (\lambda \omega)^2} \quad (30-b)$$

A figura 10 ilustra o comportamento destas duas quantidades em função da frequência de oscilação.

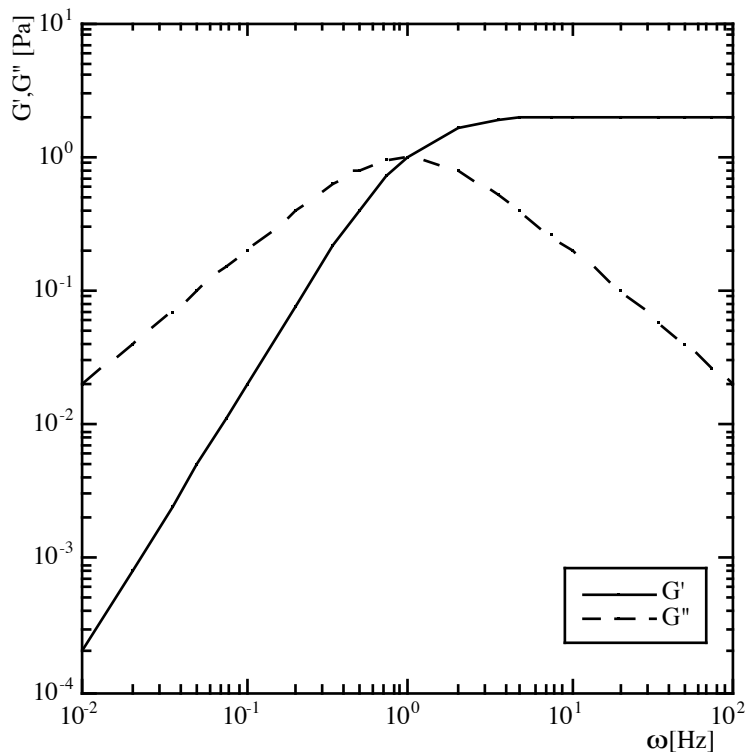


Figura 10- Comportamento dos módulos de conservação  $G'$  e de dissipação  $G''$  do modelo de Maxwell convectivo ( $\eta_p = 2$  Pa.s,  $\lambda = 1$  s).

Embora do ponto de vista físico, o modelo de Maxwell contravariante seja relativamente limitado, dado que prevê alguns comportamentos que não são observados na maioria dos fluidos, nomeadamente  $\eta$  e  $\Psi_1$  constantes, ele prevê bem o comportamento real de muitos fluidos em termos dos módulos de conservação e dissipação, sobretudo quando na versão multimodo. Além disso, este modelo tem a virtude de não ser puramente empírico e poder ser deduzido a partir da

teoria cinético molecular mediante a formulação de algumas hipóteses simplificativas, o que nem sempre é o caso, sobretudo com equações constitutivas mais complexas. Dadas as suas propriedades, o modelo de Maxwell contravariante está sobretudo limitado a ser usado em combinação com outros modelos, como o modelo newtoniano.

O modelo viscoelástico imediatamente mais complexo é o modelo de Oldroyd-B definido pelas Eqs. (31), e que se caracteriza por representar a soma de um solvente newtoniano com uma molécula polimérica, obedecendo ao modelo de Maxwell contravariante

$$\tau_{ij} = \eta_s \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \tau_{ijP} \quad (31-a)$$

$$\tau_{ijP} + \lambda \left( \frac{\partial \tau_{ijP}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ijP}}{\partial x_k} \right) = \eta_p \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \left( \tau_{jkP} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ikP} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (31-b)$$

O modelo de Oldroyd-B, à semelhança do modelo de Maxwell convectivo prevê  $N_2 = 0$  e uma viscosidade de corte constante  $\eta = \eta_s + \eta_p$ , mas também sofre da singularidade na viscosidade extensional. Contudo, a convergência numérica deste modelo é geralmente mais fácil, devido à presença do solvente que introduz alguma difusão na equação de conservação de quantidade de movimento. Esta característica depende essencialmente da razão de viscosidades  $\eta_s / (\eta_s + \eta_p)$ ; quanto maior for esta razão, mais facilitada vem a convergência iterativa dos métodos numéricos. O coeficiente  $\Psi_1$  também é constante e idêntico ao do modelo de Maxwell convectivo ( $\Psi_1 = 2\eta_p \lambda$ ).

Quanto às respostas deste modelo nos ensaios oscilatórios de corte e no escoamento extensional, elas só diferem das correspondentes respostas no modelo de Maxwell convectivo, devido à presença do solvente newtoniano. Assim,  $G'$  não vem alterado, mas  $G''$  e  $\eta_E$  são dados pelas Eqs. (32) e (33)

$$G'' = \eta_s \omega + \frac{\eta_p \omega}{1 + (\lambda \omega)^2} \quad (32)$$

e

$$\eta_E = 3\eta_s + \frac{3\eta_p}{(1 + \lambda \varepsilon)(1 - 2\lambda \varepsilon)} \quad (33)$$

A Figura 11 mostra o comportamento da viscosidade extensional dos fluidos de Maxwell contravariante e Oldroyd-B.

Do ponto de vista prático, o modelo Oldroyd-B é adequado a prever o comportamento de alguns fluidos nalgumas situações, os chamados fluidos de Boger que apresentam uma viscosidade constante,  $\Psi_1$  aproximadamente constante e ainda  $\Psi_2$  nulo. Os fluidos de Boger são, regra geral, soluções poliméricas diluídas em solventes newtonianos de elevada viscosidade, mas também é possível fabricá-los com solventes de viscosidade moderada desde que estes sejam solventes pobres (Stokes et al, 2001).

A previsão de uma viscosidade variável e de uma variação não-linear das tensões normais obriga-nos a recorrer a modelos mais complexos, como por exemplo, os modelos de Phan-

Thien—Tanner (PTT), de Giesekus e de White-Metzner, entre outros, podendo o leitor interessado ter uma perspectiva mais geral das suas propriedades e comportamentos consultando as obras de Larson (1988), Bird et al (1987a,b) e mais recentemente Larson (1999), Tanner (2000) e Huilgol e Phan-Thien (1997).

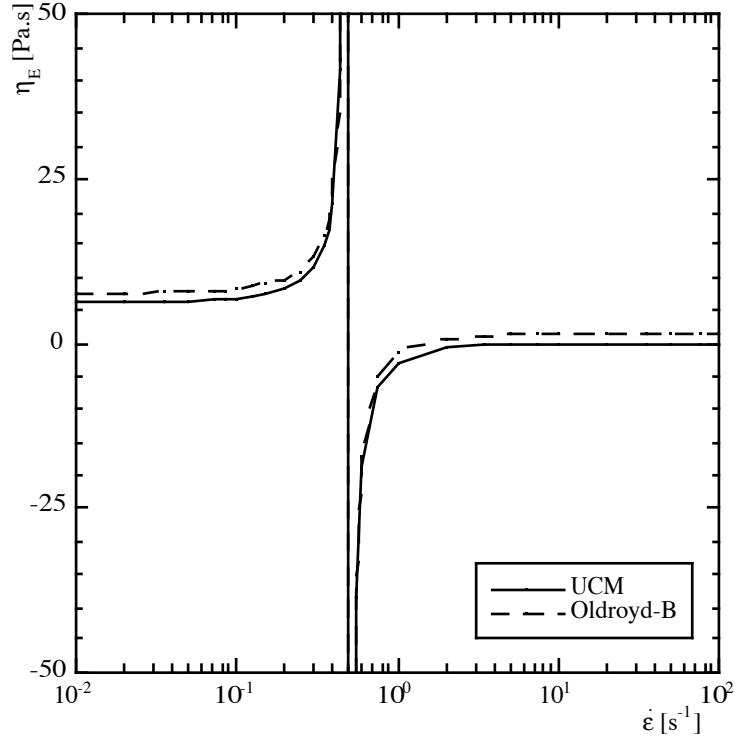


Figura 11- Viscosidade extensional dos modelos de Maxwell convectivo (UCM) e de Oldroyd -B:  $\eta_p = 2$  Pa.s,  $\eta_s = 0.5$  Pa.s,  $\lambda = 1$  s).

O modelo de Phan-Thien—Tanner é dado pela Eq. (34)

$$f(\tau_{kk})\tau_{ij} + \lambda \left[ \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \xi (\tau_{jk} D_{ik} + \tau_{ik} D_{jk}) \right] = \eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (34)$$

e possui dois parâmetros novos ( $\varepsilon$  e  $\xi$ ). A função  $f()$  é uma função exponencial do traço do tensor das tensões

$$f(\tau_{kk}) = \exp\left(\frac{\varepsilon \lambda}{\eta} \tau_{kk}\right) \quad (35-a)$$

que por vezes pode ser linearizada a partir da respectiva expansão em série de Taylor

$$f(\tau_{kk}) = 1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta} \tau_{kk} \quad (35-b)$$

Neste modelo  $\varepsilon$  é um parâmetro que limita a viscosidade extensional, a qual é proporcional ao inverso de  $\varepsilon$ . Quanto ao parâmetro  $\xi$ , ele contabiliza o deslizamento da rede molecular em relação ao meio contínuo. Quer este modelo, quer o modelo de Giesekus da Eq. (36)

$$\tau_{ij} + \lambda \left( \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) + \frac{\alpha \lambda}{\eta} \tau_{ik} \tau_{kj} = \eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (36)$$

caracterizam-se por preverem tensões normais transversais ( $\tau_{22}$ ) num escoamento de corte de que resulta uma segunda diferença de tensões normais ( $N_2 = \tau_{22} - \tau_{33}$ ) não-nula. Estas tensões normais originam alguns problemas numéricos no acoplamento tensão-velocidade-pressão ausentes do cálculo de escoamentos com fluidos em que  $N_2 = 0$ . Já a versão simplificada do PTT (SPTT) da Eq. (37), que se obtém fazendo  $\xi = 0$ ,

$$f(\tau_{kk})\tau_{ij} + \lambda \left( \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) = \eta \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (37)$$

apresenta  $\tau_{22} = 0$  e  $N_2 = 0$  e, embora reologicamente mais complicado que os modelos de Maxwell convectivo e Oldroyd-B, a sua solução não apresenta grandes problemas do ponto de vista numérico. De facto, qualquer modelo reológico que preveja um comportamento reofluidificante da viscosidade de corte, como é o caso do SPTT, tende a comportar-se melhor numericamente, já que também são “bem comportados” no que respeita à viscosidade extensional. A Figura 12 apresenta o comportamento do fluido PTT, no que diz respeito às tensões de corte ( $\tau_{xy}$ ) e normal ( $\tau_{xx}$ ), no escoamento de Couette em regime permanente. Quanto à viscosidade extensional do modelo SPTT, a Figura 7-a) mostra a diferença entre as variantes linear e exponencial do SPTT e mostra ainda o efeito do parâmetro  $\varepsilon$ .

Ainda relativamente ao modelo PTT com  $\xi \neq 0$ , outra característica torna-o menos interessante e problemático: o modelo apresenta um comportamento não-monotónico da tensão de corte (ver Figura 12-a), o que está na origem de instabilidades de origem constitutiva (Alves et al, 2001).

Haveria ainda a considerar outros modelos diferenciais como, por exemplo, os modelos de Gordon-Schowalter, Johnson-Segalman, Bird-DeAguiar, Acierno et al, ou os modelos de Oldroyd de 4, 6 e 8 constantes, mas essa descrição teria aqui pouco interesse dado o objectivo desta lição. O leitor interessado é convidado a consultar as obras referidas acima (antes da Eq. 34).

Mais recentemente, surgiu uma nova classe de modelos com base em teorias de comportamento molecular, como os modelos FENE-P (FENE vem do inglês “Finitely Extensible Non-linear Elastic” e P refere-se à simplificação introduzida por Peterlin (1966) no cálculo do coeficiente não-linear da mola) ou o recente modelo pom-pom. Estes apresentam uma ou mais equações diferenciais na conformação e extensão molecular, que são depois relacionadas algebricamente com a tensão do fluido. No caso do modelo FENE-P, segundo Bird et al (1987b) o modelo FENE-P é descrito pelo seguinte conjunto de equações, onde  $A_{ij}$  é o tensor conformação molecular

$$\tau_{ij} = \frac{\eta_p}{\lambda} [f(A_{kk})A_{kk} - \delta_{ij}] \quad (38-a)$$

com

$$f(A_{kk})A_{ij} + \lambda \left( \frac{\partial A_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial A_{ij}}{\partial x_k} - A_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - A_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) = \delta_{ij} \quad (38-b)$$

e

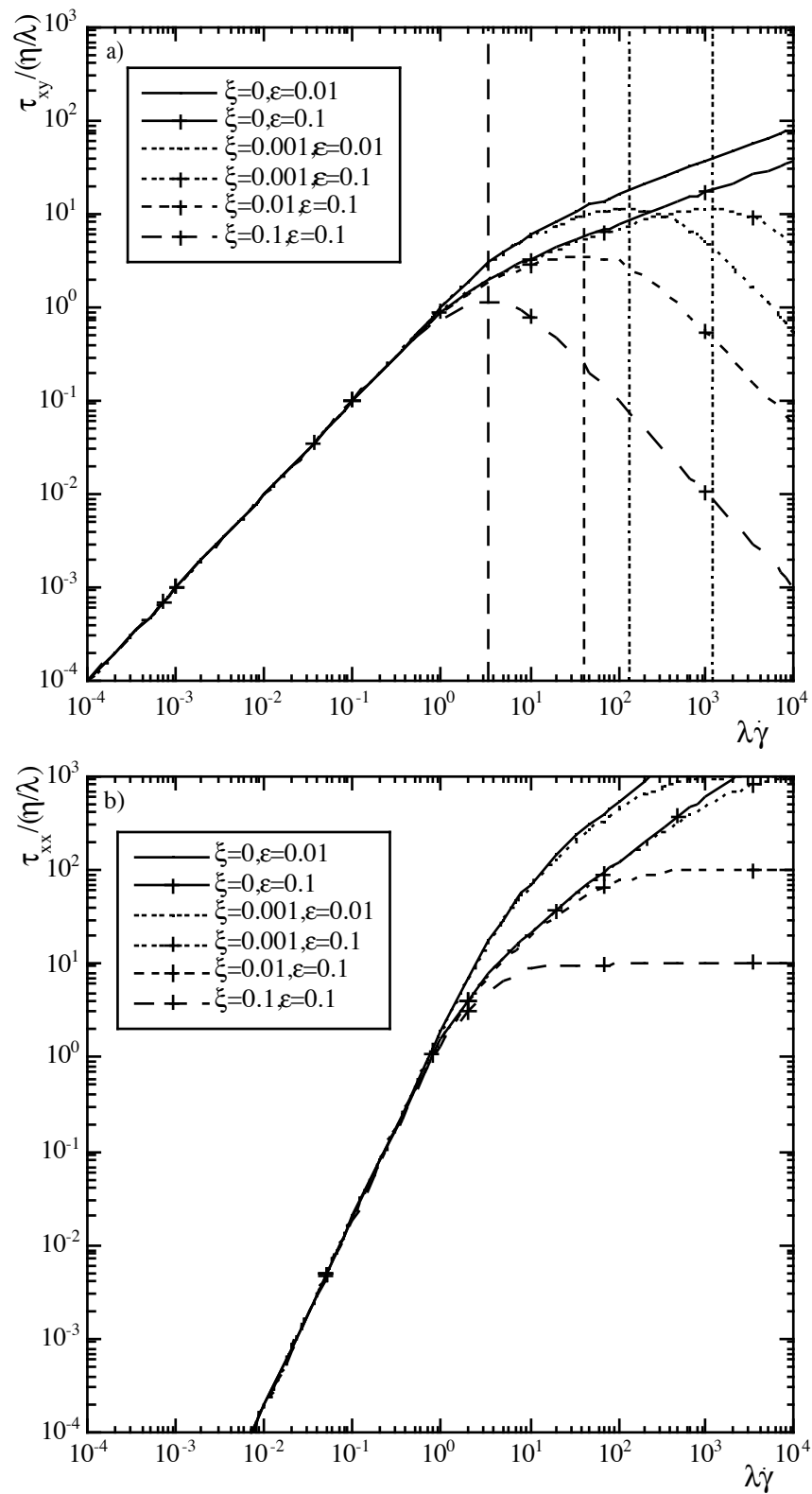


Figura 12- Variação da tensão de corte (a) e tensão normal longitudinal (b) com a velocidade de deformação num escoamento de Couette, para um fluido PTT com função de tensão linear. Linhas verticais representam taxa de deformação crítica ( de Alves et al, 2001).

$$f(A_{kk}) = \frac{L^2}{L^2 - A_{kk}} \quad (38-c)$$

$L$  representa um parâmetro relacionado com a extensibilidade da molécula. No modelo FENE-P só a orientação molecular é dada por uma equação diferencial sendo a extensão da molécula definida por um parâmetro constante. Este modelo também exhibe um comportamento viscoso reofluidificante em regime permanente,  $\Psi_2 = 0$  e uma viscosidade extensional limitada.

#### 4.6. Modelos múltimodo

Algumas das incapacidades dos modelos descritos em 4.5, de preverem quantitativamente a reologia de fluidos reais, pode resolver-se pela adopção de uma variante múltimodo de um determinado modelo constitutivo, desde que este seja capaz de prever qualitativamente a variação desejada da propriedade. Por exemplo, um modelo múltimodo baseado na equação do modelo PTT será capaz de prever correctamente o comportamento reofluidificante de um fluido real, havendo só que efectuar a determinação de todos os coeficientes da série, o que não é uma tarefa muito simples. Contudo, um modelo múltimodo baseado na equação de Maxwell contravariante não é capaz de prever uma viscosidade variável, pois todos os seus modos prevêm uma contribuição constante para a viscosidade de corte.

Um modelo múltimodo é um somatório de modos  $\tau_{ijk}$  de acordo com a equação

$$\tau_{ij} = \sum_k \tau_{ijk} \quad (39)$$

onde a tensão de cada modo  $\tau_{ijk}$  obedece a uma determinada equação constitutiva, por exemplo Maxwell convectivo, Oldroyd-B, PTT ou outro. Um modelo múltimodo é assim um somatório de várias equações do mesmo tipo, onde a diferença entre os modos resulta dos diferentes valores numéricos para os diversos parâmetros, por exemplo  $\lambda$ ,  $\eta$ ,  $\varepsilon$  ou  $\xi$  a menos de algumas restrições. Por exemplo, o parâmetro  $\xi$  está relacionado com o deslizamento do conjunto das moléculas relativamente ao meio contínuo e por isso deve tomar sempre o mesmo valor numérico num modelo múltimodo PTT.

Do ponto de vista numérico, as dificuldades associadas a um modelo múltimodo são as inerentes às de um modelo com um único modo e em especial aquele que possui o tempo de relaxação mais longo. De resto, a diferença entre um modelo de um modo e múltimodo é simplesmente a dos recursos computacionais que crescem com o número de modos utilizados, embora não de forma linear, dependendo isto do método numérico adoptado. A título de exemplo, o cálculo do escoamento numa contracção súbita de um fluido de Maxwell convectivo na malha M2 de Alves et al (2000) requereu uma capacidade de armazenamento igual a 1.3 MB, mas se o mesmo escoamento fosse previsto por um modelo de 4 modos a estimativa de memória só cresceria para 2.0 MB. O tempo de cálculo cresce mais do que o aumento de necessidades de memória, mas não é proporcional ao número de modos, dado o carácter segregado do método

numérico de Alves et al e as menores dificuldades de convergência dos modos menos importantes.



## 5. Resolução de um problema de Mecânica dos Fluidos: diferença entre as estratégias newtoniana e não newtoniana

As breves descrições das propriedades dos fluidos e dos modelos constitutivos reológicos dos capítulos 3 e 4 mostraram a diferença entre os fluidos newtonianos e não newtonianos. Essas diferenças traduzem-se também na necessidade de se utilizarem diferentes estratégias para resolver problemas de Mecânica dos Fluidos consoante o tipo de fluido.

Quando o fluido é newtoniano não há dúvidas sobre o modelo reológico a utilizar, e as diferenças entre os resultados dos cálculos numéricos e de medições experimentais resultam de erros de modelação que não os de natureza reológica (por exemplo, inadequação dos modelos de turbulência adoptados), de aproximações grosseiras na discretização das equações de conservação ou do recurso a malhas insuficientemente refinadas. Se o escoamento fôr em regime laminar não deverá sequer haver erros de carácter físico, mas estritamente numéricos e de discretização e a estratégia é basicamente a que está patente na Figura 13.

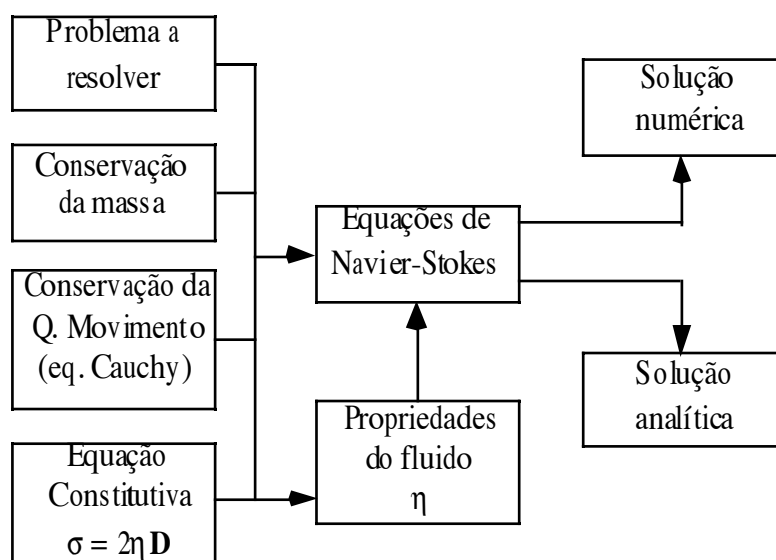


Figura 13- Metodologia de resolução de um problema de Mecânica de Fluidos com fluidos newtonianos.

Contudo, quando os fluidos são não newtonianos e o escoamento decorre em regime laminar, e para além das fontes de erro mencionadas no parágrafo anterior que são mais agudas devido à elasticidade dos fluidos, é ainda necessário seleccionar um modelo constitutivo reológico adequado. Ora, acontece que esta selecção não é simples, porque os modelos reológicos disponíveis são geralmente incapazes de prever correctamente todas as propriedades reológicas dos fluidos relevantes em todas as situações possíveis. Assim, esta selecção deve ser feita cuidadosamente, identificando-se previamente as propriedades que são relevantes no escoamento em estudo. Mesmo assim é possível e frequente que o modelo seleccionado não esteja totalmente adequado à situação em análise, excepto quando esta é muito bem conhecida.

A desadequação do modelo constitutivo reológico pode até, em última análise, significar que a caracterização experimental das propriedades dos fluidos esteja incompleta. Torna-se então necessário seleccionar novo modelo constitutivo, eventualmente completar as medições reológicas experimentais, para quantificar todos os parâmetros do modelo e finalmente proceder ao cálculo numérico do escoamento. Em suma, como ilustrado na Figura 14, está-se perante uma estratégia de tentativa e erro na escolha do modelo constitutivo reológico e nem sempre são óbvias as vantagens e desvantagens de um determinado modelo. A título de exemplo, só recentemente se constatou que os modelos PTT simplificado e de Giesekus podem conduzir a instabilidades de carácter elástico em escoamentos laminar de Couette e Poiseuille a muito baixos números de Reynolds (Grillet et al, 2002).

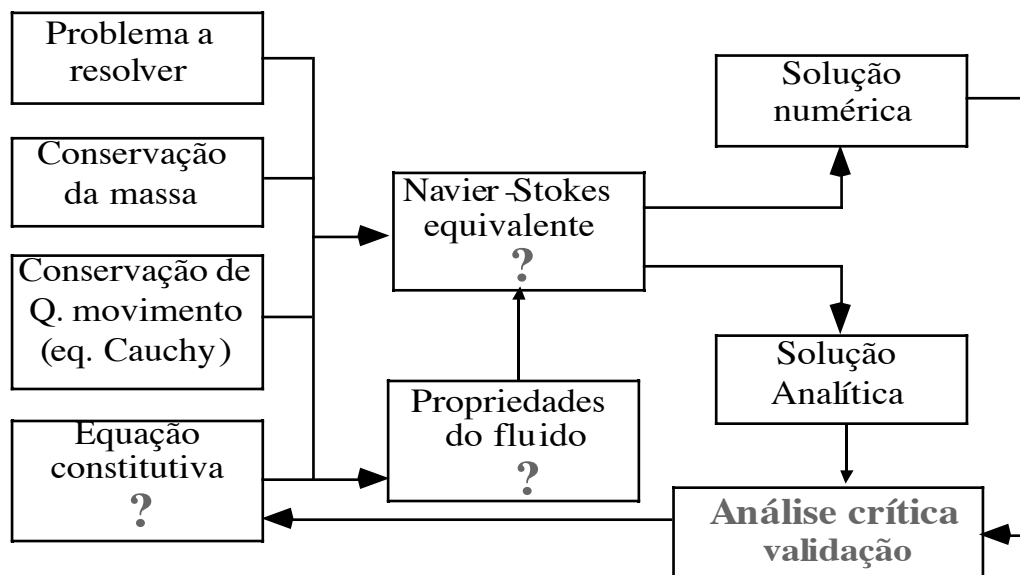


Figura 14- Metodologia de resolução de um problema de Mecânica de Fluidos com fluidos não newtonianos.

Embora a situação seja complexa, ela não é tão grave como o texto sugere. Ao longo dos anos, o acervo de conhecimentos permitiu o desenvolvimento de algumas estratégias que tentam minimizar os inconvenientes mencionados. Assim, o escoamento a estudar deve ser classificado de um ponto de vista cinemático e é bem conhecido da literatura o comportamento de inúmeros modelos constitutivos para diversos tipos de cinemática (Bird et al, 1987a, Tanner 2000), pelo que existem balizas que ajudam à selecção de um modelo constitutivo para uma determinada situação.

## 6. Métodos de cálculo numérico

Várias metodologias são utilizadas no cálculo de escoamentos de fluidos modelados por equações constitutivas diversas de que se destacam as diferenças finitas, os elementos finitos e os volumes finitos. A primeira técnica é a mais antiga, mas na sua forma pura ela é hoje pouco utilizada, pois não verifica a conservação das quantidades físicas. As diferenças finitas são, no entanto, usadas em combinação com outros procedimentos que asseguram a conservação das grandezas físicas, como é o método dos volumes finitos, onde o ponto de partida é a forma integral das equações de conservação. É esta técnica que constituirá o núcleo desta lição.

O método dos elementos finitos também pode assegurar a conservação das propriedades do escoamento, distinguindo-se dos volumes finitos pelo facto dessas equações de balanço serem multiplicadas por um factor de ponderação antes da respectiva integração. Nos elementos finitos a solução de uma equação é aproximada por uma função em cada um dos elementos do domínio de cálculo, que é depois substituída na equação de conservação. A determinação numérica dos respectivos parâmetros assenta na minimização do erro da função ajustada. Para o efeito deriva-se essa função em ordem a cada valor nodal, requerendo-se então que tais derivadas sejam nulas. Do sistema de equações resultante, a respectiva solução fornece os parâmetros da função ajustada inicialmente. Se a equação de balanço a resolver fôr previamente integrada então o método, que é designado por CVFEM (do inglês “Control Volume Finite Element Method”), assegurará a conservação da respectiva grandeza física.

No método dos volumes finitos as equações diferenciais são inicialmente integradas em cada volume de controlo do domínio de cálculo, por forma a assegurar a conservação das grandezas físicas, e só posteriormente se procede à discretização das equações resultantes que podem ter beneficiado da aplicação do teorema de Gauss. Na sua discretização usam-se agora diferenças finitas que conduzem a um conjunto de equações algébricas em que as incógnitas são os valores nodais das várias propriedades físicas e do escoamento. A resolução numérica do sistema de equações algébricas conduz à solução final sob a forma de valores das várias grandezas nos nós da malha.

Cada metodologia tem, naturalmente, as suas vantagens e desvantagens e ao longo do tempo foram sendo criadas estratégias que visaram colmatar as respectivas deficiências. Desde os anos 60 do século XX que a literatura dispõe de obras, focando as estratégias dos elementos e volumes finitos no contexto da Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor com fluidos newtonianos: para os elementos finitos temos, por exemplo, Zienkiewicz (1977), Girault e Raviart (1986), Fletcher (1991) e Hirsch (1991), entre outros; para os volumes finitos o trabalho clássico de Patankar (1980), para além das mais recentes obras de Versteeg e Malalasekera (1995) e Ferziger e Perić (2002) No que diz respeito aos fluidos não newtonianos destacamos a obra clássica de Crochet et al (1984) e mais recentemente o livro de Owen e Phillips (2002), ambos descrevendo de forma sucinta diferentes técnicas. Huilgol e Phan-Thien (1997) também abordam sucintamente o cálculo numérico de escoamentos . Apesar disto, há ainda uma carência de obras de referência na área dos métodos numéricos para cálculo de fluidos não newtonianos. A título

de exemplo, o estado da arte na metodologia dos volumes finitos aplicada a fluidos viscoelásticos não está minimamente coberto e torna-se necessário consultar uma vasta série de artigos dos últimos quinze anos.

Ao longo deste texto, faremos o possível por listar algumas das principais contribuições na área, mas sem um carácter exaustivo, dadas as limitações de espaço e tempo. A ênfase da lição é na técnica dos volumes finitos e abordaremos sobretudo as nossas contribuições.

Se a metodologia dos elementos finitos é porventura mais versátil geometricamente, e por isso atractiva para geometrias muito complexas, há fortes indicações de que ela requer um esforço computacional elevado devido ao aparecimento de matrizes sem banda definida. Por outro lado, os volumes finitos são de fácil adaptação a diferentes configurações, requerem menores esforços computacionais devido ao aparecimento de matrizes em banda, e asseguram facilmente a conservação das quantidades físicas, sendo também por isso mais transparentes as implicações físicas das modificações implementadas no método de cálculo.

As vantagens dos volumes finitos, em termos de necessidades de memória e capacidade computacional, aumentam quando se trata de fluidos viscoelásticos, devido ao aumento do número de equações a resolver. Esta é aliás uma realidade reconhecida pelos investigadores que desenvolveram trabalhos seguindo ambas as filosofias (Phan-Thien e Tanner em vários dos seus trabalhos: Huang et al, 1996 e Fan et al, 1999). Por outro lado, os recentes desenvolvimentos dos volumes finitos para malhas não-estruturadas dão também a estes métodos algumas das vantagens de índole geométrica tradicionalmente inerentes aos métodos de elementos finitos (Ferziger e Perić (2002) , Huang et al (1996), Dou e Phan-Thien (1998)).

### *6.1- Um pouco de história*

A ênfase no desenvolvimento de códigos comerciais para Mecânica dos Fluidos foi sobretudo o tratamento de fluidos newtonianos, mas as necessidades comerciais desde cedo impuseram que os programadores incluíssem também a possibilidade de efectuar cálculos com fluidos não newtonianos. Inicialmente, essa necessidade centrou-se nos fluidos de Stokes e não houve aqui dificuldades de maior, pois do ponto de vista numérico isso é equivalente a uma viscosidade turbulenta variável no espaço que os códigos já contemplavam. Alguns cuidados específicos no tratamento de fluidos com tensão de cedência ou de fluidos fortemente reofluidificantes, para evitar situações de divergência, serão abordados mais adiante no capítulo 7.

No que diz respeito ao cálculo com fluidos elásticos, as “software houses”, rapidamente se aperceberam das suas dificuldades específicas que os códigos para fluidos newtonianos eram incapazes de tratar adequadamente. Os códigos para fluidos viscoelásticos foram assim desenvolvidos de forma específica e os restantes parágrafos deste capítulo resumem a sua história na perspectiva da metodologia dos volumes finitos.

As primeiras contribuições da Reologia Computacional tiveram lugar no final dos anos sessenta e nos anos setenta do século XX havia trabalhos usando o método das diferenças finitas

(Perera e Walters, 1977). Note-se que as diferenças finitas já eram conhecidas de há muito, mas os volumes finitos só surgiram em finais dos anos 60. Na primeira obra extensa sobre Reologia Computacional, Crochet et al (1984), já os elementos finitos ocupavam um lugar de destaque, mas havia um número razoável de contribuições com o método das diferenças finitas.

Um dos primeiros trabalhos numéricos com fluidos viscoelásticos, utilizando o método dos volumes finitos foi a investigação do escoamento padrão em torno de um cilindro circular de fluidos de Maxwell convectivos por Hu e Joseph (1990). Neste trabalho, utilizaram-se malhas ortogonais desfasadas com volumes de controlo centrados nos centros das células (pressão e tensões calculadas numa única malha e cada componente do vector velocidade calculada numa malha específica desfasada da primeira) e o algoritmo SIMPLER foi adaptado ao cálculo dos componentes do tensor das tensões. Contudo, os termos inerciais da equação da quantidade de movimento foram desprezados, porque os cálculos se limitaram a escoamentos de muito baixo número de Reynolds, tendo-se atingido a convergência para números de Weissenberg<sup>2</sup> até 10. Os recursos computacionais disponíveis na altura não permitiam o uso de malhas muito refinadas.

Os termos inerciais são indispensáveis ao cálculo de escoamentos que não sejam de baixo número de Reynolds, mas a inclusão da advecção tem consequências na convergência iterativa de métodos desenvolvidos para escoamentos dominados por difusão (baixo número de Reynolds). O problema da estabilidade mais importante não surge, contudo, nos termos advectivos de quantidade de movimento, mas nos termos advectivos da equação constitutiva que estão sempre presentes e que os cálculos de Hu e Joseph (1990) não puderam por isso ignorar. É por isso importante desenvolver metodologias estáveis de cálculo para equações com inércia, como fizeram Yoo e Na (1991) nos seus estudos de escoamentos em contracções súbitas. Apesar deste progresso Yoo e Na só consideraram esquemas de interpolação de primeira ordem para os termos convectivos, que são conhecidos da Mecânica dos Fluidos Computacional (CFD) clássica (Leschziner, 1980) por introduzirem excessiva difusão numérica quando o escoamento não se encontra alinhado com a malha de cálculo. Este problema foi identificado há muito tempo (Patankar, 1980) e pode ser observado na Figura 15 que mostra a evolução de um escalar  $\phi$  num escoamento oblíquo à malha computacional para uma situação de convecção pura (difusão molecular nula). No caso da figura utilizou-se o método de 1ª ordem designado por método de discretização de montante (sigla UDS do inglês “Upwind Difference Scheme”), para diferentes malhas e os resultados são comparados com a solução exacta. Mesmo numa malha fina com 200 x 200 células, o esquema de montante resulta num grau de difusão numérica que não é desprezável.

Malhas deslocadas foram também utilizadas por Yoo e Na para assegurar o acoplamento entre a pressão, a tensão e a velocidade, o que também aconteceu com vários outros autores que

---

<sup>2</sup> O número de Weissenberg quantifica a relação entre o tempo de relaxação do fluido e um tempo de relaxação característico do escoamento. Alguns autores designam esse número adimensional por número de Weissenberg, outros autores chamam-no de número de Débora. Nesta lição utilizaremos as duas designações, indiscriminadamente.

nos anos seguintes aplicaram os volumes finitos ao cálculo de escoamentos com fluidos viscoelásticos (Gervang e Larsen 1991; Sasmal 1995 e Xue et al 1995, 1998 a,b) entre outros. As malhas desfasadas das velocidades, centradas nas faces das células computacionais para a pressão e tensões, conduzem à necessidade de interpolar a tensão de corte  $\tau_{xy}$  na equação de quantidade de movimento. Uma variante do método calcula esta tensão numa terceira malha centrada nos vértices da malha da pressão e das tensões normais (Mompeam e Deville, 1997, Bevis et al 1992), mas a sua desvantagem é a eventual necessidade de calcular a tensão de corte, em locais onde existam singularidades geométricas (caso da contração súbita, por exemplo).

A utilização de malhas desfasadas é uma solução fácil para garantir o acoplamento entre os campos de tensão, pressão e velocidade, mas dificulta enormemente a capacidade de representar geometrias complexas que requerem o uso de malhas de características genéricas. De facto, as geometrias industriais raramente são simples e por isso prefere-se o uso de malhas não-ortogonais colocadas ou até malhas não-estruturadas, devendo ser estas as filosofias a presidir ao desenvolvimento de métodos modernos de cálculo.

O recurso a malhas não-ortogonais colocadas tem sido frequente nos volumes finitos aplicados a fluidos newtonianos desde meados dos anos oitenta, mas não o era com fluidos elásticos até 1995, o que exemplifica bem o distanciamento entre estas duas áreas. Na vertente dos volumes finitos, a Reologia Computacional só veio pois a utilizar em meados dos anos noventa, algumas das técnicas já desenvolvidas para fluidos newtonianos em meados dos anos oitenta. Assim, com algumas excepções, a transferência de "know-how" não foi de início suficientemente rápida em questões tão importantes como o acoplamento pressão-velocidade para malhas colocadas, a marcha no tempo necessária ao estudo de escoamentos transitórios e de instabilidades, ou o uso de malhas colocadas não ortogonais. Os anos noventa viram a rápida transferência desse "know-how" e as necessárias alterações para a previsão de escoamentos de fluidos viscoelásticos que incluiu também as questões da estabilidade de cálculo dominado por advecção, situação típica de escoamento de fluidos elásticos e de escoamentos de fluidos de Euler e ondas de choque (Morton e Paisley 1989, Mackenzie et al 1993).

No que diz respeito às malhas de cálculo, Huang et al (1996) usaram métodos não-estruturados baseados na formulação mista elementos finitos/ volumes finitos (CVFEM) para prever o escoamento de fluidos de Phan-Thien—Tanner em chumaceiras. Contudo, a formulação do método de cálculo apresentado nesse trabalho carecia ainda da generalidade e elegância dos métodos hoje utilizados com fluidos newtonianos, presentemente baseados quase exclusivamente em malhas colocadas (Ferziger e Perić, 2002).

Usando malhas estruturadas do tipo colocadas não-ortogonais, Oliveira et al (1998) apresentaram um método de cálculo para a solução completa das equações diferenciais de transporte e constitutiva reológica de fluidos viscoelásticos. O uso de malhas colocadas requereu o desenvolvimento de um método que garantisse o acoplamento entre os campos de tensão, pressão e velocidade e permitiu o cálculo mais fácil de características de escoamentos mais complexos que anteriormente não eram possíveis com volumes finitos, como por exemplo o es-

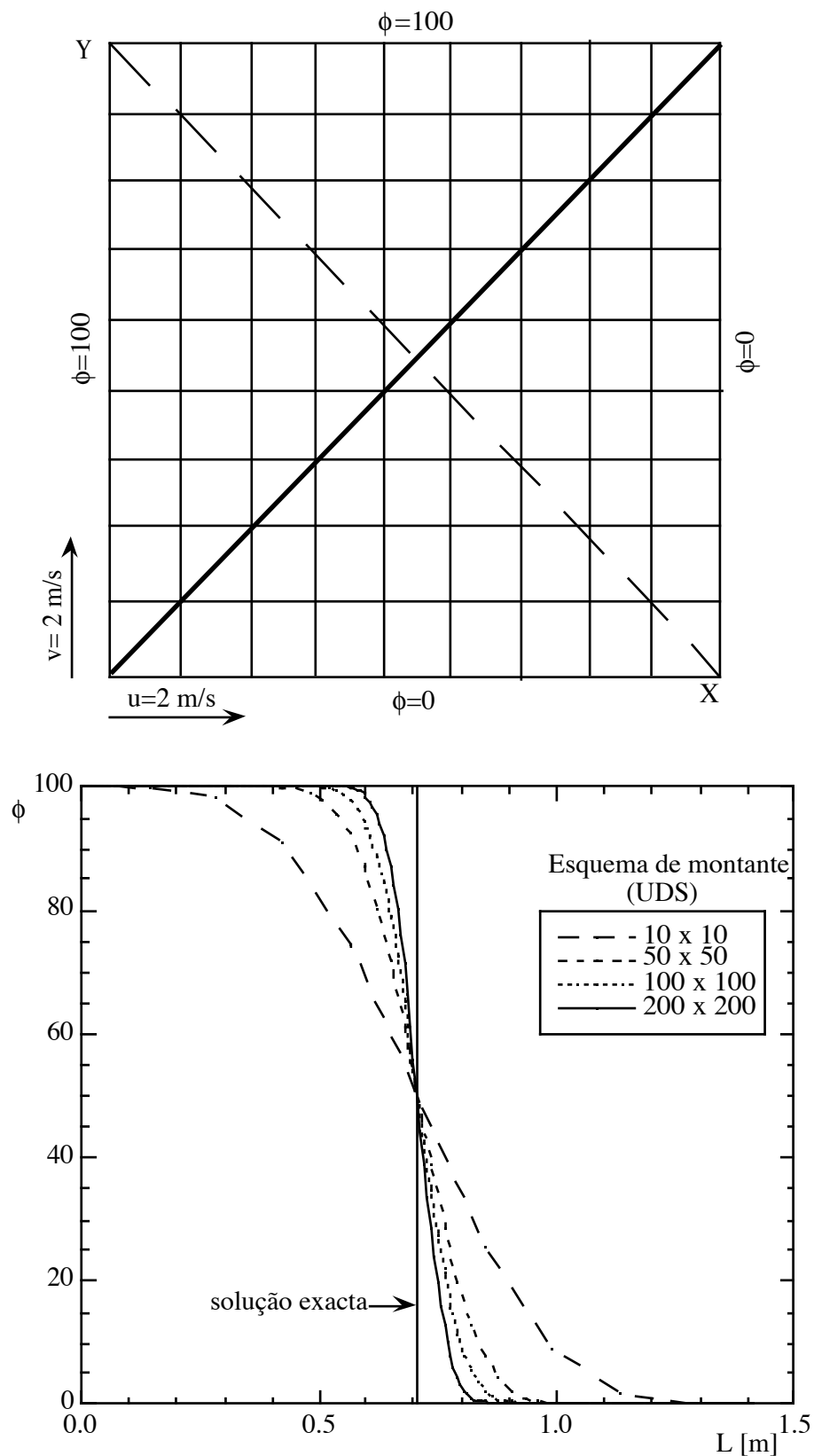


Figura 15- Efeito do refinamento da malha sobre a difusão numérica quando o esquema de discretização é o esquema de primeira ordem de montante (UDS). O perfil de  $\phi$  (b) é obtido no plano marcado a tracejado na parte superior da figura (a).  $L$  é a distância ao longo da diagonal.

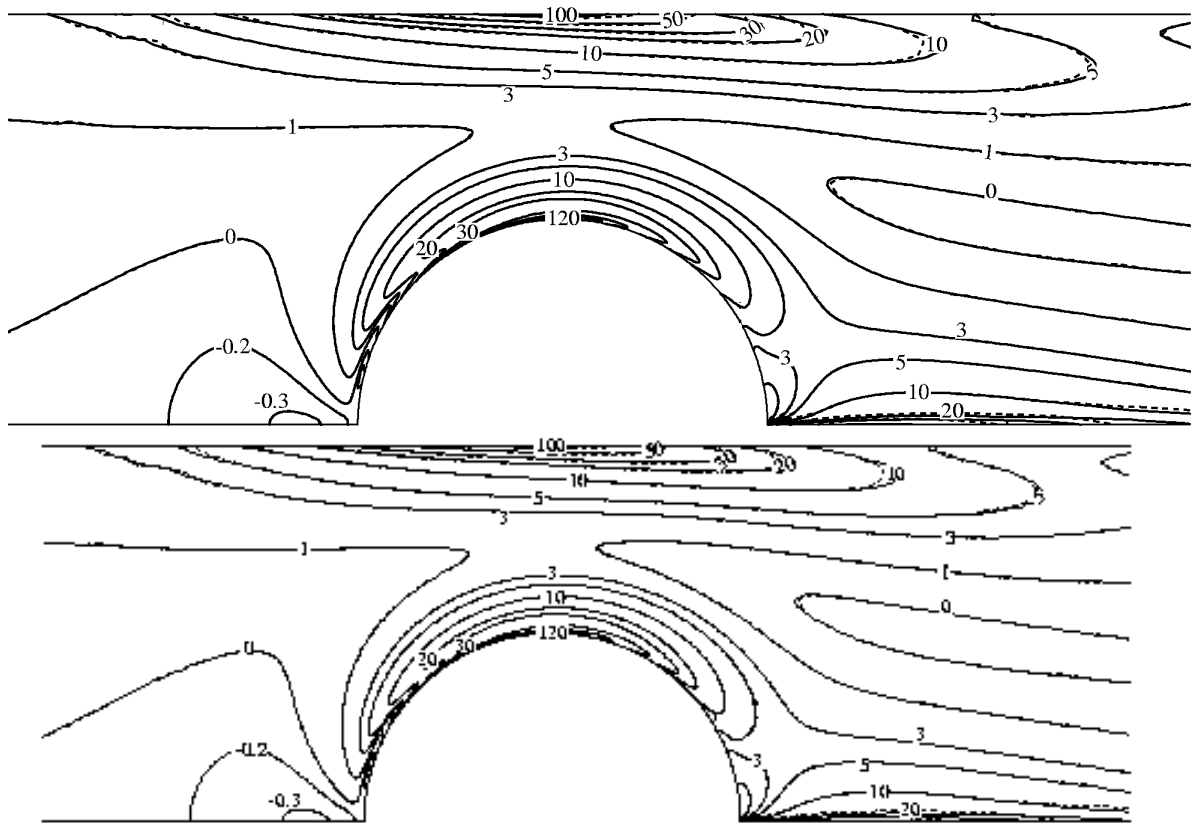


Figura 16- Isolinhas da tensão normal axial ( $\tau_{xx}$ ) no escoamento de um fluido de Oldroyd-B em torno de um cilindro confinado para  $De= 0.9$  (de Alves et al, 2001).

coamento padrão em torno de um cilindro confinado. A Figura 16 mostra, nesta situação, o campo de tensões axiais normais ( $\tau_{xx}$ ).

O acoplamento dos campos de tensão, pressão e velocidade é um dos aspectos fundamentais no cálculo de escoamentos, independentemente da metodologia utilizada. Para os volumes finitos Oliveira e Pinho (1999a) apresentaram um melhoramento do método de interpolação desenvolvido por Oliveira et al (1998). Esta problemática foi também abordada por Missirlis et al (1998), mas numa perspectiva mais simples, pois baseada em malhas ortogonais desfasadas.

A questão do acoplamento também surge noutra perspectiva que é a do uso de métodos híbridos de cálculo: a maior facilidade dos elementos finitos em representar geometrias complexas, mas a vantagem dos volumes finitos em assegurar a conservação das grandezas físicas desde cedo, levou à combinação das duas técnicas como foi inicialmente proposto por Baliga e Patankar (1983). No âmbito da Reologia Computacional essa combinação tem sido fortemente desenvolvida por Webster e seus co-autores (Aboubacar e Webster 2001, Aboubacar et al 2002, Wapperom e Webster 1998, 1999, mas também por Sato e Richardson 1994 e Phan-Thien e Dou 1999, Dou e Phan-Thien, 1999).

Os problemas de estabilidade e precisão estão intimamente ligados, mas o esforço maior tem sido feito para assegurar a estabilidade e convergência dos métodos de cálculo, especialmente devido aos termos advectivos na equação da tensão. Se a estabilidade pode ser obtida por recurso



a métodos de discretização de primeira ordem, como por exemplo o método de montante (UDS), daqui resulta uma menor precisão e o aparecimento de difusão numérica (Ferziger e Peric, 2002).

Os trabalhos iniciais já citados para fluidos elásticos usando volumes finitos preocupavam-se sobretudo em obter soluções numéricas mas, sem cuidados específicos para garantir uma elevada precisão o que também requeria malhas muito refinadas e de custo muito elevado, para os meios disponíveis na época. De qualquer forma, a partir de meados dos anos noventa, a preocupação pela precisão e estabilidade tornou-se central e Sato e Richardson (1994) foram dos primeiros investigadores a enveredar por este caminho. Eles usaram elementos finitos para resolver a equação de conservação de quantidade de movimento, mas para a massa e as tensões recorreram aos volumes finitos e os termos convectivos das tensões foram discretizados e estabilizados com um esquema de fluxo de transporte corrigido e limitado, para obedecer a critérios de variação total decrescente (TVD do inglês “Total Variation Diminishing”). A preocupação pela estabilidade de cálculo também tem sido um dos *leitmotiv* dos trabalhos de Aboubacar et al (2001, 2002), e Wapperom e Webster (1998, 1999), embora a precisão dos resultados obtidos por estes autores nem sempre tenha sido a melhor (Alves et al, 2003b).

Na versão mais pura da metodologia dos volumes finitos tem havido um esforço significativo em garantir estabilidade e precisão nos trabalhos de Oliveira, Pinho e seus colaboradores: Oliveira e Pinho (1999), Alves et al (2000, 2001, 2003a, 2003b). Oliveira e Pinho (1999b) usaram esquemas de interpolação de segunda ordem para os termos convectivos das equações das tensões (LUDS-esquema linear de montante e CDS- esquema de diferenças centradas), e posteriormente avançaram para o uso dos chamados métodos de alta-resolução. Estes representam os desenvolvimentos mais recentes, onde se deu um salto qualitativo muito importante, quer ao nível da precisão do cálculo, quer da convergência iterativa (Alves et al, 2000). De facto, os métodos de alta-resolução permitiram obter resultados com o mesmo nível de precisão dos métodos mais avançados, baseados em elementos finitos (Alves et al, 2001, 2003b), e alcançaram convergência iterativa a níveis próximos dos atingidos por aqueles métodos (medidos pelo número de Weissenberg ou Débora máximo a que ocorre divergência). É o que se mostra na Figura 17, onde são comparados os coeficientes de arrasto do escoamento em torno de um cilindro, obtidos por diferentes métodos de cálculo baseados quer em elementos quer em volumes finitos. Por razões discutidas em Fan et al (1999), os valores mais precisos são os menores, e é claro da Figura 17, que os volumes finitos já conseguem o mesmo nível de precisão das metodologias de elementos finitos mais recentes. Comparações ainda mais recentes para este problema, e para o caso do escoamento padrão numa contracção súbita, apresentam-se em Alves et al (2003b), que recorre a um novo método de alta resolução para tratamento da advecção, especialmente desenvolvido para escoamentos de fluidos elásticos (Alves et al, 2003a).

De facto, algumas das dificuldades remanescentes na convergência iterativa de escoamentos de fluidos viscoelásticos com o método dos volumes finitos só foram recentemente ultrapassadas com o desenvolvimento de um novo esquema de alta resolução, para a interpolação de termos convectivos nas faces dos volumes de controlo, que é ainda mais restritivo na obediência a

diversos critérios. Este esquema, designado por CUBISTA, obedece aos critérios de variação total decrescente (TVD), que são mais restritivos que os critérios de limitação de convecção (CBC do inglês “Convection Boundedness Criteria”) e de limitador universal (ULTIMATE na literatura inglesa da especialidade), como fica demonstrado em Alves et al (2003a) e se explica no anexo.

Um aspecto ainda pouco desenvolvido nos métodos de volumes e elementos finitos para escoamentos de fluidos viscoelásticos, mas igualmente relevante, tem sido o cálculo de escoamentos transitórios de fluidos viscoelásticos, sendo ainda comum o recurso a métodos de discretização no tempo de 1ª ordem, como o método de Euler implícito. Este método de discretização é excessivamente difusivo e a previsão de certos fenómenos reais de carácter transitório associado a instabilidades elásticas (Grillet et al, 2002), necessita de esquemas de marcha no tempo mais precisos. Neste contexto, Oliveira (2001a) desenvolveu um método de marcha no tempo de 2ª ordem que utilizou para prever o impacto da elasticidade sobre a ejeção de vórtices no escoamento em torno de um cilindro. Os seus resultados mostraram a vantagem do método relativamente aos esquemas de discretização de 1ª ordem, pois não evidenciaram qualquer atenuação na amplitude das oscilações na esteira de Von Kármán e os seus resultados compararam favoravelmente com os dados experimentais de Cadot e Kumar (2000).

O cálculo de escoamentos transitórios é um tema que interessa de sobremaneira a comunidade científica e recentemente têm surgido desenvolvimentos no uso de métodos espectrais isoladamente ou em combinação com os elementos finitos. Trata-se de métodos globais, em contraste com os elementos e os volumes finitos que são métodos locais, e em consequência conduzem a aproximações de grau mais elevado. Obviamente, daqui advém um custo computacional superior. A discussão destes métodos está fora do âmbito desta lição.

Hoje já é indiscutível na Reologia Computacional que os volumes finitos atingiram a maturidade, pois são actualmente capazes de performances idênticas às conseguidas com outros métodos (Owen e Phillips, 2002). Um menor número de investigadores activos no desenvolvimento dos volumes finitos para fluidos viscoelásticos significa naturalmente uma menor taxa de evolução da metodologia. Contudo, o desenvolvimento dos volumes finitos continua e recentemente foi já aplicado a problemas de transferência de calor (Wachs e Clermont, 2000). Os últimos desenvolvimentos sugerem que a investigação neste campo se concentrará, a breve prazo, noutros aspectos igualmente relevantes, como a extensão dos volumes finitos ao cálculo de problemas com superfície livre, o recurso a modelos constitutivos reológicos multimodo, integrais e também a inclusão de novos modelos de base molecular, como são os modelos FENE-P ou Pom-Pom. A médio prazo, os volumes finitos poderão ainda ser usados em cálculos estocásticos com modelos derivados da teoria cinético-molecular. Para além disso, serão necessários mais progressos para utilizar malhas não-estruturadas em volumes finitos para escoamentos de fluidos viscoelásticos. Que os volumes finitos têm um futuro promissor é também a opinião de Phan-Thien e seus colaboradores, que possuem experiência das várias metodologias concorrentes; volumes finitos: Huang et al (1996), Dou e Phan-Thien (1999);

elementos finitos (Fan et al, 1999), mas cada vez mais apresentam trabalhos recorrendo aos volumes finitos (Dou e Phan-Thien 1999, Xue et al 2002).

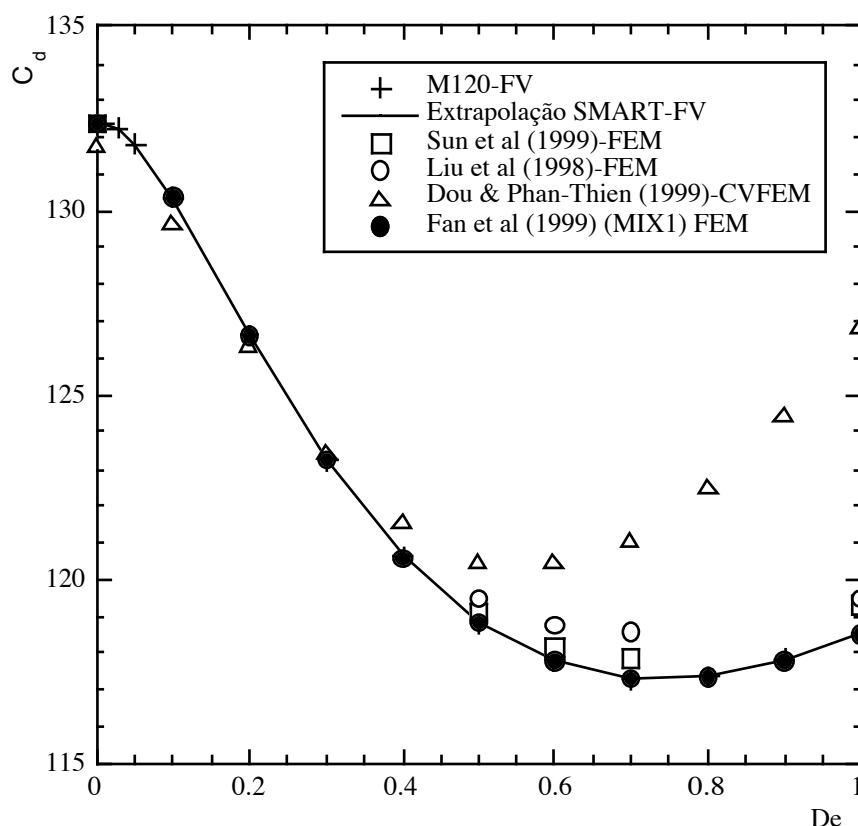


Figura 17- Coeficiente de arrasto para o escoamento padrão de um fluido de Oldroyd-B em torno de um cilindro. FV- Volumos finitos (nosso trabalho); FEM- elementos finitos; CVFEM elementos finitos com volume de controle.

Não se pretende nesta lição explicar detalhadamente a metodologia dos volumes finitos aplicada ao cálculo numérico com fluidos viscoelásticos. Contudo, a exiguidade de obras de referência neste tema oferecem a esta lição uma oportunidade única de compilar diversas contribuições para o desenvolvimento do método, que o autor apresenta mais detalhadamente no Anexo. Desde mil novecentos e noventa e cinco que o autor e alguns dos seus colaboradores têm desenvolvido um trabalho apreciável nesta área e são as suas contribuições que se expõem no Anexo.

Contribuições para outras técnicas numéricas de resolução das equações da Reologia Computacional têm também sido inúmeras e significativas e apresentam outros problemas específicos. Bons pontos de partida para o conhecimento dessas técnicas e alguns dos seus problemas são os capítulos finais de Huilgol e Phan-Thien (1997), mas sobretudo a obra de Owen e Phillips (2002). A consulta do *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, é também fundamental para todos os interessados.



## 7. Resultados, discussão e alguns problemas

Este capítulo apresenta exemplos típicos de cálculo de escoamentos de fluidos não newtonianos, utilizando o método dos volumes finitos e discute os seus problemas mais importantes.

### 7.1. Fluidos newtonianos generalizados

#### 7.1.1. Problemas específicos e solução

O cálculo de escoamentos de fluidos newtonianos generalizados sem tensão de cedência é hoje frequente em vários códigos comerciais, embora só com alguns dos modelos mais comuns. Os problemas mais importantes deste tipo de cálculo ocorrem sobretudo quando se utiliza uma lei de potência para a viscosidade de corte (Eq. 15), ou um outro qualquer modelo em que a viscosidade viscosimétrica tenda para infinito, quando a velocidade de deformação tenda para zero. Trata-se pois de um problema de limitação associado às propriedades do fluido e que acontece geralmente porque os códigos inicializam a zero, ou noutro valor constante, as diversas propriedades do escoamento. Neste contexto, há também a possibilidade de alguns problemas em regiões de escoamento estagnado o que dificulta a convergência do código, se o fluido for fortemente reofluidificante.

A nossa experiência mostra que o primeiro problema se limita às primeiras iterações de cálculo, havendo uma solução fácil, limitar a viscosidade. Para o fazer há pelo menos três alternativas:

- 1) Fixar a viscosidade de corte num valor elevado mas limitado, sempre que o invariante da velocidade de deformação  $\dot{\gamma}$  seja inferior a um pequeno valor pré-definido. Se o valor do limitador for muito elevado, e a região afectada muito extensa, as matrizes dos coeficientes dos sistemas de equações tornam-se demasiado rígidas e a convergência do código abranda. Contudo, se a região de elevada viscosidade for localizada, como por exemplo num plano de simetria que constitua fronteira do domínio de cálculo, não há geralmente qualquer problema, porque nas células vizinhas da fronteira a viscosidade é bem comportada. Com fluidos reofluidificantes a convergência do cálculo não coloca problemas especiais, embora seja mais lenta do que com fluidos newtonianos. No entanto, para fluidos fortemente reofluidificantes, por exemplo com o expoente da lei de potência  $n= 0.2$ , o número de iterações necessário a atingir o mesmo nível de convergência é no mínimo duas a três vezes superior do que para a simulação newtoniana equivalente;
- 2) Na ausência de zonas de escoamento estagnado, ou se elas forem muito localizadas, pode-se iniciar o cálculo numérico admitindo que o fluido tem uma viscosidade constante e após algumas iterações, mudar o comportamento da viscosidade para a sua verdadeira lei de variação;

- 3) Substituir a lei de potência por uma lei de viscosidade alternativa, que possua um valor constante de viscosidade a baixas velocidades de deformação, como o modelo de Carreau-Yasuda simplificado

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 \left[ 1 + (\lambda \dot{\gamma})^a \right]^{\frac{n_c - 1}{a}} \quad (40)$$

O utilizador deve ter alguns cuidados na selecção dos valores numéricos dos parâmetros: a coincidência da região reofluidificante do modelo de Carreau com o modelo de lei de potência obriga a que  $n_c = n$  e  $K = \eta_0 \lambda^{n_c - 1}$ , mas a selecção de  $\eta_0$  e  $\lambda$  requer uma ideia da gama de caudais (ou escala de tempos), que prevalecem no escoamento. As equações (15) e (40) estão representadas na Figura 18. O valor de  $\lambda$  deve ser superior ao valor estimado para o inverso da velocidade de deformação mínima no escoamento, sendo que uma boa regra é considerar  $\lambda \approx 100/\dot{\gamma}_{\min}$ . Se  $\dot{\gamma}_{\min} = 0$ , como num plano de simetria,  $\dot{\gamma}_{\min}$  não deve corresponder ao valor de  $\dot{\gamma}$  no plano de simetria, mas no centro da célula de cálculo adjacente mais próxima.

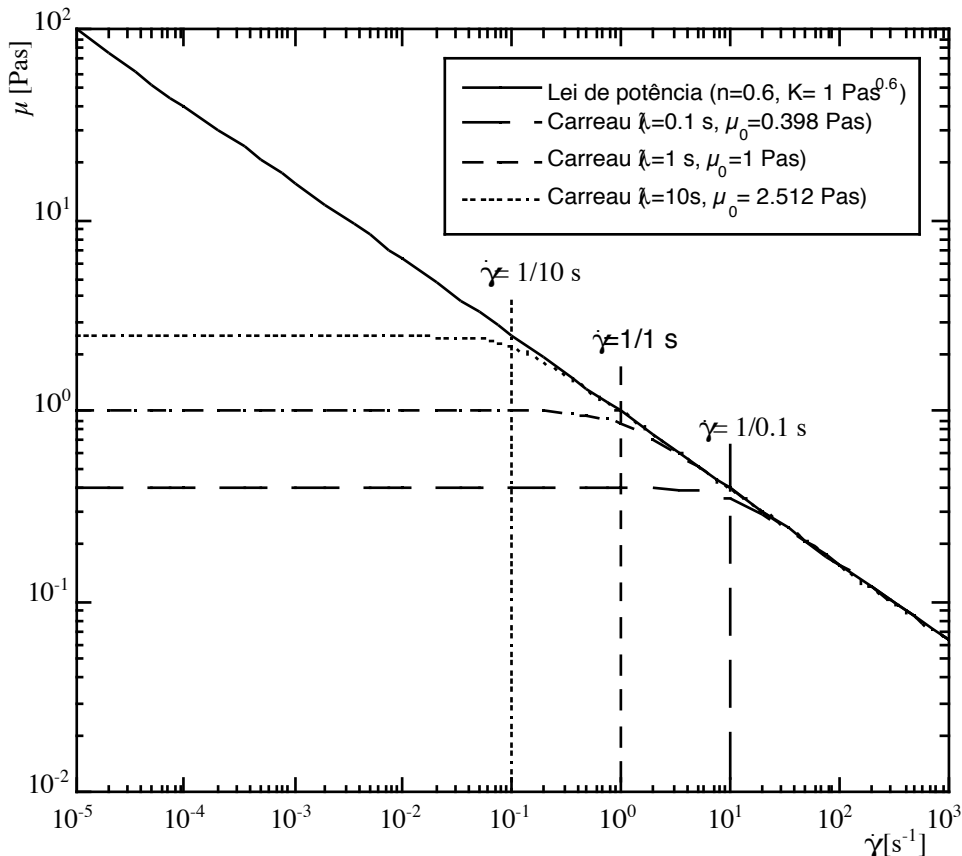


Figura 18- O efeito de  $\lambda$  na comparação entre os modelos de Carreau simplificado ( $a=2$ ) e de lei de potência.

Para se ter uma ideia da repercussão da adopção desta terceira estratégia sobre os resultados, fizeram-se alguns testes referentes ao escoamento laminar desenvolvido numa conduta de secção circular. Começou por se efectuar um cálculo em três malhas uniformes consecutivamente

refinadas usando uma lei de potência da viscosidade, sem qualquer limitador de viscosidade, já que o cálculo se iniciou numa solução newtoniana.

Os resultados obtidos constam da metade superior da Tabela 1, que compara os valores calculados para o coeficiente de fricção de Darcy com os respectivos valores teóricos. Os correspondentes perfis de velocidade axial nas três malhas comparam-se na Figura 19-a), constatando-se que uma malha de 20 células na direcção radial providencia um perfil de velocidades muito próximo do perfil teórico. Os cálculos foram efectuados com o esquema híbrido de discretização (1ª ordem), aplicado aos termos convectivos da equação de quantidade de movimento.

**Tabela 1**- Comparação entre os coeficientes de fricção calculado e teórico para escoamento laminar desenvolvido numa conduta usando lei de potência e modelo de Carreau simplificado ( $Re_{gen} = 5.261$ ).

Casos	$f$	$f_{teoria}$	Erro [%]
Lei de potência: 10 células	12.314	12.165	1.22
Lei de potência: 20 células	12.200	12.165	0.29
Lei de potência: 40 células	12.185	12.165	0.16
Carreau 20 células: $\lambda = 0.1$ s	12.124	12.165	-0.34
Carreau 20 células: $\lambda = 1$ s	12.210	12.165	0.37
Carreau 20 células: $\lambda = 10$ s	12.211	12.165	0.38

Com a malha uniforme de 20 células radiais efectuaram-se então simulações, usando o modelo de Carreau simplificado da Figura 18, apresentando-se os resultados na metade inferior da Tabela 1 e na Figura 19-b). Excepto para  $\lambda = 0.1$  s, os restantes perfis de velocidade ( $\lambda = 1$  s e  $\lambda = 10$  s) concordam com o correspondente perfil para a lei de potência e os coeficientes de fricção também comparam bem (a menos de um pequeno erro, naturalmente). A partir do cálculo efectuado com a lei de potência da viscosidade, o mínimo valor da velocidade de deformação é de  $0.3 \text{ s}^{-1}$  na malha de 20 células e de  $0.095 \text{ s}^{-1}$  na malha de 40 células. Usando estes valores, a consulta da Figura 18 mostra bem as limitações do modelo de Carreau simplificado, enquanto substituto da lei de potência da viscosidade. Um critério objectivo para este tipo de substituição foi formulado por Escudier et al (2002a) no contexto de escoamentos em condutas anelares, com diferentes tipos de fluido de viscosidade variável, mas o critério é facilmente adaptado para outras geometrias e escoamentos.

Nas secções seguintes, apresentam-se três exemplos de simulações numéricas de escoamentos com fluidos newtonianos generalizados sem tensão de cedência.

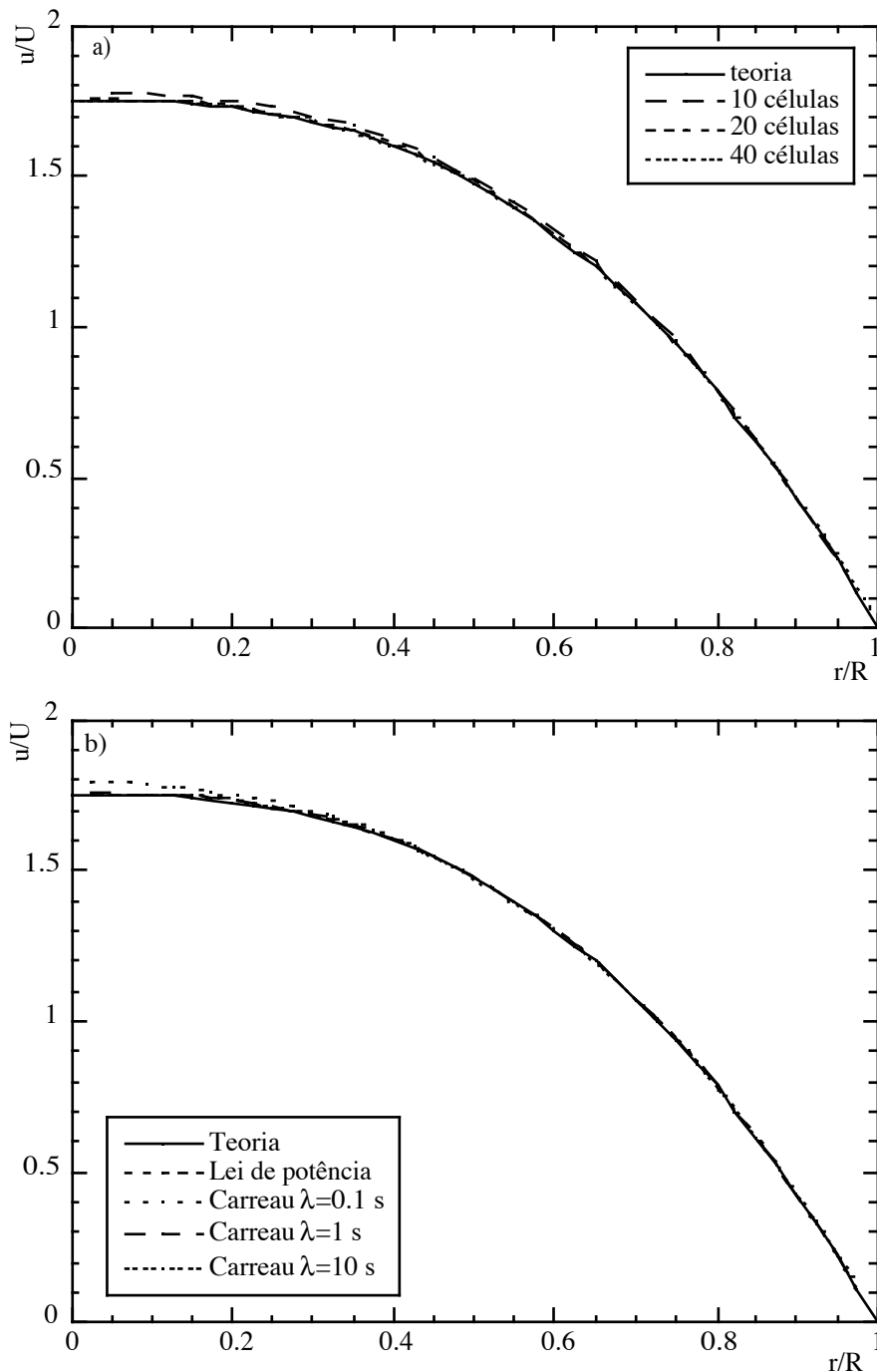


Figura 19- Perfis de velocidade no escoamento laminar desenvolvido numa conduta para um fluido de lei de potência com  $n= 0.6$ . a) Efeito do refinamento da malha e comparação com teoria; b) Comparação entre teoria e previsões obtidas com a lei de potência da viscosidade e o modelo de Carreau simplificado para diferentes valores de  $\lambda$  (malha com células na direcção radial). Todos os cálculos convergiram para o mesmo resíduo normalizado de  $10^{-4}$ .

### 7.1.2. Escoamento axial numa conduta anelar com rotação do cilindro interior

Um dos escoamentos de fluidos não newtonianos que mais atenção tem atraído é o escoamento em geometrias anelares, típico do que existe quando se perfuram poços de petróleo



ou gás natural, em permutadores de calor tubulares ou em feiras de extrusão e, na ausência de escoamento axial em chumaceiras. O caso aqui apresentado é mais típico das primeiras aplicações devido à rotação do cilindro interior, mostrando-se na Figura 20 uma geometria típica, a nomenclatura e uma malha de cálculo.

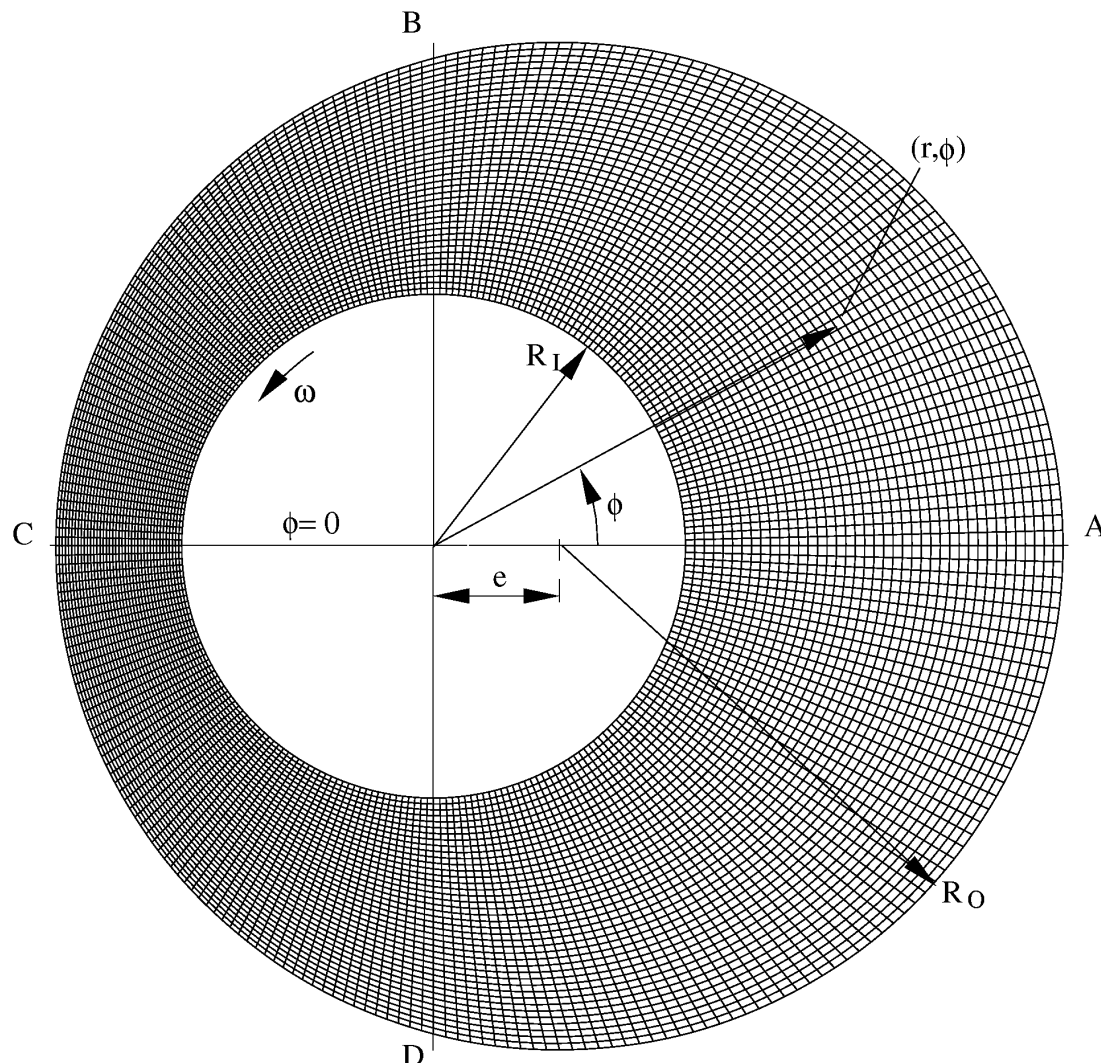


Figura 20- Representação esquemática da geometria de uma conduta anelar excêntrica com rotação do cilindro interior.

A Figura 20 mostra ainda as várias combinações possíveis de escoamento: geometria concêntrica ou excêntrica, escoamento tangencial, axial ou combinado, rotação do cilindro interior, exterior ou de ambos e, finalmente, diversos tipos de fluidos (newtonianos, não newtonianos com ou sem tensão de cedência, puramente viscosos ou viscoelásticos). Uma listagem exaustiva de trabalhos nesta área com fluidos não newtonianos apresenta-se em Escudier et al (2002a).

A motivação dos vários trabalhos é variada. Desde “simples” estudos de estabilidade, à investigação de características do escoamento relevantes para o projecto de permutadores de calor tubulares, passando pelo cálculo de perdas de carga em escoamento desenvolvido para uma

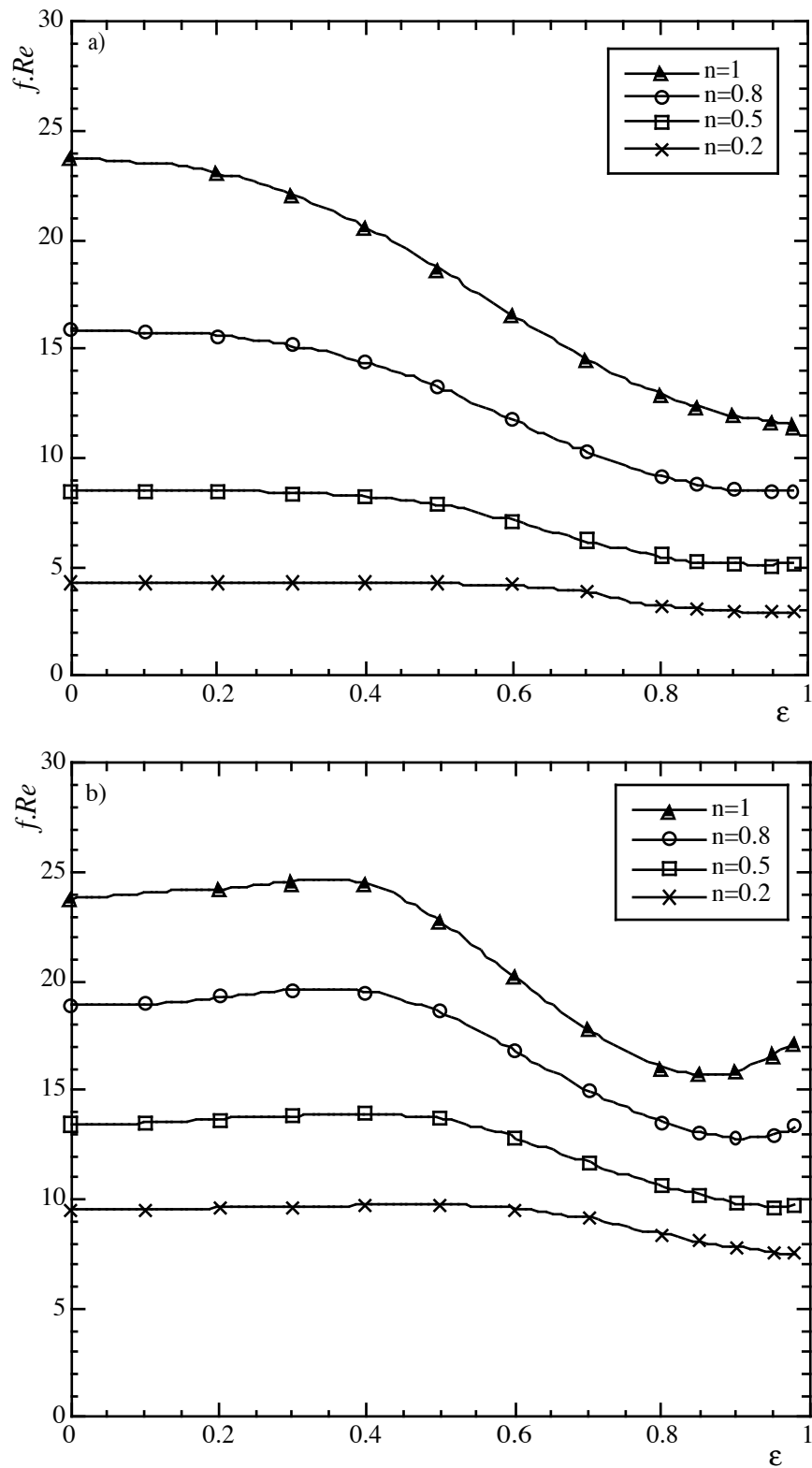


Figura 21- Efeito da excentricidade na variaço de  $fRe$  para fluidos de lei de potncia, numa conduta anelar com 50% de razo de raios e nmero de Reynolds igual a 100: a)  $Ta= 1,000$  b)  $Ta= 50,000$ .

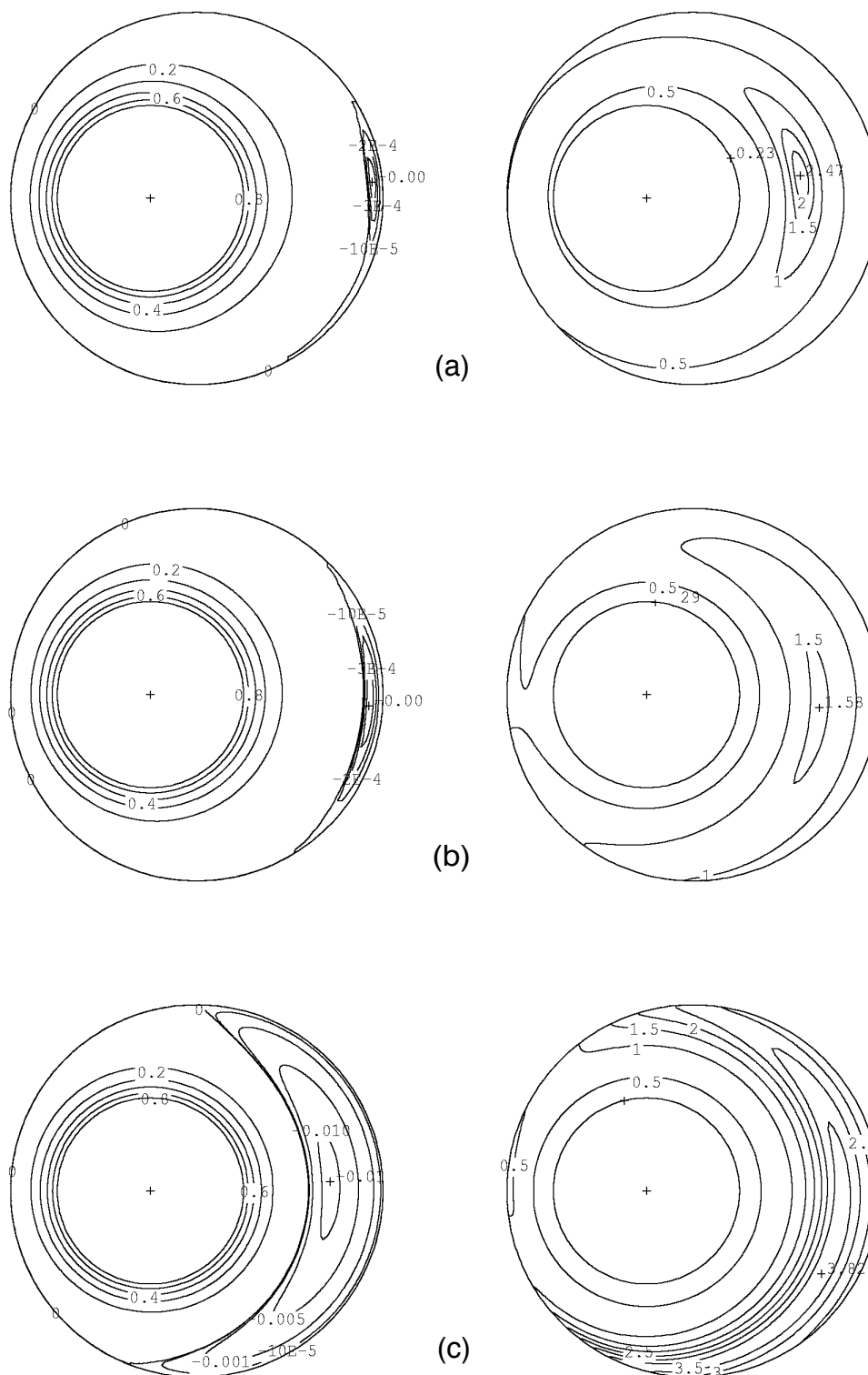


Figura 22- Linhas de corrente do escoamento secundário (esquerda) e isolinhas de viscosidade viscosimétrica para  $\kappa=0.5$ ,  $\varepsilon=0.5$ ,  $n=0.5$ ,  $Re=10$ : (a)  $Ta=10$ ; (b)  $Ta=1000$ ; (c)  $Ta=50,000$ .

previsão mais correcta das variações de pressão ao longo de poços. Foi esta última a motivação do nosso trabalho em que se quantificou de forma exaustiva a perda de carga em escoamentos desenvolvidos em condutas anelares excêntricas com rotação do cilindro interior para fluidos

puramente viscosos, obedecendo ao modelo de viscosidade de lei de potência. Embora para esta mesma aplicação seja igualmente relevante conhecer a perda de carga em regime turbulento, o que a seguir se apresenta diz respeito exclusivamente ao regime laminar.

Alguns dos resultados dessa investigação apresentam-se nas Figuras 21, 22 e 23. Na Figura 21 mostra-se a variação do coeficiente de fricção em função da excentricidade relativa da conduta e do número de Taylor do escoamento, para um número de Reynolds igual a 100. A diferença de comportamento relativamente ao caso newtoniano é notória por comparação com as curvas para  $n=1$  e uma análise mais detalhada das características do escoamento, que permitiu aos autores (Escudier et al, 2002a) explicar as diferenças. A Figura 22 mostra o efeito da rotação do cilindro (número de Taylor) sobre o escoamento secundário, mantendo-se os restantes parâmetros constantes.

Finalmente, foram também efectuados cálculos numéricos com outros modelos de viscosidade, que representam mais fielmente o comportamento viscoso de fluidos reais. Desta forma, validaram-se os cálculos numéricos por comparação dos campos de velocidade calculados com perfis de velocidade medidos por técnicas ópticas de diagnóstico. Um exemplo da boa qualidade desta comparação entre valores experimentais e calculados está patente na Figura 23 retirado de Escudier et al (2002b).

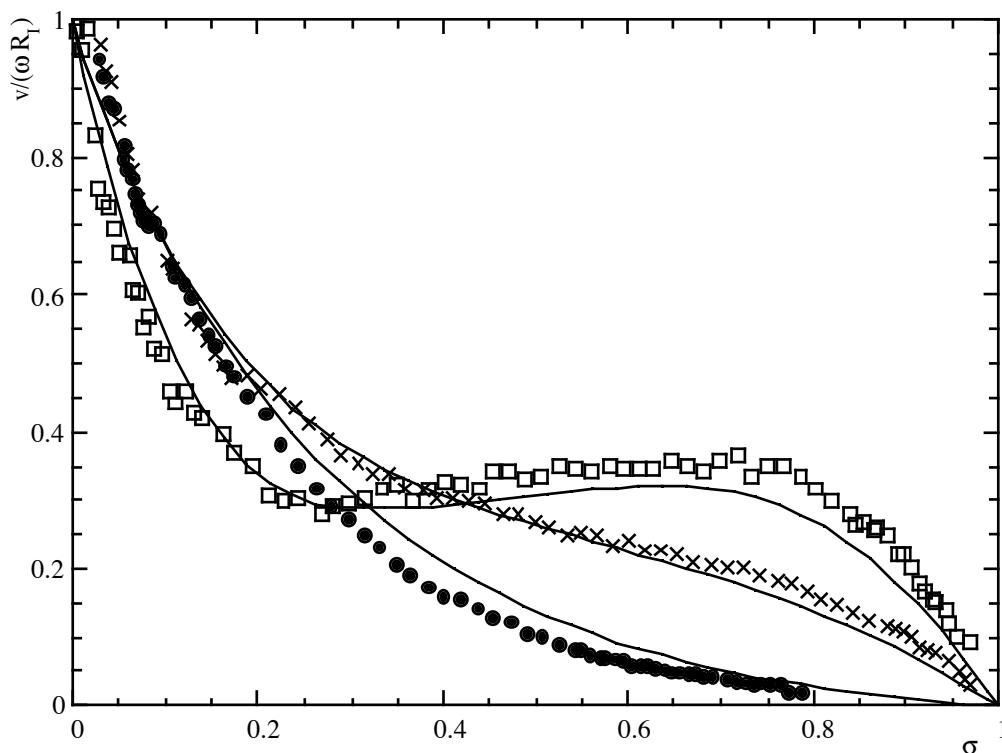


Figura 23- Comparação entre os resultados da simulação e dados experimentais de Nouar et al (1998), para a componente tangencial de velocidade de uma solução de 0.2% de Carbopol 940 com  $\kappa=0.615$ ,  $\varepsilon=0$ :  $Re=0$ ,  $Ta=0.293$  (■);  $Re=0.12$ ,  $Ta=0.0014$  (○);  $Re=0.375$ ,  $Ta=0.326$  (x).

### 7.1.3- Perda de carga localizada numa expansão súbita axissimétrica

O segundo exemplo de cálculo é a determinação do coeficiente de perda de carga localizada ( $C_I$ ) no escoamento laminar numa expansão súbita, esquematizada na Figura 24, para fluidos de lei de potência. O estudo, recentemente efectuado (Pinho et al, 2003), permitiu quantificar o coeficiente  $C_I$  representado na Figura 25, tendo-se ajustado uma expressão (Eq. 41) para uma expansão com razão de diâmetros  $D_2/D_1 = 1: 2.6$ , números de Reynolds compreendidos entre 0.09 e 200 e expoentes de lei de potência  $n$  entre 0.2 e 1. Estimou-se nesse trabalho que a Eq. (41) fornecia valores de  $C_I$  com uma precisão superior a 3% para baixos e elevados números de Reynolds e da ordem de 5 a 6% para números de Reynolds intermédios.

$$C_I = \frac{m_1}{Re_{gen}^{m_2}} + m_3 + m_4 \times \log(Re_{gen}) + m_5 \times \log^2(Re_{gen}) \quad (41)$$

Os coeficientes  $m_i$  desta equação são dados pelas expressões

$$\begin{aligned} m_1 &= 17.45 - 27.53 \times \log(n) \\ m_2 &= 1 - 0.009n + 0.0027n^2 - 0.010n^3 \\ m_3 &= 0.113 - 1.02n \\ m_4 &= -0.256 + 1.21n + 0.498n^2 \\ m_5 &= 0.124 - 0.0911n - 0.149n^2 - 0.110n^3 \end{aligned} \quad (42)$$

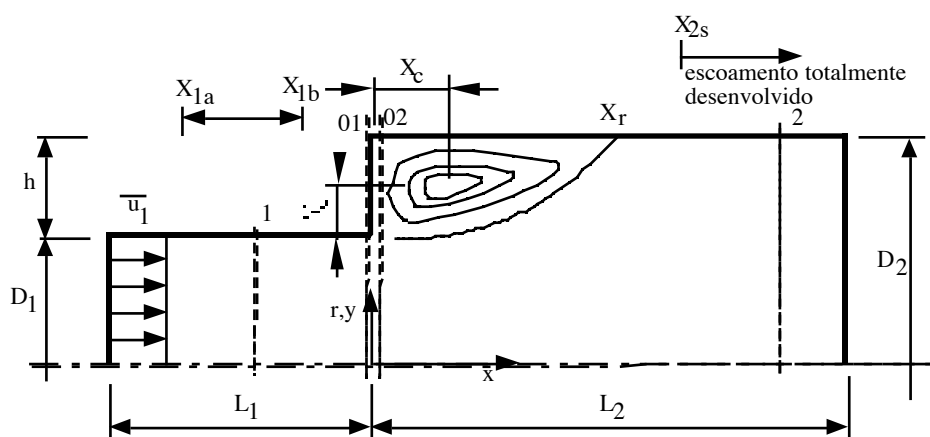


Figura 24- Representação esquemática do domínio de cálculo e nomenclatura.

Até à data só estavam disponíveis dados de  $C_I$  determinados a partir de várias simplificações para escoamentos a elevado número de Reynolds e que possuíam erros da ordem de 20% a 30%, mas que excediam 100% para baixos números de Reynolds.

Esta é uma área carente de informação e torna-se necessário um programa mais extenso de investigação nas vertentes numérica e experimental, por forma a melhor quantificar as perdas de carga localizadas em acessórios de condutas com todo o tipo de fluidos não-newtonianos e sobretudo em escoamentos no regime laminar a baixos números de Reynolds, onde as discrepâncias tendem a aumentar.

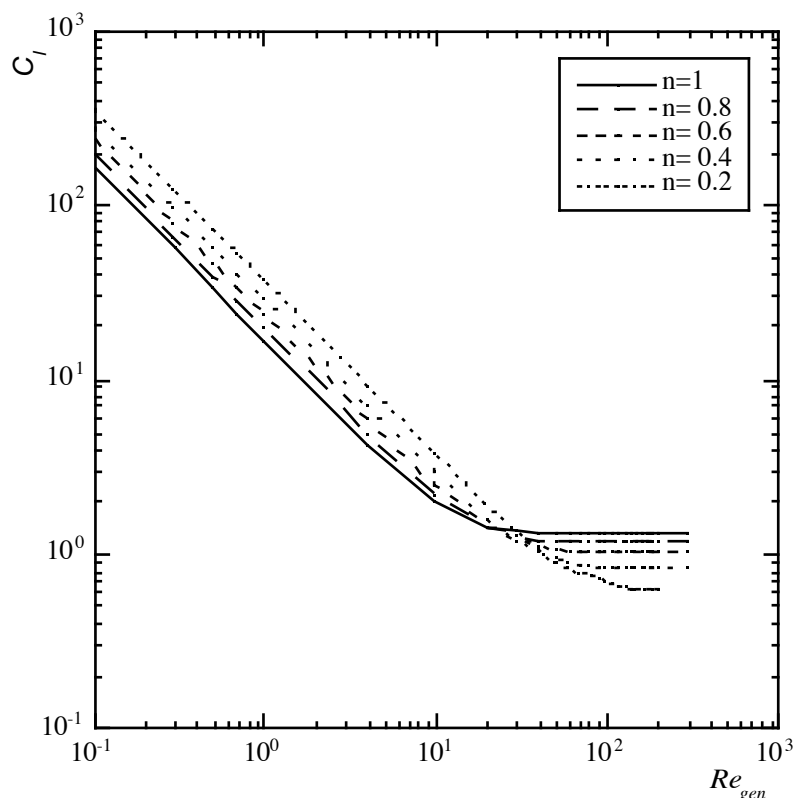


Figura 25- Coeficiente de perda localizada para fluidos de lei de potência no regime laminar e numa expansão de razão de diâmetros igual a 1/2.6.

#### 7.1.4- Projecto automático de feiras de extrusão

O terceiro exemplo mostra o cálculo do escoamento numa cabeça de extrusão que está representada na Figura 26. O cálculo deste escoamento está integrado num algoritmo mais complexo de “design” automático e optimização de cabeças de extrusão, cujo objectivo é a procura da geometria, que permita equilibrar da melhor maneira o escoamento à saída do aparelho, ie, garantir que as velocidades médias do escoamento à saída das várias zonas que constituem o perfil sejam as mais próximas possíveis, para evitar posteriores distorções do extrudido.

Para se obter a geometria final da Figura 26 a partir de um perfil inicial, a evolução iterativa das velocidades médias é a que está patente na Figura 27. Este trabalho resulta da colaboração com a Universidade do Minho e alguns dos seus resultados estão já publicados em Nóbrega et al (2001 a,b; 2003) e Carneiro et al (2003) entre outros.

O escoamento no interior de uma cabeça de extrusão é o de um fluido viscoelástico, mas os primeiros desenvolvimentos do programa de projecto automático de cabeças de extrusão concentraram-se no algoritmo de optimização; por forma a reduzir tempos de cálculo efectuaram-se as simulações com o modelo newtoniano generalizado com a viscosidade ajustada à de polímero fundido. São esses os resultados que aqui se mostram, e num futuro próximo o cálculo deste tipo de escoamentos basear-se-á na reologia de um fluido viscoelástico.

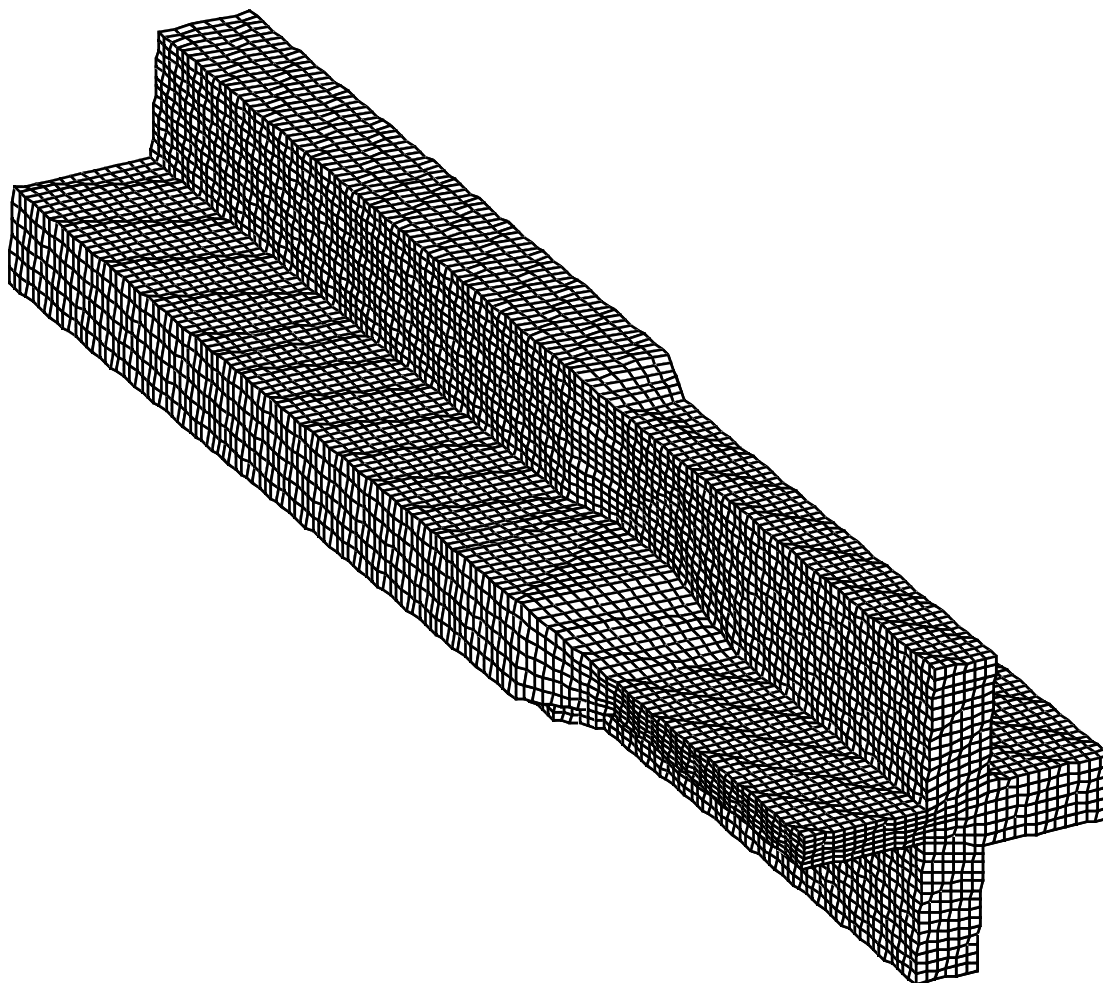


Figura 26- Malha típica utilizada no cálculo numérico de optimização do projecto de uma cabeça de extrusão

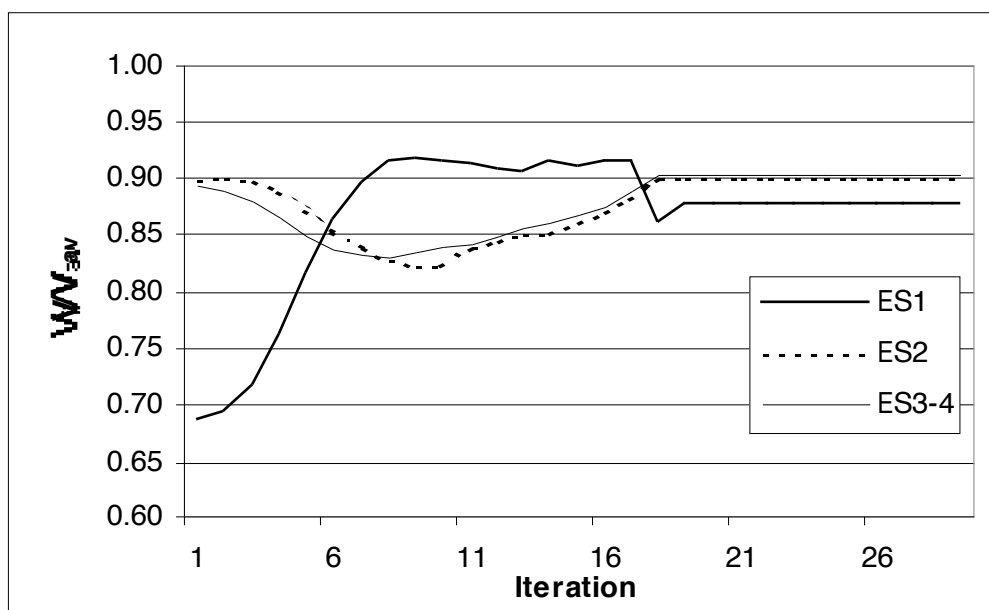


Figura 27- Evolução iterativa da velocidade média relativa em cada secção elementar da cabeça de extrusão durante o processo de optimização (de Nóbrega et al, 2001).

## 7.2. Fluidos com tensão de cedência

Como se viu, o cálculo numérico de escoamentos com fluidos de Stokes sem tensão de cedência tem, do ponto de vista numérico, muitas semelhanças com o cálculo de escoamentos newtonianos em regime turbulento, usando modelos de turbulência baseados no conceito de viscosidade turbulenta. Identicamente, também há semelhanças quando os fluidos apresentam tensão de cedência, mas há algumas especificidades que são abordadas nesta secção.

O cálculo de escoamentos de fluidos com tensão de cedência pode colocar problemas de convergência e precisão. Em regiões onde o fluido apresenta velocidades de deformação nulas, as viscosidades são ilimitadas, como se depreende do modelo da viscosidade de Herschel-Bulkley

$$\eta(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1} + \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} \quad \text{para } \tau > \tau_Y$$

$$\dot{\gamma} = 0 \quad \text{para } \tau \leq \tau_Y$$
(43)

Mesmo quando se modifica adequadamente um modelo com tensão de cedência, como se verá de seguida, as viscosidades nas regiões sem cedência podem ser muito elevadas e a convergência pode tornar-se lenta. O número de iterações necessário à convergência de um determinado problema pode facilmente ser 10 a 100 vezes superior ao necessário para o problema equivalente com fluidos sem tensão de cedência e há duas razões para esta diferença:

- i) As elevadas viscosidades nas regiões de fluido sem cedência ( $\dot{\gamma} = 0$ ), ou com velocidades de deformação muito baixas, aumentam a rigidez das matrizes dos coeficientes, o que reduz consideravelmente a taxa de convergência do cálculo;
- ii) Por outro lado, para se obter um mesmo nível de precisão no resultado final é necessário convergir as equações para um resíduo normalizado (o critério de convergência normalmente utilizado) 10 a 1000 vezes inferior ao utilizado no problema equivalente com fluidos sem tensão de cedência.

Estes problemas são explicados com base no cálculo de um caso simples, o do escoamento de um plástico de Bingham numa conduta circular. O problema tem solução exacta, o que permite avaliar o desempenho do cálculo sem ambiguidades, e apresenta-se na Figura 28 em termos de perfis radiais de velocidade e tensão de corte. Para as condições de escoamento e o modelo constitutivo seleccionado o fluido desloca-se como um corpo rígido para  $r/R \leq 0.3425$ , de que resultam aí viscosidades ilimitadas.

Para evitar o aparecimento dessas viscosidades ilimitadas a estratégia é substituir o modelo de fluido viscoplástico inicial por um dos três modelos seguintes: o modelo da bi-viscosidade de Beverly e Tanner (1992), o modelo da bi-viscosidade modificado ou o modelo de Papanastasiou (1987). Nesta lição explicaremos o modelo da bi-viscosidade modificado e apresentamos também a variante de Papanastasiou aos modelos com tensão de cedência. O leitor interessado em mais detalhes pode consultar Pinho (2001).



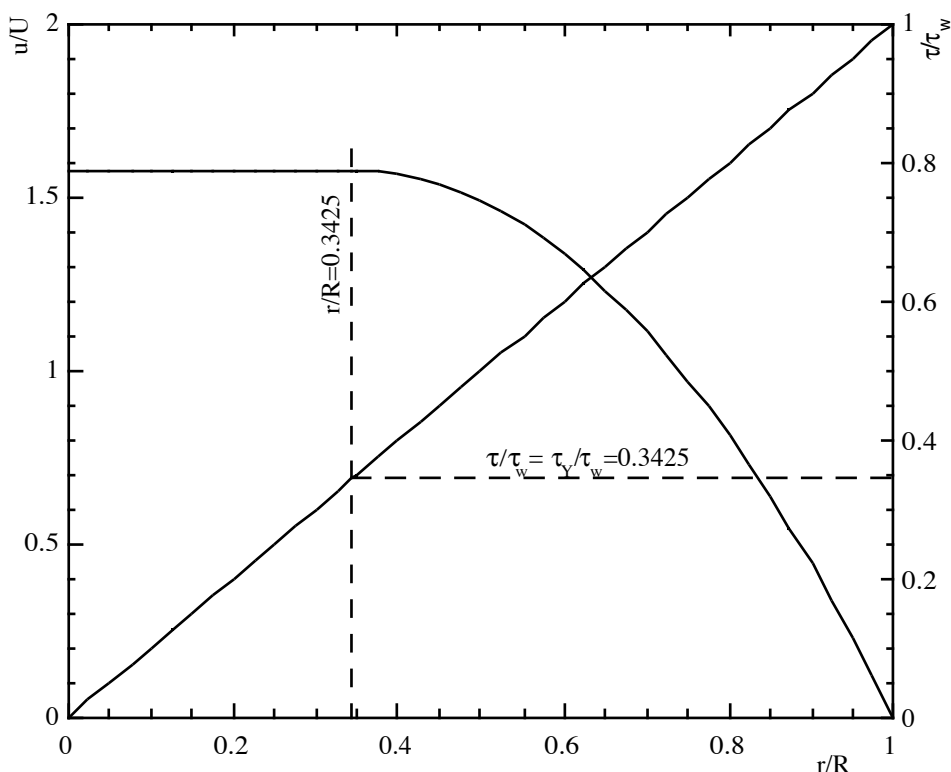


Figure 28- Perfis radiais de velocidade e tensão de corte normalizados para o escoamento laminar de um plástico de Bingham numa conduta:  $K = 0.2$  Pas,  $n = 1$ ,  $\tau_Y = 10$  Pa,  $U = 0.1$  m/s.  $\tau_w$  é a tensão de corte na parede e  $U$  é a velocidade média do escoamento.

No modelo da biviscosidade modificado, aqui explicado como sucedâneo do modelo de Herschel-Bulkley, substitui-se o modelo viscoplástico original de Herschel-Bulkley por dois modelos de viscosidade dados pela Eq. (44): um fluido newtoniano de elevada viscosidade  $\eta_r$  a baixas velocidades de deformação e um modelo de Herschel-Bulkley modificado a elevadas velocidades de deformação.

$$\eta = \eta_r \quad \text{para } |\dot{\gamma}| \leq \dot{\gamma}_c$$

$$\eta(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1} + \frac{\tau_Y - K\dot{\gamma}_c^n}{\dot{\gamma}} \quad \text{para } |\dot{\gamma}| > \dot{\gamma}_c \quad (44)$$

Nesta equação  $\dot{\gamma}_c$  é a velocidade de deformação crítica que resulta da intersecção das duas equações (44) e que é a solução da equação implícita

$$\eta_r \dot{\gamma}_c = K\dot{\gamma}_c^n + \tau_Y \quad (45)$$

O valor de  $\eta_r$  deve ser elevado para representar melhor o modelo inicial mas, se fôr excessivamente elevado, as matrizes dos coeficientes tornam-se novamente demasiado rígidas e a solução manter-se-á de convergência difícil. Um bom compromisso, para o caso de plásticos de Bingham ( $n = 1$  na Eq. 43), é utilizar  $300 \leq \eta_r/\mu \leq 1000$  como recomendado por Beverly e Tanner (1992), Soares et al (1998) e Vradis e Ötügen (1997). Outro critério, da autoria de Vradis

e Ötügen (1997), é  $\eta_r \geq 1000\tau_Y R/U$  o que nalguns casos resulta em valores de  $\eta_r$  mais elevados que o critério anterior.

Esta transformação não garante a solução de todos os problemas inerentes ao cálculo de fluidos com tensão de cedência. O modelo da bi-viscosidade, ou qualquer um dos outros modelos alternativos, elimina o aparecimento de uma viscosidade ilimitada, mas a taxa de convergência do método de cálculo permanece baixa, devido às elevadas viscosidades a baixas velocidades de deformação. Além disso, a necessidade de um critério de convergência mais restrito, para idêntico nível de precisão, implica um maior número de iterações (Pinho, 2001). É por isso recomendável que se façam alguns cálculos preliminares para testar o método de cálculo e o melhor compromisso para o valor de  $\eta_r$  a usar. É particularmente importante ter em linha de conta o tipo de resultado pretendido: se o objectivo for simplesmente obter valores integrais do escoamento sem uma precisão muito elevada, como o factor de fricção ou o número de Nusselt, o critério de convergência não necessita de ser tão exigente, mas para calcular com precisão perfis de velocidade ou identificar e distinguir zonas com e sem cedência, os critérios de convergência do cálculo terão então de ser bastante mais restritivos.

Tabela 2- Comparação entre factores de fricção teórico e calculados. Casos da Figura 29.

Resíduo normalizado	$f$	$f$ -teórico	erro [%]
1E-4	7.007	5.840	20.0
1E-5	6.121	5.840	4.8
1E-6	5.846	5.840	0.1

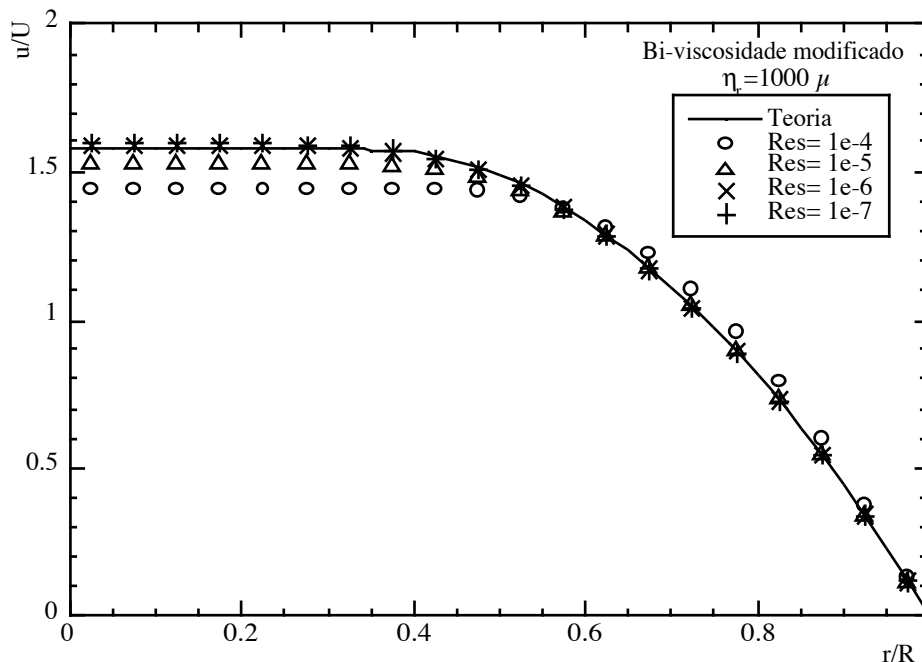


Figura 29- Efeito do critério de convergência (resíduo normalizado das equações de conservação) sobre os perfis radiais de velocidade de um plástico de Bingham a escoar numa condura em regime laminar. A malha tem 20 células uniformes na direcção radial.

É possível ter uma ideia desta dicotomia por observação da Figura 29 e da Tabela 2. Na Figura 29 comparam-se o perfil teórico de velocidade com os perfis calculados para o escoamento de plásticos de Bingham numa conduta, usando diferentes critérios de convergência numa malha com 20 células uniformes na direcção radial. Para estes mesmos casos a Tabela 2 compara os diversos valores do factor de fricção.

Veja-se também o efeito do refinamento da malha quando o critério de convergência é muito restrito na Figura 30 e Tabela 3. A importância do critério de convergência é especialmente notória: as previsões com uma malha grosseira de 10 células radiais e resíduo igual a  $10^{-7}$  são claramente superiores às previsões com malha de 20 células e resíduo igual a  $10^{-5}$  da Figura 29. Por outro lado, se aceitarmos um erro de 5% no cálculo do coeficiente de fricção um resíduo de  $10^{-5}$  já será suficiente.

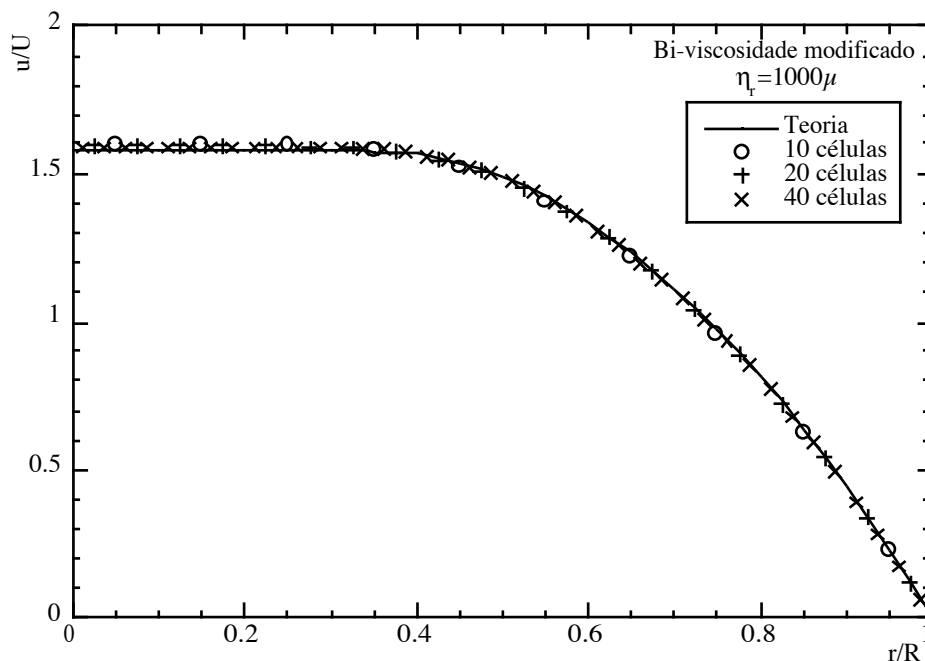


Figura 30- Efeito do refinamento da malha sobre os perfis radiais de velocidade para o escoamento de um plástico de Bingham numa conduta. Resíduo normalisado de convergência igual a  $1E-7$ .

Tabela 3- Comparação entre factores de fricção teórico e calculados. Casos da Figura 30.

Malha	$f$	$f$ teórico	erro [%]
10 células	5.805	5.840	-0.60
20 células	5.819	5.840	-0.36
40 células	5.822	5.840	-0.31

Em alternativa ao uso de duas expressões, como no modelo modificado da Eq. (44), Papanastasiou (1987) introduziu uma modificação que permite generalizar qualquer modelo

constitutivo para fluidos com tensão de cedência através de uma única expressão. Essa modificação está feita no primeiro termo do membro da direita da equação geral (46) e permite combinar o efeito da tensão de cedência com qualquer outro comportamento viscoso, suavizando o aumento súbito da viscosidade quando passa a haver cedência no material. O caso particular da Eq. (46) exemplifica a modificação de Papanastasiou a um modelo que resulta da adição de uma tensão de cedência a um modelo de viscosidade de Carreau.

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} [1 - \exp(-m\dot{\gamma})] + \eta_\infty + (\eta_0 - \eta_\infty) \left[ 1 + (\lambda\dot{\gamma})^a \right]^{\frac{(n-1)}{2}} \quad (46)$$

Castro et al (2001) analisa em mais detalhe as várias simplificações desta equação e Pinho (2001) discute o efeito do valor numérico de  $m$  sobre as previsões efectuadas com esta modificação.

Uma das funções que os fluidos de perfuração analisados na Secção 7.1.2 podem ter que realizar é o de suspender aparas de rocha e transportá-las para a superfície. Para cumprir esta missão, os fluidos são aditivados para adquirirem tensão de cedência, assim podendo transportar sólidos em suspensão sem sedimentação. Cálculos semelhantes aos da secção 7.1.2. foram repetidos por João (2001) utilizando plásticos de Bingham: a autora quantificou o efeito dos números de Hedstrom, Taylor e Reynolds, bem como da excentricidade e razão de diâmetros da conduta, sobre os coeficientes de fricção, de binário resistente e de caudal secundário, evidenciando o efeito da tensão de cedência (através do número de Hedstrom).

Algumas das contribuições na literatura usando o método dos volumes finitos para cálculo de escoamentos com tensão de cedência são os trabalhos de Vradis e Ötügen (1997), Hammad et al (2001), Nieckele et al (1998), Soares et al (1999) e Mendes et al (2002) entre outros.

### 7.3. Fluidos viscoelásticos

Nesta secção vamos apresentar resultados de simulações viscoelásticas em vários escoamentos de referência. Estes são escoamentos que apresentam zonas de comportamento singular com origem geométrica, como o escoamento numa contracção súbita plana ou axissimétrica, ou de origem hidrodinâmica, como no caso do escoamento em torno de um cilindro confinado entre duas placas paralelas.

#### 7.3.1. Contracção súbita plana

A contracção súbita plana, sobretudo para uma razão de contracção 4:1, é uma das geometrias mais utilizadas para averiguar da qualidade dos métodos numéricos, pois foi definido em 1988 (Hassager, 1988) como um dos escoamentos de referência a utilizar no estudo de escoamentos elásticos. Isto está relacionado com a existência de uma reentrância geométrica que dá origem ao aparecimento de elevadas tensões e gradientes de tensão na sua vizinhança, criando assim um escoamento particularmente sensível a comportamentos fortemente elásticos. Em particular é relevante o crescimento da zona de recirculação existente a montante da contracção e em função

da elasticidade, a queda de pressão necessária a esse escoamento e a variação de velocidade ao longo do plano central, sobretudo enfatizando-se a situação de “overshoot”.

#### 7.3.1.1. Observações experimentais

Do ponto de vista experimental, o escoamento em contracções súbitas tem sido estudado a partir do século XIX e as suas características são bem conhecidas para fluidos newtonianos e não newtonianos puramente viscosos, sobretudo na variante axissimétrica, como se constata na revisão de Boger (1987). Os escoamentos em contracções são muito sensíveis quer às propriedades dos fluidos quer aos aspectos geométricos, nomeadamente à razão de contracção. Há assim que distinguir entre os comportamentos em contracções planas e axissimétricas, de fluidos elásticos de viscosidade constante (fluidos de Boger), fluidos elásticos reofluidificantes, bem ainda como o comportamento dos fluidos no que diz respeito à viscosidade extensional (Boger, 1987). O estudo de contracções tridimensionais de secção rectangular começa também a ser tema de investigação e apresenta características específicas (Alves, 2004). De facto, podem observar-se diferentes padrões de comportamento hidrodinâmico, o que durante algum tempo originou alguma confusão. Por exemplo, fluidos de Boger em contracções axissimétricas podem ou não originar um grande crescimento do vórtice. No caso da contracção plana são necessárias razões de contracção bastante mais elevadas para se observar a mesma intensificação do vórtice de canto com a elasticidade, que se observa na geometria axissimétrica.

Na contracção circular, enquanto para alguns fluidos só se observa um vórtice de canto crescente com o aumento do número de Débora, para outros fluidos de viscosidade constante coexistem um vórtice de canto e um vórtice na reentrância que surge quando o vórtice de canto se estende até ao canto reentrante da contracção. Posteriormente, à medida que a elasticidade do escoamento aumenta, o vórtice de reentrância aumenta de tamanho e vai empurrando o vórtice de canto, sendo que a dimensão deste junto à parede da conduta de montante se mantém inalterado (Boger et al, 1986). Com o aumento da elasticidade do escoamento, o vórtice da reentrância acaba por engolir o vórtice de canto, torna-se convexo e continua posteriormente a aumentar de tamanho até se atingirem condições de instabilidade ou periodicidade no escoamento. A inspecção da Figura 31 ajuda a perceber a geometria e a descrição destes fenómenos.

Na contracção plana, os primeiros estudos com a razão de contracção de 4:1 datam de 1982 com Walters e Webster, que não encontraram nenhuma actividade especial na região com fluidos de Boger, em forte contraste com o que acontecia numa contracção circular de 4.4:1 com os mesmos fluidos. Para ajudar a clarificar esta diferença, Evans e Walters (1986) visualizaram o escoamento de fluidos elásticos reofluidificantes em contracções com razões de 4:1, 16:1 e 80:1, tendo observado a existência do mecanismo da intensificação elástica do vórtice mesmo na contracção mais pequena, mostrando ainda que o aumento da razão de contracção provoca também uma intensificação do fenómeno. Contudo, nas maiores contracções estudadas Evans e Walters (1986) encontraram um vórtice de reentrância que estava ausente da menor contracção

(4:1). Utilizando agora fluidos de Boger, Evans e Walters (1989) investigaram o seu comportamento na contracção de 4:1 e mostraram que nestas condições existia um pequeno vórtice de reentrância. A baixa viscosidade do fluido utilizado neste estudo fez com que as forças de inércia jogassem um papel importante e em consequência verificou-se uma diminuição no tamanho de ambos os vórtices com o aumento da elasticidade do escoamento, e simultâneo aumento da inércia. Contudo, no estudo em contracções circulares de Raiford et al (1989) os efeitos de inércia estiveram ausentes e neste caso também existiu vórtice reentrante que aumentou com a elasticidade do escoamento.

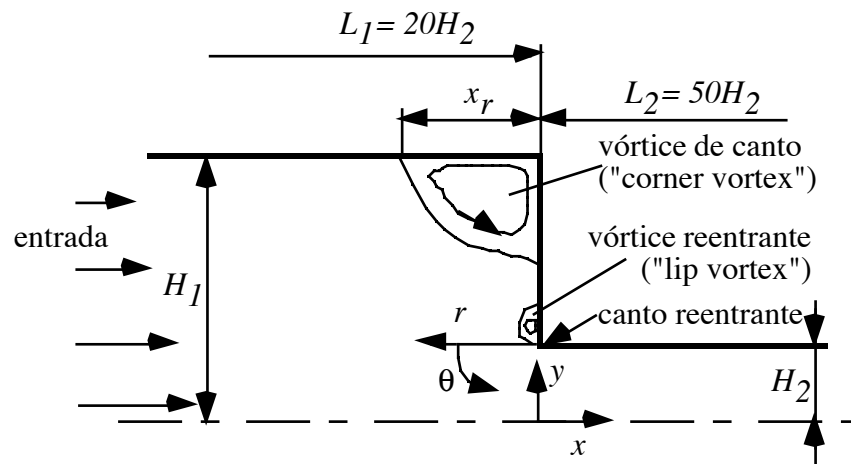


Figura 31- Representação esquemática de alguns escoamentos de fluidos viscoelásticos numa contracção plana de 4:1.

Em suma, com fluidos reofluidificantes verificou-se experimentalmente existir intensificação elástica do vórtice quer em contracções planas, quer em contracções axissimétricas de razão 4:1. Já no caso dos fluidos de Boger só na contracção circular foi reportada a intensificação do vórtice, e na contracção plana nada de especial ocorreu mesmo para razões de contracção elevadas. Esta situação foi recentemente estudada experimentalmente por Nigen e Walters (2002), que tiveram a preocupação de comparar o comportamento de fluidos de Boger e fluidos newtonianos com idêntica viscosidade de corte, em contracções com razões de contracção entre 4:1 e 32:1 e os resultados foram novamente muito claros. Enquanto que nas contracções axissimétricas a intensificação elástica do vórtice esteve sempre presente e manifestou-se também no enorme aumento da relação entre variação de pressão e caudal, nas contracções planas nunca se observou qualquer diferença entre os vórtices dos fluidos newtonianos e dos fluidos de Boger, nem nas relações de variação de pressão- caudal dos dois fluidos. Vórtices reentrantes só foram observados na contracção plana para valores de caudais super-críticos, i.e., para condições em que o escoamento é instável.

A inexistência de vórtices da reentrância em contracções planas com fluidos de viscosidade constante, mas a sua presença em contracções circulares continua por explicar, apesar de algum trabalho teórico nesse campo (Binding, 1988; Xue et al, 1998). De qualquer das formas, é hoje

assente que a viscosidade extensional joga um papel importante e será necessário revisitar estes escoamentos no futuro, usando fluidos em que as propriedades de corte e extensionais, sobretudo extensionais transientes, estejam simultaneamente mais bem controladas. De facto, as experiências de White e Baird (1986,1988-a) mostraram a relevância do crescimento da tensão extensional na zona da contracção sobre a dinâmica do comportamento dos vórtices em contracções planas de 4:1 e 8:1. Posteriormente, os mesmos autores (White e Baird, 1988-b) simularam numericamente esses escoamentos usando a equação constitutiva do fluido de PTT com coeficiente exponencial de tensão. O aumento do vórtice foi observado com menores valores do parâmetro  $\varepsilon$ , o que sugeriu o aumento do vórtice e a formação do vórtice de reentrância quanto mais o fluido se aproximasse de um fluido de Maxwell convectivo que, como sabemos, tem elevadas viscosidades extensionais em determinadas condições.

Em qualquer das contracções (plana ou circular), o aumento indefinido da elasticidade do escoamento (numa situação de inércia desprezável), conduz inevitavelmente a uma situação de instabilidade após o crescimento do vórtice em regime permanente. Essa instabilidade pode assumir contornos caóticos ou começar por apresentar periodicidade. Esta sequência de eventos foi desde cedo demonstrada (Cable e Boger, 1979; Nguyen e Boger, 1979) e o estudo destas instabilidades tem sido motivo de investigação, como por exemplo por Lawler et al (1986), McKinley et al (1991) e mais recentemente Yesilata et al (1999).

### 7.3.1.2- Simulações numéricas

Os estudos numéricos de escoamentos em contracções iniciaram-se também em finais dos anos setenta e início dos anos oitenta, mas cedo se constatou haver problemas de convergência. Por isso, o esforço de desenvolvimento nesta área concentrou-se sobretudo no desenvolvimento de métodos de cálculo mais precisos para a previsão do escoamento em regime permanente e do fenómeno do crescimento do vórtice, e que comparem bem com resultados experimentais. A história desses desenvolvimentos é extensa, mas está descrita com algum detalhe em Owens e Phillips (2002). Também nós nos temos debruçado no estudo deste escoamento e é parte desse esforço que se descreve nesta secção. Aqui, apresentam-se resultados de algumas simulações numa contracção súbita plana de 4:1 com fluidos de Maxwell contravariantes, de Oldroyd-B, Phan-Thien—Tanner linear e Phan-Thien—Tanner exponencial. Em todos os casos apresentam-se sómente resultados actualmente considerados fiáveis obtidos com volumes finitos e não se farão considerações sobre o efeito do refinamento da malha.

#### 7.3.1.2.1- Fluido de Maxwell contravariante

O estudo numérico do escoamento numa contracção súbita plana efectuado pelo método dos volumes finitos e com resultados de elevada precisão foi apresentado por Alves et al (2000). A qualidade dos resultados deveu-se à combinação de malhas refinadas com a utilização de um esquema de elevada resolução, para os termos convectivos da equação constitutiva, no caso vertente o esquema MINMOD. Isso veio também permitir obter resultados muito precisos com

malhas refinadas e a números de Débora/Weissenberg mais elevados, resultados que marcaram a diferença relativamente a anteriores trabalhos do grupo (Oliveira e Pinho, 1999b) e de outros autores (Sato e Richardson, 1994), em que se utilizaram métodos de discretização de menor precisão, (frequentemente de primeira ordem) e malhas pouco refinadas.

A geometria do escoamento e a nomenclatura utilizada estão também patentes na Figura 31, o número de Reynolds ( $Re \equiv \rho U_2 H_2 / \eta$ ) é mantido constante e igual a 0.01 e o número de Débora ( $De \equiv \lambda U_2 / H_2$ ) varia para se estudar o efeito da elasticidade sobre o escoamento.

Hinch(1993) analisou teóricamente o escoamento de um fluido de Oldroyd-B na vizinhança do canto reentrante e demonstrou que nesta região os componentes de velocidade e tensão variam com a distância radial ao canto segundo leis do tipo

$$u_i \propto r^{5/9} \text{ e } \tau_{ij} \propto r^{-2/3} \quad (47)$$

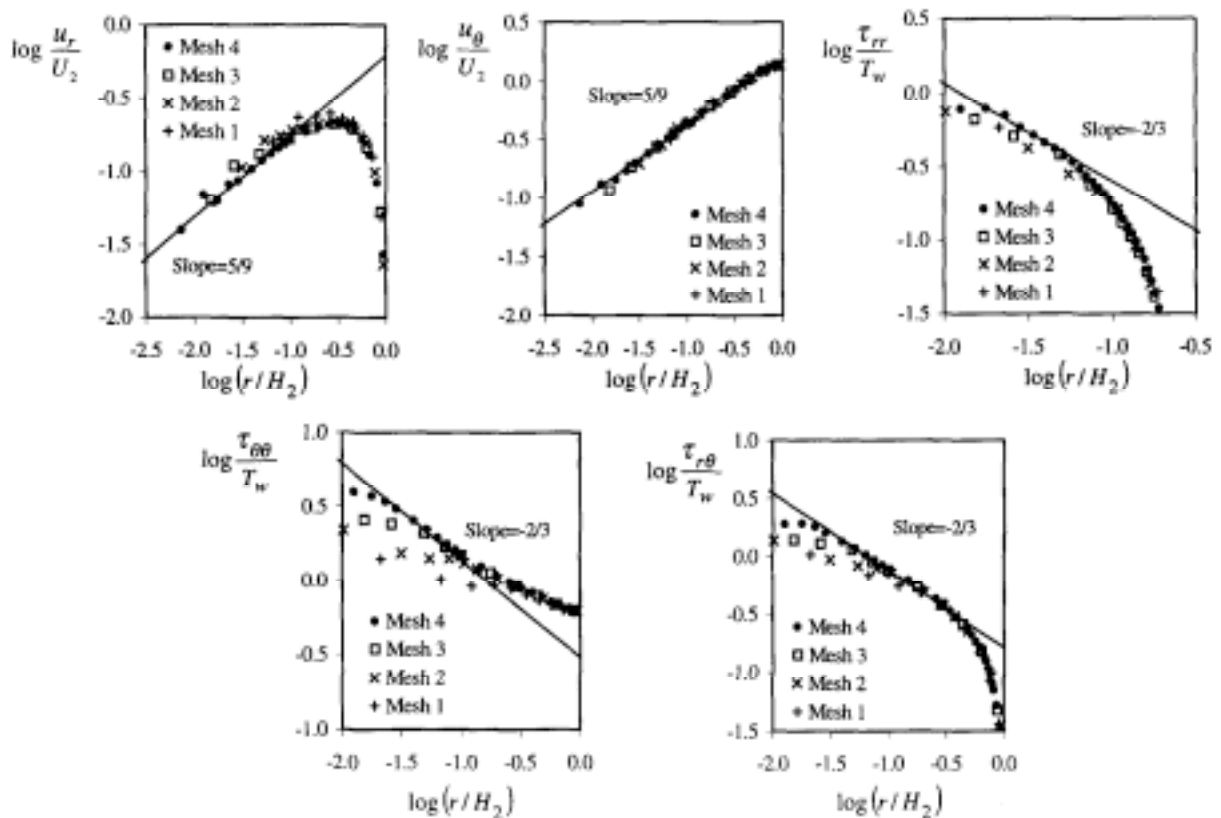


Figura 32- Comportamento assintótico das previsões de velocidade e tensão junto ao canto reentrante, para o escoamento com  $De=1$  de um fluido viscoelástico de Maxwell contravariante e ao longo da direcção  $\theta = \pi/2$ . Reproduzido de Alves et al (2000).

Este comportamento assintótico só é válido para números de Débora inferiores a 1 pois não pode haver qualquer vórtice no canto reentrante. Hinch mostrou ainda que este comportamento assintótico se devia fundamentalmente ao predomínio das tensões elásticas sobre as tensões do solvente newtoniano, pois se assim não fosse recuperar-se-ia o comportamento assintótico deduzido para fluidos newtonianos por Dean e Montagnon (1949) e Moffat (1964). Em consequência, o comportamento assintótico da Eq. (47) também é válido com fluidos de



Maxwell contravariantes e isso pode confirmar-se na Figura 32, onde se mostra também que a malha M3 já tem o grau de refinamento suficiente a uma previsão qualitativa e quantitativamente correcta. O pequeno desvio junto à parede não é de estranhar porque Hinch previu o comportamento do tipo  $-2/3$  na aproximação à parede, mas ainda longe desta. A malha M3 utilizada nestes cálculos possuía 14258 células computacionais e uma dimensão adimensional mínima de  $\delta_x/H_2 = 0.01$ , enquanto que a malha M4 com 57032 células tinha uma dimensão mínima junto ao canto reentrante de  $\delta_x/H_2 = 0.005$ .

A variação no padrão de escoamento com o número de Débora está bem ilustrado na sequência de previsões de linhas de corrente da Figura 33. Aí vê-se claramente um vórtice incipiente no canto reentrante a  $De=1$ , crescendo até cerca de  $De=4$ , altura em que se estende em direcção ao vórtice de canto. Para  $De=5$  os dois vórtices estão quase fundidos numa única entidade, que depois aumenta de comprimento. Na fase de crescimento do vórtice de reentrância, o vórtice de canto diminui ligeiramente de comprimento e intensidade. Esta variação no comprimento do vórtice de canto em função de  $De$  está patente na Figura 34. Em linhas gerais e

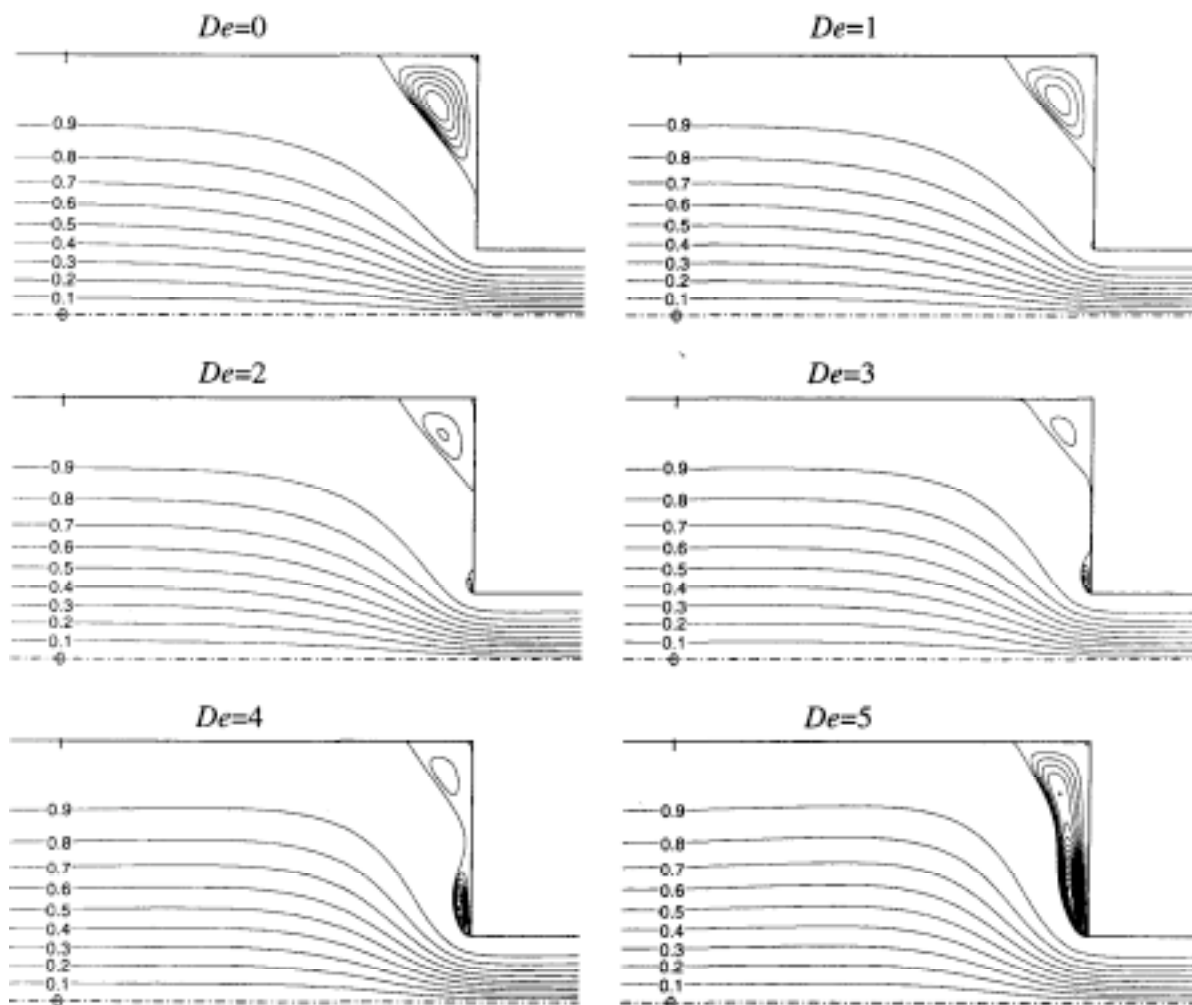


Figura 33- Sequência de linhas de corrente obtidas na malha M3 para  $Re=0.01$ . As linhas de corrente no interior dos vórtices estão igualmente espaçadas com  $\delta_\psi = 2 \times 10^{-4}$ . Reproduzido de Alves et al (2000).

com pequenas diferenças devido a diferentes níveis de refinamento da malha, esta sequência de eventos está de acordo com outros resultados da literatura obtidos para o escoamento numa contracção plana de 4:1, como por exemplo nos trabalhos de Phillips e Williams (1999) ou Matallah et al (1998).

O efeito da singularidade provocada pelo canto reentrante da contracção súbita está bem patente nas isolinhas do campo de tensões da Figura 35. Na parede da contracção a figura mostra gradientes de tensão muito elevados, mas as tensões máximas obtem-se de facto junto à parede no início da camada limite da conduta de jusante. Estas tensões são transportadas por convecção para jusante, formando uma camada limite de tensão muito fina. A figura mostra ainda que as isolinhas são bastante suaves, uma indicação da boa qualidade dos resultados obtidos quer devido aos métodos de discretização, quer devido ao grau de refinamento utilizado.

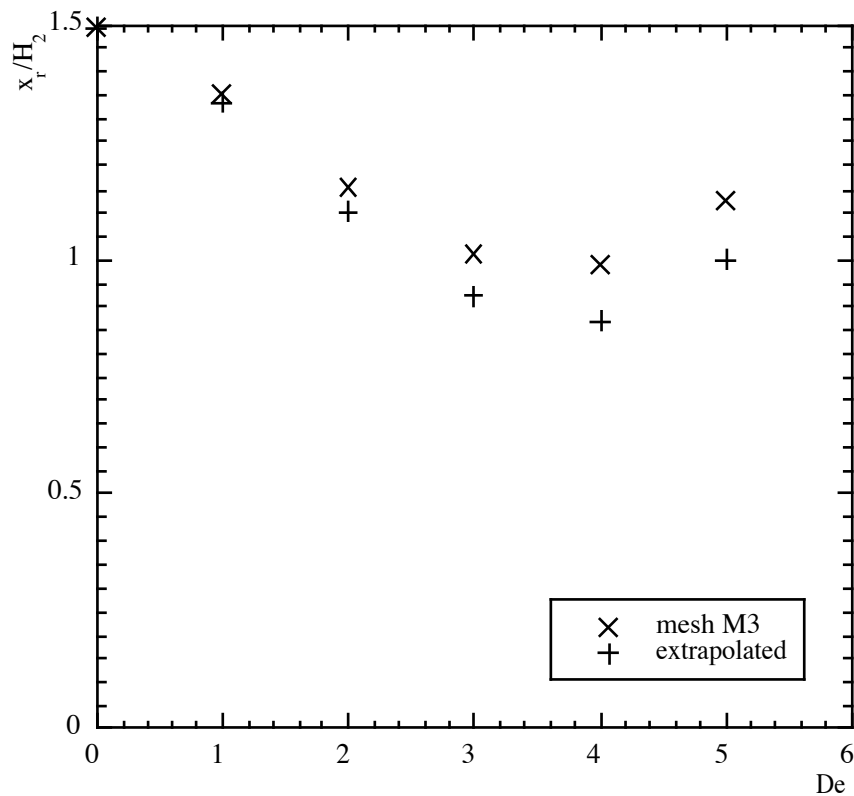


Figura 34- Variação do comprimento do vórtice de canto numa expansão súbita plana de 4:1 em função de  $De$ , para  $Re= 0.01$  e um fluido viscoelástico de Maxwell contravariante. Os valores extrapolados foram obtidos pela extrapolação de Richardson com base em valores provenientes de 3 malhas consecutivamente refinadas. Os cálculos numéricos baseiam-se no esquema MINMOD.

Para terminar a caracterização do escoamento numa contracção súbita plana 4:1 do fluido de Maxwell contravariante, apresenta-se na Figura 36 a variação da correcção de Couette com o

número de Débora. A correcção de Couette é a perda de carga localizada através da contracção devidamente adimensionalizada, como na Eq. (48).

$$C = \frac{\Delta p - (\Delta p_1)_{FD} - (\Delta p_2)_{FD}}{2T_w} \quad (48)$$

onde  $(\Delta p_1)_{FD}$  e  $(\Delta p_2)_{FD}$  se referem às variações de pressão do escoamento totalmente desenvolvido na conduta de montante e jusante, respectivamente.

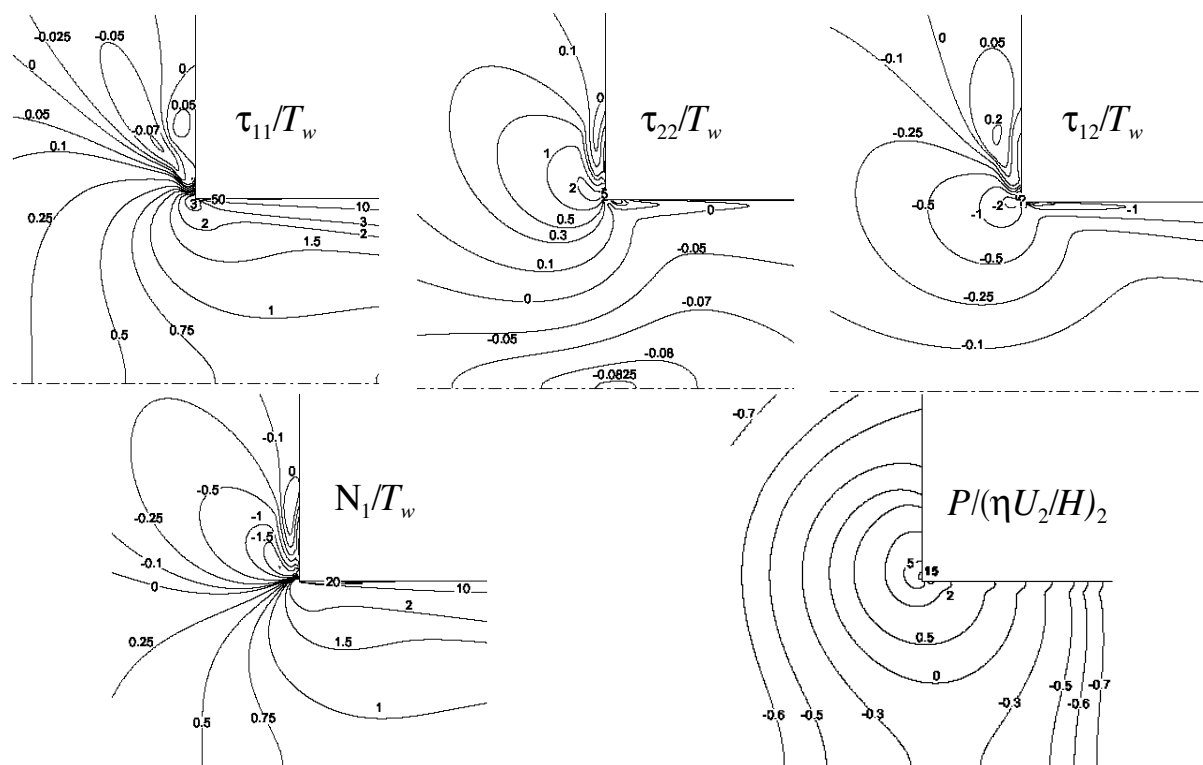


Figura 35- Isolinhas de  $\tau_{11}/T_w$ ,  $\tau_{22}/T_w$ ,  $\tau_{12}/T_w$ ,  $N_1/T_w$  e  $P/(\eta U_2/H)_2$  junto à reentrância para  $De=3$ . Resultados obtidos na malha M4. Reproduzido de Alves et al (2000).

A figura inclui dados da literatura, nomeadamente das previsões de Coates et al (1992), para uma contracção axissimétrica de 4:1 com um modelo de Maxwell contravariante, modificado (MUCM) e um modelo FENE de Chilcott-Rallison modificado (MCR), bem como as previsões de Debbaut et al (1988) para a contracção plana 4:1, com um fluido Oldroyd-B com razão de viscosidades 1/9. As previsões deste último trabalho foram obtidas com elementos finitos usando um esquema de interpolação de menor precisão (SU do inglês “Streamline Upwinding”) e numa malha grosseira, daí os valores mais elevados de  $C$  típicos de situação, onde a difusão numérica pode ser importante.

#### 7.3.1.2.2- Fluido Oldroyd-B

Para estudar com precisão o escoamento de fluidos Oldroyd-B utilizou-se simultaneamente o esquema CUBISTA de elevada resolução para os termos convectivos da equação das tensões, desenvolvido por Alves et al (2003-a) para escoamentos de fluidos viscoelásticos, e malhas muito

refinadas, tendo cerca de 170 000 células computacionais, a que correspondem mais de 1 milhão de graus de liberdade. Os cálculos foram efectuados para  $Re = 0$ , e uma razão entre as viscosidades do solvente e total igual a  $1/9$  para facilitar comparações com resultados da literatura. A elevada precisão dos resultados, a maioria dos quais tem uma incerteza inferior a 0.3%, permite que estes valores sejam considerados de referência, podendo encontrar-se mais detalhes em Alves et al (2003-b).

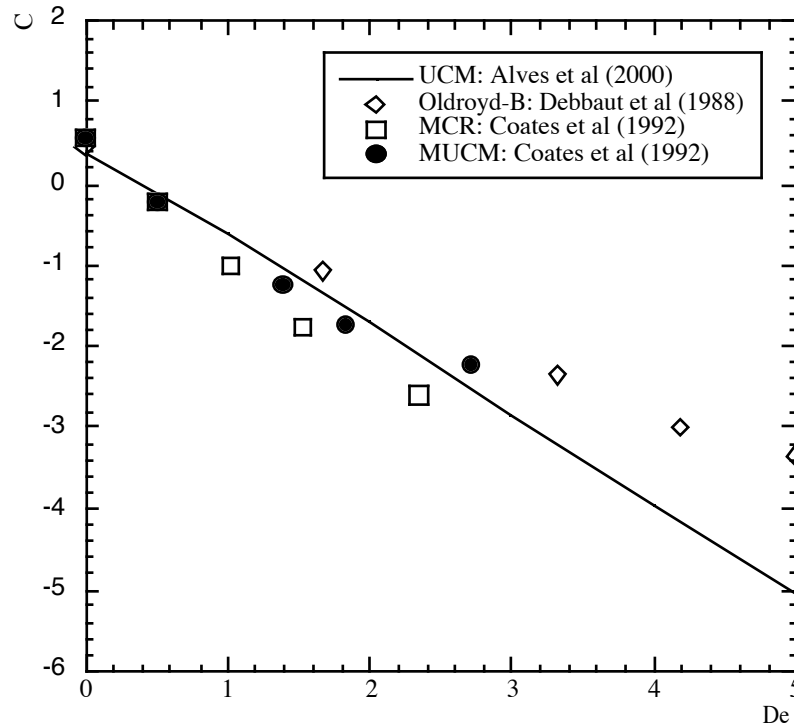


Figura 36-Comparação dos valores previstos para a correcção de Couette e valores da literatura, em função de  $De$ . Reproduzido a partir de Alves et al (2000). UCM: modelo de Maxwell contravariante, MUCM: modelo de Maxwell contravariante modificado, MCR: modelo FENE-CR modificado.

O actual estado da arte no que diz respeito à previsão do comprimento do vórtice no canto de montante ( $x_R$ ) é o que está patente na Figura 37, onde se incluem os nossos resultados de  $X_R$  ( $X_R \equiv x_R/H_2$ ) (Alves et al, 2003-b). Para baixos valores do número de Débora, o comprimento da recirculação tem necessariamente de tender para a solução newtoniana. Um estudo semi-analítico do escoamento lento de fluidos newtonianos foi recentemente efectuado por Rogerson e Yeow (1999) que calcularam  $X_R = 1.5$ , valor que coincide com as nossas previsões da Figura 36. Contactos com o Professor Webster indicam-nos que o desvio dos seus resultados a baixos números de Débora se devem provavelmente a uma insuficiente convergência no tempo das simulações efectuadas em Aboubacar e Webster (2001) e Aboubacar et al (2002). Os restantes resultados de  $X_R$  a elevados números de Débora são geralmente superiores, uma indicação de maior difusão numérica, como foi demonstrado em Alves et al (2000).

Quanto à intensidade deste mesmo vórtice ( $\Psi_R$ ), a sua variação com o número de Débora apresenta-se na Figura 38, que inclui novamente resultados da literatura. É agora ainda mais óbvia a qualidade dos nossos resultados, quer porque apresentam as menores intensidades (sabe-se que a difusão numérica e o recurso a esquemas de discretização de menor precisão conduzem a maiores intensidades, Alves et al, 2000) mas também porque apresentam uma variação mais suave. Os casos em que isso não acontece sugerem que as malhas não eram suficientemente refinadas, o que se confirma por consulta desses trabalhos. À semelhança de  $X_R$  vê-se que  $\Psi_R$  diminui com a elasticidade o que está de acordo com observações do comportamento do fluido de Boger em contracções planas, que não exibem o aumento do vórtice por efeito da elasticidade. Este comportamento tinha já sido obtido para o modelo de Maxwell contravariante como está patente na Figura 34, o que não é de estranhar visto que o fluido Oldroyd-B não é mais que a soma de um modelo de Maxwell com um solvente newtoniano.

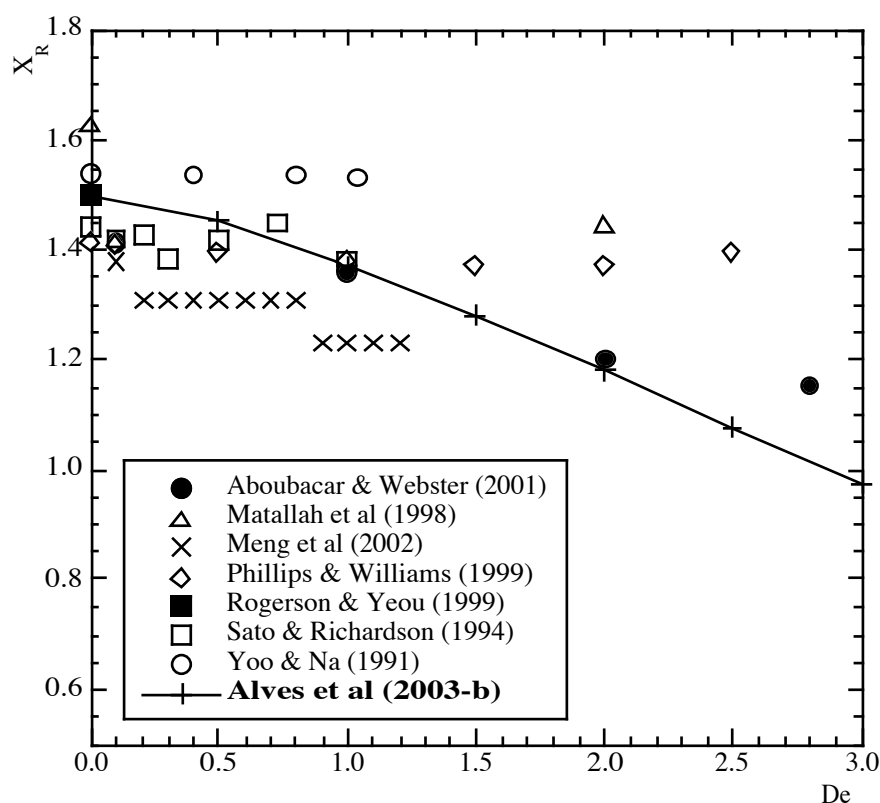


Figura 37- Comparação entre previsões da literatura para o comprimento adimensional da bolha de recirculação numa contracção súbita plana de 4:1 para fluidos Oldroyd-B. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

Para escoamentos a  $De > 3$  não é possível saber se há uma inversão do comportamento, pois não foi possível obter uma solução convergida na malha mais fina. Quando se utiliza um método de primeira ordem (método *upwind*) vê-se de facto essa inversão, mas isso pode ser um artefacto numérico devido a excessiva difusão numérica ou até pode acontecer que deixe de haver solução bidimensional em regime permanente para este fluido, como discutido por Keunings (1986)

numa tentativa de explicar os problemas de convergência a elevado número de Débora. No caso das simulações com o fluido de Maxwell convectivo das Figuras 33 a 36 foi possível chegar a  $De=5$  pois utilizou-se uma malha mais grosseira. Ora, dadas as semelhanças entre os fluidos de Maxwell e Oldroyd-B a comparação entre as Figuras 33 a 36 com as Figuras 37 a 39 mostra bem o efeito benéfico do refinamento da malha sobre as previsões.

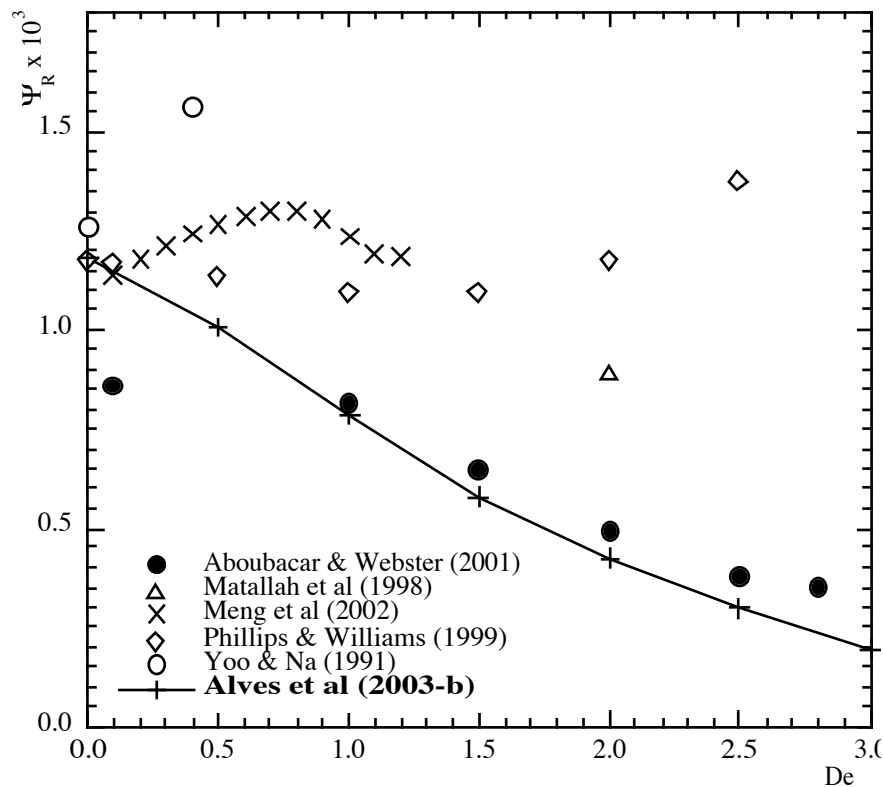


Figura 38- Comparação entre previsões da literatura para a intensidade adimensional da bolha de recirculação numa contracção súbita plana de 4:1 para fluidos Oldroyd-B. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

Podemos ter uma ideia mais concreta da especificidade deste tipo de escoamento e da evolução da zona de recirculação com a elasticidade por observação das linhas de corrente na Figura 39, obtidas com o esquema CUBISTA na malha mais refinada para o fluido Oldroyd-B. É nítida a redução do tamanho do vórtice do canto saliente com a elasticidade, mas também é claro o aparecimento de um vórtice na zona do canto reentrante, como aliás acontecia com o fluido de Maxwell, mas agora menos intenso devido à maior precisão dos cálculos. Para  $De=2.5$  o vórtice reentrante ainda é de pequenas dimensões, mas é mais intenso do que para valores de  $De$  inferiores. É nítido que este vórtice não é um resíduo numérico e apresenta uma intensidade finita, que pode inclusivé obter-se também por extrapolação para uma malha de dimensão nula, a partir de cálculos em malhas consecutivamente mais refinadas. A Figura 39 foi obtida com a malha mais refinada, mas o cálculo com várias outras malhas e posterior extrapolação dos

resultados para uma malha com células de espessura nula permitem concluir que o vórtice reentrante só aparece para números de Débora entre 1 e 1.5 (Alves et al, 2003-b).

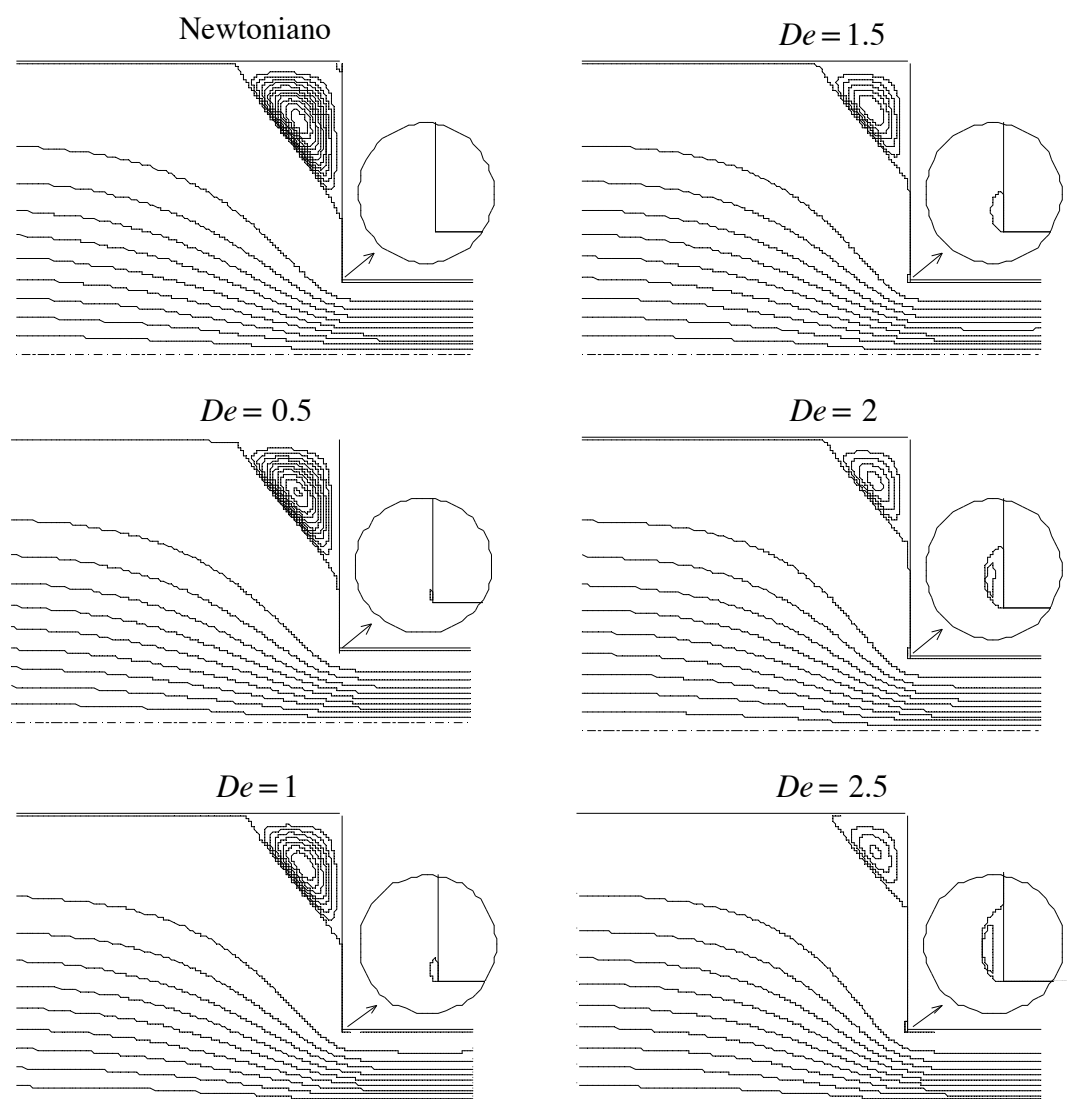


Figura 39- Linhas de corrente para o escoamento de um fluido Oldroyd-B numa contracção plana 4:1. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

A variação da correção de Couette (definida na Eq 48) com o número de Débora para fluidos de Oldroyd-B pode observar-se na Figura 40. A variação é linear e  $C$  atinge valores negativos (recuperação de pressão elástica), em conformidade com cálculos efectuados para o fluido de Maxwell convectivo. Este comportamento, contudo, é contrário ao observado experimentalmente, pelo que se conclui que os modelos Maxwell e Oldroyd-B não parecem os mais adequados a prever a perda de carga localizada em contracções súbitas planas. Esta falha não é inerente ao actual método de cálculo: até à data, e usando variadíssimas técnicas numéricas, nenhum grupo de investigação foi capaz de prever a variação observada experimentalmente para este coeficiente de perda de carga localizada. Contudo, diga-se também em abono da verdade, que a medição

experimental deste coeficiente de forma correcta não é tarefa simples e podem por isso haver incertezas experimentais significativas.

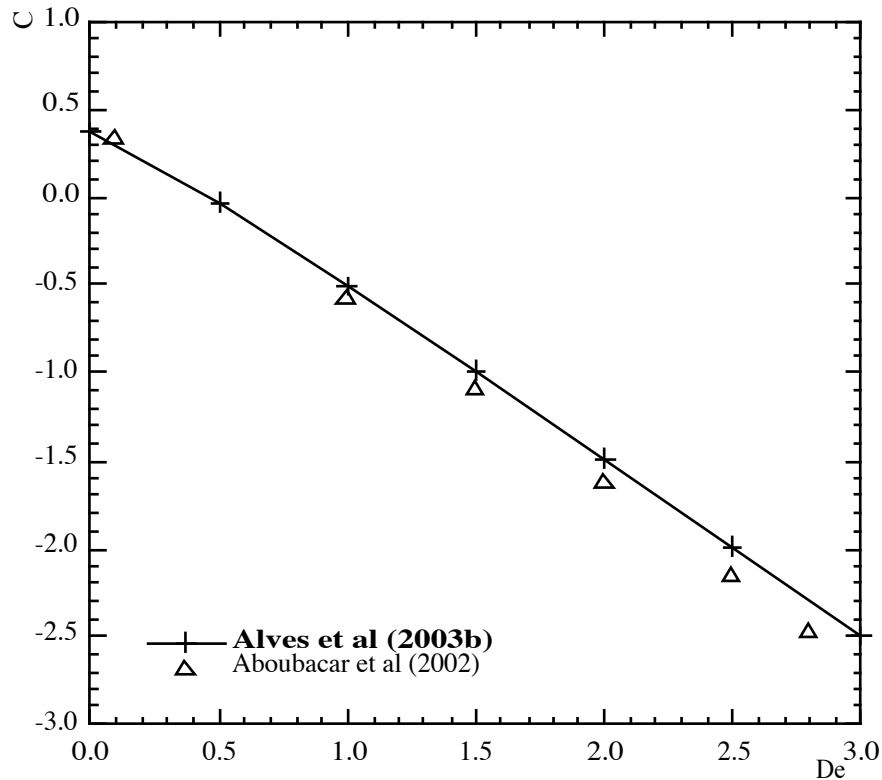


Figura 40- Variação da correcção de Couette com o número de Débora para fluidos de Oldroyd-B. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

### 7.3.1.2. 3- Fluido PTT linear

As simulações com o fluido PTT (Eq. 34) permitem ver o efeito simultâneo da reofluidificação da viscosidade de corte e  $\Psi_1$  e da elasticidade dos fluidos que, como sabemos pela revisão dos resultados experimentais, é dramaticamente diferente do comportamento dos fluidos de Boger representados pelo modelo de Oldroyd-B. Os resultados que aqui se apresentam, extraídos de Alves et al (2003-b), foram obtidos nas mesmas condições dos resultados da secção anterior, ie, usando o mesmo esquema de alta resolução CUBISTA e a mesma malha muito refinada com mais de 1 milhão de graus de liberdade. O modelo PTT utilizado é a variante linearizada (Eq. 35-b) na sua vertente simplificada ( $\xi = 0$ ).

Como os fluidos PTT têm um comportamento extensional limitado (inversamente proporcional ao valor do parâmetro  $\varepsilon$ , ver Figura 7-a), ao contrário do que acontece com os fluidos Maxwell ou de Oldroyd-B, foi possível obter soluções convergidas para números de Débora superiores a 100. Este fluido foi combinado também com um solvente newtoniano definindo idênticamente uma razão entre as viscosidade do solvente e polimérica de 1/9 para baixas velocidades de deformação de corte.



O fluido PTT é reofluidificante quer na viscosidade viscosimétrica quer no coeficiente da primeira diferença de tensão normal. Os resultados que aqui se apresentam dizem respeito a um valor  $\varepsilon = 0.25$ , que é típico para soluções concentradas de polímero e polímero fundido (neste caso se a viscosidade do solvente fôr anulado). No entanto, como o impacto da viscosidade do solvente é mínimo, os resultados são qualitativamente semelhantes quando a viscosidade do solvente é nula.

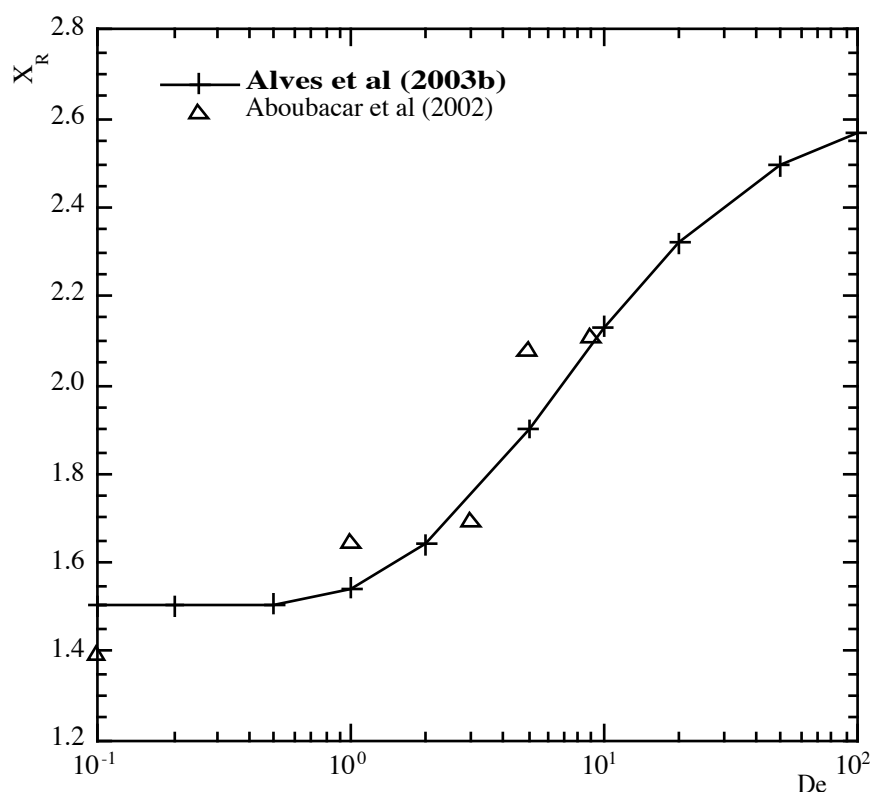


Figura 41- Variação do comprimento de recirculação com a elasticidade do escoamento para o fluido PTT linear numa contracção plana 4:1. Reproduzido de Alves et al (2003-b). Incerteza dos dados Alves et al: 0.02% a  $De = 0$ , 0.1% a  $De = 20$  e 0.5% a  $De = 100$ .

Ao contrário do que acontecia com o fluido Oldroyd-B, o comprimento da recirculação (Figura 41) e a sua intensidade (Figura 42) aumentam com o número de Débora, havendo uma menor sensibilidade dos resultados ao grau de refinamento da malha, excepto para elevadas elasticidades. Este comportamento é aquele que se esperava a fazer fé nos resultados experimentais, já que aí se observou o aumento elástico do vórtice quando os fluidos são reofluidificantes. Nota-se ainda que o comprimento de recirculação tende a estabilizar a elevados números de Débora, pelo que este modelo não parece adequado a prever as situações experimentais, em que o comprimento de recirculação aumenta enormemente e o escoamento atinge situações de instabilidade. No entanto, é necessário efectuar cálculos tridimensionais e dependentes do tempo para de facto investigar correctamente esses fenómenos.

A evolução das linhas de corrente do escoamento e o crescimento do vórtice com a elasticidade podem ser melhor observados na Figura 43 que reforça as diferenças de comportamento do fluido reofluidificante elástico em relação ao fluido de Boger. Para baixos números de Débora, começa por se observar um aumento do vórtice de canto em direcção à reentrância, ao mesmo tempo que há um aumento do seu comprimento e não é detectado nenhum vórtice reentrante. Quando o vórtice de canto ocupa toda a largura da contracção ( $De=2$ ), a sua forma passa de côncava a convexa à medida que a elasticidade do escoamento aumenta (de  $De \approx 2$  até  $De \approx 10$ ) e o vórtice torna-se mais comprido. Também se constata que o centro do vórtice se desloca em direcção ao canto reentrante com o aumento da elasticidade. Para valores elevados de  $De$  os aumentos de  $X_R$  e  $\Psi_R$  vão se tornando progressivamente menos intensos.

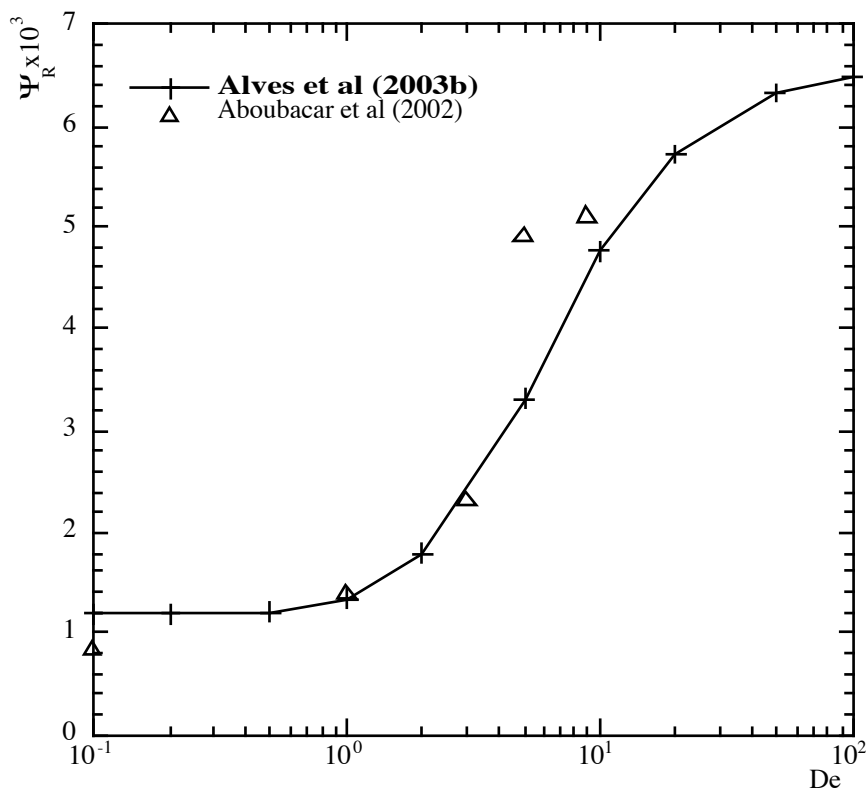


Figura 42- Variação com a elasticidade da intensidade do vórtice para o escoamento de um fluido PTT linear numa contracção plana 4:1. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

A evolução da correcção de Couette para o fluido PTT linear está ilustrada na Figura 44. O coeficiente diminui com  $De$  até um valor mínimo que é negativo para  $De \approx 20$ , e depois aumenta. Assim, o aumento da correcção de Couette só acontece para  $De > 20$ , pelo que novamente se pode questionar da utilidade deste modelo em prever o aumento da perda de carga localizada em entradas súbitas medido experimentalmente. Contudo, também não devemos esquecer que nas recentes medições experimentais de Nigen e Walters (2002), numa contracção súbita plana não se é totalmente conclusivo a este respeito: na sua Figura 13 há valores negativos de  $C$  ( $C = -1.37$ ) para um caudal de 40 g/s com o fluido de Boger 2 e o xarope reo-fluidificante 2. É possível que

tais valores negativos sejam atribuídos a incerteza experimental, pois as medições dos mesmo autores numa contracção súbita axissimétrica, com uma conduta de saída curta, já indicaram uma contínua perda de pressão ( $C > 0$ ). Resultados mais detalhados das previsões com o fluido PTT linear encontram-se em Alves et al (2003-b).

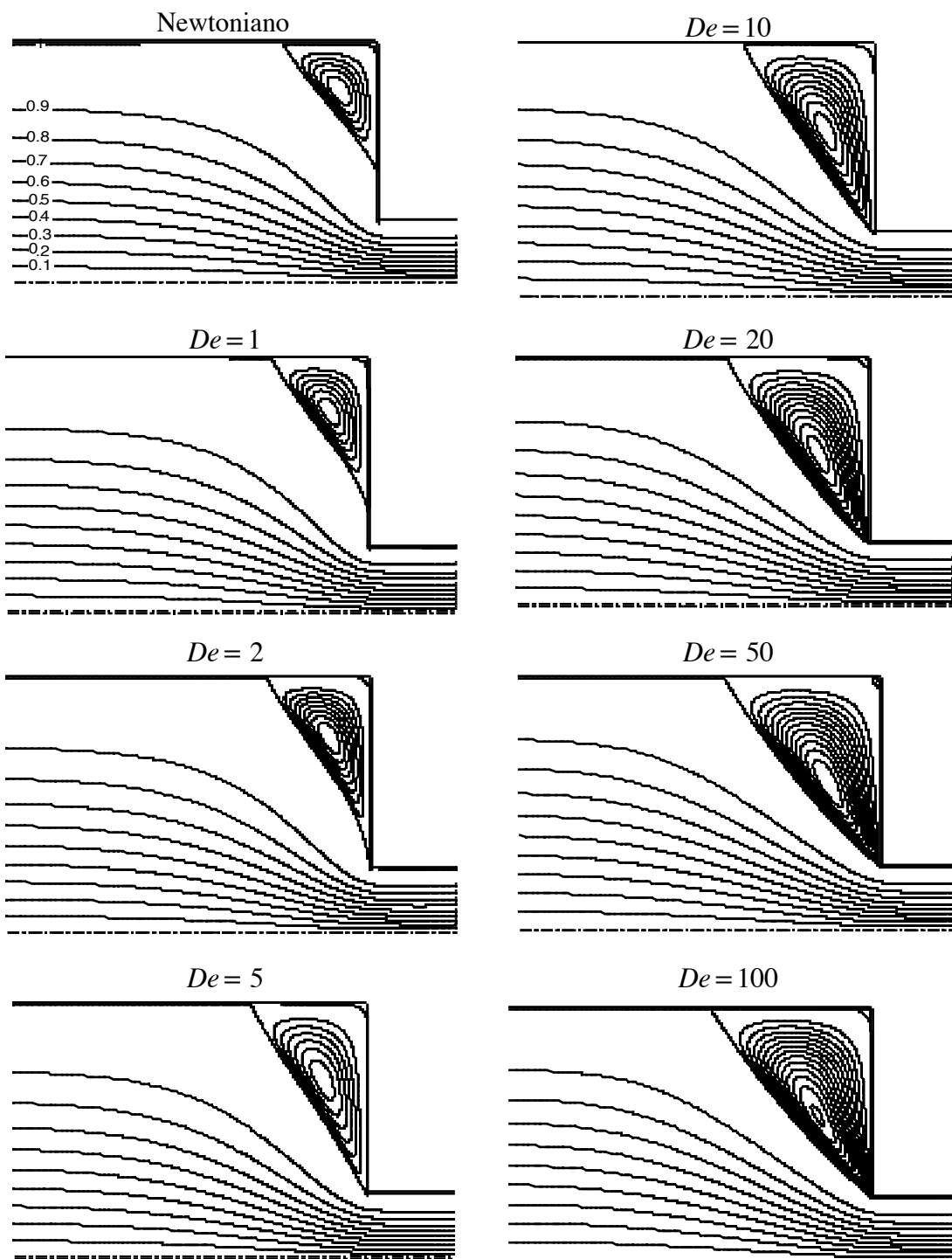


Figura 43- Evolução das linhas de corrente do escoamento de um fluido PTT linear numa contracção plana 4:1. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

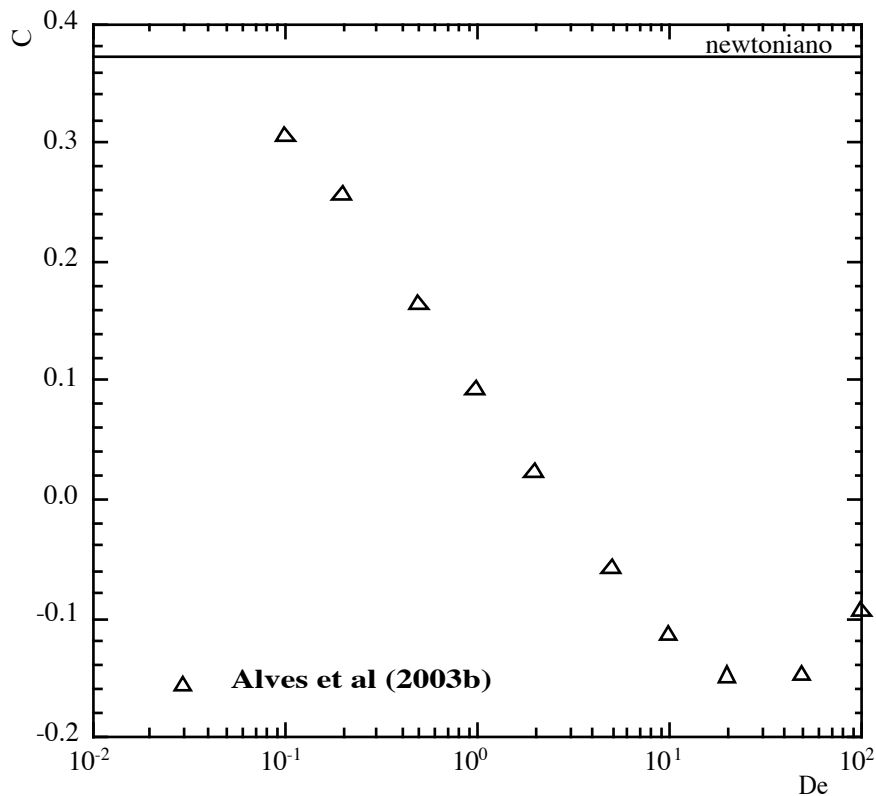


Figura 44- Variação da correção de Couette com a elasticidade do escoamento para um fluido PTT linear.

#### 7.3.1. 2. 4- Fluido PTT exponencial

O modelo PTT exponencial simplificado das Eqs. (34) e (35-a) difere do modelo PTT linear da secção anterior na variação da viscosidade extensional. Esta agora diminui após atingir o seu valor máximo, i.e., o fluido PTT exponencial é reofluidificante em extensão acima de um valor de velocidade de deformação (ver Figura 7-a), enquanto que o modelo PTT linear exibe uma viscosidade extensional constante, após a fase inicial de reoessamento<sup>3</sup>. É natural que esta diferença de reologia afecte o comportamento hidrodinâmico do escoamento numa contracção súbita, o que se estudou através de um conjunto de simulações na mesma contracção súbita plana e utilizando as mesmas malhas refinadas e esquema de discretização (CUBISTA). A este modelo adicionou-se novamente um solvente newtoniano, definindo-se assim uma razão entre as viscosidades do solvente e total igual a 1/9 para velocidades de deformação nula.

Para este fluido, as variações de  $X_R$  e  $\Psi_R$  com o número de Débora estão patentes nas Figuras 45 e 46. Foi possível com este fluido obter convergência para simulações a números de Débora extremamente elevados, da ordem de 10 000, porque o comportamento reofluidificante das viscosidades viscométrica e extensional é tão intenso que o fluido basicamente tende para um comportamento newtoniano quando  $De$  aumenta. Por esta razão o tamanho e intensidade do

<sup>3</sup> Quando o valor de  $\varepsilon$  excede 0.5, a viscosidade extensional do modelo PTT linear também exibe um comportamento reofluidificante em extensão.

vórtice aumentam enquanto a razão de Trouton aumenta, atingindo um máximo e exibindo um comportamento semelhante ao do modelo PTT linear. Depois, para valores ainda mais elevados de  $De$ , e como as viscosidades de corte e extensional do fluido tendem para os valores do solvente, o comportamento hidrodinâmico vai tender para o comportamento newtoniano.

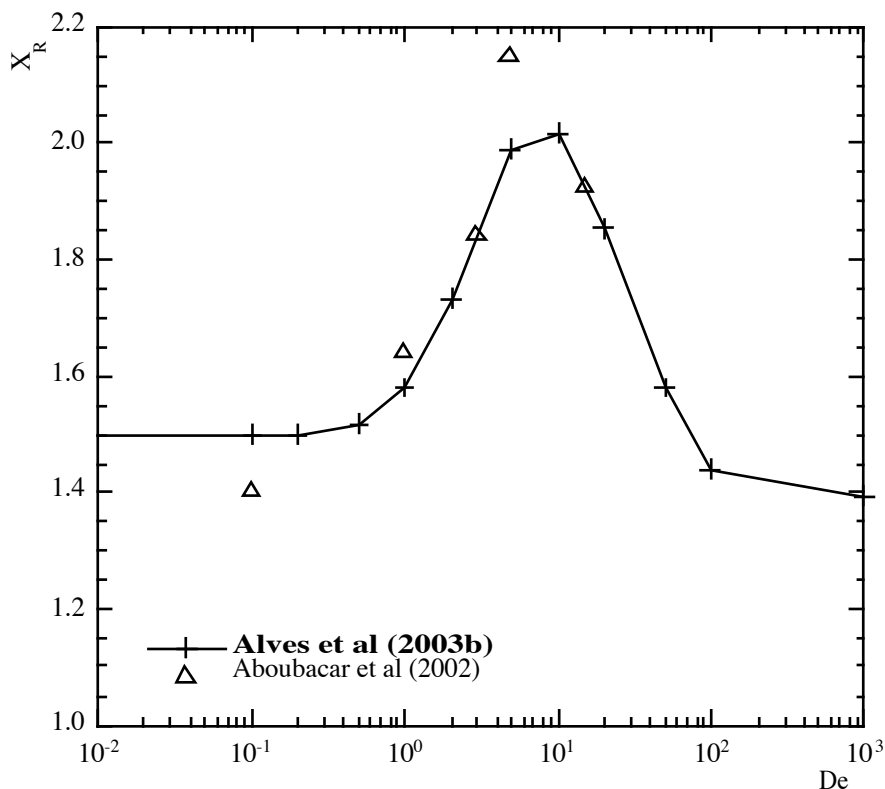


Figura 45- Variação do comprimento adimensional do vórtice com o número de Débora para o escoamento de um fluido PTT exponencial numa contracção súbita plana 4:1. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

Quanto à correcção de Couette, ela está mais em linha de conta com aquilo que se observa experimentalmente, segundo Keunings e Crochet (1984) e Saramito e Piau (1994), embora a opinião destes dois estudos tenha sido obtida em expansões súbitas axissimétricas. Na Figura 47 vê-se que a correcção diminui até um valor mínimo e depois aumenta com  $De$ , ultrapassa o valor correspondente a fluidos newtonianos e para valores de  $De$  ainda mais elevados acaba por estabilizar no valor newtoniano. Apesar de se observar um aumento significativo da correcção de Couette em determinadas gamas de  $De$ , os valores de  $C$  continuam a ser muito inferiores aos obtidos experimentalmente, pelo que novamente se questiona a utilidade do modelo para prever perdas de carga localizadas em entradas. A observação das linhas de corrente (ver em Alves et al, 2003-b), mostram o aumento do vórtice com a elasticidade a baixos valores de  $De$  e a sua posterior diminuição para valores de  $De$  ainda maiores, quando o seu comportamento tende a ser newtoniano. Na fase de aumento do comprimento do vórtice não se atingem valores tão elevados de  $X_R$  como no caso do modelo PTT linear.

Uma parte do aumento de  $C$  observado nas Figuras 44 e 47 não corresponde de facto a um aumento real da perda de carga, mas tem a ver com a forma como se adimensionaliza a variação de pressão, usando a tensão na parede correspondente ao escoamento totalmente desenvolvido na conduta de jusante. Ora, essa tensão na parede vai diminuir significativamente quando se aumenta o comportamento reofluidificante do fluido (Oliveira e Pinho, 1999c), o que significa que continuam as dificuldades em calcular numericamente a perda de carga medida experimentalmente quando há aumento do vórtice por acção das forças elásticas. Esta é uma questão fulcral porque a utilidade dos métodos numéricos de cálculo requerem a sua capacidade para efectuarem previsões correctas. Ora, se no passado havia a ideia que estas dificuldades eram sobretudo de ordem numérica e de precisão de cálculo, a evolução nesta área aponta agora para falhas nos modelos reológicos utilizados para prever os escoamentos.

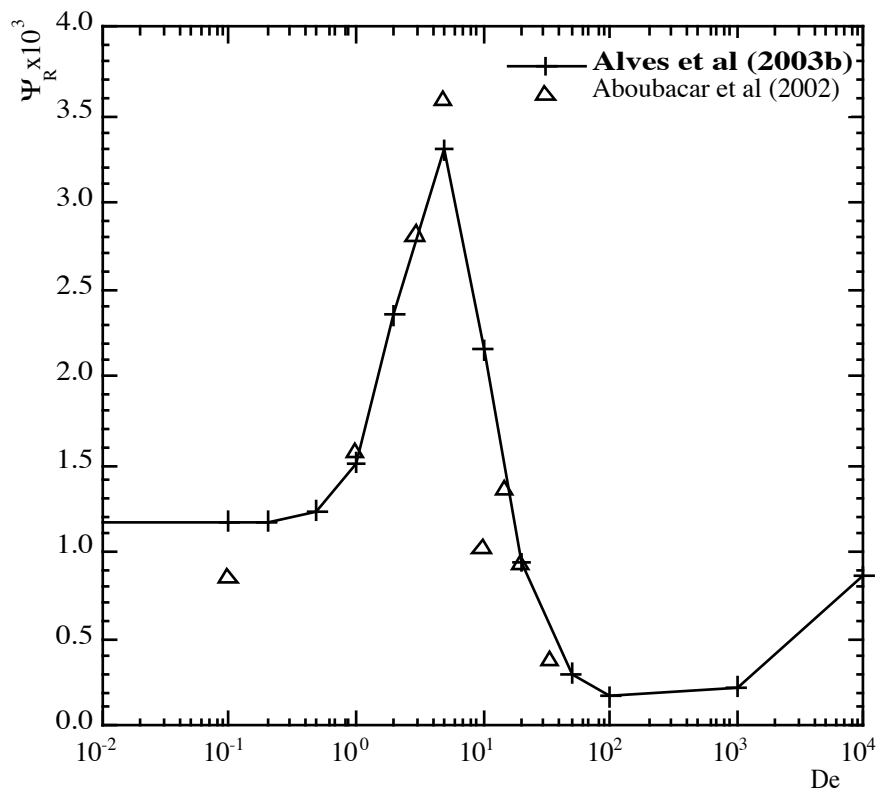


Figura 46- Variação da intensidade do vórtice com o número de Débora para o escoamento de um fluido PTT exponencial numa contracção súbita plana 4:1. Reproduzido de Alves et al (2003-b).

Torna-se assim necessário evoluir para modelos constitutivos mais realistas, que introduzam características reológicas até agora consideradas irrelevantes, como por exemplo os modelos multimodo ou modelos capazes de perverso correctamente a evolução transiente da viscosidade extensional, entre outros. Volta-se a falar deste assunto mais adiante quando se apontar a evolução futura da reologia computacional.

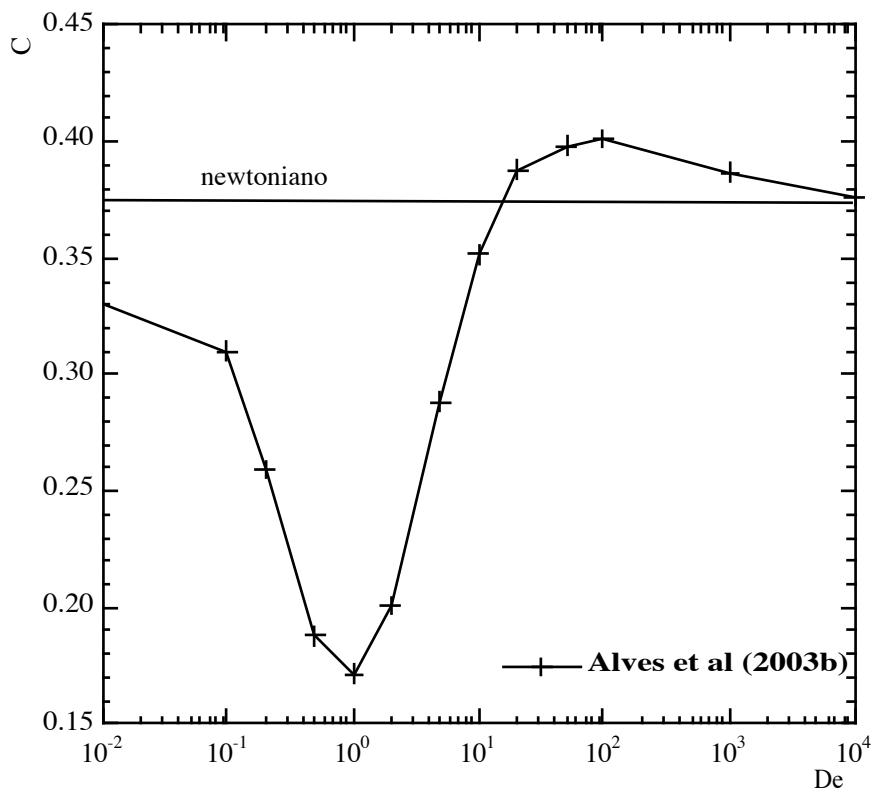


Figura 47- Variação da correção de Couette com a elasticidade do escoamento para um fluido PTT exponencial ( $\epsilon = 0.25$ ). Reproduzido de Alves et al (2003-b).

### 7.3.2. Escoamento em torno de um cilindro confinado

#### 7.3.2.1 Breve descrição de resultados experimentais

O escoamento em torno de um cilindro confinado é outro dos escoamentos de referência utilizado no estudo e desenvolvimento de métodos para cálculo de escoamentos de fluidos viscoelásticos. O escoamento não apresenta uma geometria ortogonal, nem possui pontos geométricos singulares, mas desenvolvem-se finas camadas limite e de mistura de tensão cuja resolução precisa não é trivial. O escoamento apresenta regiões diferentes de predominância de esforços de corte e de esforços extensionais. No entanto, dada a sua simplicidade geométrica, o escoamento é fácil de medir e por isso existem diversos estudos experimentais que têm sido utilizados como base de comparação.

Este escoamento não é só relevante deste ponto de vista, mas tem um interesse industrial. Os escoamentos em torno de cilindros são frequentes na indústria e sistemas de processamento, como atesta a consulta de manuais industriais e obras de referência relativamente a, por exemplo, permutadores de calor: Babcock e Wilcox (1975) e Rosehnow (1985), entre outros.

A geometria do escoamento está esquematizada na Figura 48: um cilindro longo está colocado entre duas placas, definindo uma razão de bloqueamento de 50%. O comprimento do cilindro na direcção neutra é muito grande por forma a assegurar um escoamento bidimensional na porção central da geometria. A figura inclui alguns detalhes dos blocos usados para gerar a malha





anemometria laser-Doppler eles mediram detalhadamente vários perfis de velocidade. No entanto, este trabalho concentrou-se mais na detecção de instabilidades de origem elástica: as primeiras instabilidades do escoamento bidimensional surgem e concentram-se na esteira do cilindro para números de Débora de 1.3. Para números de Débora superiores, o escoamento mantém-se estável, mas tridimensional e a um segundo número de Débora crítico ( $De= 1.85$ ), surgiu uma segunda transição, agora para um escoamento instável no tempo. O estudo mais aprofundado das instabilidades conduziu McKinley et al (1996) a demonstrarem que as instabilidades se deviam à combinação de curvatura das linhas de corrente, com elevadas tensões normais de origem elástica, tendo sido deduzido um critério quantificador da ocorrência da instabilidade. O escoamento em regime permanente na região da esteira foi estudado com mais detalhe por Shiang et al (1997) usando PIV.

### 7.3.2.2- Simulações numéricas

Ao contrário, do que acontece com a contração súbita, a descrição das características deste escoamento mostra menos surpresas e comportamentos contraditórios, quando se está no regime subcrítico. Já para números de Débora correspondentes ao regime supercrítico, a existência de escoamento tridimensional com ou sem instabilidades torna-o igualmente rico e interessante. No entanto, isto não significa que o escoamento subcrítico seja fácil de prever numericamente.

A combinação de intensas camadas limite de tensão sobre o cilindro e de uma esteira muito fina com tensões normais muito elevadas fazem deste escoamento um desafio, sobretudo quando se pretende calcular situações a número de Débora muito elevado. O problema numérico é difícil de resolver e muito especialmente quando envolve fluidos de Maxwell convectivos e de Oldroyd-B, que possuem viscosidades extensionais ilimitadas.

Nas secções que se seguem pretende-se exactamente mostrar a actual capacidade do método de volumes finitos em prever este escoamento no regime subcrítico e isso será feito com fluidos de Maxwell e Oldroyd-B. O estudo deste escoamento para fluidos reofluidificantes pode ser consultado na literatura.

Finalmente, o cálculo dos vários regimes supercríticos é uma tarefa ainda maior, que necessita de cálculos precisos no tempo e malhas tridimensionais, sendo por isso um dos desafios actuais.

Nos resultados dos cálculos que se apresentam, interessa sobretudo olhar para o efeito da elasticidade sobre as seguintes quantidades: a variação do coeficiente de arrasto, a evolução das tensões normais ao longo do plano central da esteira e o desvio das linhas de corrente do escoamento, e em especial na esteira. O coeficiente de arrasto obtém-se por integração dos campos de tensão e pressão em torno do cilindro de acordo com a Eq. (49).

$$C_D \equiv \frac{1}{\eta U} \int_S (\tau_{tot} - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{i}} dS \quad (49)$$

Os resultados dos cálculos apresentados com mais detalhe em Alves et al (2001), referem-se à malha M120 que tem 69 600 células computacionais (mais de 400 000 graus de liberdade) e usam o esquema de alta resolução SMART para a discretização dos termos convectivos das

equações a resolver. Este esquema é de precisão semelhante ao esquema CUBISTA, usado nos cálculos da contracção súbita, mas apresenta alguns problemas de limitação e instabilidade, como foi demonstrado em Alves et al (2003-a). O número de Reynolds do escoamento é nulo e o número de Débora define-se como

$$De = \frac{\lambda U}{R} \quad (50)$$

onde  $R$  é o raio do cilindro.

#### 7.3.2.2.1- Fluido de Maxwell contravariante

Começamos por comparar na Figura 49 a evolução do coeficiente de arrasto em função do número de Débora vários trabalhos. É de notar que os valores mais baixos de  $C_D$  correspondem aos cálculos mais precisos que foram obtidos pelo nosso grupo. Note-se também que os resultados de Fan et al (1999), usando o método MIX1 e os Phan-Thien e Dou (1999) só atingem valores de  $De$  iguais a 0.7 e 0.5, respectivamente, enquanto que com o esquema SMART se atingiu  $De= 1.0$ .

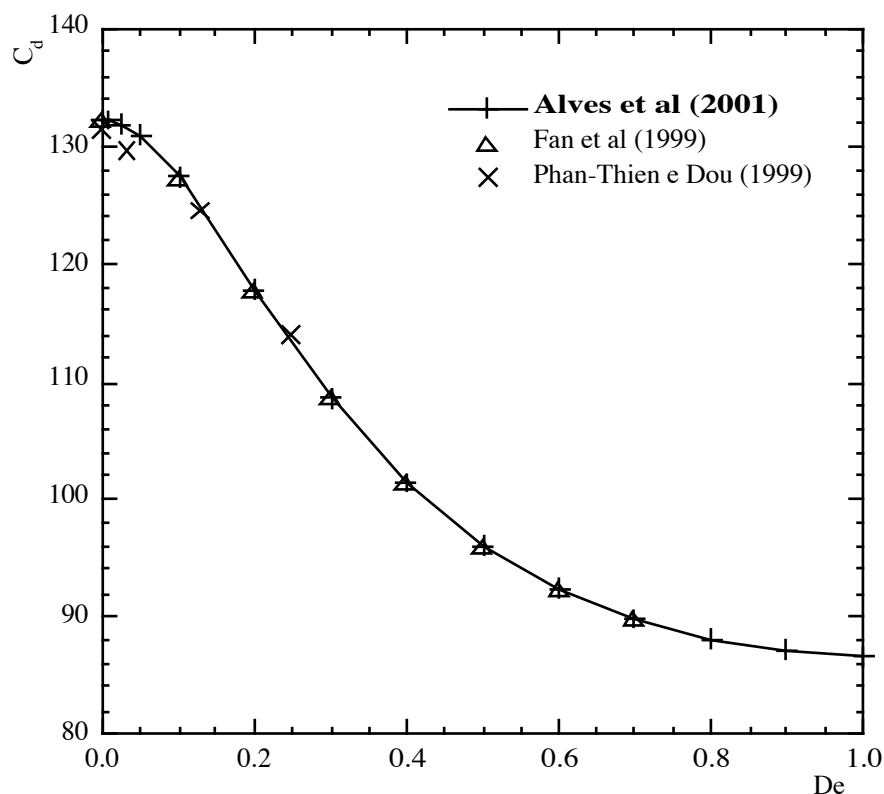


Figura 49- Variação do coeficiente de arrasto com o número de Débora do escoamento para um fluido UCM.

Para números de Débora superiores (dependendo da malha), o cálculo divergiu devido ao crescimento inusitado da tensão normal ao longo do plano de simetria, na esteira, como está documentado na Figura 50. A Figura 51 mostra também o perfil da velocidade longitudinal ao longo da linha central, mostrando assim o efeito de  $De$ . Na Figura 51 vê-se que este perfil de

velocidades é simétrico na direcção axial para fluidos newtonianos, simetria essa que é quebrada quando  $De \neq 0$ . À medida que a elasticidade aumenta a zona de recuperação alonga-se, excepto na vizinhança imediata do ponto de estagnação posterior. De facto, a figura sugere que há um desvio para jusante das linhas de corrente, excepto junto ao cilindro, onde se observa a tendência oposta. Estas variações foram confirmadas em várias simulações com malhas mais refinadas e usando diferentes esquemas de interpolação e estão também de acordo com as observações experimentais. Note-se que o efeito junto à parede geralmente não é referido nos trabalhos experimentais, dada a sua pequena dimensão e difícil observação. As linhas de corrente para o fluido de Maxwell são praticamente idênticas às que se observam com fluidos de Oldroyd-B, como se verá mais adiante, excepto que para este segundo caso o deslocamento para montante das linhas de corrente é mais pronunciado.

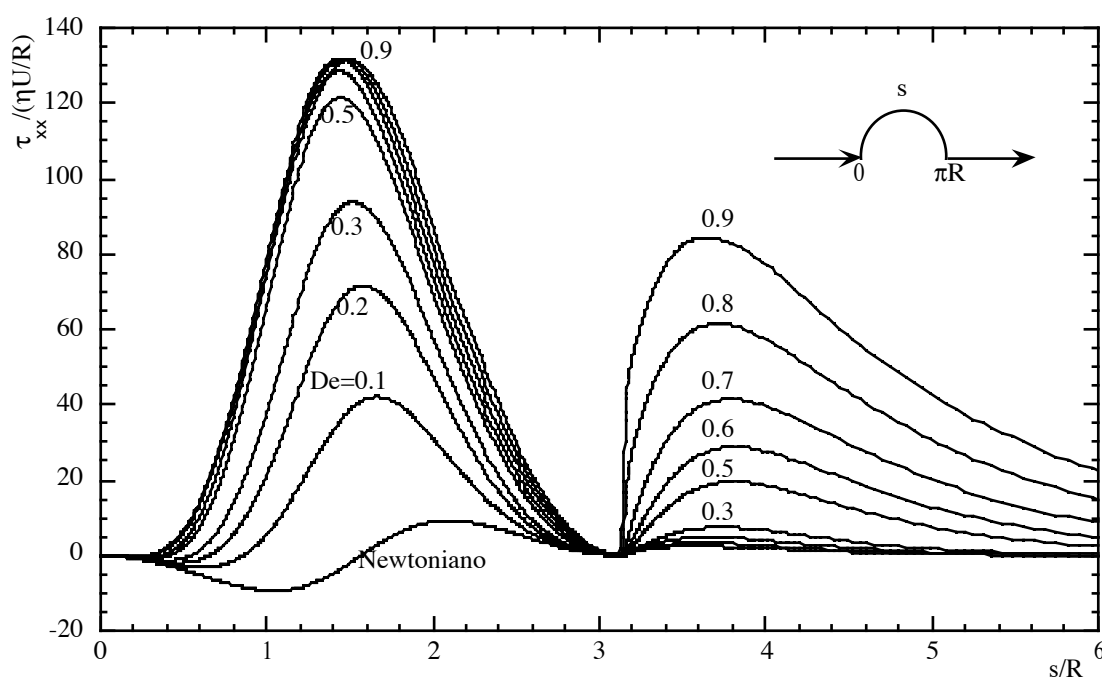


Figura 50- Efeito do número de Débora sobre os perfis da tensão normal axial ao longo da superfície do cilindro e plano de simetria para fluidos UCM (de Alves et al, 2001).

Nos perfis de tensão da Figura 50 é clara a existência de dois máximos da tensão, um a montante e outro a jusante do cilindro. Enquanto que o pico de montante aumenta de forma lenta, mas progressiva, com a elasticidade, tendendo para um valor assintótico, o pico de jusante é inicialmente baixo e depois aumenta muito rapidamente e de forma cada vez mais intensa, tendendo para infinito. É exactamente o aparecimento destas tensões muito elevadas na camada de mistura da esteira, que provoca a divergência do cálculo. Este comportamento foi confirmado independentemente, e explicado, por Fan et al (1999). No entanto, o nosso método de cálculo é robusto e logrou convergência para valores de  $De$  mais elevados do que o método de Fan et al, como já foi mencionado.

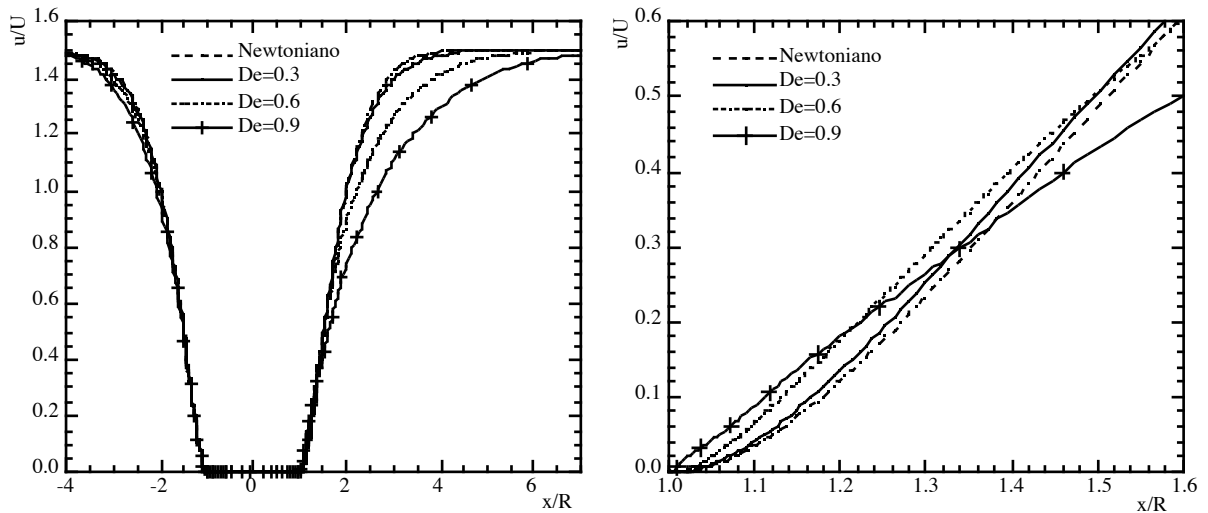


Figura 51- Efeito do número de Débora sobre os perfis da velocidade longitudinal ao longo da superfície do cilindro e plano de simetria para fluidos de Maxwell contravariantes (de Alves et al, 2001).

A par do comportamento ilimitado da tensão normal, a pressão comporta-se também de forma singular como se observa na Figura 52, que mostra a evolução do perfil de pressão ao longo do plano central e em função do número de Débora.

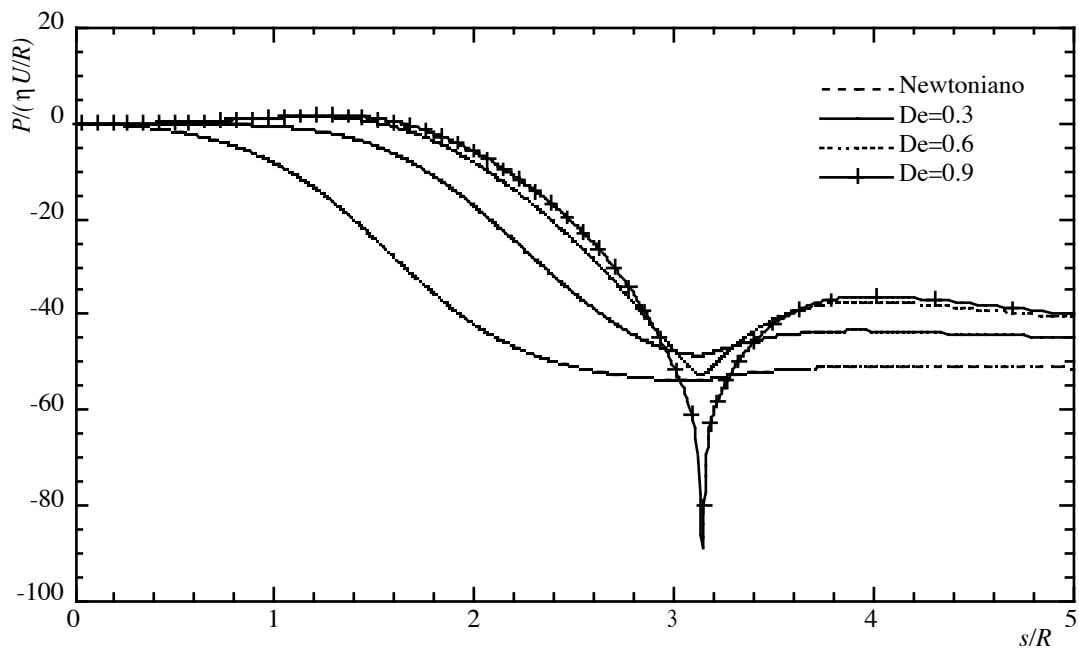


Figura 52- Influência do número de Débora na distribuição de pressão em torno do cilindro e ao longo do plano de simetria para fluidos de Maxwell contravariante. Reproduzido de Alves et al (2001).

#### 7.3.2.2.2- Fluido de Oldroyd-B

Começamos por comparar na Figura 53 a evolução do coeficiente de arrasto em função do número de Débora de vários trabalhos da literatura. Como acontece com o fluido de Maxwell, os

valores mais baixos de  $C_D$  correspondem aos cálculos mais precisos e esses foram obtidos posteriormente aos nossos cálculos. Estamos crentes que o uso de malhas mais refinadas, a par do esquema de alta-resolução (CUBISTA), entretanto desenvolvido em Alves et al (2003-a), conduzirá a previsões de qualidade pelo menos idênticas às dos resultados de Caola et al (2001) e Owens et al (2002). Ao contrário do que acontecia com o modelo de Maxwell, o  $C_D$  atinge um mínimo para  $De$  igual a 0.75 e depois aumenta com a elasticidade (para o fluido de Maxwell contravariante a tendência era sempre decrescente). Novamente para valores de  $De$  superiores a 1, há dificuldades de convergência como aconteceu com o fluido de Maxwell e pelas mesmas razões, como se constata dos perfis de tensão da Figura 54.

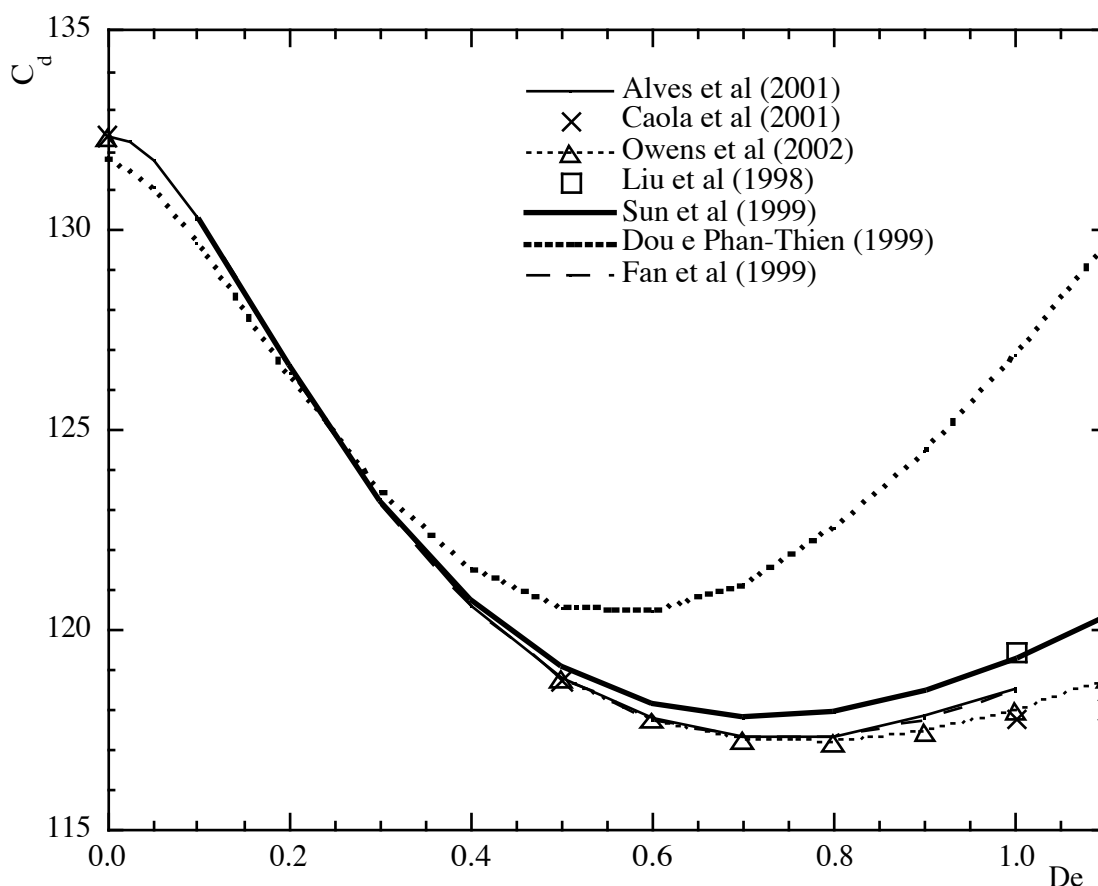


Figura 53- Variação do coeficiente de arrasto para um fluido de Oldroyd-B em função da elasticidade do escoamento.

Não há grandes diferenças entre os comportamentos dos fluidos de Oldroyd-B e de Maxwell convectivo, pois ambos apresentam uma viscosidade de corte e coeficiente de primeira diferença de tensões normais constantes, bem como uma viscosidade extensional ilimitada. Por isso, só para este caso representamos o campo de tensões normais e analisamos o efeito do refinamento da malha com ênfase para a região próxima da esteira, onde as tensões atingem os valores mais elevados e as diferenças serão mais significativas. Os contornos das tensões normais axiais estão patentes na Figura 55.

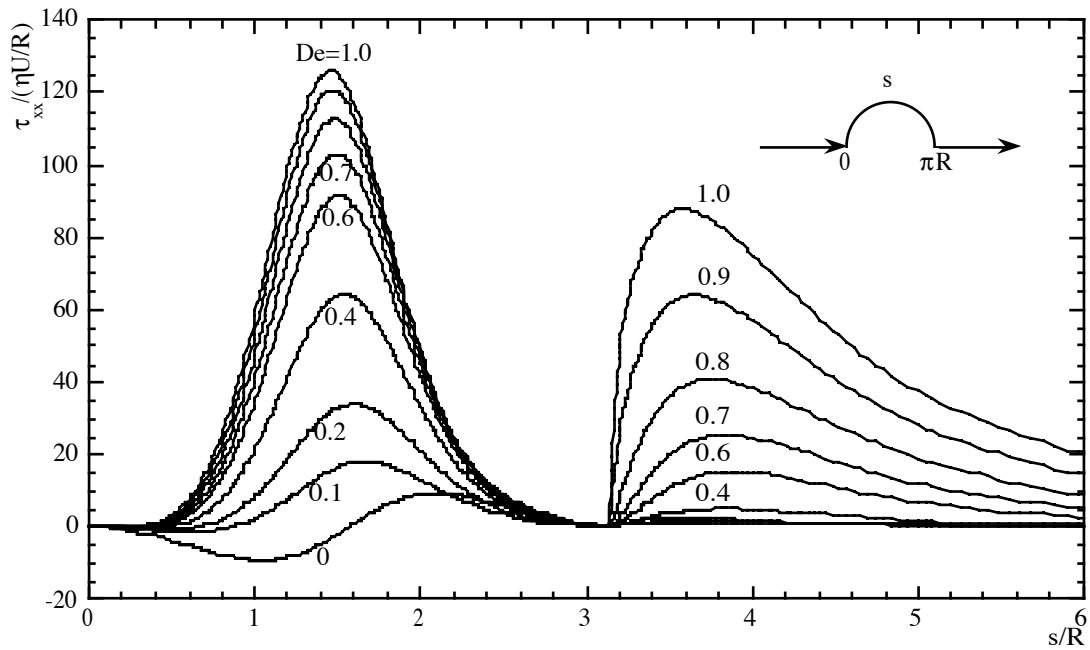


Figura 54- Variação longitudinal da tensão normal sobre a parede do cilindro e linha central em função do número de Débora. Reproduzido de Alves et al (2001).

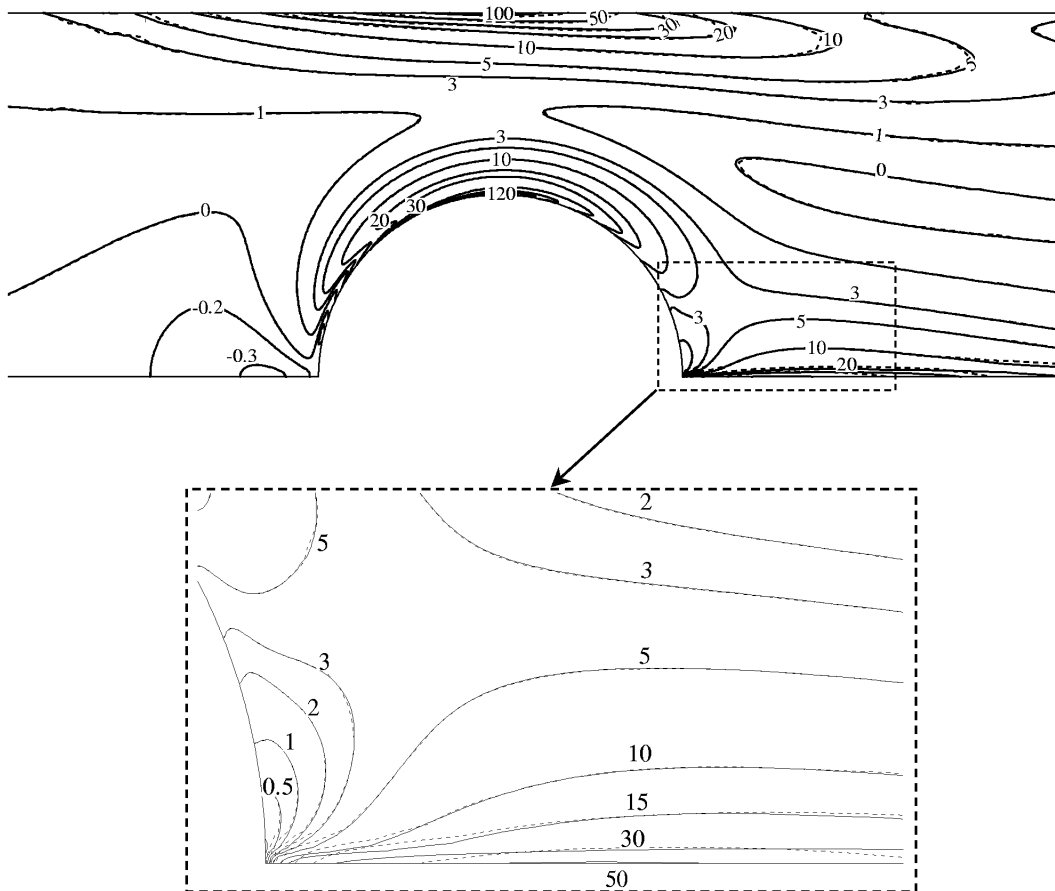


Figura 55- Isolinhas das tensões normais axiais na esteira próxima do cilindro para um fluido Oldroyd-B a  $De = 0.9$ : previsões com malha fina M60 (traço interrompido), previsões com malha muito fina M120 (traço cheio). Reproduzido de Alves et al (2001).

Finalmente, as linhas de corrente representadas na Figura 56 mostram bem a dupla alteração na região da esteira devido à elasticidade do escoamento. A figura compara o padrão de escoamento para um fluido newtoniano com o padrão para um fluido Oldroyd-B com  $De=0.9$ . Na zona lateral do cilindro e na esteira as linhas de corrente afastam-se para jusante e só junto ao ponto de estagnação posterior é que o escoamento elástico está desviado para montante.

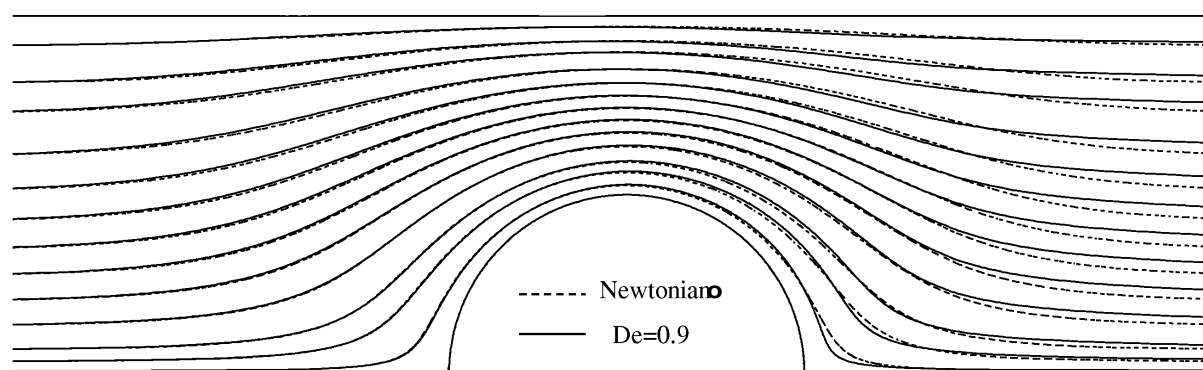


Figura 56- Linhas de corrente do escoamento newtoniano (traço interrompido) e de Oldroyd-B a  $De=0.9$  (traço cheio) junto ao cilindro. Reproduzido de Alves et al (2001).

### 7.3.3. Ejeção de vórtices

Este último exemplo com fluidos viscoelásticos corresponde ao regime transitório e mais especificamente trata de um escoamento com periodicidade. É interessante averiguar da capacidade do método de discretização no tempo de captar correctamente fenómenos dependentes do tempo, especialmente de longa duração. O caso a analisar corresponde a um escoamento com inércia e por isso difere significativamente dos casos anteriores em que  $Re=0$ .

O escoamento em torno de cilindros tem sido estudado desde há mais de 100 anos como o provam as contribuições fundamentais de Strouhal (1878), Hiemenz (1911) e von Kármán (1912) para fluidos newtonianos, entre outros. Estes escoamentos são de grande relevância em processos industriais envolvendo transferência de calor e massa (por exemplo, em permutadores de calor), e também em situações envolvendo fenómenos de acústica e hidráulica (para fluidos newtonianos). Não há aqui a intenção de rever a literatura, mas para o caso newtoniano, o leitor interessado pode consultar alguns trabalhos de revisão mais recentes: Cantwell e Coles (1983), Telionis et al (1992) e Williamson (1996).

O escoamento em torno de cilindros caracteriza-se por diversos regimes de escoamento, mas aqui só nos interessa considerar o primeiro regime transitório. Para números de Reynolds baixos (inferiores a 47), a inércia não é desprezável, mas na presença de um escoamento livre de velocidade constante, o escoamento na esteira do cilindro permanece estável e decorre em regime laminar. A partir do número de Reynolds crítico ( $Re \approx 47$ ), o escoamento torna-se dependente do tempo, verificando-se a ejeção periódica de vórtices a partir da superfície do cilindro. Este

regime de escoamento caracteriza-se por ser laminar, bidimensional e por possuir uma periodicidade bem estabelecida e definida para fluidos newtonianos. É este o regime de escoamento que nos interessa analisar e para números de Reynolds da ordem de 150 a 200 (Coelho e Pinho, 2003) ocorre uma outra transição de regime de escoamento, que não nos interessa nesta lição.

Para fluidos de características viscoelásticas o acervo de dados experimentais e conhecimento é muito mais reduzido, os resultados são frequentemente contraditórios devido à complexidade do escoamento e às variadíssimas características reológicas dos fluidos estudados. A revisão bibliográfica de Coelho e Pinho (2003) ilustra bem essa grande diversidade. Para soluções muito diluídas de polímero, em que a viscosidade de corte é basicamente constante (fluidos de Boger), os trabalhos recentes de Cadot e Kumar (2000) e Cressman et al (2001), e anteriormente de Usui et al (1980), mostram que a elasticidade dos fluidos diminui a frequência de ejeção de vórtices, reduz a vorticidade do escoamento e aumenta o comprimento de onda das estruturas presentes na esteira. Estas são características que interessa ser capaz de prever numericamente, o que requer métodos precisos de discretização no tempo.

Contrariamente aos cálculos em regime permanente, cálculos de escoamentos transitórios com fluidos viscoelásticos em torno de cilindros são escassos. O primeiro trabalho foi sem dúvida o de Hu e Joseph (1990), com volumes finitos e que foi contemporâneo do trabalho de Delvaux e Crochet (1990) com elementos finitos. Em ambos os casos os métodos de discretização no tempo foram de primeira ordem, o que é insuficiente para cálculos precisos no tempo, mas que na altura eram adequados dada a novidade e as capacidades de cálculo disponíveis.

A maior parte dos estudos recentes de escoamentos transitórios com fluidos viscoelásticos limitam-se a investigar o arranque de escoamento de Poiseuille ou Couette e a comparar os resultados com a respectiva solução analítica. O problema deste teste é que se trata de um fenómeno de duração limitada e pouco transitório, sobretudo considerando os baixos números de Reynolds considerados ( $Re \approx 0$ ), que de facto não constituem um teste às verdadeiras capacidades de cálculo. Para averiguar correctamente as características dos métodos é necessário testá-los em escoamentos fortemente transitórios e independentes do período de tempo em que é efectuado o cálculo, permitindo averiguar separadamente o efeito dos métodos de discretização e do intervalo de tempo.

Numa perspectiva de volumes finitos, Oliveira (2001a) desenvolveu um esquema de discretização de segunda ordem no tempo que está exposto detalhadamente no Anexo. O esquema permitiu prever a ejeção de vórtices do escoamento de um fluido FENE-CR (modelo FENE modificado por Chilcott e Rallison) em torno de um cilindro não confinado mostrando que, ao contrário do que acontece com métodos de primeira ordem como o método de Euler implícito, não há qualquer atenuação nas oscilações ao longo do tempo. O fluido estudado (FENE-CR) tem como principais características reométricas uma viscosidade viscosimétrica constante, um coeficiente da primeira diferença de tensões normais positiva e reofluidificante e viscosidade extensional reoespesante, mas limitada.



Estes resultados estão patentes na Figura 57, onde se comparam as evoluções no tempo do coeficiente de arrasto instantâneo no cilindro para diferentes esquemas de discretização. Quando o método de discretização é de primeira ordem a variação periódica do  $C_D$  vai-se atenuando ao longo do tempo ao mesmo tempo que a curva média do  $C_D$  vai diminuindo. Ao fim de algum tempo a ejeção de vórtices desapareceu. Esta atenuação das oscilações periódicas deve-se à difusão numérica e à acumulação de erros que é típica dos esquemas de primeira ordem e diminui com o refinamento da malha no tempo. No entanto, mesmo para o menor valor de  $\Delta t$  testado a atenuação das oscilações e a diminuição do  $C_D$  médio continua a verificar-se. Idêntico comportamento ocorre para o coeficiente de sustentação, que não é aqui mostrado, embora neste caso só se observe a atenuação das oscilações, mantendo-se sempre nulo o valor médio de  $C_L$ .

Pelo contrário, o esquema de discretização temporal de segunda ordem desenvolvido por Oliveira (2001a), e designado por BS2, não sofre nem da atenuação das oscilações ao longo do tempo, nem da diminuição do valor médio do  $C_D$ , havendo além disso coincidência de resultados para diferentes valores de  $\Delta t$ .

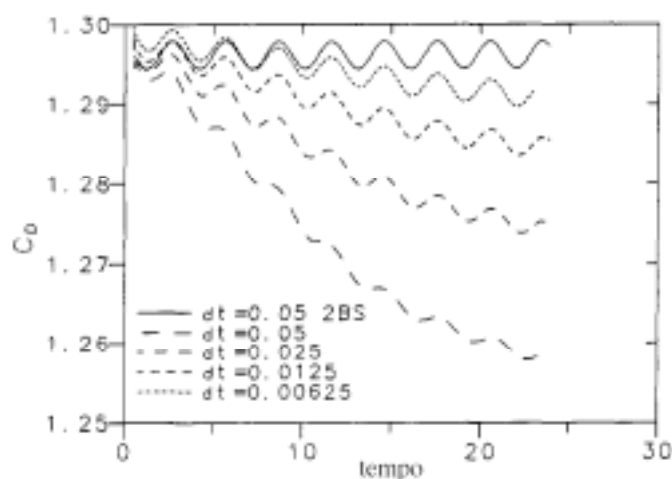


Figura 57- Efeito do passo no tempo e do esquema de discretização (Euler implícito ou 2BS) sobre a evolução temporal do coeficiente de arrasto instantâneo sobre o cilindro. Reproduzido de Oliveira (2001a) com autorização do autor.

Contudo, o recurso a um método preciso de discretização no tempo não é suficiente para previsões correctas, sendo também necessário utilizar métodos precisos de discretização no espaço sobretudo para os termos convectivos, como é o caso do esquema CUBISTA. Todos os resultados apresentados nesta secção resultaram do uso das diferenças centradas para a difusão e do esquema de alta resolução CUBISTA (3ª ordem no espaço quando se usam malhas uniformes), para os fluxos convectivos de quantidade de movimento e tensão.

De seguida, apresenta-se na Figura 58 a variação da amplitude dos coeficientes de arrasto e sustentação com a elasticidade para  $Re=100$  e quando o parâmetro de extensibilidade  $L^2=100$ . É notória a redução da amplitude das flutuações com a elasticidade e isso também é acompanhado por um aumento da frequência da ejeção de vórtices, como se observa na Figura

59. A frequência de ejeção apresenta-se de forma adimensional, usando o número de Strouhal  $St = fD/U$ , definido com base no diâmetro do cilindro ( $D$ ) e a velocidade média do escoamento ( $U$ ). Os resultados destas duas figuras são consistentes com as observações experimentais da

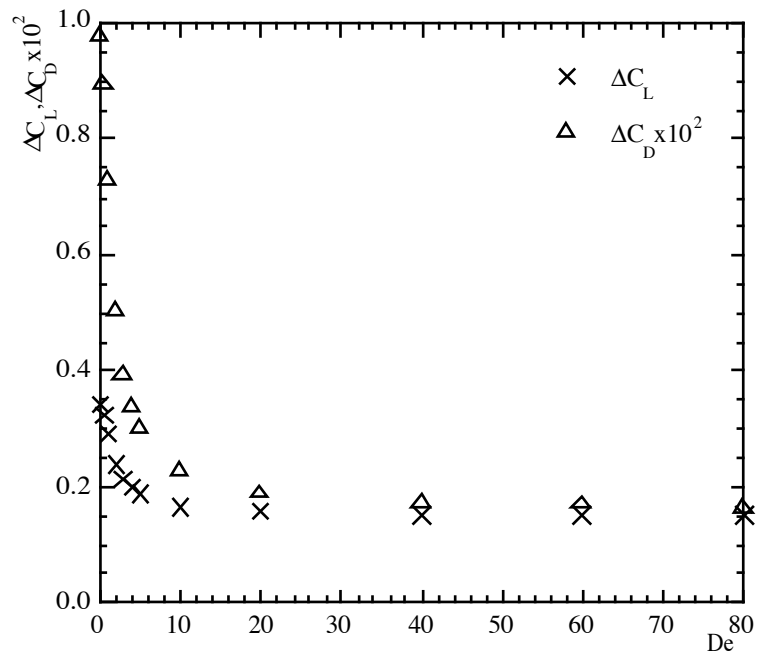


Figura 58- Variação de  $\Delta C_L$  e  $\Delta C_D$  com a elasticidade para o escoamento de um fluido FENE-CR em torno de um cilindro com  $Re=100$  e  $L^2=100$ . Reproduzido de Oliveira (2001a) com autorização do autor.

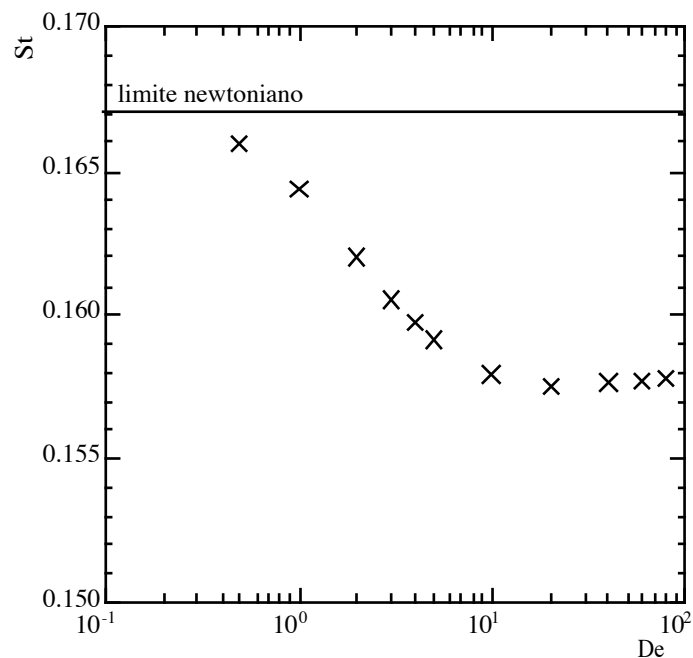


Figura 59- Variação de  $St$  com a elasticidade para o escoamento de um fluido FENE-CR em torno de um cilindro com  $Re=100$  e  $L^2=100$ . Reproduzido de Oliveira (2001-a) com autorização do autor.

literatura, em que a elasticidade foi responsável pelo aumento da frequência da ejeção de vórtices, pela diminuição da sua intensidade e maior alongamento. Estas características também são notórias na Figura 60 que compara linhas de rasto para o escoamento de um fluido newtoniano e de um fluido FENE-CR para  $Re= 100$  e  $De= 80$ . A Figura 60 mostra também que o comprimento de formação (ver definição em Coelho e Pinho, 2003) aumenta com a elasticidade do fluido. De facto, os resultados de Oliveira (2001a) mostram que todos estes efeitos da elasticidade aumentam quer com o número de Débora, quer com o parâmetro de extensibilidade do fluido, uma vez que ambos induzem uma viscosidade extensional mais elevada, observando-se também a redução do desvio padrão (rms) das flutuações de velocidade na esteira.

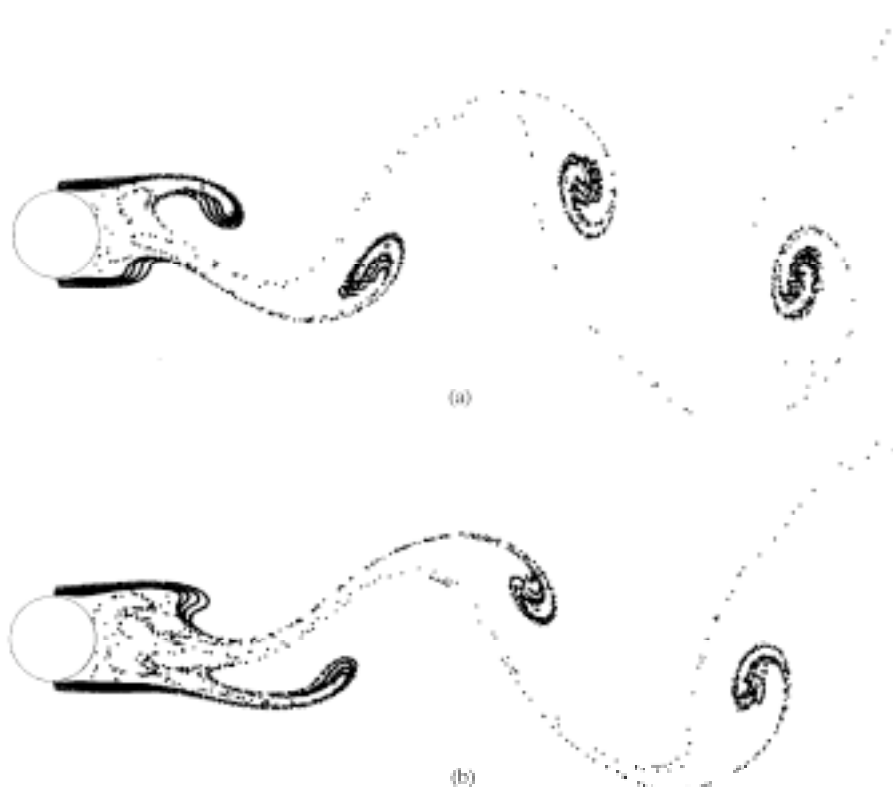


Figura 60- Linhas de rasto (ou linha filamento) para os escoamentos de um fluido newtoniano (a) ( $Re= 100$ ,  $De= 0$ ), com um fluido FENE-CR (b) ( $Re= 100$ ,  $De= 80$ ). Reproduzido de Oliveira (2001a) com autorização do autor.



## 8. Cálculos de escoamentos em regime turbulento com fluidos viscoelásticos

Dada a extensão desta lição não se pretende aqui abordar esta temática complicada e só por si merecedora de uma outra lição. Contudo, a questão coloca-se naturalmente e faz-se aqui uma breve menção a este problema.

Desde 1948, quando Toms reportou a ocorrência de redução do arrasto no escoamento turbulento numa conduta de um fluido não newtoniano, que inúmeros investigadores dedicaram o seu tempo a compreender o comportamento de fluidos viscoelásticos nestas condições. Estes esforços culminaram em meados dos anos setenta, numa razoável compreensão fenomenológica, que está bem documentada nas revisões de Hoyt (1972) e Virk (1975).

Durante os vinte anos que se seguiram o esforço de investigação dirigiu-se sobretudo a uma compreensão física do fenómeno, o que foi possível sobretudo devido ao desenvolvimento de métodos ópticos de diagnóstico durante as décadas de setenta e oitenta. São alguns exemplos desse esforço os trabalhos iniciais de Achia e Thompson (1977) e Reischman e Tiederman (1975), de Luchik e Tiederman (1987,88) e Pinho e Whitelaw (1990) nos anos oitenta e mais recentemente de Warholic et al (1999), Pereira e Pinho (1994) e Escudier et al (1999), entre outros. Em 1995 Gyr e Bewersdorff fizeram uma revisão crítica do estado de conhecimento num livro que abordou não só a redução de arrasto para soluções de polímero, mas também para soluções de agentes tenso-activos e suspensões de fibras.

Uma das descobertas importantes das investigações de Tiederman e Hanratty em escoamentos entre placas paralelas foi a enorme redução nas tensões de corte de Reynolds. O conseqüente défice de tensão de Reynolds tem de ser explicado pelo aparecimento de uma tensão de corte suplementar, de origem elástica, mas que até à data não foi medido. Esta descoberta sugere uma nova dinâmica da turbulência envolvendo, entre outras, o acoplamento entre as flutuações das tensões elásticas e as flutuações do gradiente de velocidade. Estas também foram algumas das conclusões de estudos usando simulação numérica directa (DNS do inglês "Direct Numerical Simulation") de Massah e Hanratty (1997) com o modelo FENE-P, que mostrou que a tensão elástica flutua e interage com a turbulência e o escoamento médio.

Apesar de todos os esforços experimentais, não há ainda uma explicação clara para a ocorrência de redução de arrasto e a sua relação com a reologia dos fluidos viscoelásticos. Contudo, há fortes indícios para uma relação entre a redução do arrasto e uma viscosidade extensional reoespessante, embora até à data não tenha havido uma demonstração cabal desse facto. A medição da viscosidade extensional é ainda uma tarefa difícil e em especial para os fluidos muito diluídos capazes de atingir escoamentos em regime turbulento.

Com os grandes avanços em capacidade de cálculo computacional surgiu a alternativa de se realizar investigação por DNS. Desde 1993 com Massah et al, o DNS tem fornecido informação útil sobre o efeito de propriedades específicas de fluidos sobre as características do escoamento, e vice-versa, e é hoje um método poderoso de caracterizar o escoamento turbulento, com qualquer tipo de fluido. Para fluidos viscoelásticos existe, porém, uma dificuldade acrescida relativamente à utilização da técnica com fluidos newtonianos e discutido no capítulo 5: não há *a priori* a

certeza de qual seja a equação constitutiva correcta para um determinado fluido. Veja-se a este propósito as conclusões de Zhou e Akhavan (2003) que afirmam que o modelo FENE-P apresenta erros significativos na previsão da viscosidade extensional em regime transitório. Mesmo assim, o DNS permite a obtenção de informação extremamente relevante sobre a relação entre a reologia dos fluidos e as respectivas características hidrodinâmicas, sendo por isso um dos métodos que proporciona informação mais relevante para o desenvolvimento de modelos de turbulência, baseados em modelos clássicos ou novos.

As primeiras investigações do tipo DNS não eram auto-consistentes uma vez que se concentraram na resolução da equação constitutiva reológica, geralmente FENE-P, para uma cinemática newtoniana. Esta estratégia, adoptada por Massah et al (1993) e co-autores (por exemplo, Massah e Hanratty, 1997) não é capaz de prever a redução do arrasto, mas permite ver o efeito da turbulência na evolução das conformações moleculares e, conseqüentemente nas propriedades dos fluidos.

Uma das principais descobertas de Massah et al (1997) foi o grande aumento do tamanho das moléculas presentes na subcamada viscosa, mas a ausência de extensão na camada intermédia. Num escoamento de Couette em regime laminar, as moléculas também se estenderam significativamente, mas não se encontrou redução de arrasto. A conclusão é óbvia: embora os efeitos da extensão molecular afectem as viscosidades de corte e extensional, o arrasto é só uma função da tensão de corte que em regime laminar não depende da viscosidade extensional. Contudo, a extensão molecular interfere na dinâmica da turbulência e a tensão de corte em regime turbulento vem afectada.

O progresso dos meios de cálculo permitiu simulações numéricas directas consistentes a partir de meados dos anos noventa mas usando equações constitutivas simplificadas dirigidas para analisar o efeito da turbulência sobre propriedades reológicas específicas. Foi o que Orlandi (1995) e Den Toonder et al (1995, 1997) fizeram. Eles adoptaram equações constitutivas viscosas para imitar os efeitos dos polímeros nos seus cálculos com DNS. Contudo, os modelos apresentavam termos anisotrópicos e diferentes tipos de variação das propriedades reológicas e o seu impacto sobre a redução de arrasto foi investigado.

Mais recentemente já se efectuaram simulações DNS consistentes em escoamentos entre placas paralelas com modelos viscoelásticos mais realistas derivados das teorias cinético-molecular (FENE-P) e das redes (Giesekus) por Massah e Hanratty (1997), Sureshkumar et al (1997) e Dimitropoulos et al (1998, 2001). Estes trabalhos conseguiram prever reduções de arrasto significativas e mostraram concordância qualitativa com resultados experimentais. Além disso, as simulações com o modelo FENE-P e de Giesekus mostraram reduções de arrasto semelhantes quando os seus parâmetros foram escolhidos, por forma a igualar a viscosidade extensional máxima (Dimitropoulos et al, 2001). Nas suas investigações com a técnica DNS, Dimitropoulos et al (2001) efectuaram os balanços da energia cinética da turbulência, das tensões de Reynolds e vorticidade e por consequência esta é uma referência importante para o desenvolvimento de modelos de turbulência locais. A redução do arrasto foi relacionada

directamente com a extensibilidade das cadeias de polímero e um pré-requisito para a redução de arrasto é que haja uma viscosidade extensional suficientemente aumentada, o que está de acordo com descobertas anteriores.

As investigações com DNS para fluidos viscoelásticos estão longe de estar esgotadas e muito há ainda a aprender com elas, à semelhança do que acontece com fluidos newtonianos. Embora esta técnica seja extremamente poderosa, os recursos que necessita são muito elevados e por isso o uso de DNS não é actualmente compatível com escoamentos de relevância industrial, para o que se necessita de modelos de turbulência locais.

Em contraste com o trabalho experimental e o DNS, o progresso no desenvolvimento de modelos de turbulência locais para escoamentos de fluidos viscoelásticos tem sido muito vagaroso. Após um esforço inicial nos anos 1970 (Durst et al, 1977, 1979; Hassid e Poreh, 1975, 1978 e Poreh e Hassid, 1977) pouco mais se fez desde então. Nesses desenvolvimentos iniciais o modelo  $k-\epsilon$  para fluidos newtonianos foi utilizado com modificações nas funções de parede (modelo “standard”) ou nas funções de amortecimento (modelo de baixo número de Reynolds). Hassid e Poreh (1975) sugeriram um modelo de uma equação, mas este tipo de modelos foi rapidamente abandonado devido às dificuldades em se definir uma escala de comprimento adequada, mesmo para fluidos newtonianos. Em Poreh e Hassid (1977) e Hassid e Poreh (1978) a mesma versão modificada do modelo  $k-\epsilon$  de baixo número de Reynolds de Jones e Launder (1973) foi utilizado, mas isso não foi suficiente para prever redução do arrasto de forma genérica. O coeficiente da função de amortecimento da viscosidade turbulenta do tipo Van Driest teve que ser determinado a partir de resultados da redução de arrasto para o caso específico a ser previsto e por isso a aplicabilidade do modelo ficou em causa.

Essencialmente, em todos estes casos as modificações não foram capazes de prever a redução do arrasto com generalidade, mas mostraram que modificações adequadas da lei de parede ou das funções de amortecimento podem conduzir a previsões correctas. A deficiência de generalização do modelo resulta da falta de ligação entre o modelo de turbulência e a reologia dos fluidos. O assunto já tinha sido abordado em 1974 por Mizushima et al que utilizou um modelo de turbulência de ordem zero com um factor de amortecimento de Van Driest modificado para ter em consideração a viscoelasticidade do fluido incorporando um tempo de relaxação, que foi determinado a partir da teoria linear elástica de Rouse e de resultados experimentais. Esta metodologia foi capaz de prever o comportamento com um mesmo fluido em diferentes condições de escoamento, o que os modelos de turbulência posteriores de Hassid e Poreh e Durst et al não foram capazes de conseguir.

As excursões na temática do desenvolvimento de modelos de turbulência para fluidos não newtonianos dos anos noventa tiveram uma aplicação muito limitada: Politis (1989), Malin (1997) e Cruz et al (2000) deduziram independentemente as equações relevantes à previsão de escoamentos turbulentos com fluidos lei de potência com um modelo tipo  $k-\epsilon$ , mas não foram capazes de prever redução de arrasto de origem elástica.

Outros desenvolvimentos de modelos de viscosidade turbulenta também foram tentados. Poreh e Dimant (1972) desenvolveram um modelo baseado no comprimento de mistura de Van Driest por inclusão de um parâmetro de amortecimento variável que representava os efeitos dos aditivos poliméricos. Expressões mais complexas foram deduzidas por Edwards e Smith (1980) e mais recentemente por Azouz e Shirazi (1997). Estes autores previram o escoamento turbulento de soluções poliméricas de CMC em condutas anulares, mas necessitaram de utilizar no seu modelo resultados de escoamentos dos mesmos fluidos em condutas de secção circular.

Só muito recentemente surgiu o primeiro modelo de turbulência verdadeiramente acoplado a um modelo reológico de um fluido. Partindo de um modelo constitutivo reológico para um fluido newtoniano generalizado, que foi modificado para incluir efeitos do reoessamento da viscosidade extensional, Pinho (2003) e Cruz e Pinho (2003) desenvolveram um modelo  $k$ - $\epsilon$  capaz de prever simultaneamente o comportamento de fluidos puramente viscosos e também de fluidos reofluidificantes com elasticidade, esta caracterizada por uma viscosidade extensional reoessante. O modelo é genérico, pois só necessita de informação sobre dados reométricos convencionais, mas necessita ainda de inúmeras melhorias, para que as previsões sejam quantitativamente precisas para uma gama extensa de fluidos e de condições de escoamento.



## 9. Desenvolvimentos futuros

Cada vez mais o cálculo numérico de escoamentos tem relevância industrial e nos últimos anos adquiriu, a todos os níveis, a credibilidade que necessitava para se tornar uma ferramenta imprescindível em engenharia. À medida que os métodos de cálculo se aperfeiçoam, o seu uso em situações cada vez mais complexas torna-se menos dispendioso e os resultados mais credíveis. Na Reologia Computacional, a evolução dos últimos 30 anos tem sido tremenda, mas há ainda um grande caminho a percorrer, pois esta disciplina está também ligada à problemática dos modelos constitutivos reológicos, o que por sua vez está intimamente ligado às limitações tecnológicas da reometria.

Nos próximos anos deveremos assistir a desenvolvimentos em várias frentes, a saber:

- 1) Relacionado com modelos constitutivos, desenvolvidos no âmbito da Mecânica dos Meios Contínuos;
- 2) Relacionado com modelos constitutivos, desenvolvidos no âmbito da teoria cinético-molecular. Num futuro ainda mais longínquo as equações constitutivas evoluirão no sentido de uma representação física ainda mais detalhada, já que se basearão numa representação de comportamentos a nível atómico.

Os desenvolvimentos nestas duas grandes áreas não são mutuamente exclusivos já que há evidentes benefícios mútuos.

No primeiro grupo, salienta-se o desenvolvimento de novos métodos de cálculo ainda mais precisos, que sejam capazes de aumentar o número de Weissenberg máximo dos escoamentos, desde que exista solução física, aumentar a precisão do cálculo, aumentar a sua rapidez e a capacidade de resolução de situações, que envolvam singularidades geométricas sem os problemas que afectaram o passado. Ainda a este nível haverá desenvolvimentos de métodos de cálculo para modelos constitutivos integrais, que exigem a capacidade de seguir a história da deformação das partículas de fluido. Isto requer, por um lado, métodos de cálculo preciso e por outro grandes capacidades de cálculo que começam a estar disponíveis, devido à evolução individual das máquinas, mas também pela maior facilidade em implementar sistemas de cálculo em paralelo.

No segundo grupo de desenvolvimentos, assistir-se-á a uma evolução na formulação de equações constitutivas baseadas na teoria cinético-molecular. Aqui, desenvolvem-se modelos aproximados do comportamento das moléculas, onde se ignoram as descrições atómicas ou a completa descrição do comportamento molecular. Estes modelos são então resolvidos de forma estocástica para se obter o campo de tensões no seio do fluido em escoamento, a partir de médias de conjunto de resultados de simulações com modelos a nível molecular. Assim, esta metodologia obriga a seguir, em cada local da malha computacional, a história de deformação de um número de partículas estatisticamente representativo para posterior cálculo das propriedades reológicas do fluido, através de uma média de conjunto. Uma vez obtido o campo de tensões é então possível resolver as equações macroscópicas de conservação da massa e quantidade de

movimento. Esta forma híbrida de cálculo de escoamentos é conhecida por formulação micro-macro ou CONNFFESSIT e foi introduzida por Laso e Öttinger (1993), sendo muito promissora.

Aliás, esta filosofia não é exclusiva da mecânica dos fluidos não-newtoniana: as nanotecnologias na área da mecânica dos fluidos e da micro-fluídica operam frequentemente a um nível, em que a mecânica dos meios contínuos não é válida. Por exemplo, o estudo de escoamentos em condutas de pequenas dimensões deixa de ser possível invocando a condição de não-deslizamento. Assim, só uma filosofia híbrida, baseada em modelos atomísticos ou moleculares junto a paredes, em combinação com formulações macroscópicas clássicas longe das paredes, permitirá resolver correctamente esses escoamentos.

A curto e médio prazo, e numa perspectiva mais direccionada para a metodologia dos volumes finites, são ainda necessários alguns desenvolvimentos em áreas relevantes para as aplicações industriais, como é o caso do tratamento de superfícies livres ou de cálculo em domínios múltiplos, envolvendo física múltipla.

Ao nível dos escoamentos em regime turbulento vão-se desenvolver modelos de turbulência locais, combinando equações constitutivas reológicas mais realistas para se poderem prever escoamentos de relevância industrial (escoamentos em geometrias complexas a números de Reynolds moderados e elevados), utilizando uma aproximação semelhante à usada por Pinho (2003), em combinação com o uso de informação disponibilizada por cálculos com DNS. Estes conjuntos de modelos integram-se na filosofia RANS (do inglês “Reynolds average Navier Stokes”), mas será também muito importante o desenvolvimento de sub-modelos, para a simulação de grandes escalas com fluidos viscoelásticos.

## ANEXO

### Método dos volumes finitos para malhas colocadas e coordenadas não-ortogonais<sup>4</sup>

Neste anexo apresenta-se com algum detalhe o método numérico de cálculo de escoamentos para fluidos viscoelásticos baseado numa formulação de volumes finitos para malhas colocadas e usando coordenadas não-ortogonais. A descrição baseia-se na totalidade em trabalhos desenvolvidos pelo autor e seus colaboradores, em grupo ou isoladamente, com quem o autor teve o privilégio de partilhar experiências e de onde foram extraídas também inúmeras figuras e os casos estudados no texto principal.

#### 1 Transformação de coordenadas

As equações básicas necessárias ao estudo numérico de escoamentos incompressíveis e tri-dimensionais, que são as equações de conservação da massa (Eq. 1), da quantidade de movimento (Eq. 3), da energia (Eq. 4) e uma equação constitutiva reológica (Secção 4), devem escrever-se num sistema de coordenadas não-ortogonais, para permitirem maior generalidade do método numérico no tratamento de escoamentos em geometrias complexas. Naturalmente que este desiderato também pode conseguir-se usando malhas não-estruturadas, mas esse foi um caminho que optamos por não trilhar nesta fase, embora o futuro nele nos possa colocar. Tudo dependerá das dificuldades que nos serão colocadas e da nossa capacidade de os resolvermos com o actual método. Que seja do nosso conhecimento, há um único grupo que actualmente utiliza malhas não-estruturadas com volumes finitos para prever escoamentos de fluidos viscoelásticos (Huang et al, 1996).

Para a explicação do método que se segue, adoptaremos como equação constitutiva reológica, representativa do comportamento de um fluido viscoelástico, o modelo convectivo superior de Maxwell dado pela Eq. (28). Este modelo tem uma forma adequada para explicar as variações do método numérico em relação ao método usado para fluidos newtonianos. Sempre que fôr necessário usar um modelo reológico diferente, essa situação será devidamente assinalada.

As equações citadas obedecem a princípios de invariância, mas a sua discretização numa malha global composta de hexaedros não-ortogonais requer a sua prévia transformação para um sistema de coordenadas não-ortogonais ( $\xi_1, \xi_2, \xi_3$ ), como se vê na Figura A1. Note-se que só as coordenadas serão representadas num sistema não-ortogonal, pois as velocidades a calcular referem-se às componentes no sistema cartesiano. Isto significa que na transformação das equações de conservação só é necessário converter as derivadas relativamente a coordenadas cartesianas.

---

<sup>4</sup> A simbologia deste anexo que não está listada da secção de Notação, apresenta-se no final.

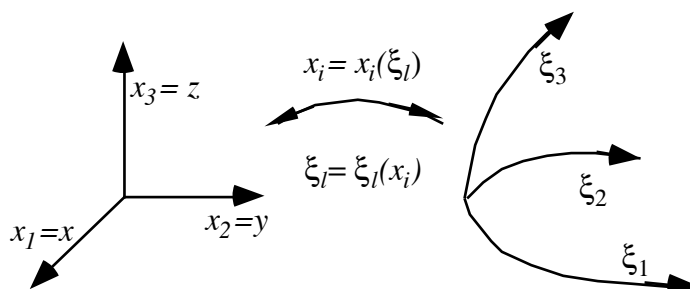


Figura A1- Representação esquemática da transformação de um sistema de coordenadas rectangular cartesiano para um sistema de coordenadas não-ortogonal definido nas direcções da malha.

Do ponto de vista numérico é vantajoso escrever as equações resultantes na sua forma forte, que é conservativa, pois essa forma ajudará à conservação das quantidades físicas nas equações algébricas finais. Esta é, aliás, uma das principais razões para se utilizar a técnica dos volumes finitos: é essencial conservar as quantidades físicas, como por exemplo a massa, a quantidade de movimento e a energia. A excepção é o termo do gradiente de pressão na conservação de quantidade de movimento onde há argumentos importantes (ver Oliveira, 1992) que favorecem o uso da formulação não conservativa.

As regras de transformação geométrica são bem conhecidas da literatura, por exemplo Vinokur (1989), e são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} J \\ \frac{\partial}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial \xi_l} \frac{\partial \xi_l}{\partial x_i} = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi_l} \beta_{li} \end{aligned} \quad (A1)$$

onde  $J$  é o jacobiano da transformação  $x_i = x_i(\xi_l)$  (ou determinante da matriz jacobiana  $J_{ij}$  da transformação), que é definido como

$$J = \det \left( \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{vmatrix} \quad (A2)$$

e  $\beta_{li}$  são os coeficientes métricos que se definem como o cofactor de  $\partial x_i / \partial \xi_l$  na matriz jacobiana.

Após aplicação das regras de transformação (A1), as equações de conservação mencionadas e apresentadas na secção 2 passam a escrever-se como

$$\begin{aligned} &\text{- conservação da massa} \\ &\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j) = 0 \end{aligned} \quad (A3)$$

- conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial}{\partial t}(J\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial \xi_l}(\rho\beta_{lj}u_j u_i) - \frac{\partial(\beta_{lj}\tau_{ij,s})}{\partial \xi_l} = -\beta_{li} \frac{\partial p}{\partial \xi_l} + \frac{\partial}{\partial \xi_l}(\beta_{lj}\tau_{ij,p}) + J\rho g_i \quad (A4)$$

Nesta equação a tensão total foi decomposta numa tensão puramente newtoniana para o solvente e numa tensão extra elástica para o polímero, sendo a componente newtoniana dada pela Eq. (13).

- conservação da energia

$$\frac{\partial(J\rho cT)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi_l}(\rho\beta_{lj}c u_j T) = \frac{\partial}{\partial \xi_k} \left( \frac{k}{J} \beta_{ki} \beta_{li} \frac{\partial T}{\partial \xi_l} \right) + \tau_{ij} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} + JS_i \quad (A5)$$

Note-se que ao transformar o termo difusivo da equação de energia, que envolvia sómente segundas derivadas do tipo normal, surgem agora no sistema de coordenadas não-ortogonais segundas derivadas do tipo mistas.

- equação constitutiva reológica

$$J\tau_{ij,p} + \lambda \frac{\partial}{\partial t}(J\tau_{ij,p}) + \lambda \frac{\partial}{\partial \xi_l}(\beta_{lk} u_k \tau_{ij,p}) = \eta \left[ \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} + \beta_{li} \frac{\partial u_j}{\partial \xi_l} \right] + \lambda \left[ (\beta_{lk} \tau_{kj,p}) \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} + (\beta_{lk} \tau_{ki,p}) \frac{\partial u_j}{\partial \xi_l} \right] - \frac{2}{3} \eta \beta_{lk} \frac{\partial u_k}{\partial \xi_l} \delta_{ij} \quad (A6)$$

Estas equações diferenciais serão integradas em volume antes de discretização, como veremos na subsecção seguinte. Nessa integração, os coeficientes métricos  $\beta_{li}$  transformar-se-ão nos componentes do vector área das faces dos volumes de controlo  $B_{li}$ .

É normal na Mecânica dos Fluidos Computacional Clássica, e por isso também em Reologia Computacional, escrever no lado esquerdo das equações os termos que são tratados de forma implícita, enquanto que no membro da direita se colocam os termos tratados de forma explícita, procedimento que é aqui adoptado. É também sabido que a difusão é essencial para promover a estabilidade das equações de transporte quando estas são resolvidas pelo método dos volumes finitos (e também em elementos finitos) e podemos constatar que na equação (A4) a difusão não está explicitamente presente. Assim, para promover a estabilidade do método de cálculo Oliveira et al (1997) decidiram adicionar a ambos os membros da equação (A4) um idêntico termo de difusão molecular, mas que só contém os termos ditos normais. A diferença é meramente numérica e diminuirá à medida que se alcança a solução do estado estacionário.

Este procedimento é diferente daqueles que têm vindo a ser adoptados para cálculos com fluidos não newtonianos em elementos finitos como o EVSS de Rajagopalan et al (1990) ou de Perera e Walters (1977) ou o AVSS de Sun et al (1990). No EVSS a tensão é separada numa contribuição viscosa e noutra elástica, fazendo-se aparecer a contribuição viscosa no membro esquerdo da equação de quantidade de movimento para ser tratado de forma implícita. A desvantagem deste método é que ele é mais elaborado, obrigando a uma mudança de variáveis, mas por outro lado não introduz qualquer termo fisicamente adicional na equação de quantidade de movimento e que por isso possa alterar a física do fenómeno o que é especialmente

importante para cálculos de escoamento em regime transitório. De qualquer das formas o resultado final será o mesmo que no método aqui descrito. No AVSS, contudo, a separação entre as contribuições elástica e viscosa é diferente, uma vez que para esta última é utilizado um coeficiente de viscosidade que não corresponde à verdadeira viscosidade do fluido. Em vez disso, utiliza-se um coeficiente adaptável consoante determinados critérios e por isso também aqui se está a introduzir um termo adicional para a difusão, embora ele seja compensado no balanço global de quantidade de movimento. No AVSS a estabilidade é conseguida por intermédio de um aumento fictício na viscosidade do termo adicional.

O método que nós adoptamos tem a vantagem de manter a generalidade do código e não obriga a qualquer mudança de variáveis, mas por outro lado deve haver cuidados especiais na sua formulação para cálculos em regime transitório, por forma a assegurar que os termos adicionados de facto se anulem em cada passo do tempo, não modificando fisicamente o problema. Note-se que os vários métodos mencionados foram todos desenvolvidos com a preocupação de efectuar cálculos em regime permanente e para melhorar a convergência do método numérico, devido aos problemas de convergência a elevados números de Weissenberg. É natural que por isso sofram alterações e melhorias à medida que o cálculo de escoamentos dependentes do tempo se torne mais frequente. No nosso método, o termo de difusão que é acrescentado ao membro da esquerda da equação (A4), para lhe dar estabilidade, é também adicionado ao membro da direita, pelo que a equação final se mantém inalterável, sendo que o coeficiente de viscosidade utilizado corresponde ao do fluido em estudo. É na equação discretizada que poderão haver diferenças, pois esses dois termos usam valores numéricos de iterações consecutivas, que só tendem a ser iguais em condições de solução convergida. Daí o cuidado que se deve ter em assegurar a convergência destes dois termos em cada passo no tempo por forma à sua anulação durante cálculos em regime transitório.

O método adoptado é conveniente do ponto de vista numérico e baseou-se na experiência em cálculos com fluidos newtonianos (Khosla and Rubin [14]). Após a inclusão dos termos difusivos normais, a Eq. (A4) é substituída pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial \xi_l}(\rho \beta_{lj} u_j u_i) - \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left( \frac{\eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) - \frac{\partial (\beta_{lj} \tau_{ij,s})}{\partial \xi_l} = -\beta_{li} \frac{\partial p}{\partial \xi_l} + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} \tau_{ij}) + J \rho g_i - \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left( \frac{\eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) \quad (\mathbf{l} = l \text{ e sem aplicação da regra da soma no subíndice } \mathbf{l})(A7)$$

Como referido anteriormente, na Eq. (A7) os termos no membro da esquerda são tratados de forma implícita e os termos no membro da direita são tratados de forma explícita, i.e., são incluídos no termo fonte da equação algébrica resultante e calcular-se-ão com base nos campos das variáveis da iteração anterior. O termo do divergente da tensão newtoniana será parcialmente discretizado de forma implícita (os termos normais), sendo os termos cruzados encaminhados para o termo fonte para tratamento explícito.

## 2 Método numérico

### 2.1 Introdução e notação

No método dos volumes finitos, o domínio de cálculo divide-se em células computacionais de 6 faces e as equações diferenciais na forma forte (com a excepção já mencionada do gradiente de pressão) são integradas em cada célula, por forma a assegurar a conservação total das várias quantidades físicas. Para este efeito, aplica-se o teorema da divergência de Gauss, como se explica em várias obras clássicas sobre o tema (Patankar 1980, Ferziger e Perić 2002, Versteeg e Malalasekera 1995). Depois, a aplicação do método evoluiu de forma ligeiramente diferente consoante se trabalha com malhas desfasadas, como está descrito em Patankar (1980) ou Versteeg e Malalasekera (1995), ou com malhas colocadas como explicado em Perić (1985) ou em Ferziger e Perić (2002). Neste artigo só nos interessa o segundo caso.

Quando se utilizam malhas colocadas todas as quantidades são calculadas e armazenadas nos centros das células (volumes de controlo), sendo o acoplamento pressão-velocidade garantido por um método de interpolação especial para o cálculo das velocidades, que aparecem nos fluxos de massa nas faces das células, e que é conhecido por método de Rhie-e-Chow. Devido à elasticidade do fluido e à necessidade de se calcular também o campo de tensões, surge um problema adicional de acoplamento tensão-velocidade-pressão, que foi resolvido por um método de interpolação especial para as tensões, desenvolvido por Oliveira et al (1998), e melhorado em Oliveira e Pinho (1999a), para lidar com malhas não-uniformes.

Os termos difusivos da equação integrada são discretizados por diferenças centradas, que é equivalente ao uso de interpolação linear para calcular os termos em qualquer local intermédio, a partir dos valores das variáveis nos centros das células (embora a ordem do método varie consoante o local a que se refere esse cálculo). Para os termos convectivos utilizam-se métodos de interpolação específicos. Inicialmente, utilizamos o método de segunda ordem de montante linear (LUDS do inglês “Linear Upwind scheme”) (Oliveira et al, 1998; Oliveira e Pinho, 1999b), após o que passamos a utilizar métodos mais avançados em precisão e estabilidade, os chamados métodos de alta-resolução (Alves et al 2000, 2001, 2003b). Neste anexo, começamos por explicar o método de cálculo utilizando o esquema de montante (UDS do inglês “Upwind Differencing Scheme”), por ser o mais simples e também por ser utilizado em combinação com outros métodos. Mais adiante apresentam-se as alterações associadas ao uso de métodos de alta resolução, como o esquema CUBISTA de Alves et al (2003a). Note-se que estes outros esquemas de ordem superior são através do método da correcção diferida, o que requer o uso do esquema de montante.

O esquema LUDS é uma generalização do esquema de montante (LUDS, do inglês “Linear Upwind Differencing Scheme”). No esquema de montante (UDS) o valor de uma variável na face de um volume de controlo é igual ao valor dessa mesma variável no centro da célula, que lhe está imediatamente a montante. Enquanto que o método UDS é um esquema de interpolação de primeira ordem, já o LUDS é de segunda ordem e por isso reduz o principal defeito do UDS que é a excessiva difusão numérica. Para calcular o valor da variável na face do volume de

controlo com o esquema LUDS utiliza-se uma extrapolação linear baseada no valor dessa variável nos dois nós (centros dos volumes de controlo), imediatamente a montante da face em questão. O esquema CUBISTA é um pouco mais complicado porque resulta da combinação de vários métodos, mas no essencial o cálculo de uma variável numa face baseia-se no ajuste de uma equação a essa variável em três pontos adjacentes à face, dois a montante e um a jusante. Mais detalhes deste método surgirão mais adiante.

Resulta do processo de discretização das equações diferenciais um sistema de equações algébricas, que relaciona o valor das incógnitas no centro de uma célula com os valores das incógnitas no centro das células vizinhas. A solução do sistema é obtida numericamente através de um método de resolução iterativa de sistemas de equações algébricas. Nos métodos de cálculo desenvolvido, adoptámos como método de resolução iterativa o método do gradiente-conjugado com pré-condicionamento e decomposição LU incompleta: conjugado gradiente normal para problemas com matrizes simétricas como para a pressão e bi-conjugado para as restantes variáveis, cujas matrizes originais não são simétricas .

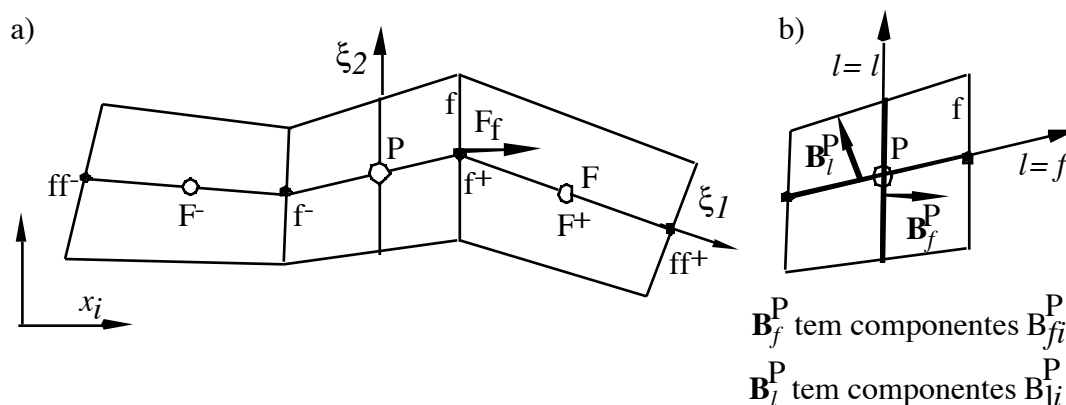


Figura A2- Nomenclatura: a) célula central e suas vizinhas; b) vetores de área e seus componentes.

Para se integrarem as equações que governam o escoamento, escritas em coordenadas generalizadas (Eqs. A3, A5, A6 e A7), é importante familiarizarmo-nos com a nomenclatura da Figura A2. Depois da integração, faz-se a discretização das equações assumindo as aproximações clássicas quanto às grandezas nas faces das células e nos volumes de controlo (essas aproximações estão explicadas em Ferziger e Peric, 2002). Nessa discretização, os coeficientes  $\beta_{li}$  transformam-se em componentes do vector área da superfície orientada na direcção  $l$ , que se convencionou designar por  $B_{li}$ , o jacobiano  $J$  transforma-se no volume da célula de cálculo  $V$ ; e as derivadas  $\partial/\partial\xi_l$  passam a ser diferenças entre valores ao longo da direcção  $l$ , i.e.

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\xi_l} = [\Delta\Phi]_l \equiv \Phi_{l^+} - \Phi_{l^-} \quad (\text{A8})$$



Estas diferenças, e os componentes de um vector área, podem ser calculadas em duas situações diferentes:

1) podem ser diferenças centradas e áreas calculadas no centro das células, representadas por um índice superior P,

$$[\Delta\Phi]_f^P \equiv \Phi_{f^+} - \Phi_{f^-} \quad e \quad B_{fi}^P \quad (A9)$$

2) ou podem ter de ser calculadas em relação à face de uma célula, sendo aí representadas por um índice superior  $f$ ,

$$[\Delta\Phi]_f^f \equiv \Phi_F - \Phi_P \quad e \quad B_{fi}^f \quad (A10)$$

Esta nomenclatura pretende evitar a proliferação de índices; caso contrário a localização será indicada por um índice inferior. O índice "F" por sua vez designa uma qualquer célula vizinha imediata (próxima) da célula geral e central "P", na direcção da face " $f$ " (ver Fig. A2); o recurso a caracteres duplos ("FF" e " $ff$ ") referencia os segundos vizinhos (ou vizinhos afastados) da célula central "P". Estes vizinhos afastados aparecem nas equações quando se usa o esquema LUDS para a convecção ou um dos esquemas mais elaborados, como os que integram os métodos de alta resolução.

Nas equações discretizadas, representa-se com o índice "P" a célula central que tem seis vizinhos próximos (F=1 a 6, ou W, E, S, N, B e T com o significado: oeste (west), este, sul, norte, baixo e topo, i.e. para  $l = \pm 1, \pm 2$  e  $\pm 3$ , respectivamente). Para designar os seis vizinhos afastados utiliza-se então o índice FF com o significado seguinte: FF=1 a 6, para WW, EE, SS, NN, BB e TT. Nas equações discretizadas, os termos referentes aos vizinhos próximos são sempre tratados implicitamente, e formam assim os termos principais da célula computacional, enquanto que os termos associados aos seis vizinhos afastados são colocados no termo fonte das equações algébricas e tratados de forma explícita. Desta forma, os sistemas de equações linearizadas para cada variável dependente, que devem ser resolvidos em cada instante de tempo, apresentam uma matriz bem definida com banda onde há 7 diagonais com termos não-nulos. Esta é uma das principais diferenças em relação ao método dos elementos finitos que dá lugar a matrizes com banda, mas sem uma estrutura bem definida no seu interior, o que dificulta a sua resolução numérica.

De seguida apresentam-se os detalhes de todo este processo de discretização para cada equação.

## 2.2 Discretização das equações

### 2.2.1 Equação da continuidade

Faz-se o integral de volume da equação da continuidade, a posterior discretização da equação resultante, da forma que se segue, onde as somas são explicitamente representadas na equação discretizada usando a notação de Einstein:

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j) dV = \sum_{l=1}^3 \left[ \Delta \left( \sum_{j=1}^3 \rho B_{lj} u_j \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 \left( \sum_{j=1}^3 \rho B_{ff}^f \tilde{u}_{j,f} \right) \quad (\text{A11})$$

Nesta equação, a soma das diferenças centradas na célula P foi transformada numa soma de contribuições com origem nas 6 faces  $f$  do volume de controlo P. O til em  $\tilde{u}_{j,f}$  referente à componente de velocidade  $u_j$  na face  $f$ , significa que essa velocidade não pode ser calculada por uma simples interpolação linear, caso em que nenhum símbolo especial seria utilizado de acordo com a nomenclatura utilizada. Pelo contrário, a velocidade na face  $\tilde{u}_{j,f}$  tem de ser determinada por uma interpolação especial, designada por interpolação de Rhie e Chow (1983), que é apresentada mais adiante na secção 2.4. É esta interpolação especial da velocidade que é responsável por assegurar o acoplamento entre os campos de pressão e velocidade.

Os caudais mássicos através das faces são definidos como

$$F_f \equiv \sum_{j=1}^3 \rho B_{ff}^f \tilde{u}_{j,f} \quad (\text{A12})$$

pelo que a equação da continuidade discretizada (Eq. A11) pode ser reescrita como

$$\sum_{f=1}^6 F_f = 0 \quad (\text{A13})$$

Esta equação afirma que a soma dos fluxos de massa a entrar no volume de controlo iguala a soma dos fluxos a sair.

### 2.2.2 Equação de conservação de quantidade de movimento

A integração de cada termo da Eq. (A7) resulta nas seguintes discretizações.

#### *Termo de inércia*

Este termo, não sendo um divergente, não beneficia da aplicação do teorema da divergência de Gauss e por isso é assumido que o valor do integrando no centro da célula representa o valor médio a multiplicar pelo volume do respectivo volume de controlo

$$\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial t} (J \rho u_i) dV = \frac{\rho V_P}{\delta t} (u_{i,P} - u_{i,P}^o) \quad (\text{A14})$$

onde  $u_{i,P}^o$  é a velocidade na célula P no instante de tempo anterior. A discretização da derivada no tempo da Eq. (A14) e o tratamento no tempo dos restantes termos da equação é totalmente implícito, mas de primeira ordem (Euler implícito), significando isto que todas as grandezas sem índice superior associado ao tempo se consideram como pertencentes ao novo instante de tempo. A colocação de um índice superior igual a zero indica quantidade determinada no instante de tempo anterior. Mais adiante modificaremos este procedimento por forma a conferir precisão no cálculo de escoamentos transitórios por adopção de um método implícito de segunda ordem. Novamente, o recurso a um método mais simples nesta fase facilita significativamente a compreensão do método numérico.

### Termo de convecção

À semelhança dos fluxos de massa da Eq. (A11), a discretização dos fluxos de quantidade de movimento beneficia da aplicação do teorema de Gauss e resulta em

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j u_i) dV = \sum_{l=1}^3 \left[ \Delta \left( \sum_{j=1}^3 (\rho B_{lj} u_j) u_i \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 F_f \hat{u}_{i,f} \quad (\text{A15})$$

Nesta expressão, os caudais mássicos nas faces da célula são os definidos na Eq. (A12) e as velocidades de convecção nas faces  $f$ ,  $\hat{u}_{i,f}$ , são aqui calculadas de acordo com o esquema de discretização adoptado para tratar os termos convectivos (uso do acento circunflexo). Para o esquema de montante (UDS),  $\hat{u}_{i,f}$  é igual ao valor da velocidade no centro da célula imediatamente a montante da face, ie:

$$\hat{u}_{i,f} = u_{i,P} \quad (\text{para } F_f^+ > 0) \quad \text{e} \quad \hat{u}_{i,f} = u_{i,F} \quad (F_f^- < 0) \quad (\text{ver Fig. A2}) \quad (\text{A16})$$

Os fluxos convectivos de quantidade de movimento podem escrever-se na forma mais geral da Eq. (A17) para o esquema UDS

$$F_f \hat{u}_{i,f} = F_f^+ u_{i,P} + F_f^- u_{i,F} \quad \text{onde} \quad F_f^+ \equiv \text{Max}(F_f, 0) \quad \text{e} \quad F_f^- \equiv \text{Min}(F_f, 0) \quad (\text{A17})$$

### Termo difusivo normal ordinário implícito

Este é o termo que foi adicionado ao membro da esquerda da equação de conservação da quantidade de movimento e que é tratado de forma implícita. O termo idêntico a este no membro da direita é discretizado da mesma forma, só que o seu cálculo é explícito, i.e., os valores de  $u_{i,F}$  e  $u_{i,P}$  correspondem aos das iterações anteriores e são por isso conhecidos em cada iteração.

Da discretização deste termo resulta a Eq. (A18)

$$-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left( \frac{\eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) dV = -\sum_{f=1}^6 \frac{\eta_{f,p}}{V_f} B_f^2 [\Delta u_i]_f^f = -\sum_{f=1}^6 D_{f,p} (u_{i,F} - u_{i,P}) \quad (\text{A18})$$

onde a área da superfície da célula é  $B_f = \left( \sum_j B_{ff}^f B_{ff}^f \right)^{1/2}$ , o volume de uma pseudo-célula

centrada na face é dada por  $V_f = \sum_{j=1}^3 B_{ff}^f [\Delta x_j]_f^f$ , e  $D_{f,p} \equiv \eta_{f,p} B_f^2 / V_f$  é uma condutância difusiva

polimérica.

### Termo da tensão do solvente newtoniano

O termo difusivo newtoniano é tratado como um termo difusivo num método de cálculo clássico para fluidos newtonianos (Ferziger e Perić, 2002), resultando em

$$-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} \tau_{ij,s}) dV = -\sum_{l=1}^3 \left[ \Delta \left( \sum_{j=1}^3 B_{lj} \tau_{ij,s} \right) \right]_l^P =$$

$$-\eta_s \sum_{l=1}^6 \frac{1}{V_f} \left[ \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{ff}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{ff}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right] \quad (\text{A19})$$

A Eq. (A19) contem termos difusivos normais e cruzados relativamente às faces das células e, segundo a metodologia desenvolvida por Oliveira et al (1998) devemos avaliar implicitamente os termos normais indo os restantes para o termo fonte. Os termos normais são dados pelo primeiro termo do membro da direita da Eq. (A19) quando  $m=f$ . Em consequência, o termo difusivo normal tratado de forma implícita é

$$-\sum_{l=1}^6 \frac{\eta_s}{V_f} \left[ \sum_{j=1}^3 B_{ff}^f B_{ff}^f [\Delta u_i]_f^f \right] = -\sum_{f=1}^6 D_{f,s} (u_{i,F} - u_{i,P}) \quad (\text{A20})$$

i.e., é um termo análogo ao da Eq. (A18) em que se substituiu  $\eta_p$  por  $\eta_s$  (muda por isso a definição de  $D_{f,p}$  para  $D_{f,s}$ ). A contribuição para o termo fonte é

$$S_{u_i - \text{newtoniano}} = \eta_s \sum_{l=1}^6 \frac{1}{V_f} \left[ \sum_{j=1}^3 \sum_{m \neq f}^2 B_{ff}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{ff}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right] \quad (\text{A21})$$

#### *Termo do gradiente de pressão*

À semelhança do termo de inércia, este termo não beneficia da aplicação do teorema de Gauss, por isso assume-se que o gradiente de pressão está centrado em  $P$ , transformando-se assim numa diferença entre pressões nas faces da célula  $P$ . Estas são calculadas por interpolação linear a partir de  $p_p$  e  $p_F$ . Ao representar o termo como  $S_u$  indica-se que ele será colocado no termo fonte da equação algébrica, como acontece com todos os termos a tratar de forma explícita.

$$-\int_{V_p} \beta_{li} \frac{\partial p}{\partial \xi_l} dV = -\sum_{l=1}^3 B_{li}^P [\Delta p]_l^P \equiv S_{u_i - \text{pressão}} \quad (\text{A22})$$

#### *Termo do divergente da tensão*

Sendo este termo um divergente de uma tensão, o seu tratamento beneficia da aplicação do teorema de Gauss e dá origem a

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{ij} \tau_{ij}) dV = \sum_{f=1}^6 \sum_{j=1}^3 B_{ff}^f \tilde{\tau}_{ij,f} \equiv S_{u_i - \text{tensão}} \quad (\text{A23})$$

onde, à semelhança da velocidade na face que aparece na equação da continuidade, as tensões nas faces das células devem ser calculadas por um método de interpolação especial para garantir o acoplamento entre os campos de tensão e velocidade neste sistema de malhas colocadas. Este método de interpolação especial é apresentado na Secção 2.6 e é essencial para o bom funcionamento do algoritmo e o cálculo correcto de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Este termo também é inserido no termo fonte da equação de conservação de quantidade de movimento.

*Termo da força de gravidade explícito*

À semelhança do termo no gradiente de pressão, este termo é calculado no centro do volume de controlo e faz parte do termo fonte global

$$\int_{V_P} J\rho g_i dV = \rho V_P g_i \equiv S_{u_i-gravidade} \quad (A24)$$

*Termo difusivo normal ordinário*

Este é o termo adicionado ao membro da direita da equação de conservação da quantidade de movimento que corresponde ao termo da esquerda tratado na Eq. (A18).

Por forma a evitar inconsistências, este termo tem de ser tratado exactamente da mesma maneira que o termo acrescentado ao membro da esquerda da equação de conservação de quantidade de movimento, Eq. (A18), resultando:

$$-\sum_{f=1}^6 D_{f,p}(u_{i,F} - u_{i,P}) \equiv S_{u_i-difusão} \quad (A25)$$

A única diferença está na forma como os dois termos são calculados ao longo do tempo: enquanto que o termo da esquerda é calculado implicitamente, com  $D_{f,p}$  adicionado ao coeficiente  $a_p$ , o termo da direita é adicionado ao termo fonte da equação discretizada, que é calculado com base nos valores das grandezas obtidas na iteração temporal anterior, ie, este termo está atrasado numa iteração no tempo, em relação ao outro termo difusivo. A partir do momento em que se atinge a solução de regime permanente, ambos os termos são iguais e por isso anulam-se entre si. Já numa formulação para cálculo de escoamentos em regime transitório é necessário modificar este tratamento para evitar diferenças físicas introduzidas por estes dois termos em cada passo no tempo. Isto será explicado mais adiante na Secção 2.8, quando for referida a metodologia de cálculo para escoamentos transitórios. De forma breve, pode-se explicar que este problema é ultrapassado se dentro de um mesmo passo no tempo a equação de conservação de quantidade de movimento for resolvida (iterada) mais que uma vez, usando-se para as velocidades do instante \*\* da iteração interna seguinte os valores de velocidade  $t+1$ , obtidos na iteração interna anterior, i.e. o procedimento de cálculo é do tipo “predictor-corrector”, com várias fazes de correcção. Desta forma, dentro de um mesmo intervalo de marcha no tempo ( $t+1$ ) os valores de velocidade do termo difusivo explícito (que se referem an instante  $t+1$ ) aproximam-se dos valores da velocidade do termo difusivo implícito (também referentes à iteração  $t+1$ ) e os dois termos extraordinários tendem a anular-se.

A forma final da equação discretizada que exprime a conservação de quantidade de movimento obtém-se por reagrupamento dos vários termos, e é dada por:

$$a_P u_{i,P} - \sum_F a_F u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^o \quad (A26)$$

onde os coeficientes  $a_F$  têm contribuições convectivas ( $a_F^C$ , aqui baseadas em UDS) e contribuições difusivas ( $a_F^D$ ):

$$a_F = a_F^D + a_F^C,$$

$$\text{com } a_{\text{F}}^{\text{D}} = D_{\text{f},\text{p}} + D_{\text{f},\text{s}} \text{ e } a_{\text{F}}^{\text{C}} = +F_{\text{f}}^+ = \max(F_{\text{f}}, 0) \quad (\text{para uma face negativa, f-})$$

$$a_{\text{F}}^{\text{C}} = -F_{\text{f}}^- = -\min(F_{\text{f}}, 0) \quad (\text{para uma face positiva, f+}), \quad (\text{A27})$$

O coeficiente central (da célula P) é:

$$a_{\text{P}} = \frac{\rho V_{\text{P}}}{\delta t} + \sum_{\text{F}} a_{\text{F}} \quad (\text{A28})$$

e o termo fonte é constituído pela soma dos vários termos fonte determinados anteriormente

$$S_{u_i} = S_{u_i\text{-pressão}} + S_{u_i\text{-gravidade}} + S_{u_i\text{-newtoniano}} + S_{u_i\text{-tensão}} + S_{u_i\text{-difusão}} \quad (\text{A29})$$

O termo fonte  $S_{u_i}$  contem ainda outras contribuições, como por exemplo as que resultam da aplicação das condições de fronteira, do termo de inércia calculado no instante de tempo anterior (segundo termo da direita da Eq. A26) ou provenientes de outros esquemas de interpolação para o tempo e para os termos convectivos.

### 2.3. Equação constitutiva

A discretização dos três termos do membro da esquerda da Eq. (A6) é semelhante à de vários termos da equação de conservação de quantidade de movimento, nomeadamente dos termos da gravidade (Eq. A24), da inércia (Eq. A14) e convectivo (Eq. A15), respectivamente e por isso não apresentam qualquer dificuldade adicional. Só é necessário alertar para a necessidade de substituir a componente de velocidade  $u_i$  pela componente da tensão  $\tau_{ij}$  e os caudais mássicos nos fluxos convectivos, definidos na Eq. (A12), devem ser multiplicados pela razão entre o tempo de relaxação  $\lambda$  e a massa específica  $\rho$  (comparem-se os fluxos convectivos das Eqs. A4 e A6). Quanto ao termo fonte da equação constitutiva, seguindo também uma filosofia análoga à utilizada para discretizar o termo fonte da equação de conservação da quantidade de movimento, obtem-se:

$$S_{\tau_{ij}} = \eta_{\text{P}} \sum_l^3 \left( B_{lj}^{\text{P}} [\Delta u_i]_l^{\text{P}} + B_{li}^{\text{P}} [\Delta u_j]_l^{\text{P}} \right) + \lambda_{\text{P}} \sum_l^3 \left( \left( \sum_k^3 B_{lk}^{\text{P}} \tau_{ik,\text{P}} \right) [\Delta u_j]_l^{\text{P}} + \left( \sum_k^3 B_{lk}^{\text{P}} \tau_{jk,\text{P}} \right) [\Delta u_i]_l^{\text{P}} \right) -$$

$$\frac{2}{3} \eta_{\text{P}} \left( \sum_l^3 \sum_k^3 B_{lk}^{\text{P}} [\Delta u_k]_l^{\text{P}} \right) \delta_{ij} \quad (\text{A30})$$

Nesta equação, e nas que se seguem, deixamos de utilizar o subíndice  $p$  para designar componente polimérica, passando-se a utilizar índices que designam o local onde se faz o cálculo. Assim, a forma final da equação linearizada é

$$a_{\text{P}}^{\tau} \tau_{ij,\text{P}} - \sum_{\text{F}} a_{\text{F}}^{\tau} \tau_{ij,\text{F}} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_{\text{P}} V_{\text{P}}}{\delta t} \tau_{ij,\text{P}}^{\circ} \quad (\text{A31})$$

onde os coeficientes  $a_{\text{F}}^{\tau}$  têm as contribuições convectivas da Eq. (A27), multiplicadas por  $\lambda/\rho$ , e o coeficiente central é agora dado por:

$$a_{\text{P}}^{\tau} = V_{\text{P}} + \sum_{\text{F}} a_{\text{F}}^{\tau} + \frac{\lambda_{\text{P}} V_{\text{P}}}{\delta t} \quad (\text{A32})$$

Como a malha de cálculo é colocada, estes coeficientes são idênticos para os seis componentes do tensor das tensões, o que reduz substancialmente as necessidades de memória. Para efectuar

cálculos com um fluido newtoniano há duas alternativas: a primeira, mais imple, consiste em anular  $\eta_P$  e  $\lambda$  de que resulta um problema clássico de mecânica dos fluidos computacional uma vez que a equação constitutiva polimérica impõe  $\tau_{ij,p} = 0$ . Na segunda opção, anula-se a viscosidade do solvente newtoniano ( $\eta_s$ ) e  $\lambda$  pelo que o fluido newtoniano é dado através da equação constitutiva polimérica agora simplificada. Daqui resulta que todos os coeficientes  $a_F^\tau$  se anulam e a equação da tensão (A31) reduz-se a uma simples equação algébrica explícita na tensão. Neste caso é pois necessário resolver a Eq. (A31) de forma iterativa como se de um sistema de equações se tratasse, pois em cada ponto da malha de cálculo a equação (A31) só envolve a tensão no ponto de forma explícita. Em suma, esta segunda opção permite também, sem dificuldade, a solução de problemas com fluidos newtonianos, embora demore um pouco mais ( $\approx 13\%$ ) que a solução pelo primeiro método que é o método de cálculo desenvolvido especificamente para a equação de Navier-Stokes (Oliveira e Pinho, 1999a).

#### *2.4 Um esquema de alta resolução para a convecção: CUBISTA*

Os termos convectivos das equações de conservação da quantidade de movimento e constitutiva reológica envolvem primeiras derivadas das quantidades, que estão a ser transportadas, por isso requerem uma qualquer fórmula de interpolação, que permita determinar essas quantidades nas faces das células. Na secção anterior utilizou-se o método de interpolação de montante para calcular as velocidades convectivas definidas na Eq. (A16). O método UDS é o esquema mais estável de todos os que existem para o tratamento da convecção, mas só tem uma precisão de primeira ordem e isso resulta em difusão numérica excessiva. O problema agrava-se quando se aplica o esquema à solução da equação das tensões.

Ao longo dos anos foram surgindo métodos de discretização de ordem superior que permitiram a obtenção de resultados mais rigorosos, como é o caso do LUDS/SOU (o esquema linear de montante ou “upwind” de segunda ordem), ou o QUICK que é um esquema quadrático de montante de terceira ordem de precisão. No entanto, estes esquemas apresentam problemas de estabilidade, convergência ou falta de limitação e como solução a estas deficiências combinaram-se com outros esquemas, por forma a melhorar as suas características naquilo que se convencionou designar por métodos de alta resolução. Estes métodos asseguram melhores características de convergência e estabilidade e são geralmente limitados para evitar o aparecimento de oscilações atípicas em regiões onde há grandes gradientes da grandeza transportada.

O cálculo de escoamentos de fluidos viscoelásticos coloca dificuldades específicas que estão bem descritas em obras da especialidade (Owens e Phillips, 2002). Por outro lado, os esquemas de alta-resolução (EAR) com bons desempenhos em fluidos newtonianos apresentam frequentemente problemas de convergência e estabilidade quando usados com fluidos viscoelásticos como ficou demonstrado por Alves et al (2003a) onde se desenvolveu um EAR mais adequado à reologia computacional. Este é o esquema CUBISTA (esquema de interpolação convergente e universalmente limitado para o tratamento da advecção, do inglês “Convergent

and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection”), que está implementado nos nossos programas de simulação e que é explicado de seguida.

O EAR está implementado através da chamada correcção diferida de Khosla e Rubin (1974). Isto significa que, no que diz respeito às contribuições da convecção para os coeficientes  $a_F$  e  $a_P$  estes baseiam-se no esquema de montante UDS, por forma a assegurar coeficientes positivos, e a diferença entre os fluxos convectivos calculados por EAR e por UDS são calculados usando valores no instante de tempo anterior e incluídos no termo fonte da equação. A correcção diferida proporciona pois estabilidade, simplicidade e poupança de recursos computacionais (memória), já que os coeficientes  $a_P$  e  $a_F$  são idênticos para os três componentes do vector velocidade e os seis componentes do tensor das tensões a menos de um factor de escala (e da contribuição difusiva ausente no caso das tensões), quando se resolvem as equações de conservação de quantidade de movimento e constitutiva reológica, respectivamente. A taxa de convergência não será, contudo, tão elevada como a que se obteria com uma formulação mais específica para o EAR adoptado, mas o código perderia generalidade. Relativamente à solução de problemas em regime transitório, o recurso à correcção diferida acarreta os mesmos problemas que a inclusão dos termos ordinários de difusão na equação de conservação de quantidade de movimento mas, identicamente, a solução destes dois problemas é a mesma, uma das vantagens de uma formulação geral do método.

Aplicando a correcção diferida, juntamente com o esquema de alta resolução, à equação discretizada de quantidade de movimento, esta passa a ser reescrita como

$$a_P u_{i,P} - \sum_F a_{F,i} u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^0 + \left( \sum_f F_f \hat{u}_{i,f} \right)_{UDS} - \left( \sum_f F_f \hat{u}_{i,f} \right)_{EAR} \quad (A33)$$

enquanto que a equação constitutiva discretizada passa a ser

$$a_P^\tau \tau_{ij,P} - \sum_F a_{F,i}^\tau \tau_{ij,F} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_P V_P}{\delta t} \tau_{ij,P}^0 + \left( \sum_f \frac{\lambda}{\rho} F_f \hat{\tau}_{ij,f} \right)_{UDS} - \left( \sum_f \frac{\lambda}{\rho} F_f \hat{\tau}_{ij,f} \right)_{EAR} \quad (A34)$$

vindo os novos termos (os dois termos finais do membro da direita) integrados no termo fonte.

Os fluxos convectivos a calcular pelo esquema de montante já foram explicados anteriormente, uma vez que estão na base do cálculo dos termos implícitos (incluídos no membro da esquerda da equação). Quanto ao esquema de alta resolução, o fluxo é agora dado pela equação (A35) para o caso da tensão (para as velocidades substitui-se  $\tau_{ij}$  por  $u_i$  e elimina-se  $\lambda/\rho$ ). Note-se que nas Eqs. (A33) e (A34) os fluxos são calculados nas seis faces de uma célula P, sendo negativos os fluxos de entrada

$$\left( \frac{\lambda}{\rho} F_f \hat{\tau}_{ij,f} \right)_{EAR} = \frac{\lambda}{\rho} F_f \tau_{ij,P} + \frac{\lambda}{\rho} F_f \left[ a(\tau_{ij,D} - \tau_{ij,U}) + (b-1)(\tau_{ij,P} - \tau_{ij,U}) \right] \quad (A35)$$

Os coeficientes  $a$  e  $b$  são explicados de seguida bem como o significado de  $\tau_{ij,D}$  e  $\tau_{ij,U}$ . Note-se ainda que o primeiro termo da direita da Eq. (A35) corresponde de facto ao cálculo de um fluxo pelo esquema de montante de modo que a diferença entre os dois somatórios da Eq. (A34) é de facto o termo entre parêntesis rectos da Eq. (A35) multiplicado por (-1).



Os esquemas de alta resolução são normalmente formulados de forma compacta, utilizando a formulação normalizada de espaço e variáveis (NVSF do inglês “normalized variable and space formulation”) de Darwish e Moukalled (1994). Nesta formulação a variável transportada por convecção  $\phi$  (por exemplo  $u_i$  ou  $\tau_{ij}$ ) e o sistema de coordenadas curvilíneas  $\xi$ , que se mostra esquematicamente na Figura A3, são adimensionalizados como

$$\phi = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (\text{A36})$$

$$\xi = \frac{\xi - \xi_U}{\xi_D - \xi_U} \quad (\text{A37})$$

onde os índices  $U$  e  $D$  se referem às células a montante ( $U$  de “upstream”) e jusante ( $D$  de “downstream”) da célula  $P$  que, por sua vez está imediatamente a montante da face  $f$  em questão. Note-se que o objectivo é o cálculo de  $\phi$  nesta face  $f$ , através de um esquema de interpolação especial para a convecção ( $\phi_f$ ).

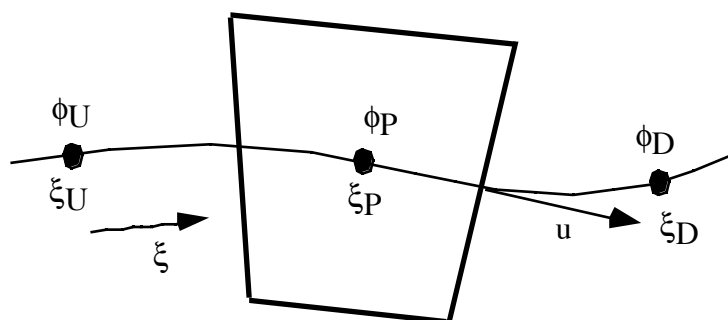


Figura A3- Definição de variáveis e coordenadas locais. Reproduzido de Alves et al (2000)

Para satisfazer o critério de limitação convectivo de Gaskell e Lau (1988) (CBC do inglês “Convection Boundedness Criterion”) a relação funcional para determinar  $\phi_f$ ,  $\phi_f = fn(\phi_P)$ , deve ser contínua e limitada inferiormente por  $\phi_f = \phi_P$  e superiormente por 1 na gama  $0 < \phi_P < 1$ . No entanto, as condições CBC não são suficientes para garantir um esquema limitado e por isso Alves et al (2003a) usaram a noção de limitador universal de Leonard (1991), que é válida para cálculos de escoamento transitórios explícitos e que se reduz ao critério de limitação convectiva, quando o escoamento é em regime permanente. Contudo, o critério de variação total decrescente (TVD do inglês “Total Variation Diminishing”) para métodos explícitos dependentes do tempo é ainda mais restritivo e foi com base nele que o esquema CUBISTA foi formulado para garantir estabilidade. Para além do critério da variação total decrescente, o esquema CUBISTA assenta ainda no esquema básico de discretização de 3ª ordem QUICK, evita o aparecimento de mudanças bruscas no declive da função e garante ainda o problema da limitação no lado de jusante, não permitindo que  $\phi$  seja superior a  $\phi_D$  na sua proximidade. Estas condições estão todas explicadas em detalhe em Alves et al (2003a), dando

origem à seguinte função para o esquema CUBISTA escrito para uma malha não-uniforme como

$$\phi_f = a + b\phi_P = \begin{cases} \left[ 1 + \frac{\xi_f - \xi_P}{3(1 - \xi_P)} \right] \xi_f \phi_P & 0 < \phi_P < \frac{3}{4}\xi_P \\ \frac{\xi_f(1 - \xi_f)}{\xi_P(1 - \xi_P)} \phi_P + \frac{\xi_f(\xi_f - \xi_P)}{1 - \xi_P} & \frac{3}{4}\xi_P \leq \phi_P \leq \frac{1 + 2(\xi_f - \xi_P)}{2\xi_f - \xi_P} \xi_P \\ 1 - \frac{1 - \xi_f}{2(1 - \xi_P)} (1 - \phi_P) & \frac{1 + 2(\xi_f - \xi_P)}{2\xi_f - \xi_P} \xi_P < \phi_P < 1 \\ \phi_P & \phi_P < 0 \text{ and } \phi_P > 1 \end{cases} \quad (A38)$$

onde  $\phi_P$ ,  $\xi_P$  e  $\xi_f$  se definem obviamente a partir das Eqs. (A36) e (A37).

### 2.5 Formulação dos caudais mássicos nas faces das células

Os fluxos de massa ( $F_f$ ) que aparecem nos coeficientes  $a_F^C$ ,  $a_P^C$  e  $F_f$  das secções anteriores têm de ser calculados com as velocidades nas faces das células ( $\tilde{u}_{i,f}$ ), as quais, por seu lado, devem ser relacionadas com as velocidades nos centros dos volumes de controlo. Estas velocidades nas células, que têm origem na equação da continuidade e que são representadas por  $\tilde{u}_i$ , não devem ser confundidas com as velocidades nas faces que surgem nos termos convectivos da equação de quantidade de movimento e que são representadas por  $\hat{u}_i$ .

A equação de conservação da massa é necessária para o cálculo do campo de pressões, após a obtenção de um campo de velocidades por resolução da equação de conservação de quantidade de movimento. Esta sequência de procedimentos é tradicionalmente realizada por recurso a malhas desfasadas para as componentes do vector velocidade e pressão (Patankar, 1980). Neste procedimento clássico as malhas onde se armazenam as componentes de velocidade estão desfasadas de meia célula, na respectiva direcção, em relação à malha onde é feito o cálculo da pressão e das restantes quantidades escalares. Desta forma, garante-se um acoplamento total entre os campos de velocidade e de pressão ao mesmo tempo que se assegura a conservação da massa. A desvantagem deste procedimento está na limitação geométrica que este método impõe, pois obriga a usar malhas ortogonais para representar geometrias complexas, o que é extremamente difícil de conseguir na maioria das situações.

Ao utilizar-se uma malha única não-ortogonal para fácil mapeamento de geometrias complexas, o acoplamento entre os campos de pressão e velocidade requer a utilização de um método especial de interpolação de velocidades que foi desenvolvido por Rhie e Chow (1983). Nos nossos códigos para escoamentos de fluidos viscoelásticos adopta-se esse esquema e além disso adopta-se também a formulação de Issa e Oliveira (1994) para o algoritmo de marcha no tempo que aqui serve, sobretudo para subrelaxação do método de cálculo em regime permanente, como se explica em Versteeg e Malalasekera (1995). Considere-se então, para simplificar

$$H(u_{i,F}) \equiv \sum_F a_{F,i} u_{i,F} \quad (A39)$$

e coloque-se o termo da pressão fora do termo fonte de forma que  $S_{u_i}$  passa a ser escrito como  $S_{u_i} = -\sum_{l=1}^3 B_{li}^P [\Delta p]_l^P + S'_{u_i}$ . O termo  $S'_{u_i}$  inclui as restantes contribuições para o termo fonte já discutidas (ver Eq. (A29)).

A equação de conservação de quantidade de movimento nos nós P e F pode agora ser escrita como

$$a_P u_{i,P} = H(u_{i,P}) - \sum_{l=1}^3 B_{li}^P [\Delta p]_l^P + S'_{u_i} + \left( \frac{\rho V}{\delta t} \right)_P u_{i,P}^o \quad (\text{A40})$$

$$a_F u_{i,F} = H_F(u_{i,F}) - \sum_{l=1}^3 B_{li}^F [\Delta p]_l^F + S'_{u_i,F} + \left( \frac{\rho V}{\delta t} \right)_F u_{i,F}^o \quad (\text{A41})$$

onde as diferenças de pressão são calculadas no centro das células computacionais (i.e.  $[\Delta p]_l^P = p^{l+} - p^{l-}$ , c.f. Fig. A2) pelo que será necessário estimar os valores da pressão nas respectivas faces. Contudo, antes de avançar convém definir previamente algumas quantidades geométricas.

Considere-se a Figura A4 onde se mostram as posições de algumas células (letras maiúsculas) e as respectivas faces (letras minúsculas). A Figura A4 mostra ainda a nomenclatura usada para quantificar a distância entre faces.

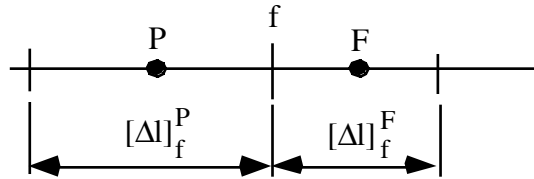


Figura A4- Representação esquemática das dimensões associadas à célula P e sua vizinha genérica F.

De acordo com a Figura A4 define-se geralmente os factores de interpolação linear como

$$L_f^+ = \frac{[\Delta l]_f^P}{[\Delta l]_f^P + [\Delta l]_f^F}, \quad L_f^- = 1 - L_f^+ \quad (\text{A42})$$

onde  $\Delta l$  é o comprimento da célula na direcção  $f$ . Para calcular  $\phi$  na face  $f$  por interpolação linear entre as células F e P, faz-se  $\phi_f = L_f^+ \phi_F + L_f^- \phi_P$ .

De acordo com o método especial de interpolação de Rhie e Chow, a velocidade na face da célula  $\tilde{u}_F$  é calculada através de uma interpolação linear das equações de quantidade de movimento (A40) e (A41), com excepção do termo do gradiente (diferença) de pressão que é determinado como no método original de Patankar em que se usavam malhas desfasadas. Esta ideia executa-se, como em Issa e Oliveira (1994), escrevendo

$$\bar{a}_P \tilde{u}_{i,f} = \overline{H(u_i)} + \overline{S_{u_i}} - B_{fi}^f [\Delta p]_f^f - \sum_{l \neq f} \overline{B_{li} [\Delta p]_l} + \left( \frac{\rho V}{\delta t} \right)_P \tilde{u}_{i,f}^o \quad (\text{A43})$$

onde a barra superior significa média aritmética das quantidades pertencentes aos nós F e P devidamente pesadas pelos tamanhos das células ( $\bar{u}_f = L_f^- u_P + L_f^+ u_F$ ), o que é de facto

equivalente a uma interpolação linear. De notar que a diferença de pressões ao longo da direcção  $l=f$  é agora calculada centrada na face da célula (i.e.  $[\Delta p]_f^f = p_F - p_P$ ), enquanto que as pressões nas faces da célula, que pertencem a diferenças de pressão onde  $l \neq f$ , são calculadas por interpolação linear de valores nodais de pressão. Desta forma, a velocidade na face  $f$  está directamente ligada a pressões vizinhas na mesma direcção, ie calculadas em células consecutivas na mesma direcção da mesma maneira que no arranjo desfasado de malhas.

Subtraindo a Eq. (A43) da equação que resulta da interpolação linear para a face  $f$  das equações de conservação da quantidade de movimento (A40) e (A41) para assim calcular  $\overline{a_P u_{i,P}}$ , chega-se à seguinte equação final para a velocidade na face:

$$\tilde{u}_{i,f} = \frac{\overline{a_P u_{i,P}} + B_{fi}^P [\Delta p]_f^P - B_{fi}^f [\Delta p]_f^f + \left( \frac{\rho V}{\delta t} \right)_P \tilde{u}_{i,f}^o - \left( \frac{\rho V}{\delta t} u_i^o \right)_P}{\overline{a_P}} \quad (\text{A44})$$

que tem a vantagem de evitar a necessidade de se calcular e armazenar o operador  $H$ . Esta expressão substitui-se na Eq. (A12) para se calcularem os fluxos convectivos sem a necessidade de se armazenarem os vários componentes da velocidade nas faces nos instantes de tempo actual e anterior, o que novamente traz benefícios em necessidades de memória.

## 2.6 Formulação das Tensões nas faces das células

Na equação de conservação da quantidade de movimento é também necessário calcular tensões nas faces das células a partir dos valores das tensões nos centros das células e por forma a garantir acoplamento entre os campos de tensão e velocidade, uma questão semelhante à que ocorre entre a pressão e a velocidade para se evitar o aparecimento de oscilações nos campos de tensões. Referimo-nos à tensão  $\tilde{\tau}_{ij,f}$  da Eq. (A23). Se se utilizar uma interpolação linear simples dos valores nodais de tensão para determinar os valores das tensões nas faces pode ocorrer um problema de acoplamento entre as tensões e as velocidades, mesmo que o fluido seja newtoniano, como se ilustra no exemplo seguinte.

### Exemplo

Considere-se a malha uniformemente espaçada da Fig. A5 e a forma discretizada do termo  $\partial \tau_{xy} / \partial y$  em coordenadas cartesianas que é dado por

$$\left( \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right)_P = \frac{\tau_{xy,n} - \tau_{xy,s}}{\Delta y} = \frac{1}{\Delta y} \left[ \frac{\tau_{xy,N} + \tau_{xy,P}}{2} - \frac{\tau_{xy,P} + \tau_{xy,S}}{2} \right] = \frac{1}{2\Delta y} [\tau_{xy,N} - \tau_{xy,S}] \quad (\text{A45})$$

Para simplificar, assuma-se também que o escoamento está completamente desenvolvido, que o fluido é newtoniano e que só  $u_x$  contribui para a tensão de corte newtoniana ( $\tau_{xy} = \eta \partial u_x / \partial y$ ). Então, a tensão na Eq. (A45) pode ser expressa em termos dos valores nodais de velocidade  $u_x$ . Considerando que  $\tau_{xy,N}$  depende de  $u_{x,nm}$  e  $u_{x,n}$ , e que estas se obtém a partir das velocidades nodais adjacentes, chegamos à Eq. (A46), onde verificamos que um padrão oscilante de velocidades pode resultar no correcto gradiente de tensões.

$$\left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}\right)_P = \frac{\eta}{4\Delta y^2} [u_{x,NN} - 2u_{x,P} + u_{x,SS}] \quad (\text{A46})$$

Em vez deste termo, na equação de Navier-Stokes aparece já o segundo gradiente da velocidade, pois substituiu-se a equação constitutiva newtoniana. O termo correspondente é dado por  $\eta \partial^2 u_x / \partial y^2$ , que se discretiza, usando diferenças centradas, em:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}\right)_P &= \eta \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} = \frac{\eta}{\Delta y} \left[ \left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)_n - \left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)_s \right] = \frac{\eta}{\Delta y} \left[ \frac{u_{x,N} - u_{x,P}}{\Delta y} - \frac{u_{x,P} - u_{x,S}}{\Delta y} \right] = \\ &= \frac{\eta}{\Delta y^2} [u_{x,N} - 2u_{x,P} + u_{x,S}] \end{aligned} \quad (\text{A47})$$

um resultado que é bem conhecido do CFD clássico. Agora há um bom acoplamento entre os campos de velocidade e tensão.

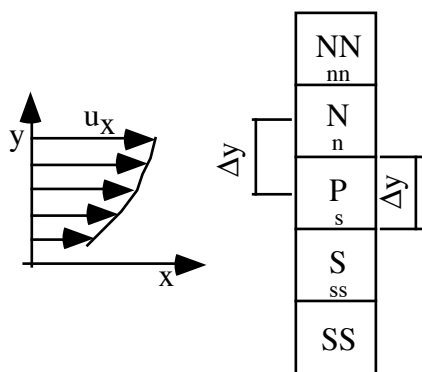


Figura A5- Malha uniforme representando uma célula P e os seus vizinhos na direcção norte-sul. Reproduzido de Oliveira et al (1998)

Em conclusão, enquanto que no cálculo newtoniano tradicional há um forte acoplamento entre a tensão no nó P (através do seu gradiente) e as velocidades nos nós vizinhos próximos (Eq. A44), na actual formulação da equação de conservação de quantidade de movimento, se o gradiente de tensão fôr obtido por interpolação linear (Eq. A43), há a possibilidade de um padrão irrealístico de velocidade oscilatória conduzir a um campo de tensão correcto, já que o gradiente de tensão em P só está relacionado com as velocidades em P e nos nós vizinhos mais afastados.

Para resolver este problema de desacoplamento, as tensões nas faces  $\tilde{\tau}_{ij,f}$ , como na Eq. (A45), não devem ser obtidas exclusivamente por interpolação linear das tensões nodais, mas devem ser calculadas em alternativa com o novo método de interpolação desenvolvido por Oliveira et al (1998) e melhorado por Oliveira e Pinho (1999a). A equação algébrica da tensão (Eq. A31) pode escrever-se como:

$$a_P^{\tau} \tau_{ij,P} = H(\tau_{ij}) + \sum_l^3 \left( b_{li} [\Delta u_j]_l^P + b_{lj} [\Delta u_i]_l^P - \frac{2}{3} \left( \sum_k \eta B_{lk} [\Delta u_k]_l^P \right) \delta_{ij} \right) + S'_{\tau_{ij}} \quad (\text{A48})$$

onde o operador  $H$  se define como anteriormente, na Eq. (A39) mas em termos de  $\tau_{ij}$ , e os termos proporcionais às diferenças de velocidade devem aparecer explicitamente por recurso à definição

$$b_{li} = \eta B_{li} + \lambda \sum_k^3 B_{lk} \tau_{ik} \quad (\text{A49})$$

De seguida, divide-se a equação (A49) por  $a_P^\tau$  passando ela a escrever-se como

$$\tau_{ij,P} = H'(\tau_{ij}) + \sum_l^3 \left( b'_{li} [\Delta u_j]_l^P + b'_{lj} [\Delta u_i]_l^P \right) + S'_{\tau_{ij}} \quad (\text{A50})$$

onde o apósstrofe indica que a quantidade está dividida pelo coeficiente  $a_P^\tau$  (por exemplo,  $H'(\tau_{ij}) \equiv H(\tau_{ij})/a_P^\tau$  e  $b'_{li} = b_{li}/a_P^\tau$ ). Identicamente, escreve-se uma equação semelhante para a célula vizinha F. No termo fonte da Eq. (A50) passou a estar incluído o penúltimo termo da Eq. (A48).

Na equação da conservação da quantidade de movimento sempre que uma tensão  $\tau_{ij}$  seja necessária numa face  $f$  de uma célula, ela deve ser obtida como resultando de uma interpolação linear das equações de tensão para a célula P (Eq. A50) e para a sua célula vizinha F que lhe é consecutiva através da face  $f$ , excepto no caso das diferenças de velocidade ao longo da direcção da face, que são calculadas directamente. Desta maneira, o espírito da interpolação de Rhie and Chow (1983) para as velocidades nas faces é mantido agora para as tensões, garantindo uma boa ligação entre a tensão na face e os valores da velocidade nos nós adjacentes a uma dada face  $f$ . Este procedimento é equivalente a definir as tensões nas faces dos volumes de controlo da seguinte forma (compare-se com a Eq. A43):

$$\tilde{\tau}_{ij,f} = \overline{H'(\tau_{ij})} + \overline{b'_{ff}} [\Delta u_i]_f^f + \overline{b'_{fi}} [\Delta u_j]_f^f + \left( \overline{\sum_{l \neq f}^2 b'_{lj} [\Delta u_i]_l^P} + \overline{\sum_{l \neq f}^2 b'_{li} [\Delta u_j]_l^P} \right) + \overline{S'_{\tau_{ij}}} \quad (\text{A51})$$

onde os termos proporcionais às diferenças de velocidade que não estão alinhadas com a direcção da face, i.e.,  $[\Delta u_i]_{l \neq f}^P$  são calculadas por interpolação linear, como o termo fonte  $S'_{\tau_{ij}}$  e o termo envolvendo o operador  $H'$ . Em vez de se utilizar a Eq. (A51) para calcular a tensão na face de uma célula, e para poupar recursos computacionais, é preferível e mais eficiente utilizar um método incremental em que a tensão na face da célula da Eq. (A51) seja subtraída da tensão que resulta da interpolação linear das tensões em P e F dadas pela Eq. (A50) aplicada a ambos os nós P e F, de forma idêntica ao que foi efectuado com as velocidades. Desta subtracção resulta uma expressão para calcular  $\tilde{\tau}_{ij,f}$  que evita o armazenamento de várias quantidades.

$$\tilde{\tau}_{ij,f} = \frac{\overline{a_P^\tau \tau_{ij,P}}}{\overline{a_P^\tau}} + \overline{b'_{ff}} [\Delta u_i]_f^f + \overline{b'_{fi}} [\Delta u_j]_f^f - \left( \overline{b'_{ff}} [\Delta u_i]_f^f + \overline{b'_{fi}} [\Delta u_j]_f^f \right) - \frac{2}{3} \sum_k \eta_P \overline{B'_{fk}} [\Delta u_k]_f^f \delta_{ij} + \frac{2}{3} \sum_k \eta_P \overline{B'_{fk}} [\Delta u_k]_f^f \delta_{ij} \quad (\text{A52})$$

onde agora

$$\bar{b}'_{fi} = \frac{\eta_p B_{fi} + \lambda \sum_k^3 B_{fk} \bar{\tau}_{ik}}{V_f (a_p^\tau / V_P)} \quad \text{e} \quad \bar{B}'_{fi} \equiv \frac{B_{fi}}{V_f (a_p^\tau / V_P)} \quad (\text{A53})$$

Nesta equação  $V_P$  representa o volume da célula centrada em P e  $V_f$  o volume da célula centrada na face  $f$ .

É óbvio da equação (A52) que a tensão na face  $f$  ( $\tilde{\tau}_{ij,f}$ ) está agora directamente acoplada às velocidades vizinhas através dos termos tipo  $[\Delta u_i]_f^f \equiv u_{i,F} - u_{i,P}$ ; de facto, a expressão (A52) aplicada ao exemplo anterior conduz directamente à boa solução da Eq. (A47) e não à solução desacoplada da Eq. (A46), demonstrando assim que o problema do desacoplamento tensão-velocidade fica bem resolvido. Segundo Ferziger and Perić 2002) a aproximação associada à Eq. (A52) é equivalente a um termo na quarta derivada da tensão, pelo que este método de cálculo de tensões nas faces não contribui para difusão artificial.

### 2.7- Algoritmo de resolução

Como em qualquer procedimento de cálculo que se baseia na implementação de uma correção de velocidade (eg. Patankar and Spalding, 1972), a pressão é calculada indirectamente a partir da restrição imposta pela conservação da massa, uma vez que a equação da quantidade de movimento, que contém um termo no gradiente de pressão, é usada para se calcular o campo de velocidades. O procedimento SIMPLE desenvolvido por Patankar e Spalding tem alguns problemas de convergência, que foram detectados na década de setenta e que se devem a uma excessiva correção de pressão imposta pelas simplificações associadas a essa equação, nomeadamente a assunção de correções de velocidade nulas, em todas as células vizinhas à célula P. Esse defeito resulta na necessidade de se impôr subrelaxação para permitir a convergência do método de cálculo.

Várias alternativas ao algoritmo SIMPLE foram desenvolvidas ao longo dos anos, mas elas não serão aqui exploradas. Interessa-nos em particular o algoritmo SIMPLEC, desenvolvido por Van Doormal e Raithby (1984), que é aqui adoptado e estendido para tomar em consideração a necessidade de se calcular o campo das tensões. Além disso, este algoritmo foi também modificado por Issa e Oliveira (1994) para incorporar a marcha no tempo, i.e., foi adaptado à resolução de problemas em regime transitórios e é essa variante que se usa nesta lição. A vantagem desta variante do SIMPLEC é que ela pode ser utilizada para calcular escoamentos em regime permanente, assumindo o termo transiente das equações o papel de subrelaxação, como está explicado por exemplo em Versteeg e Malalasekera (1994). Foi por esta razão que desde o início se escreveram as equações na sua forma completa, incluindo o termo dependente do tempo.

Como a preocupação principal do algoritmo SIMPLEC é o cálculo da pressão a partir da equação da continuidade, as modificações do algoritmo devido à nova equação para o campo de

tensões são mínimas. Dois novos passos de cálculo são introduzidos no plano sequencial do algoritmo que tomam em linha de conta a resolução da equação das tensões. Assim, a nova forma do algoritmo de cálculo é a seguinte:

- O campo de tensões resulta da solução de seis equações constitutivas implícitas, o que se faz dentro de cada iteração global antes de se resolverem as equações de conservação da quantidade do movimento;
- Uma vez conhecidas as tensões, as equações da quantidade do movimento são resolvidas implicitamente para cada componente do vector velocidade. No termo fonte desta equação, que contém o divergente da tensão, utilizam-se as tensões calculadas no passo anterior. É importante que esse termo (Eq. A23) seja calculado, usando o método especial de interpolação definido na Eq. (A52).

De seguida faz-se uma descrição mais completa de todo o algoritmo incluindo-se os novos passos que introduzem o cálculo das tensões. Para cada avanço no tempo igual a  $\delta t$ , três passos são necessários. Primeiro, as seis tensões devem ser obtidas sequencialmente a partir das equações implícitas na tensão (Eq. A31, com o termo contendo  $\tau_{ij,P}^0$  incluído no termo fonte):

$$a_P^\tau \tau_{ij,P}^* - \sum_F a_F^\tau \tau_{ij,F}^* = S_{\tau_{ij}} \quad (A54)$$

Nesta equação, os coeficientes e o termo fonte baseiam-se nos valores de velocidade e tensão obtidos no instante de tempo anterior, e  $\tau_{ij}^*$  representa o valor da tensão  $\tau_{ij}$  no actual instante de tempo. A Eq. (A54) representa um sistema de equações lineares a ser resolvido em ordem a  $\tau_{ij}^*$ .

No segundo passo do algoritmo as equações de conservação de quantidade do movimento (Eq. A23) são resolvidas implicitamente para cada componente de velocidade:

$$\left( \sum_F a_F + S_P + \frac{\rho V_P}{\delta t} \right) u_{i,P}^* - \sum_F a_F u_{i,F}^* = \sum_l^3 B_{li} [\Delta p^o]_l^P + S'_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^0 \quad (A55)$$

onde o termo do gradiente de pressão é calculado com base nos valores de pressão no instante de tempo anterior. Na Eq. (A55) este termo foi isolado para o exterior do termo fonte por conveniência. A parcela do termo fonte relacionada com a tensão (Eq. A23) baseia-se nos novos valores da tensão nas faces  $\tilde{\tau}_{ij}^{*,J}$ , calculados a partir da Eq. (A52), o que requer os coeficientes centrais da equação da tensão ( $a_P^\tau$ ). É exactamente por isto que é necessário resolver a equação constitutiva reológica antes de se resolver a equação de conservação de quantidade de movimento.

Regra geral, os componentes do vector velocidade, representados por um asterisco ( $u_i^*$ ), não satisfazem a equação da continuidade. O terceiro passo do algoritmo envolve uma correcção da velocidade  $u_i^*$ , por forma a que a velocidade corrigida  $u_i^{**}$  satisfaça quer a equação da conservação da massa quer a seguinte forma da equação de conservação da quantidade de movimento:

$$\left( \sum_F a_F + S_P \right) u_{i,P}^* + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^{**} = \sum_F a_F u_{i,F}^* - \sum_l B_{li} [\Delta p^*]_l^P + S'_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^0 \quad (A56)$$



Nesta Eq. (A56) só o termo transitório foi actualizado para o novo instante de tempo  $u_i^{**}$ , o que é uma característica do algoritmo SIMPLEC (Issa e Oliveira, 1994). Subtraindo esta equação da Eq. (A55) e forçando  $u_i^{**}$  a satisfazer a equação da continuidade ( $\sum_f F_f^{**} = 0$ , c.f.

Eqs. A12 e A13) chega-se às equações das correcções de pressão (Eq. A57 onde  $p' \equiv p^* - p^0$ ) e velocidade (Eq. A58) :

$$a_P^p p_P' = \sum_F a_F^p p_F' - \sum_f F_f^* \quad (a_P^p = \sum_F a_F^p ; a_F^p = \frac{\rho B_f^2}{(\rho V / \delta t)_f}) \quad (A57)$$

$$\frac{\rho V_P}{\delta t} (u_i^{**} - u_i^*)_P = -\sum_l B_{li}^P [\Delta p']_l^P \quad (A58)$$

cuja resolução completa o algoritmo. Em resumo, a sequência de resolução de equações no interior de um passo no tempo é: (A54), (A55), (A57) e (A58).

Os vários sistemas de equações algébricas são resolvidos por métodos adequados à resolução iterativa de equações: para a pressão, usa-se um método simétrico, enquanto que para as restantes variáveis se recorre ao método do gradiente conjugado (Meijerink e Van der Vorst, 1977). Em qualquer dos casos, as matrizes são pré-condicionadas por uma decomposição incompleta do tipo LU.

## 2.8- Cálculos em regime transitório

As equações de conservação e constitutiva possuem um termo de variação no tempo que foi até agora tratado por um método de discretização implícito de 1ª ordem que não é adequado para o cálculo de escoamentos em regime transitório com precisão. Contudo, enquanto processo para subrelaxar os cálculos em regime permanente, o recurso a um esquema de 1ª ordem no tempo é perfeitamente adequado.

Para calcular com mais precisão escoamentos dependentes do tempo é necessário usar pelo menos um esquema de discretização de segunda ordem e aqui vamos descrever sucintamente o método de segunda ordem de diferenças anteriores (2BS do inglês “Second-order Backward Differences”) que foi desenvolvido por Oliveira (2001a) para cálculos com fluidos viscoelásticos. Neste método, a discretização no tempo do termo  $\partial\phi / \partial t$  é feito de acordo com

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} \approx \frac{(1 + \kappa)\phi^{n+1} - (1 + 2\kappa)\phi^n + \kappa\phi^{n-1}}{\delta t} \quad (A59)$$

onde  $\kappa$  tem de tomar o valor 0.5 e os índices superiores indicam o instante de tempo. A vantagem do método 2BS é que a sua incorporação no programa de cálculo requer um número mínimo de alterações relativamente ao método existente, o que não seria o caso se se optasse pelo método de Crank-Nicholson, também ele de segunda ordem. No entanto, o método 2BS requer alterações profundas no cálculo dos fluxos das faces se se pretender que estes sejam independentes do valor do  $\delta t$  utilizado no cálculo. Se essa alteração não for efectuada, o erro introduzido é contudo bastante pequeno podendo ser considerado um erro de truncatura no tempo. Os resultados dos cálculos efectuados por Oliveira (2001a), alguns dos quais são

apresentados nesta lição (ver secção 7.3.3), são uma boa demonstração da precisão dos resultados obtidos por este método.

No que se segue, assume-se que é conhecida a solução no instante  $t^n$  (e obviamente  $t^{n-1}$ ), sendo o objectivo avançar para a solução no instante  $t^{n+1}$ . Pretende-se também minimizar as alterações ao código existente e descrito até agora, onde estava implementado o método implícito de Euler (de 1ª ordem).

O cálculo num passo do tempo faz-se em duas partes: na primeira parte obtêm-se os campos de velocidade e pressão que satisfazem a conservação de quantidade de movimento e de massa. Uma vez conhecido o campo de velocidades é efectuado o cálculo do novo campo de tensões. O método de cálculo que se descreve de seguida acaba por ser de primeira ordem, contrariamente ao pretendido inicialmente, porque ao minimizar as alterações relativamente ao método disponível anteriormente se procederam a simplificações que baixaram a ordem do método. Contudo é possível obter o resultado final com a precisão pretendida de segunda ordem, se se iterar várias vezes o conjunto destas equações e actualizando os campos de velocidade, pressão e tensão ( $u^{n+1}$ ,  $p^{n+1}$ ,  $\tau^{n+1}$ ) no final de cada iteração interna. Nas equações que se seguem aparecerão quantidades identificadas com um e dois asteriscos (\* e \*\*), que designam níveis de cálculo intermédio dentro de uma iteração no tempo.

Começamos por resolver a seguinte forma da equação de conservação de quantidade de movimento

$$\left[ a_0 + (1+\kappa) \frac{\rho V_P}{\delta t} \right] u_{i,P}^{**} - \sum_F a_F u_{i,F}^{**} = -\nabla p^* + \nabla \cdot \tau_{ij}^* + S'_u(u_i^*) + \frac{\rho V_P}{\delta t} [(1+2\kappa)u_i^n - \kappa u_i^{n-1}] \quad (\text{A60})$$

onde  $V$  é o volume,  $S'_u$  representa vários termos fonte e  $a_0 \equiv \sum_F a_F$ . A equação (A60) é resolvida para se obter um campo intermédio de velocidade  $u^{**}$ . Note-se que a pressão e a tensão ( $p^*$  e  $\tau^*$ ) são tratadas de forma semi-implícita e explícita, respectivamente e que elas são inicialmente iguais aos valores da iteração anterior ( $p^n$  e  $\tau^n$ ).

A pressão é dita semi-implícita porque ao pretendermos que o campo final de velocidades  $u_i^{n+1}$  obedeça à equação de conservação da massa (A61)

$$\nabla \cdot u_i^{n+1} = 0 \quad (\text{A61})$$

iremos determinar correcções de pressão.

Para se determinar o campo correcto de velocidades, é necessário conhecer a correcção de velocidades  $u^{n+1} = u^{**} + u'$  bem como o campo correcto de pressões que pode ser determinado por intermédio de

$$p^{n+1} = p^{**} + p' \quad (\text{A62})$$

Para determinar a correcção de pressão  $p'$  é agora necessário manipular a equação da continuidade. Para diminuir as alterações ao algoritmo, comecemos por considerar a seguinte modificação da equação da quantidade de movimento (A60)

$$a_0 u_{i,P}^{**} + (1 + \kappa) \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^{n+1} - \sum_F a_F u_{i,F}^{**} = -\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot \tau_{ij}^* + S'_u(u_i^*) + \frac{\rho V_P}{\delta t} [(1 + 2\kappa) u_i^n - \kappa u_i^{n-1}] \quad (\text{A63})$$

e subtraia-se esta equação da Eq. (A60)

$$(1 + \kappa) \frac{\rho V_P}{\delta t} (u_{i,P}^{n+1} - u_{i,P}^{**}) = -\nabla (p^{n+1} - p^*) = -\nabla p' \quad (\text{A64})$$

Esta é a equação que define a correcção de velocidade  $u'$  pois daqui advém que

$$u_{i,P}^{n+1} = u_{i,P}^{**} - \frac{1}{(1 + \kappa)(\rho V_P / \delta t)} \nabla p' \quad (\text{A65})$$

Finalmente, para se determinar  $p'$  é necessário impor agora a conservação da massa e podemos para isso considerar a equação (A64). Aplicando a esta equação o divergente e considerando válida a Eq. (A61) concluímos que

$$\nabla \cdot u_{i,P}^{**} = \nabla \cdot \frac{1}{(1 + \kappa)(\rho V_P / \delta t)} \nabla p' \quad (\text{A66})$$

Como conhecemos o campo intermédio  $u^{**}$  da resolução da Eq. (A60), a Eq. (A66) pode ser resolvida em ordem a  $p'$ , utilizando um método de gradiente conjugado simétrico, como explicado em Oliveira et al (1998). Em resumo, o cálculo de  $u_i^{n+1}$  e  $p^{n+1}$  obtém-se pela seguinte sequência de resolução de equações: (A60), (A66), (A62) e (A65). De seguida analisa-se o cálculo da nova tensão  $\tau_{ij}^{n+1}$ .

A equação constitutiva também deve ser reescrita tendo em conta a nova forma de discretização no tempo do método 2BS. A Eq. (A67) está escrita na forma diferencial, mas identifica já como cada termo vai depender do tempo.

$$\tau_{ij}^{n+1} + \frac{\lambda}{f(\tau_{kk}^*)} \left[ \frac{(1 + \kappa) \tau_{ij}^{n+1} - (1 + 2\kappa) \tau_{ij}^n + \kappa \tau_{ij}^{n-1}}{\delta t} + \nabla \cdot u^{n+1} \tau^{n+1} \right] = \eta_P \left( \nabla u_{ij}^{n+1} + (\nabla u_{ij}^{n+1})^T \right) + \frac{\lambda}{f(\tau_{kk}^*)} \left( \tau^* \cdot \nabla u^{n+1} + (\nabla u^{n+1})^T \cdot \tau^* \right) \quad (\text{A67})$$

Na equação (A67)  $f(\tau_{kk}^*)$  designa uma função dependente do campo de tensões que aparece nalgumas equações constitutivas não-lineares (por exemplo nos modelos FENE-P, FENE-CR e PTT entre outros) e que aqui é mantido por generalidade e para se perceber qual o valor de  $\tau$  que é aí utilizado. O termo convectivo da tensão  $(\nabla \cdot u^{n+1} \tau^{n+1})$  é resolvido através do método CUBISTA de alta resolução, pelo que a sua discretização resulta nos seguintes termos

$$\frac{\lambda}{f(\tau^*)} \nabla \cdot u^{n+1} \tau^{n+1} \approx a_0^\tau \tau_{ij,P}^{n+1} - \sum_F a_F^\tau \tau_{ij,F}^{n+1} + S_{\tau-EAR} \quad (\text{A68})$$

que contém vários termos correctivos encaminhados para o termo fonte ( $S_{\tau-EAR}$ ). Os coeficientes  $a_F^\tau$  e  $a_0^\tau$ , contêm fluxos convectivos calculados pelo esquema de montante como foi explicado nas Secções 2.3 e 2.4. Em resumo, a forma discretizada da Eq. (A67) é escrita como

$$\left[ V_P + a_0^\tau + (1 + \kappa) \frac{\lambda V_P}{f(\tau^*) \delta t} \right] \tau_P^{n+1} - \sum_F a_F^\tau \tau_F^{n+1} = S_\tau(u^{n+1}, \tau^*) + S_{\tau-EAR} + \frac{\lambda V_P}{f(\tau^*) \delta t} [(1 + 2\kappa) \tau_P^n - \kappa \tau_P^{n-1}] \quad (A69)$$

que é a equação cuja resolução quantifica  $\tau_{ij}^{n+1}$ . Nesta equação o termo  $S_\tau(u^{n+1}, \tau^*)$  engloba os termos do lado direito da equação (A67) que dependem de  $u^{n+1}$  e  $\tau^*$  e o termo fonte  $S_{\tau-EAR}$  proveniente do esquema de alta resolução também depende de quantidades  $u^{n+1}$  e  $\tau^*$ . Note-se que, na primeira vez que se calcula a equação (A69),  $\tau_{ij}^* = \tau_{ij}^n$ .

Em resumo, depois de se calcularem  $u_i^{n+1}$  e  $p^{n+1}$  pela sequência de equações (A60), (A66), (A62) e (A65), basta resolver a Eq. (A69) para se obter  $\tau_{ij}^{n+1}$ . Contudo, como mencionado atrás, o algoritmo apresentado ainda é de primeira ordem por três razões:

- 1) no problema acoplado de resolução das equações de conservação da quantidade de movimento e da massa, a equação de quantidade de movimento (Eq. A63) foi modificada (por exemplo, alguns  $u^{n+1}$  foram transformados em  $u^{**}$ ), pois só assim se obteve uma equação na correcção de pressão que não é muito complicada e que é equivalente a desprezar efeitos de convecção/ difusão durante a correcção de pressão;
- 2) no tratamento da velocidade realizou-se um desacoplamento total entre velocidade e tensão, já que o cálculo de  $u^{n+1}$  (Eq. A63) se baseia em  $\tau^*$ , que de facto é igual a  $\tau^n$ , em vez de  $\tau^{n+1}$ ;
- 3) Finalmente, na equação constitutiva as tensões ligadas à derivada convectiva são calculadas com base em  $\tau^* = \tau^n$  e não com base em  $\tau^{n+1}$ . Este problema é menor pois é independente do problema da velocidade e pressão e pode eliminar-se bastando para o efeito iterar duas vezes a equação da tensão dentro de cada iteração global.

Por forma a resolver estas limitações e a transformar o algoritmo num procedimento de segunda ordem no tempo, basta repetir várias vezes a sequência de cálculos formada pelas equações (A60), (A66), (A62), (A65) e (A69) no interior de cada salto no tempo, sendo que os valores dos campos  $u^*$  e  $\tau^*$  a usar na nova iteração interna passam a ser os valores  $(u^{n+1}, \tau^{n+1})$ , obtidos na iteração interna anterior que pertence ao mesmo salto no tempo (mesma iteração global). Em cada iteração global (salto no tempo) efectua-se assim várias iterações do conjunto de equações até se cumprir um determinado critério de convergência. Oliveira (2001a) menciona que a imposição de um critério de convergência de 1% baseado no resíduo  $L_1$  das equações significa entre 3 a 5 iterações internas do conjunto de equações dentro de cada iteração global, excepto no início do cálculo. Note-se ainda que neste procedimento, em cada iteração interior, os coeficientes e termos fonte devem ser actualizados por forma a tornar o algoritmo o mais implícito possível e assim dar-lhe a característica de 2ª ordem no tempo. É possível que não seja necessário actualizar estes coeficientes e termos fonte em cada iteração interna para se

manter a precisão do cálculo, o que traria óbvias vantagens computacionais, mas este é um assunto que ainda necessita de investigação.

Este algoritmo tem também a vantagem de dispensar a necessidade de usar sub-relaxação dentro de cada iteração interna no tempo, em contraste com outros métodos existentes para cálculo transitório com fluidos newtonianos (ver Oliveira, 2001a).

### 2.9- Condições de fronteira

Condições de fronteira são estabelecidas no código para as componentes do vector velocidade nas entradas, saídas, planos de simetria e paredes. As equações da tensão são hiperbólicas e por isso condições de fronteira só são necessárias na entrada. Nas paredes e planos de simetria a resolução da equação constitutiva reológica, ou de uma sua forma simplificada, providencia as adequadas condições de fronteira. Como o escoamento é incompressível, o valor absoluto da pressão é irrelevante e só a sua variação interessa. Assim, a pressão é definida num determinado ponto, por exemplo à entrada, e todo o campo de pressões é inicializado a zero. A correcção do campo de pressões em cada iteração assegura o cumprimento da conservação da massa, de acordo com o algoritmo descrito na Secção 2.7.

No cálculo de escoamentos viscoelásticos geralmente o domínio de cálculo extravasa a região de interesse e impõe-se à entrada e à saída condições de escoamento desenvolvido. De seguida descrevem-se as várias condições de fronteira mais detalhadamente.

*Entrada:* No plano de entrada, as velocidades e tensões são pré-definidas geralmente de acordo com uma solução teórica para escoamento desenvolvido. Quando não é conhecida a solução analítica para a equação constitutiva imposta recomenda-se como solução alternativa a imposição das condições de entrada correspondentes a escoamento desenvolvido de um modelo semelhante.

*Saída:* A saída está normalmente localizada longe da região de interesse, onde o escoamento já é localmente parabólico. Desta forma, os gradientes longitudinais de tensão e velocidade são nulos o que se define do ponto de vista numérico, fazendo com que os valores nas faces de saída sejam iguais aos mesmos valores nos nós da respectiva célula a montante (ou vice-versa). Relativamente ao gradiente de pressão, este também é constante, o que equivale a efectuar uma extrapolação linear da pressão na face de saída a partir dos dois nós imediatamente a montante. Finalmente, é necessário corrigir as velocidades nas fronteiras de saída por forma a garantir a conservação da massa global.

*Planos de Simetria:* Através de um plano de simetria os fluxos convectivos e difusivos anulam-se. Estas duas condições aplicam-se a todas as grandezas usando regras de reflexão adequadas e o recurso a células simétricas fictícias, como se ilustra na Figura A6. Deste

exercício, resultam várias condições de fronteira (ver Oliveira, 1996), que se apresentam de seguida

No plano de simetria a velocidade normal é nula e só existe componente tangencial de velocidade. Em termos matemáticos teremos então na face  $u_{i,f}^n = 0$  pelo que  $u_{i,f}^\tau = u_{i,f}$  (os índices superiores  $n$  e  $\tau$  designam componente normal e tangencial, respectivamente). Como a célula fictícia  $P'$  é simétrica da célula  $P$ , isto significa que o cálculo dos componentes de velocidade  $u_i$  na fronteira  $f(u_{i,f})$ , obtida por interpolação linear a partir das células adjacentes ao plano de simetria, resulta em

$$u_{i,f} = u_{i,f}^\tau = u_{i,P} - u_P^n \cdot n_i \quad \text{e} \quad u_P^n = \sum_{j=1}^3 u_{j,P} n_j \quad (\text{A70})$$

onde  $u_P^n$  é o componente do vector velocidade normal ao plano de simetria e  $n_i$  é o componente  $i$  do vector unitário que é normal ao plano de simetria.  $n_j$  e  $n_k$  são os vectores unitários do sistema de coordenadas cartesiano)

Para uma qualquer quantidade escalar, como a pressão, a regra de reflexão conduz a

$$p_f = p_P \quad (\text{A71})$$

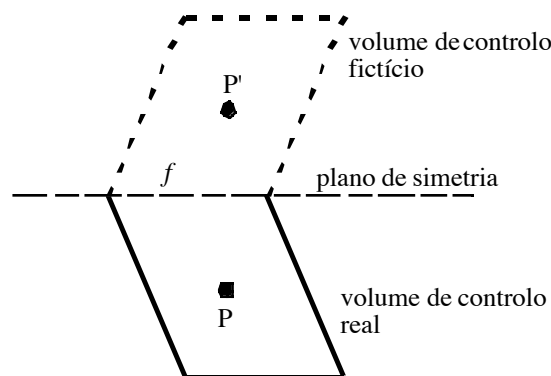


Figura A6- A célula fictícia adjacente a um plano de simetria. Reproduzido de Oliveira et al (1998)

Para perceber o que acontece com as tensões convém introduzir primeiro o conceito de vector tensão  $T_i = \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} n_j$ , correspondente a um determinado campo de tensões, e perceber que na fronteira (plano de simetria), não haverá componente tangencial do vector tensão ( $T_f^\tau = 0$  que é obtido por interpolação linear de  $P$  e  $P'$  sabendo-se que  $T_P^\tau = -T_{P'}^\tau$ ), mas somente componente normal ( $T_f^n = T_P^n = T_{P'}^n$ , também obtido por interpolação linear).

Assim, basta calcular a componente normal à face  $f$  do vector tensão na célula  $P$  cujas componentes são dadas pela Eq. (A72):

$$T_f^n = T_P^n = \sum_{j=1}^3 T_j n_j \quad \text{com} \quad T_j = \sum_{k=1}^3 \tau_{jk,P} n_k \quad (\text{A72})$$

de que resultam as seguintes tensões na face

$$\sum_{k=1}^3 (\tau_{ik})_f n_k = \left( \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 (\tau_{jk})^P n_j n_k \right) n_i = T_P^n n_i = T_{i,f} \quad (A73)$$

que é um sistema de equações implícitas nos componentes do tensor das tensões no plano de simetria  $(\tau_{ik,f})$ , conhecidas que são os valores nodais  $(\tau_{jk})^t$ . Felizmente, nem todos os componentes individuais do tensor das tensões são necessários na face  $f$ , como se pode deduzir a partir das equações de conservação da quantidade de movimento. De facto, a partir da Eq. (A23) a contribuição da face  $f$  para a tensão total na célula P é sómente:

$$\left( S_{u_i-tensão} \right)_f = \sum_{j=1}^3 B_{ff}^f \tau_{ij,f} = B_f \sum_{j=1}^3 \tau_{ij,f} n_j \quad (A74)$$

onde o vector unitário normal é calculado como sendo  $n_j = B_{ff}^f / B_f$  e  $B_f$  representa a área escalar da face fronteira. Assim, a condição de fronteira no plano de simetria  $f$  é implementado como:

$$\left( S_{u_i-tensão} \right)_f = T_{n,P} B_{fi} = T_{n,P} B_f n_i \quad (A75)$$

que basicamente consiste nas tensões normais cuja direcção é normal à face  $f$ .

*Paredes:* É nas paredes que há mais problemas em definir condições de fronteira sobretudo para a pressão e as tensões e este problema é mais agudo quando a equação constitutiva prevê tensões normais à parede (tensões normais transversais) não nulas, como os modelos de Giesekus, PTT completo ou FENE-P. Para a velocidade as condições de fronteira são fáceis de impor. Para uma parede em movimento à velocidade  $u_w$ , usa-se a condição de não-deslizamento para os diversos componentes do vector velocidade, o que impõe

$$u_{i,f} = u_{i,w} \quad (A76)$$

Mais genericamente, e se a parede não fôr porosa, isso exprime-se matematicamente como  $u_{i,f}^n = 0$  e  $u_{i,f}^\tau = u_{i,f}$  que são obtidas por interpolação linear a partir da célula P e de uma célula fictícia P' adjacente à parede, mas do lado de fora do domínio de cálculo, da mesma maneira que para um plano de simetria. Para estas duas células adjacentes à parede verifica-se que  $u_{i,P'}^n = -u_{i,P}^n$  e  $u_{i,P'}^\tau = u_{i,P}^\tau$ . Se a parede fôr estacionária, então  $u_{i,P'}^\tau = u_{i,P}^\tau = u_{i,f}^\tau = 0$ .

A definição de condições de fronteira para as tensões na parede tem sido a área em que houve maiores alterações com o tempo e isso advém da crescente complexidade das equações constitutivas com que se trabalha.

Em princípio, devido à natureza hiperbólica das equações constitutivas, não há necessidade de impor condições de fronteira para as tensões e assim a equação constitutiva deve ser resolvida na parede como parte da solução, por forma a obter aí as tensões. Contudo, para reduzir o esforço computacional, e evitar eventuais problemas de convergência, podem impor-se condições de fronteira adequadas na parede. Inicialmente, as tensões eram linearmente extrapoladas para a parede, um procedimento análogo ao utilizado para a pressão. Infelizmente, este método revelou-se muito instável, uma possível consequência dos elevados gradientes locais de tensão que se desenvolvem na camada limite de tensão junto à parede, e por isso optou-se por definir

condições de fronteira para tensão, que foram deduzidas a partir da equação constitutiva. Para uma parede situada numa face geral  $f$ , a equação constitutiva (A6) reduz-se a:

$$J_f \tau_{ij,f} = \eta_f \left[ \beta_{ff} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_f} + \beta_{fi} \frac{\partial u_j}{\partial \xi_f} \right] + \lambda_f \left[ (\beta_{fk} \tau_{kj}) \frac{\partial u_i}{\partial \xi_f} + (\beta_{fk} \tau_{ki}) \frac{\partial u_j}{\partial \xi_f} \right] - \frac{2}{3} \eta_f \beta_{fk} \frac{\partial u_k}{\partial \xi_f} \delta_{ij} \quad (\text{A77})$$

após anular os termos convectivos, e considerando ainda que se devem anular as diferenças de velocidade nas superfícies paralelas às paredes (i.e.,  $(\partial u_j / \partial \xi_l)_{l \neq f} = 0$ ). A simplificação da Eq.

(A77) conduz a expressões analíticas para os componentes da tensão na parede, mas isso causa oscilações das soluções numéricas. Após alguma experimentação, decidiu-se resolver implicitamente a Eq. (A77) para se obterem as tensões na parede  $\tau_{ij,f}$  incorporando a equação no esquema iterativo global. Assim, as tensões que aparecem no lado direito da equação (A77) estão atrasadas, i.e., pertencem à iteração anterior mas, à medida que se progride para a solução convergida tendem para as tensões, que aparecem no membro esquerdo da equação. Este método revelou-se muito mais preciso do que o uso das expressões analíticas simplificadas para calcular as tensões na parede e foi adoptado para o cálculo das tensões na parede no trabalho inicial de Oliveira et al (1998).

Posteriormente veio a verificar-se que o cálculo era mais estável se se calculassem na face  $f$  tensões aproximadas de forma diferente. A partir de 1999, passou a assumir-se que junto às paredes o escoamento era paralelo e desenvolvido, i.e. que se estava na presença de um escoamento de Couette. No fundo trata-se de uma forma ainda mais simplificada da Eq. (77) e que permite facilmente impôr condições de fronteira para qualquer modelo constitutivo reológico, desde que se conheçam à partida as funções reométricas de corte. Para se perceber o procedimento, que está explicado em detalhe em Oliveira (2001b), considere-se a Figura A7 que mostra uma célula vizinha da parede

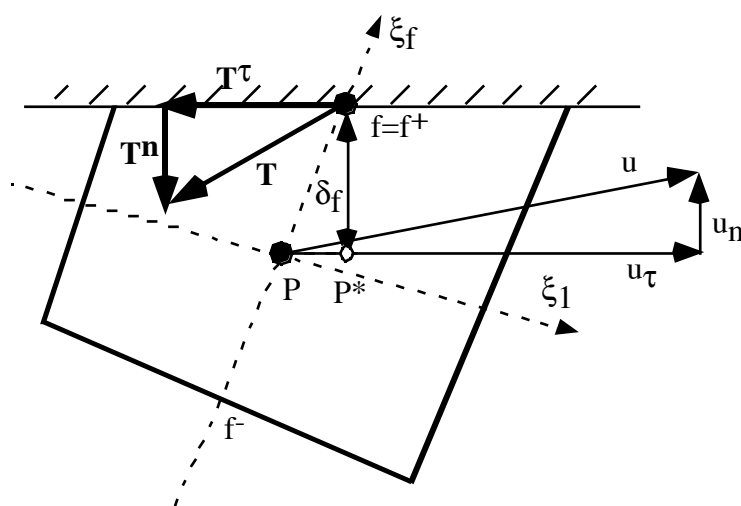


Figura A7- Representação esquemática de uma célula interna junto a uma parede.

O vector tensão  $T_i$  devido ao campo de tensões na parede tem uma componente tangencial e uma componente normal à parede tal que



$$T_i = T_i^\tau + T_i^n \quad (\text{A78})$$

Como junto à parede o escoamento é essencialmente viscosimétrico, a componente tangencial do vector tensão calcula-se como sendo

$$T_i^\tau = \eta(\dot{\gamma}) \frac{\partial u_{i,f}^\tau}{\partial n} \quad (\text{A79})$$

onde  $n$  é o vector normal à parede e  $\eta(\dot{\gamma})$  é a viscosidade viscosimétrica do modelo constitutivo, que depende do invariante  $\dot{\gamma}$  do tensor velocidade de deformação. Essa viscosidade é uma propriedade reométrica do fluido e não deve ser confundida com o parâmetro  $\eta$  do modelo constitutivo, embora para alguns modelos eles sejam iguais (por exemplo, no modelo de Maxwell contravariante). A equação (A79) é discretizada junto à parede em

$$T_i^\tau = \eta(\dot{\gamma})_f \frac{u_{i,f}^\tau - u_{i,P^*}^\tau}{\delta_f} \quad (\text{A80})$$

em que  $\delta_f$  é a distância da parede ao ponto  $P^*$  (ver Figura A7). A componente  $i$  da velocidade tangencial da face ou é nula (parede estacionária) ou é um dado do problema, enquanto que a velocidade tangencial no nó  $P^*$  é calculada como na Eq. (A70) sendo aí  $n_i$  o vector unitário normal à parede. Pode-se assumir  $u_{i,P^*}^\tau = u_{i,P}^\tau$  desprezando a não-ortogonalidade da malha junto à parede. A função reométrica pode obter-se da literatura para o modelo em causa, devendo o invariante na parede ser calculado como

$$\dot{\gamma}_f = \frac{u_{i,f}^\tau - u_{i,P}^\tau}{\delta_f} \quad (\text{A81})$$

Note-se que no método dos volumes finitos a discretização do vector tensão é de facto efectuada enquanto parte integrante da equação de conservação de quantidade de movimento e aparece por via do processo de integração e posterior discretização descrito para o termo (A23), mas agora aplicado à parede. Aí

$$(S_{u_i - \text{tensão}})_f = B_f \sum_{j=1}^3 \tau_{ij,f} n_j = B_f T_i = B_f (T_i^\tau + T_i^n)_f \quad (\text{A82})$$

que como vimos vai dar origem a duas contribuições: uma associada à componente tangencial do vector tensão e outra associada à componente normal à superfície do vector tensão. A contribuição com origem na componente tangencial é dada na Eq. (A83)

$$B_f T_{i,f}^\tau = B_f \eta(\dot{\gamma}_f) \frac{u_{i,f}^\tau - u_{i,P}^\tau}{\delta_f} \quad (\text{A83})$$

Quanto à componente normal do vector tensão teremos

$$T_{i,f}^n = -g(\dot{\gamma})_f \lambda \eta \left( \frac{\partial u_{i,f}^\tau}{\partial n} \right)^2 \quad (\text{A84})$$

onde  $g(\dot{\gamma})$  é uma função específica de cada modelo constitutivo que traduz o comportamento reométrico da tensão normal perpendicular à parede no escoamento viscosimétrico (mais concretamente  $g(\dot{\gamma}) = -\Psi_2(\dot{\gamma}) / (\lambda \eta_p)$  onde  $\Psi_2$  é o coeficiente da segunda diferença de tensões

normais). Na Eq. (A84)  $\eta$  é agora o parâmetro  $\eta$  do modelo constitutivo e não a viscosidade viscosimétrica.

Como consequência desta tensão normal, a respectiva contribuição para a equação de conservação de quantidade de movimento na parede é

$$B_f T_i^n = \pm B_f g (\dot{\gamma}_f) \lambda \eta_p \left( \frac{u_{i,f}^\tau - u_{i,P}^\tau}{\delta_f} \right)^2 \quad (\text{A85})$$

Nesta expressão,  $\pm$  toma os seguintes sinais: - se a parede estiver colocada na direcção positiva da coordenada  $\xi_f$  e + se a parede estiver colocada na direcção negativa  $\xi_f$ . Note-se que para os modelos de Maxwell contravariante, de Oldroyd-B ou PTT simplificado (SPTT) não existe esta contribuição normal, mas ela terá de ser contabilizada para os modelos de Giesekus, PTT normal ou FENE-P ou outros que possuam  $N_2 \neq 0$ .

Finalmente, temos ainda de considerar as condições de fronteira na parede para a pressão. Embora seja prática corrente a sua extrapolação linear para a parede a partir dos valores nos dois nós interiores adjacentes, como se faz no CFD clássico (Ferziger e Perić (2002) e Patankar (1980)), essa prática é incorrecta e resulta em valores insatisfatórios quando os fluidos apresentam elevadas tensões normais às paredes, como é o caso de alguns fluidos viscoelásticos. Se não fôr esse o caso, pode-se utilizar na mesma a extrapolação linear, mas uma formulação mais robusta para a pressão na parede é a que se segue.

A partir da equação de conservação de quantidade de movimento para a componente de velocidade normal a uma parede é possível demonstrar (Oliveira, 2001b), que a pressão na parede deve ser obtida a partir da Eq. (A86)

$$p_f = 2p_P - p_{f^-} + \frac{a_P \mu_{n,P}}{B_f} \quad (\text{A86})$$

Nesta equação os dois primeiros termos (ver Figura A7 para a nomenclatura) correspondem de facto à extrapolação linear a partir das pressões nos dois nós interiores adjacentes à superfície, mas que deve ser corrigido pelo último termo. À medida que a malha é refinada junto à parede o factor correctivo diminui de intensidade.

Esta é a condição a impôr para a pressão, desde que a parede seja impermeável e que a não-ortogonalidade da malha junto à parede não seja muito severa. Fora destas condições deve utilizar-se uma expressão mais complexa (Oliveira, 2001b).

## Notação suplementar

### Romana

- $a_F$  coeficiente vizinho da forma canónica da equação algébrica de transporte de quantidade de movimento
- $a_P$  coeficiente central da forma canónica da equação algébrica de transporte de quantidade de movimento
- $B_{li}$  componente  $i$  do vector área das faces dos volumes de controlo orientada na direcção  $l$
- $B_f$  área da superfície de uma face
- $D_f$  condutância difusiva
- $F_f$  caudal mássico através da face  $f$
- $g(\dot{\gamma})$  função relacionada com o coeficiente da segunda diferença de tensões
- $J$  determinante da matriz jacobiana da transformação de coordenadas
- $L_f^+$  factor de interpolação linear (tal como  $L_f^-$ )
- $S_{u_i}$  termo fonte (ou contribuição para o termo fonte) da forma canónica da equação algébrica de conservação de quantidade de movimento
- $S_{\tau_{ij}}$  termo fonte (ou contribuição para o termo fonte) da forma canónica algébrica da equação constitutive reológica
- $T_i$  componente  $i$  do vector tensão
- $u_i$  componente  $i$  do vector velocidade no sistema cartesiano  $x_i$
- $\tilde{u}_i$  componente  $i$  do vector velocidade calculada pelo método de interpolação de Rhie e Chow
- $\hat{u}_i$  componente  $i$  do vector velocidade que aparece num termo de convecção da equação de transporte e calculada por método de interpolação específico para convecção
- $V$  volume da célula computacional

### Grega

- $\beta_{li}$  cofactor de  $\partial x_i / \partial \xi_l$  na matriz jacobiana
- $\delta t$  intervalo de tempo nas equações de transporte e constitutiva algébricas
- $\Delta$  identifica uma diferença entre as quantidades calculadas nos lados positivo e negativo
- $\Phi$  grandeza genérica
- $\kappa$  parâmetro usado na discretização da derivada temporal, equação (A59)
- $\tau_{ij}$  componente  $ij$  do tensor das tensões no sistema cartesiano
- $\tilde{\tau}_{ij}$  componente  $ij$  do tensor das tensões calculada por método especial de interpolação para assegurar acoplamento tensão-velocidade-pressão
- $\hat{\tau}_{ij}$  componente  $ij$  do tensor das tensões que aparece num termo de convecção da equação constitutive e calculada por método de interpolação específico para convecção
- $\xi_i$  coordenada  $i$  no sistema de coordenadas generalizado

**Índice inferior**

- $D$  referente ao lado de jusante (do inglês “downwind”)  
 $f$  orientada segundo a direcção da face  $f$   
 $f^-$  sentido negativo da direcção  $f$  ou face negativa na direcção  $f$  da célula centrada em P  
 $f^+$  sentido positivo da direcção  $f$  ou face positiva na direcção  $f$  da célula centrada em P  
 $U$  referente ao lado de montante (do inglês “upwind”)

**Índice superior**

- $C$  referente a contribuição convectiva  
 $D$  referente a contribuição difusiva  
 $f$  centrado na face  $f$   
 $F$  centrado no centro da célula F que é vizinha da célula P  
 $n_j$  componente  $j$  de vector unitário  
 $n$  referente a componente normal de um vector ou a passo no tempo  $n$   
 $n-1$  referente a passo no tempo  $n-1$   
 $n+1$  referente a passo no tempo  $n+1$   
 $o$  referente ao instante de tempo anterior ao actual  
 $p$  referente à contribuição polimérica  
 $P$  centrado no centro da célula P  
 $s$  referente à contribuição do solvente  
 $\tau$  referente a componente tangencial de um vector ou a termo relativo a equação constitutiva reológica para a tensão  $\tau$

### Lista de referências

- Aboubacar M e Webster MF 2001. A cell-vertex finite-volume/ element on triangles for abrupt contraction viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 98, 83-106.
- Aboubacar M, Matallah H e Webster MF 2002. Highly elastic solutions for Oldroyd-B and Phan-Thien—Tanner fluids with a finite-volume/element method: planar contraction flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 103, 65-103.
- Achia BU e Thompson DW 1977. Structure of the turbulent boundary layer in drag-reducing pipe flow. *J. Fluid Mech.*, 81, 439-464
- Alves MA 2004. *Escoamentos de fluidos viscoelásticos em regime laminar: análise numérica, teórica e experimental*. Tese de doutoramento, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto.
- Alves MA, Pinho FT e Oliveira PJ 2000. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 93, 287-314.
- Alves MA, Pinho FT e Oliveira PJ 2001. The flow of viscoelastic fluids past a cylinder: finite-volume high-resolution methods. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 97, 205-230.
- Alves MA, Oliveira PJ e Pinho FT 2003-a. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 41, 47-75.
- Alves MA, Oliveira PJ e Pinho FT 2003-b. Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 110, 45-75.
- Azouz I e Shirazi SA 1994. Turbulent flow of drag-reducing fluids in annular passages. FED-Vol. 179, Numerical Methods for Non-Newtonian Fluid Dynamics, ASME 1994, 71-81
- Babcock GH e Wilcox S 1975. *Steam: Its Generation and Use*, Babcock & Wilcox, New York, 38<sup>th</sup> Edition.
- Baaijens FPT, Baaijens HPW, Peters GWM e Meijer HEH 1994. An experimental and numerical investigation of viscoelastic flow around a cylinder. *J. Rheol.*, 38, 351-376.
- Beverly CR e Tanner RI 1992. Numerical analysis of three-dimensional Bingham plastic flow. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 42, 85-115.
- Bevis MJ, Darwish MS e Whiteman JR 1992. Numerical modeling of viscoelastic liquids using a finite volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 45, 311-337.
- Binding DM 1988. An approximate analysis for contraction or converging flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 27, 173-189.
- Bird RB, Armstrong RC e Hassager O 1987a. *Dynamics of Polymeric Liquids. Volume 1: Fluid Mechanics*, Wiley, Nova Iorque.
- Bird RB, Armstrong RC e Hassager O 1987b. *Dynamics of Polymeric Liquids. Volume 2: Kinetic Theory*, Wiley, Nova Iorque.
- Bird RB e Curtiss CF 1998. Thermoviscoelasticity: continuum-molecular connections. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 79, 255-259.
- Bird RB, Stewart WE e Lightfoot EN 2002. *Transport Phenomena*, 2<sup>a</sup> edição, John Wiley & Sons Inc, Nova Iorque.

- Boger DV, Hur DU e Binnington RJ 1986. Further observations of elastic effects in tubular entry regions. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 20, 31-49.
- Boger DV 1987. Viscoelastic flows through contractions. *Annual Rev. of Fluid Mech.* 19, 157-182.
- Boger DV e Walters K 1993. *Rheological Phenomena in Focus* Rheology Series, Elsevier, Amsterdão.
- Broadbent JM e Mena B 1974. Slow flow of an elastico-viscous fluid past cylinders and spheres. *Chem. Eng. J.*, 8, 11-19.
- Cable P.J and Boger DV 1978a. A comprehensive experimental investigation of tubular entry flow of viscoelastic fluids: Part I. Vortex characteristics in stable flow. *AIChEJ*, 24, 868-879.
- Cable P.J and Boger DV 1978b. A comprehensive experimental investigation of tubular entry flow of viscoelastic fluids: Part II. The velocity fields in stable flow. *AIChEJ*, 24, 992-999.
- Cable P.J and Boger DV 1979. A comprehensive experimental investigation of tubular entry flow of viscoelastic fluids: Part III. Unstable flow. *AIChEJ*, 25, 152-159
- Cadot O e Kumar S 2000. Experimental characterization of viscoelastic effects on two- and three-dimensional shear instabilities. *J. Fluid Mech.*, 416, 151-172.
- Cantwell B e Coles D 1983. An experimental study of entrainment and transport in turbulent near wake of a circular cylinder. *J. Fluid Mech.*, 136, 321-374
- Caola AE, Joo YL, Armstrong RC e Brown RA 2001. Highly parallel time integration of viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 100, 191-216.
- Carneiro OS, Nóbrega JM, Oliveira PJ e Pinho FT 2002. Flow Balancing in Extrusion Dies for Thermoplastic Profiles. Part II: Influence of the Design Strategy. *International Polymer Processing em impressão*.
- Castro AG, Covas JA e Diogo AC 2001 *Reologia e suas aplicações industriais*. Coleção Ciência e Técnica, Instituto Piaget, Lisboa.
- Christiansen JC, Yue Y, Drozdov AD, von der Ohe R, Jensen EA, Solvang M e Jense SL 2002. The Rheology of Stone. Workshop on Process Modelling, Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Lake Vyrnwy, Wales, 25-27th March 2002.
- Coates PJ, Armstrong RC e Brown RA 1992 Calculation of steady state viscoelastic flow through axisymmetric contractions with the EEME formulation. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 42, 141-188.
- Coelho PM e Pinho FT 2003. Vortex shedding in cylinder flow of shear-thinning fluids. I- Identification and demarcation of flow regimes. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 110, 143-176.
- Cressman JR, Bailey Q e Goldberg WI 2001. Modification of a vortex street by a polymer additive. *Phys Fluids*, 13, 867-871.
- Crochet M 1994. Numerical simulation of viscoelastic flow. Lecture Series 1994-03, Von Kármán Institute of Fluid Dynamics.
- Crochet MJ, Davies AR e Walters K 1984. *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*, Elsevier, Amsterdão.

- Cruz DOA, Maneschy CE, Macedo EN e Quaresma JNN 2000. A turbulence model for computing the flow of power law fluids within circular tubes. *Hybrid Methods in Eng.*, 2, 1-13.
- Cruz DOA e Pinho FT 2003. Turbulent pipe flow predictions with a low Reynolds number  $k-\epsilon$  model for drag reducing fluids. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 114, 109-148.
- Curtiss CF e Bird RB 1997. Thermal conductivity of dilute solutions of chainlike polymers. Relatório interno nº WIS-TCI-867 da University of Wisconsin- Madison, Theoretical Chemistry Institute.
- Darwish MS e Moukalled F 1994. Normalised variable and space formulation methodology for high resolution schemes. *Num. Heat Transfer, Part B*, 79-96.
- Day C 2002 Warm bedrock forms water beneath rapidly moving ice stream in Central Greenland. *Physics Today*, 55 (3), 17-18.
- Dean WR e Montagnon PE 1949. On the steady motion of viscous liquid in a corner *Proc. Cambridge Philo. Soc.*, 45, 389-394.
- Debbaut B, Marchal JM e Crochet MJ 1988. Numerical simulation of highly viscoelastic flows through an abrupt contraction. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 29, 119-146.
- Delvaux V e Crochet MJ 1990. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 37, 297-315.
- Den Toonder JMJ, Hulsen MA, Kuiken GDC e Nieuwstadt FTM 1977. Drag reduction by polymer additives in a turbulent pipe flow: numerical and laboratory experiments. *J. Fluid Mech.*, 337, 193-231.
- Den Toonder JMJ, Nieuwstadt FTM e Kuiken GDC 1995. The role of elongational viscosity in the mechanism of drag reduction by polymer additives. *Appl Sci. Res.*, 54, 95-123.
- Dhahir SA e Walters K 1989. On non-Newtonian flow past a cylinder in a confined flow. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 33, 781-804.
- Dimitropoulos CD, Sureshkumar R e Beris AN 1998. Direct numerical simulation of viscoelastic turbulent channel flow exhibiting drag reduction: effect of the variation of rheological parameters. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 79, 433-468.
- Dimitropoulos CD, Sureshkumar R, Beris AN e Handler RA 2001. Budgets of Reynolds stress, kinetic energy and streamwise enstrophy in viscoelastic turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 13, 1016-1027.
- Dou HS e Phan-Thien N 1998. Parallelisation of an unstructured finite volume code with PVM: viscoelastic flow around a cylinder. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 77, 21-51.
- Dou HS e Phan-Thien N 1999. The flow of an Oldroyd-B fluid past a cylinder in a channel: adaptive viscosity vorticity (DAVSS- $\omega$ ) formulation. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 87, 47-73.
- Durst F, Keck T e Kleine R 1979. Turbulence quantities and Reynolds stress in pipe flow of polymer solutions measured. "6th Symposium on Turbulence in Liquids" - Chemical Eng. Dept.- University of Missouri- Rolla, 55-65.

- Durst F e Rastogi AK 1977. Calculations of turbulent boundary layer flows with drag reducing polymer additives. *Phys. Fluids*, 20, 1975-1985.
- Edwards MF e Smith R 1980. The use of eddy viscosity expressions for predicting velocity profiles in Newtonian, non-Newtonian and drag reducing turbulent pipe flow. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 7, 153-169.
- Eggleton CD, Pulliam TH and Ferziger JH 1996 Numerical Simulation of Viscoelastic Flow Using Flux Difference Splitting at Moderate Reynolds numbers. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 64, 269.
- Escudier MP, Gouldson IW, Pereira AS, Pinho FT e Poole RJ 2001. On the reproducibility of the rheology of shear-thinning liquids. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 97, 99-124.
- Escudier MP, Oliveira PJ e Pinho FT 2002a. Fully developed laminar flow of purely viscous non-Newtonian liquids through annuli, including the effects of eccentricity and inner-cylinder rotation. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 23, 52-73.
- Escudier MP, Oliveira PJ, Pinho FT e Smith S 2002b. Fully-developed laminar flow of non-Newtonian liquids through annuli: comparison of numerical calculations with experiments. *Exp. in Fluids*, 33, 101-111.
- Escudier MP, Presti F e Smith S 1999. Drag reduction in the turbulent pipe flow of polymers. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 81, 197-213
- Evans RE e Walters K 1986. Flow characteristics associated with abrupt changes in geometry in the case of highly elastic liquids. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 20, 11-29.
- Evans RE e Walters K 1989. Further remarks on the lip-vortex mechanism of vortex enhancement in planar-contraction flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 32, 95-105.
- Fahnestock M, Abdalati W, Joughin I, Brozena J e Gogineni P 2001. High geothermal heat flow, basalt melt, and the origin of rapid ice flow in central Greenland. *Science* 294, 2338- 2342.
- Fan Y, Tanner RI e Phan-Thien N 1999. Galerkin/least-square finite-element methods for steady viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 84, 233-256.
- Ferziger JH e Perić M 2002. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 3ª edição, Berlim.
- Fletcher CAJ 1991. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, Volumes I e II, Springer Verlag, Berlim.
- Fortin M e Fortin A 1989. A new approach for the FEM simulation of viscoelastic flows, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 32, 295-310.
- Fung YC 1997. *Biomechanics: Circulation*. Springer Verlag, Berlin.
- Gaskell PH e Lau AKC 1988. Curvature compensated convective transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 8, 617-641.
- Gervang B e Larsen PS 1991. Secondary flows in straight ducts of rectangular cross section. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 39, 217-237.
- Girault V e Raviart PA 1986. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*. Springer Verlag, Berlim.



- Griffiths RW 2000. The dynamics of lava flows. *Annual Rev. of Fluid Mech.*, 32, 477-518.
- Grillet AM, Bogaerds ACB, Peters GWM e Baaijens FPT 2002. Stability analysis of constitutive equations for polymer melts in viscometric flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 103, 221-250.
- Gyr A e Bewersdorff HW 1995. *Drag reduction of turbulent flow by additives* Kluwer Academic Publishers.
- Hammad KJ, Vradis GC e Ötügen MV 2001. Laminar flow of a Herschel-Bulkley fluid over an axisymmetric sudden expansion. *J. Fluid Eng.*, 123, 588-594.
- Hassager O 1988. Working group on numerical techniques. Fifth International Workshop on numerical methods in non-Newtonian flows. *J. non-Newt. Fluid Mech.*, 29, 2-5.
- Hassid S e Poreh M 1975. A turbulent energy model for flows with drag reduction. *Trans ASME J. Fluids Eng.*, 97, 234-241.
- Hassid S e Poreh M 1978. A turbulent energy dissipation model for flows with drag reduction. *J Fluids Eng*, 100, 107-112.
- Hiemenz K 1911 Die Grenzschicht an einem in dem gleichförmigen Flüssigkeitsstrom eingetauchten geraden Kreiszyylinder. Tese de doutoramento, Universidade de Göttingen, Alemanha.
- Hinch EJ 1993. The flow of an Oldroyd fluid around a sharp corner. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 50, 161-171.
- Hirsch, C 1991. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Volumes I e II, John Wiley, Nova Iorque.
- Hoyt JH 1972. The effect of additives on fluid friction. *Trans ASME J. Basic Eng.*, 94, 258-285.
- Hu HH e Joseph DD 1990. Numerical Simulation of Viscoelastic Flow Past a Cylinder. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 37, 347-377.
- Huang X, Phan-Thien N e Tanner RI 1996. Viscoelastic flow between eccentric rotating cylinders: unstructured control volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 64, 71-92.
- Huilgol RR e Phan-Thien N. 1997. *Fluid Mechanics of Viscoelasticity*. Elsevier, Amsterdão.
- James DF e Acosta AJ 1970. The laminar flow of dilute polymer solutions around circular cylinders. *J. Fluid Mech.*, 42, 269-288.
- Jones WP e Launder BE 1972. The prediction of laminarization with a two- equation model of turbulence. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 15, 301-314.
- Keunings R 1986. On the high Weissenberg number problem. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 20, 209-226.
- Keunings R e Crochet MJ 1984. Numerical simulation of the flow of a viscoelastic fluid through an abrupt contraction. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 14, 279-299.
- Khosla PK e Rubin SG 1974, A diagonally dominant second order accurate implicit scheme. *Computers and Fluids*, 2, 207-209.

- King RC, Apelian MR, Armstrong RC e Brown RA 1988. Numerically stable finite element techniques for viscoelastic calculations in smooth and singular geometries, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 29, 147.
- Larson RG 1988. *Constitutive equations for polymer melts and solutions*. Butterworths, Boston.
- Larson RG 1999. *The structure and rheology of complex fluids*. Oxford University Press, Oxford
- Laso M e Öttinger HC 1993. Calculation of viscoelastic flow using molecular models: the CONNFESSIT approach. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 47, 1-20.
- Lawler JV, Muller SJ, Brown RA and Armstrong RC 1986. Laser-Doppler velocimetry measurements of velocity fields and transitions in viscoelastic fluids. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 20, 51-92.
- Leschziner MA 1980. Practical evaluation of three finite-difference schemes for the computation of steady-state recirculating flows. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 23, 293-312.
- Leonard BP 1991. The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional convection. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 88, 17-74.
- Lielens G, Keunings R e Legat V 1999. The FENE-L and FENE-LS closure approximations to the kinetic theory of finitely extensible dumbbells. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 87, 179-196.
- Liu AW, Bornside DE, Armstrong RC e Brown RA 1998. Viscoelastic flow of polymer solutions around a periodic, linear array of cylinders: comparisons of predictions for microstructure and flow fields. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 77, 153-190.
- Luchik TS e Tiederman WG 1988. Turbulent structure in low concentration drag reducing channel flows. *J. Fluid Mech.*, 190, 241-263.
- Mackenzie JA, Crumpton PI e Morton KW 1993. Cell vertex algorithms for the compressible Navier-Stokes equations, *J. Comput. Phys.*, 109, 1-15.
- Malin MR 1997. Turbulent pipe flow of power-law fluids. *Int. Comm. Heat and Mass Transf.*, 24, 977-988.
- Manero O e Mena B 1981. On the flow of viscoelastic liquids past a circular cylinder. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 2, 379-387.
- Marchal, JM e Crochet, MJ 1987. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 26, 77-114.
- Massah H, Kontomaris K, Schowalter WR e Hanratty TJ 1993. The configurations of a FENE bead-spring chain in transient rheological flows and in a turbulent flow. *Phys. Fluids A*, 5, 881-890.
- Massah H e Hanratty TJ 1997. Added stresses because of the presence of FENE-P bead-spring chains in a random velocity field. *J. Fluid Mech.*, 337, 67-101.
- Matallah H, Townsend P e Webster MF 1998. Recovery and stress-splitting schemes for viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 75, 139-166.
- McKinley G, Raiford WP, Brown RA e Armstrong RC 1991. Nonlinear dynamics of viscoelastic flow in axisymmetric abrupt contraction. *J. Fluid Mech.*, 223, 411-456.

- McKinley G, Armstrong RC e Brown RA 1993. The wake instability in viscoelastic flow past confined circular cylinders. *Phil. Trans. Roy. Soc. A*, 344, 265-304.
- McKinley G, Pakdel P e Öztekin A 1996. Rheological and geometric scaling of purely elastic flow instabilities. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 67, 19-47.
- Mena B e Caswell B 1974. Slow flow of an elastic-viscous fluid past an immersed body. *Chem. Eng. J.*, 8, 125-134.
- Mendes PRS, Naccache MF, Braga CVM, Nieckele AO e Ribeiro FS 2002. Flows of Bingham material through ideal porous media: an experimental and theoretical study. *J. Brazilian Soc. Mech. Sci.*, 24, 40-45.
- Missirlis KA, Assimacopoulos D e Mitsoulis E 1998. A finite-volume approach in the simulation of viscoelastic expansion flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 78, 91-118.
- Mizushima T, Usui H e Yoshida T 1974. Turbulent pipe flow of dilute polymer solutions. *J. Chem. Eng. Japan*, 7, 162-167.
- Moffat HK 1964. Viscous and resistive eddies near a sharp corner. *J. Fluid Mech.*, 18, 1-18.
- Mompean G e Deville M 1997. Unsteady finite-volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 72, 253-279.
- Morton KW e Paisley MF 1989. A finite volume scheme with shock fitting for the steady Euler equations. *J. Comput. Physics*, 80, 168-203.
- Nguyen H e Boger DV 1979. The kinematics and stability of die entry flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 5, 353-368.
- Nieckele AO, Naccache MF e Mendes PRS 1998. Cross flow of viscoplastic materials through tube bundles. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 75, 43-54.
- Nigen S e Walters K 2002. Viscoelastic contraction flows: comparison of axisymmetric and planar configurations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 102, 343-359.
- Nóbrega JM, Carneiro OS, Pinho FT e Oliveira PJ 2001 a. Computer aided rheological design of extrusion dies for profiles. *Journal of Materials Processing and Technology*, 114/1, 75-86.
- Nóbrega JM, Carneiro OS, Pinho FT e Oliveira PJ 2001 b. Flow balancing of profile extrusion dies. Livro de Actas do SPE Annual Technical Conference, ANTEC 2001, Vol. 1, artigo 31, pp 59-63, Dallas, Texas, 6 a 10 de Maio.
- Nóbrega, JM, Carneiro, OS, Oliveira, PJ e Pinho, FT 2003. Flow Balancing in Extrusion Dies for Thermoplastic Profiles. Part I: Automatic Design. *International Polymer Processing*. Em impressão.
- Oliveira PJ 1992. Computer modeling of multidimensional multiphase flows and applications to T- junctions. Tese de doutoramento, Imperial College, Universidade de Londres, Reino Unido.
- Oliveira PJ 1996. Boundary treatment of the stress tensor. Relatório interno do Departamento de Eng. Electromecânica, Universidade da Beira Interior, Covilhã, Portugal.

- Oliveira PJ, Pinho FT e Pinto, GA 1998. Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 79, 1-43.
- Oliveira PJ e Pinho FT 1999a. Numerical procedure for the computation of fluid flow with arbitrary stress-strain relationships. *Num. Heat Transfer, Part B*, 35, 295-315.
- Oliveira PJ e Pinho FT 1999b. Plane contraction flows of upper convected Maxwell and Phan-Thien—Tanner fluids as predicted by a finite-volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 88, 63-88.
- Oliveira PJ e Pinho FT 1999c. Analytical solution for the fully developed channel flow of a Phan-Thien—Tanner fluid. *J. Fluid Mech.*, 387, 271-280.
- Oliveira PJ 2001a. Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: vortex shedding behind cylinder. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 101, 113-137.
- Oliveira PJ 2001b. On the numerical implementation of nonlinear viscoelastic models in a finite-volume method. *Num. Heat Transfer, Part B*, 40, 283-301.
- Orlandi P 1995. A tentative approach to the direct simulation of drag reduction by polymers. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 60, 277-301.
- Owens RG, Chauvière C e Phillips TN 2002. A locally upwinded spectral technique (LUST) for viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 108, 49-71.
- Owens RG e Phillips TN 2002. *Computational Rheology*. Imperial College Press, London, UK
- Papanastasiou TS 1987. Flows of materials with yield. *J. Rheology*, 31, 385-404
- Patankar SV 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, Nova Iorque.
- Pereira AS e Pinho FT 1994. Turbulent pipe flow characteristics of low molecular weight polymer solutions. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 55, 321-344.
- Perera MGN e Walters K 1977. Long range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. Part I: Flows associated with L-shaped and T-shaped geometries. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 2, 49-81.
- Peterlin A 1966. Hydrodynamics of macromolecules in a velocity field with longitudinal gradient. *J. Polymer Sci.*, 4, 287-291.
- Phan-Thien N e Dou H-S 1999. Viscoelastic flow past a cylinder: drag coefficient. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 180, 243-266.
- Phillips TN e Williams AJ 1999. Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-Lagrangian finite volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 86, 215-246.
- Pinho FT, Oliveira PJ e Miranda JP 2002. Pressure losses in the laminar flow of shear-thinning power-law fluids across a sudden pipe expansion. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 24, 747-761.
- Pinho FT 2001. The Finite-Volume Method Applied to Computational Rheology: II—Fundamentals For Stress-Explicit Fluids. *e-rheo.pt*, 1, 63-100.
- Pinho FT 2003. A GNF framework for turbulent flow models of drag reducing fluids and proposal for a  $k-\epsilon$  type closure. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 114, 149-184.
- Pinho FT e Whitelaw JH 1990. Flow of non-Newtonian fluids in a pipe. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 34, 129-144.

- Politis S 1989 Turbulence modelling on inelastic power law fluids. Internal report, Dep. Mech. Eng., Imperial College, UK, also Internal report of Brite project RIIB.0085.UK (H)
- Poole R e Escudier MP 2002. Laminar viscoelastic flow through a plane sudden expansion. Artigo 31.4, em CD-ROM. Anais do 11<sup>th</sup> International Symposium on Applications of Laser techniques to Fluid Mechanics, 8-11<sup>th</sup> July, Lisbon, Portugal.
- Pope SB 2000. *Turbulent flows* Cambridge University Press, Cambridge, Massachussets, US
- Poreh M e Hassid S 1977. Mean velocity and turbulent energy closures for flows with drag reduction. *Phys Fluids*, 20 (10), S193-S196.
- Quinzani LM, Armstrong RC e Brown RA 1994. Birefringence and laser-Doppler velocimetry studies of viscoelastic flow through a planar contraction. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 52, 1-36.
- Raiford WP, Quinzani LM, Coates PJ, Armstrong RC and Brown RA 1989. LDV measurements of viscoelastic flow transitions in abrupt axisymmetric contractions: interaction of inertia and elasticity. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 32, 39-68.
- Rajagopalan D, Armstrong RC e Brown RA 1990. Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a Newtonian viscosity. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 36, 159-192.
- Reischman MM e Tiederman WG 1975. Laser-Doppler anemometer measurements in drag-reducing channel flows. *J. Fluid Mech.*, 70, 369-392.
- Rhie CM e Chow WL 1983. A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. *AIAAJ*, 21, 1525-1532.
- Rogerson MA e Yeow YL 1999. Representation of Stokes flow through a planar contraction by Papkovitch-Fadle Eigenfunctions. *J. Appl. Mech.- Trans ASME*, 66, 940-944.
- Rosehnow WM 1985. Process heat exchangers, in: WM Rosehnow, JP Hartnett e EN Ganic (Eds.), *Handbook of Heat Transfer Applications*, 2<sup>nd</sup> edition.
- Saramito P e Piau JM 1994. Flow characteristics of viscoelastic fluids in an abrupt contraction by using numerical modeling. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 52, 263-288.
- Sasmal, GP 1995. A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 56, 15-47.
- Sato, T. e Richardson, S. 1994. Explicit numerical simulation of time-dependent viscoelastic flow problems by a finite element/finite volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 51, 249- 275.
- Schlichting H 1968. *Boundary-layer theory* . McGraw-Hill, Nova Iorque.
- Schlichting H e Gersten K 1999. *Boundary-layer theory*. 8<sup>a</sup> edição, Springer-Verlag, Berlin.
- Sedov LI 1971. *A course in continuum mechanics*. Vol. 1, Walters- Noordhoft Publishers, Gröningen, Holanda
- Shiang AH, Lin JC, Öztekin A e Rockwell D 1997. Viscoelastic flow around a confined circular cylinder: measurements using high-image-density particle image velocimetry. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 73, 29-49.
- Shin S e Cho YI 1994. Laminar heat transfer in a rectangular duct with a non-Newtonian fluid with temperature-dependent viscosity. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 37, 19-30.

- Soares EJ, Naccache MF e Mendes PRS 1999. Heat transfer to viscoplastic materials flowing laminarily in the entrance region of tubes. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 20, 60-67.
- Speziale CG 1987. On nonlinear  $k-l$  and  $k-\epsilon$  models of turbulence. *J. Fluid Mechanics*, 178, 459-475.
- Sun J, Phan-Thien N e Tanner RI 1996. An adaptive viscoelastic stress splitting scheme and its applications: AVSS/SI and AVSS/SUPG. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 65, 75-91.
- Sun J, Smith MD, Armstrong RC e Brown RA 1999. Finite element method for viscoelastic flows based on the discrete adaptive viscoelastic stress splitting and the discontinuous Galerkin method: DAVSS-G/DG. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 86, 281-307.
- Sureshkumar R, Beris AN e Handler RA 1997. Direct numerical simulation of the turbulent channel flow of a polymer solution. *Phys. Fluids*, 9, 743-755.
- Stokes JR, Graham LJW, Lawson NJ e Boger DV 2001 Swirling flow of viscoelastic fluids. Part 2: Elastic effects. *J. Fluid Mech.*, 429, 117-153.
- Strouhal V 1878. Über eine besondere Art der Tonerregung. *Ann. Phys. Chem. (Leipzig) Neue Folge Bd.*, 5, 10.
- Tanner RI 2000. *Engineering Rheology*, 2ª edição, Oxford Eng. Science Series 52, Oxford University Press, New York.
- Telionis DP, Gundappa M e Diller TE 1992. On the organization of flow and heat transfer in the near wake of a circular cylinder in steady and pulsed flow. *ASME J. Fluids Eng.*, 114, 348-355.
- Thurston GB 1979. Rheological parameters for the viscosity, viscoelasticity and thixotropy of blood. *Biorheology*, 26, 149-162.
- Usui H, Shibata T e Sano Y 1980. Kármán vortex behind a circular cylinder in dilute polymer solutions. *J. Chem. Eng. Japan*, 13, 77-79.
- Wachs A e Clermont JR 2000. Non-isothermal viscoelastic flow computations in an axisymmetric contraction at high Weissenberg numbers by a finite volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 95, 147-184.
- Walters K e Webster M F 1982. On dominating elastico-viscous response in some complex flows. *Phil. Trans. R. Soc. London A*, 308, 199-218.
- Wapperom P e Webster MF 1998. A second order hybrid finite element/ volume method for viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 79, 405-431.
- Wapperom P e Webster MF 1999. Simulation for viscoelastic flow by a finite volume/element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 180, 281-304.
- Warholic MD, Massah H e Hanratty TJ 1999. Influence of drag reducing polymers on turbulence: effects of Reynolds number, concentration and mixing. *Exp. in Fluids*, 27, 461-472
- White FM 1991. *Viscous Fluid Flow*. 2ª edição, Mc Graw-Hill, Nova Iorque.
- White SA e Baird DG 1988-a) Flow visualization and bi-refringence studies on planar entry flow behavior of polymer melts. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 29, 245-267.

- White SA e Baird DG 1988-b) Numerical simulation studies of the planar entry flow of polymer melts. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 30, 47-71.
- Williamson CHK 1996. Vortex dynamics in the cylinder wake. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 28, 477-539.
- Versteeg HK e Malalasekera W 1995. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method*. Longman, Harlow.
- Virk PS 1975. Drag reduction fundamentals. *AIChEJ*, 21, 625-656.
- Vinokur M 1989. An analysis of finite-difference and finite-volume formulations of conservation laws. *J. Comp. Physics*, 81, 1- 52.
- Von Kármán Th 1912. Über den Mechanismus dem Widerstands, den ein bewegter Körper in einer Flüssigkeiten erfährt. *Göttingen Nachr. Math. Phys. Kl*, 12, 509.
- Vradis GC e Ötügen MV 1997. The axisymmetric sudden expansion flow of a non-Newtonian viscoplastic fluid. *J. Fluids Eng.*, 119, 193-200.
- Xue S-C, Phan- Thien N e Tanner RI 1995. Numerical study of secondary flows of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 59, 191-213.
- Xue S-C, Phan- Thien N e Tanner RI 1998a. Numerical investigations of Lagrangian unsteady extensional flows of viscoelastic fluids in 3-D rectangular ducts with sudden contractions. *Rheol. Acta.*, 37, 158-169.
- Xue S-C, Phan- Thien N e Tanner RI 1998b. Three dimensional numerical simulations of viscoelastic flows through planar contractions. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 74, 195-245.
- Xue S-C, Phan- Thien N e Tanner RI 2002. Upwinding with deferred correction (UPDC): an effective implementation of higher-order convection schemes for implicit finite volume methods. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 108, 1-24.
- Yesilata B, Öztekin A e Neti S 1999. Instabilities in viscoelastic flow through an axisymmetric sudden contraction. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 85, 35-62.
- Yoo JY e Na Y 1991. A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the SIMPLER algorithm. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 39, 89-106.
- Zana E, Tiefenbruck F e Leal LG 1975. A note on the creeping motion of a viscoelastic fluid past a sphere. *Rheol. Acta*, 14, 891-898.
- Zhou Q and Akhavan R 2003. A comparison of FENE and FENE-P dumbbell and chain models in turbulent flow. *J. Non-Newt. Fluid Mechanics*, 109, 115-155.
- Zinkiewicz OC 1977. *The Finite Element Method*. McGraw-Hill, New York.