

UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR

Faculdade de Engenharia

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELECTROMECHANICA



**Escoamentos de Fluidos Não Newtonianos
e Instabilidades Elásticas**

Dissertação apresentada com vista à obtenção do grau de Doutor em Engenharia
Mecânica pela Faculdade de Engenharia da Universidade da Beira Interior

Gerardo Imanuel de Nóbrega Rocha

Mestre em Engenharia de Sistemas de Controlo e Manutenção Industrial pela Universidade
da Beira Interior

Orientador: Professor Doutor Paulo Jorge dos Santos Pimentel de Oliveira
Departamento de Engenharia Electromecânica
Universidade da Beira Interior

Covilhã, Março de 2010

UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR
FACULDADE DE ENGENHARIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELECTROMECHANICA



Escoamentos de Fluidos Não Newtonianos e
Instabilidades Elásticas

ERRATA

Gerardo Imanuel de Nóbrega Rocha
(Mestre em Engenharia de Sistemas de Controlo e Manutenção Industrial pela
Universidade da Beira Interior)

Covilhã, Outubro de 2010

Errata

Página	Linha	Onde se lê	Deve ler-se
4	14	“... Computacional...”	“... Computational ...”
5	9	“... pontos próximos da fronteira.”	“... pontos sobre a fronteira.”
13	30	“... implementas.”	“... implementadas.”
22/23	34/1	“... mostraram claramente escoamento ...”	“... mostraram claramente que o escoamento ...”
104	6	“... em torno de cada ...”	“... sobre cada ...”
105	14	“... anulam-se ...”	“... igualam-se ...”
132	---	“ 5.5 – Algoritmo de solução”	“ 5.5 – Algoritmo de resolução “
160	13	“ No nosso caso ...”	“ Neste caso ...”
167	3/4	“...é fazer tender a diminuir ...”	“... tende a diminuir ...”
204	7	“... com elasticidade ...”	“... com a elasticidade...”
318	2	O comentário sobre “ maior mistura” com base na Fig. 11.16 é meramente qualitativo.	

Página	Tabela	Onde se lê	Deve ler-se
36	3.1	“Nº de variáveis de dependentes”	“Nº de variáveis dependentes”

Página	Equação	Incorrecto	Correcto
55	4.11	$\bar{\tau}_{xy} = \frac{(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\bar{\tau}_{xx}}{a}} \lambda \dot{\gamma}$	$\bar{\tau}_{xy} = \frac{a(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\bar{\tau}_{xx}}{a}} \lambda \dot{\gamma}$
301	11.5	A definição aqui adoptada para o número de Strouhal (Eq. (11.5)) é inversa da definição mais comum para este parâmetro.	

Página	Figura	Incorrecto	Correcto
190 257	7.2 9.3(b)		

Resumo

Título da tese: Escoamentos de fluidos não newtonianos e instabilidades elásticas

O tema desta tese é o estudo, através de simulações computacionais, de instabilidades estacionárias e não estacionárias que ocorrem a baixos números de Reynolds em escoamentos laminares de fluidos não newtonianos, e cuja origem pode ser apontada ao carácter viscoelástico dos fluidos. Para isso foram escolhidas duas geometrias de base que correspondem a escoamentos de características fundamentais, e que podem fazer parte, como módulos, de geometrias mais complexas encontradas na prática do processamento de polímeros ou em aplicações microfluídicas. Assim, foi estudado o escoamento laminar de fluidos newtonianos e viscoelásticos através de uma expansão plana com razão de expansão de 1 para 4, e o escoamento sem inércia ($Re = 0$) de um cruzamento de canais. As propriedades viscoelásticas dos fluidos foram definidas através da aplicação dos modelos constitutivos FENE-P, FENE-CR e FENE-MCR, todos baseados numa macromolécula com extensibilidade elástica finita e não-linear. As equações de governo foram resolvidas utilizando um algoritmo totalmente implícito, baseado no método dos volumes finitos, com a aplicação do esquema de alta resolução CUBISTA para a discretização dos termos convectivos das equações da tensão e da quantidade de movimento.

Para a geometria com expansão o interesse foi o de investigar o despoletar da bifurcação que conduz às duas soluções bidimensionais estacionárias, acima de um número de Reynolds crítico, com ocorrência de assimetria no padrão do escoamento, mas mantendo-se este em regime permanente. Apresenta-se um estudo sobre a influência do número de Reynolds ($0.01 \leq Re \leq 100$), do número de Weissenberg ($0 \leq We \leq 100$), da razão de viscosidade do solvente ($0.3 \leq \beta \leq 1.0$) e do parâmetro de extensibilidade ($100 \leq L^2 \leq 500$). Verificou-se que globalmente a elasticidade tende a estabilizar a assimetria do escoamento provocada por um efeito inercial de Coanda.

Para a geometria formada por um cruzamento de canais planos demonstrou-se que a viscoelasticidade conduz a uma bifurcação no padrão do escoamento sob condições perfeitamente simétricas. Uma vez que as simulações foram efectuadas desprezando-se efeitos inerciais ($Re = 0$) pôde concluir-se que a instabilidade prevista é de natureza puramente elástica. As configurações obtidas para o escoamento newtoniano e viscoelástico estão

qualitativamente de acordo com todas as observações experimentais muito recentes de Arratia *et al.* [15]. Foram feitas simulações para duas configurações geométricas: uma sem arredondamento dos cantos (cantos vivos) e outra com dois graus de arredondamento dos cantos, um ligeiro e outro mais intenso. Estendeu-se este estudo para uma geometria 3D de forma a avaliar os efeitos de natureza tridimensional presentes em aplicações de microfluídica, e analisou-se também a influência do efeito inercial no caso bidimensional, fazendo variar apenas o número de Reynolds. Foi ainda feito algum esforço no sentido de se conseguir explicar fisicamente a origem da instabilidade. Sabe-se, e constata-se das simulações, que neste arranjo geométrico se desenvolve na região central uma forte camada extensional que emana ao longo dos canais de saída e que poderia estar na origem do mecanismo que provoca a instabilidade observada quando o escoamento é viscoelástico. De forma a testar essa hipótese, concebeu-se uma geometria para limitar a extensão dessa camada fina com forte concentração de tensões normais, e que consiste num cruzamento de canais planos modificado (com duas entradas na horizontal e quatro saídas também na horizontal). Os resultados mostraram que a bifurcação estacionária continua a ocorrer, apesar das camadas de tensões terem um comprimento muito mais curto.

Por último, efectuou-se um estudo do escoamento viscoelástico em regime variável através do mesmo cruzamento de canais planos. Aplicou-se um escoamento periódico pulsante na entrada dos canais para definir as condições não estacionárias, com as velocidades nas duas entradas a encontrarem-se em fase. O interesse deste estudo foi de investigar a influência da pulsação sobre a estabilidade do escoamento, nomeadamente de saber se a assimetria que ocorre acima de um número de Débora crítico para o caso permanente se mantém quando a frequência de pulsação é variada. A motivação decorreu de um estudo recente (Phelan *et al.* [114]) onde se simulou a evolução de uma mistura caótica em dispositivos muito pequenos provocada por um escoamento oscilante desfasado. O estudo aqui apresentado pretende ser uma primeira tentativa para simular este fenómeno usando um líquido viscoelástico e velocidades à entrada em fase (criando um ponto de estagnação no centro da geometria).

Palavras-chave: Simulação numérica; Fluidos newtoniano e viscoelástico; Método dos volumes finitos; Expansão plana simétrica 1:4; Cruzamento de canais planos; Escoamento assimétrico; Instabilidades elásticas; Modelos FENE-P, FENE-CR e FENE-MCR; Escoamentos laminar e pulsante.

Abstract

Thesis title: Flows of Non-Newtonian fluids and elastic instabilities

The theme of this thesis is the study, by means of numerical simulations, of stationary and non-stationary flow instabilities generated when Non-Newtonian fluids flow at negligible or very low Reynolds numbers, under conditions for which the origin of the instability can be traced back to the elasticity of the fluid. With that purpose two flow geometries have been chosen, corresponding to fundamental flow configurations in which the kind of instabilities we envisage are prone to arise. Thus, the laminar flow of Newtonian and viscoelastic fluids through a planar sudden expansion and through a planar cross-slot geometry are studied in this thesis via computer simulations. Fluid viscoelasticity was represented by the FENE-P, FENE-CR and FENE-MCR constitutive models, which are based on the non-linear finite extensibility dumbbell model. The governing equations were solved using a fully-implicit finite volume numerical method with the high-resolution CUBISTA scheme applied for the discretization of the convective terms in the stress and momentum equations.

For the expansion geometry the interest is to investigate two-dimensional steady-state solutions where, above a critical Reynolds number, stable asymmetric flow states are known to occur. The thesis reports a systematic parametric investigation analyzing the influences of Reynolds number ($0.01 \leq Re \leq 100$), Weissenberg number ($0 \leq We \leq 100$), solvent viscosity ratio ($0.3 \leq \beta \leq 1.0$) and the extensibility parameter ($100 \leq L^2 \leq 500$). It was verified that overall the fluid elasticity tends to delay the inertial Coanda-type instability to higher Reynolds numbers.

For the planar cross-slot channel we demonstrate that viscoelastic flow through this geometry can lead to bifurcations under perfectly symmetric flow conditions. Since the simulations were carried out by omitting inertial effects ($Re = 0$) it is obvious to conclude that the predicted instability is purely elastic in nature. Results of the computations show that the Newtonian and viscoelastic flow patterns are in qualitative agreement with all the recent experimental observations of Arratia *et al.* [15]. Two different geometry configurations were considered: one without rounded corners (sharp-corners) and other situation with two cases having “slightly” and “markedly” rounded corners. This study was extended for a 3D geometry by considering the effect of the three-dimensional nature of the flow due to the

confining end walls, and in addition the influence of inertial effects was also analyzed in the two-dimensional flow case by varying only the Reynolds number.

Consideration was also given to devising a physical explanation for the observed bifurcation. In the cross-slot arrangement the straight narrow regions of strong planar extensional flow emanating vertically upwards and downwards from the slot centre (the “birefringence strands”) are often thought as playing an important role as a possible triggering mechanism for the instability observed when the flow is viscoelastic. In order to limit the extension of those birefringence strands a modified cross-slot geometry was devised, having two inlets and four outlets, so that previous hypothesis could be checked. In this study the inlet boundary conditions were the same applied to the standard cross-slot problem.

Finally, the flow configuration was generalized and the unsteady problem of a viscoelastic fluid flowing through a 2D cross-slot channel was addressed. Unsteadiness was generated by a pulsating incoming flow imposed at the cross-slot entrances and the interest was to investigate the effect of flow pulsation upon the bifurcated asymmetric pattern that occurs above a critical Deborah number. It has been recently shown (Phelan *et al.* [114]) that chaotic mixing in microfluidic devices may result from such oscillatory flows and the present work is a first attempt to simulate this phenomenon for a viscoelastic liquid. In the present case the velocities imposed at the two inlets pulsate in phase and the study encompassed the influence of pulsation period in phase and the ratio of oscillatory to stationary pressure gradient. Recirculation eddies were found to be formed in the cross-slot center during part of the period of oscillation for particular combinations of the controlling parameters (frequency, pressure gradient ratio).

Keywords: Numerical simulation; Newtonian and viscoelastic fluids; Finite volume method; Planar symmetric expansion; 2D and 3D Cross-slot; Asymmetric flow; Elastic instabilities; FENE-P, FENE-CR and FENE-MCR models; Laminar and pulsating flows.

Agradecimentos

Ao terminar esta tese de doutoramento resta-me registar os meus sinceros agradecimentos a um conjunto de pessoas e entidades que, de várias formas, contribuíram para que este percurso não fosse feito de forma solitária e individual, mas que reunisse um conjunto agregador de esforços que, indubitavelmente, se afirmaram como pilares na construção deste trabalho.

Em primeiro lugar, gostaria de agradecer ao Professor Doutor Paulo Jorge dos Santos Pimentel de Oliveira, meu orientador científico, o sólido apoio, a partilha do saber e as valiosas e inestimáveis contribuições para este trabalho. A sua inteira disponibilidade e o incessante acompanhamento foram uma mais-valia e um grande exemplo a seguir ao longo do meu percurso académico.

À Universidade da Beira Interior, em particular ao Departamento de Engenharia Electromecânica, gostaria de agradecer os recursos que me foram disponibilizados, nomeadamente o local onde tive oportunidade de desenvolver este trabalho.

À minha namorada Alexandra pelo seu sorriso, pelo amor dedicado, compreensão e por tudo o que representa para mim.

Quero deixar um especial agradecimento aos meus pais e aos meus irmãos por terem acreditado sempre em mim, pelo apoio incondicional que sempre me deram e pelo grande incentivo na prossecução dos meus estudos ao longo da vida. Ao longo deste trajecto, a minha família foi sempre o meu porto seguro.

A todos os meus amigos quero deixar uma palavra de reconhecimento pelo apoio e incentivo inabaláveis.

Por último, quero agradecer a Fundação para a Ciência e a Tecnologia pela concessão da bolsa de investigação com a referência SFRH/BD/22644/2005, financiada pelo POPH/FSE. Sem este apoio o trabalho não teria sido viável. A FCT financiou ainda, parcialmente, este trabalho através do projecto PTDC/EME-MFE/70186/2006.

A todos, o meu profundo e sincero agradecimento.

Índice

Lista de símbolos	<i>xi</i>
Capítulo 1	1
Introdução	
1.1 – Enquadramento e motivação	2
1.1.1 – Motivação. Problemas concretos em estudo	2
1.1.2 – A dinâmica de fluidos computacional	3
1.1.3 – Métodos e programas computacionais de partida	5
1.2 – Comportamentos reológicos	6
1.2.1 – Fluido newtoniano	7
1.2.2 – Fluido não newtoniano	8
1.3 – Definição dos objectivos	11
1.4 – Organização e estrutura da tese	13
Capítulo 2	15
Revisão bibliográfica	
2.1 – Introdução	16
2.2 – Escoamento numa expansão plana	19
2.2.1 – Descrição do problema	19
2.2.2 – Trabalhos realizados	21
2.3 – Escoamento numa intersecção de canais planos	25
2.3.1 – Descrição do problema	25
2.3.2 – Trabalhos realizados	26
2.4 – Modelos reológicos	28
2.5 – Método de cálculo numérico	31
Capítulo 3	33
Equações matemáticas	
3.1 – Equações de conservação	34
3.2 – Equações constitutivas	36
3.2.1 – Modelo hookeano	37
3.2.2 – Modelo não-hookeano (modelo FENE)	39
3.2.2.1 – Modelo FENE-P	41
3.2.2.2 – Modelo FENE-CR	45
3.2.2.3 – Modelo FENE-MCR	46
3.3 – Adimensionalização das equações de governo	46
3.4 – Parâmetros adimensionais	48

Capítulo 4	51
Funções materiais dos modelos viscoelásticos	
4.1 – Funções materiais em escoamento estacionário	52
4.1.1 – Escoamento de corte simples	52
4.1.1.1 – Modelo FENE-P	53
4.1.1.2 – Modelo FENE-CR (ou FENE-MCR)	58
4.1.2 – Escoamento extensional (ou elongacional)	62
4.1.2.1 – Modelo newtoniano	63
4.1.2.2 – Modelo FENE-P	64
4.1.2.3 – Modelo FENE-CR (ou FENE-MCR)	67
4.2 – Funções materiais em escoamento simples não estacionário	70
4.2.1 – Escoamento transitório de corte simples	71
4.2.1.1 – Modelo FENE-MCR	72
4.2.1.2 – Modelo FENE-CR	78
4.2.1.3 – Modelo FENE-P	83
4.2.1.4 – Comparação entre os modelos FENE-MCR, -CR e -P	86
4.2.2 – Escoamento transitório extensional uniaxial	89
4.2.2.1 – Modelo FENE-MCR	90
4.2.2.2 – Modelo FENE-CR	93
4.2.2.3 – Modelo FENE-P	96
4.2.2.4 – Comparação entre os modelos FENE-MCR, -CR e -P	99
Capítulo 5	103
Método numérico	
5.1 – Introdução	104
5.1.1 – Coordenadas cartesianas	104
5.1.2 – Transformação de coordenadas	107
5.1.3 – Coordenadas não ortogonais generalizadas	109
5.2 – Discretização das equações	111
5.2.1 – Equação de conservação da massa	113
5.2.2 – Equação de conservação da quantidade de movimento	114
5.2.2.1 – Agrupamento final da equação da quantidade de movimento discretizada	120
5.2.3 – Equação constitutiva	122
5.2.3.1 – Agrupamento final da equação constitutiva geral discretizada	124
5.3 – Cálculo da velocidade e tensões nas faces do volume de controlo	125
5.4 – Esquema de alta resolução para o termo convectivo: CUBISTA	129
5.5 – Algoritmo de solução	132
5.6 – Condições de fronteira	137
5.7 – Validação do modelo FENE-P	138
Capítulo 6	149
Fenómeno da bifurcação em escoamentos viscoelásticos através de uma expansão simétrica 1:4	
6.1 – Introdução	150
6.2 – Descrição do problema	151
6.3 – Resultados	153

6.3.1 – Resultados para o caso newtoniano (validação)	158
6.3.2 – Resultados para o caso viscoelástico	165
6.3.2.1 – Efeito devido à elasticidade, We	165
6.3.2.2 – Efeito devido à concentração do solvente, β	172
6.3.2.3 – Efeito devido à extensibilidade, L^2	175
6.3.2.4 – Efeito devido à inércia, Re	176
6.4 – Conclusões	186
Capítulo 7	187
Efeitos de extensibilidade na bifurcação do escoamento através da junção de dois canais planos	
7.1 – Introdução	188
7.2 – Descrição do problema	188
7.3 – Resultados	192
7.3.1 – Efeitos devido ao parâmetro de extensibilidade, L^2	193
7.3.2 – Efeitos devido à concentração polimérica	202
7.3.3 – Efeitos devidos ao arredondamento dos cantos: $R = 0.05d$ e $0.5d$	208
7.3.4 – Efeitos devido ao modelo viscoelástico: FENE-CR e FENE-P	220
7.3.5 – Energia dissipada	226
7.4 – Conclusões	235
Capítulo 8	237
Escoamento tridimensional através da junção de dois canais planos	
8.1 – Introdução	238
8.2 – Descrição do problema	239
8.3 – Validação preliminar	241
8.4 – Malha e refinamento de malha	243
8.5 – Resultados	245
8.6 – Conclusões	251
Capítulo 9	253
Escoamento de fluido newtoniano através da junção de dois canais planos: Estudo do efeito de inércia	
9.1 – Introdução	254
9.2 – Descrição do problema	255
9.3 – Resultados	258
9.3.1 – Vórtice e linhas de corrente	258
9.3.2 – Pressão e coeficiente de perda	269
9.4 – Conclusões	276
Capítulo 10	277
Bifurcação elástica num cruzamento de canais planos modificado com quatro saídas	
10.1 – Introdução	278
10.2 – Descrição do problema	279

10.3 – Estudo de refinamento de malha	282
10.4 – Resultados	283
10.4.1 – Efeitos devido ao parâmetro de elasticidade, De	283
10.4.2 – Efeitos devido à extensibilidade, L^2	292
10.5 – Conclusões	295

Capítulo 11 **297**

Estudo do escoamento pulsante laminar através de um cruzamento de canais planos

11.1 – Introdução	298
11.2 – Descrição do problema	299
11.3 – Resultados	302
11.3.1 – Influência do período de oscilação, T	314
11.3.2 – Influência do parâmetro oscilatório, AK	318
11.3.3 – Influência do efeito de inércia, Re	322
11.3.4 – Influência do parâmetro de extensibilidade, L^2	326
11.3.5 – Influência da elasticidade, De	329
11.3.6 – Condições puramente oscilatórias	332
11.4 – Conclusões	335

Capítulo 12 **337**

Conclusões e sugestões para trabalho futuro

12.1 – Conclusões	338
12.2 – Sugestões para trabalho futuro	342

Referências bibliográficas **343**

Lista de símbolos

a	Parâmetro adicional do modelo FENE-P (Cap. 3); parâmetro das Eqs. (8.1)-(8.5); espessura das paredes do canal de entrada (Cap. 10)
A	Magnitude da bifurcação (Eq. (7.1)); área da secção rectangular (Cap. 8)
\mathbf{A}	Tensor adimensional utilizado no modelo FENE
a_F	Coefficiente das equações na forma discretizada
a_P	Coefficiente central das equações na forma discretizada
AK	Parâmetro adimensional oscilatório ($= K_0/K_e$)
AR	Razão de aspecto ($= H/d$)
a_1, a_2, a_3	Coefficientes da Eq. (4.5); coefficients da Eq. (5.68)
b	Face na direcção “a baixo” da célula P
b	Parâmetro elongacional dos modelos FENE (Cap. 3); parâmetro adicional da Eq. (5.16); coefficient da Eq. (5.86); parâmetro das Eqs. (8.1)-(8.5); espaçamento central dos canais de entrada (Cap. 10)
b_1, b_2	Coefficientes da Eq. (4.7)
B	Célula na direcção “a baixo” da célula P
\mathbf{B}	Área da superfície
c	Concentração do polímero
C	Correcção de Couette
d	Altura do canal de entrada; semi-altura do canal de entrada (Cap. 5)
D	Altura do canal de saída (Cap. 6); coefficient da Eq. (5.87)
\mathbf{D}	Tensor velocidade de deformação
De	Número de Débora
De'	Número de Débora modificado ($= De/\Theta$)
D_f	Condutância difusiva na face f
$D_{0,f}$	Condutância difusiva artificial da mistura polimérica na face f
DQ	Parâmetro adimensional de bifurcação do escoamento
DX	Parâmetro do tamanho da bifurcação do vórtice assimétrico
DY	Parâmetro do tamanho da bifurcação do vórtice assimétrico
e	Face na direcção “a este” da célula P
e	Termo de contribuição isotrópica extra do modelo FENE-P
E	Célula na direcção “a este” da célula P
E	Erro temporal (Cap. 4); número de elasticidade ($= We/Re$ ou De/Re)
ER	Razão de expansão ($= D/d$)
f	Função de extensibilidade dos modelos FENE; factor de expansão ou compressão das células; declive do decréscimo da pressão ($= 12/Re$); frequência (Cap. 11)
F	Índice da célula vizinha relativamente a célula genérica P, segundo a direcção f ; Caudal mássico
F	Força tangencial aplicada na placa superior no escoamento de corte simples
$F^{(c)}$	Força de conexão da mola
ff	Índice da face da segunda célula vizinha relativamente a célula genérica ‘P’, segundo a direcção f

FF	Índice da segunda célula vizinha relativamente a célula genérica P, segundo a direcção f
f_x, f_y	Quociente da dimensão de células consecutivas segundo a direcção x e y
h	Semi-altura do canal de entrada ($= d/2$)
H	Constante da mola (Cap. 3); altura entre placas no escoamento de corte simples (Cap. 4); altura do canal (Cap. 5); comprimento de profundidade (Cap. 8)
$H()$	Operador representativo da influência das células vizinhas relativamente a célula P
I	Matriz unitária (ou identidade)
J	Matriz Jacobiana
J	Cofactor da matriz Jacobiana ($= \det(\mathbf{J})$)
k	Constante de Boltzmann (Cap. 3); parâmetro que controla o tipo de esquema de interpolação (Cap. 5)
K_e, K_o	Amplitude estacionária e oscilatória
L	Comprimento do canal
L_1, L_2	Comprimentos dos canais de entrada e saída da expansão plana
L^2	Parâmetro de extensibilidade dos modelos FENE
n	Face na direcção “a norte” da célula P
n	Número de moléculas poliméricas por unidade de volume
N	Célula na direcção “a norte” da célula P
N	Número total de passos no tempo (Cap. 4); número inteiro limite do somatório (Cap. 8)
N_1	Primeira diferença de tensões normais
N_2	Segunda diferença de tensões normais
N_x, N_y	Número de volumes de controlo segundo a direcção x e y
p	Pressão
p'	Correcção de pressão
P	Índice de célula genérica
Q	Comprimento de estiramento da mola (Cap. 3); caudal volúmico
\mathbf{Q}	Vector de ligação entre as esferas do modelo “dumbbell”
Q_e	Comprimento médio entre as esferas do modelo “dumbbell”
Q_0	Comprimento máximo de estiramento da mola
Q_1, Q_2	Fluxos que saem pelos canais superior e inferior (cruzamento de canais)
r	Coefficiente de correlação linear
R	Raio de curvatura
Re	Número de Reynolds
s	Face na direcção “a sul” da célula P
S	Célula na direcção “a sul” da célula P
S	Termo fonte das equações discretizadas
St	Número de Strouhal
$tr()$	Operador traço
t	Face na direcção “a topo” da célula P
t	Tempo
T	Célula na direcção “a topo” da célula P
T	Temperatura (Cap. 3); período (Cap. 11)
TOL	Tolerância de convergência
T_R	Número de Trouton
\mathbf{u}	Vector velocidade
u, v, w	Componentes do vector velocidade segundo as coordenadas x, y e z
u_i	Coordenada cartesiana da velocidade segundo a direcção i

$\hat{u}_{i,f}$	Componente i , da velocidade na face f estimada por interpolação especial, referente aos termos convectivos
$\tilde{u}_{j,f}$	Componente j , da velocidade na face f estimada por uma interpolação especial
U, U_2	Velocidade média no canal de entrada e saída
U_0	Velocidade máxima no canal de entrada
U_1	Velocidade máxima na placa superior do escoamento de Couette (Cap. 4); velocidade média no canal de entrada da expansão plana (Cap. 6)
U_{3D}	Velocidade média do canal plano tridimensional
V	Volume genérico de uma célula
w	Face na direcção “a oeste” da célula P
w	Factor de interpolação (Eqs. (5.49) e (5.50))
W	Célula na direcção “a oeste” da célula P
We	Número de Weissenberg
We'	Número de Weissenberg modificado ($= (1 - \beta) We$)
x, y, z	Coordenadas cartesianas
X	Gradiente de pressão adimensional
x_c	Posição longitudinal do vórtice central (Cap. 6); posição axial do vórtice central na parede do canal de saída (Cap. 9)
x_c	Posição central do ponto de estagnação (Cap. 9)
X_c	Posição longitudinal adimensional do vórtice central ($= x_c/D$); posição axial adimensional do vórtice no canal de saída ($= x_c/d$, Cap. 9)
x_i	Coordenada cartesiana segundo a direcção i
x_r	Comprimento de recirculação
X_r	Comprimento adimensional de recirculação ($= x_r/d$)
y_c	Posição axial do vórtice central (Cap. 6); posição longitudinal do vórtice no canal de saída (Cap. 9)
y_c	Posição central do ponto de estagnação
Y_c	Posição axial adimensional do vórtice central ($= y_c/D$); posição longitudinal adimensional do vórtice no canal de saída ($= y_c/d$, Cap. 9)
$y_{r1}, y_{r2}, y_{r3}, y_{r4}$	Tamanho dos vórtices formados nas paredes dos canais de saída da geometria em forma de cruz
$Y_{r1}, Y_{r2}, Y_{r3}, Y_{r4}$	Tamanhos adimensionais dos vórtices formados nas paredes dos canais de saída da geometria em forma de cruz ($= y_r/d$)
Z	Função de extensibilidade dos modelos FENE (subsecção 3.2.2.1)

Índices superiores

C	Coeficiente da parte convectiva
D	Coeficiente da parte difusiva
f	Na face f
n	Contador de iterações/passos de integração temporal
P	Célula genérica
T	Transposta
$+$	Índice para tempos positivos (Cap. 4); Índice para a face positiva
$-$	Índice para a face negativa
—	Variável adimensional; média aritmética
\bullet	Derivada temporal nas tensões

∇	Índice da derivada superior de Oldroyd
** , *	Passos intermédios do algoritmo (Secção 5.5)
\sim, \wedge	Interpolações especiais
τ	Índice do coeficiente das equações na forma discretizada para a equação constitutiva

Índices inferiores

cr, cr2	Condições críticas (regime estacionário)
cr1	Condições críticas (regime não estacionário, Cap. 7 e Cap. 8)
D	<i>Downstream</i> (volume de controlo a jusante, Cap. 5)
e	Estacionário
eq	Equilíbrio
f	Na face f
\hat{f}	Segundo a direcção da face f
F	Célula vizinha da célula P segundo a direcção \hat{f}
FD	Completamente desenvolvido (<i>Fully Developed</i>)
i, j, k	Índices de coordenadas cartesianas (x_i)
l, m, n	Índices de coordenadas generalizadas (ξ_i)
max	Máximo
med	Médio
min	Mínimo
o	Oscilante
p	Soluto polimérico
P	Célula genérica
rec	Recirculação
s	Solvente newtoniano
tot	Total
U	<i>Upstream</i> (volume de controlo a montante, Cap. 5)
w	Parede
0	Condições estacionárias
1, 2	Índice correspondente a parede inferior e superior após a expansão (Cap. 6)
3D	Tridimensional

Símbolos gregos

α	Número de Womersley ou Stokes
β	Razão de viscosidades do solvente
β_{ij}	Cofactor da matriz Jacobiana
γ	Deformação
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação
Γ	Coefficiente de difusão
δ_{ij}	Tensor unitário (componente ij)

Δt	Passo de integração temporal
Δp	Diferença de pressão
Δp_{FD}	Diferença de pressão para canal plano completamente desenvolvido
Δx_{\min}	Tamanho mínimo das células segundo x
Δy_{\min}	Tamanho mínimo das células segundo y
Δz_{\min}	Tamanho mínimo das células segundo z
$\dot{\epsilon}$	Taxa de deformação extensional
Φ, ϕ	Variável genérica
η, μ	Viscosidade (de corte)
η_E	Viscosidade extensional (ou elongacional)
η_{E_p}	Viscosidade extensional da mistura polimérica
η_p	Viscosidade do polímero
$\eta_{p,ef}$	Coefficiente de viscosidade polimérica efectiva ($= \eta_p / f$)
η_s	Viscosidade do solvente (newtoniano)
η_0	Viscosidade total da mistura polimérica (newtoniano + polimérico)
Θ	Espaçamento central adimensional ($= b/d$)
λ	Tempo de relaxação do fluido
λ_0	Tempo de relaxação do modelo de Maxwell
λ_{ef}	Tempo de relaxação efectivo ($= \lambda / f$)
Λ	Espessura adimensional das paredes do canal de entrada ($= a/d$)
ρ	Massa volúmica
ξ_l	Sistema generalizado de coordenadas não ortogonais
ζ	Coefficiente de atrito de Stokes
$\tilde{\tau}_{ij,f}$	Componentes i, j da tensão na face f , estimada por interpolação especial
$\hat{\tau}_{ij,f}$	Componentes i, j da tensão na face f , estimada por interpolação especial - referente ao termo convectivo
τ_{tot}	Tensor das tensões totais
τ_s	Tensor das tensões do solvente (newtoniano)
τ	Tensor das tensões do polímero; Tensor das tensões
$\tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}$	Tensões de corte
$\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{zz}$	Tensões normais
τ_{kk}	Traço do tensor das tensões
Ψ_c	Função de corrente no centro do cruzamento dos canais
Ψ_r	Intensidade de recirculação
Ψ_r	Intensidade normalizada de recirculação ($= \Psi_r / Ud$)
Ψ_1	Coefficiente da primeira diferença de tensões normais
Ψ_2	Coefficiente da segunda diferença de tensões normais
ω	Frequência angular do gradiente de pressão oscilante

Abreviaturas

CFD	Dinâmica de fluidos computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
CPU	<i>Central Processing Unit</i>
CUBISTA	<i>Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection</i>
DOF	Graus de Liberdade (Degrees Of Freedom)
DPL	<i>Dynamics of Polymeric Liquids</i>
FENE	<i>Finite Extensible Nonlinear Elastic</i>
FENE-P	<i>Finite Extensible Nonlinear Elastic - Peterlin</i>
FENE-CR	<i>Finite Extensible Nonlinear Elastic – Chilcott and Rallison</i>
FENE-MCR	<i>Finite Extensible Nonlinear Elastic – Modified Chilcott and Rallison</i>
GNF	<i>Generalised Newtonian Fluid</i> (Fluido newtoniano generalizado)
HRS	<i>High-Resolution Scheme</i>
MVF	Método dos Volumes Finitos
NVC	Número de Volumes de Controlo
NVA	<i>Normalized Variable Approach</i>
NVSF	<i>Normalized Variable and Space Formulation</i>
PTT	<i>Phan-Thien & Tanner</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
SIMPLEC	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations – Consistent</i>
SIMPLER	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations – Revised</i>
SMART	<i>Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport</i>
UCM	<i>Upper Convected Maxwell</i>
UDS	Esquema de diferenças de montante de 1 ^a ordem (<i>Upwind Differencing Scheme</i>)
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
3NT	Método de três níveis no tempo

Capítulo 1

Introdução

Neste primeiro capítulo começa-se por fazer uma breve apresentação do trabalho do ponto de vista científico, no que diz respeito ao seu enquadramento e importância no estudo de certos fenómenos que ocorrem em escoamento de fluidos, indicando-se também as motivações que levaram à sua realização. Posteriormente, descreve-se o comportamento reológico dos fluidos, apresentando-se o conceito de fluido newtoniano e não newtoniano. Por último, destacam-se os principais objectivos que nortearam este trabalho e finaliza-se com uma descrição geral da sua estrutura, apresentando-se uma breve explicação de cada capítulo.

1.1 – Enquadramento e motivação

1.1.1 – Motivação. Problemas concretos em estudo

Esta tese aborda o estudo de escoamentos estacionários e não estacionários de fluidos complexos, nomeadamente com características não newtonianas como seja a da viscoelasticidade, em regime laminar e em situações propícias à ocorrência de instabilidades. Este estudo é feito com base em simulações computacionais usando o método dos volumes finitos.

As instabilidades do tipo elástico são fenómenos que ocorrem em inúmeros escoamentos com interesse industrial importante, nomeadamente em operações de processamento de polímeros, como a extrusão, a produção de fibras, a moldagem por sopro, a mistura de pastas e de soluções, entre outras. Este tipo de instabilidades é observado, na maior parte das vezes, em condições de número de Reynolds muito baixo, tipicamente em situações onde o escoamento newtoniano correspondente seria estável. Por isso, são conotadas especificamente com as características viscoelásticas do fluido em consideração (daí a designação “instabilidades elásticas”). Do ponto de vista da engenharia é claramente importante conhecer as condições de parâmetros para as quais essas instabilidades não podem ser evitadas. De facto, o que se observa é que para valores elevados da taxa de produção de um determinado material polimérico, medida pelo caudal volumétrico, existem instabilidades e os produtos finais apresentam imperfeições não admissíveis e que deveriam ser evitadas. Como exemplo tem-se o caso da pele de tubarão (*sharkskin*, do inglês) e que está associado a um defeito superficial; caracterizado pela existência de pequenas fracturas na superfície do fundido.

Nos últimos anos (1999-presente) tem surgido uma crescente actividade internacional de investigação, sobretudo do ponto de vista experimental, que aborda o problema das instabilidades elásticas em escoamentos através de contracções ou expansões abruptas. Apesar destas configurações de escoamento serem bastante simples do ponto de vista geométrico, são adequadas para estudar o tipo de situação que ocorre em processos de extrusão e noutras operações de processamento de polímeros. No que se refere à simulação numérica de escoamentos não newtonianos com propriedades viscoelásticas através de expansões planas não há muitos trabalhos publicados. A maior parte dos estudos que se podem encontrar sobre expansões empregam apenas fluidos newtonianos. Assim sendo, a motivação deste trabalho

proveio da escassez de informação que se possa encontrar na literatura especializada sobre o escoamento viscoelástico em expansões planas, nomeadamente para números de Reynolds moderados quando é sabido que o correspondente escoamento newtoniano bifurca.

Aliado a isso, surgiram recentemente dois trabalhos (um experimental (Arratia *et al.* [15]) e outro numérico (Poole *et al.* [118])) que despertaram interesse no estudo do escoamento através da junção de dois canais planos (*cross-slot flow*, segundo a designação anglo-saxónica) e que serviram também de estímulo para este trabalho. Verificou-se que essa configuração de escoamento também conduz a uma bifurcação, mas as causas e parâmetros que afectam essa instabilidade eram desconhecidas, tendo sido necessário fazer um estudo exaustivo de todos os possíveis factores relevantes. Este tipo de situação tem grande interesse em aplicações de microfluídica, por exemplo como técnica para descodificar o ADN ou em aplicações de nanotecnologia tão em voga actualmente.

1.1.2 – A dinâmica de fluidos computacional

O estudo do movimento de fluidos é complexo e em muitos problemas de engenharia ou científicos recorre-se, normalmente, a um de dois métodos de previsão: experimental ou teórico/numérico. Ambos estes métodos permitem obter uma descrição e explicação dos fenómenos que estão presentes no problema físico em estudo, mas existem algumas diferenças relevantes entre os dois. A utilização da investigação experimental é a mais fiável na obtenção do conhecimento de um determinado processo físico novo, uma vez que é obtida geralmente através de medições directas. Contudo, podem surgir algumas dificuldades na obtenção de resultados, tais como: problemas em efectuar medições à escala real; dificuldades em extrapolar medições em protótipos reduzidos e transpô-los para a sua escala normal, uma vez que não é garantido que todos os parâmetros adimensionais se mantenham iguais; erros inerentes às medições; etc. Além disso, há que salientar o custo inerente e o tempo de montagem experimental que lhe está associado, bem como a calibração cuidada necessária no uso de equipamentos para a obtenção de uma boa precisão nos resultados experimentais. Uma alternativa para contornar as limitações inerentes aos ensaios experimentais é fornecida pela simulação computacional, onde se aplicam métodos numéricos para resolver as equações que regem a mecânica dos fluidos. O avanço dos computadores para o cálculo numérico veio permitir a simulação de problemas complexos, proporcionando assim uma maior aplicabilidade deste tipo de estudo. Isto diminui os custos e viabiliza a pesquisa nesta área.

A simulação numérica é, geralmente, mais conveniente para estudar problemas envolvendo o escoamento de fluidos, devido a facilidade de armazenamento de informações e a facilidade de esclarecer diversos processos físicos. A utilização de métodos numéricos não vem pôr de parte a mecânica de fluidos experimental, nem as análises teóricas. De facto, deve considerar-se que estas três abordagens de investigação são complementares. No entanto, os métodos numéricos apresentam também algumas limitações, sobretudo no que diz respeito a validação do modelo matemático/físico que se pretende resolver e o controlo dos erros de discretização inerentes aos métodos. No primeiro aspecto existem problemas para os quais não se dispõem, ainda, de modelos matemáticos totalmente adequados como, por exemplo, certos escoamentos de fluidos não newtonianos complexos, escoamentos bifásicos, etc. Assim, tem-se de recorrer aos dados experimentais para a validação e encontrar o modelo matemático que mais se ajuste ao problema físico.

A simulação numérica de escoamentos de fluidos é uma actividade inserida na área da dinâmica de fluidos computacional (sigla CFD, designação inglesa de *Computational Fluid Dynamics*). A dinâmica de fluidos computacional é um ramo da mecânica de fluidos que utiliza métodos e algoritmos numéricos para a simulação de fenómenos que envolvem fluidos em movimento e aplica-os em problemas concretos da física e da engenharia. A utilização de códigos numéricos na resolução de problemas em CFD (ver, por exemplo, Patankar [107] ou Ferziger & Perić [49] como livros de texto básicos) tem tido um crescimento significativo incluindo a simulação de escoamentos viscoelásticos. Desta forma, o objectivo básico do CFD é reduzir o número de ensaios experimentais e explorar fenómenos que não poderiam ser estudados em laboratórios de forma prática. Utilizando as técnicas do CFD, pode avaliar-se numericamente o efeito dos vários parâmetros inerentes a um problema de estudo. Estes podem ser facilmente alterados até que o resultado da simulação atenda às exigências do projecto, no caso de um problema de engenharia. Tudo isto de uma forma bem mais conveniente e a custos e tempos menores do que apenas utilizando técnicas experimentais. As análises teóricas, por outro lado, são muito difíceis, senão impossíveis, de realizar em problemas complexos. Na Figura 1.1 listam-se as etapas necessárias para a obtenção da solução numérica de um problema de dinâmica de fluidos.

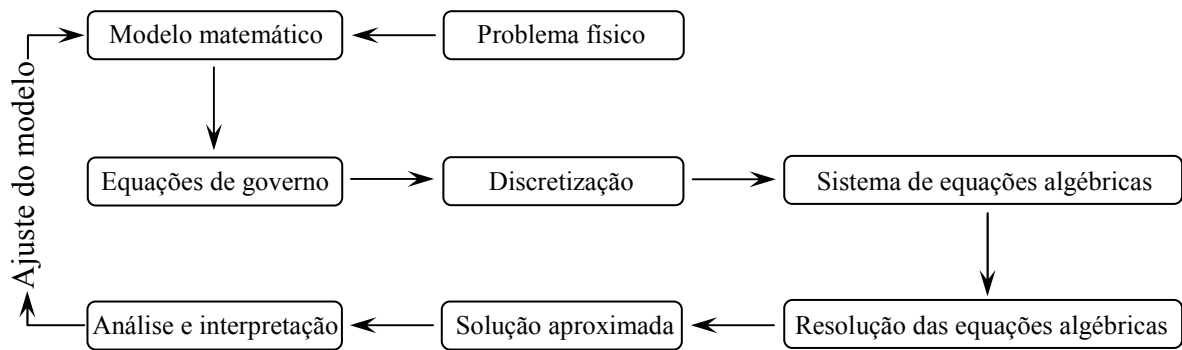


Figura 1.1 – Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema de dinâmica de fluidos. Reprodução de acordo com De Souza *et al.* [40].

Para tratar o modelo computacional é necessário discretizar, de forma adequada, as equações e o domínio onde o escoamento se processa. A correcta e precisa distribuição dos pontos do domínio de cálculo é fundamental para se obter uma solução numérica representativa do escoamento. Posteriormente, os termos que aparecem nas equações são escritos em função dos valores das incógnitas em pontos discretos adjacentes (ou pontos vizinhos) que definem a malha computacional (ver, como exemplo, Fig. 5.2). O resultado da discretização consiste num conjunto de vários sistemas de equações algébricas, que podem ou não estar acoplados. Nessa etapa introduzem-se as condições de fronteira do problema, normalmente modificando-se as equações para pontos próximos da fronteira. As condições de fronteira, juntamente com as condições iniciais, as propriedades físicas do fluido e os parâmetros de escoamento descrevem o problema em estudo. E, por fim, as equações algébricas são resolvidas, fornecendo a solução do problema. Esta deve, nesse momento, ser verificada e validada por comparação com resultados experimentais ou soluções analíticas, de forma a poder ter-se uma ideia quantitativa da precisão numérica conseguida.

1.1.3 – Métodos e programas computacionais de partida

O método de discretização aqui seguido foi o método dos volumes finitos, uma vez que o trabalho vem no seguimento de estudos anteriores que adoptaram, desde logo, esse método devido à simplicidade e eficácia comparativamente a outros métodos de discretização. Os cálculos numéricos apresentados neste trabalho foram efectuados tendo como base um código computacional já existente programado em linguagem FORTRAN®. Este código foi

sendo posteriormente modificado para se adaptar às necessidades da investigação. O programa de simulação é constituído por três componentes principais:

- **Pré-processamento:** Foi utilizado o código computacional “mesh3d” que serviu para gerar as malhas computacionais. As malhas utilizadas foram bi- ou tridimensionais e caracterizaram-se por serem malhas estruturadas por blocos.
- **Programa principal:** Foi usado o código “mmenn1” (manual para a versão newtoniana por Oliveira & Miranda [100]). Este código permite resolver as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, juntamente com as equações constitutivas que regulam o comportamento do material. Este programa de simulação é adequado ao tratamento do escoamento de fluidos newtonianos e não newtonianos elásticos em regime laminar estacionário e não estacionário.
- **Pós-processamento:** Nesta fase utilizou-se programas comerciais (Tecplot® e Grapher®) que serviram para a representação gráfica dos resultados obtidos.

1.2 – Comportamentos reológicos

Uma vez que o estudo do comportamento dos fluidos não newtonianos não é ainda comum a nível de licenciatura e mestrados em cursos de engenharia, faz-se nesta secção uma resenha de alguns aspectos fundamentais para a compreensão da tese. Os fluidos são materiais que se deformam continuamente quando submetidos a um estado de tensão de corte. Essa deformação é caracterizada pelo deslizamento de camadas infinitamente próximas e, enquanto o fluido estiver a ser solicitado, a deformação vai crescendo intensamente. Por isso é que se utiliza, quase sempre, a velocidade de deformação (taxa de deformação ou taxa de corte) como parâmetro para qualificar o estado de deformação de um fluido. Quando este se encontra em movimento gera uma resistência à deformação, que está relacionada com a viscosidade de corte (atrito interno). A viscosidade de corte (ou viscosimétrica) é considerada uma propriedade reológica importante de qualquer material e quantifica a resistência que um fluido oferece ao escoamento. Esta propriedade reológica pode depender da temperatura,

pressão, velocidade de deformação (ou taxa de deformação) e do tempo (duração da deformação imposta ao escoamento).

As características reológicas presentes num fluido não newtoniano são descritas matematicamente através de uma equação de estado (constitutiva) que define o fluido. Esta equação relaciona o campo de tensões com os campos de deformação e taxa de deformação. De acordo com o comportamento reológico os fluidos podem ser classificados em dois tipos:

- fluidos newtonianos;
- fluidos não newtonianos.

Na Figura 1.2 apresenta-se um diagrama com a classificação geral dos fluidos segundo o seu comportamento reológico e que serão descritos de seguida.

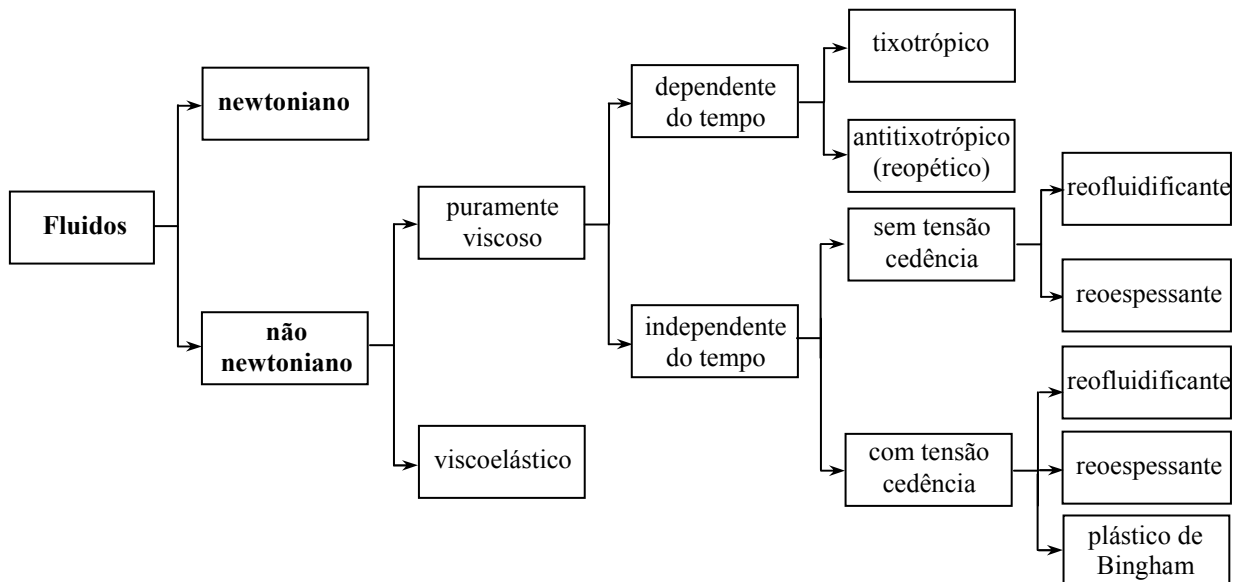


Figura 1.2 – Classificação dos fluidos segundo o seu comportamento reológico.

1.2.1 – Fluido newtoniano

O fluido newtoniano caracteriza-se por apresentar uma viscosidade de corte constante independentemente da velocidade de deformação (ou taxa de deformação) a que é submetido para uma determinada temperatura. A função material que caracteriza estes fluidos é a viscosidade. Este fluido é regido por uma equação de estado constitutiva reológica definida pela lei de Newton da viscosidade, onde o tensor das tensões é directamente proporcional à taxa de deformação.

1.2.2 – Fluido não newtoniano

Os fluidos designados por não newtonianos, como o próprio nome indica, não são regidos pela lei de Newton da viscosidade, ou seja, não se verifica uma relação linear directa entre o tensor das tensões e a taxa de deformação aplicada, como no caso do fluido newtoniano atrás descrito. Estes fluidos necessitam de equações constitutivas mais elaboradas para descrever o seu comportamento reológico.

Os fluidos não newtonianos dividem-se em duas classes:

- fluidos puramente viscosos ou inelásticos;
- fluidos viscoelásticos.

Os fluidos puramente viscosos ou inelásticos não apresentam qualquer tipo de comportamento elástico, sendo incapazes de armazenar energia de forma elástica como no caso dos fluidos viscoelásticos (efeito “memória”). Este tipo de fluidos pode ser caracterizado quanto à dependência do seu comportamento relativamente ao tempo como:

- fluidos dependentes do tempo;
- fluidos independentes do tempo.

Os fluidos cujo comportamento é dependente do tempo apresentam uma taxa de deformação função não só da tensão de corte instantânea a que são submetidos mas também da duração da sua aplicação e do intervalo de tempo entre aplicações da tensão de corte. Dentro desta classe de fluidos podem existir dois tipos distintos de comportamento:

- tixotropia;
- antitixotropia (ou reopexia).

Nos fluidos tixotrópicos verifica-se uma diminuição da viscosidade com a duração do ensaio, ou seja, com o tempo de deformação. Por outro lado, os fluidos antitixotrópicos são aqueles cuja viscosidade aumenta com o tempo de deformação, tal como se pode observar no gráfico da Fig. 1.3(b). Geralmente, estes fenómenos têm um efeito de reversibilidade, isto é, após a deformação o fluido retoma à sua viscosidade inicial algum tempo depois de terminada a aplicação, de acordo com a Fig. 1.3(c).

Relativamente aos fluidos que apresentam um comportamento independente do tempo a taxa de deformação depende apenas da tensão de corte instantânea. Estes fluidos podem dividir-se em duas categorias:

- sem tensão de cedência;
- com tensão de cedência.

Os fluidos independentes do tempo sem tensão de cedência são aqueles cujas propriedades reológicas não dependem de uma tensão inicial (τ_c , tensão de cedência) para começarem a deformar. Dentro desta classe de fluidos existem:

- fluidos reofluidificantes (ou pseudoplásticos);
- fluidos reoespessantes (ou dilatantes).

Os fluidos com propriedades reofluidificantes (*shear-thinning*, do inglês) são aqueles que apresentam uma diminuição da viscosidade com o aumento da taxa de deformação. Os fluidos com características reoespessantes (*shear-thickening*) são caracterizados por um comportamento inverso, ou seja, a viscosidade aumenta com o crescimento da taxa de deformação (Fig. 1.3(a)).

Quando se está na presença de fluidos independentes do tempo com tensão de cedência é necessário atingir uma determinada tensão inicial (tensão de cedência, τ_c) para que comecem a escoar. Esta categoria de fluidos pode subdividir-se em três classes: fluidos reofluidificantes (ou pseudoplásticos); reoespessantes (ou dilatantes); e plásticos de Bingham. O comportamento dos fluidos reofluidificantes e reoespessantes já foi atrás descrito, enquanto os fluidos designados por plásticos de Bingham após atingirem a tensão de cedência apresentam uma relação linear entre o tensor das tensões e a taxa de deformação comportando-se, assim, como um fluido newtoniano para $\tau > \tau_c$ (ver gráfico da Fig. 1.3(a)).

Os fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas são aqueles que possuem características de líquidos viscosos com propriedades elásticas e de sólidos com propriedades viscosas, ou seja, estão associadas as propriedades elásticas e viscosas. Estes fluidos quando submetidos a um estado de tensão sofrem uma deformação e, após ser retirada a tensão, apresentam uma certa recuperação elástica. Por outro lado, têm a particularidade da relação entre tensão e deformação não ser local (no espaço e no tempo) e de, muitas vezes, a viscosidade não ser constante (para uma determinada temperatura e pressão). Existem muitos

modelos constitutivos reológicos para representar a viscoelasticidade de fluidos reais, por exemplo modelos do tipo FENE que serão utilizados ao longo desta tese, e de sólidos, por exemplo o modelo de Kelvin-Voigt. No que se refere à componente viscosa, os fluidos viscoelásticos podem também ser classificados como fluidos não newtonianos com características viscosas dependentes do tempo e independentes do tempo, da mesma forma que os fluidos puramente viscosos ou inelásticos atrás enunciados. No entanto, no caso de fluido não newtoniano viscoelástico com características viscosas dependentes do tempo é difícil distinguir na prática se a variação da viscosidade com o tempo tem origem na elasticidade ou nas propriedades tixotrópicas/antitixotrópicas.

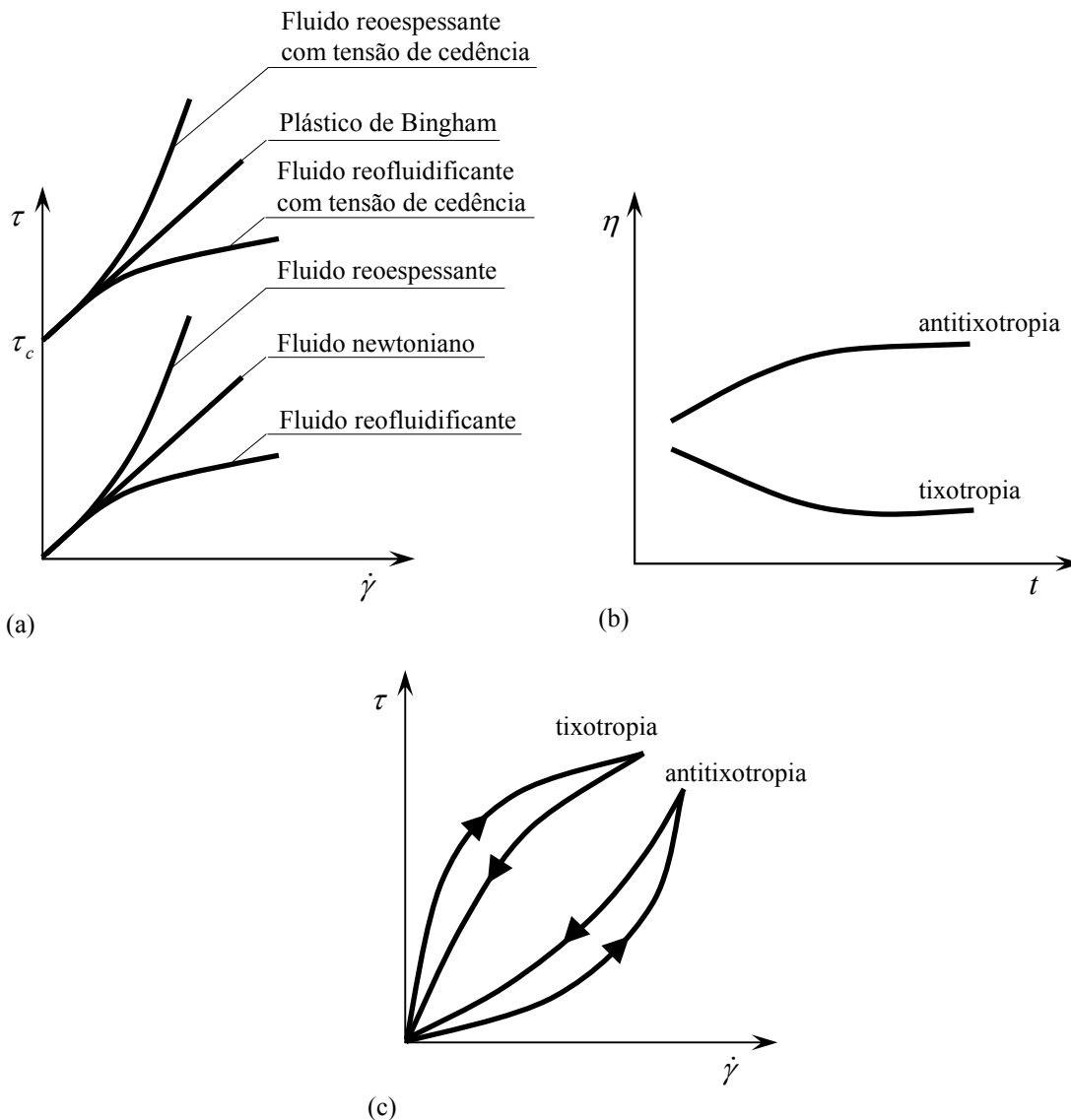


Figura 1.3 – Diagrama reológico dos fluidos com comportamento: (a) completamente viscoso independente do tempo; e (b)-(c) tixotrópico e antitixotrópico em função do tempo e da taxa de deformação, respectivamente.

Vai ser apenas sobre as classes de fluidos newtoniano e não newtoniano com características viscoelásticas (independentes do tempo), designados simplesmente como fluidos viscoelásticos, que se desenvolverá este trabalho. Para uma consulta mais aprofundada sobre a reologia e suas aplicações industriais sugere-se a leitura do livro de Gomes de Castro *et al.* [54].

Em problemas que envolvem fluidos não newtonianos viscoelásticos torna-se necessário caracterizá-los adequadamente (definir a sua reologia), para que seja possível aplicar o modelo constitutivo mais apropriado ao escoamento. A Reologia Computacional é a área científica que trata da resolução, por via numérica, das equações de conservação e constitutivas (equações reológicas de estado) que regem o movimento de fluidos não newtonianos. Na literatura especializada encontra-se uma grande variedade de equações constitutivas para descrever, de forma adequada, o comportamento desses fluidos. A escolha da equação constitutiva deve ter em conta alguns critérios, tais como o tipo de escoamento, as propriedades de interesse mais relevantes, os recursos computacionais disponíveis, o nível de precisão desejado na solução do problema físico, entre outros. Ao invés dos fluidos newtonianos (puramente viscosos) e dos sólidos hookeanos (puramente elásticos) em que a equação de estado é única e obedece a uma relação linear, existe uma multitude de equações constitutivas para fluidos não newtonianos que são, na maior parte, não-lineares.

Após feita a escolha da equação constitutiva reológica (que estabelece a relação entre o campo de tensões e a taxa de deformação no escoamento) a aplicar ao problema concreto em estudo, esta será resolvida juntamente com duas equações de conservação (massa e quantidade de movimento). Estas equações encontram-se descritas em detalhe no Capítulo 3.

Refira-se, por fim, que a combinação de características viscosas e elásticas nos escoamentos resulta, por vezes, em comportamentos bizarros e imprevisíveis, tal como se pode constatar através das imagens apresentadas no livro de Boger & Walters [27].

1.3 – Definição dos objectivos

O objectivo principal desta tese é estudar, por meio de simulação numérica, as instabilidades (matematicamente designadas por bifurcações) que ocorrem no escoamento de fluidos não newtonianos com características viscoelásticas através de uma geometria com uma expansão plana de razão 1:4, e de uma geometria formada por uma intersecção de canais planos (*cross-slot*). O trabalho efectuado e que será apresentado ao longo desta tese é de

índole fundamental. Deve referir-se que os casos geométricos considerados reproduzem escoamentos básicos que se encontram em diversos processos com aplicação industrial como, por exemplo, a extrusão de polímeros, onde é usual haver canais com expansão súbita da secção transversal. Desta forma, o trabalho desenvolvido tem um papel relevante em áreas das engenharias mecânica e dos materiais. Por outro lado, os escoamentos efectuados através de geometrias com intersecção de canais são frequentes em processos utilizando a microfluídica, que actualmente estão em crescente utilização.

Este trabalho irá envolver:

- O desenvolvimento e aplicação de uma ferramenta de previsão, construída com base no método dos volumes finitos, para a simulação de escoamentos viscoelásticos em regime estacionário e não estacionário. Uma ênfase particular será dada às questões que estão directamente relacionadas com a precisão numérica, tanto no espaço como no tempo;
- Estudo detalhado de um tipo de escoamento de entrada, no caso vertente o escoamento através de uma expansão súbita em que a inércia tende a promover o desenvolvimento de zonas de recirculação de dimensões crescentes a jusante da secção expandida e, assim, conduzindo eventualmente a bifurcações assimétricas, soluções tridimensionais ou instabilidades não estacionárias. A viscoelasticidade actua, em princípio, com tendência contrária, mas a sua influência nas instabilidades que ocorrem em expansões planas era em larga medida desconhecida;
- Estudo detalhado de escoamentos elásticos num cruzamento de canais planos (*cross-slot*), onde a viscoelasticidade promove à bifurcação do escoamento, o que poderá eventualmente ser útil, por exemplo, na mistura de fluidos em micro-dispositivos. Tal como referido anteriormente, o interesse por esta geometria só surgiu em 2006 após um trabalho experimental encontrado na literatura (Arratia *et al.* [15]) que revelou a ocorrência duma bifurcação supercrítica. Assim, a investigação sobre esta geometria tem grande relevância e actualidade.

1.4 – Organização e estrutura da tese

O ponto-chave deste trabalho é a utilização da dinâmica de fluidos computacional (CFD) na solução de problemas que envolvem fluidos poliméricos (não newtonianos viscoelásticos). Mais precisamente, é descrita e aplicada uma metodologia numérica para a resolução das equações de governo do escoamento, baseada no método dos volumes finitos, e usando um esquema de alta resolução CUBISTA (Alves *et al.* [7]) para a representação dos termos convectivos. Os fluidos em estudo são considerados incompressíveis e isotérmicos.

Esta tese encontra-se estruturalmente dividida em 12 capítulos. No Capítulo 2 apresenta-se uma revisão bibliográfica relevante para este trabalho. Começa-se por fazer uma breve introdução aos livros que se podem encontrar sobre o tema deste trabalho. Em seguida, faz-se uma descrição detalhada dos principais trabalhos publicados, para cada um dos tópicos descritos. Por fim, é feita uma abordagem sobre os modelos constitutivos utilizados e o método numérico (método dos volumes finitos) aplicados.

No Capítulo 3 são descritas, em detalhe, as equações que regem o escoamento de um fluido viscoelástico, em regime laminar e em condições isotérmicas. Neste capítulo apresentam-se as equações de conservação (massa e quantidade de movimento), juntamente com as equações constitutivas reológicas para o tensor das tensões (modelos newtoniano, FENE-MCR, FENE-CR e FENE-P). Após a apresentação das equações sob a forma dimensional estas são escritas na forma adimensional. Por último, definem-se os parâmetros adimensionais utilizados que resultam da adimensionalização das equações de governo.

No Capítulo 4 elabora-se um estudo detalhado sobre o comportamento das funções materiais dos modelos constitutivos reológicos utilizados neste trabalho quando submetidos a escoamentos de corte simples e extensional uniaxial, em regimes estacionário e não estacionário. Neste último caso tratam-se os designados escoamentos de arranque.

No Capítulo 5 descreve-se o método numérico utilizado neste trabalho, apresentando-se primeiramente as equações do escoamento na forma diferencial, transformadas para coordenadas não ortogonais generalizadas. Posteriormente, trata-se a discretização das equações por integração sobre um volume de controlo, segundo o método dos volumes finitos. Após a discretização explicam-se os esquemas de diferenças utilizados para cada um dos termos, bem como o algoritmo SIMPLEC empregue no acoplamento entre pressão, velocidade e tensões, juntamente com a indicação das condições de fronteira implementadas. Por fim, apresentam-se alguns resultados referentes à validação do modelo FENE-P implementado no programa de cálculo numérico expressamente para este trabalho.

Posteriormente, o programa de computador é aplicado na simulação dos escoamentos viscoelásticos já referidos, através de uma expansão plana 1:4 e de um cruzamento de canais planos (*cross-slot*). No Capítulo 6 apresentam-se e discutem-se os resultados obtidos para os escoamentos newtoniano e não newtoniano viscoelástico através de uma geometria plana com variação abrupta da secção transversal (razão de expansão de 1:4). No Capítulo 7 faz-se um estudo detalhado do escoamento viscoelástico através de uma geometria com cruzamento de canais planos bidimensionais, desprezando os efeitos inerciais ($Re = 0$).

Os dois capítulos que se seguem generalizam os resultados do Capítulo 7. No Capítulo 8 faz-se o estudo do escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais em geometria tridimensional. Este capítulo tem como intuito analisar os efeitos da tridimensionalidade sobre a ocorrência da bifurcação puramente elástica neste tipo de geometria. No Capítulo 9 abordam-se os efeitos provocados no escoamento num cruzamento de canais planos resultantes da inércia, ou seja, neste estudo procede-se ao aumento progressivo do número de Reynolds.

O escoamento viscoelástico dá origem ao aparecimento na região central de intersecção dos canais a uma camada típica com forte concentração de tensões normais, e que poderia estar relacionada com a origem da bifurcação do escoamento. Para se verificar esse facto, considerou-se um cruzamento de canais planos modificado (duas entradas e quatro saídas), de forma a limitar os comprimentos dos canais de saída, e os resultados da análise efectuada encontram-se apresentados no Capítulo 10.

No Capítulo 11 aborda-se o caso do escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais planos em regime não estacionário. Considera-se que o escoamento é dependente do tempo por se impor nos canais de entrada um gradiente de pressão a oscilar em fase. Pretendeu-se analisar a resposta do escoamento viscoelástico nestas condições quando este já se encontra, ou está prestes a ficar, assimétrico. Verifica-se que a viscoelasticidade conduz ao aparecimento de escoamentos secundários que poderão ser úteis para a mistura caótica das duas correntes do mesmo fluido vindas das entradas do cruzamento de canais.

Por fim, no Capítulo 12, são apresentadas as principais conclusões referentes ao trabalho desenvolvido perspectivando-se, ainda, algumas sugestões para trabalhos futuros que podem dar continuidade a este estudo.

Capítulo 2

Revisão bibliográfica

Neste capítulo faz-se uma apresentação da revisão bibliográfica relevante para o estudo de certos fenómenos que ocorrem no escoamento de fluidos não newtonianos viscoelásticos. Começa-se por destacar os livros de maior ênfase existentes na literatura especializada, que serviram para aprendizagem numa fase inicial deste trabalho. Posteriormente, descrevem-se os principais trabalhos publicados de índole numérica e experimental sobre o escoamento viscoelástico através de uma expansão plana e de um cruzamento de canais planos. Por fim, faz-se uma breve revisão dos modelos reológicos mais utilizados para descrever estes fluidos, e finaliza-se com uma descrição sumária dos métodos de cálculo numérico que podem ser empregues na resolução das equações de governo.

2.1 – Introdução

Numa primeira fase do trabalho elaborou-se uma revisão bibliográfica para a obtenção de conhecimentos básicos sobre fluidos não newtonianos com características viscoelásticas. Esta revisão bibliográfica tem como intuito identificar, de forma clara e concisa, os aspectos mais relevantes da área científica em que se insere o trabalho e visa adquirir conhecimentos no campo de fluidos não newtonianos, no que se refere a: reologia computacional, através do estudo numérico de escoamentos viscoelásticos em diversas geometrias (neste caso, numa expansão plana 1:4 e num cruzamento de canais planos); modelos constitutivos reológicos, que caracterizam o comportamento reológico destes fluidos; e método dos volumes finitos utilizado na discretização das equações que regem o escoamento.

O estudo do comportamento reológico de fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas é actualmente uma área de intensa investigação quer através de simulações numéricas, quer através de trabalhos experimentais, existindo assim uma grande diversidade de material de estudo. De seguida, destacam-se alguns livros de texto com interesse e que serviram como base no desenvolvimento desta tese, que são: *An Introduction to Rheology* de Barnes *et al.* [18]; *Engineering Rheology* de Tanner [145]; *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol. 1: Fluid Mechanics* de Bird *et al.* [21]; e mais recentemente, *Computational Rheology* de Owens & Phillips [105]. Estes livros fazem uma descrição e análise, essencialmente teórica, sobre o comportamento dos fluidos newtonianos e não newtonianos viscoelásticos com a ilustração de alguns casos práticos relevantes. Os dois primeiros livros [18,145] são fundamentais para aprofundar conhecimentos sobre a área da Reologia, que é definida como a ciência que se dedica ao estudo da deformação e do escoamento dos materiais. Actualmente, esta área é bem conhecida no que respeita à análise do comportamento de materiais complexos, com um papel preponderante da investigação científica. Desta forma, a leitura destes livros é útil numa fase inicial para compreender certos fenómenos que ocorrem no escoamento de fluidos não newtonianos, nomeadamente quando se empregam os líquidos poliméricos. A obra de Bird *et al.* [21] aborda este tema de uma forma mais aprofundada referindo-se, na maior parte, aos fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas. Pode ainda destacar-se a apresentação das mais importantes equações constitutivas que descrevem o comportamento destes fluidos, bem como a aplicação de vários métodos analíticos na resolução de problemas com cariz teórico e prático. Desta listagem de livros falta ainda destacar o livro de Owens & Phillips [105], com principal relevo na reologia computacional. A Reologia Computacional é uma área científica recente onde se procura resolver, através da aplicação de métodos numéricos adequados, as equações fundamentais

(equações de conservação e constitutivas reológicas) que governam o escoamento de fluidos complexos maioritariamente com propriedades viscoelásticas. Este livro traça a evolução que tem havido no desenvolvimento de métodos numéricos para o cálculo de escoamentos com fluidos não newtonianos desde os anos 60 até aos dias de hoje. Começa por apresentar uma descrição pormenorizada sobre os fluidos não newtonianos, apresentando e analisando as principais equações constitutivas reológicas que os descrevem. Depois são discutidas técnicas computacionais específicas para a resolução de problemas onde se utilizam estes fluidos. E, por fim, essas técnicas são aplicadas na resolução de alguns problemas reológicos de referência, com grande aplicabilidade em engenharia ou em estudos científicos, tais como escoamentos através de contracções e em torno de um cilindro confinado, e que estão discutidos com grande detalhe.

Além dos livros atrás enunciados, destaca-se outro de carácter experimental que mereceu especial atenção o *Rheological Phenomena in Focus* de Boger & Walters [27]. Este livro apresenta uma grande diversidade de fotos provenientes de ensaios efectuados com fluidos não newtonianos ilustrando escoamentos em diversas geometrias. Estes estudos experimentais são úteis porque permitem visualizar as características do escoamento viscoelástico que ocorrem nesses casos de referência. Outro livro recente a realçar e que se enquadra neste assunto é *Reologia e suas Aplicações Industriais* de Gomes de Castro *et al.* [54], que descreve também o comportamento reológico dos fluidos viscoelásticos, bem como as suas propriedades reológicas quando submetidos a diversos ensaios de corte e elongacional. Esta obra suscita grande interesse, não só porque é a única em Português, mas também porque trata de aplicações práticas da reologia, tais como na extrusão de termoplásticos, no fabrico de pastas alimentares, no processamento de tintas e géis, entre outras.

Como foi já referido no Capítulo 1, quando se procedeu à descrição do comportamento reológico dos materiais, os fluidos não newtonianos necessitam de equações constitutivas reológicas mais elaboradas para a sua descrição física. O movimento destes fluidos não é regido por uma equação constitutiva tão simples como a do fluido newtoniano que relaciona directamente o tensor das tensões com a velocidade de deformação local. Os fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas apresentam características que não são previstas pela mecânica clássica dos fluidos, tais como:

- dependência da viscosidade de corte (ou viscosimétrica) em relação à taxa de deformação (ou velocidade de deformação);

- presença de tensões normais quando submetidos a escoamentos de corte;
- elevada resistência a deformações alongacionais;
- ocorrência de efeitos de “memória” relacionados com as propriedades elásticas.

Existem inúmeros modelos constitutivos para simular o comportamento destes materiais. Nesta tese considerou-se que o fluido não newtoniano viscoelástico é composto por uma mistura de um solvente newtoniano com um soluto polimérico. Para definir a parte polimérica utilizou-se como equação constitutiva um modelo baseado na teoria cinética para moléculas poliméricas com extensão elástica finita e não-linear (sigla FENE, designação inglesa de *Finite Extensible Nonlinear Elastic*), tendo como base o livro *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol. 2: Kinetic Theory* de Bird *et al.* [22]. Este livro descreve com grande amplitude a teoria cinética molecular, apresentando e desenvolvendo modelos moleculares e os métodos estatísticos usados na dedução desses modelos.

Foram até aqui referidas as obras mais importantes que abordam os aspectos teóricos dos fluidos não newtonianos viscoelásticos, incluindo um número alargado de equações constitutivas. Passa-se agora para os aspectos numéricos do problema, uma vez que vai ser necessário aplicar métodos numéricos para resolver as equações que regem o escoamento viscoelástico. Estas equações são definidas pelas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento associadas com uma equação constitutiva reológica. Na literatura da especialidade encontram-se muitos livros que abordam diversos assuntos de CFD, como os volumes finitos, elementos finitos, malhas computacionais, sistemas de equações algébricas, etc. Porém, ir-se-á aqui destacar apenas os livros que suscitaram maior interesse na realização deste trabalho: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* de Patankar [107], *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* de Versteeg & Malalasekera [153] e *Computational Methods for Fluid Dynamics* de Ferziger & Perić [49], entre outros. A obra da autoria de Patankar [107] foi um dos primeiros livros de volumes finitos a surgir na literatura em 1980. Este livro discute o método SIMPLE, muito utilizado no cálculo de escoamentos incompressíveis, e que foi desenvolvido pelo autor e colegas segundo a escola do Imperial College. Esta obra é uma referência importante na dinâmica de fluidos computacional, sendo utilizado o método dos volumes finitos na discretização das equações diferenciais parciais e equações de Navier-Stokes. Alguns anos mais tarde, em 1995, Versteeg & Malalasekera [153] publicam um livro que aborda também as técnicas necessárias na simulação numérica através da aplicação do método dos volumes finitos em dinâmica de

fluidos computacional. Neste caso as técnicas de volumes finitos são aplicadas as equações de Navier-Stokes, descrevendo métodos de solução numérica para escoamentos compressíveis e incompressíveis, com a ilustração de alguns exemplos práticos. Um ano depois (1996) surge o livro de Ferziger & Perić [49] que faz uma descrição mais detalhada das técnicas mais recentes aplicadas na dinâmica de fluidos computacional, como seja a utilização de malhas não deslocadas.

Associado a estas três referências que tratam sobretudo de fluidos newtonianos, destaca-se o livro *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow* de Crochet *et al.* [35], que diz respeito aos métodos numéricos utilizados na simulação de escoamentos com fluidos não newtonianos. A discretização das equações é obtida através da aplicação do método das diferenças finitas e, sobretudo, o dos elementos finitos, sendo apresentados inúmeros exemplos de aplicação.

2.2 – Escoamento numa expansão plana

2.2.1 – Descrição do problema

Este problema é bidimensional, com o fluido a escoar através de um canal com expansão plana, sendo a razão de expansão definida por $ER = D/d$ de acordo com o esquema apresentado na Fig. 2.1. O fluido entra pelo canal estreito com altura d e comprimento $L_1 = 20d$ que, posteriormente, sofre uma expansão súbita da secção transversal, passando o escoamento a fazer-se através de um canal mais largo com altura $D = 4d$ e comprimento $L_2 = 50d$. Como é sabido, devido à variação súbita da geometria formam-se a jusante da expansão duas zonas de recirculação de escoamento que se encontram coladas na parede superior e inferior dos canais de saída (com o mesmo tamanho no caso do escoamento simétrico), tal como representado na Fig. 2.1.

Neste tipo de problema o escoamento é predominantemente de corte junto às paredes dos canais e extensional ao longo do eixo central. Para esta geometria bidimensional plana verifica-se que a razão de velocidades médias é dada por $U_2/U_1 = d/D = 1/ER$.

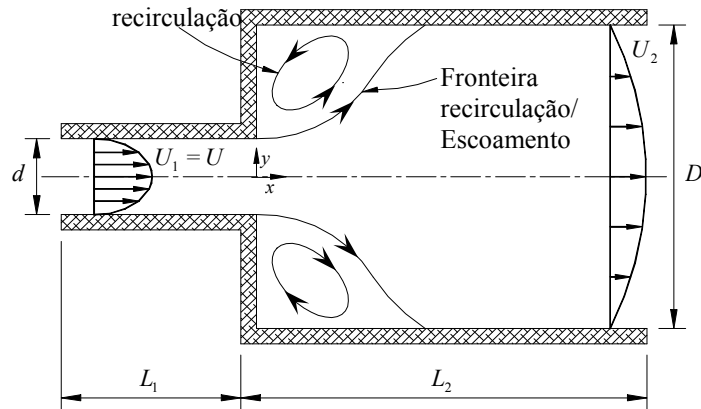


Figura 2.1 – Representação esquemática do canal plano com razão de expansão 1:4. Ilustração para escoamento simétrico.

Neste estudo a razão de expansão da geometria mantém-se constante e toma o valor $ER = D/d = 4$. No caso de fluido newtoniano, o escoamento é apenas função do número de Reynolds uma vez que se mantém constante a razão de expansão. No entanto, para fluido não newtoniano com propriedades viscoelásticas para além de se fazer variar o número de Reynolds surgem outros parâmetros adimensionais neste problema possíveis de serem alterados e que são: o número de Weissenberg (We); a razão de viscosidades do solvente (β); e a extensibilidade do fluido (L^2). Estes parâmetros adimensionais são definidos na Secção 3.4.

O interesse deste estudo vem no seguimento do trabalho numérico de Rocha [128], onde foi analisada uma gama de valores do número de Reynolds baixos: $0.01 \leq Re \leq 35$ para o fluido newtoniano; e $0.01 \leq Re \leq 20$ para o fluido viscoelástico, com $We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$. Os resultados de Rocha [128] não apresentam bifurcação do escoamento, uma vez que os parâmetros utilizados se encontravam abaixo do valor crítico para a transição do regime simétrico para assimétrico. O intuito desse trabalho foi apenas analisar o comportamento do escoamento newtoniano e não newtoniano viscoelástico na região simétrica. O estudo efectuado nesta tese (Cap. 6), na mesma geometria, engloba uma análise do comportamento do escoamento newtoniano e não newtoniano viscoelástico em ambos os regimes de escoamento: simétrico e assimétrico. Trata-se assim de um estudo mais detalhado sobre o comportamento do escoamento na expansão 1:4 que, do ponto de vista geométrico, constitui uma configuração bastante simples. No entanto, é útil para o estudo de certos fenómenos que ocorrem quando se está na presença de fluidos viscoelásticos e que poderão ser depois transpostos para geometrias mais complexas. Na próxima subsecção faz-se uma

descrição dos trabalhos mais relevantes, de índole numérica ou experimental, e que serviram de base para a realização deste estudo.

2.2.2 – Trabalhos realizados

Do ponto de vista fundamental, os escoamentos de fluidos viscoelásticos através de condutas planas com variação abrupta da secção transversal, quer sejam contracções ou expansões, são importantes para a compreensão de certos fenómenos inesperados que são causados pela elasticidade do fluido. Estes fenómenos produzem alterações significativas no padrão do escoamento e nos campos de tensões a que o fluido está sujeito, que não se verificam no caso de fluido newtoniano. Como exemplos apontam-se: aumento ou supressão dos vórtices; na possibilidade do escoamento ficar dependente do tempo (não estacionário) ou tridimensional, devido a instabilidades elásticas; elevada concentração de tensões no ponto singular da geometria (canto reentrante), entre outros.

O estudo do escoamento através deste tipo de geometrias tornou-se um problema clássico também porque tende a ocorrer em diversas aplicações de engenharia, tais como: na extrusão de polímeros; no processamento de tintas e géis; no fabrico de pastas alimentares; entre muitas outras aplicações (ver Gomes de Castro *et al.* [54]). Regra geral, estes processos envolvem o escoamento de materiais que apresentam propriedades viscoelásticas.

Pode encontrar-se na literatura especializada uma panóplia de estudos relacionados com o escoamento viscoelástico através de contracções (Aboubacar *et al.* [3], Alves *et al.* [8-10], Mompean & Deville [87] e Phillips & Williams [115]). Todavia, estudos numéricos ou experimentais de escoamentos viscoelásticos através de geometrias com expansão são relativamente mais escassos, embora não sejam menos importantes. A maior parte destes trabalhos estão relacionados com condições em que se despreza o efeito de inércia ($Re = 0$). Um dos primeiros foi o de Halmos *et al.* [57] e Halmos & Boger [55,56] que obtiveram soluções numéricas juntamente com resultados experimentais para escoamento inelástico através de uma expansão axissimétrica, sendo a viscosidade do fluido representada pelo modelo de lei de potência. Mais tarde, nos trabalhos numéricos apresentados por Darwish *et al.* [39] e Missirlis *et al.* [86] foi simulado o escoamento de um fluido viscoelástico através de uma expansão plana bidimensional 1:4, utilizando a técnica dos volumes finitos e aplicando o modelo convectivo superior de Maxwell para $Re = 0.1$. Missirlis *et al.* [86] mostraram que a actividade do vórtice é suprimida com o aumento do número de

Weissenberg e que acima do valor $We = 3.0$ a zona de recirculação é completamente eliminada.

Deve também referir-se os trabalhos apresentados por Townsend & Walters [148] e Baloch *et al.* [17]. Em ambos os estudos foi utilizado a forma linear do modelo PTT (Phan-Thien & Tanner [113]), numa tentativa de simular as visualizações experimentais de Townsend & Walters [148] para o escoamento de duas soluções poliméricas, poliacrilamida e goma de xantano, através de uma expansão aproximadamente bidimensional e outra tridimensional. As visualizações mostraram, de forma clara, que existe uma redução do comprimento de recirculação no caso dos fluidos viscoelásticos, estando as simulações numéricas de acordo, qualitativo, com as visualizações experimentais.

Como é sabido, tendo sido documentado primeiro em Abbott & Kline [1], o escoamento de fluidos newtonianos numa expansão plana fica assimétrico acima de um certo valor de Reynolds crítico mas mantém-se estacionário. O número de Reynolds crítico, que controla o ponto de transição do escoamento simétrico para assimétrico, depende somente da razão de expansão (ou seja, a razão entre a altura do canal de saída e de entrada) quando o escoamento é bidimensional. No entanto, quando o escoamento é tridimensional este depende também da razão de aspecto (ou seja, a razão entre a largura e a altura do canal de entrada). De facto, em 2D a assimetria é completamente eliminada para razões de expansão inferiores a 1.5. Esta assimetria foi observada, por exemplo, nos trabalhos experimentais de Cherdron *et al.* [30], Durst *et al.* [44,45] e Fearn *et al.* [47] e estudada numericamente por Drikakis [42], Battaglia *et al.* [19] e Wahba [155].

Drikakis [42] analisou o efeito provocado no escoamento de fluidos newtonianos pela variação da razão de expansão, tendo mostrado que o número de Reynolds crítico diminui à medida que a razão de expansão aumenta. Para uma razão de expansão 1:4 o valor do número de Reynolds crítico obtido foi de $Re_{cr} \approx 35.3$ (definido com a altura e a velocidade média no canal de entrada). Battaglia *et al.* [19] fazem o mesmo estudo para várias razões de expansão (entre 1.5 e 7) e apresentaram conclusões semelhantes às verificadas no trabalho de Drikakis [42]. Para uma razão de expansão 1:4 estes autores obtiveram um número de Reynolds crítico ligeiramente superior $Re_{cr} \approx 35.8$. Mais tarde, para a mesma razão de expansão, Wahba [155] obteve um valor de $Re_{cr} \approx 36$. No presente trabalho obteve-se para o escoamento newtoniano um número de Reynolds crítico $Re_{cr} \approx 36$, estando este resultado perfeitamente de acordo com os resultados apresentados anteriormente. Isto será discutido com maior detalhe na subsecção 6.3.1, cujo conteúdo foi publicado em Rocha *et al.* [133]. Dos trabalhos experimentais atrás referidos [30,44,45,47] os resultados mostraram claramente

que o escoamento através de uma expansão plana mantém-se simétrico para valores de Re baixos e que se torna assimétrico para valores de Re altos ($Re \geq Re_{cr}$).

Uma análise de estabilidade linear para razões de expansão 1:2 e 1:3 foi feita por Shapira *et al.* [138], tendo sido analisado o comportamento do escoamento para vários valores do número de Reynolds. Refira-se também os trabalhos de Foumeny *et al.* [50], Alleborn *et al.* [5] e Hawa & Rusak [60] que analisaram a instabilidade dos fluidos newtonianos em geometrias planas com expansão, para diversas razões de expansão.

De Zilwa *et al.* [41] fizeram um estudo numérico/experimental do escoamento através de uma expansão plana para valores de $ER = 2, 3$ e 5 . As previsões destes autores mostraram que para valores de Reynolds acima do valor crítico, à medida que o número de Reynolds vai aumentando, aparece uma terceira zona de recirculação do escoamento já mais distante da zona de expansão. Esta nova bifurcação gera uma recirculação na parede oposta à da maior recirculação gerada pela bifurcação primária.

Passando agora a fluidos não newtonianos inelásticos Neofytou & Drikakis [88] analisaram a instabilidade do escoamento para fluido não newtoniano através de uma expansão plana 1:2. Estes autores utilizaram três modelos constitutivos, Casson, lei de potência e Quemada, que são vulgarmente utilizados na literatura especializada para simular o comportamento reológico do sangue. Estes modelos são inelásticos (sem elasticidade) e têm a particularidade de representar o comportamento reofluidificante do sangue. Os resultados revelaram que a assimetria do escoamento ocorre nos três modelos aplicados e que o número de Reynolds crítico depende dos parâmetros desses modelos. Tendo como base os resultados apresentados por estes autores, Manica & de Bortoli [79] apresentaram um estudo numérico confirmando essas previsões utilizando como modelo constitutivo a lei de potência. De facto, um dos primeiros trabalhos a abordar o estudo de fluidos não newtonianos puramente viscosos (inelásticos) foi desenvolvido por Bell & Surana [20]. Estes autores apresentaram um estudo do escoamento de um fluido descrito pelo modelo lei de potência através de uma expansão plana 1:2. Concluíram que o valor do índice lei de potência (n) afecta o comprimento e intensidade dos vórtices de recirculação. A influência do comportamento viscoso reofluidificante foi também analisada pelo modelo lei de potência por Mishra & Jayaraman [85] para uma expansão plana 1:16. As previsões mostraram que o aumento do grau de pseudoplasticidade atrasa o ponto crítico da bifurcação do escoamento.

Um dos primeiros trabalhos a aparecer na literatura especializada sobre o estudo do escoamento assimétrico de um fluido viscoelástico para números de Reynolds moderados foi apresentado por Oliveira [97]. Aplicando o modelo FENE-CR modificado (FENE-MCR) este

autor analisou o comportamento do fluido viscoelástico através de uma expansão plana com uma razão de expansão $ER = D/d = 3$. Os resultados numéricos obtidos em Oliveira [97] estão de acordo com os estudos prévios para baixos valores do número de Reynolds. Estes resultados mostram que a elasticidade reduz o comprimento e a intensidade dos vórtices, e induz uma estabilização do escoamento à jusante da expansão. Este efeito faz com que a assimetria do escoamento ocorra para valores superiores do número de Reynolds quando comparado com o fluido newtoniano. O número de Reynolds crítico depende do número de Weissenberg (We), da razão de viscosidade do solvente (β) e do parâmetro de extensibilidade (L^2) do modelo FENE-CR. As previsões de Oliveira [97] serviram como base de comparação no trabalho de Ternik *et al.* [147], que utilizaram um modelo GNF (*Generalised Newtonian Fluid*, do inglês) quadrático para descrever a reologia do fluido para uma expansão plana 1:3. Os resultados destes autores estão em concordância com as previsões de Oliveira [97].

Para finalizar, destacam-se os trabalhos recentes de Ternik [146] e Poole *et al.* [120]. Ternik [146] utilizou novamente o modelo lei de potência para investigar os efeitos de fluido newtoniano generalizado na transição do escoamento simétrico para assimétrico através de uma expansão plana 1:3. Os resultados revelaram que o comportamento reofluidificante do fluido afecta a bifurcação do escoamento. Isto observa-se não só no valor do número de Reynolds crítico generalizado, que é maior do que o valor crítico do fluido newtoniano, como também na evolução do crescimento da recirculação do escoamento. Poole *et al.* [120] utilizaram o modelo constitutivo UCM e desprezaram o efeito de inércia ($Re = 0$), para várias razões de expansão $ER = 1.25, 1.5, 2, 4, 8, 16$ e 32 . Este trabalho generaliza um anterior dos mesmos autores (Poole *et al.* [119]) onde tinha sido considerada uma única razão de expansão (1:3). Estes autores concluem que para razões de expansão elevadas ($ER \geq 4$) o escoamento fica dominado pelo tamanho do canal de saída e as quantidades adimensionais tendem a ficar independentes de ER .

Na Tabela 2.1 apresentam-se alguns valores de Reynolds críticos (Re_{cr}) previstos para escoamento newtoniano para razões de expansão (ER) entre 2 e 5. Os valores ilustrados na tabela foram definidos tendo em conta a altura (d) e a velocidade média (U) do canal de entrada ($Re = \rho U d / \eta_0$, como assumido nesta tese).

Tabela 2.1 – Número de Reynolds crítico previsto em escoamento newtoniano para razões de expansão entre 2 e 5.

$ER = D/d$	Re_{cr}	Método	Autor(es)
2	123.3	Experimental	Chedron <i>et al.</i> [30]
	83.3/83.3	Num./Exp.	Durst <i>et al.</i> [45]
	144	Numérico	Drikakis [42]
	143.6	Numérico	Battaglia <i>et al.</i> [19]
	145	Numérico	Wahba [155]
	143.3	Numérico	Shapira <i>et al.</i> [138]
	145.3	Numérico	Alleborn <i>et al.</i> [5]
	120/123.3	Num./Exp.	De Zilwa <i>et al.</i> [41]
3	53.9	Experimental	Fearn <i>et al.</i> [47]
	53.3	Numérico	Drikakis [42]
	53.8	Numérico	Battaglia <i>et al.</i> [19]
	55.1	Numérico	Shapira <i>et al.</i> [138]
	53.3	Numérico	Foumeny <i>et al.</i> [50]
	53.3	Numérico	Alleborn <i>et al.</i> [5]
	53.8	Numérico	Hawa & Rusak [60]
	60/58.7	Num./Exp.	De Zilwa <i>et al.</i> [41]
	54	Numérico	Mishra & Jayaraman [85]
	54	Numérico	Oliveira [97]
4	35.3	Numérico	Drikakis [42]
	35.8	Numérico	Battaglia <i>et al.</i> [19]
	36	Numérico	Wahba [155]
	36	Numérico	Rocha <i>et al.</i> [133]
5	27.3	Numérico	Drikakis [42]
	28.4	Numérico	Battaglia <i>et al.</i> [19]
	28.5	Numérico	Alleborn <i>et al.</i> [5]
	30/30	Num./Exp.	De Zilwa <i>et al.</i> [41]

2.3 – Escoamento numa intersecção de canais planos

2.3.1 – Descrição do problema

Uma representação esquemática da geometria para simular o escoamento no cruzamento de canais planos é mostrada na Fig. 2.2. O domínio de cálculo do escoamento assemelha-se a uma cruz, com o fluido a entrar pelos canais da esquerda e da direita e a sair pelos canais superior e inferior. Na região central do cruzamento dos canais, os fluxos de entrada intersectam-se e impingem um no outro, gerando um ponto de estagnação na localização central da geometria ($x = y = 0$), a partir da qual se formará um forte escoamento extensional em direcção às saídas. Ao longo da linha central da geometria o escoamento de entrada é comprimido em direcção ao ponto de estagnação, seguido pelo estiramento ao longo dos canais de saída verticais.

Escoamentos viscoelásticos que propiciam o aparecimento de um ponto de estagnação interno são frequentes em geometrias relacionadas com processamento de polímeros e em áreas como a micro- e nanotecnologia.

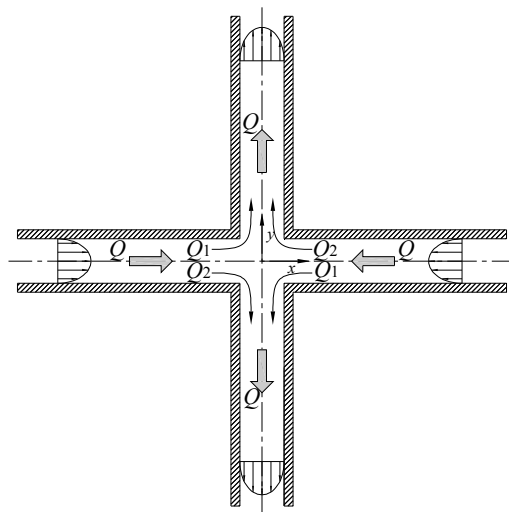


Figura 2.2 – Representação esquemática da geometria do escoamento num cruzamento de canais planos.

2.3.2 – Trabalhos realizados

Os escoamentos com fluidos não newtonianos viscoelásticos através de geometrias compostas por um cruzamento de canais têm sido largamente empregues como problemas de referência em reologia computacional (por exemplo, Harlen *et al.* [58], Singh & Leal [139] e Remmelgas *et al.* [125]). Esta geometria pode gerar um elevado grau de acumulação de deformação normal (de Hencky), muito superior quando comparado com o caso do escoamento através de uma contracção ou em torno de um cilindro, devido à existência de um ponto de estagnação interno (ver, por exemplo, Peters *et al.* [111]). Assim, esta geometria em forma de cruz pode ser utilizada para investigar o comportamento das propriedades extensionais do escoamento, possibilitando que as moléculas poliméricas flexíveis possam ser totalmente estendidas. Na literatura especializada encontram-se trabalhos experimentais (Soulages *et al.* [140] e Coventry & Mackley [34]), algumas vezes associados com simulações numéricas (Schoonen [135] e Schoonen *et al.* [136]), efectuados em geometrias em que não há arredondamento dos cantos. Porém, aparecem outros estudos em que os cantos são arredondados para evitar problemas de elevados gradientes de tensão que surgem próximos aos pontos singulares (Hassell *et al.* [59], Soulages *et al.* [141] e Abedijaberi *et al.* [2]). Em alguns destes trabalhos numéricos foram utilizados modelos constitutivos reológicos sofisticados como, por exemplo, em Verbeeten *et al.* [152] que usaram uma nova versão do

modelo Pom-Pom. Outros estudos numéricos foram efectuados em geometrias similares contendo um ponto de estagnação interno. Destacam-se os estudos numéricos efectuados por Remmelgas & Leal [124] (misturador de duas rodas) ou Feng & Leal [48] (misturador de quatro rodas), onde o intuito foi de obter a viscosidade extensional de soluções poliméricas diluídas através de medições ópticas do estiramento molecular do fluido.

Dois trabalhos recentes (um experimental e outro numérico) reavivaram o interesse do estudo do comportamento dos escoamentos viscoelásticos através de um cruzamento de canais planos. No trabalho experimental de Arratia *et al.* [15] foi feita a descrição de um novo tipo de instabilidade associado à viscoelasticidade presente no escoamento. Estes autores analisaram o comportamento do escoamento de uma solução de poliacrilamida através de uma geometria micro-fabricada formada por um cruzamento rectangular de canais planos. Nesta geometria os elementos de fluido sofrem, na zona do cruzamento dos canais, um elevado estiramento para baixos valores do número de Reynolds ($< 10^{-2}$). Os resultados experimentais mostram que devido a este forte estiramento molecular, que é precedido por uma forte compressão, o escoamento passa a ficar elasticamente instável e o campo de velocidades torna-se assimétrico, enquanto no caso do fluido newtoniano o escoamento mantém-se simétrico. Esta assimetria do escoamento, com mais fluxo de um dos canais de entrada a sair por uma das duas saídas, e vice-versa, acontece em regime permanente (não depende do tempo) e para valores do número de Débora baixos. Em terminologia de instabilidade de escoamentos, o caso vertente corresponde a uma bifurcação em forma de forquilha supercrítica (*supercritical pitchfork bifurcation*, Larson [72]). Arratia *et al.* [15] verificaram também a existência de uma segunda instabilidade que surge para valores mais elevados da taxa de deformação e que conduz a uma assimetria, onde o escoamento passa a processar-se em regime variável. Nenhum destes fenómenos de assimetria foi previsto em simulações numéricas anteriores por se ter utilizado apenas um quarto da geometria total do escoamento, no pressuposto de que devido à simetria da geometria o escoamento seria sempre simétrico. Todavia, motivados pelos resultados experimentais de Arratia *et al.* [15], Poole *et al.* [118] provaram que essa instabilidade elástica pode ser prevista com um modelo constitutivo de extensibilidade infinita para fluido viscoelástico, considerando a geometria total do escoamento. Os seus resultados numéricos estão em concordância qualitativa com as visualizações experimentais de Arratia *et al.* [15], mostrando que o escoamento passa do estado simétrico a assimétrico para números de Débora superiores a 0.31, sem que existam efeitos inerciais ($Re = 0$). Concluíram também que para números de Débora elevados o escoamento mantém-se assimétrico e fica não estacionário. A explicação física proposta por

estes autores para o fenómeno da bifurcação baseia-se numa instabilidade centrífuga que resulta de uma distorção do campo de velocidades, devido às tensões compressivas que são geradas ao longo da linha central do cruzamento do canais de entrada até ao ponto de estagnação. Desta forma, estas conclusões realçam que a bifurcação do escoamento não está directamente ligada às fortes extensões uniaxiais poliméricas que se verificam nos canais de saída. No seguimento dessas previsões surge o trabalho numérico publicado por Rocha *et al.* [132] (Cap. 7) utilizando o modelo constitutivo FENE-CR. Os resultados permitiram, uma vez mais, constatar que o escoamento viscoelástico num cruzamento de canais planos se torna assimétrico a partir de um certo valor crítico do número de Débora ($De_{cr} \approx 46$, para $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Para finalizar, destacam-se ainda os trabalhos apresentados por Xi & Graham [158], Puangkird *et al.* [121] e Oliveira *et al.* [104]. Xi & Graham [158] simularam o escoamento para valores de Reynolds baixos e, para evitar problemas de convergência numérica, optaram por arredondar os cantos da geometria. As suas previsões, utilizando como equação constitutiva o modelo FENE-P, apenas permitiram obter uma solução instável (dependente do tempo) para valores elevados do número de Débora. Aplicando os modelos constitutivos Oldroyd-B, PTT, FENE-CR e Pom-Pom, Puangkird *et al.* [121] assumiram desde logo simetria e usaram apenas um quarto da geometria. O intuito deste trabalho era estudar o comportamento dos modelos constitutivos e das propriedades reológicas quando submetidos a um escoamento sobre um cruzamento de canais. No trabalho de Oliveira *et al.* [104] foi feito um estudo numérico do escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais planos com três entradas e uma saída. Estes autores aplicaram o método dos volumes finitos usando os modelos constitutivos UCM e PTT para descreverem o escoamento. As previsões mostraram a ocorrência de duas instabilidades: uma primeira em que o escoamento fica assimétrico mas estável; e outra, para elevados valores do número de Débora, onde o escoamento fica instável, oscilando no tempo.

2.4 – Modelos reológicos

Normalmente, a simulação numérica do movimento de fluidos passa sempre pela resolução de duas equações: conservação da massa (Eq. (3.1)) e da quantidade de movimento (Eq. (3.2)). Para fluidos não newtonianos torna-se necessário ainda resolver uma equação constitutiva reológica que relaciona o tensor das tensões (τ_{tot} da Eq. (3.2)) com a deformação

e velocidades de deformação a que o fluido está sujeito. Esta relação poderá ser mais ou menos complexa, dependendo principalmente das características do fluido que se pretende simular.

Tal como referido anteriormente, os fluidos podem dividir-se em duas categorias: newtonianos e não newtonianos. No caso newtoniano o modelo constitutivo é simples e segue a usual lei de Newton da viscosidade. Os fluidos não newtonianos precisam de modelos constitutivos mais elaborados. O modelo não newtoniano mais simples é o de fluido newtoniano generalizado (GNF). O modelo GNF é útil para descrever o comportamento não newtoniano inelástico, nomeadamente a variação da viscosidade com a taxa de deformação, tendo sido desenvolvido como uma extensão do modelo newtoniano. Na literatura especializada podem encontrar-se vários modelos empíricos deste tipo como, por exemplo, o modelo de Carreau-Yasuda (ver Yasuda *et al.* [159] e uma aplicação em Miranda *et al.* [84]), o modelo de lei de potência (ver Pinho & Oliveira [116] para uma aplicação), entre outros. Todavia, os materiais não newtonianos mais comuns apresentam outras características. Além de serem viscosos, como os fluidos newtonianos, têm características elásticas, o que dificulta a simulação numérica mas, por outro lado, torna o comportamento físico destes materiais mais interessante. Estes fluidos são designados por fluidos viscoelásticos. Um fluido viscoelástico, ao contrário dos fluidos newtoniano e newtoniano generalizado, tem efeito de “memória” (ou de história) dos estados de deformação a que esteve sujeito em instantes anteriores. Estes fluidos podem ser soluções de polímeros, suspensões de fibras, etc.

Actualmente, o desenvolvimento de modelos constitutivos reológicos para descrever de forma adequada o escoamento de fluidos viscoelásticos em geometrias diversas tem recebido especial atenção. O modelo viscoelástico mais simples, do ponto de vista reológico, é o modelo convectivo superior de Maxwell (UCM, Bird *et al.* [21]). Numericamente, este modelo tende a gerar problemas de convergência muito difíceis devido à tendência para induzir tensões normais muito elevadas. Nos trabalhos numéricos de Alves *et al.* [7,11] e Poole *et al.* [118,120] foi utilizado este modelo reológico na previsão do comportamento viscoelástico. Outro modelo reológico pouco mais complexo que o UCM é o modelo de Oldroyd-B (Oldroyd [89]), que se caracteriza pela combinação linear da equação do modelo UCM com um solvente newtoniano. Apesar deste modelo ser de convergência mais fácil que o modelo UCM, também apresenta algumas limitações para razões de viscosidade baixas (Pinho & Oliveira [116]) quando a influência do solvente se esbate. Do ponto de vista prático, este modelo é adequado para prever o comportamento de fluidos de Boger (James [66]). Estes fluidos apresentam uma viscosidade constante e, regra geral, são compostos por soluções

poliméricas diluídas em solventes newtonianos de elevada viscosidade. Este modelo tem sido também utilizado por diversos investigadores, podendo-se citar os trabalhos de Mompean & Deville [87], Alves *et al.* [8] e Duarte *et al.* [43].

Na simulação de fluidos com viscosidade variável e variação complexa das tensões normais recorre-se a modelos reológicos mais complexos como, por exemplo, os modelos PTT (Phan-Thien [112] e Phan-Thien & Tanner [113]) e de Giesekus [53]. Estes modelos foram utilizados, por exemplo, no trabalho de Afonso *et al.* [4].

Em 1995, Bird & Wiest [26] publicaram uma revisão de um vasto conjunto de equações constitutivas apropriadas para líquidos poliméricos. Os polímeros, muito utilizados em processos industriais, são materiais formados por cadeias, mais ou menos longas, onde um ou mais monómeros (composto químico que contém uma única molécula) se repetem. Dos modelos reológicos apropriados para soluções poliméricas destacam-se aqueles que derivam da teoria cinética molecular (modelos FENE, Bird *et al.* [22]), e que serviram de base para o modelo viscoelástico seguido neste trabalho. O modelo FENE é útil porque permite descrever simultaneamente o estiramento e a orientação das moléculas poliméricas em escoamentos complexos. Estes modelos têm já em conta algumas particularidades dos fluidos não newtonianos viscoelásticos, como o efeito reofluidificante ou a viscosidade elongacional finita que não são tidas em conta nos modelos UCM e Oldroyd-B referidos atrás. Existem vários modelos reológicos desenvolvidos a partir do modelo FENE original (Bird *et al.* [22]) como, por exemplo, o modelo FENE-P (FENE com aproximação de Peterlin (Bird *et al.* [22] e Peterlin [110])), FENE-CR (proposto por Chilcott & Rallison [31]), FENE-MCR (versão modificada do modelo FENE-CR), entre outros que poderão ser consultados no trabalho de Lielens *et al.* [78] e Oliveira [98].

O modelo FENE-P é o mais próximo da versão original FENE (Bird *et al.* [22]). Este modelo tem a particularidade de apresentar um comportamento reofluidificante na viscosidade de corte. Purnode & Crochet [122] apresentaram um trabalho numérico/experimental tendo medido as propriedades reológicas de corte e extensionais de uma solução aquosa de poliacrilamida. Utilizaram depois o modelo FENE-P em simulações numa contracção, comparando as previsões numéricas com os resultados experimentais. Num trabalho integrado nesta tese Rocha *et al.* [132] (Cap. 7) utilizaram o modelo FENE-P para simular o escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais planos.

Em 1988, Chilcott & Rallison [31] fizeram uma alteração na equação do modelo FENE original de modo empírico e de forma a eliminar a dependência da viscosidade de corte. Desta forma, o novo modelo proposto por estes autores intitulado de FENE-CR,

passaria a ter viscosidade de corte constante e seria apropriado para descrever um fluido de Boger. Este modelo reológico foi utilizado, por exemplo, nos trabalhos de Rimmelin & Leal [124], Oliveira & Miranda [101], Rocha *et al.* [131,133], entre outros.

Coates *et al.* [32] apresentaram um estudo numérico de um escoamento axissimétrico com contracção, onde alteraram a equação reológica do modelo FENE-CR original. A simplificação adicional proposta por estes autores foi desprezar o termo correspondente à derivada substantiva da função de extensibilidade presente no modelo FENE-CR. Esta nova versão passou a denominar-se por modelo FENE-CR modificado (FENE-MCR). Em escoamentos estacionários simples, o comportamento reológico deste modelo é idêntico ao do modelo original do fluido FENE-CR. Contudo, podem surgir eventuais diferenças quando o termo desprezado é importante como, por exemplo, num escoamento com forte convecção local. Este modelo (FENE-MCR) foi utilizado em diversos trabalhos numéricos, tais como Oliveira [97] no estudo do escoamento viscoelástico através de uma expansão plana 1:3 e Rocha *et al.* [133] também no estudo viscoelástico numa expansão plana mas com razão de 1:4.

Os três modelos da família FENE atrás descritos foram utilizados nesta tese para descrever o escoamento viscoelástico, encontrando-se explicados com detalhe na Secção 3.2. Para além dos modelos reológicos aqui descritos poderão ser encontrados na literatura da especialidade outros mais complexos para líquidos poliméricos, por exemplo o modelo de Pom-Pom desenvolvido por McLeish & Larson [81], que tem vindo a ganhar popularidade. Para maiores detalhes sobre equações reológicas e a teoria que lhes estão subjacentes consultar em Bird *et al.* [21,22], Larson [71] ou Verbeeten [151].

2.5 – Métodos de cálculo numérico

Tal como já referido, as equações necessárias para resolver um problema de fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas são as habituais equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, acrescidas por um conjunto de equações às derivadas parciais que representam o transporte das componentes do tensor das tensões. Normalmente, este conjunto de equações não é passível de resolução por forma analítica sendo, por isso, necessário recorrer aos métodos numéricos. Os métodos mais utilizados em escoamentos viscoelásticos são o das diferenças finitas, o dos elementos finitos e o dos volumes finitos. O método das diferenças finitas foi um dos primeiros métodos a aparecer e

consiste na aproximação das derivadas nas equações diferenciais por meio de séries de Taylor. Em meados dos anos 70 surgem os primeiros trabalhos publicados com este método, Crochet & Pilate [36] e Perera & Walters [109]. Com o aparecimento de técnicas mais estáveis este método na sua forma original entrou em desuso devido, essencialmente, a não garantir a conservação das quantidades físicas.

No método dos elementos finitos a solução das equações diferenciais é aproximada por uma função em cada um dos elementos que compõem o domínio de cálculo. Este método tem a vantagem de ser mais versátil geometricamente, tornando-se atractivo principalmente para modelar geometrias complexas. No entanto, é mais exigente em termos de recursos computacionais, porque requer mais memória e capacidade computacional. Isto pode tornar-se mais evidente quando se passa para problemas em escoamentos viscoelásticos, devido a complexidade da equação constitutiva reológica. Baaijens [16] apresenta uma revisão da técnica dos elementos finitos aplicada à reologia computacional.

No início dos anos 90, o método dos volumes finitos (sigla FVM, designação inglesa de *Finite Volume Method*) começou a ser utilizado na simulação de escoamentos (Hu & Joseph [63] e Yoo & Na [160]) devido ao crescente interesse dos investigadores em analisar problemas e fluidos cada vez mais complexos. Com este método a discretização das equações do modelo matemático guia-se pelo princípio simples de balanços de fluxos em volumes de controlo discretos que compõem a malha computacional.

Os volumes finitos têm visto a sua popularidade aumentar na dinâmica de fluidos computacional envolvendo fluidos não newtonianos. Isto por se adequar a malhas complexas, por proporcionar maior estabilidade numérica e por ser mais vantajoso em termos de tempo de processamento e espaço computacional, quando comparado com o método dos elementos finitos (Huang *et al.* [64] e Fan *et al.* [46]). Desta forma, esta metodologia é uma alternativa viável na obtenção de soluções numéricas com fluidos viscoelásticos.

Nesta tese a previsão dos escoamentos foi efectuada tendo como base um algoritmo formulado segundo o método dos volumes finitos. Este método numérico tem sido testado com sucesso em diversos trabalhos científicos publicados anteriormente como, por exemplo, Oliveira *et al.* [103], Oliveira [95] e Alves *et al.* [7,11], relacionados com modelação de escoamentos viscoelásticos descritos por diversos modelos reológicos diferenciais. Uma descrição mais elaborada deste método numérico encontra-se no Capítulo 5.

Capítulo 3

Equações matemáticas

A maior parte dos escoamentos de fluidos poderão ser descritos matematicamente por um conjunto de equações diferenciais que determinam a relação entre velocidades, pressão e tensões. Este conjunto de equações é composto pelas habituais equações de conservação da massa e da quantidade de movimento. A estas duas equações será necessário juntar uma equação constitutiva reológica que relaciona o campo de tensões com o campo cinemático das deformações e taxas de deformação. Neste capítulo serão apresentadas as equações de governo que definem um escoamento não newtoniano com propriedades viscoelásticas. Primeiramente, apresentam-se as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento e, posteriormente, são apresentadas as diversas equações constitutivas que advêm da teoria cinética molecular (FENE, Bird et al. [22]) e que serão objecto de estudo neste trabalho.

3.1 – Equações de conservação

As equações de governo que regem o escoamento estacionário, laminar, incompressível e isotérmico de um fluido viscoelástico são as habituais equações de conservação da massa e da quantidade de movimento escritas na forma vectorial como:

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

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \equiv \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{tot} \quad (3.2)$$

onde \mathbf{u} representa o vector velocidade (com componentes u , v , e w segundo as direcções x , y e z , respectivamente), t o tempo, ρ a massa volúmica do fluido, p a pressão e $\boldsymbol{\tau}_{tot}$ o tensor das tensões extra. O termo $D(v)/Dt = \partial(v)/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla(v)$ representa a derivada material ou substancial da propriedade v .

Em situações envolvendo fluidos complexos, por exemplo quando são adicionadas pequenas quantidades de polímero a um solvente newtoniano, a solução adquire propriedades viscoelásticas. Os fluidos considerados neste estudo são soluções poliméricas compostas por uma mistura de um solvente newtoniano com um soluto polimérico. Estas soluções poliméricas são assumidas como homogéneas, ou seja, a concentração em polímero é a mesma em qualquer ponto do escoamento. Para descrever o comportamento destes fluidos é necessário definir uma relação entre a tensão e a deformação. É também assumido que o tensor das tensões extra da solução polimérica pode ser representado como a soma de uma parte newtoniana resultante do solvente, segundo a usual lei de Newton da viscosidade dada por:

$$\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \equiv 2\eta_s \mathbf{D}, \quad (3.3)$$

com uma componente não newtoniana $\boldsymbol{\tau}_p$, devido à presença de moléculas poliméricas complexas que introduzem características elásticas, resultando na seguinte equação:

$$\boldsymbol{\tau}_{tot} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p = 2\eta_s \mathbf{D} + \boldsymbol{\tau}_p \quad (3.4)$$

No seguimento deste trabalho adoptar-se-á a notação $\boldsymbol{\tau} \equiv \boldsymbol{\tau}_p$, sendo η_s a viscosidade do solvente (assumida constante), $(\nabla \mathbf{u})^T$ a transposta do gradiente de velocidade e \mathbf{D} o tensor velocidade de deformação, $\mathbf{D} = 1/2(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$. O parâmetro $\beta = \eta_s/\eta_0$ define a razão entre a viscosidade do solvente newtoniano (η_s) e a viscosidade total da mistura (η_0) definida pela seguinte expressão:

$$\eta_0 = \eta_s + \eta_p = \beta\eta_0 + (1 - \beta)\eta_0 \quad (3.5)$$

Como o próprio nome indica, o tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ é uma grandeza tensorial que depende da posição e da orientação do plano sobre o qual as forças associadas a $\boldsymbol{\tau}$ estão a ser avaliadas, ver Fig. 3.1.

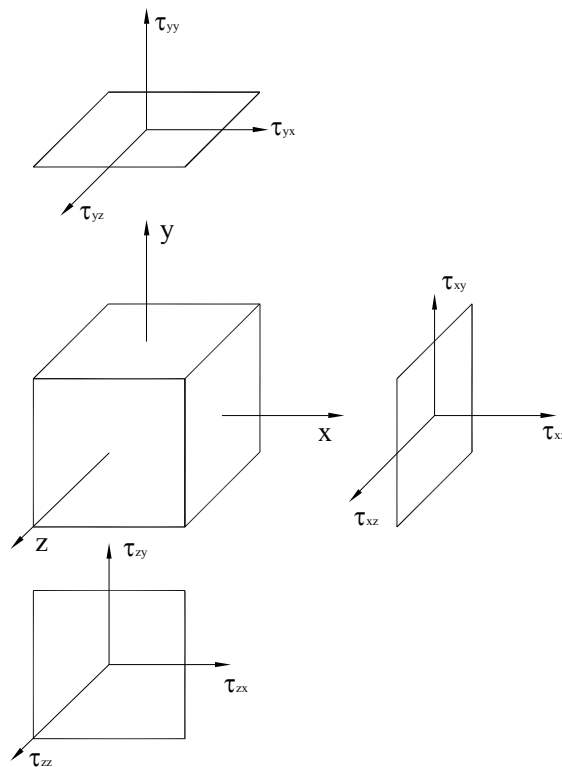


Figura 3.1 – Representação esquemática do tensor das tensões num referencial cartesiano.

O tensor das tensões extra será determinado através de uma equação constitutiva reológica, que será descrita na próxima secção. Admitindo que $\boldsymbol{\tau}$ é um tensor simétrico, num referencial cartesiano escreve-se da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\tau} \equiv \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Analisando as equações atrás descritas pode constatar-se que para simular o escoamento de um fluido com propriedades viscoelásticas é necessário resolver um sistema de 10 equações às derivadas parciais, no caso de uma geometria tridimensional. As variáveis dependentes que compõem o problema são definidas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Variáveis dependentes para o caso genérico tridimensional do escoamento.

Equação	Nº de Equações	Variáveis dependentes	Nº de variáveis de dependentes
Continuidade (Eq. 3.1)	1	p	1
Quant. de movimento (Eq. 3.2)	3	u, v, w	3
Constitutiva reológica FENE-P (Eq. 3.24) FENE-CR (Eq. 3.27) FENE-MCR (3.30)	6 (tensor simétrico)	$\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yy}, \tau_{yz}, \tau_{zz}$	6
Total	10	---	10

3.2 – Equações constitutivas

Actualmente, existem na literatura da especialidade diversos modelos constitutivos capazes de descrever efeitos viscoelásticos presentes no escoamento. A escolha do tipo de equação constitutiva a utilizar depende principalmente das características do fluido para modelar um determinado problema.

A equação constitutiva reológica utilizada para descrever o tensor das tensões poliméricas ($\boldsymbol{\tau} \equiv \boldsymbol{\tau}_p$) no presente trabalho será do tipo FENE (Bird *et al.* [22]). Esta equação é baseada na teoria cinética para moléculas com extensão elástica finita e não-linear, que traduz de forma adequada o comportamento reológico de soluções poliméricas líquidas com moderada ou forte diluição. No estudo de soluções poliméricas diluídas as moléculas de polímero são normalmente representadas pela ligação de duas esferas a uma mola, conforme

representado esquematicamente na Fig. 3.2. Este modelo representa o comportamento da estrutura molecular do polímero dispersa no solvente newtoniano, designado por modelo *dumbbell* (conjunto esfera-mola).

3.2.1 – Modelo hookeano

No caso de se estar na presença de um escoamento com solvente newtoniano, o conjunto esfera-mola sofre movimentações lineares e distorções devido às forças viscosas exercidas nas esferas pelo próprio solvente. Existem ainda forças de atracção/repulsão entre esferas devidas à elasticidade da mola. Normalmente, num modelo simples, assume-se que as forças elásticas entre as esferas são proporcionais ao estiramento da mola. Esta simplificação resulta no modelo hookeano em que a força de conexão $F^{(c)}$ da mola é representada pela seguinte expressão (Bird *et al.* [22]):

$$F^{(c)} = HQ \quad (3.7)$$

onde $Q (= r_2 - r_1, \text{ ver Fig. 3.2})$ é o vector de ligação entre as esferas e H é a constante da mola elástica.

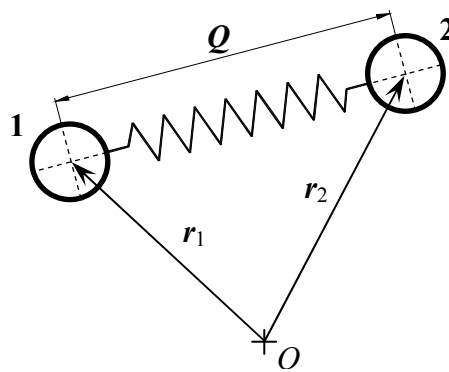


Figura 3.2 – Modelo *dumbbell* (conjunto esfera-mola).

Este é o modelo mais simples resultante da teoria cinética para uma solução diluída de polímeros lineares flexíveis. Em resumo, o modelo hookeano consiste na representação das interações moleculares do polímero como uma ligação de duas esferas através de uma mola hookeana, estando este sistema suspenso num fluido newtoniano, conforme ilustrado na Fig. 3.2.

Para se chegar a uma equação constitutiva macroscópica, a parte polimérica do tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ é obtida usando a expressão de Kramers [70] expressa da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\tau} = n \langle \mathbf{QF}^{(c)} \rangle - nkT\mathbf{I} \quad (3.8)$$

juntamente com a aplicação da expressão de Giesekus [52], representada por:

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{n\zeta}{4} \langle \overset{\nabla}{\mathbf{QQ}} \rangle \quad (3.9)$$

A convenção de sinais adoptada nas equações (3.8) e (3.9) é inversa relativamente às que se apresentam no livro de Bird *et al.* [22]. O termo $n \langle \mathbf{QF}^{(c)} \rangle$ representa a contribuição da tensão na conexão do conjunto esfera-mola, n é o número de moléculas poliméricas por unidade de volume e $\mathbf{F}^{(c)}$ corresponde à força de conexão da mola dada pela Eq. (3.7). O parêntesis $\langle \cdot \rangle = \int \cdot \psi(\mathbf{Q}) d\mathbf{Q}$ define o valor médio sobre o conjunto das moléculas no elemento de volume, onde $\psi(\mathbf{Q})$ representa a função de distribuição. O termo $-nkT\mathbf{I}$ surge devido ao movimento browniano, k é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e \mathbf{I} é a matriz identidade. Na Eq. (3.9) o parâmetro ζ corresponde ao coeficiente de atrito de Stokes e o símbolo $\overset{\nabla}{(\cdot)}$ representa a derivada convectiva superior de Oldroyd [89] expressa pela seguinte equação para o tensor \mathbf{A} :

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{\mathbf{A}} &= \frac{D\mathbf{A}}{Dt} - (\nabla\mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot (\nabla\mathbf{u}) = \\ & \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{A} - (\nabla\mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot (\nabla\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Introduzindo a Eq. (3.7) na Eq. (3.8), a contribuição polimérica para o modelo hookeano é expressa por:

$$\boldsymbol{\tau} = nH \langle \mathbf{QQ} \rangle - nkT\mathbf{I} \quad (3.11)$$

Aplicando a regra da derivada convectiva superior da Eq. (3.10) na Eq. (3.11), utilizando também a expressão que resulta de $\langle \overset{\nabla}{\mathbf{Q}} \mathbf{Q} \rangle$ da Eq. (3.9), obtém-se a seguinte equação diferencial para a evolução do tensor das tensões poliméricas:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (3.12)$$

onde foi usado o resultado de que a derivada convectiva superior da matriz identidade é dada por $\overset{\nabla}{\mathbf{I}} = -\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T = -2\mathbf{D}$. Foram também usadas as definições para o coeficiente de viscosidade do polímero $\eta_p = nkT\lambda$ e para o tempo de relaxação do fluido $\lambda = \zeta/4H$.

Desta forma, pode constatar-se que a equação constitutiva para o tensor das tensões poliméricas (Eq. (3.12)) associada ao modelo hookeano segundo a teoria molecular é idêntica, macroscopicamente, à equação de Oldroyd-B (Oldroyd [89,90]): que foi obtida algum tempo antes com base na mecânica dos meios contínuos. Talvez devido à simplicidade da sua dedução, este modelo reológico apresenta algumas inconveniências e as mais importantes advêm do facto de a viscosidade de corte ser constante e da extensibilidade do conjunto esfera-mola poder ser infinita. Uma forma para contornar este problema é substituir a mola hookeana por uma mola com comportamento não-linear, cuja rigidez aumenta com o estiramento, de modo a limitar a extensibilidade a um valor máximo (não infinito) e que será descrito com mais pormenor na próxima subsecção.

3.2.2 – Modelo não-hookeano (modelo FENE)

A relação linear hookeana da força da mola é realista para problemas que envolvam unicamente pequenas deformações, não sendo assim necessário impor nenhum limite na extensão que o conjunto esfera-mola possa sofrer. Uma forma de ultrapassar esta limitação de carácter não físico, e uma vez que grandes deformações têm um papel fundamental em problemas reológicos, será através da utilização de um modelo que tenha extensibilidade finita, tal como referido na subsecção anterior. Modelos não-lineares com extensibilidade elástica finita (com a designação inglesa de FENE, Bird *et al.* [22]) são actualmente muito utilizados no cálculo numérico de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Estes modelos constitutivos reológicos são muito úteis porque oferecem a possibilidade de descrever o estiramento que ocorre no polímero e a orientação das moléculas em escoamentos complexos.

Estes modelos representam, de forma aproximadamente adequada, a reologia de soluções diluídas e semi-diluídas de polímeros e foram usados, por exemplo, por Purnode & Legat [123], Remmelgas & Leal [124] e Oliveira [97].

Uma maneira de introduzir este tipo de não-linearidades é através da utilização de uma mola com extensibilidade elástica finita e característica não-linear, segundo a função introduzida por Warner [156], de forma a obter-se uma viscosidade dependente da taxa de deformação (comportamento reofluidificante – *shear-thinning*, do inglês). Para descrever a força de conexão da mola no modelo não-hookeano, Warner [156] definiu a seguinte expressão:

$$\mathbf{F}^{(c)} = \frac{H\mathbf{Q}}{1 - (\mathbf{Q}/Q_0)^2} \quad (\mathbf{Q} \leq Q_0) \quad (3.13)$$

onde $Q^2 = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}$ e Q_0 ($Q_0^2 = \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle_{\max}$) representa o comprimento máximo de estiramento da mola. Nesta equação a força da mola tem um comportamento linear para pequenas extensões (aproximando-se do modelo hookeano), mas tornar-se-á mais rígida à medida que é estendida. Todavia, esta extensão não poderá ultrapassar o valor de Q_0 . Assim, nos modelos FENE surge um novo parâmetro adimensional, que mede os efeitos elongacionais, e é definido por $b = HQ_0^2/kT$. No caso do modelo hookeano tem-se $b \rightarrow \infty$ e o termo em Q_0 na Eq. (3.13) desaparece. A equação para determinar o tensor das tensões poliméricas é agora dada por:

$$\boldsymbol{\tau} = nH \left\langle \frac{\mathbf{Q}\mathbf{Q}}{1 - (\mathbf{Q}/Q_0)^2} \right\rangle - nkT\mathbf{I} \quad (3.14)$$

juntamente com a aplicação da Eq. (3.9).

Para deduzir agora uma equação constitutiva macroscópica torna-se necessário simplificar a média que aparece na Eq. (3.14). No caso hookeano analisado anteriormente este problema não surgiu, pois a força da mola era linear no deslocamento. O modelo FENE sem simplificação não é muito utilizado no cálculo macroscópico de escoamentos viscoelásticos podendo, no entanto, ser usado em simulações microscópicas (ou micro-macro). Apesar disso, a equação diferencial foi simplificada considerando a distribuição da orientação dos vectores por um método de perturbação e a expressão final para o tensor das tensões polimérica

permite, desde logo, identificar a viscosidade do polímero para $\dot{\gamma} = 0$ representada por (Bird *et al.* [22], pág. 79):

$$\boldsymbol{\tau} = 2nkT\lambda\left(\frac{b}{b+5}\right)\mathbf{D} + \text{outros termos} \Rightarrow \eta_p = nkT\lambda\left(\frac{b}{b+5}\right) \quad (3.15)$$

Neste trabalho serão aplicadas duas formas aproximadas do modelo FENE. A primeira foi desenvolvida a partir da simplificação sugerida por Peterlin (modelo FENE-P, Bird *et al.* [22]), e a segunda, mais tarde, por Chilcott e Rallison (modelo FENE-CR [31]). Um terceiro modelo denominado por FENE-CR modificado (FENE-MCR), resulta duma simplificação já a nível da equação diferencial final, também será utilizado. Todos estes modelos serão descritos nas próximas subsecções.

3.2.2.1 – Modelo FENE-P

O modelo FENE-P resulta duma simplificação da Eq. (3.14), sendo uma boa aproximação da teoria cinética do modelo FENE, particularmente quando o escoamento é elongacional, onde a distribuição do conjunto esfera-mola poderá ser assumido como altamente localizado (Tanner [145]). A aproximação no modelo FENE-P consiste em transformar a média da fracção em média dos factores (numerador e denominador) na Eq. (3.14), ou seja, a força é dada por:

$$\mathbf{F}^{(c)} = \frac{H\mathbf{Q}}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} \quad (3.16)$$

obtendo-se assim um modelo próximo do FENE original, seguindo uma ideia proposta por Peterlin [110] e, por isso, o modelo designa-se FENE-P. Desta forma, o primeiro termo do lado direito da Eq. (3.14) pode ser decomposto da seguinte maneira, tal como descrito em Bird *et al.* [22]:

$$\left\langle \frac{\mathbf{Q}\mathbf{Q}}{1 - (Q^2/Q_0^2)} \right\rangle = \frac{\langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} + eQ_0^2\mathbf{I} \quad (3.17)$$

isto é, substitui-se a média da razão pela razão das médias. Para compensar o erro introduzido por essa transformação surge um termo de contribuição isotrópica extra que contém o parâmetro $e = 2/(b(b+2))$ (ver Bird *et al.* [22], pág. 89).

A expressão de Kramers definida pela Eq. (3.14) poderá ser representada por uma expressão aproximada dada por:

$$\boldsymbol{\tau} = nH \frac{\langle \boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q} \rangle}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} - (1 - eb)nkT\boldsymbol{I} \quad (3.18)$$

onde se irá introduzir a função Z :

$$\frac{1}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} = Z \Rightarrow \left\langle \frac{Q^2}{Q_0^2} \right\rangle = 1 - \frac{1}{Z} \quad (3.19)$$

Para se obter uma equação constitutiva aproximada deve-se eliminar todas as quantidades que aparecem nas Eqs. (3.9) e (3.18) dentro do operador da média ($\langle \cdot \rangle$). Para tal, começa-se por aplicar o operador traço na Eq. (3.18) que, resolvendo em função $\langle Q^2/Q_0^2 \rangle$, resulta em:

$$tr\boldsymbol{\tau} = nHQ_0^2 \frac{\langle Q^2/Q_0^2 \rangle}{1 - \langle Q^2/Q_0^2 \rangle} - 3(1 - eb)nkT \Rightarrow Z = 1 + \frac{3}{b} \left[(1 - eb) + \frac{tr\boldsymbol{\tau}}{3nkT} \right] \quad (3.20)$$

em que $tr(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}) = Q^2$ e $tr\boldsymbol{I} = 3$. Assim, a Eq. (3.18) poderá ser reescrita da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\tau} = nHZ \langle \boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q} \rangle - (1 - eb)nkT\boldsymbol{I} \quad (3.21)$$

resultando na expressão de Kramers aproximada para o modelo FENE-P.

Ao aplicar a regra da derivada convectiva superior ao termo $\left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{Z} \right)^\nabla$ e utilizando a

Eq. (3.9) para eliminar o termo $\left\langle \frac{\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}}{Z} \right\rangle^\nabla$ na equação (3.21), obtém-se a equação constitutiva final expressa por (de acordo com Bird *et al.* [22]):

$$Z\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} - \lambda [\boldsymbol{\tau} + (1 - eb)nkT\mathbf{I}] \frac{D \ln Z}{Dt} = 2(1 - eb)nkT\lambda \mathbf{D} \quad (3.22)$$

Na dedução foram usadas as seguintes relações:

$$\begin{cases} \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{Z} \right) = -\frac{1}{Z^2} \frac{DZ}{Dt}; \quad \frac{1}{Z} \frac{DZ}{Dt} = \frac{D \ln Z}{Dt} \\ \left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{Z} \right) = \frac{1}{Z} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\tau} \frac{1}{Z^2} \frac{DZ}{Dt} = \frac{1}{Z} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau} \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{Z} \right) \\ \left(\frac{\mathbf{I}}{Z} \right) = \frac{1}{Z} \overset{\nabla}{\mathbf{I}} - \mathbf{I} \frac{1}{Z^2} \frac{DZ}{Dt} = \frac{1}{Z} \overset{\nabla}{\mathbf{I}} + \mathbf{I} \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{Z} \right) \end{cases} \quad (3.23)$$

onde a função de extensibilidade Z é dada pela Eq. (3.20). Daqui em diante será utilizada a notação $f \equiv Z$ nos restantes modelos reológicos. A equação constitutiva do modelo FENE-P pode também ser escrita da seguinte forma mais compacta (agrupando os termos da Eq. (3.22)):

$$\boldsymbol{\tau} + \left(\frac{\lambda \boldsymbol{\tau}}{f} \right) = 2 \frac{a\eta_p}{f} \mathbf{D} - \frac{D}{Dt} \left(\frac{a\eta_p}{f} \right) \mathbf{I} \quad (3.24)$$

A função de extensibilidade f , quando apresentada em função da variável dependente $\boldsymbol{\tau}$, é obtida a partir da Eq. (3.20) resultando na seguinte expressão final:

$$f = f(\text{tr}\boldsymbol{\tau}) = \frac{L^2 + (\lambda/a\eta_p) \text{tr}\boldsymbol{\tau}}{L^2 - 3} \quad (3.25)$$

com $a = L^2 / (L^2 - 3)$ e L^2 definido em função de b de seguida.

O modelo FENE-P é utilizado frequentemente na simulação macroscópica de escoamentos viscoelásticos porque oferece um bom compromisso entre simplicidade e generalidade, e é uma aproximação razoável do modelo FENE original. Contudo, estudos baseados em simulações dinâmicas brownianas para escoamentos simples de corte e elongacionais, como modelos FENE (Bird *et al.* [22]), FENE-P (Van den Brule [149]), e de conjuntos esfera-mola (Herrchen & Öttinger [61] e Keunings [68]), mostram que a

simplificação feita no denominador da Eq. (3.16) (introdução do valor médio para Q) pode causar modificações significativas no comportamento reológico.

Neste modelo FENE-P podem obter-se duas versões a partir da Eq. (3.24):

- com $e = 2/b(b+2)$ (Bird *et al.* [22]); onde $\eta_p = nkT\lambda \frac{b}{b+5}$, $a = \frac{b+5}{b+2}$ e $b = L^2 - 5$;
- ou $e = 0$, do modelo original FENE-P (Bird *et al.* [23]); onde $\eta_p = nkT\lambda \frac{b}{b+3}$,
 $a = \frac{b+3}{b}$ e $b = L^2 - 3$.

Em ambos os casos é satisfeita a condição de que $a = L^2 / (L^2 - 3)$. Na Eq. (3.25) $L^2 \equiv 3Q_0^2 / Q_{eq}^2$ mede os efeitos alongacionais, sendo proporcional ao quadrado da razão entre o comprimento das moléculas do polímero quando estão completamente estendidas e o seu comprimento em estado de equilíbrio. A variável Q_{eq} ($Q_{eq}^2 = 3kT/aH$) corresponde ao comprimento em equilíbrio descrito, por exemplo, no trabalho de Oliveira [96]. O parâmetro adimensional L^2 tem o mesmo significado que o parâmetro b no modelo FENE-P, que foi utilizado nesta subsecção para descrever esse modelo constitutivo.

Por vezes aparecem versões mais simplificadas do modelo FENE-P colocando o valor de $a = 1$, o que é válido no caso de se considerar um valor elevado para o parâmetro de extensibilidade L^2 . Isto acontece uma vez que $a = L^2 / (L^2 - 3)$ e quando $L^2 \rightarrow \infty$ tem-se $a \rightarrow 1$. Todavia, aparecem na literatura especializada trabalhos numéricos onde os valores de L^2 são baixos. Refere-se a título de exemplo os estudos apresentados por Purnode & Crochet [122] e Oliveira *et al.* [99]. Nestes casos não é adequado assumir a simplificação ao modelo FENE-P em que $a = 1$. Assim sendo, neste trabalho quando for utilizado o modelo FENE-P para a simulação numérica o valor do termo a não será unitário, mas dependerá do valor de L^2 .

A equação (3.24), conjuntamente com a Eq. (3.25), é resolvida em simultâneo com a equação de conservação da massa (Eq. (3.1)) e da quantidade de movimento (Eq. (3.2)), de forma a determinar o movimento do fluido FENE-P. Pode verificar-se que quando o valor do parâmetro $L^2 \rightarrow \infty$, a função de extensibilidade $f \rightarrow 1$ (ver Eq. (3.25)). Desta forma, a equação constitutiva reduz-se à equação válida para um fluido do tipo Oldroyd-B (Eq. (3.12))

(ver Eq. (3.24) quando $f \rightarrow 1$ e $a \rightarrow 1$, com $L^2 \rightarrow \infty$). O modelo UCM é um caso particular do modelo Oldroyd-B quando não existe viscosidade do solvente.

3.2.2.2 – Modelo FENE-CR

Na literatura da especialidade encontram-se algumas variantes do modelo constitutivo FENE-P originalmente proposto por Bird *et al.* [23]. Em particular, em 1988 Chilcott e Rallison [31] propuseram uma modificação do modelo FENE-P, escrevendo a Eq. (3.18), com $e = 0$, da seguinte maneira:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{nH \langle \mathbf{Q}\mathbf{Q} \rangle - nkT\mathbf{I}}{1 - \langle Q^2 / Q_0^2 \rangle} \quad (3.26)$$

de forma a descrever um fluido de Boger (James [66]). Isto significa que, ao contrário do modelo FENE-P, o líquido descrito pelo modelo FENE-CR terá uma viscosidade constante.

Partindo da Eq. (3.26), juntamente com a Eq. (3.9), obtém-se a expressão final da equação constitutiva para este modelo FENE-CR expressa por:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{f} \right)^\nabla = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (3.27)$$

com a viscosidade polimérica definida agora como $\eta_p = nkT\lambda$ e a função de extensibilidade f dada por (partindo da Eq. (3.17) com $e = 0$):

$$f = f(\text{tr}\boldsymbol{\tau}) = \frac{L^2 + (\lambda/\eta_p) \text{tr}\boldsymbol{\tau}}{L^2 - 3} \quad (3.28)$$

Este modelo simplificado ficou conhecido como FENE-CR, apresentando algumas diferenças em relação ao modelo FENE-P. O modelo FENE-CR inclui efeitos de elasticidade e de refluidificação nas tensões normais, mas tem viscosidade de corte $\eta(\dot{\gamma})$ constante, ao contrário do modelo FENE-P, no qual a viscosidade de corte decresce proporcionalmente com o aumento da velocidade de deformação (comportamento refluidificante).

3.2.2.3 – Modelo FENE-MCR

Uma outra simplificação usual em escoamentos estacionários consiste em desprezar a variação de $1/f$, fazendo com que a função de extensibilidade f fique fora da derivada convectiva superior, ou seja:

$$\left(\frac{\tau}{f}\right)^\nabla = \frac{1}{f} \tau^\nabla + \underbrace{\tau \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{f}\right)}_{\text{termo desprezado}} \approx \frac{1}{f} \tau^\nabla \quad (3.29)$$

Esta modificação no modelo FENE-CR original foi proposta e utilizada por Coates *et al.* [32] num estudo numérico do escoamento numa contracção axissimétrica e, mais tarde, por outros autores em inúmeros problemas viscoelásticos. Desta forma, a equação constitutiva deste modelo FENE-CR modificado (FENE-MCR) resulta na seguinte expressão:

$$\tau + \frac{\lambda}{f} \tau^\nabla = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (3.30)$$

com a função de extensibilidade f expressa de forma idêntica à do modelo FENE-CR (Eq. (3.28)).

3.3 – Adimensionalização das equações de governo

Para facilitar a análise dos resultados optou-se por adimensionalizar as equações de governo (equações de conservação e constitutiva). Nesta secção serão apresentadas as equações de governo na forma adimensional, de maneira a ficar claro quais os parâmetros adimensionais que influenciam. A adimensionalização das equações é baseada nas escalas características do problema em estudo, tais como a altura do canal de entrada d e a velocidade média U , tendo em conta as seguintes variáveis adimensionais:

$$u_i = \frac{\bar{u}_i}{U}, \quad x_i = \frac{\bar{x}_i}{d}, \quad t = \frac{\bar{t}}{d/U}, \quad p = \frac{\bar{p}}{\rho U^2} \quad \text{e} \quad \tau_{ij} = \frac{\bar{\tau}_{ij}}{\eta_p U/d} \quad (3.31)$$

onde as variáveis com um traço superior identificam as variáveis dimensionais das equações apresentadas anteriormente.

Aplicando as adimensionalizações da Eq. (3.31) às equações de conservação da massa (Eq. (3.1)) e da quantidade de movimento (Eq. (3.2)) obtém-se:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.32)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1-\beta}{Re} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (3.33)$$

enquanto as equações constitutivas resultam em:

- Modelo FENE-P (Eq. (3.24)):

$$\frac{We}{f} \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} + \boldsymbol{\tau} \left(1 + We \frac{D(1/f)}{Dt} \right) = a(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \frac{We}{f} (\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}) - \frac{D(a/f)}{Dt} \mathbf{I} \quad (3.34)$$

- Modelo FENE-CR (Eq. (3.27)):

$$\frac{We}{f} \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} + \boldsymbol{\tau} \left(1 + We \frac{D(1/f)}{Dt} \right) = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \frac{We}{f} (\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}) \quad (3.35)$$

- Modelo FENE-MCR (Eq. (3.30)):

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{We}{f} \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \frac{We}{f} (\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}) \quad (3.36)$$

Em relação à função de extensibilidade f de cada um dos modelos constitutivos atrás apresentados na forma adimensional, após aplicar as normalizações da Eq. (3.31) obtém-se:

- Modelo FENE-P (Eq. (3.25)):

$$f = \frac{L^2 + (We/a) \text{tr} \boldsymbol{\tau}}{L^2 - 3} \quad (3.37)$$

- Modelo FENE-CR e FENE-MCR (Eq. (3.28)):

$$f = \frac{L^2 + We \operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}}{L^2 - 3} \quad (3.38)$$

3.4 – Parâmetros adimensionais

Para o escoamento de um fluido viscoelástico, cujo comportamento reológico seja regido pelos modelos que foram analisados neste capítulo (modelo FENE-P, FENE-CR e FENE-MCR), definem-se os seguintes parâmetros independentes adimensionais provenientes da adimensionalização das equações de governo apresentada na Secção 3.3:

- O parâmetro de extensibilidade, L^2

Este parâmetro é um novo parâmetro adimensional dos modelos FENE que define a extensibilidade adimensional máxima das moléculas do modelo *dumbbell* (Byars *et al.* [28] e Chilcott & Rallison [31]), tal como foi referido anteriormente quando se desenvolveu as equações constitutivas na Secção 3.2. De uma maneira geral, L^2 é proporcional ao quadrado da razão entre o comprimento das moléculas do polímero quando estão completamente estendidas e o seu comprimento em estado de equilíbrio. Uma vez que o estiramento máximo das moléculas poliméricas (medido por L^2) é finito, quando se aplica uma deformação no escoamento a taxa de aumento das tensões normais associadas começa a aumentar à medida que as moléculas são significativamente deformadas.

- A razão da viscosidade do solvente, β

O parâmetro β está relacionado com a concentração polimérica na mistura e é dado pela razão da viscosidade do solvente newtoniano (η_s) e da viscosidade total da mistura polimérica para taxa de deformação nula, $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ ($\eta_0 = \eta_s + \eta_p$, tal como definido na Secção 3.1):

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0} = \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p} \quad (3.39)$$

onde $\eta_s = \beta\eta_0$ e $\eta_p = (1 - \beta)\eta_0$. Ao definir-se uma concentração polimérica como $c = \eta_p/\eta_s$, então $\beta = 1/(1 + c)$, mostrando que β é, aproximadamente, inversamente proporcional a c .

- O número de Reynolds, Re

O número de Reynolds corresponde, como é usual, à razão entre as forças inerciais e viscosas presentes no escoamento e é definido da seguinte forma:

$$Re = \frac{\rho U d}{\eta_0} \quad (3.40)$$

A viscosidade usada é aquela para $\dot{\gamma} = 0$, no caso de modelos reofluidificantes como o FENE-P.

- O número de Débora (De) ou número de Weissenberg (We):

Este parâmetro mede os efeitos elásticos do fluido e é expresso por:

$$We = De = \frac{\lambda U}{d} \quad (3.41)$$

sendo relacionado pelas forças elásticas com as forças viscosas do escoamento através da razão do tempo de relaxação do fluido (λ) e o intervalo de tempo no qual é aplicada a tensão ou deformação no escoamento (d/U). O tempo de relaxação do fluido λ para uma taxa de corte nula ($\dot{\gamma} = 0$) é constante. Nota-se que em geral o número de Débora (De) e o número de Weissenberg (We) não coincidem. A definição dada é válida para o número de Débora, devendo ser usada em escoamentos não estacionários. O número de Weissenberg é geralmente definido como λ multiplicado por uma taxa de corte característica do escoamento. Em regime estacionário os dois números são muitas vezes coincidentes, como assumido na Eq. (3.41).

Capítulo 4

Funções materiais dos modelos viscoelásticos

No capítulo anterior (Cap. 3) foram descritas as equações na forma vectorial que regem o escoamento e, como se pôde verificar, as equações que descrevem o comportamento de um fluido não newtoniano com propriedades viscoelásticas são mais complexas que no caso do fluido newtoniano. Assim, pretende-se caracterizar qualitativamente estes fluidos e, para tal, é necessário analisar o comportamento das propriedades do fluido em função do tipo de escoamento a que estão submetidos.

Os escoamentos de corte simples e extensional (ou elongacional) são dois tipos de escoamentos frequentemente utilizados para caracterizar os líquidos não newtonianos viscoelásticos. Neste capítulo serão analisados os dois tipos de escoamento em regime estacionário e não estacionário (no caso do escoamento de arranque ou “start-up”) e pode-se, desde já, concluir que as propriedades materiais do escoamento são diferentes nos dois casos. A análise destes escoamentos será feita em separado, uma vez que o movimento relativo de uma partícula material é diferente em cada um dos casos.

4.1 – Funções materiais em escoamento estacionário

Em escoamento estacionário homogéneo o tensor das tensões apenas depende do gradiente do campo de velocidades, ou seja, depende exclusivamente da taxa de deformação. As funções materiais ajudam a classificar o comportamento do fluido e poderão ser usadas para determinar certas constantes das equações constitutivas reológicas (apresentadas no Capítulo 3), tal como descrito, por exemplo, no livro de Gomes de Castro *et al.* [54] ou Bird *et al.* [21].

4.1.1 – Escoamento de corte simples

No escoamento de corte simples (ou escoamento de Couette) o fluido encontra-se confinado entre duas placas planas paralelas. A placa inferior encontra-se fixa (com velocidade nula) e a placa superior desloca-se horizontalmente devido à aplicação de uma força tangencial F em regime constante com uma velocidade U_1 . A velocidade varia linearmente desde zero junto à placa inferior até U_1 junto à placa superior, considerando que não existe escorregamento do fluido sobre as placas, conforme a representação esquemática da Fig. 4.1.

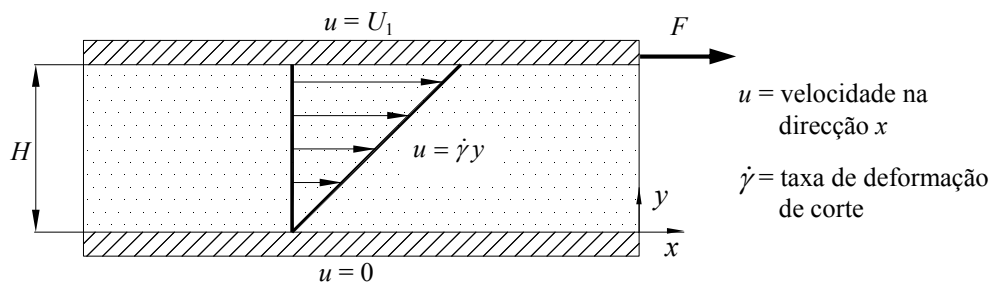


Figura 4.1 – Escoamento de corte simples (ou escoamento de Couette).

O perfil de velocidades é apenas função da coordenada transversal y e varia linearmente entre as placas ($u(y) = \dot{\gamma}y$), pelo que a taxa de deformação de corte ou velocidade de deformação, $\dot{\gamma} \equiv du/dy$, é constante em todo o domínio do escoamento.

Num escoamento de corte simples em estado estacionário é possível determinar as seguintes variáveis materiais: a viscosidade de corte η ; o coeficiente da primeira diferença de tensões normais Ψ_1 ; e o coeficiente da segunda diferença de tensões normais Ψ_2 . Estas propriedades caracterizam o comportamento do fluido, conforme descrito no livro de Gomes

de Castro *et al.* [54], sendo todas função da taxa de deformação $\dot{\gamma}$, e estando as duas últimas relacionadas com o comportamento elástico do fluido.

Para este escoamento bidimensional tem-se $u = \dot{\gamma}y$ e $v = 0$, com:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \dot{\gamma} \text{ e } \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (4.1)$$

4.1.1.1 – Modelo FENE-P

As tensões aplicadas ao escoamento de corte simples estacionário para o caso do modelo FENE-P (Eq. (3.24), com $a = L^2/(L^2 - 3)$ e $e = 0$ (para simplificar)), resultam no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} f(\tau_{kk})\tau_{xx} = 2\lambda\tau_{xy}\frac{\partial u}{\partial y} \\ f(\tau_{kk})\tau_{yy} = 0 \\ f(\tau_{kk})\tau_{xy} = a\eta_p\frac{\partial u}{\partial y} + \lambda\tau_{xy}\frac{\partial u}{\partial y} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx} = \frac{2\lambda\tau_{xy}\dot{\gamma}}{f(\tau_{kk})} \\ \tau_{yy} = 0 \\ \tau_{xy} = \frac{a\eta_p\dot{\gamma}}{f(\tau_{kk})} \end{cases} \quad (4.2)$$

sendo a função de extensibilidade f expressa pela Eq. (3.25).

A tensão normal τ_{xx} pode ser obtida a partir do sistema de equações (4.2) substituindo a equação que define τ_{xy} em τ_{xx} , resultando em:

$$\tau_{xx} = \frac{2a\lambda\eta_p\dot{\gamma}^2}{f^2} = 2a\lambda\eta_p\dot{\gamma}^2 \frac{1}{\left(\frac{L^2 + (\lambda/a\eta_p)\tau_{kk}}{L^2 - 3}\right)^2} \quad (4.3)$$

com o traço do tensor das tensões dado por $\tau_{kk} = \tau_{xx} + \tau_{yy}$. Do sistema de equações (4.2) tem-se $\tau_{yy} = 0$, resultando em $\tau_{kk} = \tau_{xx}$, pelo que a única tensão normal é a axial. Desenvolvendo a Eq. (4.3) obtém-se a seguinte equação cúbica para determinar a solução da componente normal da tensão τ_{xx} :

$$\tau_{xx}^3 + 2\left(\frac{a\eta_p L^2}{\lambda}\right)\tau_{xx}^2 + \left(\frac{a\eta_p L^2}{\lambda}\right)^2\tau_{xx} - \frac{2(a\eta_p)^3(L^2 - 3)^2}{\lambda}\dot{\gamma}^2 = 0 \quad (4.4)$$

Esta equação cúbica poderá reescrever-se seguindo o trabalho de Alves *et al.* [12]:

$$\tau_{xx}^3 + a_1 \tau_{xx}^2 + a_2 \tau_{xx} + a_3 = 0 \quad (4.5)$$

com os coeficientes a_1 , a_2 e a_3 definidos por :

$$\begin{cases} a_1 = 2 \frac{a\eta_p L^2}{\lambda} \\ a_2 = \left(\frac{a\eta_p L^2}{\lambda} \right)^2 \\ a_3 = -\frac{2(a\eta_p)^3 (L^2 - 3)^2}{\lambda} \dot{\gamma}^2 \end{cases} \quad (4.6)$$

A solução real da equação cúbica (Eq. (4.5)) poderá ser obtida utilizando a fórmula de Cardano-Tartaglia (Alves *et al.* [12]) expressa por:

$$\tau_{xx}(\dot{\gamma}) = \sqrt[3]{-\frac{b_1}{2} + \sqrt{\frac{b_1^2}{4} + \frac{b_2^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{b_1}{2} - \sqrt{\frac{b_1^2}{4} + \frac{b_2^3}{27}}} - \frac{a_1}{3} \quad (4.7)$$

com:

$$\begin{cases} b_1 = a_3 - \frac{a_1 a_2}{3} + \frac{2a_1^3}{27} \\ b_2 = a_2 - \frac{a_1^2}{3} \end{cases} \quad (4.8)$$

traduzindo-se assim numa relação explícita entre τ_{xx} e a taxa de deformação de corte $\dot{\gamma}$, juntamente com os parâmetros do modelo FENE-P, apesar de estar apresentada sob uma forma complexa.

A equação da tensão de corte τ_{xy} , obtida a partir do sistema de equações (4.2) e reescrita em termos de τ_{xx} , é dada por:

$$\tau_{xy} = \frac{a\eta_p \dot{\gamma}}{f} = \frac{a\eta_p (L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\lambda}{a\eta_p} \tau_{xx}} \dot{\gamma} \quad (4.9)$$

Adimensionalizando as equações (4.4) e (4.9) com $\bar{\tau}_{ij} = \tau_{ij}/(\eta_p/\lambda)$ resulta em:

$$\bar{\tau}_{xx}^3 + 2aL^2\bar{\tau}_{xx}^2 + (aL^2)^2\bar{\tau}_{xx} - 2a^3(L^2 - 3)^2\lambda^2\dot{\gamma}^2 = 0 \quad (4.10)$$

$$\bar{\tau}_{xy} = \frac{(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\bar{\tau}_{xx}}{a}}\lambda\dot{\gamma} \quad (4.11)$$

Nas Figuras 4.2 e 4.3 mostra-se o comportamento do fluido FENE-P, no que diz respeito às variações da tensão de corte τ_{xy} (Eq. (4.11)) e da tensão normal τ_{xx} (Eq. (4.10)), em função da taxa de deformação adimensional $\lambda\dot{\gamma}$, para valores crescentes do parâmetro de extensibilidade L^2 ($= 10, 100$ e 1000). Pode constatar-se, a partir da Figura 4.2, que o declive da recta é igual a 1 para baixos valores da taxa de deformação ($\lambda\dot{\gamma} < 1$), correspondente à zona em que a viscosidade de corte é constante, mas depois decresce progressivamente com o aumento de $\lambda\dot{\gamma}$, traduzindo a refluidificação da viscosidade de corte inerente ao modelo FENE-P.

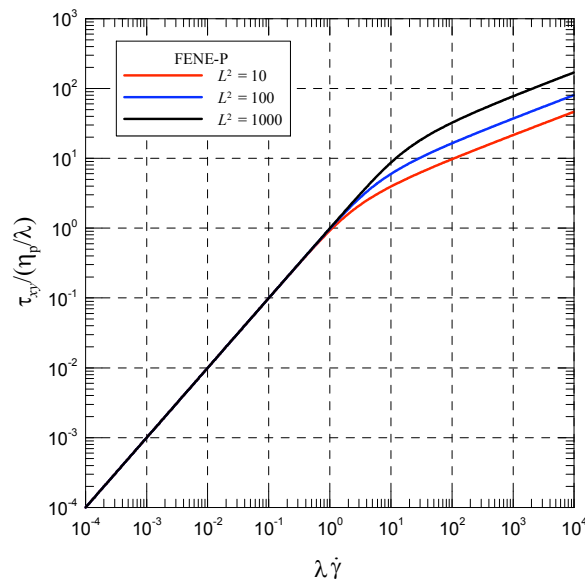


Figura 4.2 – Variação da tensão de corte $\tau_{xy}/(\eta_p/\lambda)$ com a taxa de deformação ($\lambda\dot{\gamma}$) num escoamento de corte simples em regime estacionário para o modelo FENE-P ($\beta = \eta_s/\eta_0 = 0$).

Em relação ao comportamento da tensão normal τ_{xx} , o declive é igual a 2 para baixos valores da taxa de deformação ($\lambda\dot{\gamma} < 1$), o que equivale a dizer que o primeiro coeficiente de tensões normais $\Psi_1 = \tau_{xx}/\dot{\gamma}^2$ é constante, mas que diminui com o aumento de $\lambda\dot{\gamma}$.

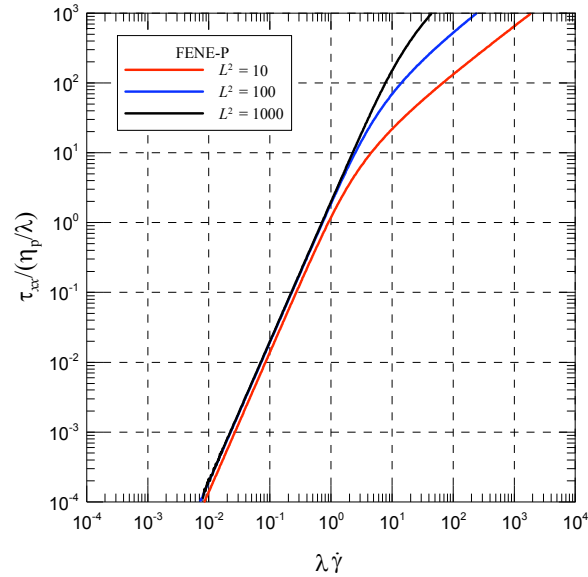


Figura 4.3 – Variação da tensão normal $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ com a taxa de deformação ($\lambda\dot{\gamma}$) num escoamento de corte simples em regime estacionário para o modelo FENE-P ($\beta = \eta_s/\eta_0 = 0$).

Em suma, poder-se-á concluir que a variação de τ_{xx} e τ_{xy} , em função da taxa de deformação adimensional ($\lambda\dot{\gamma}$), é independente do valor da razão de viscosidades do solvente β e apenas depende do valor da viscosidade extensional L^2 .

Nos líquidos poliméricos, devido a uma maior flexibilidade das moléculas, verifica-se experimentalmente que as funções materiais $\eta(\dot{\gamma})$ e $\Psi_1(\dot{\gamma})$ são positivas, enquanto $\Psi_2(\dot{\gamma})$ é quase sempre negativa (Bird *et al.* [25]). Quando se está na presença de um escoamento de corte simples (Fig. 4.1) o fluido viscoelástico desenvolve tensões normais que tendem a afastar as duas placas paralelas. Essa força normal que surge resulta do coeficiente da primeira diferença de tensões normais $\Psi_1(\dot{\gamma})$ não ser nulo (no caso do fluido newtoniano $\Psi_1(\dot{\gamma})=0$). A propriedade material Ψ_1 é definida como o quociente entre a primeira diferença de tensões normais e o quadrado da taxa de deformação:

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) \equiv \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{xx} - \tau_{yy}}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{xx}}{\dot{\gamma}^2} \quad (4.12)$$

com τ_{xx} obtido da solução da Eq. (4.7). Assim, a primeira diferença de tensões normais N_1 é definida pela diferença entre a tensão normal na direcção do escoamento (τ_{xx}) e a tensão na

direcção perpendicular (τ_{yy}). O coeficiente da segunda diferença de tensões normais (Ψ_2) relaciona as outras duas componentes da tensão normal ($N_2 = \tau_{yy} - \tau_{zz}$), sendo dado por:

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{yy} - \tau_{zz}}{\dot{\gamma}^2} = 0 \quad (4.13)$$

É nulo para o fluido FENE-P (com $\tau_{yy} = \tau_{zz} = 0$) num escoamento de corte simples. Em geral, a viscosidade de corte define-se como a razão entre a tensão de corte e a respectiva taxa de deformação, $\eta = \tau_{xy} / \dot{\gamma}$. Para fluido newtoniano o coeficiente da primeira e segunda diferença de tensões normais são nulos ($\Psi_1 = \Psi_2 = 0$).

A viscosidade de corte polimérica η_p é definida da seguinte forma:

$$\eta_p(\dot{\gamma}) \equiv \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} = \frac{a\eta_p(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\lambda}{a\eta_p}\tau_{xx}} \quad (4.14)$$

A viscosidade de corte da mistura resulta da soma da parte do solvente newtoniano (η_s) com a parte do soluto polimérico (η_p), dado por:

$$\eta(\dot{\gamma}) \equiv \eta_s + \eta_p = \eta_s + \eta_p \frac{a(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\lambda}{a\eta_p}\tau_{xx}} \quad (4.15)$$

Adimensionalizando a Eq. (4.15) com $\bar{\eta} = \eta / \eta_0$, onde $\eta_0 (= \eta_s + \eta_p)$ define a viscosidade total da mistura para $\dot{\gamma} = 0$, obtém-se:

$$\frac{\eta(\dot{\gamma})}{\eta_0} = \beta + (1 - \beta) \frac{a(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\lambda}{a\eta_p}\tau_{xx}} \quad (4.16)$$

A Figura 4.4 apresenta as propriedades materiais mais relevantes do modelo FENE-P num escoamento de corte simples estacionário, em função da taxa de deformação adimensional $\lambda\dot{\gamma}$, para valores crescentes do parâmetro de extensibilidade $L^2 = 10, 100$ e 1000 (Fig. 4.4(a) com $\beta = 0$) e para valores crescentes da razão de viscosidades do solvente $\beta = 0.1, 0.5$ e 0.8 (Fig. 4.4(b) com $L^2 = 100$).

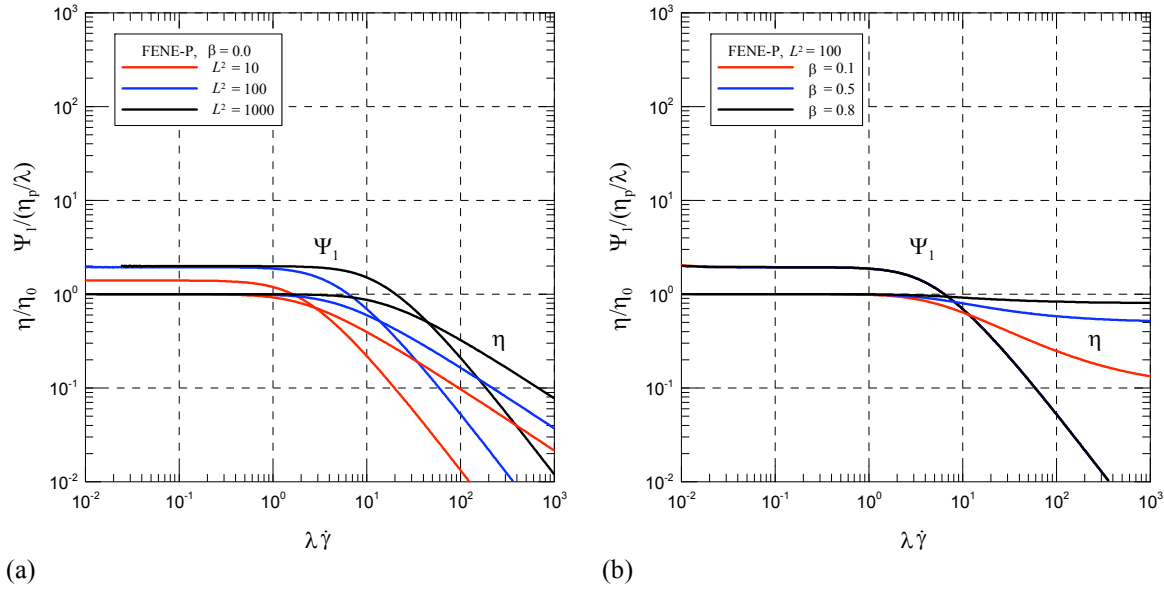


Figura 4.4 – Propriedades reométricas relevantes do modelo FENE-P em função da taxa de deformação ($\lambda \dot{\gamma}$) num escoamento de corte simples: (a) variação de L^2 ($\beta = 0$); e (b) variação de β ($L^2 = 100$).

Pode verificar-se, dos resultados destas figuras, que no modelo FENE-P a função de viscosidade η é constante para taxas de deformação de corte baixas ($\lambda \dot{\gamma}$) e tende a diminuir para valores elevados de $\lambda \dot{\gamma}$. O modelo FENE-P prevê assim um comportamento reológico reofluidificante (*shear-thinning*) para a viscosidade de corte η e para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais Ψ_1 . Este comportamento pode ser explicado pelo grau de orientação das cadeias poliméricas na direcção do escoamento, tal como descrito em Gomes de Castro *et al.* [54]. Para taxas de deformação baixas ($\lambda \dot{\gamma}$) as deformações induzidas são opostas pelo atrito intermolecular, devido às moléculas estarem entrelaçadas, resultando numa viscosidade de corte elevada. À medida que as taxas de deformação de corte vão aumentando as moléculas começam a ficar estendidas (libertando-se do entrelaçamento), e tendem a orientar-se na direcção do escoamento, provocando assim uma diminuição da viscosidade de corte (comportamento reofluidificante).

4.1.1.2 – Modelo FENE-CR (ou FENE-MCR)

Num escoamento de corte simples estacionário o comportamento dos modelos FENE-CR e FENE-MCR são muito idênticos. Desta forma, serão analisados ambos os modelos nesta subsecção.

Partindo da equação constitutiva do modelo FENE-CR (Eq. (3.27)), as tensões aplicadas ao escoamento de corte simples ($u = \dot{\gamma}y$) resultam no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \lambda_{ef} \dot{\tau}_{xx} = 2\lambda_{eq} \tau_{xy} \dot{\gamma} \\ \tau_{yy} + \lambda_{ef} \dot{\tau}_{yy} = 0 \\ \tau_{xy} + \lambda_{ef} \dot{\tau}_{xy} = \eta_p \dot{\gamma} + \lambda_{eq} \tau_{yy} \dot{\gamma} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx} = 2\lambda_{ef} \tau_{xy} \dot{\gamma} \\ \tau_{yy} = 0 \\ \tau_{xy} = \eta_p \dot{\gamma} \end{cases} \quad (4.17)$$

onde $\lambda_{ef} = \lambda/f = \frac{\lambda(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\lambda}{\eta_p} \tau_{xx}}$ e $\dot{\tau}_{xx} = \dot{\tau}_{yy} = \dot{\tau}_{xy} = 0$, no caso de um escoamento estacionário. O

tempo de relaxação efectivo λ_{ef} diminui com o traço de $\boldsymbol{\tau}$, $\tau_{kk} = \tau_{xx}$.

Do sistema de equações (4.17) obtém-se a seguinte relação para a tensão normal τ_{xx} :

$$\tau_{xx} = 2\eta_p \dot{\gamma}^2 \underbrace{\left(\frac{\lambda(L^2 - 3)}{L^2 + \frac{\lambda}{\eta_p} \tau_{xx}} \right)}_{=\lambda_{ef}} \Leftrightarrow \frac{\lambda}{\eta_p} \tau_{xx}^2 + L^2 \tau_{xx} - 2\eta_p \lambda (L^2 - 3) \dot{\gamma}^2 = 0 \quad (4.18)$$

Aplicando a fórmula resolvente à variável τ_{xx} da Eq. (4.18) resulta nas expressões para as tensões normais principais do escoamento de corte simples referentes aos modelos FENE-CR e FENE-MCR, dadas por:

$$\tau_{xx} = \frac{L^2 \left(\sqrt{1 + 8(\lambda \dot{\gamma})^2 (L^2 - 3)/L^4} - 1 \right)}{2\lambda / \eta_p} \text{ e } \tau_{yy} = 0 \quad (4.19)$$

As funções materiais para estes dois modelos constitutivos reológicos FENE-CR e FENE-MCR são definidas da seguinte forma:

$$\eta(\dot{\gamma}) \equiv \frac{(\tau_{xy})_{total}}{\dot{\gamma}} = \eta_s + \eta_p \equiv \eta_0 \text{ (constante)} \quad (4.20)$$

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_{xx} - \tau_{yy}}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{xx}}{\dot{\gamma}^2} \quad (4.21)$$

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_{yy} - \tau_{zz}}{\dot{\gamma}^2} = 0 \quad (4.22)$$

As várias propriedades reométricas de interesse estão apresentadas na Figura 4.5 ($\beta = \eta_s/\eta_0 = 0$), em coordenadas logarítmicas, onde é feita a comparação dos modelos FENE-P e FENE-CR. Essas mesmas propriedades serão úteis para interpretar os resultados numéricos destes modelos.

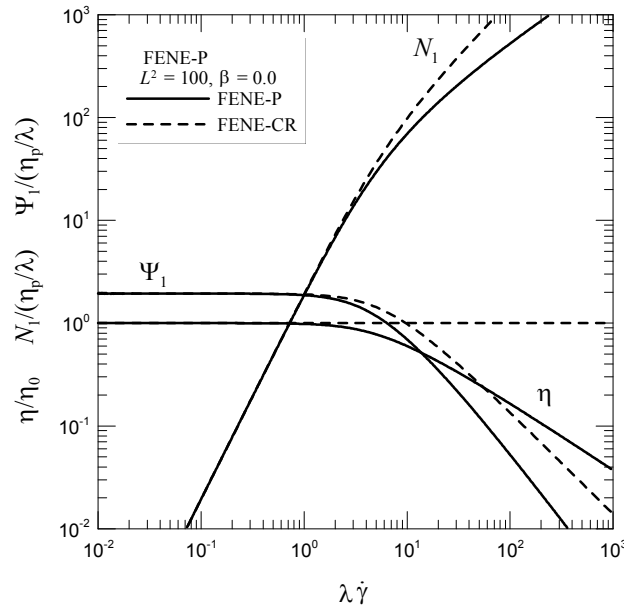


Figura 4.5 – Comparação das propriedades reométricas dos modelos FENE-P e FENE-CR, num escoamento de corte simples estacionário ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.0$).

Pode observar-se da Figura 4.5 que os fluidos FENE-P e FENE-CR apresentam características reofluidificantes no coeficiente da primeira diferença de tensões normais Ψ_1 , para taxas de deformação de corte elevadas ($\lambda\dot{\gamma}$). Para taxas de deformação baixas a variação de Ψ_1 é constante e idêntica para ambos os fluidos. A primeira diferença de tensões normais N_1 actua como uma tracção ao longo das linhas de corrente e é responsável por alguns fenómenos que ocorrem com fluidos viscoelásticos como exemplificado pelo efeito de Weissenberg. O comportamento das tensões normais N_1 representado na Figura 4.5 tem também características reofluidificantes para $\lambda\dot{\gamma}$ altos, enquanto para $\lambda\dot{\gamma}$ baixos as tensões normais variam intensamente com o $(\lambda\dot{\gamma})^2$ (ver Eq. (4.19)). Em relação à viscosidade de corte, é constante no caso do fluido FENE-CR, qualquer que seja o valor da velocidade de deformação de corte, enquanto o fluido FENE-P tem um comportamento reológico

reofluidificante para elevadas velocidades de deformação, tal como já tinha sido atrás descrito.

Na Figura 4.6 apresentam-se mais algumas propriedades reométricas para ambos os modelos (FENE-P e FENE-CR) em escoamento de corte simples, para valores crescentes da razão de viscosidade do solvente $\beta = 0.1, 0.5$ e 0.8 (Fig. 4.6(a) com $L^2 = 100$) e para valores crescentes do parâmetro de extensibilidade $L^2 = 10, 100$ e 1000 (Fig. 4.6(b) com $\beta = 0.1$).

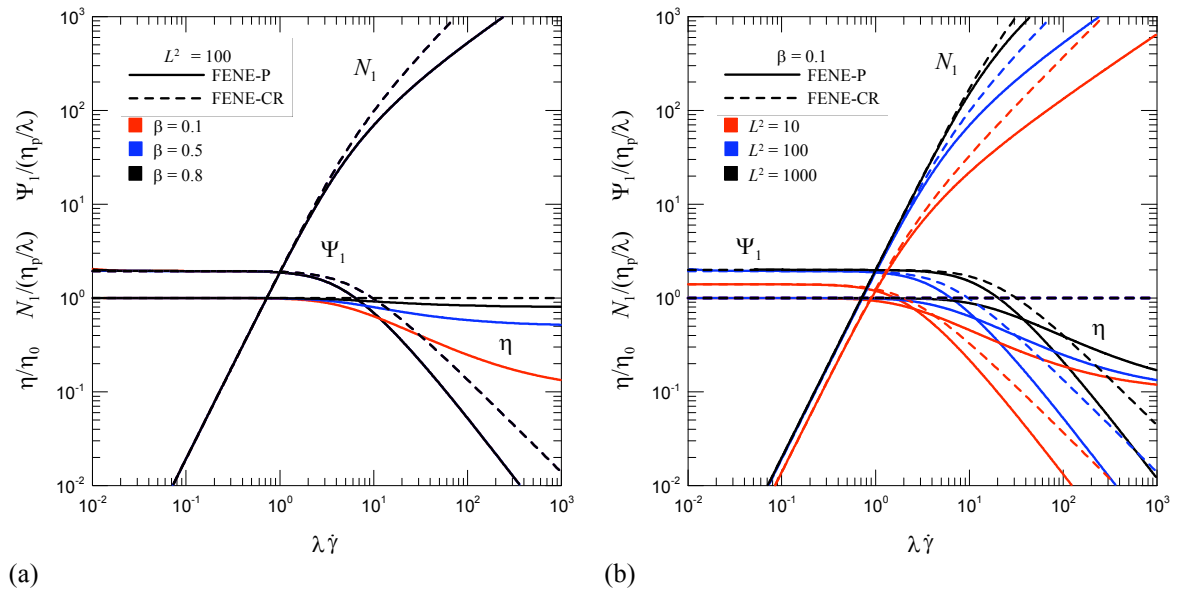


Figura 4.6 – Comparação das propriedades reométricas dos modelos FENE-P e FENE-CR, num escoamento de corte simples: (a) variação de β ($L^2 = 100$); e (b) variação de L^2 ($\beta = 0.1$).

De acordo com a Figura 4.6(a), no caso do fluido FENE-P o aumento da concentração polimérica ($c = \eta_p / \eta_s = (1/\beta) - 1$) diminui a viscosidade de corte, sobretudo para taxas de deformação elevadas, uma vez que a viscosidade de corte tende para um patamar correspondente a viscosidade do solvente newtoniano quando a taxa de deformação é elevada. Por outro lado, com o aumento da concentração polimérica c o declive da zona reofluidificante também aumenta ligeiramente e a transição do patamar newtoniano (com η constante) para a zona reofluidificante dá-se para valores mais baixos da taxa de deformação de corte.

4.1.2 – escoamento extensional (ou elongacional)

No escoamento reométrico analisado anteriormente observou-se apenas a resposta da tensão de um fluido sujeito a um escoamento de corte simples. Neste tipo de escoamento não é possível observar o comportamento do fluido em situações onde as taxas de deformação aplicadas são normais às faces de um elemento de fluido. Consequentemente, será analisado nesta subsecção o escoamento extensional (ou elongacional) que permitirá estudar os fenómenos que ocorrem devido à presença de taxas de deformação normais a que estão sujeitos os fluidos viscoelásticos.

Em escoamentos de fluidos viscoelásticos a viscosidade extensional (η_E) é uma propriedade muito importante para entender certos fenómenos, por exemplo no processo de fiação de fibras (*fiber spinning*, do inglês). Esta propriedade material mede a resistência que o fluido oferece quando sofre um estiramento. A viscosidade extensional do fluido depende do tipo de escoamento a que este é submetido: uniaxial; biaxial; ou planar. Nesta subsecção apenas será analisado o comportamento de um escoamento puramente extensional uniaxial, ou seja, sem a componente de corte. Para uma descrição dos tipos de extensão biaxial ou planar sugere-se a consulta de Bird *et al.* [21] e Gomes de Castro *et al.* [54].

No escoamento uniaxial extensional um elemento material é estendido numa direcção (por exemplo, segundo x) e comprimido, com a mesma intensidade, nas outras duas direcções (segundo y e z), conforme representado esquematicamente na Fig. 4.7.

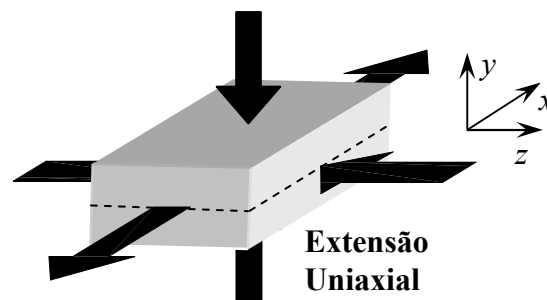


Figura 4.7 – Representação esquemática do escoamento extensional (ou elongacional) uniaxial.

Neste tipo de deformação extensional simples o campo de velocidades é definido em coordenadas cartesianas da seguinte forma:

$$u = +\dot{\epsilon}x, \quad v = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}y \quad \text{e} \quad w = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon}z \quad (4.23)$$

onde $\dot{\epsilon}$ é a taxa de deformação extensional. O campo de tensões poderá ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{cases} \tau_{xx} - \tau_{yy} = \tau_{xx} - \tau_{zz} = \dot{\epsilon} \eta_E(\dot{\epsilon}) \\ \tau_{xy} = \tau_{xz} = \tau_{yz} = 0 \end{cases} \quad (4.24)$$

onde η_E é a viscosidade extensional (ou elongacional). Este parâmetro (η_E) caracteriza a resistência do fluido em relação às deformações extensionais uniaxiais, relacionando-se com as diferenças de tensões normais do escoamento.

No escoamento extensional uniaxial todas as componentes da tensão de corte são nulas e por simetria $\tau_{yy} = \tau_{zz}$. No caso do fluido ser incompressível a resposta da tensão é completamente definida pela diferença da tensão extensional $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, para a taxa extensional ($\dot{\epsilon}$) e o tempo a partir do momento em que o fluido sofre o estiramento, tal como descrito na Eq. (4.24).

De uma maneira geral, η_E é função da taxa de deformação extensional ($\dot{\epsilon}$), tal como a viscosidade de corte é função da taxa de deformação de corte ($\dot{\gamma}$) e que foi analisada na subsecção 4.1.1. Para maiores detalhes consultar o livro de Barnes *et al.* [18].

4.1.2.1 – Modelo newtoniano

No caso do fluido ter um comportamento newtoniano as tensões normais (Eq. (3.3)) são definidas por:

$$\begin{cases} \tau_{xx} = \eta_s \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ \tau_{yy} = \eta_s \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{cases} \quad (4.25)$$

Assim, substituindo o campo de velocidades da Eq. (4.23) no sistema de equações (4.25) resulta em:

$$\begin{cases} \tau_{xx} = 2\eta_s \dot{\epsilon} \\ \tau_{yy} = -\eta_s \dot{\epsilon} \end{cases} \quad (4.26)$$

Aplicando as tensões normais resultantes das Eqs. (4.26) na Eq. (4.24) obtém-se a expressão da viscosidade extensional uniaxial para um fluido newtoniano:

$$\eta_E = \frac{2\eta_s \dot{\epsilon} - (-\eta_s \dot{\epsilon})}{\dot{\epsilon}} = 3\eta_s \quad (4.27)$$

sendo a viscosidade extensional η_E igual a três vezes a viscosidade de corte η_s . Refira-se que a relação da Eq. (4.27) é válida para qualquer valor de $\dot{\epsilon}$ e $\dot{\gamma}$, no caso do fluido newtoniano.

Em 1906 Trouton reconheceu a importância da relação entre a viscosidade extensional (ou elongacional) e a viscosidade de corte (ou viscosimétrica) de um determinado fluido, o que é agora designado por número ou razão de Trouton (T_R), sendo expresso por:

$$T_R = \frac{\text{viscosidade extensional}}{\text{viscosidade de corte}} = \frac{\eta_E(\dot{\epsilon})}{\eta_s(\dot{\gamma})} \quad (4.28)$$

Desta forma, o número de Trouton assume o valor constante de 3 para fluidos newtonianos e não depende nem da taxa de deformação de corte ($\dot{\gamma}$) nem da taxa de deformação extensional do fluido ($\dot{\epsilon}$). Para valores de T_R diferente de 3 o fluido tem comportamento não newtoniano viscoelástico. Verifica-se também, que qualquer que seja o fluido $\eta_E(\dot{\epsilon}) \rightarrow 3\eta_s(\dot{\gamma})$ para baixos valores das taxas de deformação extensional $\dot{\epsilon}$ e de corte $\dot{\gamma}$.

4.1.2.2 – Modelo FENE-P

Para um fluido viscoelástico a viscosidade elongacional será dada por uma expressão mais complicada que no caso de um fluido newtoniano. Seguindo o modelo FENE-P (Eq. (3.24)) as equações para a evolução das tensões normais, no caso de um escoamento extensional uniaxial estacionário, reduzem-se a:

$$\begin{cases} f\tau_{xx} = 2a\eta_p \frac{\partial u}{\partial x} + 2\lambda\tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \\ f\tau_{yy} = 2a\eta_p \frac{\partial v}{\partial y} + 2\lambda\tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \end{cases} \quad (4.29)$$

onde $a = L^2 / (L^2 - 3)$. Substituindo pelo campo de velocidades dado pela Eq. (4.23), resulta nas seguintes expressões para as tensões normais:

$$\begin{cases} f\tau_{xx} = 2a\eta_p\dot{\epsilon} + 2\lambda\tau_{xx}\dot{\epsilon} \\ f\tau_{yy} = -a\eta_p\dot{\epsilon} - \lambda\tau_{yy}\dot{\epsilon} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \tau_{xx} = \frac{2a\eta_p\dot{\epsilon}}{f - 2\lambda\dot{\epsilon}} \\ \tau_{yy} = -\frac{a\eta_p\dot{\epsilon}}{f + \lambda\dot{\epsilon}} \end{cases} \quad (4.30)$$

Assim, a viscosidade extensional polimérica (η_{E_p}) do modelo FENE-P é dada por, segundo a definição da Eq. (4.24):

$$\eta_{E_p} = \frac{\frac{2a\eta_p\dot{\epsilon}}{f - 2\lambda\dot{\epsilon}} - \left(-\frac{a\eta_p\dot{\epsilon}}{f + \lambda\dot{\epsilon}}\right)}{\dot{\epsilon}} = a\eta_p \left(\frac{2}{f - 2\lambda\dot{\epsilon}} + \frac{1}{f + \lambda\dot{\epsilon}} \right) \quad (4.31)$$

A viscosidade extensional (ou elongacional) da mistura polimérica (η_E) será dada pela soma da parte do solvente newtoniano (determinada na subsecção 4.1.2.1) com uma parte devido ao soluto polimérico (η_{E_p} , da Eq. (4.31)):

$$\eta_E = 3\eta_s + a\eta_p \left(\frac{2}{f - 2\lambda\dot{\epsilon}} + \frac{1}{f + \lambda\dot{\epsilon}} \right) \quad (4.32)$$

onde a função de extensibilidade f é expressa pela Eq. (3.25) e cuja solução é obtida através de uma equação cúbica apresentada de seguida.

Partindo da Eq. (3.25), que define a função de extensibilidade do modelo FENE-P, tem-se que:

$$f = \frac{L^2 + (\lambda/a\eta_p)\tau_{kk}}{L^2 - 3} \quad (4.33)$$

sendo $\tau_{kk} = \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz} = \tau_{xx} + 2\tau_{yy}$, com $\tau_{yy} \equiv \tau_{zz}$.

Somando as equações do sistema Eqs. (4.30) obtém-se a seguinte equação geral para o cálculo do traço do tensor das tensões τ_{kk} :

$$\tau_{kk} = \tau_{xx} + 2\tau_{yy} = \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f} \left(\frac{2a\eta_p\dot{\epsilon}}{f - 2\lambda\dot{\epsilon}} + \frac{a\eta_p\dot{\epsilon}}{f + \lambda\dot{\epsilon}} \right) \quad (4.34)$$

Substituindo na Eq. (4.33) resulta em:

$$f^3 - \left(\lambda \dot{\epsilon} + \frac{L^2}{L^2 - 3} \right) f^2 - \lambda \dot{\epsilon} \left(2\lambda \dot{\epsilon} - \frac{L^2}{L^2 - 3} \right) f + 2(\lambda \dot{\epsilon})^2 = 0 \quad (4.35)$$

A solução da equação cúbica (4.35) é dada pela fórmula resolvente que se apresentou na subsecção 4.1.1.1 (Eq. (4.7), fórmula de Cardano-Tartaglia), sendo posteriormente substituída na Eq. (4.32). Desta forma, obtém-se finalmente a variação da viscosidade extensional da mistura, para um escoamento extensional uniaxial, em função da taxa extensional adimensional $\lambda \dot{\epsilon}$. As Figuras 4.8 e 4.9 ilustram alguns comportamentos típicos da viscosidade extensional de fluidos FENE-P viscoelásticos.

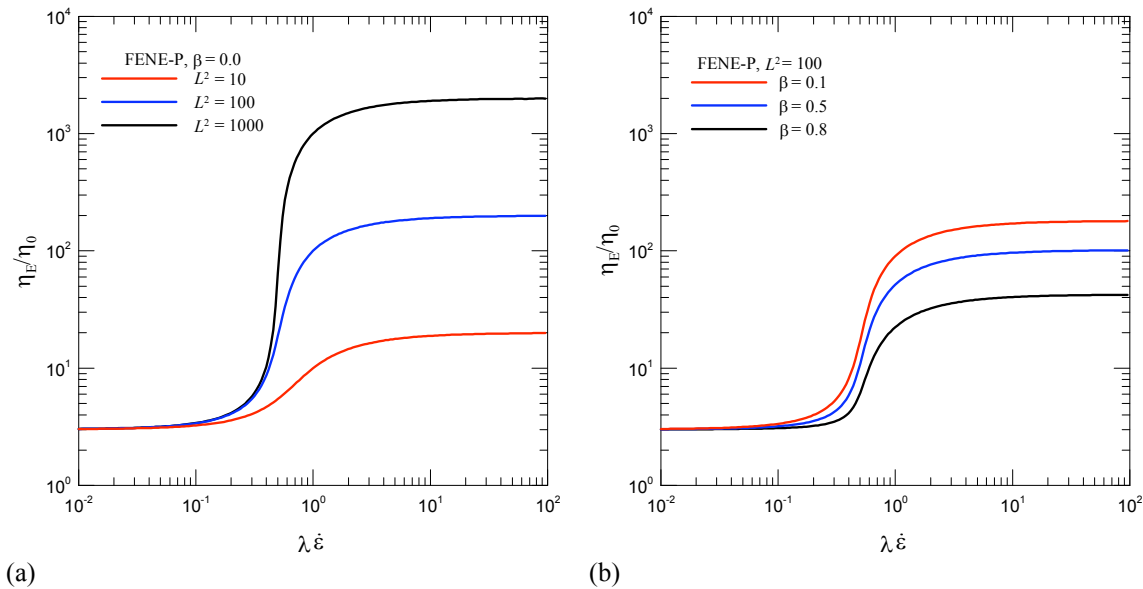


Figura 4.8 – Comportamento da viscosidade extensional uniaxial em função da taxa extensional adimensional $\lambda \dot{\epsilon}$ para o modelo FENE-P: (a) variação de L^2 ($\beta = 0$); e (b) variação de β ($L^2 = 100$).

Como se pode verificar o fluido FENE-P prevê uma viscosidade extensional que parte de um patamar inferior correspondente ao valor newtoniano, com $\eta_E = 3\eta_0$ para taxas de deformação extensional ($\lambda \dot{\epsilon}$) baixas, e depois aumenta progressivamente até atingir um patamar superior constante para taxas de deformação elevadas. Observa-se que o fluido FENE-P exhibe um comportamento típico de endurecimento (*strain-hardening*, do inglês), ou seja, a viscosidade extensional aumenta com a taxa de deformação extensional ($\lambda \dot{\epsilon}$). Este tipo de comportamento é muito frequente em soluções poliméricas. Comprova-se também que à medida que o parâmetro L^2 aumenta a viscosidade extensional também é maior para valores

intermédios/altos da taxa extensional, o que seria de esperar, uma vez que o parâmetro L^2 mede os efeitos extensionais do fluido. Pode mostrar-se que para $\lambda\dot{\epsilon} \rightarrow \infty$ tem-se $\eta_E = [3\beta + 2(1-\beta)L^2]\eta_0$ e, portanto, o patamar superior de η_E é proporcional a L^2 .

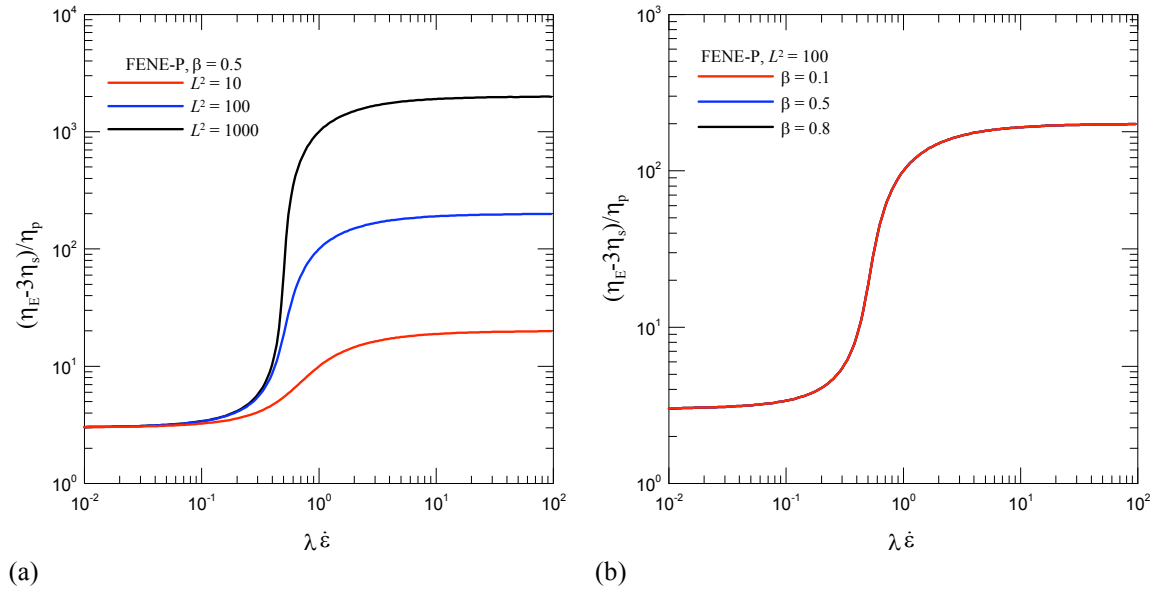


Figura 4.9 – Comportamento da componente polimérica da viscosidade extensional uniaxial em função da taxa extensional adimensional $\lambda\dot{\epsilon}$ para o modelo FENE-P: (a) variação de L^2 ($\beta = 0.5$); e (b) variação de β ($L^2 = 100$).

Pode constatar-se, das figuras anteriores (Fig. 4.8(a)-(b) e 4.9(a)) que os valores iniciais da viscosidade extensional η_E são coincidentes para baixos valores da taxa extensional, de acordo com a Eq. (4.32), e que à medida que a taxa extensional $\lambda\dot{\epsilon}$ aumenta as viscosidades extensionais atingem valores constantes em patamares diferentes. Na Figura 4.9(b) os valores da componente polimérica da viscosidade extensional são coincidentes em toda a sua extensão quando se varia a razão de viscosidades do solvente β (com $L^2 = 100$), reflectindo o facto de η_E ser independente do parâmetro β (Eqs. (4.31) e (4.35)). Já a viscosidade extensional total, da Figura 4.8(b), cresce, para $\lambda\dot{\epsilon} \geq 1$, quando β diminui.

4.1.2.3 – Modelo FENE-CR (ou FENE-MCR)

Partindo da Eq. (3.27), o sistema de equações para as tensões normais correspondente a um escoamento extensional estacionário é dado por:

$$\begin{cases} \tau_{xx} = 2\eta_p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2\lambda\tau_{xx}}{f} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \tau_{yy} = 2\eta_p \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{2\lambda\tau_{yy}}{f} \frac{\partial v}{\partial y} \end{cases} \quad (4.36)$$

De acordo com o campo de velocidades dado pela Eq. (4.23), o sistema de equações (4.36) resulta em:

$$\begin{cases} \tau_{xx} = 2\eta_p \dot{\epsilon} + \frac{2\lambda\tau_{xx}\dot{\epsilon}}{f} \\ \tau_{yy} = -\eta_p \dot{\epsilon} - \frac{\lambda\tau_{yy}\dot{\epsilon}}{f} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \tau_{xx} = \frac{2\eta_p \dot{\epsilon}}{1 - \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f}} \\ \tau_{yy} = -\frac{\eta_p \dot{\epsilon}}{1 + \frac{\lambda\dot{\epsilon}}{f}} \end{cases} \quad (4.37)$$

Para o modelo FENE-CR a viscosidade extensional da parte polimérica (η_{E_p}) é dada por (da definição da Eq. (4.24)):

$$\eta_{E_p} = \frac{\tau_{xx} - \tau_{yy}}{\dot{\epsilon}} = \frac{\frac{2\eta_p \dot{\epsilon}}{1 - \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f}} - \left(-\frac{\eta_p \dot{\epsilon}}{1 + \frac{\lambda\dot{\epsilon}}{f}} \right)}{\dot{\epsilon}} = \eta_p \left(\frac{2}{1 - \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f}} + \frac{1}{1 + \frac{\lambda\dot{\epsilon}}{f}} \right) \quad (4.38)$$

A viscosidade extensional (ou elongacional) da mistura polimérica será então:

$$\eta_E = 3\eta_s + \eta_p \left(\frac{2}{1 - \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f}} + \frac{1}{1 + \frac{\lambda\dot{\epsilon}}{f}} \right) \quad (4.39)$$

sendo a função de extensibilidade f expressa pela seguinte equação (proveniente da Eq. (3.28)):

$$f = \frac{L^2 + (\lambda/\eta_p)\tau_{kk}}{L^2 - 3} \quad (4.40)$$

onde $\tau_{kk} = \tau_{xx} + 2\tau_{yy}$.

Da mesma forma que no caso do modelo FENE-P (subsecção 4.1.2.2), somando as equações do sistema Eqs. (4.37), obtém-se a equação geral para o traço do tensor das tensões τ_{kk} :

$$\tau_{kk} = \tau_{xx} + 2\tau_{yy} = \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f} \left(\frac{2\eta_p\dot{\epsilon}}{1 - \frac{2\lambda\dot{\epsilon}}{f}} + \frac{\eta_p\dot{\epsilon}}{1 + \frac{\lambda\dot{\epsilon}}{f}} \right) \quad (4.41)$$

que substituindo na Eq. (4.40) resulta em:

$$f^3 - \left[\lambda\dot{\epsilon} + \frac{L^2}{L^2 - 3} \right] f^2 - \left[2(\lambda\dot{\epsilon})^2 - \lambda\dot{\epsilon} \frac{L^2}{L^2 - 3} + \frac{2(\lambda\dot{\epsilon})^2}{L^2 - 3} \right] f + 2(\lambda\dot{\epsilon})^2 \frac{L^2}{L^2 - 3} = 0 \quad (4.42)$$

Desta forma, substituindo a solução da equação cúbica (4.42) na equação (4.39) obtém-se a variação da viscosidade extensional da mistura do modelo FENE-CR (ou modelo FENE-MCR) em função da taxa extensional adimensional $\lambda\dot{\epsilon}$, cujos resultados estão apresentados nas Figs. 4.10 e 4.11.

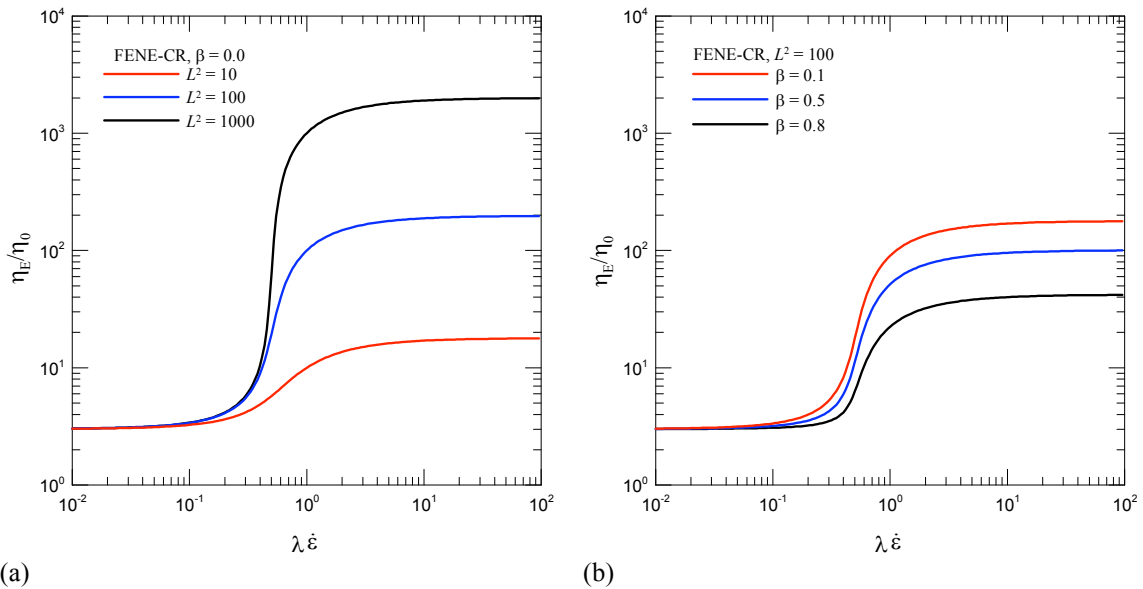


Figura 4.10 – Comportamento da viscosidade extensional uniaxial com a variação da taxa extensional adimensional $\lambda\dot{\epsilon}$ para o modelo FENE-CR: (a) variação de L^2 ($\beta = 0$); e (b) variação de β ($L^2 = 100$).

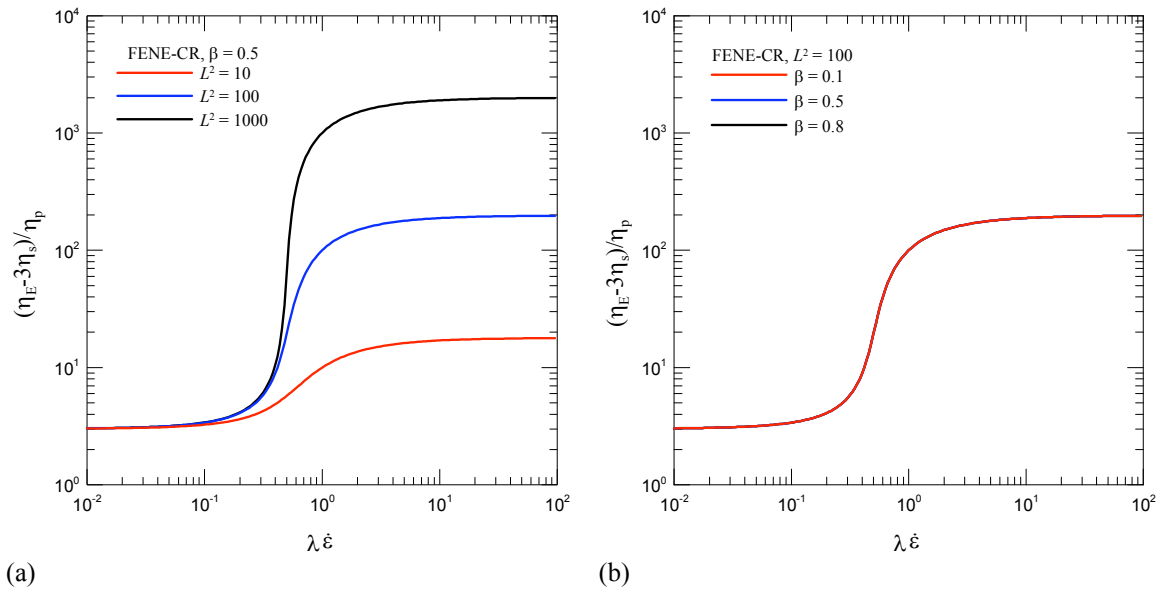


Figura 4.11 – Comportamento da componente polimérica da viscosidade extensional com a variação da taxa extensional adimensional $\lambda \dot{\epsilon}$ para o modelo FENE-CR: (a) variação de L^2 ($\beta = 0.5$); e (b) variação de β ($L^2 = 100$).

No caso do modelo FENE-CR (ou FENE-MCR) verifica-se o mesmo comportamento que foi enunciado para o caso do modelo FENE-P na subsecção anterior para a viscosidade extensional. Pode então concluir-se, que as soluções poliméricas de um fluido FENE-P apresentam um comportamento reológico reofluidificante (*shear-thinning*) na viscosidade de corte e um comportamento de endurecimento (*strain-hardening*) na viscosidade extensional uniaxial. O fluido FENE-CR (ou FENE-MCR) tem como principais características reométricas uma viscosidade de corte (ou viscosimétrica) constante e a viscosidade extensional apresenta um comportamento de endurecimento, semelhante à do modelo FENE-P.

4.2 – Funções materiais em escoamento simples não estacionário

Nesta secção pretende-se analisar o comportamento das funções materiais em regime não estacionário, ou seja, no arranque do escoamento após imposição duma taxa de deformação ($t \geq 0$) para os três modelos constitutivos reológicos FENE-MCR, FENE-CR e FENE-P. Para isso faz-se uma análise do comportamento dinâmico do fluido quando este está sujeito a um escoamento transitório de corte simples e a um escoamento transitório extensional uniaxial, tal como foi efectuada no estudo da secção anterior em regime estacionário.

4.2.1 – escoamento transitório de corte simples

Neste caso será analisado o comportamento do escoamento de arranque desde $t = 0$ (arranque do escoamento de corte – camada superior posta em movimento com velocidade U_1 constante) até $t = t_{\text{final}}$ ($t_{\text{final}} > 0$) (distribuição final de velocidades num fluxo estacionário), num escoamento de corte simples, onde o fluido se encontra confinado entre duas placas planas paralelas, tal como ilustrado pela Fig. 4.12.

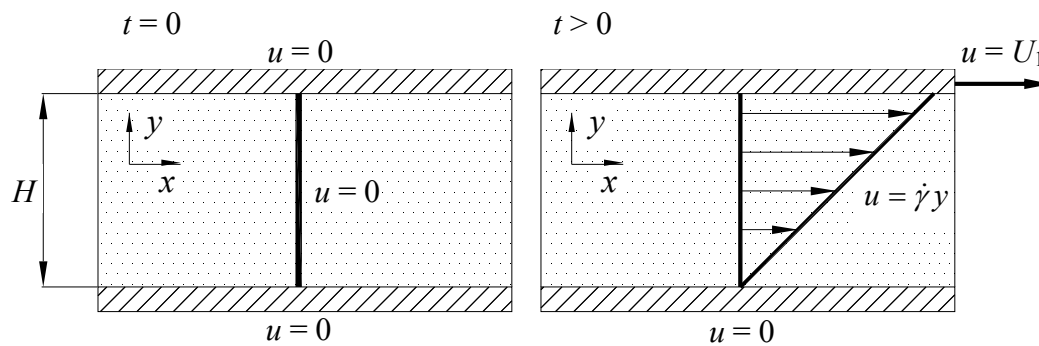


Figura 4.12 – Escoamento de corte simples não estacionário (escoamento de arranque).

Na situação em que o escoamento é estacionário, conforme visto na subsecção 4.1.1, existem apenas três tensões possíveis de serem calculadas: a tensão de corte τ_{xy} ; e as duas tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} . As propriedades reométricas do fluido em condições estacionárias são representadas pelas variáveis materiais em função da taxa de deformação ($\dot{\gamma}$) definidas por $\eta(\dot{\gamma})$, $\Psi_1(\dot{\gamma})$ e $\Psi_2(\dot{\gamma})$. Uma vez que nesta subsecção apenas interessa analisar o comportamento do fluido no arranque do escoamento as funções materiais vão depender também do tempo, além da taxa de deformação a que o fluido está submetido. Assim sendo, podem considerar-se as seguintes funções materiais no escoamento de arranque de corte simples $\eta^+(t, \dot{\gamma})$, $\Psi_1^+(t, \dot{\gamma})$ e $\Psi_2^+(t, \dot{\gamma})$. O índice superior “+” indica que a taxa de deformação é calculada para tempos positivos ($t > 0$).

4.2.1.1 – Modelo FENE-MCR

Tal como visto na subsecção 4.1.1, no escoamento de corte simples o perfil de velocidades é apenas função da coordenada transversal y e o campo de velocidades é representado da seguinte forma:

$$\begin{cases} u = \dot{\gamma}y \\ v = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial y} = \dot{\gamma} \\ \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (4.43)$$

onde a taxa de deformação $\dot{\gamma}(t)$ pode ser função do tempo.

As tensões normais e tangenciais aplicadas ao escoamento são determinadas a partir da equação constitutiva (Eq. (3.30)), que consiste no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \frac{\lambda}{f} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} = 2 \frac{\lambda}{f} \tau_{xy} \dot{\gamma} \\ \tau_{yy} = 0 \\ \tau_{xy} + \frac{\lambda}{f} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} = \eta_p \dot{\gamma} \end{cases} \quad (4.44)$$

onde a função de extensibilidade é dada pela Eq. (3.28).

Usando a seguinte adimensionalização:

$$\bar{t} = \frac{t}{\lambda}, \quad \bar{\tau}_{ij} = \frac{\tau_{ij}}{\eta_p / \lambda} \quad \text{e} \quad We = \lambda \dot{\gamma} \quad (\text{número de Weissenberg}) \quad (4.45)$$

o sistema de Eqs. (4.44) fica:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \frac{1}{f} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} = \frac{2We\tau_{xy}}{f} \\ \tau_{xy} + \frac{1}{f} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} = We \end{cases} \quad (4.46)$$

onde o traço superior a indicar a variável adimensional foi suprimido. Em geral, a solução analítica deste sistema é difícil, se não impossível. O método numérico mais simples para resolver este sistema de Eqs. (4.46) é por diferenças finitas substituindo as derivadas por

razões entre as variações da função e da respectiva variável. Assim sendo, usando o método de Euler implícito, tem-se:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} + \frac{1}{f} \left(\frac{\tau_{xx}^{n+1} - \tau_{xx}^n}{\Delta t} \right) = \frac{2We \cdot \tau_{xy}^n}{f} \\ \tau_{xy}^{n+1} + \frac{1}{f} \left(\frac{\tau_{xy}^{n+1} - \tau_{xy}^n}{\Delta t} \right) = We \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} = \left(\frac{2We \cdot \tau_{xy}^n}{f} + \frac{\tau_{xx}^n}{f \Delta t} \right) \Big/ \left(1 + \frac{1}{f \Delta t} \right) \\ \tau_{xy}^{n+1} = \left(We + \frac{\tau_{xy}^n}{f \Delta t} \right) \Big/ \left(1 + \frac{1}{f \Delta t} \right) \end{cases} \quad (4.47)$$

onde o índice superior denota o nível temporal; $n+1$ corresponde ao tempo futuro $t = t^{n+1}$ e n corresponde ao tempo actual $t = t^n$.

A função de extensibilidade do modelo reológico (Eq. (3.28)) adimensionalizada será dada por:

$$f = \frac{L^2 + \tau_{xx}}{L^2 - 3} \quad (4.48)$$

com $tr(\boldsymbol{\tau}) = \tau_{xx} + \tau_{yy} = \tau_{xx}$, uma vez que $\tau_{yy} = 0$.

Como referido, o sistema de Eqs. (4.47) constitui o método de Euler implícito para o cálculo das tensões τ_{xx} e τ_{xy} , que oferece vantagens de estabilidade comparativamente a métodos explícitos. No entanto, o método de Euler implícito é um método de 1ª ordem. O erro cometido em cada avanço no tempo, para cada cálculo de τ_{xx}^{n+1} e τ_{xy}^{n+1} a partir de τ_{xx}^n e τ_{xy}^n , é proporcional a $(\Delta t)^2$, desde que Δt seja suficientemente pequeno. No entanto, como serão calculados N valores de τ_{xx} e τ_{xy} , onde N é o número total de passos no tempo, o erro total cometido pode ser estimado como sendo proporcional a $E \propto N(\Delta t)^2 \propto \Delta t$, uma vez que $N = (t_f - t_i)/\Delta t$. Fica assim demonstrada a primeira ordem do método.

Uma maneira relativamente fácil de garantir 2ª ordem no tempo é utilizando três níveis no tempo (método 3NT) no cálculo das derivadas. Este método 3NT é também totalmente implícito mas, com o principal objectivo de melhorar a precisão no tempo, a derivada temporal é calculada com diferenças regressivas de segunda ordem (Oliveira [92]). A derivada temporal da Eq. (4.46), por exemplo, é agora calculada usando a seguinte expressão:

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} = \frac{1.5\tau_{ij}^{n+1} - 2\tau_{ij}^n + 0.5\tau_{ij}^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.49)$$

em vez de $\partial\tau_{ij}/\partial t = (\tau_{ij}^{n+1} - \tau_{ij}^n)/\Delta t$ como no método de Euler implícito. Aplicando o método de 3NT ao sistema de Eqs. (4.46) obtém-se:

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} + \frac{1}{f} \left(\frac{1.5\tau_{xx}^{n+1} - 2\tau_{xx}^n + 0.5\tau_{xx}^{n-1}}{\Delta t} \right) = \frac{2We\tau_{xy}^n}{f} \\ \tau_{xy}^{n+1} + \frac{1}{f} \left(\frac{1.5\tau_{xy}^{n+1} - 2\tau_{xy}^n + 0.5\tau_{xy}^{n-1}}{\Delta t} \right) = We \end{cases} \Rightarrow \\ & \Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} = \left(\frac{2We\tau_{xy}^n}{f} + \frac{2\tau_{xx}^n}{f\Delta t} - \frac{0.5\tau_{xx}^{n-1}}{f\Delta t} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f\Delta t} \right) \\ \tau_{xy}^{n+1} = \left(We + \frac{2\tau_{xy}^n}{f\Delta t} - \frac{0.5\tau_{xy}^{n-1}}{f\Delta t} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f\Delta t} \right) \end{cases} \end{aligned} \quad (4.50)$$

O método de 3NT tem um erro de truncatura $E \propto (\Delta t)^2$. Requer mais memória do que o método de Euler implícito de 1ª ordem, uma vez que é preciso também guardar as variáveis de τ_{xy}^{n-1} e τ_{xx}^{n-1} no tempo $n - 1$, conforme visível no sistema de Eqs. (4.50).

A viscosidade de corte não estacionária é definida da forma usual pela seguinte expressão, onde à esquerda é dada de forma dimensional e à direita sob duas formas adimensionais:

$$\eta^+(t, \dot{\gamma}) = \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} \Rightarrow \frac{\eta^+(t, \dot{\gamma})}{\eta_p} = \frac{\tau_{xy}}{We} \quad \text{ou} \quad \frac{\eta^+(t, \dot{\gamma})}{\eta(\dot{\gamma})} = \frac{\tau_{xy}}{\tau_{xy0}} \quad (4.51)$$

sendo $\eta(\dot{\gamma})$ e τ_{xy0} a viscosidade e a tensão de corte estacionária, respectivamente. O coeficiente da primeira diferença de tensões normais é dado pela seguinte equação (de acordo com a definição da Eq. (4.12)):

$$\Psi_1^+(t, \dot{\gamma}) = \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{xx}}{\dot{\gamma}^2} \Rightarrow \Psi_1^+(t, \dot{\gamma}) = \frac{\tau_{xx}}{We^2} \quad \text{ou} \quad \frac{\Psi_1^+(t, \dot{\gamma})}{\Psi_1(\dot{\gamma})} = \frac{\tau_{xx}}{\tau_{xx0}} \quad (4.52)$$

Adimensionalizado com $\Psi_1^+/\lambda\eta_p$, sendo $\Psi_1(\dot{\gamma})$ e τ_{xx0} o coeficiente da primeira diferença de tensões normais (Eq. (4.12)) e a tensão normal (Eq. (4.10)) estacionária, respectivamente.

O coeficiente da segunda diferença de tensões normais é definido como sendo nulo para os modelos aqui considerados:

$$\Psi_2^+(t, \dot{\gamma}) = \frac{N_2}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{yy} - \tau_{zz}}{\dot{\gamma}^2} = 0 \quad (4.53)$$

Seguidamente, apresentam-se alguns resultados das tensões τ_{xy} e τ_{xx} correspondentes ao modelo FENE-MCR utilizando o método de Euler implícito de 1ª ordem e o método de 3NT, para valores de $We = 5$, $L^2 = 25$ e 100.

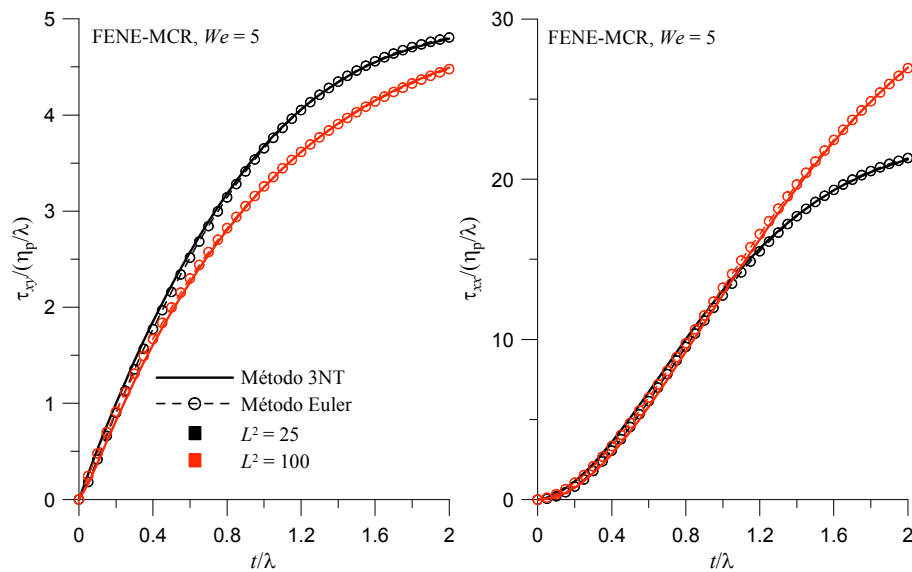


Figura 4.13 – Comparação do método de Euler com o método de três níveis no tempo (3NT) para o modelo FENE-MCR, com $L^2 = 25$ e 100, e $We = 5.0$ ($N = 40$ e $\Delta \bar{t} = 1/20 = 0.05$).

Analisando a Figura 4.13 pode constatar-se que existe uma ligeira diferença entre os resultados obtidos com o método de Euler implícito e o método de 3NT para o valor de Δt utilizado ($\Delta \bar{t} = 0.05$ com escala temporal baseada em λ). Para valores mais baixos de Δt (por exemplo, $\Delta \bar{t} = 0.01$ ou 0.005) não seriam visíveis diferenças num gráfico. De todos os modos, como o método de 3NT (2ª ordem) é mais preciso que o método de Euler implícito (1ª ordem), daqui para a frente apenas será utilizado este método 3NT na discretização das equações dependentes do tempo.

Seguidamente, apresentam-se alguns resultados obtidos após resolução do sistema de equações (4.50) para o modelo FENE-MCR, onde se pode analisar o comportamento das tensões τ_{xy} e τ_{xx} em função do tempo adimensional t/λ .

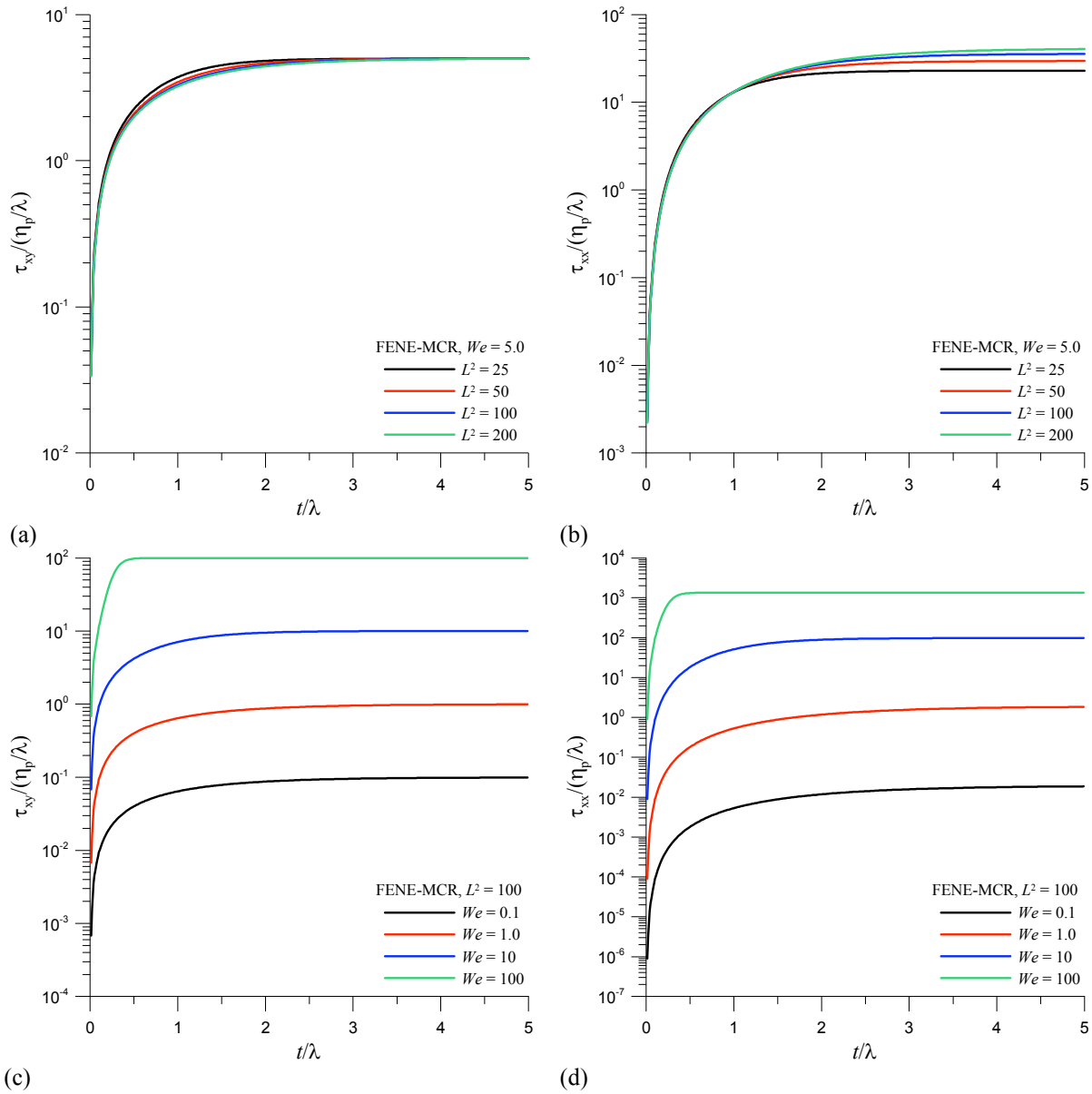


Figura 4.14 – Tensões $\tau_{xy}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ para o modelo FENE-MCR em função de L^2 e We ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$).

Pode observar-se, a partir dos gráficos da Figura 4.14, que tanto a tensão de corte τ_{xy} como a tensão normal τ_{xx} não apresentam um *overshoot* (pico, ou seja um acréscimo destas variáveis comparativamente ao caso estacionário), e que os valores crescem rapidamente em função do tempo até atingirem a zona estacionária. Variando o parâmetro de extensibilidade L^2 do modelo FENE-MCR ($We = 5.0$) as tensões de corte τ_{xy} diminuem com o aumento de L^2 e tendem a coincidir na zona estacionária (Fig. 4.14(a)). No caso das tensões normais, os resultados são coincidentes no arranque do escoamento (para baixos valores do tempo) e quando atingem valores estacionários as tensões aumentam com o aumento de L^2

(Fig. 4.14(b)). Mantendo L^2 constante ($= 100$) e variando o número de Weissenberg (We) pode constatar-se que tanto as tensões de corte como as tensões normais aumentam à medida que se aumenta We (Fig. 4.14(c)-(d)).

A partir das Eqs. (4.51) e (4.52) pode avaliar-se o comportamento das variáveis materiais para este modelo (FENE-MCR) que é apresentado nos gráficos da Figs. 4.15 e 4.16. A variação da viscosidade é igual com as duas adimensionalizações (Fig. 4.15(a) e (b), e Fig. 4.16(a) e (b)), uma vez que para o modelo FENE-MCR $\eta(\dot{\gamma}) = \eta_p$ é constante. Para toda a gama de parâmetros considerada ($L^2 = 25 - 200$; $We = 0.1 - 100$) verifica-se que cinco unidades de tempo de relaxação são suficientes para se atingir o estado estacionário. A rapidez do desenvolvimento, para um dado valor de L^2 , aumenta com We . Por outro lado, com We fixo, o estado estacionário atinge-se mais depressa quando L^2 diminui.

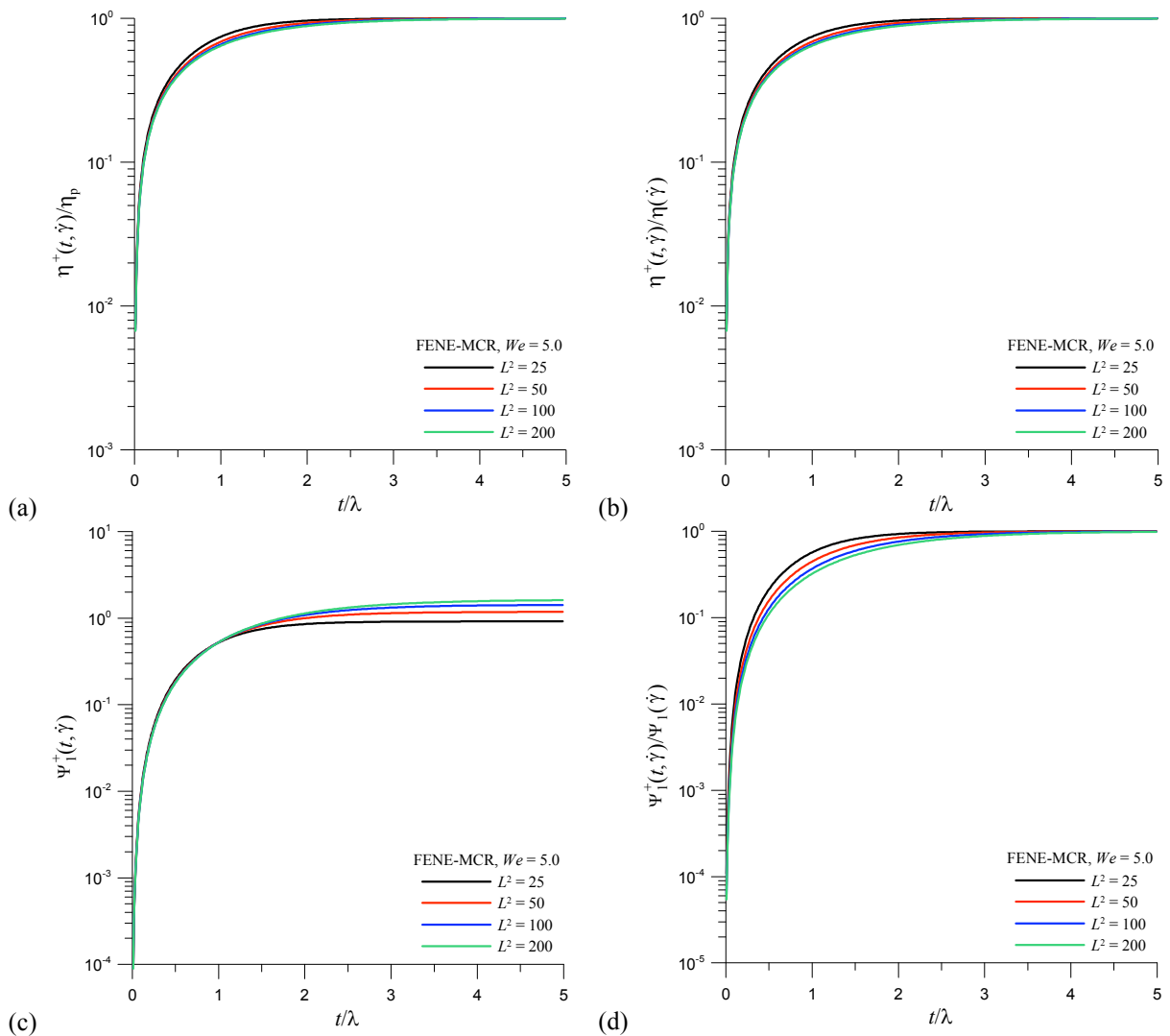


Figura 4.15 – Propriedades materiais do modelo FENE-MCR ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

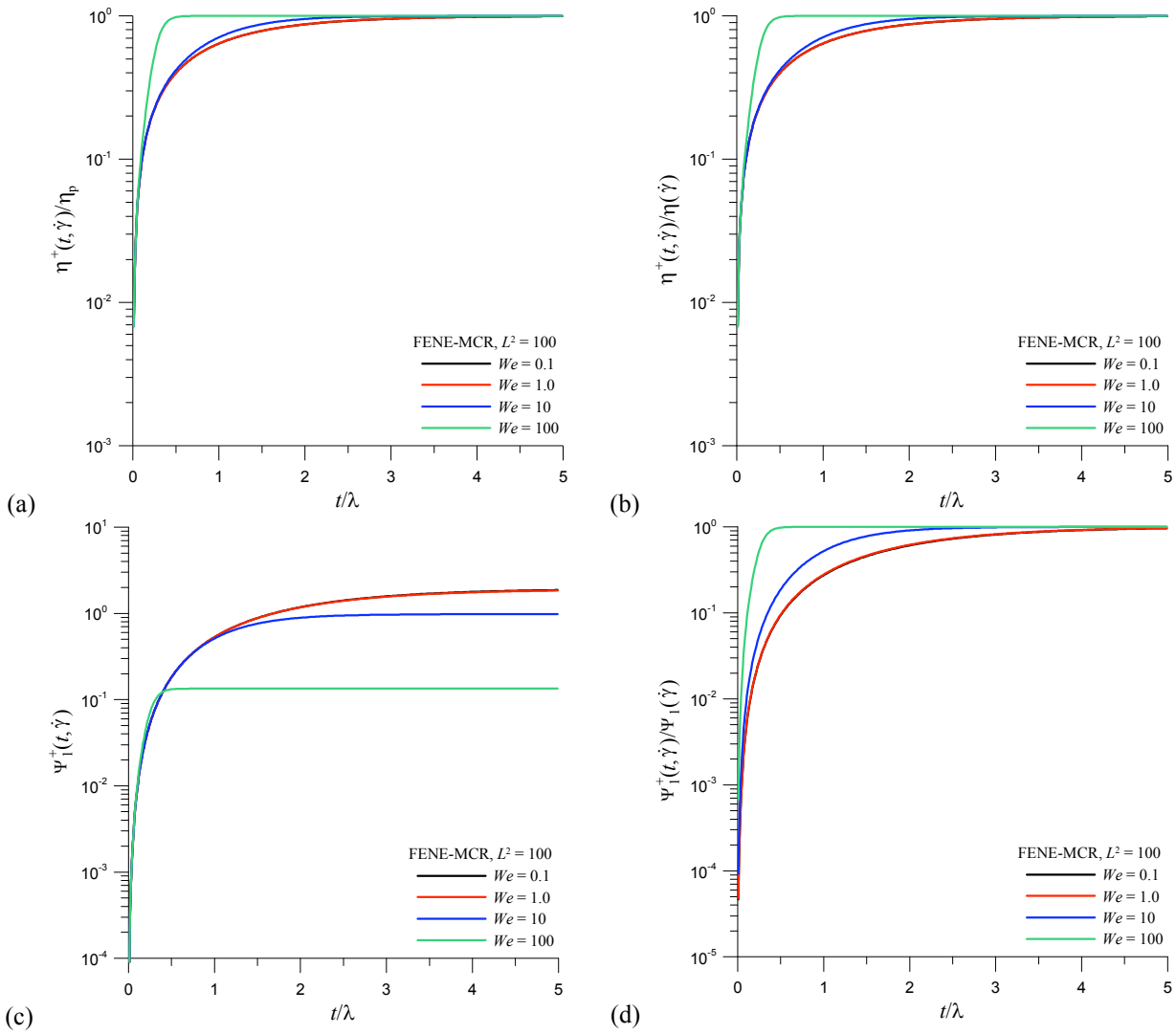


Figura 4.16 – Propriedades materiais do modelo FENE-MCR ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

4.2.1.2 – Modelo FENE-CR

Partindo da Eq. (3.27) o sistema de equações para um escoamento de corte simples de um fluido FENE-CR reduz-se a:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \lambda \frac{\partial(\tau_{xx}/f)}{\partial t} = \frac{2\lambda}{f} \tau_{xy} \dot{\gamma} \\ \tau_{yy} = 0 \\ \tau_{xy} + \lambda \frac{\partial(\tau_{xy}/f)}{\partial t} = \eta_p \dot{\gamma} \end{cases} \quad (4.54)$$

Aplicando o método de 3NT (ver Eq. (4.49)) ao sistema de Eqs. (4.54) tem-se que:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} + \lambda \left(\frac{1.5(\tau_{xx}/f)^{n+1} - 2(\tau_{xx}/f)^n + 0.5(\tau_{xx}/f)^{n-1}}{\Delta t} \right) = 2\lambda \left(\frac{\tau_{xy}}{f} \right)^n \dot{\gamma} \\ \tau_{yy}^{n+1} = 0 \\ \tau_{xy}^{n+1} + \lambda \left(\frac{1.5(\tau_{xy}/f)^{n+1} - 2(\tau_{xy}/f)^n + 0.5(\tau_{xy}/f)^{n-1}}{\Delta t} \right) = \eta_p \dot{\gamma} \end{cases} \quad (4.55)$$

Usando a adimensionalização proposta na Eq. (4.45), o sistema de Eqs. (4.55) resulta em:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} = \left(2We \left(\frac{\tau_{xy}}{f} \right)^n + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^{n-1} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1} \Delta t} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} = 0 \\ \tau_{xy}^{n+1} = \left(We + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xy}}{f} \right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xy}}{f} \right)^{n-1} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1} \Delta t} \right) \end{cases} \quad (4.56)$$

Uma vez que nestes modelos a função de extensibilidade f depende do valor de τ_{xx} , que varia com o tempo, tem-se de calcular os valores de f para os vários níveis temporais:

$$\begin{cases} t = t^{n+1} \Rightarrow f^{n+1} = \frac{L^2 + \tau_{xx}^{n+1}}{L^2 - 3} \\ t = t^n \Rightarrow f^n = \frac{L^2 + \tau_{xx}^n}{L^2 - 3} \\ t = t^{n-1} \Rightarrow f^{n-1} = \frac{L^2 + \tau_{xx}^{n-1}}{L^2 - 3} \end{cases} \quad (4.57)$$

Os resultados obtidos para o sistema de Eqs. (4.56) e (4.57) (adimensionalizados) são apresentados seguidamente (Fig. 4.17), referente às tensões τ_{xy} e τ_{xx} .

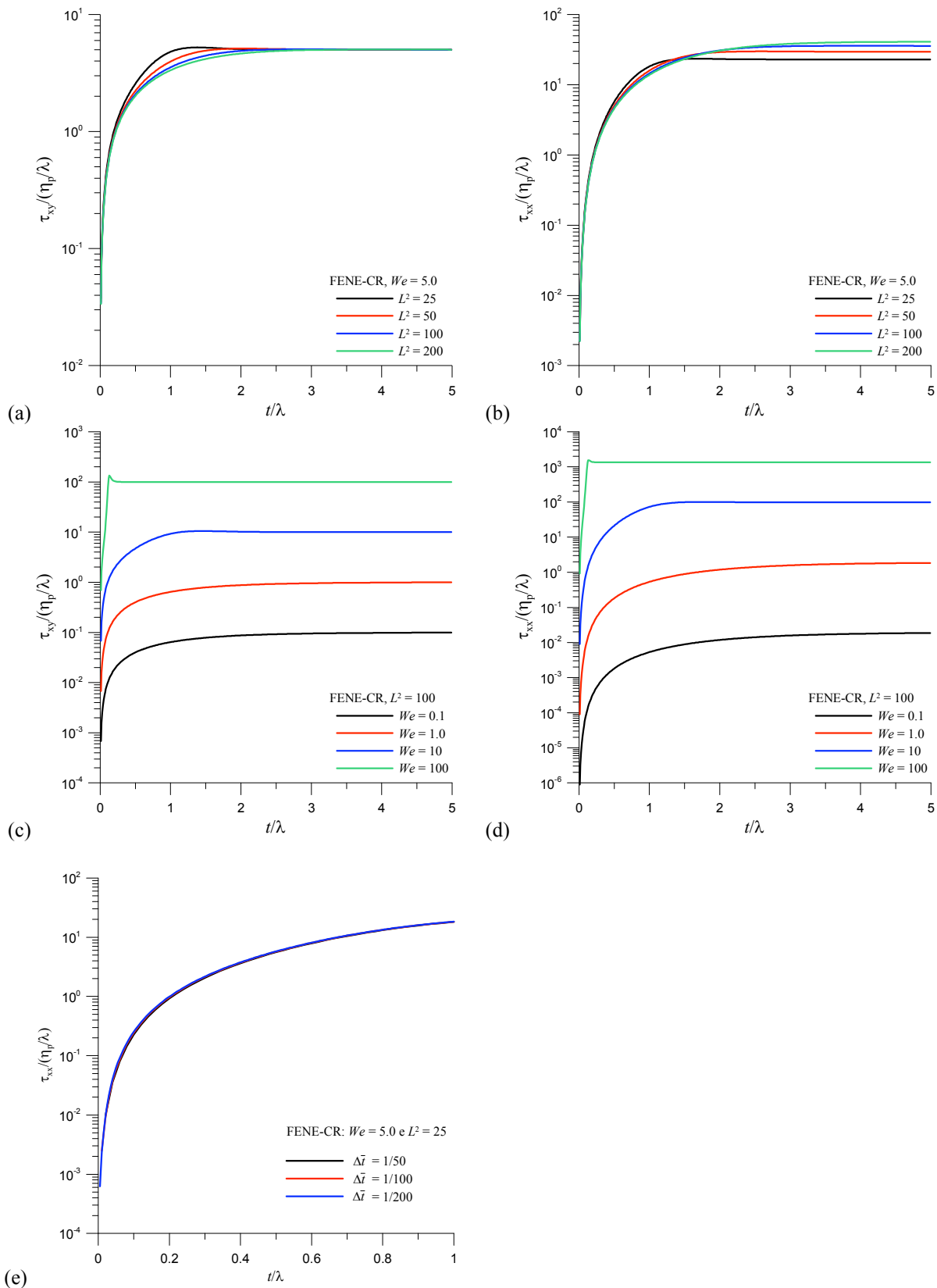


Figura 4.17 – Tensões $\tau_{xy}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ para o modelo FENE-CR em função de L^2 e We ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$ em (a)-(d)).

Dos gráficos da Figura 4.17 para o modelo FENE-CR verifica-se que, com $We = 5.0$ e variando L^2 , as tensões τ_{xy} e τ_{xx} apresentam um ligeiro *overshoot* (pico) para $L^2 = 25$, e que à medida que L^2 aumenta esse efeito tende a desaparecer (Fig. 4.17(a)-(b)). No caso em que $L^2 = 100$, variando o número de Weissenberg, destaca-se que para $We = 100$ aparece um *overshoot* (pico) assinalável no perfil das tensões τ_{xy} e τ_{xx} , e que para valores de We baixos isso já não se verifica (Fig. 4.17(c)-(d)). Na Figura 4.17(e) apresenta-se o perfil de tensões τ_{xx} para um caso ($L^2 = 25$ e $We = 5$), variando o tempo de integração, $\Delta\bar{t} = 1/50, 1/100$ e $1/200$. Comprova-se que o valor de $\Delta\bar{t}$ não interfere nos resultados, uma vez que para cada um desses valores de $\Delta\bar{t}$ os perfis de tensão τ_{xx} são quase coincidentes. Esta boa concordância é consequência da utilização de um método de 2ª ordem.

Usando as definições apresentadas nas Eqs. (4.51) e (4.52) pode analisar-se o comportamento das variáveis materiais ($\eta^+(t, \dot{\gamma})$ e $\Psi_1^+(t, \dot{\gamma})$) para este modelo constitutivo (FENE-CR), o que é apresentado nos gráficos da Figs. 4.18 (variação de L^2 , com $We = 5.0$) e 4.19 (variação de We , com $L^2 = 100$). As conclusões da subsecção anterior referente ao modelo FENE-MCR continuam a ser válidas, não sendo aqui repetidas. O facto novo refere-se ao aparecimento do *overshoot* da viscosidade e da primeira diferença de tensões normais, já referido acima. Esta sobreavaliação do valor estacionário das duas propriedades é mais notória no caso da viscosidade, e fica realçada quando as propriedades são adimensionalizadas com os respectivos valores para $t \rightarrow \infty$.

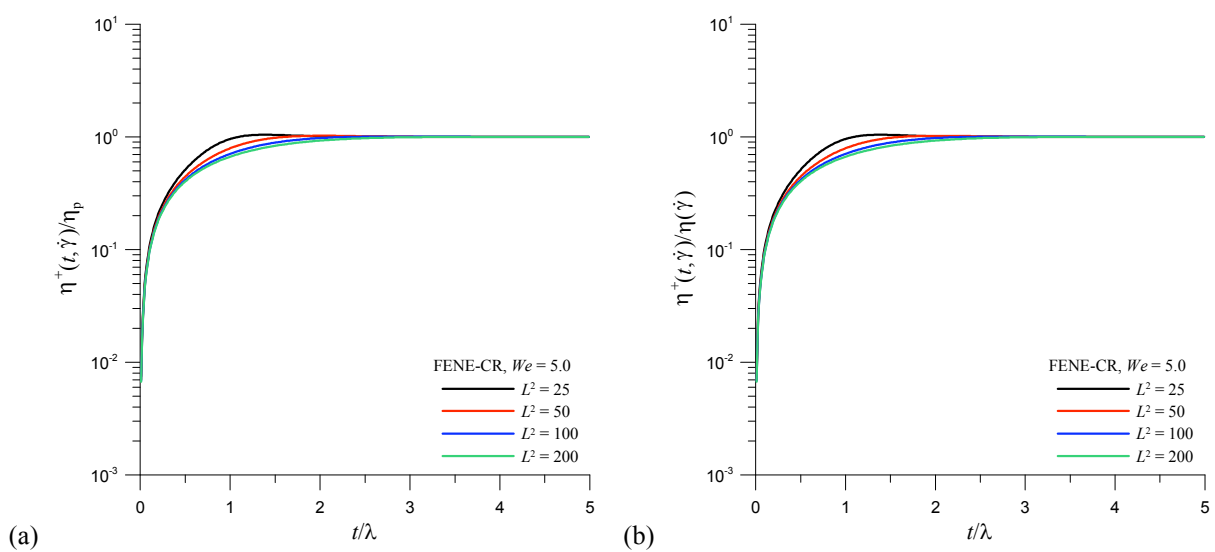


Figura 4.18 – Propriedades materiais do modelo FENE-CR ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

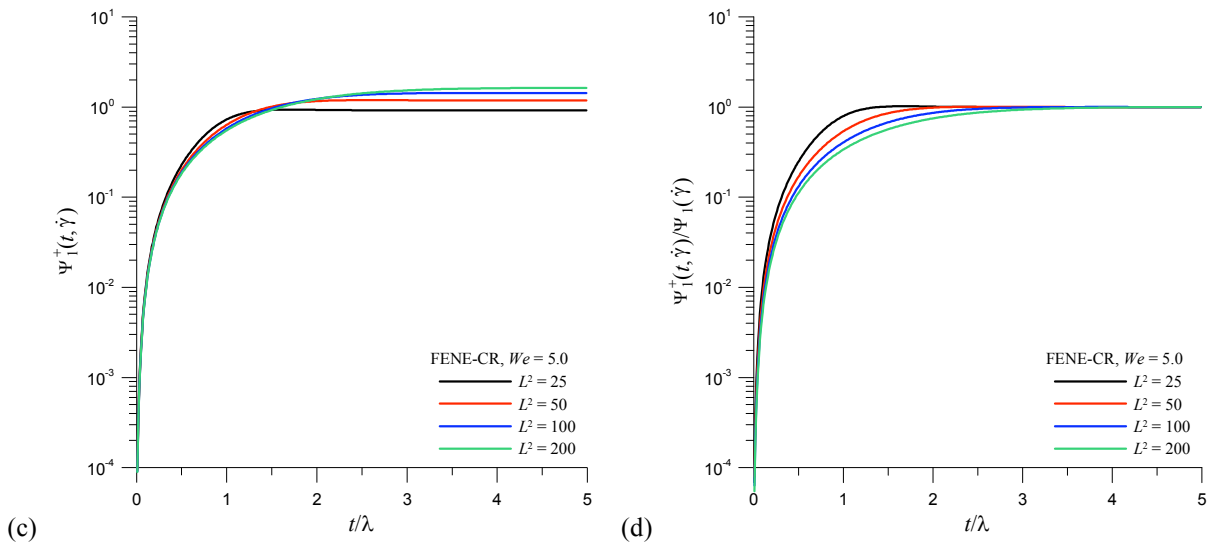


Figura 4.18 (cont.) – Propriedades materiais do modelo FENE-CR ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

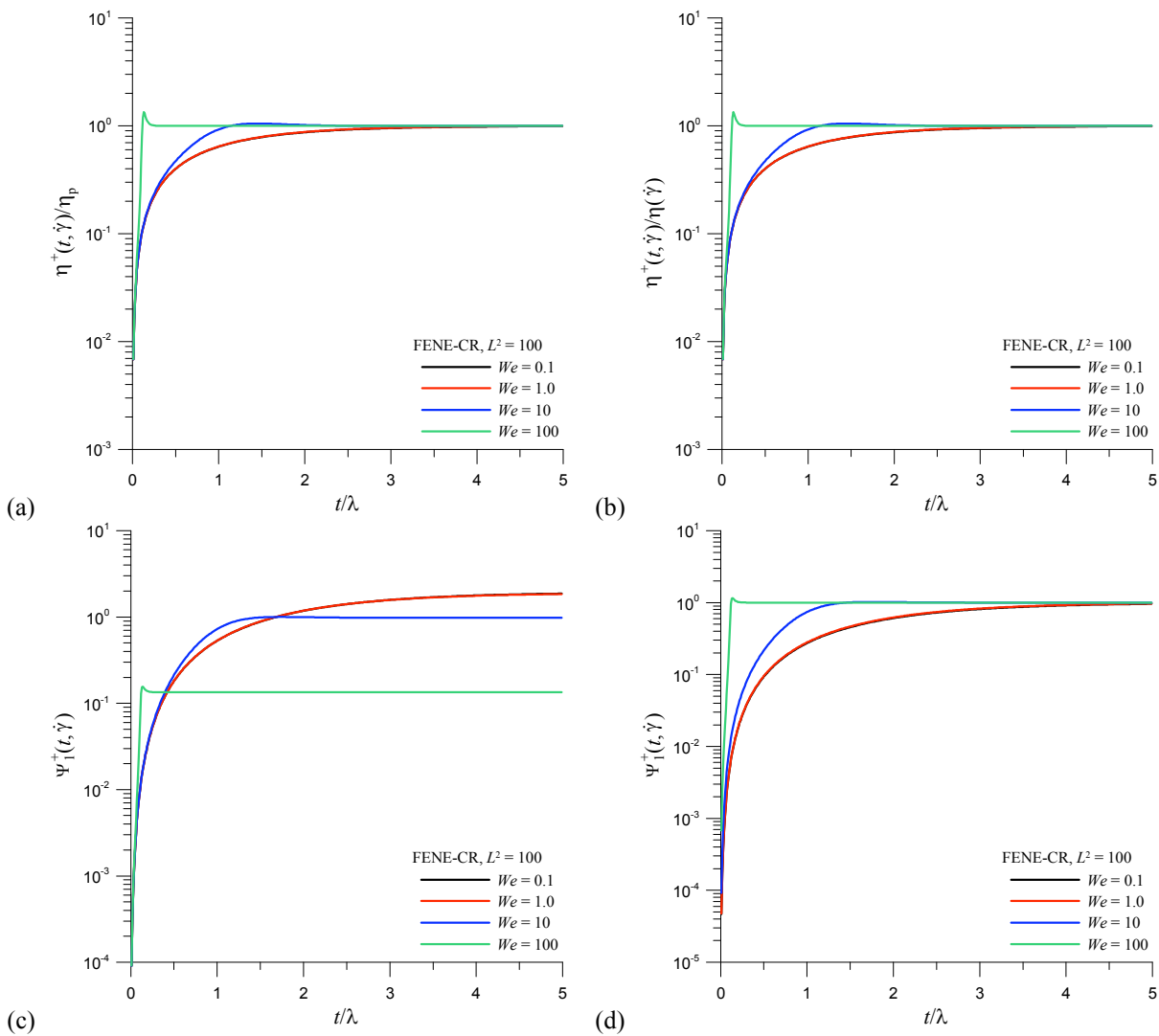


Figura 4.19 – Propriedades materiais do modelo FENE-CR ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

4.2.1.3 – Modelo FENE-P

Para o modelo FENE-P (Eq. (3.24)) em escoamento de corte não estacionário obtém-se o seguinte sistema de equações para as componentes da tensão:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \lambda \frac{\partial(\tau_{xx}/f)}{\partial t} = 2\lambda \left(\frac{\tau_{xy}}{f}\right) \dot{\gamma} - a\eta_p \frac{\partial(1/f)}{\partial t} \\ \tau_{yy} = 0 \\ \tau_{xy} + \lambda \frac{\partial(\tau_{xy}/f)}{\partial t} = \frac{a\eta_p}{f} \dot{\gamma} \end{cases} \quad (4.58)$$

onde a função de extensibilidade f é dada pela Eq. (3.25), com a constante $a = L^2 / (L^2 - 3)$.

Aplicando o método de 3NT (Eq. (4.49)) resulta no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} + \lambda \left(\frac{1.5(\tau_{xx}/f)^{n+1} - 2(\tau_{xx}/f)^n + 0.5(\tau_{xx}/f)^{n-1}}{\Delta t} \right) = 2\lambda \left(\frac{\tau_{xy}}{f}\right)^n \dot{\gamma} - \frac{a\eta_p}{\Delta t} \left(\frac{1.5}{f^{n+1}} - \frac{2}{f^n} + \frac{0.5}{f^{n-1}} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} = 0 \\ \tau_{xy}^{n+1} + \lambda \left(\frac{1.5(\tau_{xy}/f)^{n+1} - 2(\tau_{xy}/f)^n + 0.5(\tau_{xy}/f)^{n-1}}{\Delta t} \right) = \frac{a\eta_p}{f^n} \dot{\gamma} \end{cases} \quad (4.59)$$

Adimensionalizando o sistema de Eqs. (4.59), conforme apresentado na Eq. (4.45), tem-se que:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} = \left(2We \left(\frac{\tau_{xy}}{f}\right)^n + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f}\right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f}\right)^{n-1} - \frac{a\eta_p}{\Delta t} \left(\frac{1.5}{f^{n+1}} - \frac{2}{f^n} + \frac{0.5}{f^{n-1}} \right) \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1}\Delta t} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} = 0 \\ \tau_{xy}^{n+1} = \left(\frac{aWe}{f} + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xy}}{f}\right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xy}}{f}\right)^{n-1} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1}\Delta t} \right) \end{cases} \quad (4.60)$$

com a função de extensibilidade f dada por:

$$\begin{cases} t = t^{n+1} \Rightarrow f^{n+1} = \frac{L^2 + \tau_{xx}^{n+1}/a}{L^2 - 3} \\ t = t^n \Rightarrow f^n = \frac{L^2 + \tau_{xx}^n/a}{L^2 - 3} \\ t = t^{n-1} \Rightarrow f^{n-1} = \frac{L^2 + \tau_{xx}^{n-1}/a}{L^2 - 3} \end{cases} \quad (4.61)$$

A partir das equações obtidas apresentam-se os resultados de τ_{xy} e τ_{xx} , para o modelo FENE-P. Para o caso em que $We = 5.0$ e $L^2 = 25$ os perfis das tensões apresentam um *overshoot* (pico) no arranque do escoamento estabilizando na zona estacionária. Aumentando o valor de L^2 pode constatar-se que os valores de τ_{xy} e τ_{xx} aumentam quando o escoamento fica estacionário (Fig. 4.20(a)-(b)). Na Figura 4.20(c)-(d) estuda-se o efeito de We para L^2 fixo e verifica-se o aparecimento de um *overshoot* (pico) no arranque do escoamento para $L^2 = 100$ e $We = 100$. Esse efeito tende a desaparecer à medida que We diminui.

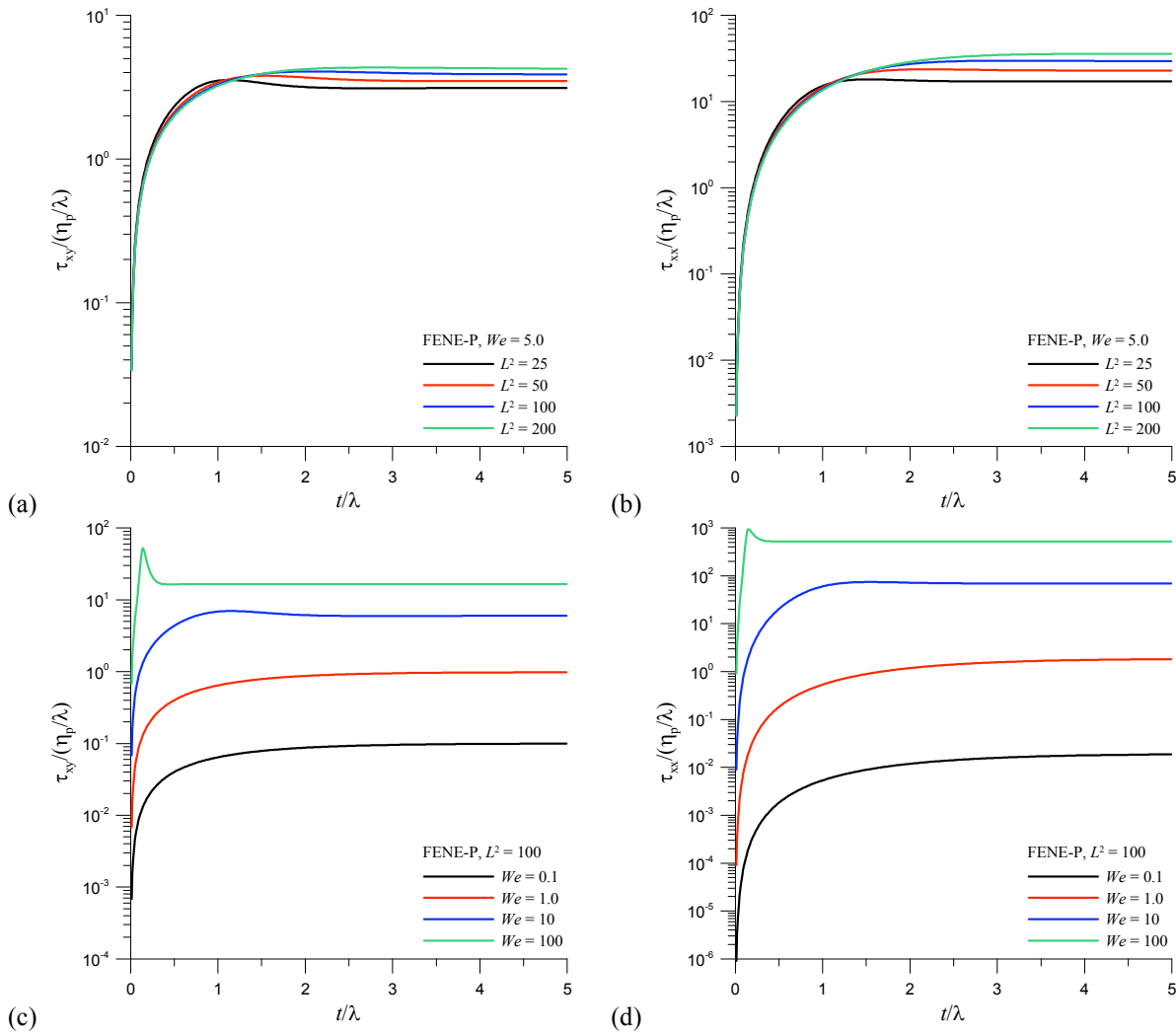


Figura 4.20 – Tensões $\tau_{xy}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ para o modelo FENE-P em função de L^2 e We ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 ($We = 5.0$) e da elasticidade We ($L^2 = 100$).

Nas Figuras 4.21 (variação de L^2 , com $We = 5.0$) e 4.22 (variação de We , com $L^2 = 100$) apresenta-se o comportamento das propriedades materiais resultantes do modelo FENE-P. A fluidificação da viscosidade é notória nas Figuras 4.21(a) e 4.22(a), com a viscosidade a diminuir no estado estacionário à medida que L^2 decresce e We cresce. Esse efeito é removido na representação das Figuras 4.21(b) e 4.22(b), onde a viscosidade é normalizada com o seu valor em estado estacionário. Por outro lado, o fenómeno do *overshoot* fica mais claro nesta última representação. Os mesmos comentários aplicam-se para a evolução do coeficiente da primeira diferença de tensões normais. O pico acentuado de η^+ , que ocorre logo após o arranque do escoamento, é uma previsão do modelo FENE-P que parece algo deslocada da realidade.

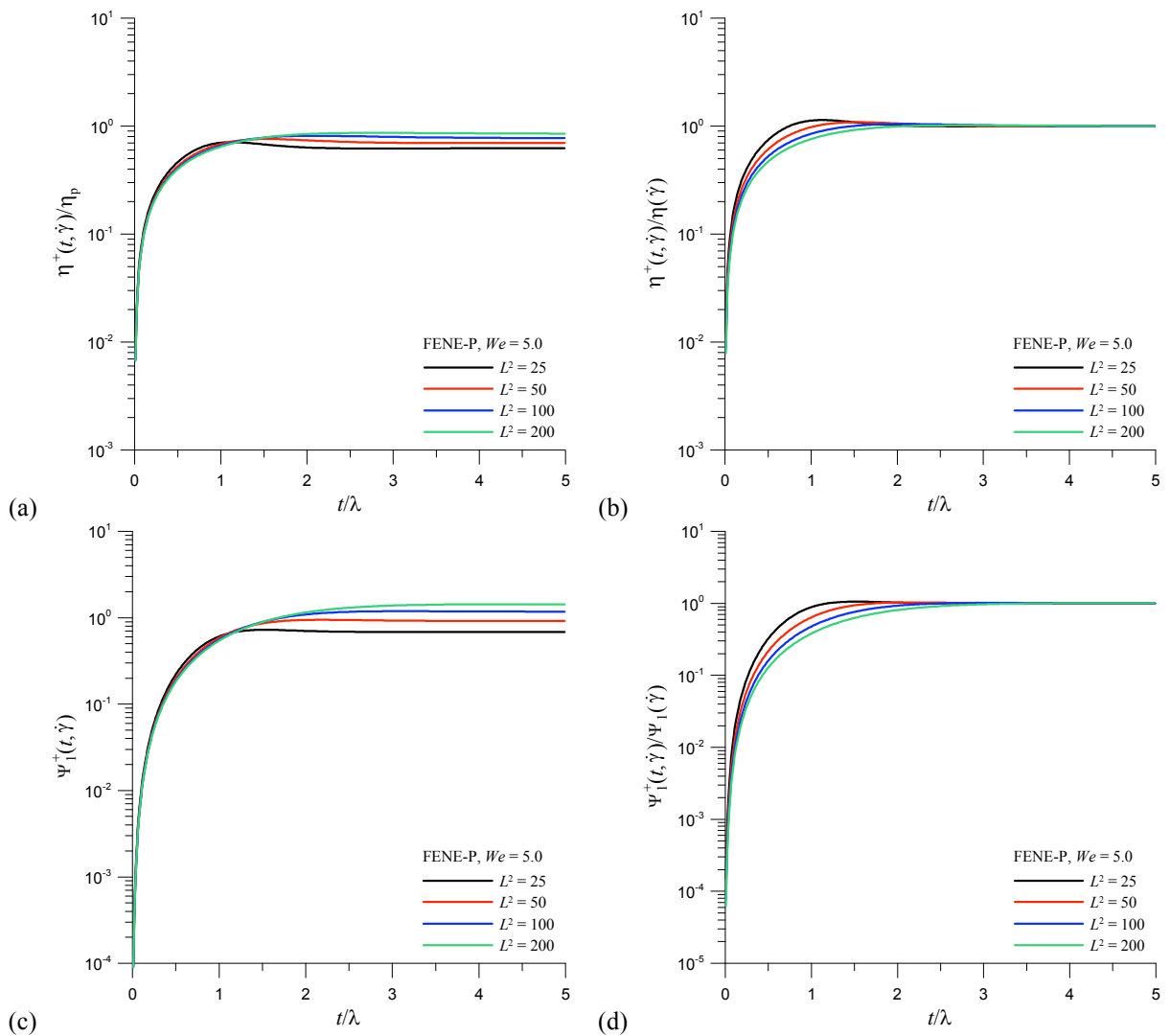


Figura 4.21 – Propriedades materiais do modelo FENE-P num escoamento de arranque de corte simples ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

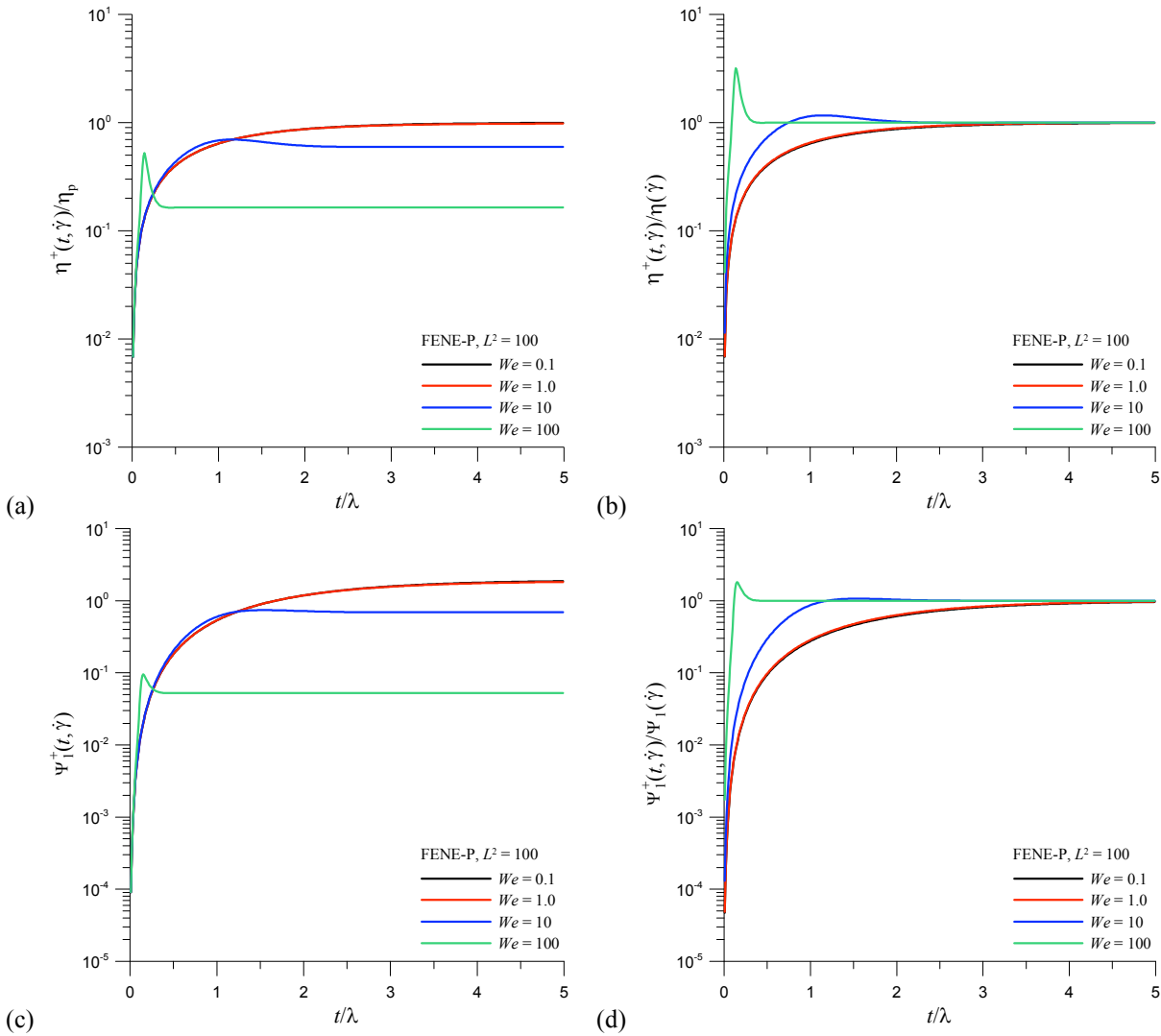


Figura 4.22 – Propriedades materiais do modelo FENE-P num escoamento de arranque de corte simples ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da elasticidade $We (= \lambda\dot{\epsilon})$, com $L^2 = 100$.

4.2.1.4 – Comparação entre os modelos FENE-MCR, -CR e -P

Na Figura 4.23 mostra-se a variação das tensões τ_{xy} e τ_{xx} para os três modelos constitutivos analisados (FENE-MCR, FENE-CR e FENE-P) num escoamento de arranque de corte simples, variando L^2 ($We = 5.0$) e We ($L^2 = 100$). Para valores baixos da taxa de deformação aplicada ($We = \lambda\dot{\gamma} \leq 1$) todos os modelos fornecem os mesmos resultados. Para valores elevados de We , o efeito reofluidificante na viscosidade do modelo FENE-P torna-se claro. As respostas do modelo FENE-CR e -MCR são idênticos em estado estacionário, mas o modelo FENE-MCR aproxima-se desse resultado de forma mais suave, sem sobreavaliações.

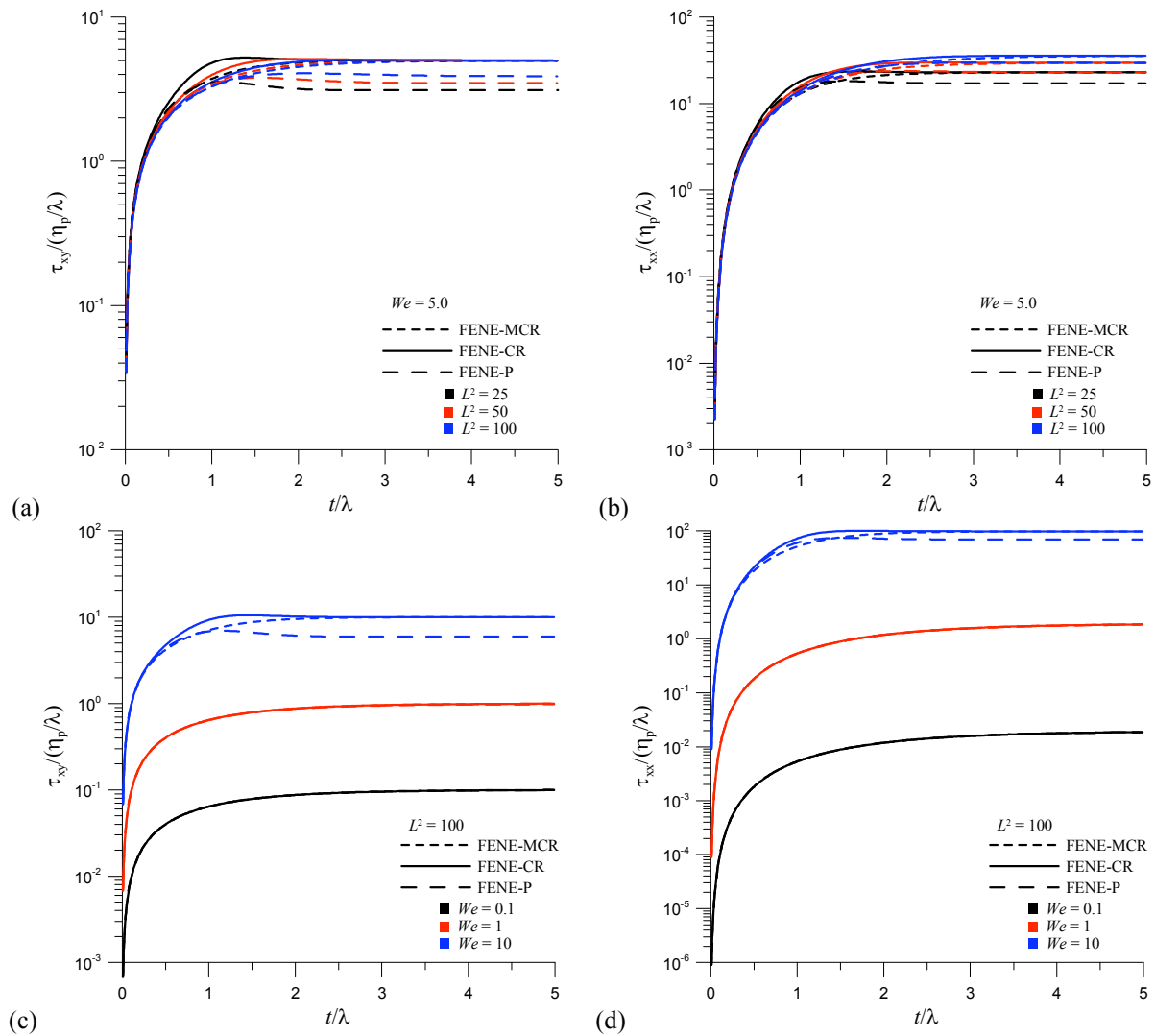


Figura 4.23 – Tensões $\tau_{xy}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ para o modelo FENE-MCR, -CR e -P, em função de L^2 e We ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$).

Nas Figuras 4.24 (variação de L^2 , com $We = 5.0$) e 4.25 (variação de We , com $L^2 = 100$) apresenta-se o comportamento das funções materiais dos modelos FENE-MCR, FENE-CR e FENE-P para as mesmas situações atrás consideradas, em escoamento de arranque de corte simples. A resposta do modelo FENE-P é a mais rápida dos três modelos, apresentado *overshoots* mais cedo e mais acentuados, o que é mais notório quando as propriedades são normalizadas com os respectivos valores em $t \rightarrow \infty$.

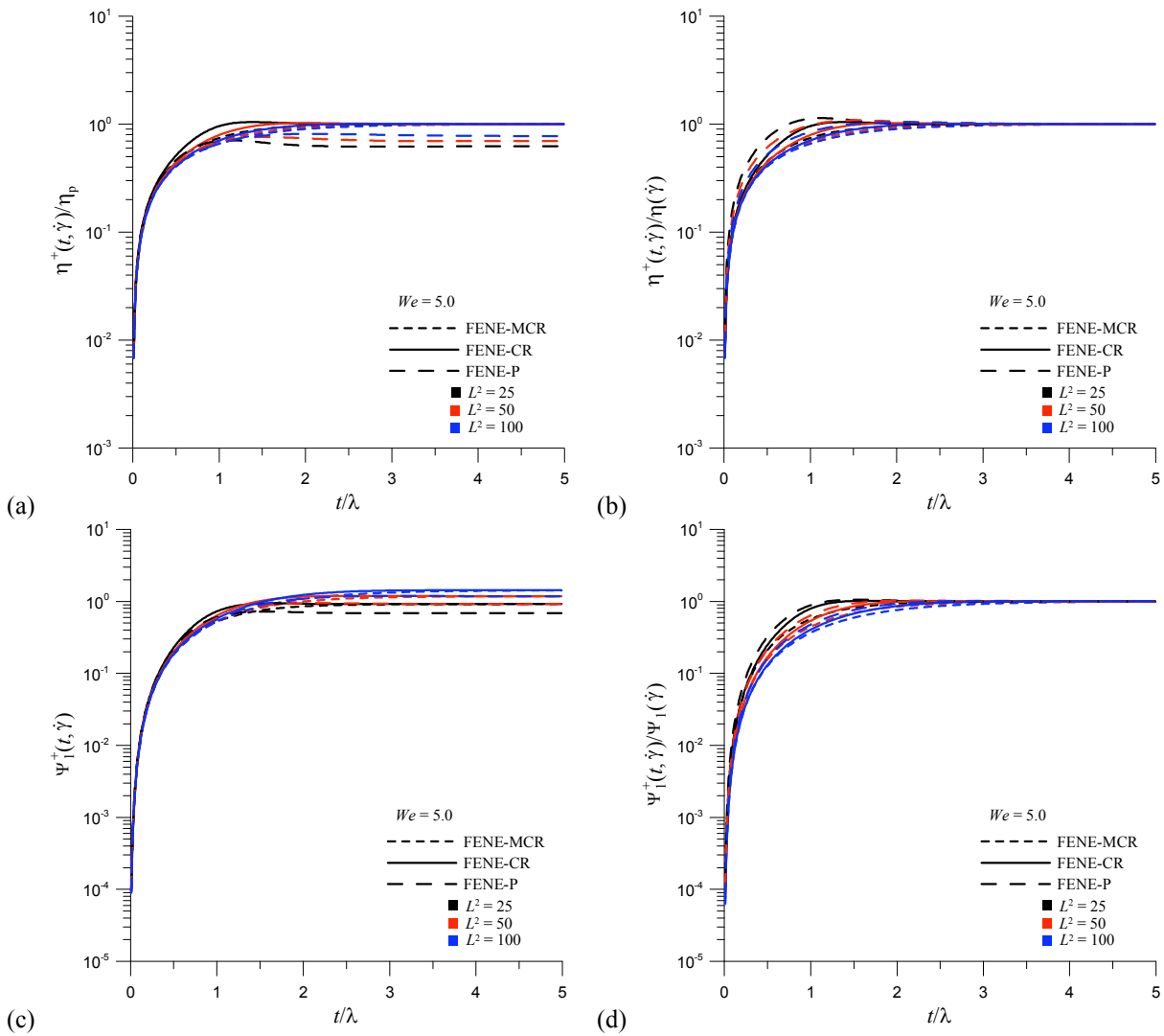


Figura 4.24 – Propriedades materiais do modelo FENE-MCR, -CR e -P ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$).
Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

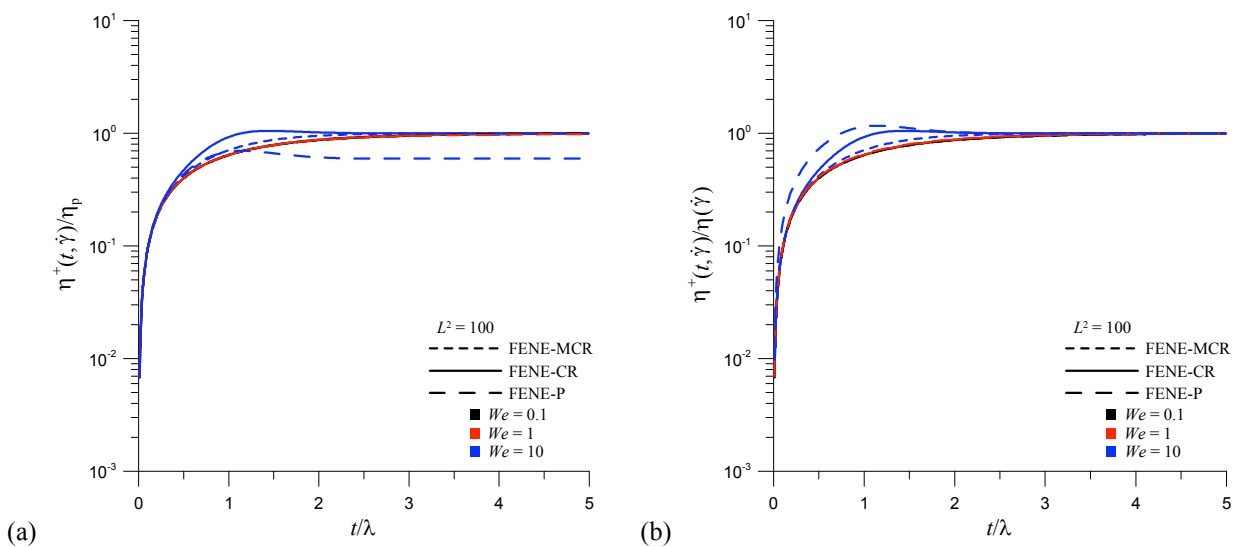


Figura 4.25 – Propriedades materiais do modelo FENE-MCR, -CR e -P ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$).
Influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

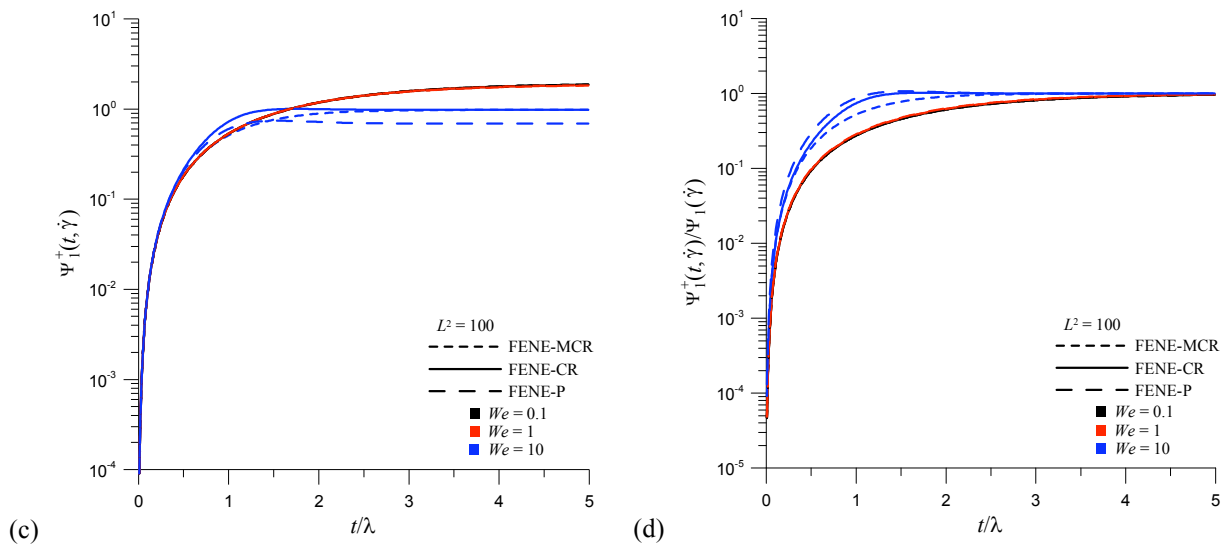


Figura 4.25 (cont.) – Propriedades materiais do modelo FENE-MCR, -CR e -P ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$).
Influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

4.2.2 – escoamento transitório extensional uniaxial

Neste tipo de escoamento extensional uniaxial de arranque (Fig. 4.26), em $t = 0$ um elemento material sofre um estiramento com uma taxa de extensão $\dot{\epsilon}$ constante ao longo da direção x . O campo de velocidades para este tipo de escoamento é definido pela Eq. (4.23).

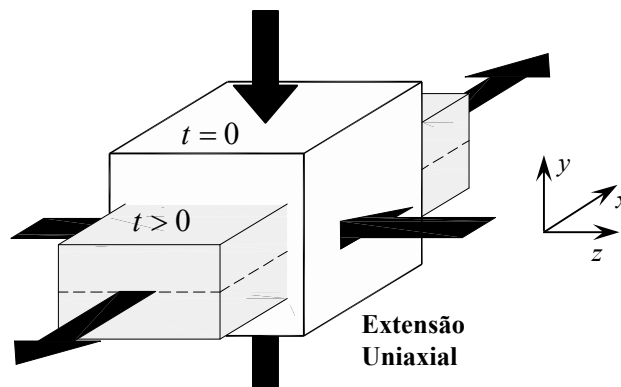


Figura 4.26 – Representação esquemática do escoamento extensional uniaxial não estacionário.

A viscosidade extensional transiente uniaxial $\eta_E^+(t, \dot{\epsilon})$, que contabiliza a dependência temporal, é dada pela seguinte expressão:

$$\eta_E^+(t, \dot{\epsilon}) = \frac{\tau_{xx} - \tau_{yy}}{\dot{\epsilon}} \tag{4.62}$$

Adimensionalizando de acordo com os seguintes parâmetros:

$$\bar{t} = \frac{t}{\lambda}, \quad \bar{\tau}_{ij} = \frac{\tau_{ij}}{\eta_p / \lambda} \text{ e } We = \lambda \dot{\epsilon} \quad (4.63)$$

resulta em:

$$\frac{\eta_E^+(t, \dot{\epsilon})}{\eta_p} = \frac{\bar{\tau}_{xx} - \bar{\tau}_{yy}}{We} \quad (4.64)$$

Geralmente, a viscosidade extensional é função da taxa extensional $\dot{\epsilon}$ e do tempo t , aumentando com o aumento da taxa extensional (Bird & Spriggs [24] e Housiadas & Beris [62]). Quando não ocorre uma ruptura do fluido, a viscosidade extensional η_E aproxima-se de um valor limite $\eta_E(\dot{\epsilon}, \infty) = \eta_E(\dot{\epsilon})$, a partir do qual não varia com a taxa extensional (viscosidade extensional estacionária). Esse valor limite de η_E foi discutido na subsecção 4.1.2.

4.2.2.1 – Modelo FENE-MCR

Aplicando a equação reológica do modelo FENE-MCR (Eq. (3.30)) para este tipo de escoamento obtém-se o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \frac{\lambda}{f} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} - 2\tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 2\eta_p \frac{\partial u}{\partial x} \\ \tau_{yy} + \frac{\lambda}{f} \left(\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} - 2\tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 2\eta_p \frac{\partial v}{\partial y} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx} + \frac{\lambda}{f} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} - 2\tau_{xx} \dot{\epsilon} \right) = 2\eta_p \dot{\epsilon} \\ \tau_{yy} + \frac{\lambda}{f} \left(\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} + \tau_{yy} \dot{\epsilon} \right) = -\eta_p \dot{\epsilon} \end{cases} \quad (4.65)$$

Usando a adimensionalização da Eq. (4.63) o sistema de equações anterior reduz-se a (omitindo-se o traço superior a indicar tensões e tempo adimensionais):

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \frac{1}{f} \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} = 2We + 2 \frac{We \tau_{xx}}{f} \\ \tau_{yy} + \frac{1}{f} \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} + \frac{We}{f} \tau_{yy} = -We \end{cases} \quad (4.66)$$

Utilizando o método de 3NT, definido na Eq. (4.49), o sistema de Eqs. (4.66) resulta em:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} + \frac{1}{f} \left(\frac{1.5\tau_{xx}^{n+1} - 2\tau_{xx}^n + 0.5\tau_{xx}^{n-1}}{\Delta t} \right) = 2We + 2 \frac{We\tau_{xx}^n}{f} \\ \tau_{yy}^{n+1} + \frac{1}{f} \left(\frac{1.5\tau_{yy}^{n+1} - 2\tau_{yy}^n + 0.5\tau_{yy}^{n-1}}{\Delta t} \right) + \frac{We}{f} \tau_{yy}^{n+1} = -We \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} = \left(2We + 2 \frac{We\tau_{xx}^n}{f} + \frac{2\tau_{xx}^n}{f\Delta t} - \frac{0.5\tau_{xx}^{n-1}}{f\Delta t} \right) \Big/ \left(1 + \frac{1.5}{f\Delta t} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} = \left(-We + \frac{2\tau_{yy}^n}{f\Delta t} - \frac{0.5\tau_{yy}^{n-1}}{f\Delta t} \right) \Big/ \left(1 + \frac{1.5}{f\Delta t} + \frac{We}{f} \right) \end{cases} \quad (4.67)$$

A função de extensibilidade adimensionalizada do modelo reológico FENE-MCR (Eq. (3.28)) será dada por:

$$f = \frac{L^2 + (\tau_{xx} + 2\tau_{yy})}{L^2 - 3} \quad (4.68)$$

com $tr(\boldsymbol{\tau}) = \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz} = \tau_{xx} + 2\tau_{yy}$, uma vez que $\tau_{yy} = \tau_{zz}$. Será sempre calculado com valores do tempo presente, $f = f^n$.

Apresentam-se de seguida alguns resultados obtidos por resolução do sistema de Eqs. (4.67), para o modelo FENE-MCR, a partir dos quais se pode analisar a evolução das tensões τ_{xx} e τ_{yy} até atingirem o regime permanente (Figs. 4.27 e 4.28).

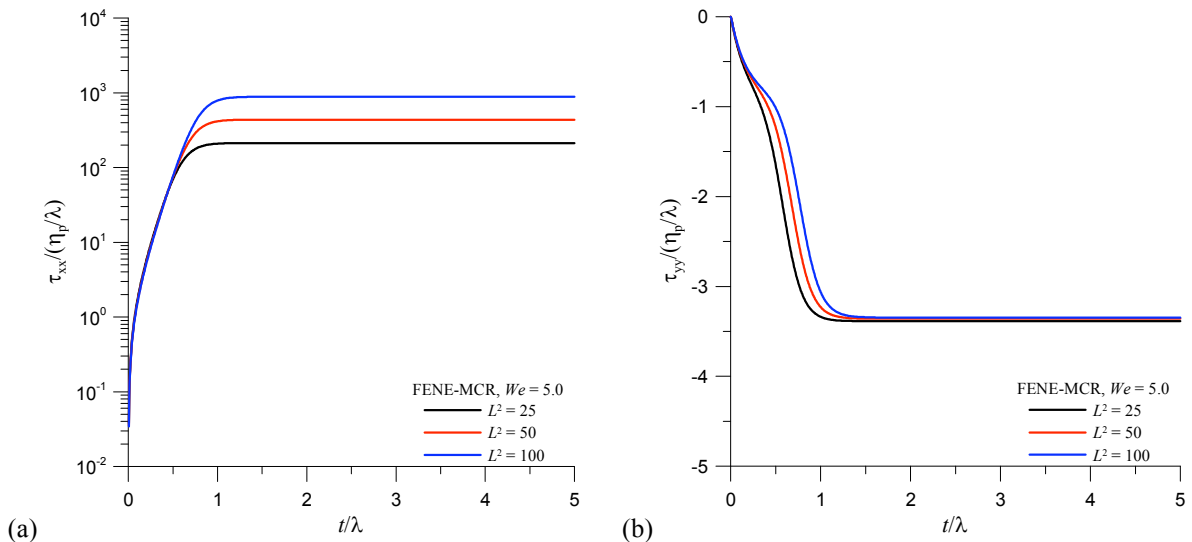


Figura 4.27 – Tensões normais $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{yy}/(\eta_p/\lambda)$ num escoamento extensional do modelo FENE-MCR ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

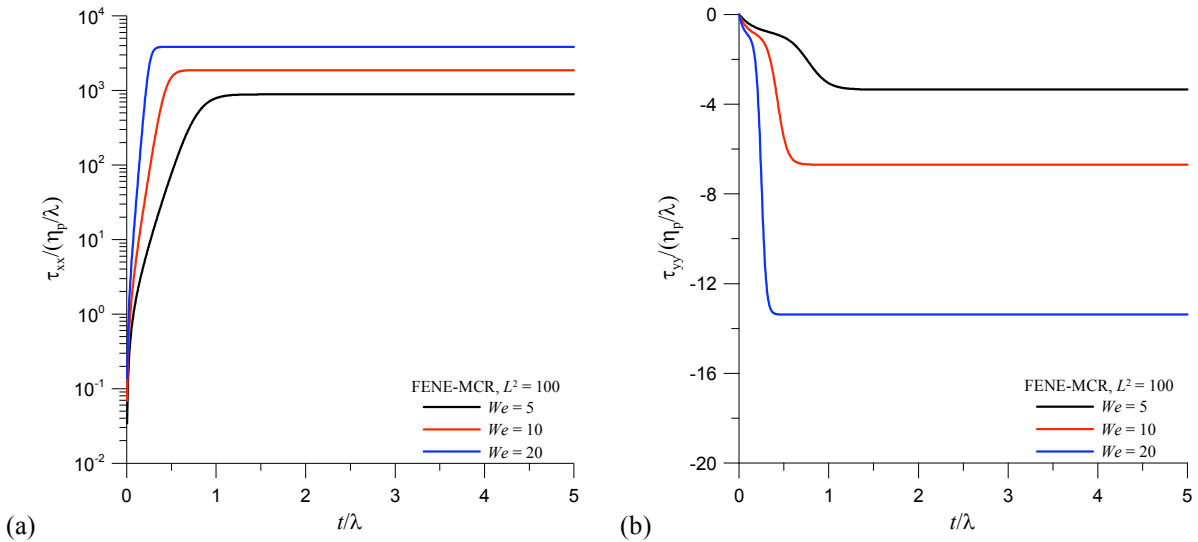


Figura 4.28 – Tensões normais $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{yy}/(\eta_p/\lambda)$ num escoamento extensional do modelo FENE-MCR ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

Dos resultados obtidos constata-se que para valores de $We = 5.0$, quando se faz variar o parâmetro L^2 , o perfil de tensões normais τ_{xx} é coincidente logo após se dar o arranque do escoamento, mas quando se atinge a zona estacionária os resultados aumentam com L^2 como seria de esperar (Fig. 4.27(a)). Em relação aos valores de τ_{yy} , uma vez que o fluido é comprimido segundo a direcção y , os valores são negativos e aumentam com L^2 no início do escoamento, sendo quase coincidentes na zona estacionária (Fig. 4.27(b)). Analisando o efeito de We , com L^2 constante ($= 100$), pode concluir-se que tanto as tensões τ_{xx} como τ_{yy} (em módulo) aumentam com o crescimento de We (Fig. 4.28(a) e (b)).

Na Figura 4.29 mostra-se o comportamento da viscosidade extensional para o modelo FENE-MCR.

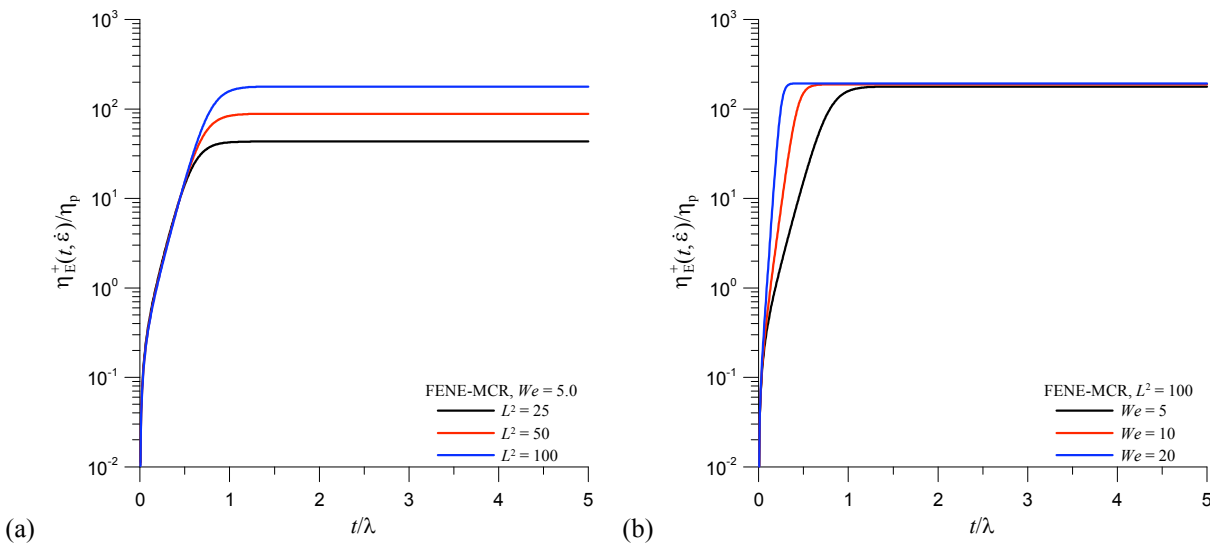


Figura 4.29 – Viscosidade extensional em função do tempo para o modelo FENE-MCR ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência de L^2 (com $We = 5.0$) e We (com $L^2 = 100$).

Com base nos resultados da Figura 4.29 pode concluir-se que o aumento do parâmetro de extensibilidade (L^2) do modelo FENE-MCR (para $We = 5.0$) conduz a maior viscosidade extensional para tempo infinito (regime permanente). Neste caso, o intervalo de tempo que decorre até se atingir a viscosidade extensional estacionária é maior com valores de L^2 crescentes (Fig. 4.29(a)). Em relação à situação em que L^2 se mantém constante ($= 100$) e se faz variar o número de Weissenberg, verifica-se que à medida que aumenta a elasticidade do fluido (We maiores) se atinge mais rapidamente a situação em que a viscosidade extensional fica estacionária (Fig. 4.29(b)). Em todos os casos um tempo de relaxação parece suficiente para o regime extensional estacionário ficar estabelecido; contrariamente no que acontecia no escoamento de corte da subsecção 4.2.1.

4.2.2.2 – Modelo FENE-CR

Partindo da equação tensorial que define este modelo constitutivo reológico (Eq. (3.27)) obtém-se o seguinte sistema de equações para as tensões não nulas em escoamento extensional uniaxial:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \lambda \left(\frac{\partial(\tau_{xx}/f)}{\partial t} - 2\dot{\epsilon} \frac{\tau_{xx}}{f} \right) = 2\eta_p \dot{\epsilon} \\ \tau_{yy} + \lambda \left(\frac{\partial(\tau_{yy}/f)}{\partial t} + \dot{\epsilon} \frac{\tau_{yy}}{f} \right) = -\eta_p \dot{\epsilon} \end{cases} \quad (4.69)$$

Aplicando a adimensionalização definida pela Eq. (4.63) o sistema de Eqs. (4.69) fica expresso da seguinte forma (sem traço superior):

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \frac{\partial(\tau_{xx}/f)}{\partial t} = 2We + 2We \frac{\tau_{xx}}{f} \\ \tau_{yy} + \frac{\partial(\tau_{yy}/f)}{\partial t} + We \frac{\tau_{yy}}{f} = -We \end{cases} \quad (4.70)$$

Usando o método de 3NT (Eq. (4.49)) para a discretização resulta no seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} + \left(\frac{1.5(\tau_{xx}/f)^{n+1} - 2(\tau_{xx}/f)^n + 0.5(\tau_{xx}/f)^{n-1}}{\Delta t} \right) = 2We + 2We \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n \\ \tau_{yy}^{n+1} + \left(\frac{1.5(\tau_{yy}/f)^{n+1} - 2(\tau_{yy}/f)^n + 0.5(\tau_{yy}/f)^{n-1}}{\Delta t} \right) + We \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^{n+1} = -We \end{cases} \Rightarrow \quad (4.71)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \tau_{xx}^{n+1} = \left(2We + 2We \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^{n-1} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1} \Delta t} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} = \left(-We + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^{n-1} \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1} \Delta t} + \frac{We}{f^{n+1}} \right) \end{cases}$$

Neste modelo FENE-CR a função de extensibilidade f é definida da seguinte forma (partindo da Eq. (3.28)):

$$\begin{cases} t = t^{n+1} \Rightarrow f^{n+1} = \frac{L^2 + (\tau_{xx}^{n+1} + 2\tau_{yy}^{n+1})}{L^2 - 3} \\ t = t^n \Rightarrow f^n = \frac{L^2 + (\tau_{xx}^n + 2\tau_{yy}^n)}{L^2 - 3} \\ t = t^{n-1} \Rightarrow f^{n-1} = \frac{L^2 + (\tau_{xx}^{n-1} + 2\tau_{yy}^{n-1})}{L^2 - 3} \end{cases} \quad (4.72)$$

Seguidamente, são apresentados os resultados obtidos para o modelo FENE-CR relativamente à evolução das tensões τ_{xx} e τ_{yy} provenientes do sistema de equações (4.71).

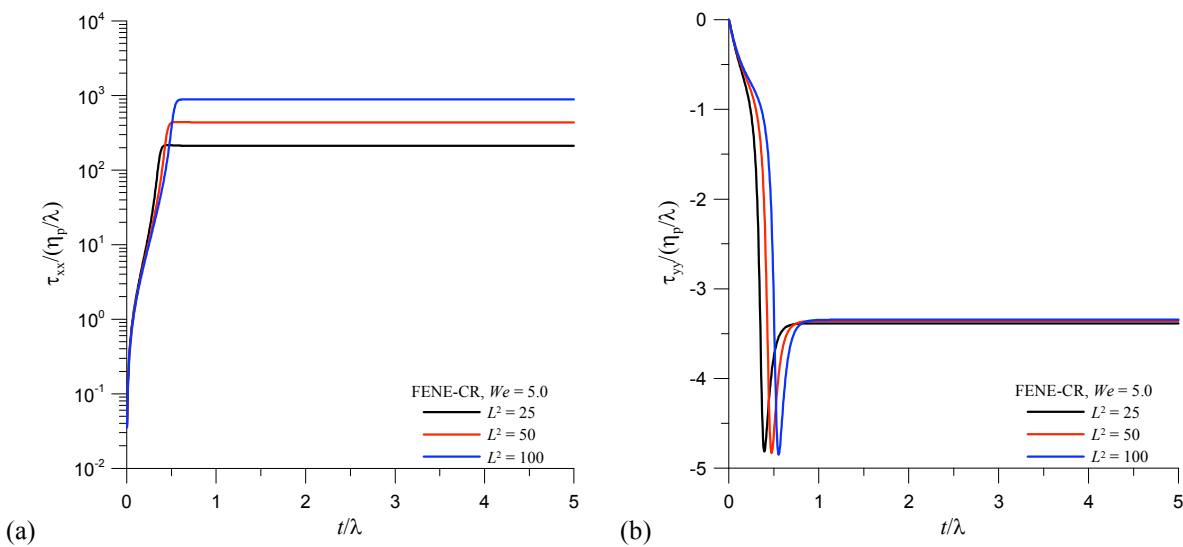


Figura 4.30 – Tensões normais $\tau_{xx} / (\eta_p / \lambda)$ e $\tau_{yy} / (\eta_p / \lambda)$ num escoamento extensional do modelo FENE-CR ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$.

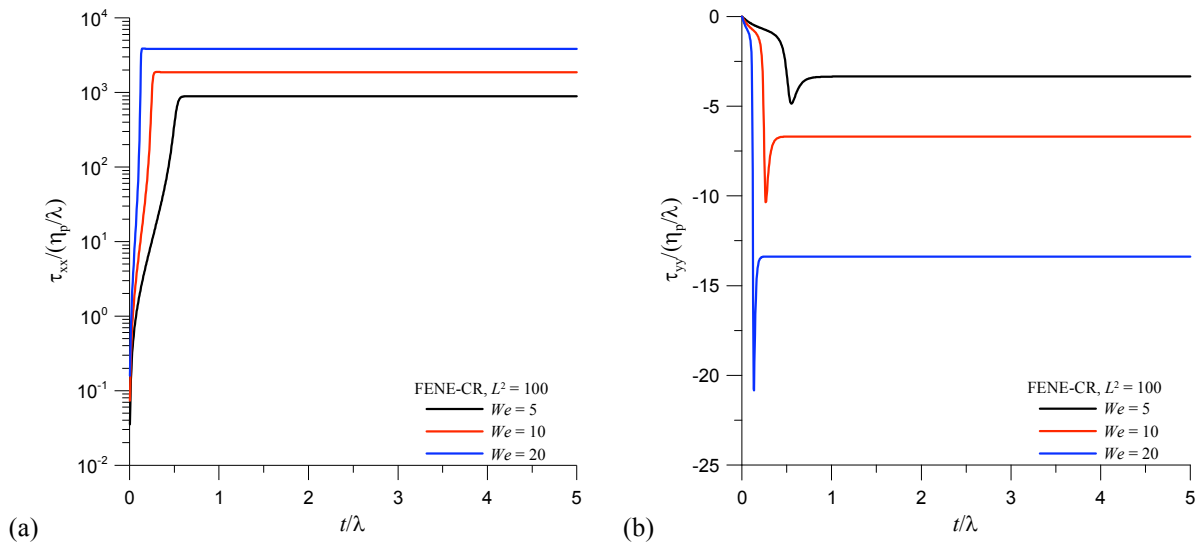


Figura 4.31 – Tensões normais $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{yy}/(\eta_p/\lambda)$ num escoamento extensional do modelo FENE-CR ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

Conclui-se, a partir dos gráficos das Figuras 4.30 e 4.31, que a variação da tensão τ_{yy} apresenta um *undershoot* (pico inferior) nos resultados para $We = 5.0$ com a variação de L^2 (Fig. 4.30(b)), e que após esse *undershoot* os valores tendem a ficar muito próximos na zona estacionária do escoamento. Em relação ao efeito de We (Fig. 4.31), com L^2 constante ($= 100$), verifica-se que o *undershoot* (pico inferior) de tensão τ_{yy} aumenta de intensidade (em valor absoluto) à medida que aumenta o valor de We (Fig. 4.31(b)).

Na Figura 4.32 apresentam-se os resultados da viscosidade extensional para este modelo reológico (FENE-CR) no arranque do escoamento uniaxial. Uma vez mais, o estabelecimento do escoamento extensional uniaxial é muito rápido, e uma unidade de tempo de relaxação é mais do que suficiente para que isso se verifique, qualquer que seja o conjunto de parâmetros L^2 e We . A rapidez com que se atinge o regime permanente aumenta com We e diminui com L^2 .

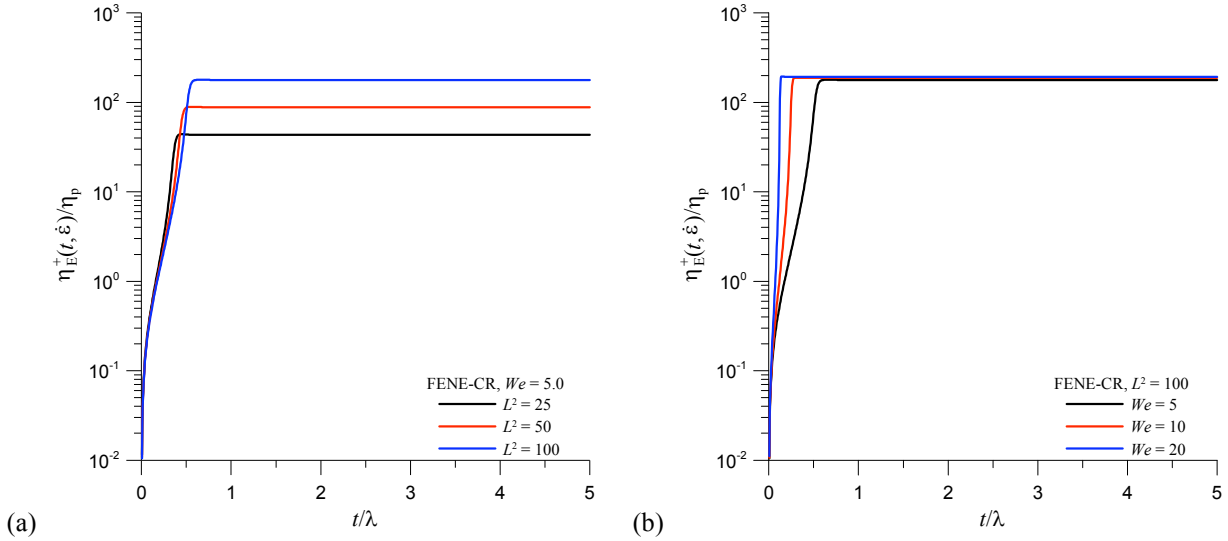


Figura 4.32 – Viscosidade extensional em função do tempo para o modelo FENE-CR ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$). Influência de L^2 (com $We = 5.0$) e We (com $L^2 = 100$).

4.2.2.3 – Modelo FENE-P

Partindo da equação tensorial que define este modelo reológico (Eq. (3.24), para a versão em que $e = 0$) obtém-se o seguinte sistema de equações para o cálculo das tensões no arranque do escoamento uniaxial do modelo FENE-P:

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \lambda \left(\frac{\partial(\tau_{xx}/f)}{\partial t} - 2\dot{\varepsilon} \frac{\tau_{xx}}{f} \right) = \frac{2a\eta_p}{f} \dot{\varepsilon} - a\eta_p \frac{\partial(1/f)}{\partial t} \\ \tau_{yy} + \lambda \left(\frac{\partial(\tau_{yy}/f)}{\partial t} + \dot{\varepsilon} \frac{\tau_{yy}}{f} \right) = -\frac{a\eta_p}{f} \dot{\varepsilon} - a\eta_p \frac{\partial(1/f)}{\partial t} \end{cases} \quad (4.73)$$

Adimensionalizando o sistema de equações anterior de acordo com a Eq. (4.63), resulta em (omitindo o traço superior):

$$\begin{cases} \tau_{xx} + \frac{\partial(\tau_{xx}/f)}{\partial t} - 2We \frac{\tau_{xx}}{f} = 2 \frac{aWe}{f} - a \frac{\partial(1/f)}{\partial t} \\ \tau_{yy} + \frac{\partial(\tau_{yy}/f)}{\partial t} + We \frac{\tau_{yy}}{f} = -\frac{aWe}{f} - a \frac{\partial(1/f)}{\partial t} \end{cases} \quad (4.74)$$

Aplicando o método de 3NT (Eq. (4.49)) para resolver o sistema de equações (4.74), obtém-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_{xx}^{n+1} + \frac{1}{\Delta t} \left[1.5 \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^{n+1} - 2 \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n + 0.5 \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^{n-1} \right] = 2We \left[\frac{a}{f^n} + \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n \right] - \\ \frac{a}{\Delta t} \left(\frac{1.5}{f^{n+1}} - \frac{2}{f^n} + \frac{0.5}{f^{n-1}} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} + \frac{1}{\Delta t} \left[1.5 \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^{n+1} - 2 \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^n + 0.5 \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^{n-1} \right] + We \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^{n+1} = -\frac{aWe}{f^n} - \\ \frac{a}{\Delta t} \left(\frac{1.5}{f^{n+1}} - \frac{2}{f^n} + \frac{0.5}{f^{n-1}} \right) \end{array} \right. \Rightarrow \quad (4.75)$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \tau_{xx}^{n+1} = \left[2We \left[\frac{a}{f^n} + \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n \right] + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{xx}}{f} \right)^{n-1} - \frac{a}{\Delta t} \left(\frac{1.5}{f^{n+1}} - \frac{2}{f^n} + \frac{0.5}{f^{n-1}} \right) \right] / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1} \Delta t} \right) \\ \tau_{yy}^{n+1} = \left(-\frac{aWe}{f^n} + \frac{2}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^n - \frac{0.5}{\Delta t} \left(\frac{\tau_{yy}}{f} \right)^{n-1} - \frac{a}{\Delta t} \left(\frac{1.5}{f^{n+1}} - \frac{2}{f^n} + \frac{0.5}{f^{n-1}} \right) \right) / \left(1 + \frac{1.5}{f^{n+1} \Delta t} + \frac{We}{f^{n+1}} \right) \end{array} \right.$$

A função de extensibilidade adimensionalizada do modelo FENE-P (Eq. (3.25)) para cada nível temporal é dada por:

$$\left\{ \begin{array}{l} t = t^{n+1} \Rightarrow f^{n+1} = \frac{L^2 + (\tau_{xx}^{n+1} + 2\tau_{yy}^{n+1})/a}{L^2 - 3} \\ t = t^n \Rightarrow f^n = \frac{L^2 + (\tau_{xx}^n + 2\tau_{yy}^n)/a}{L^2 - 3} \\ t = t^{n-1} \Rightarrow f^{n-1} = \frac{L^2 + (\tau_{xx}^{n-1} + 2\tau_{yy}^{n-1})/a}{L^2 - 3} \end{array} \right. \quad (4.76)$$

Na Figura 4.33 mostram-se os resultados obtidos para τ_{xx} e τ_{yy} referente ao modelo FENE-P.

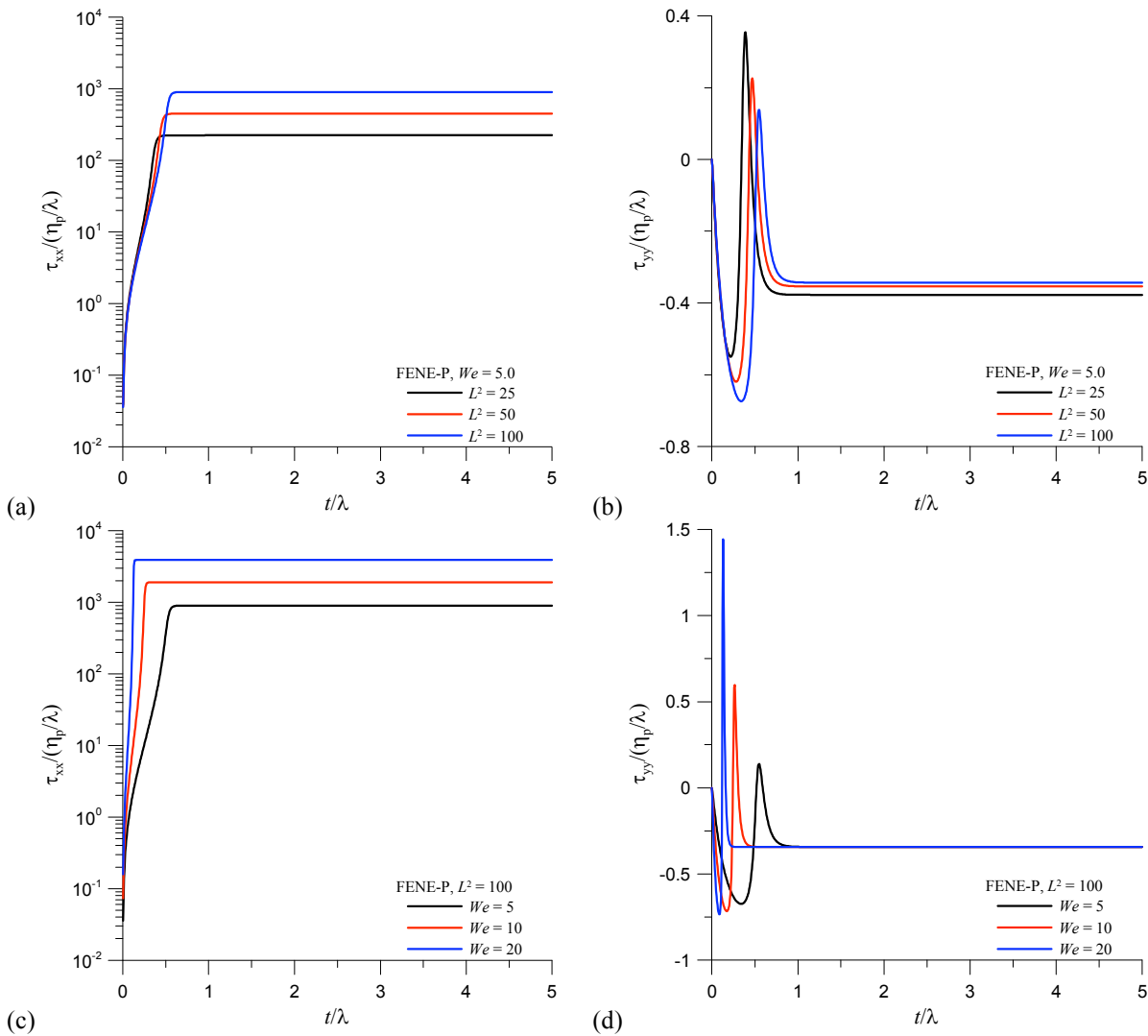


Figura 4.33 – Tensões normais $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{yy}/(\eta_p/\lambda)$ num escoamento extensional do modelo FENE-P ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$): (a) – (b) influência da extensibilidade L^2 , com $We = 5.0$; e (c) – (d) influência da elasticidade We , com $L^2 = 100$.

Analisando estes gráficos (Fig. 4.33) verifica-se que para $We = 5.0$ fixo e variando L^2 , o andamento de τ_{xx} é monótono com o valor final aumentando com o crescimento de L^2 , enquanto a evolução das tensões τ_{yy} apresenta um *undershoot* (pico inferior) e um *overshoot* (pico superior) de tensão no arranque do escoamento com intensidades diferentes (Fig. 4.33(a)-(b)). A intensidade do *undershoot* aumenta com o aumento de L^2 , enquanto a intensidade do *overshoot* diminui. Em relação à variação de We com L^2 constante ($= 100$) o aumento inicial de τ_{xx} , que contribui significativamente para N_1 , é muito brusco, com a taxa de aumento mais intensa à medida que We cresce. Não há *overshoot* (Fig. 4.33(c)). Já o perfil de tensões τ_{yy} apresenta também dois extremos de tensão, um inferior seguido por outro

superior, mas neste caso o maior destaque vai para a intensidade do pico superior que aumenta muito acentuadamente, ficando também mais estreito, com o aumento de We (Fig. 4.33(d)).

A variação da viscosidade extensional do modelo FENE-P é apresentada na Fig. 4.34. Segue basicamente a variação de τ_{xx} discutido antes, sendo de realçar a ausência de *overshoots* (picos superiores).

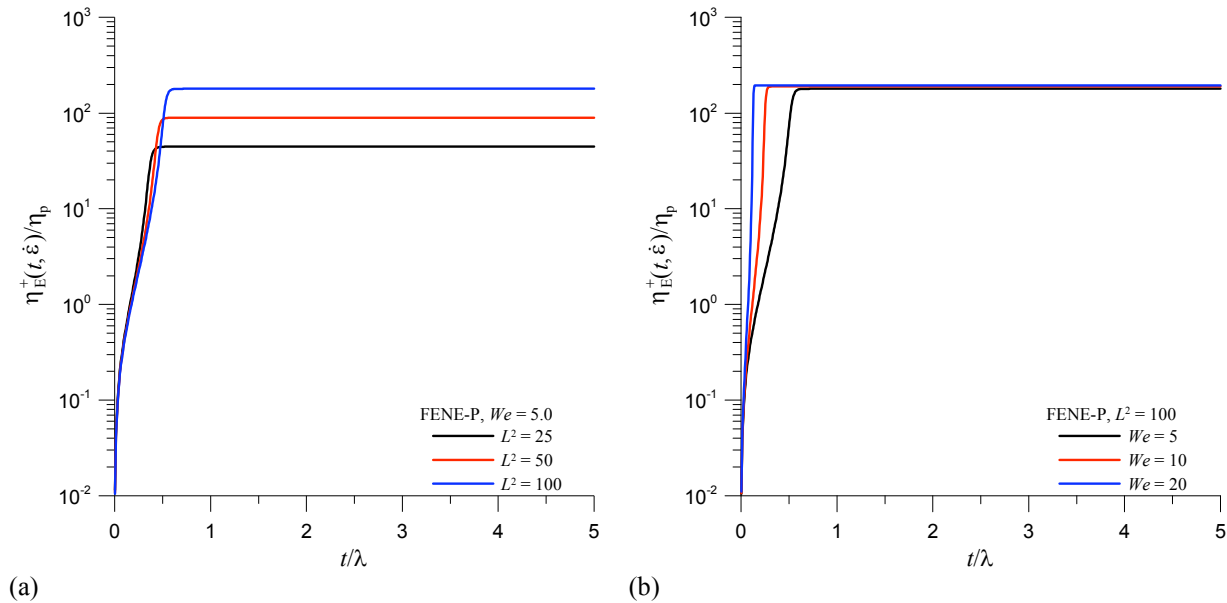


Figura 4.34 – Viscosidade extensional num escoamento de arranque uniaxial para o modelo FENE-P ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$): (a) influência de L^2 ($We = 5.0$); e (b) influência de We ($L^2 = 100$).

4.2.2.4 – Comparação entre os modelos FENE-MCR, -CR e -P

Seguidamente, apresenta-se na Figura 4.35 a variação das tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} para os modelos constitutivos FENE-MCR, FENE-CR e FENE-P, num escoamento de arranque extensional uniaxial, variando L^2 para $We = 5.0$ fixo, e variando We para $L^2 = 100$ fixo. De acordo com os resultados obtidos, observa-se que o perfil de tensões normais τ_{xx} é coincidente para os três modelos analisados logo após se dar o arranque do escoamento (Figs. 4.35(a) e (c)). No entanto, à medida que se aumenta a elasticidade We ou o parâmetro de extensibilidade L^2 há um aumento de τ_{xx} . Conclui-se ainda que uma unidade de tempo de relaxação é suficiente para se atingir o patamar estacionário, qualquer que seja o modelo

reológico aplicado ou o conjunto de parâmetros L^2 e We . Em relação a τ_{yy} , e uma vez que o fluido é comprimido segundo a direcção y , os valores ficam negativos para os três modelos constitutivos. Contudo, verifica-se que no caso do modelo FENE-CR o *undershoot* (pico inferior) é mais acentuado quando se aumenta a elasticidade We , com $L^2 = 100$ (Fig. 4.35(d)).

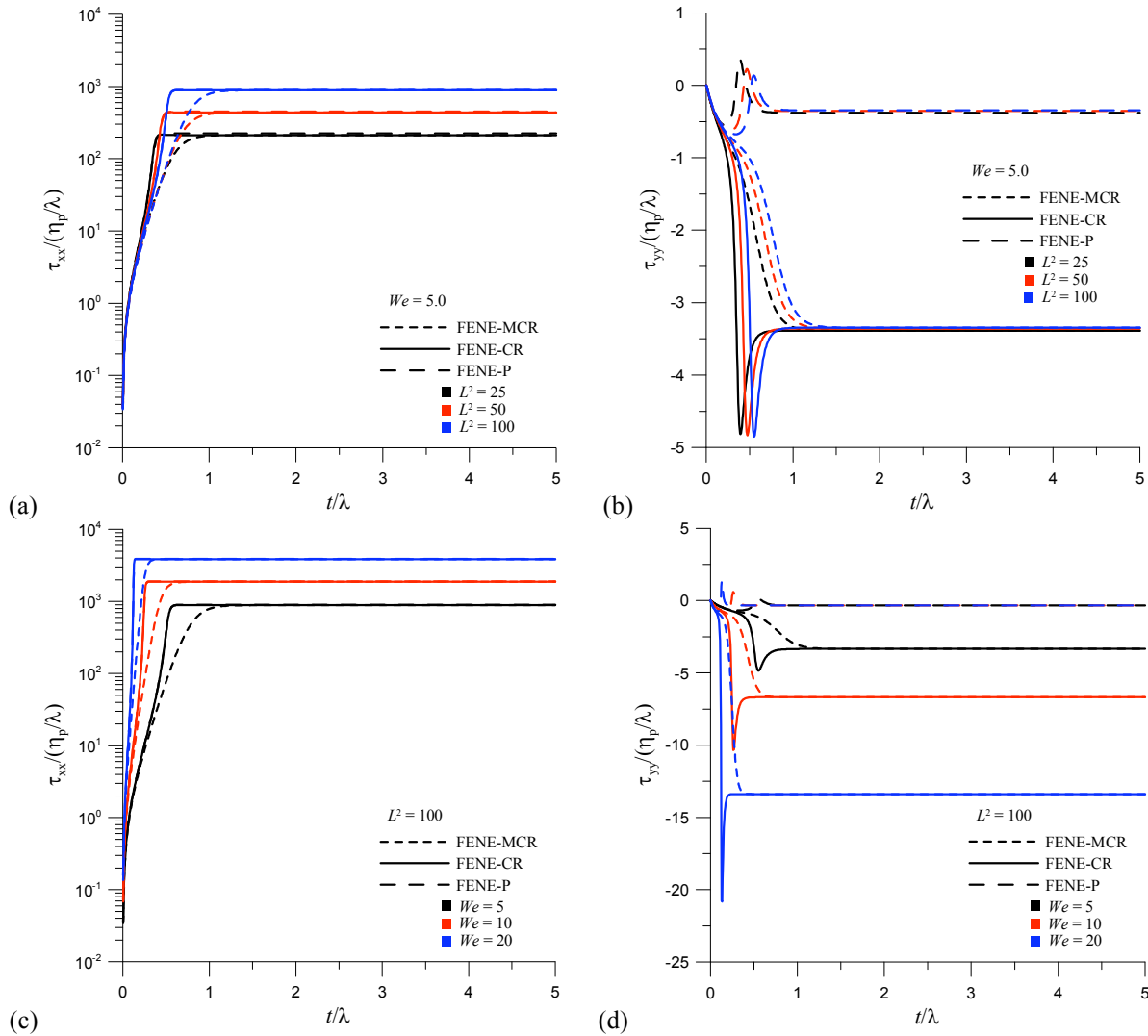


Figura 4.35 – Tensões normais $\tau_{xx}/(\eta_p/\lambda)$ e $\tau_{yy}/(\eta_p/\lambda)$ num escoamento extensional de arranque para o modelo FENE-MCR, -CR e -P ($N = 500$ e $\Delta\bar{t} = 1/100 = 0.01$): (a)-(b) influência de L^2 ($We = 5.0$); e (c)-(d) influência de We ($L^2 = 100$).

Por fim, mostra-se na Figura 4.36 o comportamento das funções materiais dos modelos FENE-MCR, FENE-CR e FENE-P para as mesmas situações atrás previstas num escoamento de arranque extensional uniaxial. Destas figuras regista-se que os níveis de τ_{yy} , por serem muito inferiores dos níveis de τ_{xx} , têm pouca influência sobre o andamento da

viscosidade extensional (ou elongacional). Esta cresce muito rapidamente com o aumento da elasticidade, tal como medida pelo número de Weissenberg, enquanto o efeito da extensibilidade resulta em patamares mais elevados para a viscosidade extensional em estado estacionário. Essas moléculas com maior extensibilidade ($L^2 \nearrow$) demoram mais tempo a estirar completamente. Não se vislumbra diferenças entre o modelo FENE-CR e FENE-P, enquanto o modelo FENE-MCR apresenta taxas de crescimento de η_E menores, o que está mais de acordo com os resultados de simulações macroscópicas de moléculas FENE (Keunings [68]).

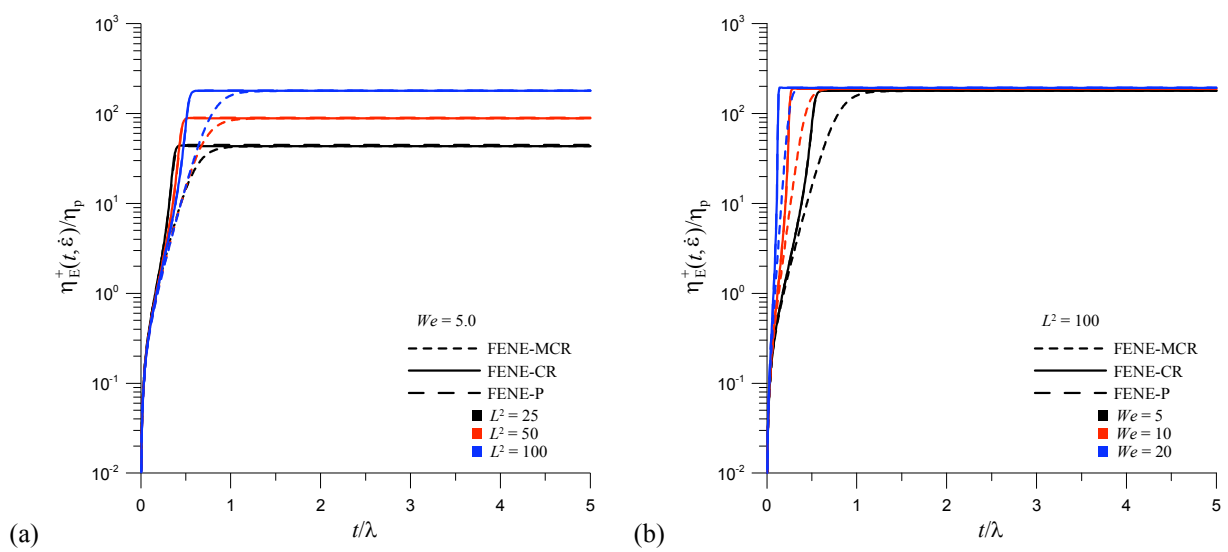


Figura 4.36 – Viscosidade extensional em função do tempo para o modelo FENE-MCR, -CR e -P ($N = 500$ e $\Delta \bar{t} = 1/100 = 0.01$): (a) influência de L^2 ($We = 5.0$); e (b) influência de We ($L^2 = 100$).

Capítulo 5

Método numérico

Neste capítulo apresentam-se as equações diferenciais do modelo matemático transformadas para coordenadas não ortogonais generalizadas. Posteriormente, faz-se a discretização das equações, aplicando o método dos volumes finitos, e são descritas as ideias base do esquema de diferenças de alta resolução aplicado aos termos convectivos: esquema CUBISTA (Alves et al. [7]). Após a discretização das equações faz-se uma breve descrição do algoritmo SIMPLC utilizado. Por fim, apresentam-se alguns resultados da implementação do modelo FENE-P no programa de cálculo, sendo feita a verificação desta implementação.

5.1 – Introdução

A solução numérica das equações de governo apresentadas na forma vectorial no Capítulo 3 é obtida através da aplicação do método dos volumes finitos (Patankar [107] e Ferziger & Perić [49]). Neste método numérico começa-se por dividir o domínio de cálculo num certo número de volumes de controlo (ou células) constituído por seis faces (tal como esquematizado na Fig. (5.3)). De seguida, as equações de governo na forma conservativa são integradas no espaço em torno de cada um desses volumes de controlo (ou células, com volume V_p) e no tempo sobre um passo temporal (Δt), assegurando que as quantidades físicas nas equações algébricas finais sejam conservadas. O termo do gradiente de pressão na equação da quantidade de movimento não é tratado de forma conservativa, tal como descrito em Oliveira [91]. Cada volume de controlo está rodeado de volumes de controlo vizinhos dispostos num espaço discreto chamado de malha computacional. As equações diferenciais são transformadas em sistemas de equações algébricas após integração nestes volumes finitos hexahedrais que podem, em geral, ser não ortogonais. A Figura 5.2 mostra um exemplo bidimensional de um elemento da malha em coordenadas generalizadas com a indicação da nomenclatura utilizada. Assim, a discretização espacial das equações que regem o escoamento, quer o problema seja uni-, bi- ou tridimensional, resultam num sistema de equações algébricas linearizado na forma $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, onde \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes da malha computacional, \mathbf{x} é o vector das variáveis (incógnitas) e \mathbf{b} é um vector que contém as informações associadas aos termos fonte e às condições de fronteira impostas. A estrutura dos coeficientes da matriz \mathbf{A} pode variar dependendo da dimensão do problema, da forma de discretização e da ordenação dos volumes de controlo da malha computacional.

Tal como já foi referido, os cálculos numéricos foram efectuados utilizando um código computacional já existente programado em linguagem FORTRAN[®] (manual para a versão newtoniana, Oliveira & Miranda [100]).

5.1.1 – Coordenadas cartesianas

As equações de conservação da massa (Eq. (3.1)) e da quantidade de movimento (Eq. (3.2)) escritas em termos de derivadas parciais para as três coordenadas cartesianas espaciais x_i ($i = 1, 2$ e 3 para x, y e z , respectivamente) escrevem-se da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij,tot}}{\partial x_j} \quad (5.2)$$

sendo desprezado o termo de variação no tempo na Eq. (5.1) por se considerarem somente escoamentos incompressíveis. Daqui em diante, os termos com índices repetidos representam um somatório segundo a convenção de Einstein¹.

Pode constatar-se da Eq. (5.2) que esta não apresenta nenhum termo difusivo e seguindo o critério apresentado no trabalho de Oliveira *et al.* [103] optou-se por fazer aparecer, em ambos os membros da equação, um termo difusivo artificial $\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$ na variável dependente u_i , em que o coeficiente de difusão (Γ) é igual ao coeficiente de viscosidade total do fluido (η_0), $\Gamma \equiv \eta_0$. Como é sabido, de estudos prévios, a presença de termos difusivos nas equações de transporte é extremamente vantajosa do ponto de vista de estabilidade no método dos volumes finitos, tal como é referido em Patankar [107] e Ferziger & Perić [49]. Após a aplicação dos termos difusivos artificiais a equação da quantidade de movimento (Eq. (5.2)) passa a ser representada da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\eta_p \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)}_{\text{termo difusivo artificial}} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij,tot}}{\partial x_j} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\eta_p \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)}_{\text{termo difusivo artificial}} \quad (5.3)$$

Do ponto de vista matemático a equação anterior mantém-se inalterada, uma vez que os termos difusivos artificiais anulam-se, pretendendo-se assim aumentar a estabilidade do algoritmo de cálculo (de acordo com o trabalho de Oliveira *et al.* [103]). Em termos numéricos, o termo difusivo artificial adicionado ao membro esquerdo da equação (5.3) é tratado de forma implícita (com incorporação nos coeficientes das equações algébricas), enquanto o termo do lado direito é tratado de forma explícita (com incorporação nos termos fonte). À medida que o processo iterativo vai decorrendo estes dois termos artificiais são ligeiramente diferentes, mas anulam-se quando é atingida a situação de convergência iterativa, voltando-se à equação original (Eq. (5.2)).

¹ A notação de Einstein é uma convenção introduzida por Einstein (1916) para simplificar a escrita de somatórios, por exemplo: $\sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$.

Tal como descrito no Capítulo 3, o tensor das tensões extra $\tau_{ij,tot}$ é representado pela soma de uma contribuição newtoniana $\tau_{ij,s}$, com uma contribuição não newtoniana viscoelástica $\tau_{ij,p} \equiv \tau_{ij}$, resultando em:

$$\tau_{ij,tot} = \tau_{ij,s} + \tau_{ij} \quad (5.4)$$

A contribuição newtoniana $\tau_{ij,s}$, escrita na forma diferencial, é dada por (adaptação da Eq. (3.3)):

$$\tau_{ij,s} = \eta_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.5)$$

onde η_s define a viscosidade do solvente newtoniano.

As equações constitutivas que serão utilizadas para descrever o tensor das tensões não newtonianas elásticas (τ_{ij}) são definidas pelos modelos de extensibilidade elástica finita e não-linear FENE-P, FENE-CR e FENE-MCR. Estas equações, escritas na forma diferencial e em coordenadas ortogonais cartesianas segundo a direcção i , expressam-se da seguinte forma:

Modelo FENE-P (adaptação da Eq. (3.24)):

$$\begin{aligned} \tau_{ij} + \tau_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\lambda_{ef} \tau_{ij}) + u_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\lambda_{ef} \tau_{ij}) \right] &= a \eta_{p,ef} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \\ \lambda_{ef} \left(\tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) &- \left[\frac{\partial}{\partial t} (a \eta_{p,ef}) + u_k \frac{\partial}{\partial x_k} (a \eta_{p,ef}) \right] \delta_{ij} \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde $\lambda_{ef} = \frac{\lambda}{f(\tau_{kk})}$ e $\eta_{p,ef} = \frac{\eta_p}{f(\tau_{kk})}$ são o tempo de relaxação e o coeficiente de viscosidade polimérica efectivos, respectivamente. Tanto λ_{ef} como $\eta_{p,ef}$ diminuem com o traço de τ_{kk} , de acordo com a Eq. (5.9) para o modelo FENE-P.

Modelo FENE-CR (adaptação da Eq. (3.27)):

$$\tau_{ij} + \left[\frac{\partial}{\partial t} (\lambda_{ef} \tau_{ij}) + u_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\lambda_{ef} \tau_{ij}) \right] = \eta_p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda_{ef} \left(\tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (5.7)$$

Modelo FENE-MCR (adaptação da Eq. (3.30)):

$$\tau_{ij} + \lambda_{ef} \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} \right) = \eta_p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda_{ef} \left(\tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (5.8)$$

A função de extensibilidade $f(\tau_{kk})$, de cada um dos modelos constitutivos, é definida da seguinte forma:

Modelo FENE-P (adaptação da Eq. (3.25)):

$$f(\tau_{kk}) = \frac{L^2 + (\lambda/a\eta_p)\tau_{kk}}{L^2 - 3} \quad (5.9)$$

Modelo FENE-CR e FENE-MCR (adaptação da Eq. (3.28)):

$$f(\tau_{kk}) = \frac{L^2 + (\lambda/\eta_p)\tau_{kk}}{L^2 - 3} \quad (5.10)$$

Note-se que $f(\tau_{kk})$ é uma função do traço do tensor extra τ_{kk} ($\equiv \tau_{xx} + \tau_{yy} + \tau_{zz}$).

5.1.2 – Transformação de coordenadas

Quando as fronteiras que circunscrevem o domínio do escoamento são em forma curvilínea, torna-se inadequado a aplicação de malhas ortogonais cartesianas. Para contornar este problema na discretização das equações do escoamento é necessário utilizar uma malha que se ajuste à curvatura imposta pelas fronteiras podendo-se, no entanto, continuar a utilizar as componentes cartesianas das variáveis dependentes vectoriais e tensoriais (por exemplo, o vector velocidade, o tensor das tensões, etc).

O código computacional permite resolver as equações de transporte tensoriais que foram apresentadas no Capítulo 3 e que serão aqui reescritas na forma generalizada, tal como se encontram implementadas no programa de cálculo. Para isso, torna-se necessário efectuar a transformação das equações em coordenadas cartesianas ortogonais x_i , $i = 1, 2$ e 3 (ou x, y e z) para um sistema de coordenadas generalizadas não ortogonais ξ_l , $l = 1, 2$ e 3 , conforme ilustrado na Fig. 5.1.

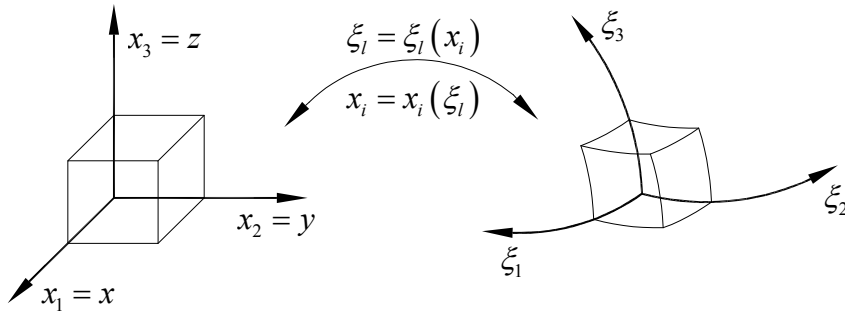


Figura 5.1 – Representação esquemática da transformação do sistema rectangular cartesiano num sistema de eixos generalizado não ortogonal.

Para a transformação de coordenadas cartesianas em coordenadas não ortogonais generalizadas aplicam-se as seguintes regras de transformação (tal como definido em Oliveira [91]):

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial t} = \frac{1}{J} \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} J \quad (5.11)$$

$$\nabla(\cdot) \equiv \frac{\partial(\cdot)}{\partial x_i} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_l} \frac{\partial \xi_l}{\partial x_i} = \frac{1}{J} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_l} \beta_{li} \quad (5.12)$$

onde J é o jacobiano da transformação $x_i = x_i(\xi_l)$ e que é definido por $J = \det(\partial x_i / \partial \xi_l)$ (determinante da matriz jacobiana J_{ij} da transformação). Os índices i, j e k serão utilizados para definir as componentes cartesianas (referentes ao eixo cartesiano x_i) e os índices l, m e n serão usados para definir as direcções generalizadas dos eixos não ortogonais ξ_l .

A matriz jacobiana inversa é definida da seguinte forma $J_{il}^{-1} \equiv \frac{1}{J} \beta_{li}$, sendo

$$\beta_l = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_{l+1}} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_{l+2}} \quad (l \text{ dado pela ordem cíclica, Vinokur [154]).}$$

Como exemplo, os componentes do vector β_l ao longo da direcção $l=1$ são dados por:

$$\beta_1 = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_2} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_3} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{vmatrix} = \mathbf{i} \left(\frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} \right) + \mathbf{j} \left(\frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \right) + \mathbf{k} \left(\frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} \right)$$

onde os componentes β_{li} são definidos por:

$$\beta_{11} = \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3}; \beta_{12} = - \left(\frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} \right); \beta_{13} = \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3}$$

o mesmo para as restantes direcções 2 e 3.

5.1.3 – Coordenadas não ortogonais generalizadas

Aplicando as regras de transformação definidas pelas Eqs. (5.11) e (5.12) às equações escritas em coordenadas cartesianas apresentadas na subsecção 5.1.1 obtêm-se as equações para as coordenadas generalizadas expressas da seguinte forma:

i) Equação de conservação da massa (Eq. (5.1)):

$$\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j) = 0 \quad (5.13)$$

ii) Equação de conservação da quantidade de movimento (Eq. (5.3)):

$$\begin{aligned} & \overbrace{\frac{\partial}{\partial t} (J \rho u_i)}^{\text{termo de inércia}} + \overbrace{\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j u_i)}^{\text{termo convectivo}} - \overbrace{\frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta_0}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right)}^{\text{termo difusivo artificial implícito}} = \\ & \underbrace{- \beta_{li} \frac{\partial p}{\partial \xi_l}}_{\text{termo do gradiente pressão}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} \tau_{ij}^{tot})}_{\text{termo do divergente tensão}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta_0}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right)}_{\text{termo difusivo artificial explícito}} \end{aligned} \quad (5.14)$$

com especial atenção ao índice que está sublinhado \underline{l} , introduzido nos termos difusivos artificiais, ao qual não é aplicada a regra do somatório.

iii) Equações constitutivas:

Modelo newtoniano (Eq. (5.5)):

$$\tau_{ij,s} = \frac{\eta_s}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} u_i) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{li} u_j) \right) \quad (5.15)$$

Modelo FENE escrito na forma geral:

$$\begin{aligned} \overbrace{J\tau_{ij}}^{\text{termo 1e}} + \overbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} (\lambda_{ef} J \tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\lambda_{ef} \beta_{lk} u_k \tau_{ij}) \right)}^{\text{termo 2e}} &= \overbrace{a \eta_{p,ef} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} u_i) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{li} u_j) \right)}^{\text{termo 1d}} + \\ \overbrace{\lambda_{ef} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lk} u_i \tau_{jk}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lk} u_j \tau_{ik}) \right)}^{\text{termo 2d}} &- \overbrace{b \left[\frac{\partial}{\partial t} (J a \eta_{p,ef}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lk} u_k a \eta_{p,ef}) \right]}^{\text{termo 3d}} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Os parâmetros da equação constitutiva são apresentados na tabela abaixo de acordo com o modelo reológico utilizado.

Tabela 5.1 – Representação dos parâmetros que representam cada um dos modelos constitutivos.

Modelo	$\eta_{p,ef}$	λ_{ef}	a	b
newtoniano	η_s	0	1	0
FENE-MCR	η_p	λ/f	1	0
FENE-CR	η_p	λ/f	1	0
FENE-P	η_p/f	λ/f	a	1

sendo a função de extensibilidade geral dada pela Eq. (5.9) e $a = L^2/(L^2 - 3)$.

5.2 – Discretização das equações

Para a discretização das equações de governo utiliza-se o método dos volumes finitos (Oliveira *et al.* [103]), que consiste em integrar as equações diferenciais parciais, transformadas em coordenadas generalizadas, sobre volumes de controlo elementares que compõem o domínio de cálculo. Desta forma, pretende-se obter um sistema de equações algébricas que contenham os princípios físicos de conservação das equações que regem o escoamento, e que vão relacionar o valor de uma variável Φ ($\Phi = p, u_i$ e τ_{ij}) com os valores dos pontos vizinhos.

A integração das equações diferenciais apresentadas na subsecção 5.1.3 é obtida através da aplicação de uma simplificação utilizando alguns conceitos fundamentais, tal como descrito em Oliveira [91] e Oliveira *et al.* [103]. Assim, após a integração num volume de controlo centrado num ponto P as quantidades geométricas J e β_{li} ficam definidas da seguinte maneira: J transforma-se num volume V (referente ao volume de controlo centrado em P) e o coeficiente métrico β_{li} transforma-se numa área superficial (componente segundo i do vector área da face do volume de controlo alinhada com a direcção l , designada por \mathbf{B}_{li} , conforme representado esquematicamente na Fig. 5.2(b)).

O termo $\frac{\partial}{\partial \xi_l}$, que representa a derivação ao longo das coordenadas generalizadas ξ_l , é substituído pela diferença finita ao longo da direcção não ortogonal l , tal como descrito em Oliveira *et al.* [103]. Desta forma, a transformação da derivada, expressa em função de uma variável genérica Φ , é obtida pela seguinte relação:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \xi_l} \approx \frac{\Delta \Phi}{\Delta \xi_l} = [\Delta \Phi]_l = \Phi_{l^+} - \Phi_{l^-}, \text{ com } \Delta \xi_l = 1 \quad (5.17)$$

em que os sinais “+” e “-” indicam o sentido positivo ou negativo da coordenada generalizada ξ_l . Na Figura 5.2 apresenta-se um esquema das células computacionais bidimensionais (2D) com o intuito de se compreender melhor o procedimento de discretização, e com a indicação da mesma nomenclatura apresentada em Oliveira *et al.* [103]. O centro do volume de controlo computacional usado na integração das equações em coordenadas generalizadas é designado pela letra P e os centros dos volumes de controlo das células vizinhas são designados por F, segundo a direcção da face f.

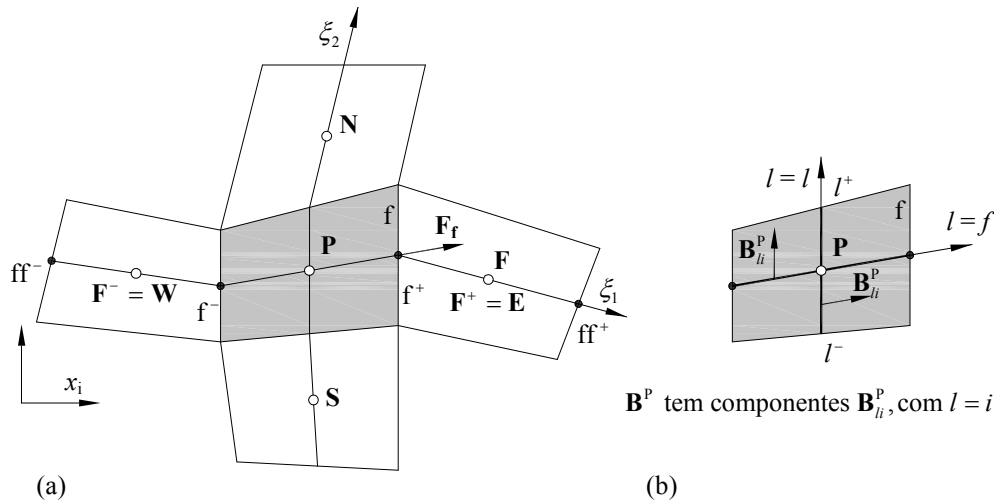


Figura 5.2 – Representação esquemática das células computacionais 2D e da nomenclatura utilizada na discretização: (a) volume de controlo (VC) genérico P e vizinhos F para a direcção ξ_1 e (b) direcções e componentes de área. Reprodução de acordo com Oliveira *et al.* [103].

Com base na Figura 5.2, o método das diferenças finitas para uma variável genérica Φ pode ser avaliada em duas situações diferentes (Oliveira *et al.* [103]):

- Diferenças centradas de Φ segundo a direcção f e áreas calculadas no centro dos volumes de controlo em P:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi_l} \right)^P \approx [\Delta \Phi]_f^P \equiv \Phi_{f^+} - \Phi_{f^-}, \text{ com a componente de área } \mathbf{B}_{li}^P \quad (5.18)$$

- Diferenças centradas de Φ segundo a direcção f e áreas calculadas no centro das faces dos volumes de controlo f:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \xi_l} \right)^f \approx [\Delta \Phi]_f^f \equiv \Phi_F - \Phi_P, \text{ com a componente de área } \mathbf{B}_{li}^f \quad (5.19)$$

As letras maiúsculas são utilizadas para identificar os centros dos volumes de controlo, enquanto as letras minúsculas são usadas para assinalar as faces das células, de acordo com a Fig. 5.3. O volume de controlo computacional que é usado na discretização das equações de governo é constituído por uma célula centrada em P e que está rodeada por seis células vizinhas, com $F = 1, 2, 3, 4, 5$ e 6 para identificar a posição W, E, S, N, B e T (Oeste, Este, Sul, Norte, Baixo e Topo), respectivamente (conforme sugerido em Patankar [107]).

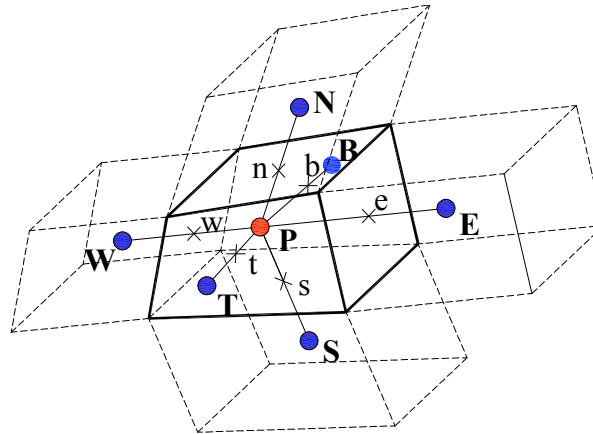


Figura 5.3– Representação esquemática de um volume de controle elementar tridimensional e respectiva nomenclatura.

Para designar as células vizinhas mais afastadas utiliza-se o índice FF com a indicação de: FF = 1 a 6, para WW, EE, SS, NN, BB, e TT (no caso genérico tridimensional). As equações discretizadas finais englobam os termos vizinhos próximos do volume de controle centrado em P tratados de forma implícita, enquanto os termos referentes às seis células vizinhas mais afastadas são colocados nos termos fonte das equações algébricas e tratados explicitamente.

5.2.1 – Equação de conservação da massa

De acordo com as definições apresentadas nas Eqs. (5.18) e (5.19), a integração da equação de conservação da massa (Eq. (5.13)) num volume de controlo unitário centrado em P resulta em:

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j) dV \approx \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 \rho B_{lj} u_j \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 \left(\sum_{j=1}^3 \rho B_{ff}^f \tilde{u}_{j,f} \right) \quad (5.20)$$

Esta manipulação mostra como a soma das diferenças segundo as três direcções ξ_l (com $l = \pm 1, \pm 2$ e ± 3) no centro do volume de controlo P pode ser transformada num somatório das contribuições provenientes das seis faces da célula f. Desta forma, constata-se que o resultado desta integração está de acordo com o teorema da divergência de Gauss

(Apostol [14]). A variável $\tilde{u}_{j,f}$ (o til (\sim) colocado na variável refere-se a velocidade u_j na face f) indica que as componentes da velocidade calculadas no centro das faces do volume de controlo não são interpoladas linearmente, requerendo um método de cálculo particular. O método utilizado para o cálculo de $\tilde{u}_{j,f}$ é o método proposto por Rhie & Chow [126], que será descrito com algum detalhe na Secção 5.3, referente ao cálculo dos caudais mássicos que cruzam as faces dos volumes de controlo. A aplicação deste método de interpolação especial da velocidade na face do volume de controlo vai garantir o acoplamento entre os campos de velocidade e pressão.

Da equação (5.20) verifica-se que os caudais mássicos que atravessam as faces f do volume de controlo são expressos por:

$$F_f = \sum_{j=1}^3 \rho B_{ff}^f \tilde{u}_{j,f} \quad (5.21)$$

e substituindo na equação de conservação da massa (Eq. (5.20)) esta pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\sum_{f=1}^6 F_f = 0 \quad (5.22)$$

O termo F_f representa os fluxos mássicos que atravessam as faces do volume de controlo genérico P . No caso genérico tridimensional: $f = 1, 2, 3, 4, 5$ e 6 , segundo a orientação “este-e”, “oeste-w”, “norte-n”, “sul-s”, “topo-t” e “baixo-b”, respectivamente e de acordo com a representação esquemática da Fig. (5.3).

A equação (5.22) indica que o somatório dos caudais mássicos que entram no volume de controlo genérico P é igual ao somatório dos caudais mássicos que saem, de acordo com a equação macroscópica de conservação da massa.

5.2.2 – Equação de conservação da quantidade de movimento

Uma vez que a equação da quantidade de movimento (Eq. (5.14)) é composta por vários termos a sua discretização será efectuada separadamente, de forma a facilitar a análise do processo de integração. Cada um dos termos será integrado num volume de controlo

centrado em P, seguindo a mesma abordagem que já foi apresentada anteriormente. A integração de cada termo resulta então nas seguintes discretizações:

a) Termo de inércia

O termo de inércia será discretizado usando o método de Euler implícito (1ª ordem) com integração sobre um volume de controlo centrado em P e resultando em:

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial t} (J \rho u_{i,p}) dV \approx \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{V_p} (J \rho u_{i,p})^{(n+1)} dV - \int_{V_p} (J \rho u_{i,p})^{(n)} dV \right] = \frac{1}{\Delta t} \left[(V_p \rho u_{i,p})^{(n+1)} - (V_p \rho u_{i,p})^{(n)} \right] = \frac{\rho V_p}{\Delta t} (u_{i,p}^{(n+1)} - u_{i,p}^{(n)}) \quad (5.23)$$

onde Δt representa o avanço no tempo e V_p corresponde ao volume da célula P (assumido como constante). A variável $u_{i,p}^{(n+1)} \equiv u_{i,p}$ representa a componente da velocidade segundo a direcção i no centro do volume de controlo P, no tempo de integração actual ($n+1$). Não se usa sobrescrito para simplificar a notação. A variável com o índice superior (n) corresponde ao tempo de integração anterior. O esquema de 1ª ordem no tempo é perfeitamente adequado para funcionar como subrelaxação dos cálculos em regime estacionário. Contudo, quando o escoamento se processa em regime transitório e é necessário calculá-lo com precisão o termo de inércia requer uma discretização mais cuidada. Nestes casos, a discretização no tempo do termo $\partial \phi / \partial t$ deve ser feita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \frac{(1+k)\phi^{n+1} - (1+2k)\phi^n + k\phi^{n-1}}{\Delta t} \quad (5.24)$$

onde o parâmetro k controla o tipo de esquema implementado. Para $k = 0.5$ tem-se o esquema regressivo de segunda ordem (método 3NT com um erro $O(\Delta t^2)$). Para $k = 0$ o esquema transforma-se no Euler implícito referido antes, com um erro $O(\Delta t)$. Os índices superiores indicam o instante de tempo. Aplicando este esquema de discretização no termo de inércia resulta em:

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial t} (J \rho u_{i,p}) dV \approx \frac{\rho V_p}{\Delta t} \left[(1+k)u_{i,p}^{(n+1)} - (1+2k)u_{i,p}^{(n)} + k u_{i,p}^{(n-1)} \right] \quad (5.25)$$

b) Termo convectivo

O termo convectivo, dado pelo caudal mássico multiplicado pelo valor da variável convectada através das faces do volume de controlo, é discretizado da mesma forma que a equação da continuidade, por aplicação do teorema de Gauss, que resulta em:

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j u_i) dV \approx \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 \rho B_{lj} u_j \right) u_i \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 \underbrace{\left(\sum_{j=1}^3 \rho B_{jf}^f \tilde{u}_{j,f} \right)}_{=F_f \text{ Eq. (5.21)}} \hat{u}_{i,f} = \sum_{f=1}^6 F_f \hat{u}_{i,f} \quad (5.26)$$

sendo o caudal mássico que atravessa as faces do volume de controlo (F_f) determinado pela Eq. (5.21). A velocidade $\hat{u}_{i,f}$ é calculada no meio da face do volume de controlo de acordo com o esquema de discretização adoptado para tratar os termos convectivos. O esquema de interpolação para a variável convectada $\hat{u}_{i,f}$ deve prevenir a introdução de soluções oscilatórias. Para evitar estas perturbações numéricas utiliza-se um esquema de alta resolução (sigla HRS, designação inglesa de *High-Resolution Scheme*) denominado por CUBISTA (*Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection*, Alves *et al.* [7]). Este esquema de alta resolução possui simultaneamente elevada precisão numérica (terceira ordem no espaço) e boas características de convergência. É vantajoso quando comparado com os esquemas de alta resolução clássicos (por exemplo, o esquema SMART de Gaskell & Lau [51]), melhorando a convergência iterativa dos métodos implícitos usualmente utilizados, o que será discutido posteriormente na Secção 5.4.

No entanto, os coeficientes das equações serão baseados no esquema de diferenças de montante (ou *upwind*, UDS – *Upwind Differencing Scheme*) proposto por Courant *et al.* [33]. Neste esquema a velocidade na face do volume de controlo $\hat{u}_{i,f}$ fica igual ao valor da velocidade no centro da célula imediatamente a montante da face f de acordo com (ver Fig. 5.4):

$$\hat{u}_{i,f} = u_{i,P} \quad (\text{para } F_f > 0) \quad \text{e} \quad \hat{u}_{i,f} = u_{i,F} \quad (\text{para } F_f < 0) \quad (5.27)$$

onde a direcção de montante da face f é definida pelo sentido do vector velocidade, conforme a representação esquemática da Fig. 5.4. Com o esquema de diferenças UDS os fluxos convectivos F_f podem ser representados de uma forma geral como:

$$F_f \hat{u}_{i,f} = F_f^+ u_{i,P} + F_f^- u_{i,F} \quad (5.28)$$

onde $F^+ \equiv \max(F_f, 0)$ (que representa o valor positivo do fluxo) e $F^- \equiv \min(F_f, 0)$ (que representa o valor negativo do fluxo).

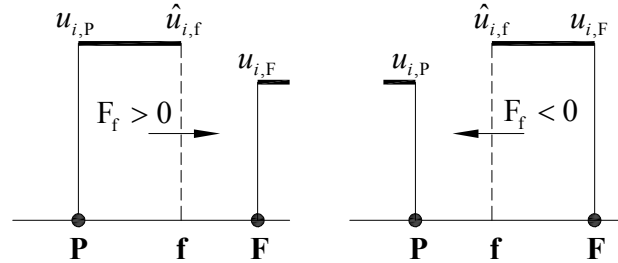


Figura 5.4 – Esquema de interpolação de montante UDS.

c) Termo difusivo artificial implícito

A integração do termo difusivo artificial colocado no lado esquerdo da equação da quantidade de movimento e que é tratado de forma implícita (Eq. (5.14)) resulta em:

$$-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\frac{\eta_0}{J} \beta_{ij} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) dV \approx -\sum_{f=1}^6 \frac{\eta_{0,f}}{V_f} B_f^2 [\Delta u_i]_f^f = -\sum_{f=1}^6 D_{0,f} (u_{i,F} - u_{i,P}) \quad (5.29)$$

onde $B_f^2 = \|B_f^f\|^2 = \sum_{j=1}^3 B_{jf}^f B_{jf}^f$ é o quadrado do valor da área da superfície da face f ,

$V_f = \sum_{j=1}^3 B_{jf}^f [\Delta x_j]_f^f$ é o volume de uma pseudo-célula centrada na face f e $D_{0,f} \equiv \frac{\eta_{0,f} B_f^2}{V_f}$ é a

condutância difusiva artificial da mistura polimérica. O termo $[\Delta x]_f^f \equiv x_j^F - x_j^P$ representa o valor da diferença x_j calculada na face f do volume de controle ao longo da direcção f .

d) Termo do gradiente de pressão

Para este termo também não se aplica o teorema de Gauss. O termo do gradiente de pressão (primeiro termo do lado direito da Eq. (5.14)) é calculado de modo explícito e

enviado para o termo fonte (representado por S_{u_i}) da equação da quantidade de movimento. A sua integração resulta na seguinte expressão:

$$-\int_{V_p} \beta_{ii} \frac{\partial p}{\partial \xi_l} dV \approx -\sum_{l=1}^3 B_{li}^p [\Delta p]_l^p \equiv S_{u_i - \text{pressão}} \quad (5.30)$$

A diferença de pressão $[\Delta p]_l^p = p_{l^+} - p_{l^-}$ no centro do volume de controlo é baseada em pressões calculadas por interpolação linear dos valores no centro dos volumes de controlo P e vizinhos F.

e) Termo do divergente da tensão

O tensor das tensões $\tau_{ij,tot} = \tau_{ij,s} + \tau_{ij}$ envolve uma parte newtoniana $\tau_{ij,s}$ (Eq. (5.5)) e outra parte não newtoniana τ_{ij} que é determinada pela equação constitutiva geral (Eq. (5.16)). Desta forma, a discretização será efectuada separadamente resultando em:

e-i) Termo do divergente da tensão newtoniana

A integração do termo referente à parte newtoniana da tensão $\tau_{ij,s}$ (Eq. (5.5)) resulta em:

$$\int_{V_p} \frac{\partial (\beta_{ij} \tau_{ij,s})}{\partial \xi_l} dV \approx \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 B_{lj} \tau_{ij,s} \right) \right]_l^p \stackrel{\text{Substituindo } \tau_{ij,s} \text{ pela Eq. (5.15)}}{=} \sum_{f=1}^6 \frac{\eta_s}{V_f} \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{ff}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{ff}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right) \quad (5.31)$$

De acordo com o critério apresentado em Oliveira [91] o termo difusivo alinhado com a direcção das faces (primeiro termo do lado direito da Eq. (5.31) para $m = f$, denominado por termo difusivo normal), deve ser tratado de forma implícita. Os restantes termos (para $m \neq f$) são tratados de forma explícita e adicionados ao termo fonte S_{u_i} resultando em:

$$S_{u_i - \text{difusivo newtoniano}} = \sum_{f=1}^6 \frac{\eta_s}{V_f} \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{m \neq f}^2 B_{ff}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{ff}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right) \quad (5.32)$$

sendo as diferenças dos valores das componentes de velocidade calculados no tempo de integração anterior (n).

O termo difusivo normal tratado de forma implícita é dado por:

$$\sum_{f=1}^6 \frac{\eta_s}{V_f} \left(\sum_{j=1}^3 \mathbf{B}_{ff}^f \mathbf{B}_{ff}^f [\Delta u_i]_f^f \right) = \sum_{f=1}^6 D_{f,s} (u_{i,F} - u_{i,P}) \quad (5.33)$$

sendo a condutância difusiva resultante da discretização do tensor das tensões da parte newtoniana $\tau_{ij,s}$ definida por: $D_{f,s} \equiv \frac{\eta_s \mathbf{B}_f^2}{V_f}$.

e-ii) Termo do divergente da tensão não newtoniana

Uma vez que este termo é definido pelo divergente da tensão será aplicado o teorema de Gauss. A integração em torno de um volume de controlo centrado em P resulta em:

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{ij} \tau_{ij}) dV \approx \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 \mathbf{B}_{ij} \tau_{ij} \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 \left(\sum_{j=1}^3 \mathbf{B}_{ff}^f \tilde{\tau}_{ij,f} \right) \equiv S_{u_i - \text{tensão não newtoniana}} \quad (5.34)$$

sendo este termo calculado de forma explícita e adicionado ao termo fonte S_{u_i} da equação da quantidade de movimento. O valor da tensão na face do volume de controlo f ($\tilde{\tau}_{ij,f}$) deve ser calculado usando um esquema de interpolação adequado para malhas colocadas, de forma a evitar o desacoplamento entre os campos de velocidade e tensão, tal como verificado no cálculo da velocidade na face que aparece na discretização da equação da continuidade. A metodologia utilizada para calcular o valor da tensão na face da célula foi desenvolvida por Oliveira *et al.* [103] e Oliveira & Pinho [102], tendo como base o método proposto por Rhie & Chow [126] apresentado na Secção 5.3.

f) Termo difusivo artificial explícito

A integração do termo difusivo artificial explícito é calculada da mesma maneira que o termo difusivo artificial implícito (conforme apresentado na alínea c)) para evitar incoerências, resultando em:

$$\begin{aligned}
-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta_0}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i^{(n)}}{\partial \xi_l} \right) dV \approx -\sum_{f=1}^6 \frac{\eta_{0,f}}{V_f} B_f^2 \left[\Delta u_i^{(n)} \right]_f = \\
-\sum_{f=1}^6 D_f \left(u_{i,F}^{(n)} - u_{i,P}^{(n)} \right) \equiv S_{u_i - \text{difusão}}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

A diferença que existe entre estes dois termos difusivos artificiais é que o termo proveniente da Eq. (5.29) é tratado de forma implícita, com a condutância difusiva artificial D_f adicionada ao coeficiente a_F , enquanto o termo difusivo artificial da Eq. (5.35) é tratado de forma explícita. Este termo é somado ao termo fonte da equação da quantidade de movimento S_{u_i} , com base nos campos das variáveis da iteração ou passo no tempo anterior (n). A partir do momento em que se atinge a solução estacionária, ambos os termos difusivos artificiais anulam-se.

Por fim, ainda há que adicionar ao termo fonte a contribuição resultante do esquema de interpolação de alta resolução CUBISTA (Alves *et al.* [7]) aqui utilizado, o que será descrito na Secção 5.4.

5.2.2.1 – Agrupamento final da equação da quantidade de movimento discretizada

O processo de discretização resulta num sistema de equações linearizadas para a variável genérica ϕ representado da seguinte forma geral:

$$a_P^\phi \phi_P - \sum_{F=1}^6 a_F^\phi \phi_F = S^\phi \Leftrightarrow [a_P^\phi] \{\phi\} = \{S^\phi\} \tag{5.36}$$

Estas equações são resolvidas como um sistema matricial para as componentes da velocidade ($\phi = u_i$) ou para o campo das tensões extra ($\phi = \tau_{ij}$). Na Eq. (5.36) o termo a_F^ϕ representa os coeficientes que contém as influências convectiva e difusiva, S^ϕ é o termo fonte onde é incorporado todas as contribuições que não são incluídas nos coeficientes a_F (por exemplo, o gradiente de pressões e o divergente do tensor das tensões extra). O índice inferior P denota a célula onde a equação é avaliada e F denota as células vizinhas. O coeficiente central da equação a_P^ϕ é geralmente dado pela soma dos coeficientes vizinhos e pela contribuição dos termos dependentes do tempo das Eqs. (5.14) e (5.16).

A forma linearizada da equação algébrica correspondente à conservação da quantidade de movimento é obtida agrupando-se os vários termos discretizados, resultando na seguinte forma final (de acordo com a definição da Eq. (5.36)):

$$a_p u_{i,P} - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\Delta t} \left[(1 + 2k) u_{i,P}^{(n)} - k u_{i,P}^{(n-1)} \right] \quad (5.37)$$

Os coeficientes da contribuição das células vizinhas a_F são constituídos por uma parte difusiva (a_F^D) e outra parte convectiva (a_F^C), resultando em:

$$a_F = a_F^C + a_F^D \quad (5.38)$$

com o termo a_F^D a descrever a parte difusiva dada por:

$$a_F^D = D_f \equiv \frac{\eta_0 (B_f)^2}{V_f} \quad (5.39)$$

e o termo a_F^C a descrever a parte convectiva de acordo com o esquema de diferenças UDS, tal como apresentado em Oliveira *et al.* [103], resultando em:

$$\begin{cases} a_F^C = +F_f^+ = +\max(F_f, 0) & \text{(para uma face positiva, } f^+) \\ a_F^C = -F_f^- = -\min(F_f, 0) & \text{(para uma face negativa, } f^-) \end{cases} \quad (5.40)$$

O coeficiente central a_p (da célula P) é expresso da seguinte forma:

$$a_p = \frac{\rho V_P}{\Delta t} (1 + k) + \sum_{F=1}^6 a_F \quad (5.41)$$

O termo fonte S_{u_i} da equação da quantidade de movimento é constituído pelo somatório de todos os termos fonte atrás apresentados:

$$S_{u_i} = \underbrace{S_{u_i\text{-pressão}}}_{\text{Eq. (5.30)}} + \underbrace{S_{u_i\text{-difusivo newtoniano}}}_{\text{Eq. (5.32)}} + \underbrace{S_{u_i\text{-tensão não newtoniana}}}_{\text{Eq. (5.34)}} + \underbrace{S_{u_i\text{-difusão}}}_{\text{Eq. (5.35)}} \quad (5.42)$$

5.2.3 – Equação constitutiva

A integração da equação constitutiva escrita na forma geral (Eq. (5.16)) para os modelos reológicos FENE-P, FENE-CR e FENE-MCR é semelhante ao que foi efectuado para a equação da quantidade de movimento. Nesta subsecção cada um dos termos que constituem a equação constitutiva geral é discretizado separadamente para facilitar a sua compreensão, resultando em:

a) Termo 1e

Integrando o primeiro termo do lado esquerdo da equação constitutiva (termo 1e – Eq. (5.16)) num volume de controlo centrado em P resulta em:

$$\int_{V_P} J \tau_{ij} dV \approx V_P \tau_{ij,P} \quad (5.43)$$

b) Termo 2e

O segundo termo do lado esquerdo da Eq. (5.16) contém uma parte inercial e outra parte convectiva para o tensor τ_{ij} que integrado num volume de controlo centrado em P obtém-se:

$$\int_{V_P} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\lambda_{ef} J \tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\lambda_{ef} \beta_{lk} u_k \tau_{ij}) \right] dV \approx \frac{V_P}{\Delta t} \left[(\lambda_{ef} \tau_{ij})_P^{(n+1)} - (\lambda_{ef} \tau_{ij})_P^{(n)} \right] + \lambda_{ef} \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk} u_k \right) \tau_{ij} \right]_l = \frac{V_P}{\Delta t} \left[(\lambda_{ef} \tau_{ij})_P^{(n+1)} - (\lambda_{ef} \tau_{ij})_P^{(n)} \right] + \frac{1}{\rho} \sum_{f=1}^6 F_f \bar{\lambda}_{ef} \hat{\tau}_{ij,f} \quad (5.44)$$

Na integração do termo 2e referente à parte inercial aplicou-se a integração temporal totalmente implícita (Euler implícito), conforme já utilizado anteriormente no caso do escoamento estacionário. A variável $\tau_{ij,P} \equiv \tau_{ij,P}^{(n+1)}$ é a componente da tensão no volume de controlo centrado em P no tempo de integração actual (n+1). A variável $\tau_{ij,P}^{(n)}$ é a componente

da tensão no tempo de integração anterior (n). Se o escoamento for dependente do tempo a discretização deste termo faz-se com base na Eq. (5.24), resultando em:

$$\int_{V_p} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\lambda_{ef} J \tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\lambda_{ef} \beta_{lk} u_k \tau_{ij}) \right] dV \approx \frac{V_p}{\Delta t} \left[(1+k) (\lambda_{ef} \tau_{ij})_p^{(n+1)} - (1+2k) (\lambda_{ef} \tau_{ij})_p^{(n)} + k (\lambda_{ef} \tau_{ij})_p^{(n-1)} \right] + \frac{1}{\rho} \sum_{f=1}^6 F_f \bar{\lambda}_{ef} \hat{\tau}_{ij,f} \quad (5.45)$$

c) Termo 1d

Integrando o primeiro termo do lado direito da equação (5.16) num volume de controlo centrado em P resulta na seguinte expressão:

$$\int_{V_p} a \eta_{p,ef} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} u_i) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{li} u_j) \right] dV \approx a \eta_{p,ef} \sum_{l=1}^3 \left(B_{lj}^p [\Delta u_i]_l^p + B_{li}^p [\Delta u_j]_l^p \right) \equiv S_{\tau_{ij}-termo1d} \quad (5.46)$$

d) Termo 2d

Fazendo a integração do segundo termo do lado direito da Eq. (5.16) resulta em:

$$\int_{V_p} \lambda_{ef} \left[\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lk} u_i \tau_{jk}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lk} u_j \tau_{ik}) \right] dV \approx \lambda_{ef} \sum_{l=1}^3 \left[\left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^p \tau_{jk,P} \right) [\Delta u_i]_l^p + \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^p \tau_{ik,P} \right) [\Delta u_j]_l^p \right] \equiv S_{\tau_{ij}-termo2d} \quad (5.47)$$

e) Termo 3d

A discretização deste último termo do lado direito da equação constitutiva geral (Eq. (5.16)) é dada por:

$$-\int_{V_p} b \left[\frac{\partial}{\partial t} (J a \eta_{p,ef}) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lk} u_k a \eta_{p,ef}) \right] dV \approx -b \left(\frac{a V_p}{\Delta t} \left[(\eta_{p,ef})_p^{n+1} - (\eta_{p,ef})_p^n \right] + \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^p u_k \right) a \eta_{p,ef} \right]_l^p \right) \delta_{ij} = -b \left(\frac{a V_p}{\Delta t} \left[(\eta_{p,ef})_p^{n+1} - (\eta_{p,ef})_p^n \right] + \frac{a}{\rho} \sum_{f=1}^6 F_f \bar{\eta}_{p,ef,f} \right) \delta_{ij} \equiv S_{\tau_{ij}-termo3d} \quad (5.48)$$

sendo aplicado a interpolação linear a todas as variáveis que apresentam uma barra superior calculadas na face f entre os volumes de controlo P e F (conforme a Fig. 5.5). Para uma variável genérica Φ a interpolação linear ($\bar{\Phi}$) é definida da seguinte forma:

$$\bar{\Phi}_f = w_f \Phi_F + (1 - w_f) \Phi_P \quad (5.49)$$

onde o factor de interpolação w_f é dado por (ver Fig. 5.5):

$$w_f = \frac{\Delta x_f^-}{\Delta x_f} \quad (5.50)$$

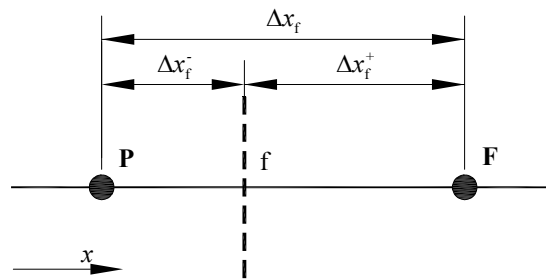


Figura 5.5 – Representação esquemática da interpolação linear para a face f num volume de controlo unidimensional.

5.2.3.1 – Agrupamento final da equação constitutiva geral discretizada

A forma linearizada da equação algébrica correspondente à equação constitutiva geral é obtida agrupando-se os vários termos discretizados (conforme a representação da Eq. (5.36)):

$$a_P^\tau \tau_{ij,P} - \sum_{F=1}^6 a_F^\tau \tau_{ij,F} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_{ef,P} V_P}{\Delta t} \left[(1 + 2k) \tau_{ij,P}^{(n)} - k \tau_{ij,P}^{(n-1)} \right] \quad (5.51)$$

onde os coeficientes a_F^τ incorporam somente efeitos convectivos determinados pela Eq. (5.40). Como os fluxos que aparecem na equação constitutiva estão multiplicados por λ_{ef} em vez de ρ , os coeficientes são multiplicados por λ_{ef}/ρ :

$$a_F^\tau = \frac{\lambda_{ef}}{\rho} a_F^C \quad (5.52)$$

O coeficiente central a_p^τ é definido da seguinte maneira:

$$a_p^\tau = V_p + \sum_{F=1}^6 a_F^\tau + \frac{\lambda_{ef,p} V_p}{\Delta t} (1+k) \quad (5.53)$$

que contém um termo adicional em relação à Eq. (5.41), resultante do termo 1e na equação (5.16), termo este que tende a promover a estabilidade por aumentar o coeficiente a_p^τ .

O termo fonte $S_{\tau_{ij}}$ é obtido do somatório das Eqs. (5.46)-(5.48) mais a incorporação de uma parte devido à correcção diferida do esquema de alta resolução CUBISTA que será discutido na Secção 5.4, resultando em:

$$S_{\tau_{ij}} = S_{\tau_{ij}-termo1d} + S_{\tau_{ij}-termo2d} + S_{\tau_{ij}-termo3d} \quad (5.54)$$

5.3 – Cálculo da velocidade e tensões nas faces do volume de controlo

A malha utilizada para discretizar o domínio de cálculo é uma malha colocada, isto é, todas as variáveis dependentes (pressão p , velocidades u_i e tensões τ_{ij}) são calculadas e armazenadas no centro dos volumes de controlo (conforme esquematizado na Fig. 5.6(a)). Esta malha é gerada começando por definir-se os volumes de controlo (correspondente à malha principal, representada a sombreado na Fig. 5.6(c)) e, posteriormente, os nós são colocados nos centros de cada um desses volumes de controlo. Os cálculos são efectuados com velocidades que só são conhecidas nos centros dos volumes de controlo, desconhecendo-se o seu valor no centro das faces $u_{j,f}$, sendo por isso necessário recorrer a alguma forma de interpolação. A utilização de interpolação linear para calcular o valor de u_f na face f da célula

não seria a mais adequada pois conduz a desacoplamento entre os campos de velocidade e de pressão, tal como descrito em Patankar [107]. Para contornar este problema, o cálculo das componentes da velocidade na face $\tilde{u}_{j,f}$ é feito através da aplicação do método proposto por Rhie & Chow [126], que foi desenvolvido com intuito de solucionar problemas de desacoplamento entre a velocidade e a pressão.

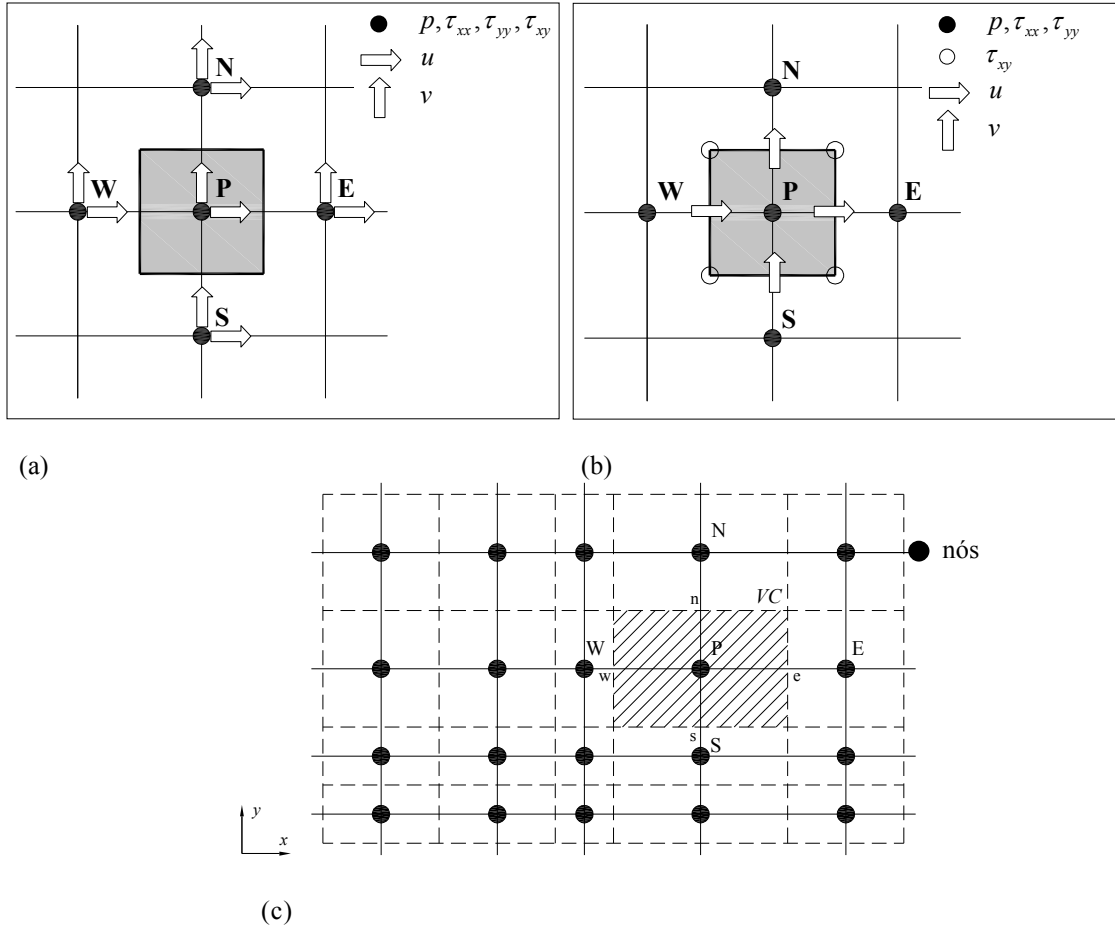


Figura 5.6 – Localização dos nós onde são calculados as componentes da pressão, velocidade e tensões: (a) malha colocada (ou não-deslocada); (b) malha deslocada; e (c) malha colocada de nós centrados.

A formulação tipo “Rhie & Chow” desenvolvida por Issa & Oliveira [65] começa por escrever as equações de conservação da quantidade de movimento no nó situado no volume de controlo centrado em P, e no nó situado na célula vizinha F, da seguinte maneira:

$$a_P u_{i,P} = H(u_{i,P}) - \sum_{l=1}^3 B_{li}^P [\Delta p]_l^P + \frac{\rho V_P}{\Delta t} [(1 + 2k) u_{i,P}^{(n)} - k u_{i,P}^{(n-1)}] \quad (5.55)$$

$$a_F u_{i,F} = H(u_{i,F}) - \sum_{l=1}^3 B_{li}^F [\Delta p]_l^F + \frac{\rho V_F}{\Delta t} [(1 + 2k) u_{i,F}^{(n)} - k u_{i,F}^{(n-1)}] \quad (5.56)$$

onde o termo $H(u_{i,F}) = \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F}$ e as diferenças de pressão são calculadas no centro dos volumes de controlo: $[\Delta p]_l^p = p_{l^+} - p_{l^-}$ (ver Fig. 5.2(b)). A ideia do método de interpolação de Rhie & Chow [126] é obter a velocidade na face f aplicando interpolação linear às Eqs. (5.55) e (5.56), excepto o termo do gradiente de pressão que deve ser estimado como se a malha fosse desfasada. Na malha desfasada as componentes da velocidade estão definidas nas faces do volume de controlo, a pressão e as tensões normais no centro da célula e as tensões de corte no centro das arestas, conforme a representação esquemática da Fig. 5.6(b).

Aplicando esta ideia às Eqs. (5.55) e (5.56), obtém-se a equação para calcular a velocidade na face $\tilde{u}_{i,f}$ da seguinte forma (Oliveira *et al.* [103]):

$$\bar{a}_p \tilde{u}_{i,f} = \overline{H(u_i)} - B_{fi}^f [\Delta p]_l^f - \sum_{l \neq f}^2 \overline{B_{li}} [\Delta p]_l + \left(\frac{\rho V_P}{\Delta t} \right) \left[(1+2k) \tilde{u}_{i,f}^{(n)} - k \tilde{u}_{i,f}^{(n-1)} \right] \quad (5.57)$$

onde a barra superior significa interpolação linear.

Aplicando a regra de interpolação linear para a face f nas Eqs. (5.55) e (5.56) resulta na seguinte equação:

$$\overline{a_p u_{i,p}} = \overline{H(u_i)} - \sum_{l=1}^3 \overline{B_{li}} [\Delta p]_l + \left(\frac{\rho V_P}{\Delta t} \right) \left[(1+2k) u_i^{(n)} - k u_i^{(n-1)} \right] \quad (5.58)$$

Subtraindo a Eq. (5.58) da Eq. (5.57) chega-se à equação final para o cálculo da velocidade na face f:

$$\tilde{u}_{i,f} = \frac{\overline{a_p u_{i,p}} + \overline{B_{fi}^p} [\Delta p]_l^p - B_{fi}^f [\Delta p]_l^f + \left(\frac{\rho V_P}{\Delta t} \right) \left[(1+2k) \tilde{u}_{i,f}^{(n)} - k \tilde{u}_{i,f}^{(n-1)} \right]}{\bar{a}_p} - \frac{\left(\frac{\rho V_P}{\Delta t} \right) \left[(1+2k) u_{i,p}^{(n)} - k u_{i,p}^{(n-1)} \right]}{\bar{a}_p} \quad (5.59)$$

Substituindo esta expressão na Eq. (5.21) obtém-se a seguinte expressão para o cálculo dos caudais mássicos F_f que atravessam as faces f do volume de controlo:

$$F_f = \frac{1}{\bar{a}_p} \left\{ \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f \overline{a_p u_{i,p}} + \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f \overline{B_{fi}^p [\Delta p]_f^p} - \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f B_{fi}^f [\Delta p]_f^f + \right. \\ \left. \overline{\left(\frac{\rho V_p}{\Delta t} \right)} \left[(1+2k) F_f^{(n)} - k F_f^{(n-1)} \right] - \sum_{i=1}^3 \rho B_{fi}^f \overline{\left(\frac{\rho V_p}{\Delta t} \right)} \left[(1+2k) u_{i,p}^{(n)} - k u_{i,p}^{(n-1)} \right] \right\} \quad (5.60)$$

Da mesma forma que foi preciso garantir o acoplamento dos campos de velocidade e de pressão no cálculo das componentes de velocidade nas faces do volume de controlo, é necessário garantir o acoplamento entre os campos de tensão e de velocidade. Na discretização do termo do divergente da tensão não newtoniana apresentada na Eq. (5.34) surge a tensão $\tilde{\tau}_{ij,f}$ que requer interpolação para a face da célula, necessitando por isso atenção especial. Ao proceder-se a uma interpolação linear dos valores nos nós junto à face do volume de controlo, podem surgir oscilações nos campos de tensões, originando problemas de estabilidade no método numérico. Para solucionar este problema de desacoplamento, as tensões nas faces das células $\tilde{\tau}_{ij,f}$ devem ser calculadas de acordo com o método de interpolação desenvolvido por Oliveira *et al.* [103] e, posteriormente, alterado para malhas não ortogonais por Oliveira & Pinho [102]. Este método de interpolação segue a ideia proposta por Rhie & Chow [126] para o cálculo das velocidades nas faces, tal como descrito nas páginas anteriores, mas agora, quando aplicado às tensões $\tilde{\tau}_{ij,f}$. A finalidade será garantir uma boa ligação entre a tensão na face e os valores das componentes de velocidade nos nós vizinhos.

Omitindo os detalhes da dedução, a equação para o cálculo das tensões nas faces do volume de controlo $\tilde{\tau}_{ij,f}$ proposta por Oliveira & Pinho [102] é a seguinte:

$$\tilde{\tau}_{ij,f} = \overline{\tau_{ij,f}} - \overline{\left(b'_{fi} [\Delta u_i]_f + b'_{fi} [\Delta u_j]_f - \frac{2}{3} \eta_p \sum_{k=1}^3 B'_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right)} + \\ \left(\tilde{b}'_{fi} [\Delta u_i]_f + \tilde{b}'_{fi} [\Delta u_j]_f - \frac{2}{3} \eta_p \sum_{k=1}^3 \tilde{B}'_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) \quad (5.61)$$

com os coeficientes dados por:

$$\left\{ \begin{array}{l} b'_{fi} \equiv \frac{\eta_p B_{fi} + \lambda_{ef} \sum_{k=1}^3 B_{fk} \overline{\tau_{ki}}}{a_p^\tau} \quad \text{e} \quad B'_{fi} \equiv \frac{B_{fi}}{a_p^\tau} \\ \tilde{b}'_{fi} \equiv \frac{\left(\eta_p B_{fi} + \lambda_{ef} \sum_{k=1}^3 B_{fk} \overline{\tau_{ki}} \right)_f}{V_f (a_p^\tau / V_p)} \quad \text{e} \quad \tilde{B}'_{fi} \equiv \frac{B_{fi}^f}{V_f (a_p^\tau / V_p)} \end{array} \right. \quad (5.62)$$

Esta equação evita problemas de desacoplamento entre os campos de tensão e de velocidade e é ligeiramente diferente da equação apresentada na primeira referência que tratou este problema (Oliveira *et al.* [103]).

5.4 – Esquema de alta resolução para o termo convectivo: CUBISTA

Os termos convectivos (não-lineares) que aparecem na equação de conservação da quantidade de movimento e na equação constitutiva reológica requerem um método de interpolação adequado que permita determinar a velocidade convectada $\hat{u}_{i,f}$ nas faces do volume de controlo. Na discretização do termo convectivo da equação da quantidade de movimento utilizou-se o método de interpolação UDS para calcular estas velocidades $\hat{u}_{i,f}$ (Eq. (5.26)) e os correspondentes fluxos são introduzidos implicitamente através dos coeficientes da Eq. (5.37). O esquema de diferenças de montante UDS (ou *upwind*) é bastante robusto mas apenas tem uma precisão formal de primeira ordem. Devido a isso, este esquema de diferenças introduz difusão numérica (falsa difusão), que se agrava quando se pretende aplicá-lo na solução da equação constitutiva reológica (equação das tensões elásticas) na qual não existe qualquer termo difusivo. Assim, o esquema *upwind* não é adequado a cálculos exactos de escoamentos viscoelásticos e a solução é utilizar um método de maior exactidão e sem difusão numérica.

Tal como referido anteriormente, o esquema de alta resolução utilizado para estimar os fluxos convectivos na face do volume de controlo é o esquema CUBISTA desenvolvido por Alves *et al.* [7], e que está especialmente indicado para lidar com fluidos viscoelásticos. O esquema de diferenças CUBISTA é formalmente de terceira ordem no espaço, garantindo uma ordem de convergência superior a dois em problemas que apresentam uma forte convecção e assegurando ainda uma boa robustez (ou seja, proporcionando boa convergência iterativa nos métodos implícitos aqui utilizados). Para assegurar a estabilidade iterativa do método de cálculo, este esquema de alta resolução foi implementado explicitamente através de um processo de correcção diferida (*deferred correction*) desenvolvido por Khosla & Rubin [69]. Desta forma, as contribuições convectivas para os coeficientes a_p e a_F contêm fluxos baseados no esquema de diferenças de montante UDS, garantindo sempre que os coeficientes são positivos e que são tratados de forma implícita. O termo fonte $S_{\tau_{ij}}$ contém a diferença entre o fluxo convectivo efectivamente utilizado, seguindo o esquema CUBISTA, e

o fluxo proveniente do esquema de montante UDS, que são calculados explicitamente, usando os valores no instante de tempo anterior (n) de acordo com a seguinte expressão:

$$a_F^C = \underbrace{a_{F,UDS}^C}_{\substack{\text{Tratado de} \\ \text{forma implícita} \\ \text{(novos valores de } a_F\text{)}}} + \underbrace{(a_{F,CUBISTA}^C - a_{F,UDS}^C)}_{\substack{\text{Tratado de} \\ \text{forma explícita} \\ \text{(somado ao termo fonte } S\text{)}}} \quad (5.63)$$

Com a aplicação da correcção diferida e do esquema de alta resolução CUBISTA, a equação discretizada da quantidade de movimento (Eq. (5.37)) passa a ser reescrita da seguinte forma:

$$a_P u_{i,P} - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\Delta t} \left[(1+2k) u_{i,P}^{(n)} - k u_{i,P}^{(n-1)} \right] - \underbrace{\sum_{f=1}^6 F_f \left[(\hat{u}_{i,f})_{CUBISTA} - (\hat{u}_{i,f})_{upwind} \right]}_{\substack{= S_{u_i-HRS} \\ \text{(somado ao termo fonte } S_{u_i} \text{ da Eq.(5.42))}}} \quad (5.64)$$

e a equação constitutiva discretizada (Eq. (5.51)) fica:

$$a_P^\tau \tau_{ij,P} - \sum_{F=1}^6 a_F^\tau \tau_{ij,F} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_{ef,P} V_P}{\Delta t} \left[(1+2k) \tau_{ij,P}^{(n)} - k \tau_{ij,P}^{(n-1)} \right] - \underbrace{\sum_{f=1}^6 \frac{\lambda_{ef}}{\rho} F_f \left[(\hat{\tau}_{ij,f})_{CUBISTA} - (\hat{\tau}_{ij,f})_{upwind} \right]}_{\substack{= S_{\tau_{ij}-HRS} \\ \text{(somado ao termo fonte } S_{\tau_{ij}} \text{ da Eq.(5.54))}}} \quad (5.65)$$

O esquema de alta resolução CUBISTA foi implementado em malhas genéricas segundo a metodologia proposta por Darwish & Moukalled [38], a formulação normalizada da variável e do espaço (sigla NVSF, designação inglesa de *Normalized Variable and Space Formulation*). Esta metodologia é uma extensão para malhas não uniformes da formulação proposta inicialmente por Leonard [76,77] segundo o conceito de variáveis normalizadas (NVA, *Normalized Variable Approach*). Segundo a formulação NVSF, a variável genérica ϕ (que representa as componentes de velocidade u_i ou de tensão τ_{ij}) transportada por convecção e o sistema de coordenadas curvilíneas ξ são adimensionalizadas da seguinte forma (segundo a nomenclatura apresentada na Fig. 5.7):

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \text{ e } \hat{\xi} = \frac{\xi - \xi_U}{\xi_D - \xi_U} \quad (5.66)$$

onde os índices D e U representam os valores nos nós dos volumes de controlo que estão a jusante (D: *Downstream*) e a montante (U: *Upstream*) do nó centrado em P (ver Fig. 5.7).

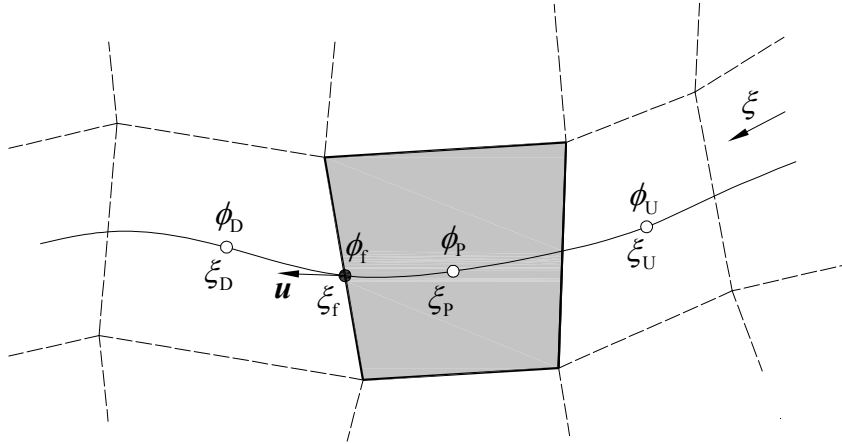


Figura 5.7 – Representação esquemática de um volume de controlo com as correspondentes variáveis e coordenadas locais. Reprodução de acordo com Alves *et al.* [7].

A principal vantagem na aplicação desta normalização é de se conseguir uma relação simples entre o valor da variável adimensional $\hat{\phi}$ na face de um volume de controlo e o respectivo valor adimensional no centro da célula imediatamente a montante $\hat{\phi}_p$. Desta forma, a formulação do esquema CUBISTA escrito para uma malha não uniforme segundo a metodologia NVSF é expressa por:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \left[1 + \frac{\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_p}{3(1 - \hat{\xi}_p)} \right] \frac{\hat{\xi}_f}{\hat{\xi}_p} \hat{\phi}_p & 0 < \hat{\phi}_p < \frac{3}{4} \hat{\xi}_p \\ \frac{\hat{\xi}_f (1 - \hat{\xi}_f)}{\hat{\xi}_p (1 - \hat{\xi}_p)} \hat{\phi}_p + \frac{\hat{\xi}_f (\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_p)}{1 - \hat{\xi}_p} & \frac{3}{4} \hat{\xi}_p \leq \hat{\phi}_p \leq \frac{1 + 2(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_p)}{2\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_p} \hat{\xi}_p \\ 1 - \frac{1 - \hat{\xi}_f}{2(1 - \hat{\xi}_p)} (1 - \hat{\phi}_p) & \frac{1 + 2(\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_p)}{2\hat{\xi}_f - \hat{\xi}_p} \hat{\xi}_p < \hat{\phi}_p < 1 \\ \hat{\phi}_p & \hat{\phi}_p < 0 \text{ e } \hat{\phi}_p > 1 \end{cases} \quad (5.67)$$

onde os termos $\hat{\phi}_p$, $\hat{\xi}_p$ e $\hat{\xi}_f$ são definidos a partir da Eq. (5.66). Para maiores detalhes sobre este esquema de discretização convectiva consultar Alves *et al.* [7].

A equação (5.67) pode ser escrita como a seguinte relação linear:

$$\hat{\phi}_f = a_1 + a_2 \hat{\phi}_p \quad (5.68)$$

que, usando a definição da variável adimensional, da Eq. (5.66), transforma-se na seguinte expressão:

$$\phi_f = \phi_p + a_1 (\phi_D - \phi_U) + (a_2 - 1) (\phi_p - \phi_U) \quad (5.69)$$

A partir da Eq. (5.69), os fluxos convectivos nas faces do volume de controlo dados pelo esquema de alta resolução CUBISTA (Eq. (5.67)) para a velocidade $\hat{u}_{i,f}$ e a tensão $\hat{\tau}_{ij,f}$ calculam-se como:

$$F_f \hat{u}_{i,f} = \underbrace{F_f u_{i,p}}_{upwind} + F_f \left[a_1 (u_{i,D} - u_{i,U}) + (a_2 - 1) (u_{i,p} - u_{i,U}) \right]_f \quad (5.70)$$

$$\frac{\lambda_{eq}}{\rho} F_f \hat{\tau}_{ij,f} = \frac{\lambda_{eq}}{\rho} \underbrace{F_f \tau_{ij,p}}_{upwind} + \frac{\lambda_{eq}}{\rho} F_f \left[a_1 (\tau_{ij,D} - \tau_{ij,U}) + (a_2 - 1) (\tau_{ij,p} - \tau_{ij,U}) \right]_f \quad (5.71)$$

onde os coeficientes a_1 e a_2 são obtidos da Eq. (5.67). Os fluxos convectivos que são calculados pelo esquema de diferenças a montante UDS e que são calculados de forma implícita foram explicados anteriormente, quando se procedeu à discretização do termo convectivo que foi incluído nos coeficientes.

5.5 – Algoritmo de solução

As equações constitutiva e de conservação da quantidade de movimento discretizadas são resolvidas utilizando uma forma modificada do algoritmo iterativo SIMPLE-Consistente (SIMPLEC) proposto por Van Doormaal & Raithby [150]. Este algoritmo (tendo como base o algoritmo SIMPLE, Patankar & Spalding [108]) permite, através de um processo iterativo de correcção de pressão, garantir uma ligação dos campos de velocidade e pressão, por forma a verificar a equação da continuidade. A modificação feita no algoritmo SIMPLEC proposta por Oliveira *et al.* [103] é a introdução de dois novos passos na parte inicial do plano sequencial do algoritmo para a resolução da equação das tensões (equação constitutiva reológica para o fluido viscoelástico). O algoritmo implementado no programa de computador é o seguinte:

- O campo de tensões τ_{ij}^* (o asterisco (*) indica que o campo de tensões corresponde a um valor intermédio que ainda não é solução do problema) é obtido da equação constitutiva discretizada (Eq. (5.51)), cujo sistema matricial é resolvido com o método iterativo do gradiente conjugado (Meijerink & Van der Vorst [82]), antes de ser tratada a equação de conservação da quantidade de movimento.
- Depois de conhecidos os valores do campo de tensões, a equação de conservação da quantidade de movimento é resolvida de forma implícita para cada componente do vector velocidade (u_i^*). No termo fonte desta equação (S_{u_i}) são introduzidos os valores das tensões calculados no passo anterior (no termo do divergente da tensão não newtoniana $S_{u_i-tensão\ não\ newtoniana}$). Nesta fase do algoritmo de cálculo é importante que o valor da tensão na face da célula ($\tilde{\tau}_{ij,f}$ da Eq. (5.34)) seja estimado recorrendo à aplicação do método de interpolação especial definido na Eq. (5.61).

A Figura 5.8 apresenta um diagrama com a sequência das operações do algoritmo de solução implementado.

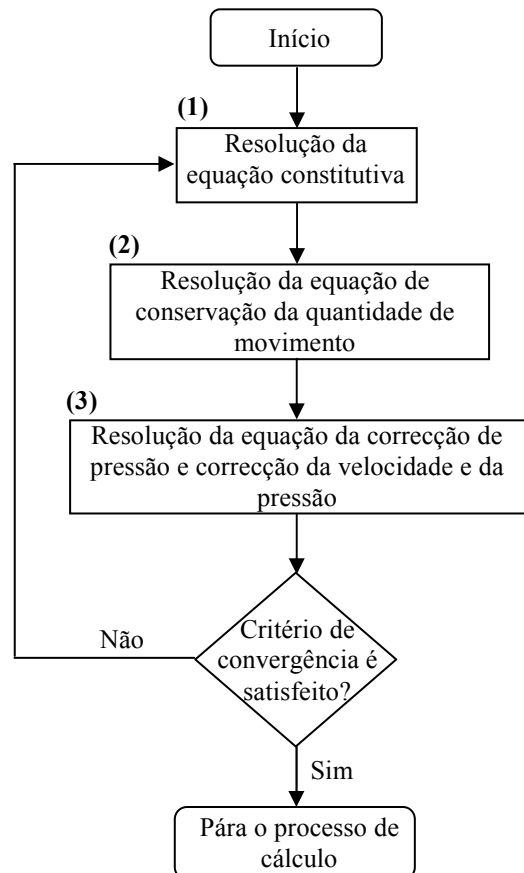


Figura 5.8 – Diagrama do algoritmo sequencial de cálculo.

Apresenta-se de seguida a descrição mais detalhada de cada um dos passos referente a este algoritmo para cada avanço no tempo Δt . Esta descrição é adequada ao caso em que o algoritmo se aplica ao cálculo de escoamentos não estacionários.

Passo (1):

Neste primeiro passo os valores das seis tensões são obtidos de forma sequencial através da resolução da equação constitutiva reológica discretizada (Eq. (5.51), com a introdução do termo $\frac{\lambda_{ef,p} V_p}{\Delta t} [(1+2k)\tau_{ij,p}^{(n)} - k\tau_{ij,p}^{(n-1)}]$ no termo fonte $S_{\tau_{ij}}$ da Eq. (5.54)):

$$a_p^r \tau_{ij,p}^* - \sum_{F=1}^6 a_F^r \tau_{ij,F}^* = S_{\tau_{ij}} \quad (5.72)$$

Esta equação é implícita em relação à tensão τ_{ij}^* , com os coeficientes e o termo fonte baseados em valores de velocidade e tensão correspondentes ao nível iterativo anterior. Após convergência do processo iterativo dentro do passo no tempo, faz-se $\tau_{ij}^{(n+1)} \equiv \tau_{ij}^*$ e passa-se para o tempo seguinte. O sistema de equações representado pela Eq. (5.72) é resolvido através de um método iterativo de resolução de sistemas lineares em ordem a τ_{ij}^* .

Passo (2):

No segundo passo do algoritmo de cálculo, depois de estimados os valores do campo de tensões no passo (1), a equação de conservação da quantidade de movimento discretizada (Eq. (5.37)) será resolvida implicitamente para cada componente de velocidade u_i^* da seguinte forma:

$$a_p u_{i,p}^* - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F}^* = - \sum_{l=1}^3 B_{li} [\Delta p^*]_l^p + \sum_{f=1}^6 \left(\sum_{j=1}^3 B_{fj} \tilde{\tau}_{ij}^* \right)_f + S'_{u_i} + \frac{\rho V_p}{\Delta t} [(1+2k)u_{i,p}^{(n)} - k u_{i,p}^{(n-1)}] \quad (5.73)$$

onde o coeficiente central é $a_p = \sum_{F=1}^6 a_F + \frac{\rho V_p}{\Delta t} (1+k)$. Por conveniência os termos fonte do gradiente de pressão (primeiro termo do lado direito) e do divergente de tensão (segundo

termo do lado direito) foram colocados fora do termo fonte principal S_{u_i} (S'_{u_i} inclui as restantes contribuições do termo fonte da Eq. (5.42)). O termo do gradiente de pressão é calculado com base nos valores da pressão na iteração anterior p^* conduzido através de um processo de correcção de pressão de acordo com o algoritmo SIMPLEC (Van Doormaal & Raithby [150]), que será explicado no passo (3). O termo relacionado com o divergente da tensão é baseado nos valores de τ_{ij}^* provenientes do passo (1) do algoritmo, sendo necessário garantir o acoplamento entre os campos de velocidade e tensão, tal como descrito em Oliveira *et al.* [103].

Passo (3):

O terceiro passo do algoritmo é usado para uma correcção dos campos de velocidade e pressão. A correcção da velocidade permite que as componentes da velocidade sejam modificadas para que seja satisfeita a equação de conservação da massa, isto porque em geral a velocidade u_i^* proveniente do passo (2) não satisfaz localmente o balanço mássico. A equação da correcção de pressão é obtida através da seguinte factorização da equação da quantidade de movimento:

$$\sum_{F=1}^6 a_F u_{i,P}^* + \frac{\rho V_P}{\Delta t} (1+k) u_{i,P}^{**} - \sum_{F=1}^6 a_F u_{i,F}^* = - \sum_{l=1}^3 B_{li} [\Delta p^{**}]_l^p + \sum_{f=1}^6 \left(\sum_{j=1}^3 B_{ff} \tilde{\tau}_{ij}^* \right) + S'_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\Delta t} [(1+2k) u_{i,P}^{(n)} - k u_{i,P}^{(n-1)}] \quad (5.74)$$

onde a velocidade referente ao termo de inércia (membro esquerdo da equação) foi avançada para o novo nível iterativo ($u_{i,P}^* \rightarrow u_{i,P}^{**}$), o mesmo acontecendo com a pressão. Os restantes termos da equação mantêm-se inalterados. Subtraindo esta equação da Eq. (5.73) obtém-se a equação de correcção de velocidade:

$$(1+k) \frac{\rho V_P}{\Delta t} (u_{i,P}^{**} - u_{i,P}^*) = - \sum_{l=1}^3 B_{li} [p^{**} - p^*]_l^p \Leftrightarrow u_{i,P}^{**} = u_{i,P}^* - \frac{\sum_{l=1}^3 B_{li} [\Delta p']_l^p}{(1+k)(\rho V_P / \Delta t)} \quad (5.75)$$

sendo a correcção de pressão definida como:

$$p' = p^{**} - p^* \quad (5.76)$$

Os valores de p' são obtidos forçando as componentes de velocidade u_i^{**} a satisfazer a equação da continuidade ($\partial \rho u_i^{**} / \partial x_i = 0$, sob forma diferencial, ou $\sum_{f=1}^6 F_f^{**} = 0$, sob forma discretizada, conforme as Eqs. (5.1) e (5.22)). Substituindo os valores u_i^{**} da Eq. (5.75) na equação da continuidade discretizada, chega-se à seguinte equação de Poisson para a correcção de pressões p' :

$$a_p^p p' = \sum_{F=1}^6 a_F^p p'_F - \sum_{F=1}^6 F_F^{**} \quad (5.77)$$

onde os coeficientes são expressos por: $a_F^p = B_F^2 / (\rho V / \Delta t)_F$ e $a_p^p = \sum_{F=1}^6 a_F^p$.

Após todo o cálculo efectuado é necessário verificar o critério de convergência do método. Se o critério de convergência não se verificar, os novos valores de τ_{ij}^* , $u_i^{**} \rightarrow u_i^*$ e $p^{**} \rightarrow p^*$ são reiniciados para um novo nível iterativo e o contador de iterações é avançado, voltando-se ao passo (1). Todo o processo de cálculo é repetido até se atingir um valor residual das equações de governo, controlado por uma tolerância prescrita (TOL). Se este se verificar, a convergência é atingida e o processo de cálculo é avançado para o nível temporal seguinte, fazendo-se $u_i^{(n+1)} = u_i^{**}$, $p^{(n+1)} = p^{**}$ e $\tau_{ij}^{(n+1)} = \tau_{ij}^*$. Nesta altura está-se na posse da solução do problema para o tempo pretendido. Para além da monitorização da convergência dos resíduos das equações, um outro critério de convergência é assumido a partir do erro relativo para a velocidade, pressão e tensões quando se atinge a tolerância de acordo com

$$\left| \frac{u_i^{**} - u_i^*}{u_{i,\max}^{(n)}} \right| \leq TOL, \quad \left| \frac{p^{**} - p^*}{p_{\max}^{(n)}} \right| \leq TOL \quad \text{e} \quad \left| \frac{\tau_{ij}^{**} - \tau_{ij}^*}{\tau_{ij,\max}^{(n)}} \right| \leq TOL. \quad \text{O valor da tolerância assumida foi de}$$

$TOL = 10^{-4}$, baseado nos valores normalizados dos resíduos e das variações das variáveis, tendo sido constatado que esta tolerância apresenta bons resultados do ponto de vista de convergência iterativa. Por fim, o sistema de equações lineares é resolvido pelo método do gradiente bi-conjugado (Meijerink & Van der Vorst [82]) até à convergência interior (isto é, a nível do sistema de equações linear, assumindo-se os coeficientes como constantes). A excepção é a equação da pressão que é resolvida pelo método do gradiente conjugado simétrico. As matrizes são pré-condicionadas baseadas na factorização incompleta do tipo LU, uma factorização mais simples do que a do método de Stone [142]. Para maiores detalhes sobre o algoritmo de cálculo e a metodologia usada para garantir o acoplamento pressão-velocidade-tensão podem ser consultados os trabalhos de Oliveira *et al.* [103] e Issa & Oliveira [65].

5.6 – Condições de fronteira

Após a apresentação das equações discretizadas e do procedimento sequencial de cálculo, é conveniente explicar a forma de prescrever os valores de fronteira das incógnitas. Esses valores impostos nas fronteiras são estipulados de acordo com o tipo físico de condição de fronteira necessário para descrever o problema que se pretende resolver.

Nesta secção faz-se uma breve descrição sobre as condições de fronteira implementadas (para maiores detalhes consultar em Oliveira [91], Oliveira *et al.* [103], Alves [6] e Miranda [83]). As principais são:

a) Entrada:

No plano de entrada é imposto um perfil parabólico para as componentes longitudinais da velocidade e as componentes da tensão são obtidas de acordo com a solução teórica, em condição de desenvolvimento completo, do modelo em estudo. Uma vez que apenas se considera escoamentos incompressíveis, o valor absoluto da pressão é irrelevante e apenas interessa a sua variação no domínio de cálculo. Desta forma, o valor da pressão num ponto junto à entrada é posto igual a zero e no restante domínio a pressão é corrigida em cada iteração por forma a garantir a equação da continuidade, tal como descrito na Secção 5.5. Como as velocidades são impostas e se mantêm constantes nos planos de entrada, não é necessário corrigi-las, o que implica condição de fronteira de Neumann para p' (gradientes normais nulos, $\partial p'/\partial x = 0$).

b) Saída:

Devido à utilização do esquema de diferenças *upwind* não é necessário, na saída do escoamento, contabilizar os valores das componentes da velocidade, tensão e pressão no plano de saída. Para evitar propagação de erros numéricos gerados junto às saídas, opta-se por prolongar o domínio de cálculo para garantir que o escoamento se encontra, localmente, completamente desenvolvido. A única condição imposta é a condição de Neumann (para a velocidade, tensão e gradiente de pressão) definida por gradientes axiais nulos .

c) Parede:

A única condição imposta nas paredes sólidas do domínio de cálculo é de não deslizamento (ou não escorregamento), ou seja, a velocidade local é igual a zero. As tensões são obtidas de soluções analíticas aproximadas que assumem um escoamento local de Couette (paralelo à parede).

d) Planos de simetria:

Nos planos de simetria considera-se que os fluxos convectivos e difusivos se anulam. Estas condições são aplicadas a todas as grandezas do problema, utilizando regras de reflexão adequadas e o recurso a células simétricas fictícias. Para maiores detalhes deve ser consultado o trabalho de Oliveira *et al.* [103].

5.7 – Validação do modelo FENE-P

As equações constitutivas implementadas no programa de cálculo compreendem o modelo convectivo de Maxwell (UCM), o modelo Oldroyd-B, o modelo Phan-Thien e Tanner (PTT) e os modelos de extensibilidade elástica finita e não-linear FENE-CR e FENE-MCR. Uma das fases do trabalho seria o de implementar o modelo FENE-P no programa principal de cálculo, inserindo uma equação constitutiva adicional para representar a evolução das tensões geradas pelas moléculas poliméricas, conforme tratado na subsecção 3.2.2.1. Nesta secção apresentam-se alguns resultados relativos à verificação da correcta implementação no programa de simulação do modelo FENE-P, sendo comparadas soluções numéricas para escoamento completamente desenvolvido com soluções teóricas do modelo.

Nestas simulações com o modelo FENE-P considerou-se o escoamento através de um canal plano bidimensional (x, y) , conforme ilustrado na Fig. 5.9. Admitiu-se, como em toda a restante tese, que o escoamento era isotérmico e incompressível, e que o canal tinha uma altura $H = 2d$ e um comprimento $L = 20d$ (o que equivale adimensionalizar distâncias com d), por forma ao escoamento estar completamente desenvolvido junto à saída.

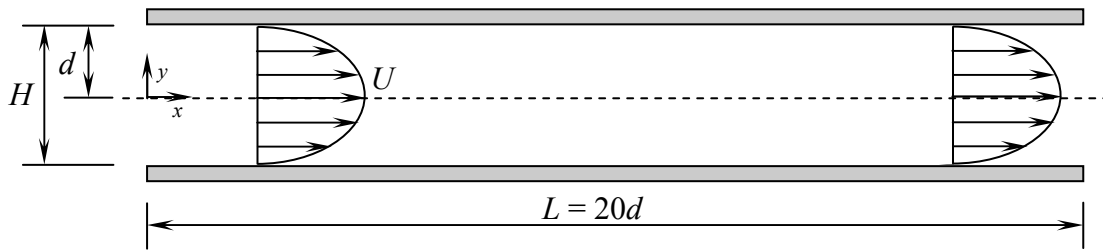


Figura 5.9 – Representação esquemática do canal plano.

Para a validação do modelo FENE-P ir-se-á analisar os resultados à saída do canal e considerou-se a geometria total deste, sem assumir simetria em relação ao plano central. Apenas foi utilizado um bloco para definir a malha computacional e as suas características geométricas estão apresentadas na Tabela 5.2. Foram utilizadas três malhas computacionais sucessivamente refinadas de forma a avaliar quantitativamente o erro induzido no estudo numérico.

Tabela 5.2 – Características geométricas das malhas computacionais.

	Malha 1		Malha 2		Malha 3	
	$N_x \times N_y$	f	$N_x \times N_y$	f	$N_x \times N_y$	f
Bloco	200 × 21	1.0	400 × 41	1.0	800 × 81	1.0
NVC	4200		16400		64800	
	$\Delta x \approx \Delta y \approx 0.1d$		$\Delta x \approx \Delta y \approx 0.05d$		$\Delta x \approx \Delta y \approx 0.025d$	

A tabela contém o número de células ao longo da direcção x (N_x) e y (N_y), e o número total de volumes de controlo (NVC). O factor de expansão das células ($f = f_x = f_y$) é igual a 1, o que corresponde a ter malha uniforme segundo x e y . Os resultados apresentados foram calculados utilizando a malha intermédia (Malha 2). A malha fina (Malha 3) e a malha grosseira (Malha 1) serviram para comparar os erros de discretização.

As equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, escritas em coordenadas cartesianas para o escoamento bidimensional, são dadas por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (5.78)$$

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \\ \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \end{cases} \quad (5.79)$$

Ir-se-á mostrar aqui a dedução da solução teórica para escoamento estacionário e completamente desenvolvido, quando a equação constitutiva não tem contribuição de solvente newtoniano, num canal plano bidimensional alinhado com o eixo x e com a direcção transversal y , conforme a representação da Fig. 5.9. Na prática, essa solução será verificada junto à saída do canal dessa figura. Uma vez que se está aí na presença de um escoamento completamente desenvolvido, tem-se $u = u(y)$ e $v = v(y)$, ou de forma equivalente $\partial u / \partial x = 0$. Partindo da equação da continuidade (Eq. (5.78)) tem-se então $\partial v / \partial y = 0$, ou seja, $v = \text{constante}$. Tendo em conta a condição de parede que impõe que $u = v = 0$, obtém-se então que $v = 0$ para qualquer valor de y .

Com estas simplificações o sistema de equações da quantidade de movimento (Eqs. (5.79)) reduz-se a:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial y} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \tau_{xy} = \frac{\partial p}{\partial x} y = Py \\ \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (5.80)$$

definindo-se $P \equiv dp/dx$, tal como apresentado no trabalho de Oliveira [96].

As equações constitutivas para este escoamento plano foram dadas no capítulo anterior, ver Eq. (4.2). Dividindo a equação para τ_{xx} com a equação para τ_{xy} , resulta $\tau_{xx} = (2\lambda \tau_{xy}^2) / a\eta_p$, e usando a Eq. (5.80) para τ_{xy} obtém-se:

$$\tau_{xx} = \frac{2\lambda}{a\eta_p} P^2 y^2 \quad (5.81)$$

O gradiente de velocidade pode ser agora determinado de forma explícita a partir da equação para τ_{xy} (Eq. (4.2)), introduzindo-se as expressões de τ_{xx} (Eq. (5.81)) e de τ_{xy} (Eq. (5.80)):

$$\frac{du}{dy} = \frac{Py}{a\eta_p} \left[1 + \frac{3a + \frac{\lambda}{\eta_p} \left(\frac{2\lambda}{a\eta_p} P^2 y^2 \right)}{L^2} \right] \quad (5.82)$$

Esta equação é normalizada aplicando as seguintes definições: $\bar{u} = u/U$, $\bar{y} = y/d$ e $We = \lambda U/d$, onde U é a velocidade média e We é o número de Weissenberg, obtendo-se:

$$\frac{d\bar{u}}{d\bar{y}} = -\frac{3X}{a}\bar{y} \left[1 + \frac{3a + \frac{18We^2 X^2 \bar{y}^2}{a}}{L^2} \right] \quad (5.83)$$

onde o gradiente de pressão adimensional X é definido como:

$$X = \frac{U_N}{U}, \text{ com } U_N = -\frac{Pd^2}{3\eta_p} \quad (5.84)$$

Integrando a Eq. (5.83) entre $y = 0$ (linha central) e $y = d$ (parede do canal), onde é imposta a condição de não escorregamento ($u = 0$), obtém-se a velocidade adimensional:

$$\bar{u}(\bar{y}) = \frac{3}{2} X (1 - \bar{y}^2) \left[1 + 9 \frac{We^2 X^2}{a^2 L^2} (1 + \bar{y}^2) \right] \quad (5.85)$$

A velocidade média U é obtida por integração da Eq. (5.85), ou seja, $U = \frac{1}{d} \int_0^d \bar{u}(\bar{y}) d\bar{y}$. Na maioria dos problemas, a velocidade média do escoamento U é conhecida e o gradiente de pressão (dp/dx) é uma das incógnitas do problema, obtendo-se a sua solução através de resolução da equação cúbica proveniente da integração da Eq. (5.85). Esta pode ser escrita da seguinte forma adimensional:

$$X(1 + bX^2) = 1 \quad (5.86)$$

$$\text{com } b = \frac{54 We^2}{4 a^2 L^2}.$$

A solução real desta equação cúbica é:

$$X = \frac{432^{1/6} (D^{2/3} - 2^{2/3})}{6b^{1/2} D^{1/3}} \quad (5.87)$$

$$\text{com } D = (4 + 27b)^{1/2} + 3^{3/2} b^{1/2}.$$

Nesta altura o problema está resolvido analiticamente: o perfil de velocidade é dado pela Eq. (5.85) e as tensões τ_{xx} e τ_{xy} podem ser obtidas das Eqs. (5.80) e (5.81), ou sob a forma adimensional:

$$\bar{\tau}_{xx} = \frac{\tau_{xx}}{3\eta_p \frac{U}{d}} = \frac{6WeX^2\bar{y}^2}{a} \quad (5.88)$$

$$\bar{\tau}_{xy} = \frac{\tau_{xy}}{3\eta_p \frac{U}{d}} = -X\bar{y} \quad (5.89)$$

A adimensionalização é feita com a tensão de corte na parede para fluido newtoniano $\tau_w = 3\eta_p U/d$.

Na entrada do canal foi imposto um perfil completamente desenvolvido para todas as variáveis (u , τ_{xx} e τ_{xy}), de acordo com o fluido tipo FENE-CR. O perfil de velocidades para escoamento completamente desenvolvido e a distribuição da tensão de corte são de facto idênticos aos que se obtêm para o caso do fluido newtoniano, excepto a tensão normal que é diferente de zero mas não contribui para estabelecer as velocidades na situação de desenvolvimento completo. Desta forma, há algum efeito do desenvolvimento desde as condições impostas à entrada até aos perfis completamente desenvolvidos que são mostrados nas figuras que se seguem. Parece-nos melhor optar por estas condições de fronteira do que estar a impor a solução analítica conhecida para o modelo FENE-P, pois esta é a que se pretende obter à saída. Na Figura 5.10 apresentam-se os resultados numéricos (símbolos) e teóricos (linha) para os perfis de tensões normal e de corte e o perfil de velocidades, tendo em conta o refinamento da malha. Os valores de base dos parâmetros da equação do modelo FENE-P foram $L^2 = 10$, $\beta = 0.0$ e $We = 1$. Pode constatar-se que existe uma boa concordância entre os resultados teóricos e numéricos e que estes variam pouco em função da malha computacional utilizada, tendo sido utilizadas três malhas sucessivamente refinadas, Malha 1 (21 células), Malha 2 (41 células) e Malha 3 (81 células). Existe sempre um nó exactamente sobre a linha central do canal, e o efeito de reofluidificação é ilustrado pelo facto da velocidade máxima aí ser inferior ao valor 1.5 válido para o modelo FENE-CR. No restante estudo comparativo, será utilizada a Malha 2 para validação do modelo FENE-P.

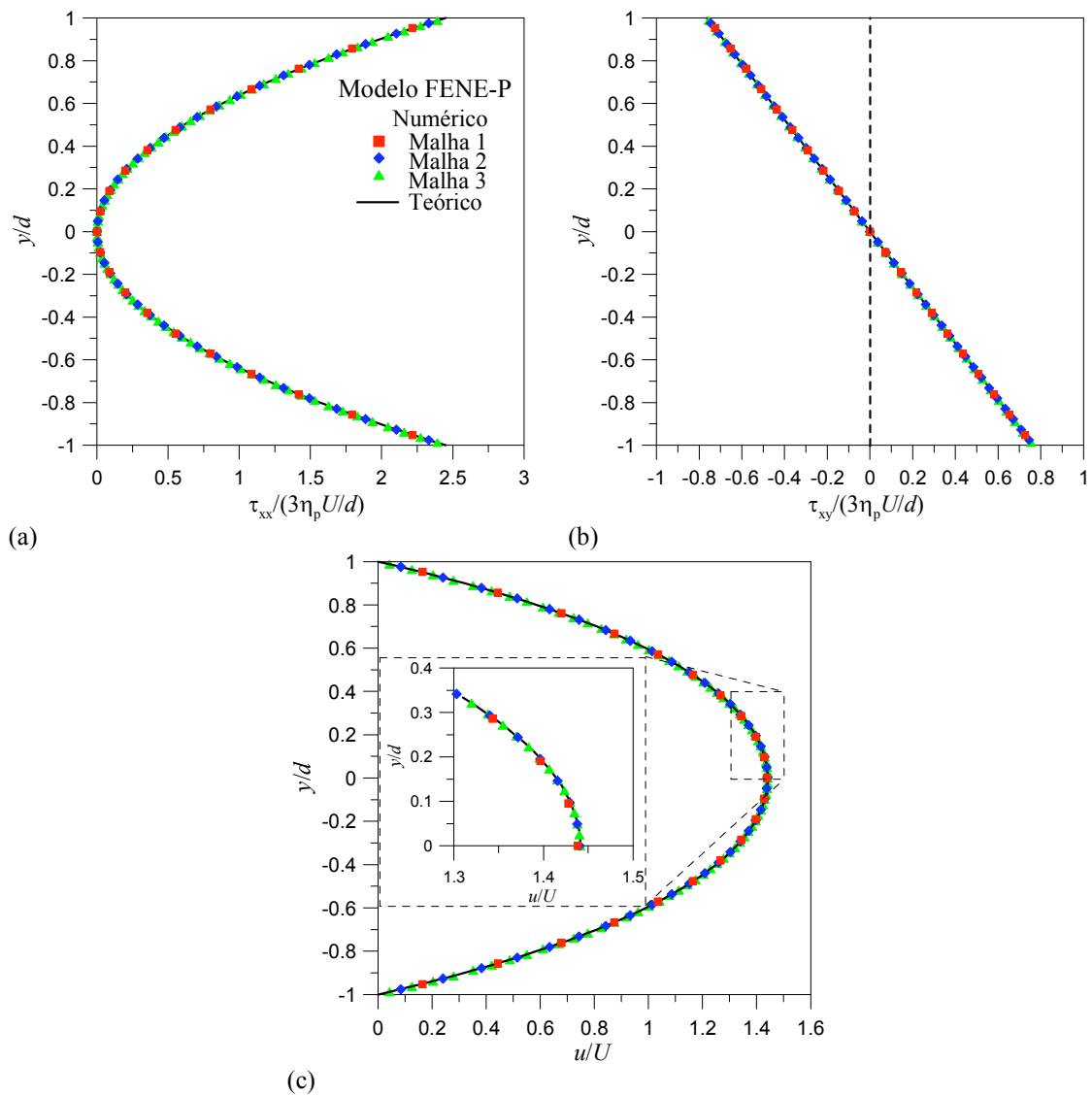


Figura 5.10 – Comparação dos perfis teóricos e numéricos em função do refinamento da malha computacional ($L^2 = 10$, $We = 1$ e $\beta = 0.0$) para: (a) tensão normal τ_{xx} ; (b) tensão de corte τ_{xy} ; e (c) perfil de velocidades.

Na Figura 5.11 apresentam-se os resultados previstos do escoamento viscoelástico FENE-P quando se faz variar o parâmetro de extensibilidade $L^2 = 10, 50$ e 100 para o caso sem solvente ($\beta = 0.0$), com $We = 1.0$. Verifica-se que a diminuição de L^2 faz aumentar o efeito reofluidificante (*shear-thinning*), o que implica que as tensões são menores e o perfil de velocidades fica mais cheio, com a velocidade máxima a diminuir.

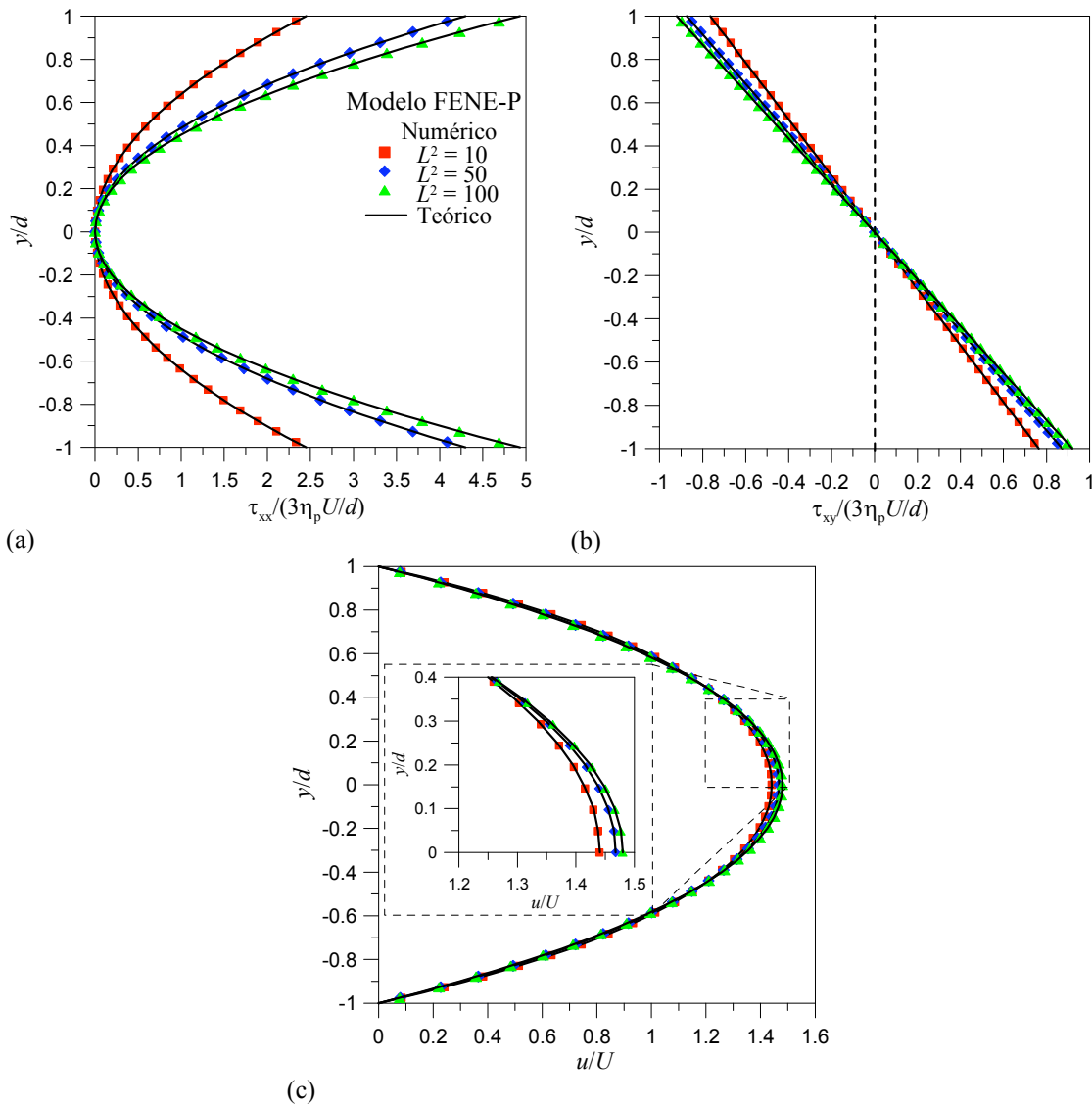


Figura 5.11 – Comparação dos perfis teóricos e numéricos em função do parâmetro de extensibilidade L^2 ($We = 1$ e $\beta = 0$) para: (a) tensão normal τ_{xx} ; (b) tensão de corte τ_{xy} ; e (c) perfil de velocidades.

Na Figura 5.12 apresenta-se o mesmo estudo só que agora considerando com solvente ($\beta = 0.5$). A solução teórica neste caso em que $\beta \neq 0.0$ corresponde a uma generalização da solução apresentada atrás, feita por Cruz *et al.* [37]. De acordo com os resultados obtidos e comparando com a situação sem solvente (Fig. 5.11), constata-se que o aumento da concentração de solvente provoca uma diminuição de tensões e reduz o efeito reofluidificante.

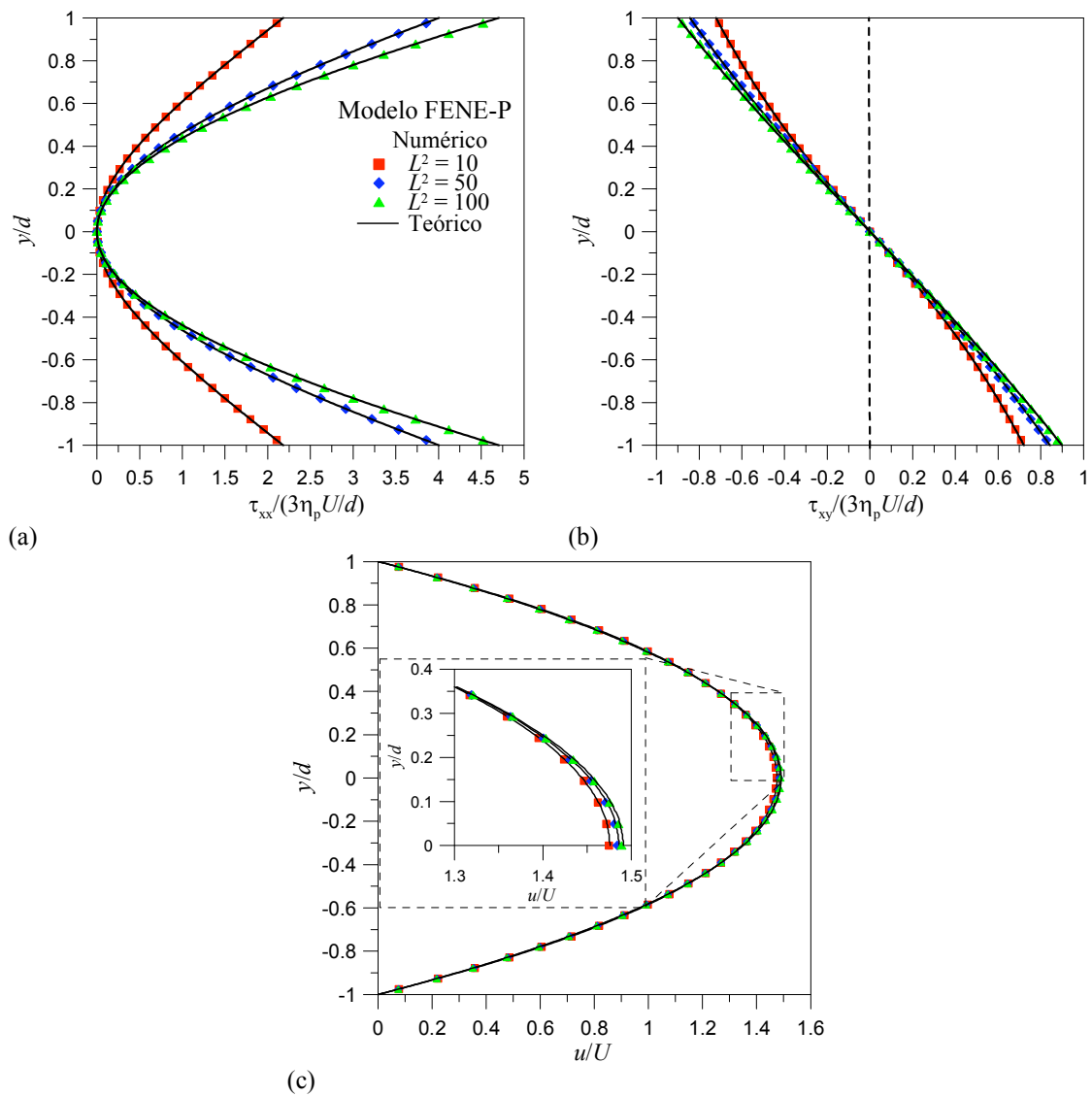


Figura 5.12 – Comparação dos perfis teóricos e numéricos em função do parâmetro de extensibilidade L^2 ($We = 1$ e $\beta = 0.5$) para: (a) tensão normal τ_{xx} ; (b) tensão de corte τ_{xy} ; e (c) perfil de velocidades.

O efeito provocado ao escoamento quando se procede ao aumento da elasticidade (controlado pelo We) encontra-se ilustrado na Fig. 5.13. Neste estudo We toma valores de 1, 2 e 5, em condições de $\beta = 0.5$ e $L^2 = 10$ fixos. Observa-se, dos resultados previstos, que: por um lado o crescimento We faz aumentar o efeito refluidificante, com tensões τ_{xy} menores e o perfil de velocidades mais cheio, com a velocidade máxima a diminuir; por outro lado o aumento da elasticidade provoca um crescimento de τ_{xx} .

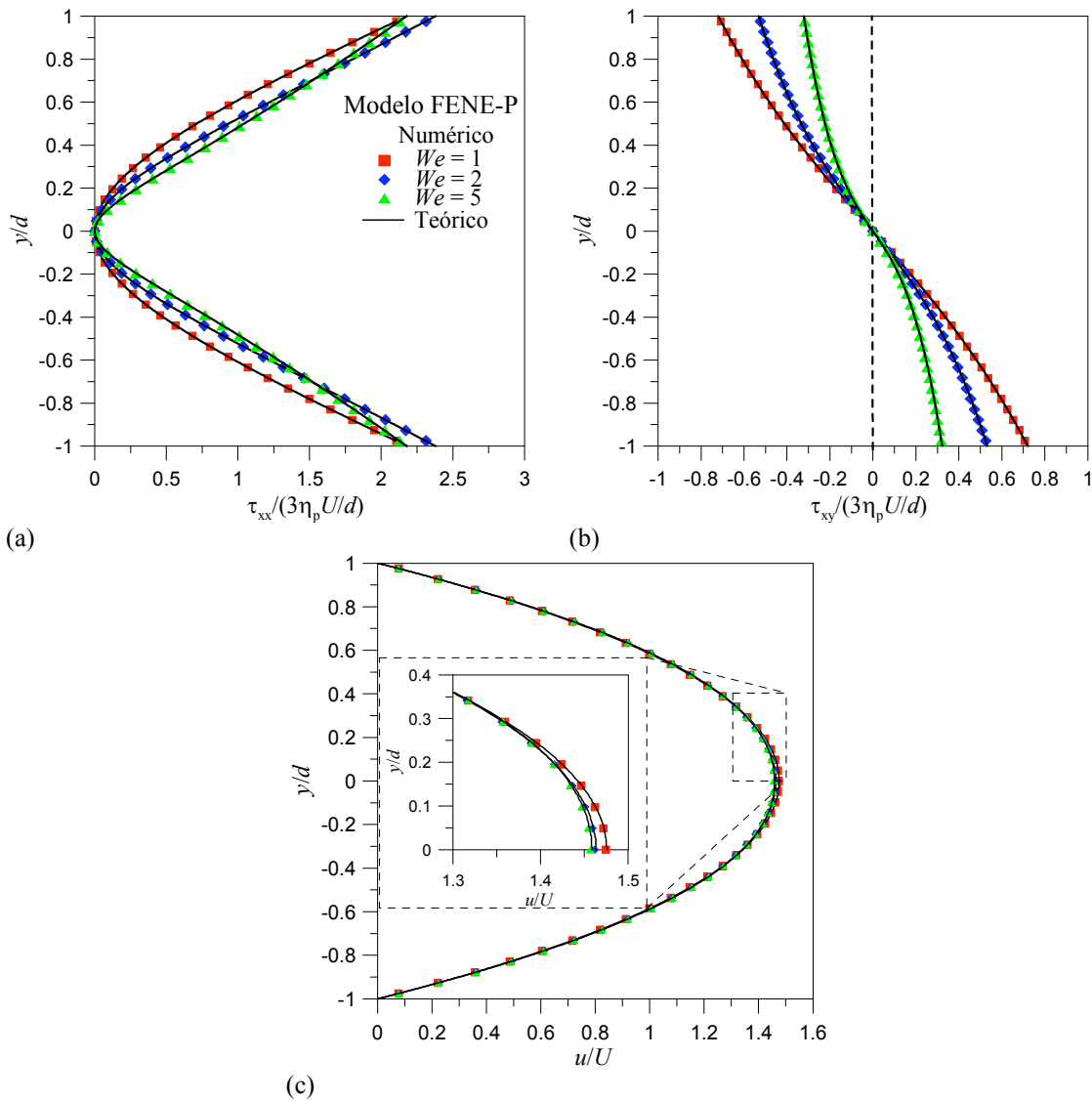


Figura 5.13 – Comparação dos perfis teóricos e numéricos em função do número de Weissenberg ($L^2 = 10$ e $\beta = 0.5$) para: (a) tensão normal τ_{xx} ; (b) tensão de corte τ_{xy} ; e (c) perfil de velocidades.

Por último, na Figura 5.14 apresentam-se os resultados obtidos quando se faz variar a razão de viscosidades do solvente $\beta = 0.0, 0.5$ e 0.9 , em condições de $L^2 = 10$ e $We = 1.0$ fixos. Conclui-se que o aumento de β mascara o efeito reofluidificante, atenuando-o, uma vez que para $\beta = 1.0$ reencontra-se o caso newtoniano com viscosidade constante. De todas as formas, β tem uma influência menor do que L^2 e We , como se constata comparando a Fig. 5.14 com as Figs. 5.12 e 5.13. É interessante ainda verificar que a tensão normal τ_{xx} é maior junto à parede para $\beta = 0.0$, mas no seio do escoamento ($y/d \approx 0.4 - 0.5$) é inferior à dos outros dois casos.

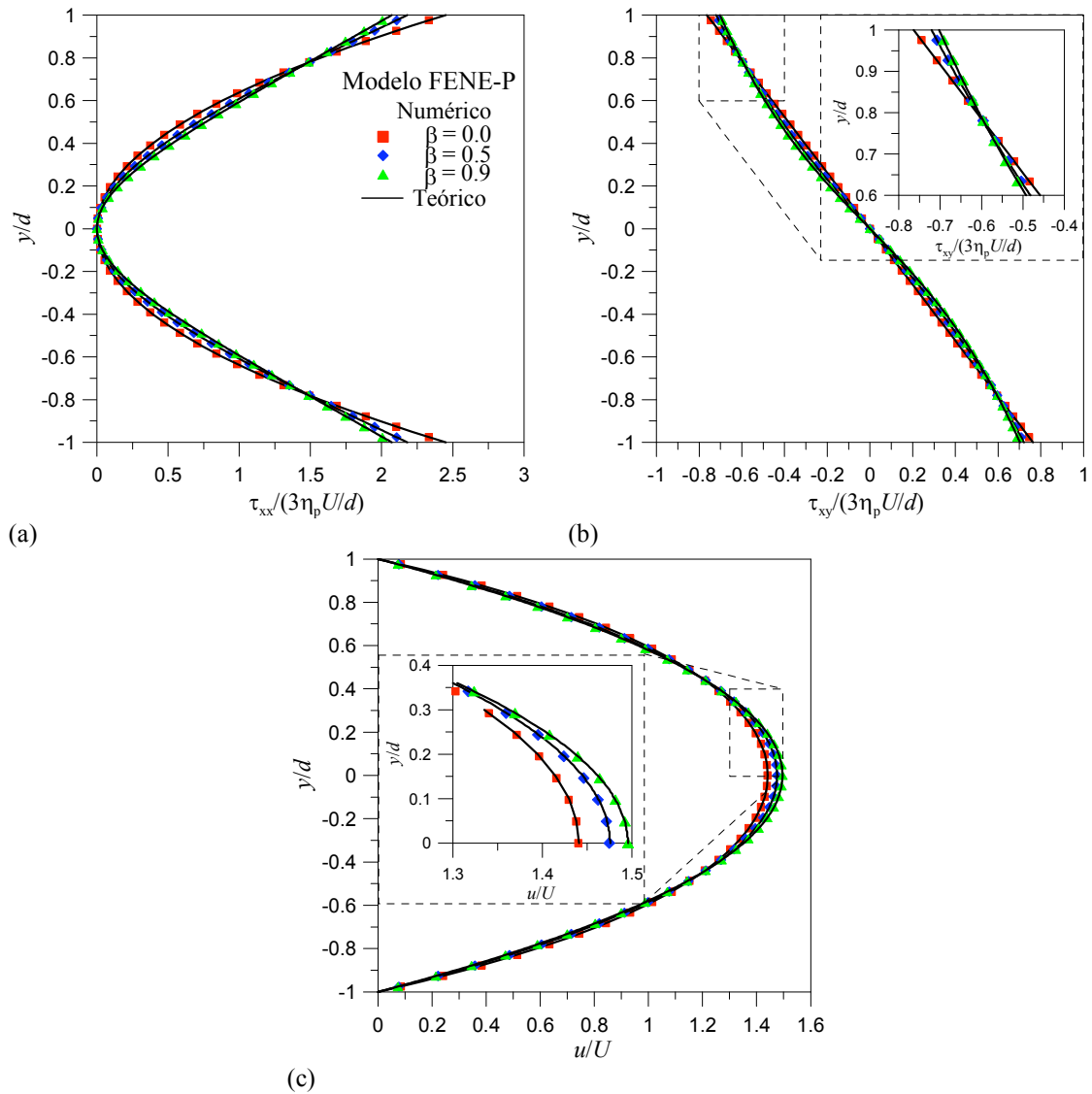


Figura 5.14 – Comparação dos perfis teóricos e numéricos em função da razão de viscosidades do solvente β ($We = 1$ e $L^2 = 10$) para: (a) tensão normal τ_{xx} ; (b) tensão de corte τ_{xy} ; e (c) perfil de velocidades.

Em todos os gráficos ilustrados nas Figuras 5.11-5.14 os resultados das soluções teóricas foram indicados pela linha cheia. Comparando os resultados numéricos e teóricos para cada uma das situações pode concluir-se que existe uma boa concordância entre ambos. Isto demonstra que a implementação do modelo FENE-P no programa de cálculo é válida e, assim, poderá ser utilizada em simulações futuras quando se pretender aplicar este modelo constitutivo a situações mais complexas de escoamento.

Capítulo 6

Fenómeno da bifurcação em escoamentos viscoelásticos através de uma expansão simétrica 1:4 *

Neste capítulo apresenta-se um estudo numérico do escoamento viscoelástico através de uma expansão plana, com uma razão de expansão $ER = D/d = 4$. O interesse deste trabalho é investigar as soluções bidimensionais estacionárias que ocorrem neste tipo de geometria, sabendo-se, à partida, que o escoamento newtoniano fica assimétrico para valores de Reynolds superiores a um número de Reynolds crítico. Este estudo concentra-se na análise das características do escoamento viscoelástico variando o número de Reynolds ($0 < Re \leq 100$), o número de Weissenberg ($0 \leq We \leq 100$) e a razão de viscosidades do solvente newtoniano ($0.3 \leq \beta \leq 1.0$). Na generalidade das simulações o parâmetro de extensibilidade (L^2), referente à versão do modelo FENE utilizado, mantém-se constante ($L^2 = 100$). Todavia, variando L^2 entre 100 e 500, os resultados revelaram que a influência deste parâmetro no escoamento é mínima.

A maior parte dos resultados aqui apresentados são relativos à estrutura do escoamento, especificamente os campos de linhas de corrente e os tamanhos e intensidades das recirculações, e à distribuição de pressão e velocidade ao longo da linha central ($y = 0$). No caso do fluido newtoniano, o escoamento bifurca para números de Reynolds superiores a 36, apresentando-se este resultado em concordância com estudos prévios (Drikakis [42] e Battaglia et al. [19]). Em contrapartida, o efeito viscoelástico nos fluidos não newtonianos tende a estabilizar o escoamento. Assim, considerando os valores típicos utilizados de $\beta = 0.5$ e $We = 2$ este bifurca para números de Re superiores a 46. Os casos newtonianos e não newtonianos viscoelásticos serão analisados em detalhe neste capítulo.

* Este capítulo é baseado no artigo “Rocha, G.N., R.J. Poole e P.J. Oliveira (2007). Bifurcation phenomena in viscoelastic flows through a symmetric 1:4 expansion. *J. Non.-Newtonian Fluid Mech.* **141**: 1-17”.

6.1 – Introdução

O escoamento de fluidos com propriedades viscoelásticas tem sido objecto de inúmeros estudos, numéricos ou experimentais, que foram já discutidos no Capítulo 2, em aplicações que envolvem geometrias com expansão da secção transversal. Como é sabido, nas zonas onde surgem estas variações de secção ocorrem alterações significativas do escoamento, aparecendo a jusante da zona de expansão duas recirculações coladas junto aos cantos das paredes superior e inferior do canal de saída. O comprimento e a intensidade dos vórtices de recirculação aumentam com o crescimento do número de Reynolds, ou seja, com a inércia do escoamento. Para um certo valor do número de Reynolds o escoamento apresenta uma instabilidade que conduz à ocorrência de uma bifurcação. Este fenómeno reflecte-se numa configuração de escoamento assimétrico, com diferentes comprimentos e intensidades de recirculação dos vórtices que se formam nos cantos superior e inferior do canal de saída após a expansão. Dependendo de factores que escapam ao controlo do utilizador, a recirculação maior pode formar-se na parede inferior do canal de saída e a recirculação menor na parede superior (ver Fig. 6.1), ou vice-versa. A importância da investigação do fenómeno de bifurcação do escoamento neste tipo de geometrias está também relacionada com a necessidade de se conseguir entender os mecanismos de instabilidade hidrodinâmica que conduzem à transição do regime laminar para turbulento. Esta geometria, apesar de apresentar uma configuração geométrica simples, permite estudar fenómenos de instabilidades estacionárias que ocorrem no escoamento e cujos resultados poderão depois ser transpostos para geometrias mais complexas.

Neste capítulo apresenta-se um estudo numérico do escoamento viscoelástico através de uma expansão plana com uma razão de expansão de $ER = D/d = 4$. Este trabalho vem no seguimento de estudos anteriormente apresentados em Rocha [128], onde foram feitas simulações para baixos valores de Re ($0.01 \leq Re \leq 35$) considerando a mesma geometria de escoamento. Os resultados aqui apresentados pretendem complementar os resultados previstos em Rocha [128], sendo válidos para uma gama mais ampla de valores do número de Reynolds ($0.01 \leq Re \leq 100$), da elasticidade do fluido ($0 \leq We \leq 100$) e da razão de viscosidade do solvente ($0.3 \leq \beta \leq 1.0$), além de implicarem uma precisão numérica superior.

Os elementos básicos para descrever o escoamento laminar numa expansão plana estão ilustrados na Fig. 6.1, onde se considera um caso de Re moderado, da ordem $O(70)$. O escoamento na entrada e saída são assumidos como completamente desenvolvidos, situando-se a uma distância de L_1 e de L_2 , a montante, e a jusante da expansão, respectivamente.

A forma exacta da fronteira da recirculação poderá ser côncava ou convexa, no canto superior e inferior do canal de saída a jusante da expansão, dependendo se o escoamento é dominado pelas forças viscosas (Re baixos) ou inerciais (Re elevados), respectivamente.

O trabalho apresentado neste capítulo tem como principais objectivos: (i) examinar a influência que cada um dos parâmetros adimensionais (Re , We , β e L^2) pode ter no escoamento, usando como modelo constitutivo o FENE-MCR, e comparar os resultados com os de Oliveira [97], para uma razão de expansão 1:3; (ii) investigar o número de Reynolds crítico que define a passagem do estado simétrico para assimétrico, no escoamento através da expansão plana, para fluido newtoniano e viscoelástico; (iii) analisar o efeito da viscoelasticidade sobre o desenvolvimento do escoamento; (iv) apresentar resultados quantitativos da variação das velocidades, das tensões e da pressão, ao longo da linha central ($y = 0$) para o fluido newtoniano e não newtoniano viscoelástico.

6.2 – Descrição do problema

Na análise deste escoamento laminar considerou-se a geometria bidimensional com o fluido a mover-se da esquerda para a direita através de uma expansão de razão 1:4, onde uma corrente com velocidade média U se processa ao longo de um canal de entrada, que tem uma altura d , e que, em $x = 0$, aumenta subitamente para D , implicando que a velocidade média diminua para U_2 (Fig. 6.1). Devido à alteração abrupta da secção do canal (originada pela expansão do canal de entrada) aparecem, logo após à zona de expansão, duas zonas onde ocorre recirculação do fluido. Este tipo de escoamento é predominantemente de corte junto às paredes dos canais, e extensional (ou elongacional) ao longo da linha central. Os canais de entrada e saída do escoamento têm alturas $d = 1$ e $D = 4$, o que corresponde a uma razão de expansão $ER = D/d = 4$. A entrada do escoamento situa-se a uma distância $L_1 = 20$ a montante da expansão, e a saída a uma distância $L_2 = 50$ a jusante da expansão. Tanto as alturas como os comprimentos dos canais foram normalizados com a altura do canal de entrada d . Uma representação esquemática da geometria está apresentada na Fig. 6.1, onde estão definidas algumas quantidades relevantes.

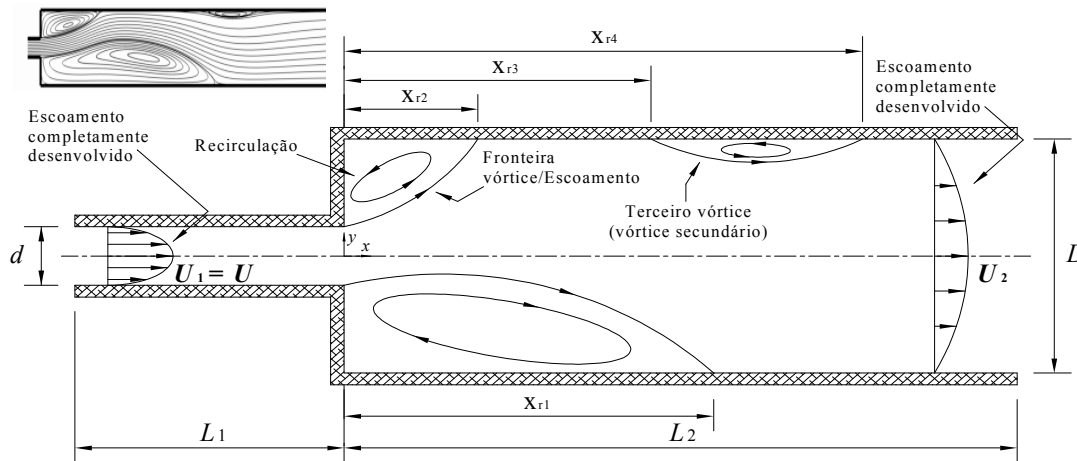


Figura 6.1 – Configuração esquemática do canal com a representação de um escoamento newtoniano assimétrico para um número de Reynolds intermédio. Indicação das linhas de corrente do escoamento newtoniano para $Re = 70$.

Estudos preliminares (Rocha & Oliveira [129,130]) mostraram que os comprimentos dos canais de entrada e de saída são suficientemente longos para garantir que não ocorram efeitos inúteis no escoamento junto à zona de expansão, e que o escoamento volta a ficar completamente desenvolvido a jusante da expansão. A maior parte dos resultados numéricos apresentados neste capítulo foram obtidos utilizando o modelo constitutivo reológico FENE-MCR, apresentando-se também alguns resultados com o modelo FENE-CR. O modelo FENE-MCR apresenta uma simplificação em relação ao modelo FENE-CR proposto por Chilcott & Rallison [31] que consiste em desprezar a derivada substantiva da função de extensibilidade ($D(1/f)/Dt$), ver Capítulo 3. Ambos os modelos constitutivos reológicos são praticamente idênticos quando utilizados em condições estacionárias, podendo ocorrer eventuais diferenças quando o efeito provocado pelo termo desprezado ($\mathbf{u} \cdot \nabla(1/f)$) é importante, por exemplo, num escoamento com forte convecção local.

Tendo em conta as condições de fronteira descritas no Capítulo 5, na entrada do canal, situado a uma distância $x = -20d$ a montante da expansão, foi imposto um perfil completamente desenvolvido para as variáveis u , τ_{xx} e τ_{xy} . O perfil de velocidades é definido de forma parabólico de acordo com a Eq. (6.1), assumindo-se que a velocidade média no canal de entrada é $U = 1$. A condição de escoamento completamente desenvolvido implica que nenhuma das quantidades varia ao longo do canal, ou seja, neste caso essas propriedades são independentes da direcção segundo x . Considerando o sistema de

coordenadas definidas na Fig. 6.1, os perfis impostos como condição de fronteira na secção de entrada são:

$$u(y) = \frac{3}{2}U \left(1 - \left(\frac{y}{d/2} \right)^2 \right) \quad (6.1)$$

$$\tau_{xy} = \eta_p \frac{du}{dy} = - \left(\frac{12\eta_p U}{d} \right) \left(\frac{y}{d} \right) \quad (6.2)$$

A equação que define o perfil de tensões normais τ_{xx} é mais complicada, estando apresentada em Oliveira [97]. O perfil de τ_{xx} depende da taxa de deformação local ($\dot{\gamma}$), do tempo de relaxação do fluido (λ) e do parâmetro de extensibilidade L^2 . Na saída, situada a uma distância $x = +50d$, foram também impostas condições de escoamento completamente desenvolvido. Assumiu-se que as variações longitudinais das variáveis são nulas, excepto a pressão que é extrapolada linearmente a partir dos valores dos volumes de controlo interiores. Estas condições de fronteira aplicadas não afectam as características do escoamento perto da zona de expansão. Nas paredes do canal considerou-se que não existe escorregamento ($u = v = 0$). Uma vez que o problema é bidimensional a direcção segundo z foi definida apenas por uma linha de células, impondo-se condições de simetria nos planos de cima e de baixo.

6.3 – Resultados

Para o estudo do escoamento através da expansão plana é necessário considerar a geometria total, sem assumir simetria ao longo do eixo centrado em x , para se prever as assimetrias no escoamento induzidas por efeitos de inércia ou elásticos. O domínio de escoamento está dividido em quatro blocos, conforme a representação esquemática da Fig. 6.2.

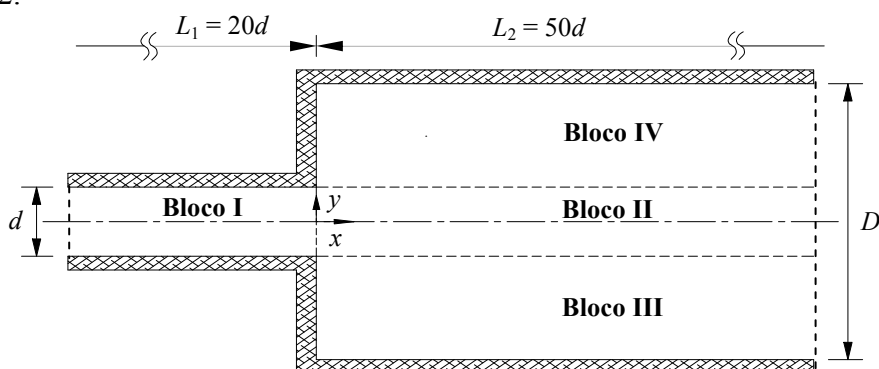


Figura 6.2 – Representação esquemática da expansão plana 1:4 (em blocos).

Foram utilizadas três malhas computacionais para quantificar o grau de refinamento e cujas características mais relevantes estão apresentadas na Tabela 6.1. A Tabela contém o número de células para cada bloco, N_x ao longo da direcção x , N_y ao longo da direcção y e o número total de volumes de controlo ou células (NVC) utilizados para descrever a malha computacional. O número de graus de liberdade (DOF), correspondente a cada uma das malhas, obtém-se do número total de células internas ou volumes de controlo (NVC) após multiplicação pelas seis variáveis: duas componentes da velocidade (u e v); uma componente da pressão (p); e três componentes do tensor das tensões extra (τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{xy}), no caso bidimensional considerado. O tamanho mínimo das células ($\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min}$, normalizados com d) na vizinhança da expansão está também indicado na Tabela 6.1, tal como o factor de expansão ou compressão (f_x) para as células ao longo da direcção x (malha não uniforme). Ao longo da direcção y optou-se por utilizar uma malha uniforme, ou seja, o factor de expansão ou compressão (f_y) é igual a 1, como se vê na Fig. 6.3.

Tabela 6.1 – Características geométricas das malhas computacionais.

	Malha 1		Malha 2		Malha 3	
	$N_x \times N_y$	f_x	$N_x \times N_y$	f_x	$N_x \times N_y$	f_x
Bloco I	40×20	0.9121	80×40	0.9554	160×80	0.9776
Bloco II	100×20	1.0370	200×40	1.0183	400×80	1.0091
Bloco III	100×30	1.0370	200×60	1.0183	400×120	1.0091
Bloco IV	100×30	1.0370	200×60	1.0183	400×120	1.0091
NVC	8800		35200		140800	
DOF	52800		211200		844800	
	$\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min} = 0.05$		$\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min} = 0.025$		$\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min} = 0.0125$	

A maior parte dos resultados foram calculados utilizando a malha média (Malha 2) com 35200 volumes de controlo e 211200 graus de liberdade. A malha fina (Malha 3) e a malha grosseira (Malha 1), com o dobro ou metade dos volumes de controlo da malha média (Malha 2) relativamente a cada uma das direcções x e y , serviram para quantificar os erros de discretização numéricos.

Na Figura 6.3 apresenta-se a malha computacional (malha média – Malha 2) que foi utilizada para os cálculos computacionais. Todas as malhas foram refinadas localmente junto à zona de expansão ($x = 0$, com maior concentração de volumes de controlo), por forma a ser possível resolver numericamente e com precisão adequada os elevados gradientes de tensão que aí ocorrem, devido à variação abrupta da secção transversal da geometria do escoamento

e ao aparecimento de um ponto singular interno (canto reentrante). Segundo a direcção x , o factor de expansão (f_x) é de aproximadamente 1.8% para a Malha 2 ($\Delta x_{i+1} = f_x \Delta x_i$, onde i representa a posição segundo x). Comparado com outros trabalhos, o presente refinamento de malha é mais preciso do que em Oliveira [97] e Rocha [128], que usaram o dobro do espaçamento mínimo aqui considerado, ou seja $\Delta x_{\min} = 0.05d$ e factor de expansão de 3.7%.

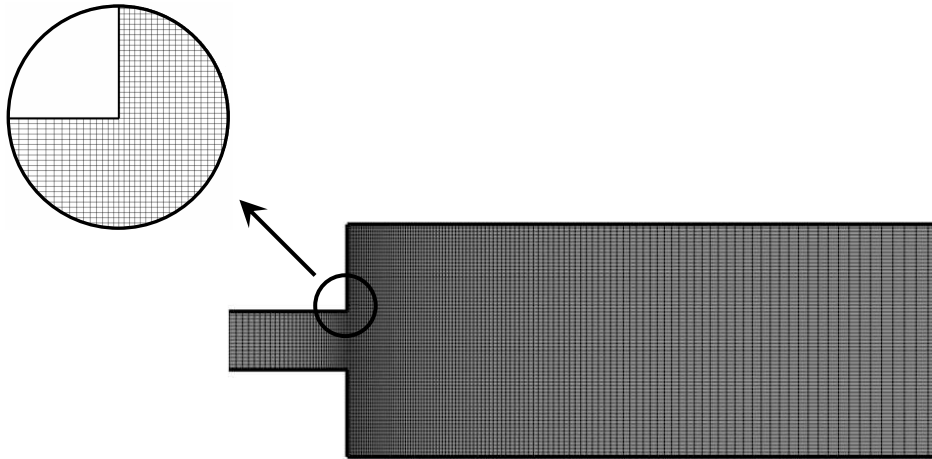


Figura 6.3 – Zoom da malha média (Malha 2, com 35200 volumes de controlo) usada no cálculo computacional ($-2 \leq x/d \leq +10$; $-2 \leq y/d \leq +2$). Detalhe junto ao canto interior.

Na Tabela 6.2 estão indicados os resultados obtidos para o comprimento (X_r) e intensidade (ψ_r) das recirculações nas três malhas computacionais utilizadas. Esses resultados referem-se a três valores de Reynolds ($Re = 10, 20$ e 30) considerando o escoamento newtoniano e não newtoniano viscoelástico ($L^2 = 100$, $\beta = 0.5$ e $We = 2$). No processo de refinamento das malhas, o número de volumes de controlo (ou células), em cada direcção, é duplicado e as razões da progressão geométrica (f_x , compressão ou expansão das células) tomam o valor da raiz quadrada das razões da progressão geométrica da malha anterior. Este procedimento é útil porque permite utilizar a extrapolação de Richardson [127] para estimar a ordem de convergência das aproximações numéricas. Desse modo, pode calcular-se uma solução mais precisa recorrendo aos valores obtidos nas três malhas computacionais com diferentes níveis de refinamento. Assumiu-se que a precisão é de segunda ordem, de acordo com trabalhos apresentados anteriormente utilizando o mesmo código numérico em escoamentos viscoelásticos (Alves *et al.* [11] e Oliveira [94,97]). Os valores obtidos estão apresentados na Tabela 6.2 designados por “Extrapolação de Richardson”, para o comprimento (X_r) e intensidade de recirculação (ψ_r). Para maiores detalhes sobre este cálculo devem ser consultados os trabalhos de Oliveira [97] e Rocha [128].

Tabela 6.2 – Efeito devido ao refinamento de malha para $Re = 10, 20$ e 30 : (a) caso newtoniano; e (b) caso viscoelástico ($We = 2, \beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

	X_r			$\psi_r (\times 10^{-2})$		
	$Re = 10$	$Re = 20$	$Re = 30$	$Re = 10$	$Re = 20$	$Re = 30$
(a) Caso newtoniano						
Malha 1	1.9898	3.6281	5.3732	2.4581	6.5039	8.7488
Malha 2	1.9939	3.6307	5.3744	2.4803	6.5487	8.8118
Malha 3	1.9974	3.6349	5.3788	2.5013	6.5827	8.8462
Extrapolação de Richardson	1.9986	3.6363	5.3803	2.5082	6.5940	8.8577
Erro de discretização (%)	0.23	0.15	0.11	1.11	0.69	0.52
(b) Caso viscoelástico						
Malha 1	0.9006	2.0684	3.6598	0.1551	2.2307	4.9865
Malha 2	0.9570	2.1562	3.7030	0.1877	2.6163	5.8633
Malha 3	0.9645	2.1787	3.7247	0.1989	2.8421	6.2309
Extrapolação de Richardson	0.9670	2.1862	3.7319	0.2026	2.9174	6.3534
Erro de discretização (%)	1.03	1.37	0.77	7.35	10.32	7.71

Na Tabela 6.2 estão indicados os erros de discretização referentes à malha média (Malha 2 – a malha principal utilizada para a generalidade dos cálculos numéricos). Pode constatar-se que o erro de discretização para o comprimento de recirculação (caso em que $Re = 20$) é menor que 0.15% para o fluido newtoniano e menor que 1.37% para o fluido viscoelástico. Em relação às intensidades dos vórtices o erro de discretização é menor que 0.69% para o fluido newtoniano, mas para o fluido viscoelástico este valor sobe para cerca de 10% (modelo FENE-MCR). De facto, comprova-se que os erros de discretização para a intensidade de recirculação (ψ_r) são bastante elevados quando comparados com os erros do comprimento de recirculação (X_r) em cada um dos casos em que foi variado o número de Reynolds. Isto pode ser explicado pela forma de como a intensidade de recirculação é avaliada, requerendo uma integração dos resultados do campo de velocidades, o que tende a diminuir a precisão dos resultados (consultar Alves *et al.* [11]). Por outro lado, os valores de ψ_r são muito pequenos, de cerca de 0.066 para newtoniano e 0.02 para viscoelástico.

Na Figura 6.4(a) está representado graficamente a variação do número total de iterações que foram necessárias para resolver o caso newtoniano nas três malhas computacionais, em condições de $Re = 20$. Verifica-se que o número total de iterações requeridas para a convergência (tolerância de 1×10^{-4} para todas as variáveis), sendo aproximadamente proporcional ao tempo computacional, apresenta uma dependência linear com o refinamento de malha (número de volumes de controlo ou células). A Figura 6.4(b) mostra a evolução do erro do comprimento de recirculação (X_r) à medida que se processa ao refinamento de malha. O erro absoluto de X_r foi calculado usando o valor exacto de X_r

obtido em cada uma das malha menos o valor estimado pela extrapolação de Richardson (Erro $X_r = |X_r(\text{Malha}) - X_r(\text{Extrap. de Richardson})|$). Os símbolos redondos indicam os valores obtidos para o fluido viscoelástico ($We = 2$, $Re = 20$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$), enquanto a recta corresponde ao ajuste que é traçado no programa de gráficos. A inclinação da recta obtida por ajuste aplicando a lei de potência é aproximadamente igual a dois, confirmando-se assim que o método numérico de cálculo para o fluido viscoelástico comporta-se como sendo de 2ª ordem.

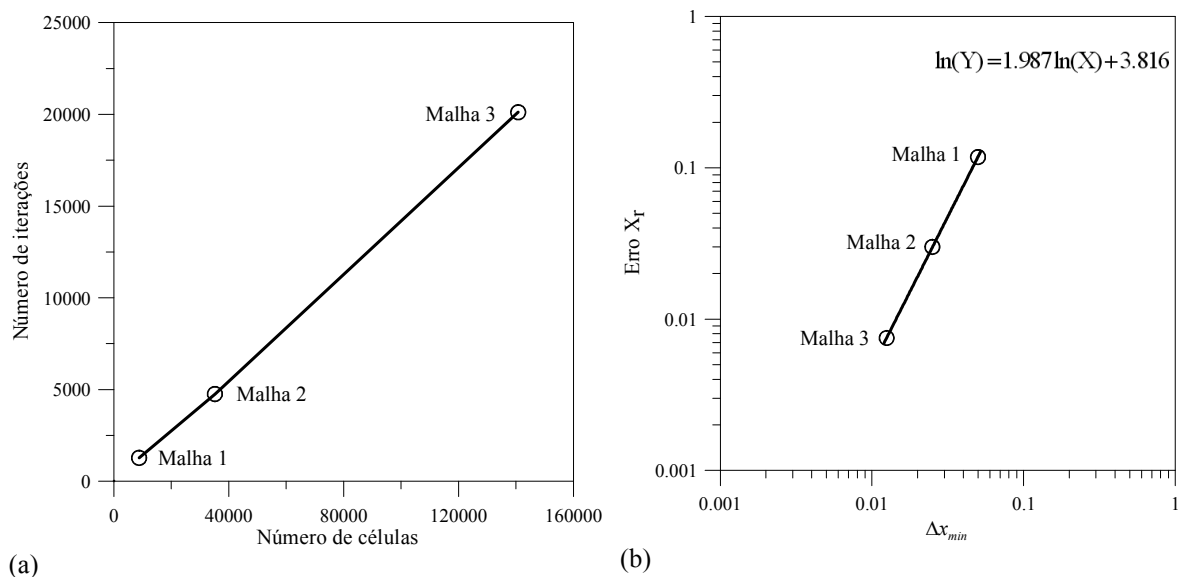


Figura 6.4 – (a) Número de iterações em função do refinamento de malha para $Re = 20$ (caso newtoniano), (b) Erro X_r vs. Δx_{min} para o caso viscoelástico ($We = 2$, $Re = 20$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Na Figura 6.5 faz-se uma comparação das tensões normais τ_{xx} para as três malhas computacionais utilizadas para o cálculo do erro de refinamento. Comprova-se que para escoamento newtoniano as três malhas apresentam resultados muito próximos, conforme indicado na Fig. 6.5(a). No caso em que o escoamento é não newtoniano viscoelástico, para condições de $Re = 20$, $We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$, verifica-se que os resultados são coincidentes para as malhas mais refinadas (Malha 2 e Malha 3), enquanto a malha menos refinada (Malha 1) apresenta uma ligeira diferença.

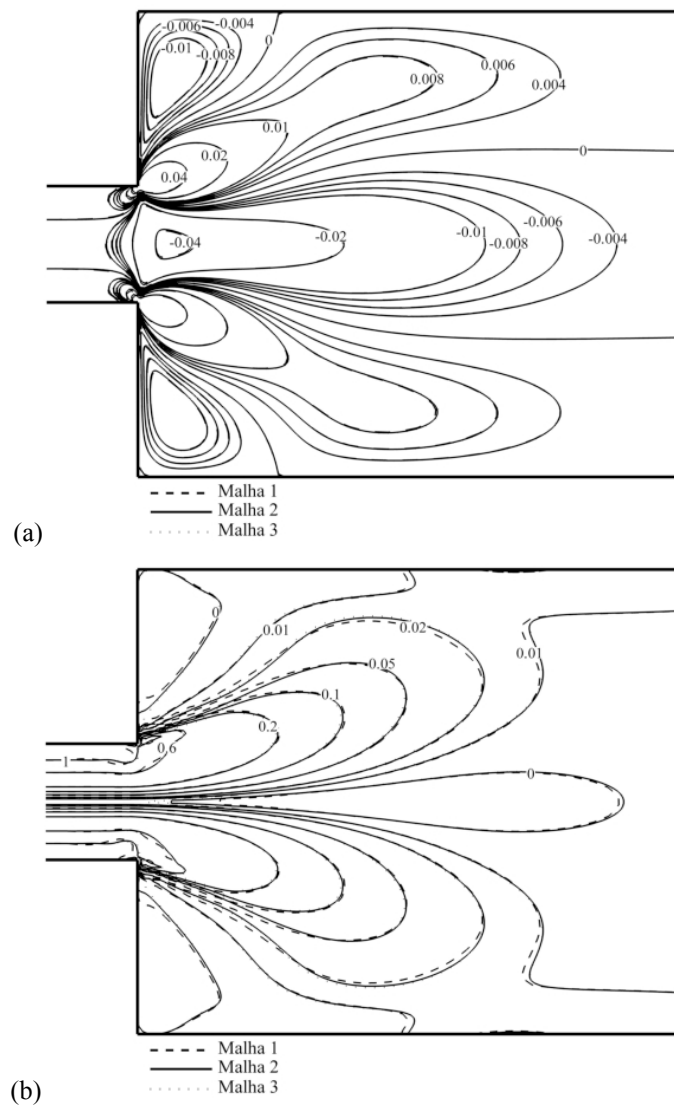


Figura 6.5 – Efeito do refinamento de malha para os contornos das tensões normais ($\tau_{xx} / \rho U^2$) com $Re = 20$: (a) fluido newtoniano; e (b) fluido viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

6.3.1 – Resultados para o caso newtoniano (validação)

No caso do escoamento newtoniano o único parâmetro possível de ser alterado é o número de Reynolds, que dá a razão entre as forças inerciais e viscosas, e foi definido pela Eq. (3.40). Na prática as forças inerciais mantiveram-se constantes (com $\rho = 1$, $U = 1$ e $d = 1$) e foi feita a variação de Re através da viscosidade do fluido. Na Figura 6.6 faz-se uma comparação dos resultados numéricos aqui obtidos com os resultados apresentados graficamente no trabalho de Drikakis [42], para escoamento newtoniano. Seguindo a metodologia apresentada no trabalho de Drikakis [42] foi definido um parâmetro adimensional DX , onde $DX = (X_{r1} - X_{r2})$ corresponde à diferença entre os comprimentos de

recirculação nas paredes inferior (X_{r1}) e superior (X_{r2}). Este parâmetro adimensional será usado para quantificar a existência, ou não, de assimetria no escoamento. Para escoamento simétrico tem-se $DX = 0$, enquanto para escoamento assimétrico $DX \neq 0$, podendo atingir ± 1 (no limite – completamente assimétrico). Quando o escoamento fica assimétrico podem ocorrer duas soluções estáveis: uma solução em que a recirculação maior ocorre na parede inferior e outra menor na parede superior ($DX > 0$); e a solução oposta, com $DX < 0$. Contudo, poderá existir ainda uma terceira solução instável, correspondente ao aparecimento de duas recirculações simétricas. Esta solução pode ser obtida numericamente fazendo a simulação do escoamento em metade do domínio de cálculo. Na prática essa solução não é provável. Drikakis [42] analisou o comportamento do escoamento newtoniano para várias razões de expansão, onde as condições impostas na entrada corresponderam a um escoamento completamente desenvolvido e o número de Reynolds foi definido tendo em conta a velocidade máxima ($U_0 = 1.5U$) e a altura (d) do canal de entrada.

Os resultados apresentados na Figura 6.6 são para um número de Reynolds definido com a velocidade média (U) e a altura (d) do canal de entrada, conforme indicado na Eq. (3.40). Os resultados obtidos apresentam concordância razoável com os resultados de Drikakis [42], excepto para $Re \geq 45$ quando já ocorre bifurcação do escoamento. Para números de Reynolds acima desse valor os resultados revelam alguma discrepância, embora essas diferenças possam resultar da dificuldade em extrair os resultados numéricos a partir dos gráficos apresentados no trabalho de Drikakis [42].

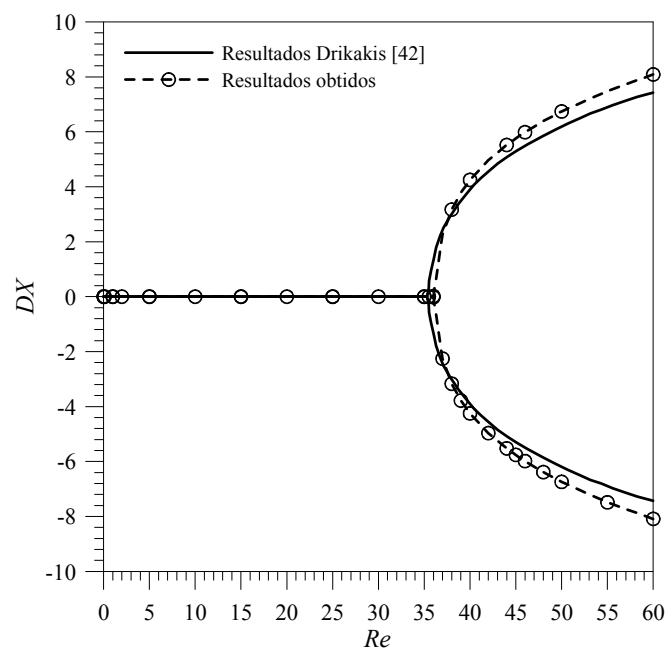


Figura 6.6 – Comparação do parâmetro de bifurcação DX aqui obtido e os resultados previstos por Drikakis [42], para o caso do escoamento newtoniano.

Em termos quantitativos, os resultados apresentados na Figura 6.6 estão contabilizados na Tabela 6.3 em função do número de Reynolds. O comprimento de recirculação é adimensionalizado como $X_r = x_r/d$, e a intensidade é calculada tendo em conta a quantidade de recirculação do escoamento normalizada pelo caudal de entrada ($\psi_r = \psi_r/ Ud$), tomando valores entre 0 e 1.

Em escoamentos a baixos valores de Reynolds, quando se pode desprezar o efeito de inércia e a equação da quantidade de movimento fica linear, sabe-se que os comprimentos da recirculação numa contracção plana são idênticos aos que ocorrem na expansão plana. Isto é válido para $Re = 0$ e para a mesma razão de contracção/expansão. Assim sendo, para um valor de Reynolds muito baixo $Re = 0.01$, pode comparar-se os resultados obtidos na expansão plana 1:4 com os resultados previstos no trabalho de Alves *et al.* [8] para a contracção 4:1. Estes autores desprezaram o efeito de inércia ($Re = 0$) nas simulações e obtiveram um comprimento de recirculação $X_r = 1.5002/2 = 0.7501$. No nosso caso para a expansão plana, com $Re = 0.01$, obteve-se um comprimento de recirculação $X_r = 0.747$, uma diferença de 0.5% com o valor de Alves *et al.* [8]. Relativamente à intensidade de recirculação, Alves *et al.* [8] obtiveram $\psi_r = 1.178 \times 10^{-3}/2 = 0.0589 \times 10^{-2}$ o que dá uma diferença de 0.2% com o resultado aqui obtido ($\psi_r = 0.059 \times 10^{-2}$).

Tabela 6.3 – Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação obtidos para o escoamento newtoniano. Os pontos críticos estão indicados a negrito.

Re	X_{r1}	X_{r2}	X_{r3}	X_{r4}	$\psi_{r1} (\times 10^{-2})$	$\psi_{r2} (\times 10^{-2})$
0.01	0.747	0.747	---	---	0.059	0.059
0.1	0.755	0.755	---	---	0.062	0.062
1	0.837	0.837	---	---	0.103	0.103
5	1.291	1.291	---	---	0.672	0.672
10	1.994	1.994	---	---	2.480	2.480
20	3.631	3.631	---	---	6.549	6.549
30	5.374	5.374	---	---	8.812	8.812
35	6.262	6.262	---	---	9.483	9.483
36	6.449	6.428	---	---	9.597	9.589
37	7.645	5.389	---	---	10.146	9.345
39	8.595	4.812	---	---	10.862	9.282
40	8.929	4.681	---	---	11.203	9.290
45	10.183	4.423	---	---	13.284	9.396
50	11.127	4.386	---	---	15.276	9.512
55	11.903	4.417	---	---	16.814	9.607
60	12.561	4.474	---	---	17.990	9.672
63	12.910	4.515	---	---	18.569	9.700
64	13.018	4.529	13.486	14.050	18.737	9.711
65	13.126	4.544	13.004	14.867	18.909	9.720
70	13.607	4.619	12.512	16.869	19.636	9.745
80	14.405	4.774	12.483	19.806	20.759	9.761
90	15.068	4.926	12.718	22.274	21.763	9.746
100	15.689	5.075	13.058	24.558	22.873	9.703

No trabalho anteriormente apresentado por Rocha [128] observou-se uma concordância qualitativa razoável entre os resultados numéricos previstos e as correlações propostas por Scott *et al.* [137], para uma gama restrita de valores de Reynolds $20 \leq Re \leq 37$. Constata-se que o comprimento de recirculação varia linearmente e a intensidade do vórtice segue uma função exponencial em função do número de Reynolds.

Na Figura 6.7 faz-se uma comparação da distribuição de pressão ao longo da parede inferior e superior obtida para o fluido newtoniano com valores de $Re = 36, 45, 70$ e 100 . Das linhas de corrente do escoamento verificou-se que a recirculação com maior comprimento situa-se na parede inferior, enquanto na parede superior o comprimento de recirculação é mais pequeno. Esta situação depende das condições iniciais impostas no problema. De acordo com a Figura 6.7(a) verifica-se que no limite da simetria do escoamento, com $Re = 36$, a distribuição de pressão é igual ao longo da parede superior e inferior (as linhas a contínuo e a tracejado sobrepõem-se). Pode também constatar-se que a jusante da zona de expansão (para $x/d \geq 0$) a pressão começa inicialmente a aumentar (zona de recuperação de pressão após a expansão plana), atingindo um valor máximo (≈ 0.17) e depois começa a diminuir de forma gradual em direcção à saída do canal. Comparando os valores numéricos obtidos com os resultados previstos por Drikakis [42] (indicados com símbolos triangulares) verifica-se haver boa concordância: os resultados presentes apresentam um declive do decréscimo da pressão igual a 0.33329 na zona entre $x/d = 20$ e 40 , o que está de acordo com o resultado teórico $f = 12/Re = 0.33333$. Quando o escoamento fica assimétrico, a distribuição de pressão é diferente na parede inferior e superior no início do canal de saída, mas, conforme se vai progredindo até à saída, volta a haver coincidência de declive, indicando que o escoamento ficou completamente desenvolvido. Para alguns valores de Reynolds (por exemplo, $Re > 70$, ver as linhas de corrente do escoamento na Fig. 6.22(a) dada mais à frente) existe uma queda de pressão a jusante da zona de recirculação maior, na parede inferior, e a jusante da recirculação mais pequena, da parede superior. Contudo, este comportamento não se verifica à jusante da recirculação que surge mais distante da expansão na parede superior (recirculação secundária) para $Re > 64$ (ver Fig. 6.22(a) para $Re = 70$). Neste caso, a recirculação provoca um deslocamento do escoamento empurrando-o em direcção à parede inferior, que pode ser visto pelas linhas de corrente do escoamento da Fig. 6.22(a) e, conseqüentemente, origina uma queda de pressão na parede oposta (parede superior). Porém, isto não acontece à jusante do comprimento de recirculação secundário que aparece na parede superior, porque o escoamento está fixo na parede inferior e, dessa forma, não é criado um deslocamento do

escoamento que provoque uma queda de pressão. Conclusões similares foram verificadas no trabalho de Drikakis [42].

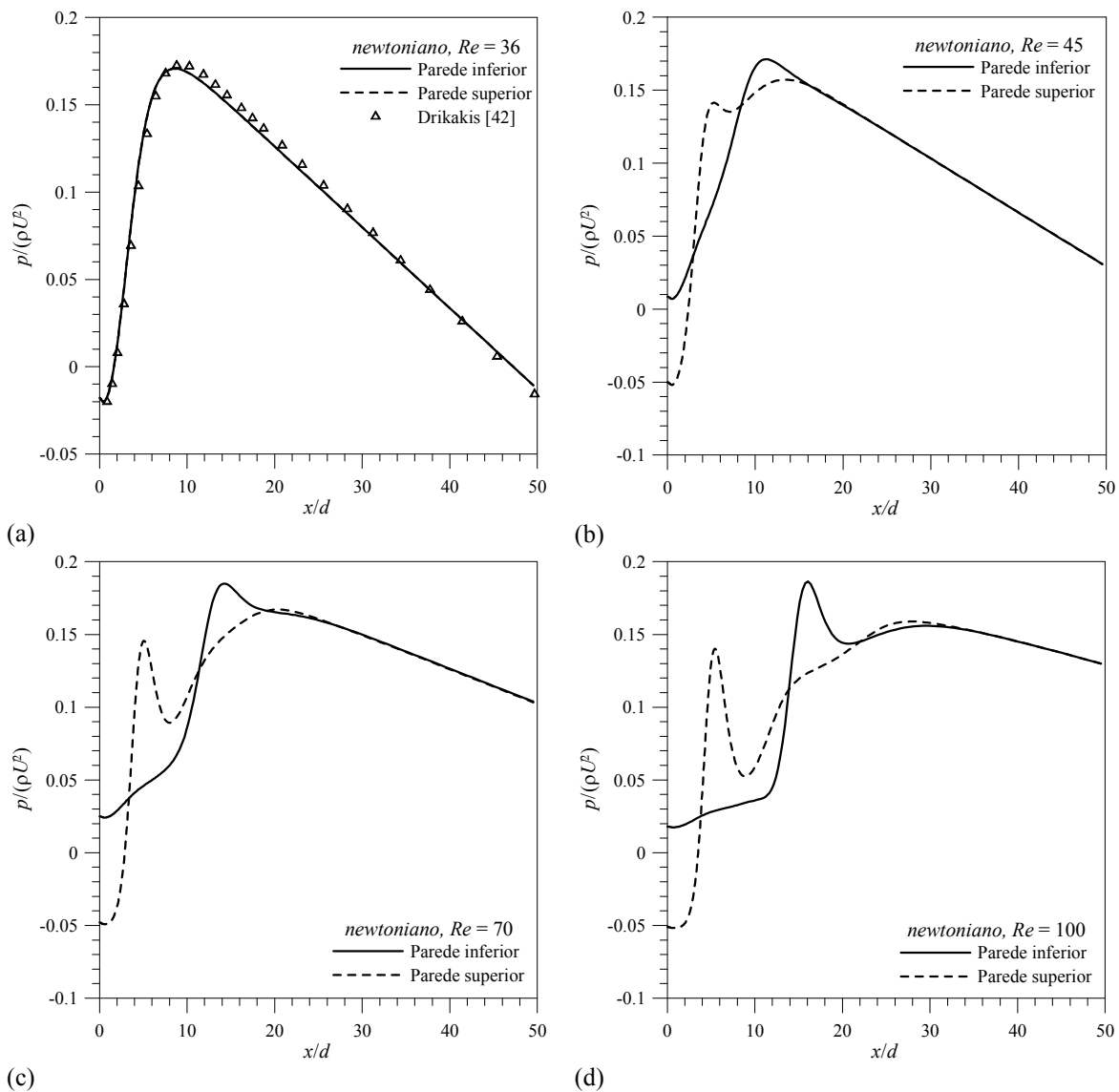


Figura 6.7 – Distribuição da pressão ao longo da parede inferior ($y/d = -2$) e superior ($y/d = +2$) do canal de saída para o caso newtoniano em função do número de Reynolds: (a) $Re = 36$ (limite da simetria); (b) $Re = 45$; (c) $Re = 70$; e (d) $Re = 100$.

Na Figura 6.8 apresentam-se perfis de velocidade axial para vários valores do número de Reynolds, correspondendo às situações em que o escoamento já se encontra assimétrico, para quatro posições transversais no canal de saída, em $x/d = 10, 15, 20$ e 25 . Estas posições estão indicadas esquematicamente na Figura 6.9 com a apresentação das linhas de corrente do escoamento para $Re = 100$ (fluido newtoniano), onde uma recirculação secundária aparece na parede superior (vórtice que surge mais distante da expansão).

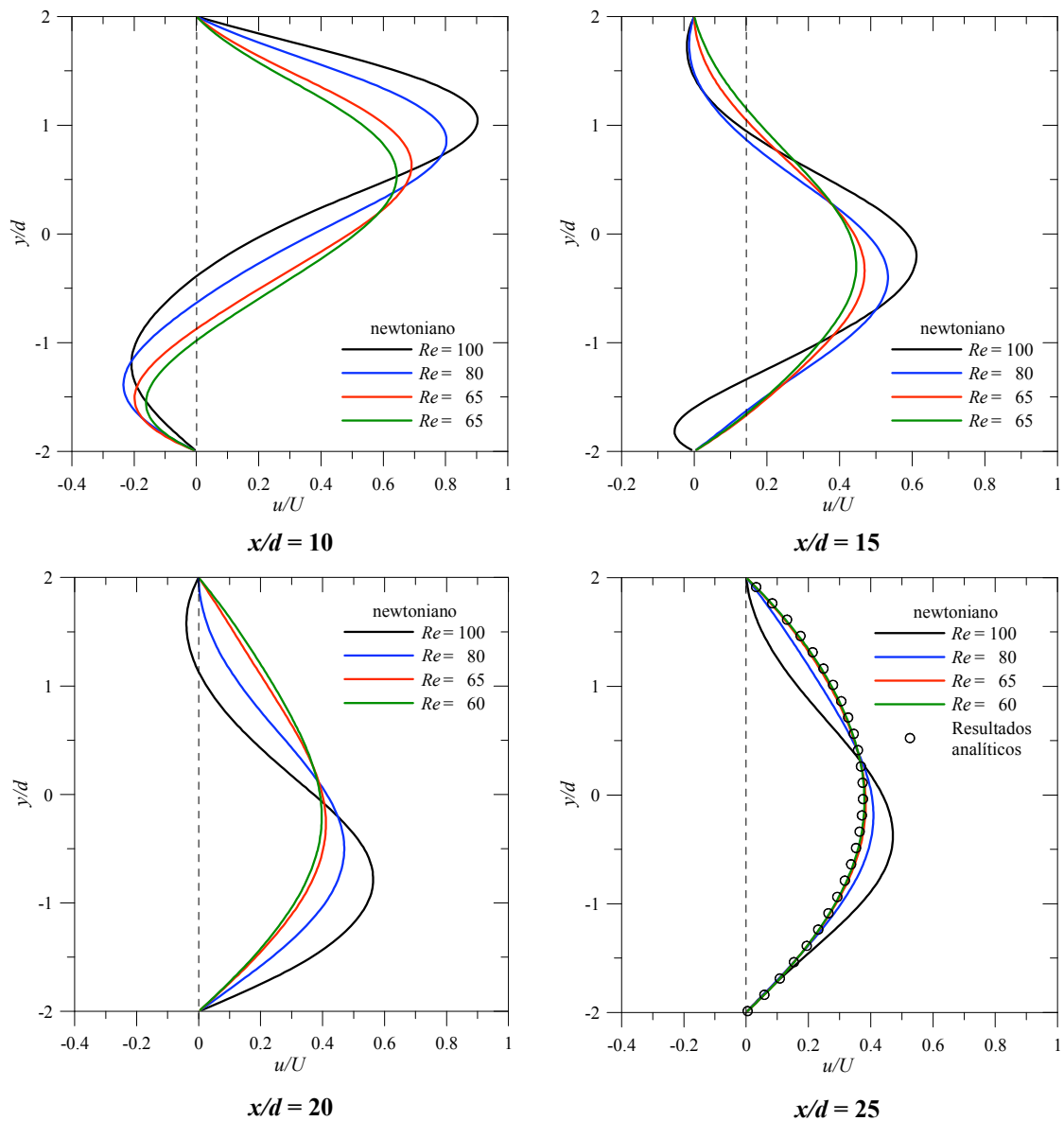


Figura 6.8 – Comparação dos perfis de velocidade axial ao longo do canal de saída para $Re = 60, 65, 80$ e 100 (escoamento newtoniano).

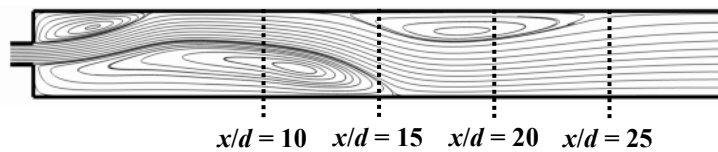


Figura 6.9 – Representação das localizações dos perfis axiais da distribuição de velocidade para $x/d = 10, 15, 20$ e 25 (linhas de corrente para $Re = 100$).

Estas recirculações secundárias só ocorrem para números de Reynolds mais elevados. Nestas situações, o escoamento separa-se da parede superior embatendo na parede inferior e depois retorna à parede superior, de acordo com o que foi descrito anteriormente na análise da distribuição de pressão ao longo das paredes superior e inferior. A Figura 6.8 revela que para $x/d = 25$ e $Re = 60$ e 65 o escoamento fica outra vez simétrico e muito próximo da solução analítica válida para escoamento completamente desenvolvido.

Na Figura 6.10 comparam-se os resultados numéricos obtidos para os comprimentos e intensidades de recirculação do escoamento newtoniano através da expansão plana 1:4 com os resultados numéricos previstos por Oliveira [97], para uma expansão plana 1:3. Estes gráficos mostram que para baixos números de Reynolds o escoamento mantém-se simétrico com comprimentos e intensidades de recirculação iguais em ambas as paredes (inferior e superior) a jusante da expansão. Aumentando o número de Reynolds os comprimentos e intensidades de recirculação crescem, em consequência da intensificação do efeito de inércia, até que se atinge um ponto crítico ($Re_{cr} \approx 36$ (1:4) e $Re_{cr} \approx 54$ (1:3)) a partir do qual o escoamento se torna assimétrico. Uma das recirculações cresce, enquanto a outra contrai, estas duas tendências a fazer aumentar a assimetria do escoamento à medida que aumenta o número de Reynolds. O valor obtido para o número de Reynolds crítico compara bem com dados da literatura Battaglia *et al.* [19] obtiveram $Re_{cr} \approx 35.8$, Drikakis [41] obteve $Re_{cr} \approx 35.3$ e Wahba [155] obteve $Re_{cr} \approx 36$, para o escoamento newtoniano através de uma expansão plana 1:4. Uma segunda bifurcação é visível na Figura 6.10(a), com o aparecimento de uma recirculação secundária a jusante já descrita nesta subsecção, que é definida por um segundo número de Reynolds crítico ($Re_{cr2} \approx 64$). Para a expansão plana 1:3 (Oliveira [97]) este fenómeno não aparece na gama $Re \leq 100$, surgindo no entanto para números de Reynolds mais elevados. Como é sabido, para escoamento newtoniano (Drikakis [42] e Battaglia *et al.* [19]) o número de Reynolds crítico (Re_{cr}) diminui com o aumento da razão de expansão. Isso mesmo é corroborado na Fig. 6.10, onde um aumento de 33% na razão de expansão implica uma diminuição de também 33% no valor crítico de Re .

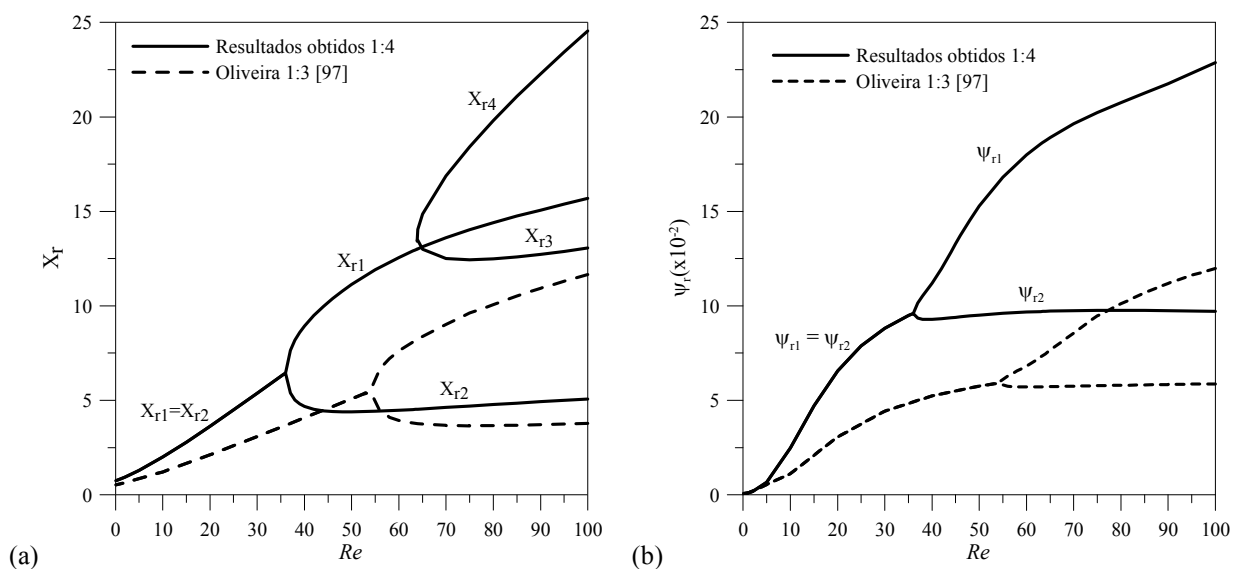


Figura 6.10 – Comparação das características dos vórtices com os resultados de Oliveira [97] numa expansão 1:3, para o fluido newtoniano: (a) comprimentos de recirculação; e (b) intensidades de recirculação.

6.3.2 – Resultados para o caso viscoelástico

No caso do fluido viscoelástico os efeitos elásticos, que não estão presentes no fluido newtoniano, provocam alterações significativas nas características do escoamento. Em particular, os fluidos viscoelásticos quando submetidos a variações da taxa de deformação média impostas pela geometria apresentam efeitos não-lineares, relacionados com a geração de diferenças de tensões normais, de tipo elongacional ou de corte. No caso anterior para o fluido newtoniano (subsecção 6.3.1) apenas foi possível alterar o número de Reynolds em cada corrida computacional, para o fluido viscoelástico existem mais parâmetros independentes que vão influenciar o escoamento. No caso dos modelos constitutivos que serão aqui analisados (FENE-MCR e FENE-CR) existem quatro parâmetros adimensionais independentes: o número de Reynolds (Re); o número de Weissenberg (We); a razão de viscosidades do solvente newtoniano (β); e o parâmetro de extensibilidade (L^2). De forma a investigar os efeitos que resultam da variação de cada um destes parâmetros adimensionais decidiu-se analisá-los em separado, mantendo os restantes fixos.

6.3.2.1 – Efeito devido à elasticidade, We

Para analisar a influência da elasticidade no escoamento utilizou-se o número de Weissenberg definido da seguinte forma $We = \lambda U/d$ (de acordo com a Eq. (3.41)). Como a velocidade média (U) e a altura do canal de entrada (d) são considerados constantes e unitários, apenas será alterado o tempo de relaxação λ do fluido para variar este parâmetro adimensional (We). O tempo de relaxação (λ) corresponde ao tempo de resposta do material viscoelástico após ser retirada instantaneamente a aplicação de uma tensão constante.

Os resultados numéricos previstos dos comprimentos e intensidades de recirculação estão apresentados na Tabela 6.4, para valores do número de Weissenberg entre 0 e 100 ($Re = 40$, $\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$).

Tabela 6.4 – Caso viscoelástico: efeito do número de Weissenberg, para $Re = 40$, $\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$.

We	X_{r1}	X_{r2}	$\Psi_{r1}(\times 10^{-2})$	$\Psi_{r2}(\times 10^{-2})$
0	8.93	4.68	11.20	9.29
1	8.44	4.96	10.50	9.05
2	8.10	5.09	10.28	8.98
3	7.99	5.02	10.30	8.92
4	7.96	4.92	10.38	8.85
5	7.95	4.84	10.45	8.78
10	7.90	4.62	10.60	8.52
15	7.85	4.54	10.59	8.40
20	7.83	4.49	10.55	8.36
30	7.82	4.43	10.49	8.50
40	7.83	4.36	10.44	8.78
50	7.91	4.20	10.16	9.66
60	7.92	4.27	10.11	9.80
70	7.92	4.28	10.10	9.91
80	7.93	4.28	10.10	9.92
90	7.93	4.28	10.10	9.92
100	7.93	4.28	10.10	9.92

Verifica-se que para os elevados valores da concentração do solvente newtoniano β utilizados nestes cálculos (valor típico para fluidos de Boger, de acordo com o trabalho de Rothstein & McKinley [134] que utilizaram uma solução de poliestireno com $\beta = 0.921$) foram conseguidas simulações para altos números de Weissenberg. Todavia, usando valores mais baixos de β nos cálculos, a gama de variação de We ficou mais limitada, não sendo possível atingir valores tão altos como anteriormente se verificou.

Os resultados apresentados na Tabela 6.4 estão qualitativamente ilustrados na Figura 6.11(a), mostrando a variação dos dois comprimentos de recirculação em função do número de Weissenberg para $Re = 40$ ($\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$). Na Figura 6.11(b) estão apresentados os resultados obtidos dos comprimentos de recirculação para $Re = 60$ usando os mesmos parâmetros. Aumentando We desde 0 (caso newtoniano) até 100, o comprimento do vórtice maior (X_{r1}) tende a diminuir em tamanho, enquanto o vórtice mais pequeno (X_{r2}) tende a aumentar de tamanho para uma gama de valores de We baixos, ou mantém-se aproximadamente constante. Isto significa que ambos estes efeitos actuam por forma a diminuir a assimetria do escoamento, mantendo-se todavia essa assimetria em toda a gama de valores de We testados ($0 \leq We \leq 100$).

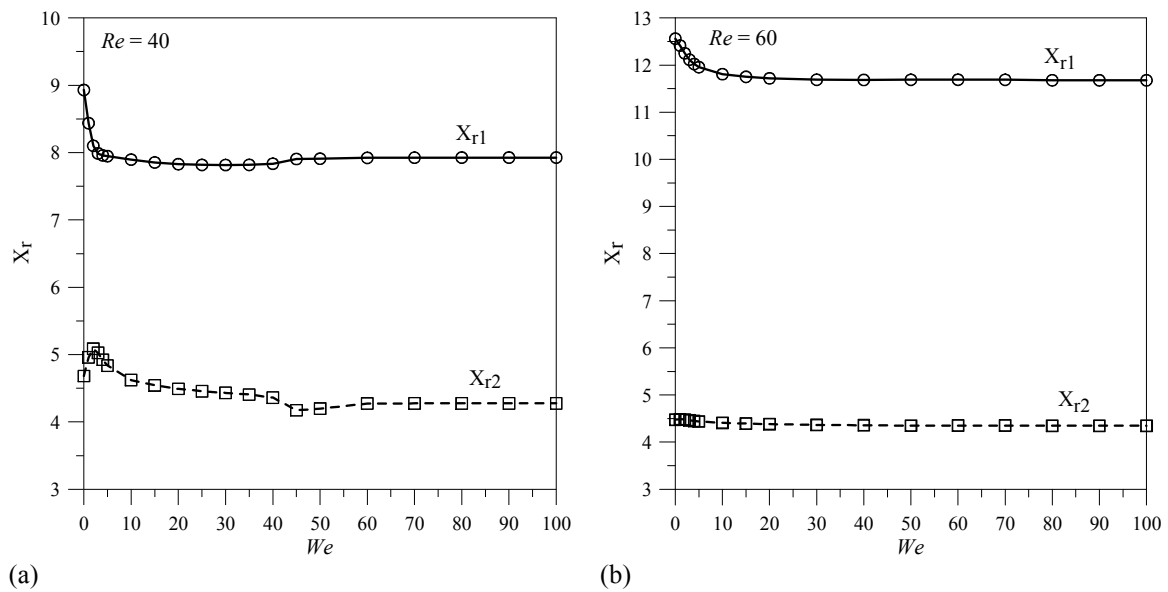


Figura 6.11 – Efeito da elasticidade (We) nos comprimentos dos dois vórtices assimétricos ($\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$) para: (a) $Re = 40$; e (b) $Re = 60$.

As linhas de corrente no caso do escoamento simétrico para $Re = 20$ ($\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) estão representadas na Figura 6.12, variando o número de Weissenberg entre 0 (caso newtoniano) e 10. Como se pode constatar, o efeito da elasticidade é fazer tender a diminuir o tamanho e a intensidade da recirculação. Outro efeito puramente elástico que ocorre à jusante da expansão plana é o aparecimento de um dilatamento lateral das linhas de corrente do escoamento (diz-se que há divergência). Este fenómeno ocorre porque o fluido converge em direcção a linha central antes da expansão, sofrendo depois uma forte divergência (devido à recuperação elástica do estiramento das moléculas poliméricas) após a expansão plana em direcção às paredes do canal de saída (ver Fig. 6.12 para $We = 10$). Devido à convergência/divergência das linhas de corrente do escoamento, ocorre um acréscimo da velocidade (*overshoot* – velocidade acima da média esperada) na linha central antes da expansão e, logo após a expansão, há uma diminuição da velocidade (*undershoot*) devido à separação das linhas de corrente, tal como apresentado na Fig. 6.13. No caso do fluido newtoniano pode verificar-se que não existe qualquer acréscimo (*overshoot*) ou decréscimo (*undershoot*) da velocidade.

No trabalho recentemente publicado por Poole *et al.* [119] foi apresentado um estudo numérico do escoamento viscoelástico através de uma contracção plana 1:3 usando os modelos constitutivos reológicos UCM e Oldroyd-B, tendo sido considerado apenas metade da geometria do escoamento. As simulações efectuadas por estes autores centraram-se no estudo do aparecimento do vórtice de entrada (*lip vortex*) que surge à montante da expansão,

perto do ponto de singularidade, e na convergência das linhas de corrente do escoamento que aí ocorrem em direcção à linha central. Os autores concluíram que a convergência das linhas de corrente que ocorre antes da expansão está relacionada com o aumento do comprimento de recirculação X_r que ocorre após a expansão, tendo maior destaque para elevados números de Weissenberg devido ao efeito provocado pelas tensões normais.

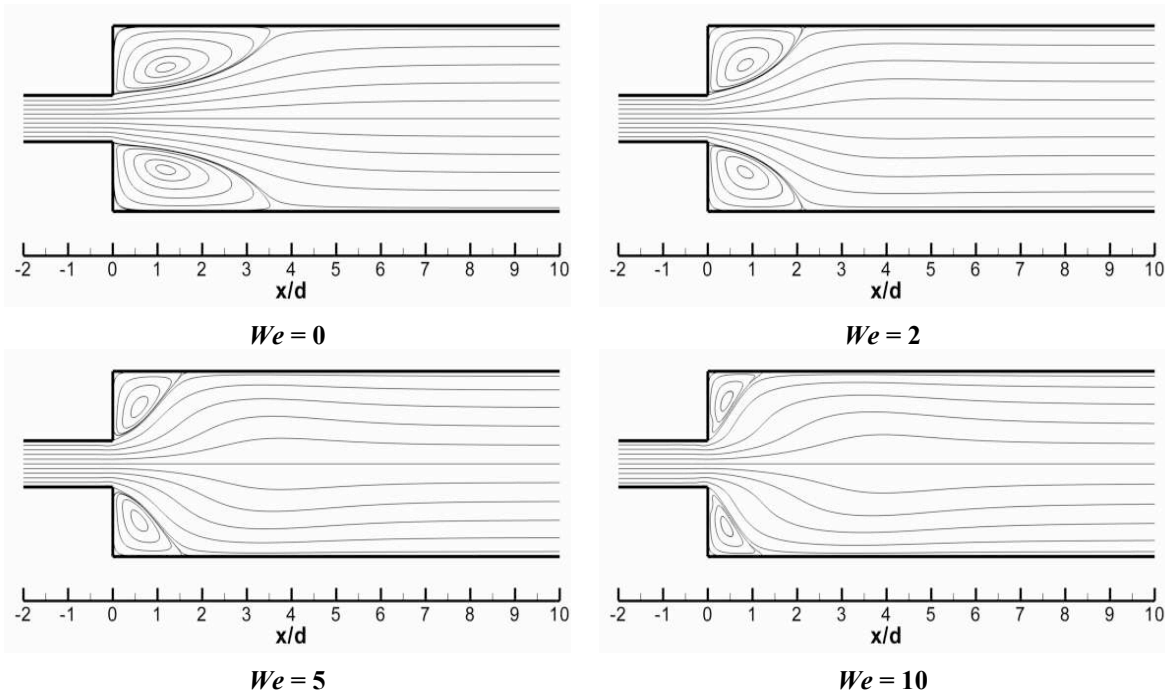


Figura 6.12 – Linhas de corrente do escoamento para vários números de We ($Re = 20$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.5$).

Na Figura 6.13 mostra-se um perfil longitudinal de velocidades u e a correspondente variação do gradiente de velocidade $\partial u/\partial x$ ao longo da linha central para $Re = 20$, com $We = 0$ (fluido newtoniano) e 10 ($\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). Verifica-se claramente que a aceleração do fluido, com $We = 10$, ao longo da linha central está concentrada numa região próxima da entrada da expansão ($x \approx 0$), enquanto a zona onde ocorre a divergência das linhas de corrente fica distribuída ao longo de uma distância maior após a expansão. Este efeito torna-se mais acentuado à medida que se aumenta o número de We , sendo também dependente do número de Reynolds, como se pode verificar na Figura 6.14, que apresenta valores para $We = 2$ e $We = 4$ e que será discutida adiante. Voltando à Figura 6.13(b), e comparando a variação da velocidade ao longo da linha central para ambos os fluidos, verifica-se que os gradientes de velocidade na zona da expansão são substancialmente maiores para o caso viscoelástico relativamente ao newtoniano.

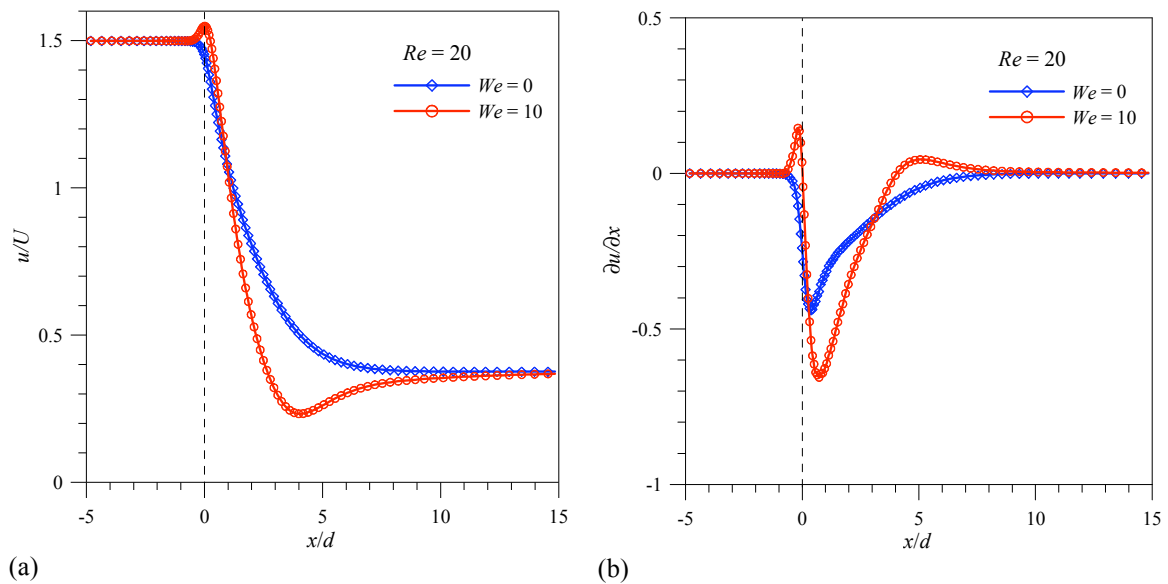


Figura 6.13 – (a e b) Variação do perfil e do gradiente de velocidades ao longo da linha central para $Re = 20$, com $We = 0$ (fluido newt.) e $We = 10$ (fluido viscoelástico, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Na Figura 6.14 apresentam-se gráficos com a variação do acréscimo e decréscimo da velocidade ao longo da linha central em função do número de Reynolds, para um escoamento viscoelástico com $We = 2$ (Fig. 6.14(a)) para dois valores de β ($= 0.5$ e 0.8), e $We = 4$ (Fig. 6.14(b)) para $\beta = 0.5$. A figura mostra que o acréscimo de velocidade acima do valor newtoniano de 1.5 diminui monotonicamente com o aumento de Re , sendo maior para valores mais elevados de We e valores mais baixos de β . Já a variação com Re do decréscimo de velocidade não é monótona: atinge um valor mínimo (maior *undershoot*) para um Re intermédio ($Re \approx 10-15$), tendendo depois para o valor normal newtoniano ($1.5/4 = 0.375$). Destas considerações conclui-se que o acréscimo da velocidade, que ocorre ligeiramente antes da expansão plana, é maior à medida que aumenta o número elástico, descrito da seguinte forma: $E = \lambda\eta_0/\rho d^2 = (1-\beta)We/Re$. Este parâmetro adimensional é definido pelo quociente entre o tempo de relaxação do fluido e um tempo característico dos fenómenos difusivos, sendo por isso independente da velocidade do escoamento. O decréscimo da velocidade, que surge devido à divergência das linhas de corrente do escoamento imediatamente após a expansão plana, atinge um máximo para um determinado valor de E ($\approx 0.08-0.10$). Recentemente, num trabalho numérico de Alves & Poole [13], foi feito um estudo detalhado sobre o comportamento da divergência das linhas de corrente do escoamento numa contração, tendo sido desprezado o efeito de inércia ($Re = 0$). Os resultados destes autores revelaram que a inércia não é essencial para explicar o dilatamento lateral das linhas de corrente do escoamento e, por outro lado, este efeito poderá não ser controlado unicamente

pele número elástico (E). A Figura 6.14 não disputa essas conclusões, mostrando que existe dilatamento mesmo com $Re = 0$, mas o dilatamento é maior para $Re \approx 10-15$.

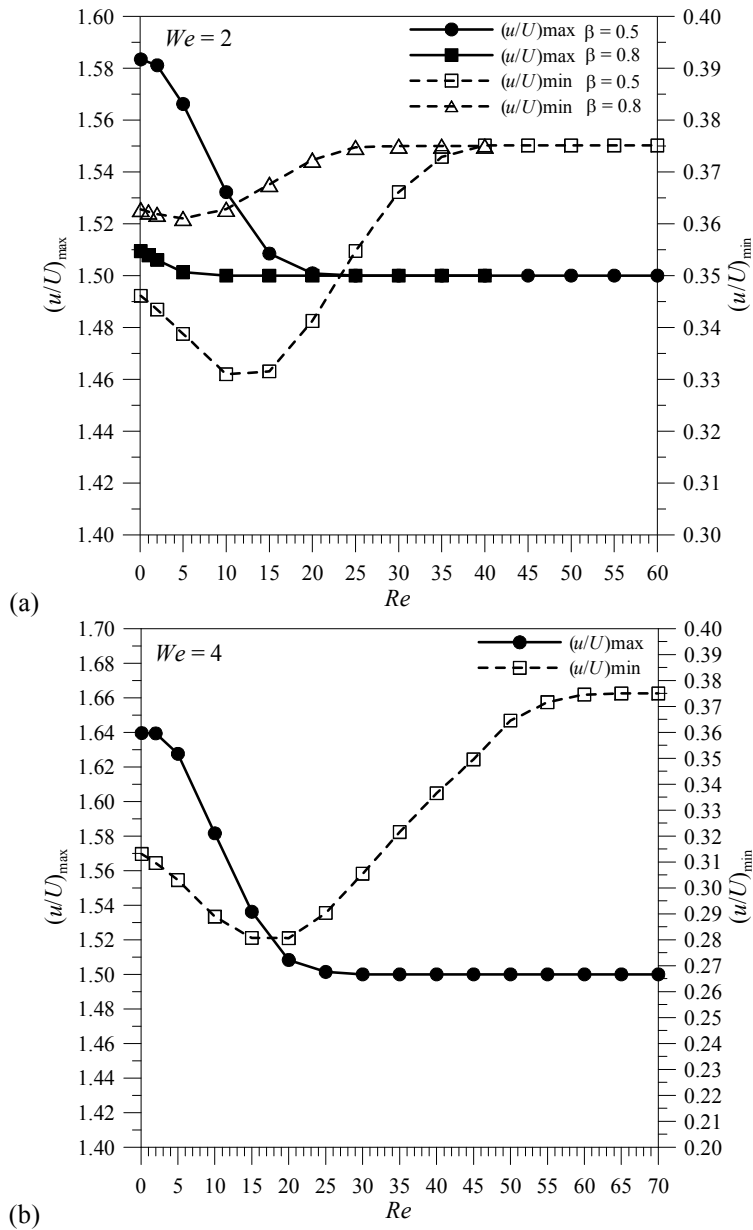


Figura 6.14 – Variação do acréscimo (*overshoot*) e do decréscimo (*undershoot*) da velocidade em função do número de Reynolds para dois valores do número de Weissenberg ($L^2 = 100$): (a) $We = 2$ ($\beta = 0.5$ e 0.8); e (b) $We = 4$ ($\beta = 0.5$).

Voltando à Figura 6.11, observa-se um comportamento estranho na variação do comprimento do vórtice em função do número de Weissenberg, para $Re = 40$ e $We \approx 40$, merecendo aqui algum destaque porque está relacionado com a elasticidade do fluido. De facto, este fenómeno foi já referido em Oliveira [97] (ver Fig. 8 do referido trabalho), não tendo no entanto sido discutido em pormenor. Este efeito não é muito significativo, mas torna-se nítido para $We = 45$ ($\beta = 0.9$ e $Re = 40 \Rightarrow E \approx 0.1$), sendo caracterizado por uma

ligeira, mas visível, diminuição do tamanho do vórtice mais pequeno (X_{r2}) situado na parede superior, acompanhada por um aumento perceptível do tamanho do vórtice maior (X_{r1}) na parede inferior. De forma a clarificar a origem deste pequeno efeito no escoamento e que é visto como uma descontinuidade na variação de X_r com We , a Figura 6.15 apresenta as linhas de corrente do escoamento para o caso referido ($Re = 40$ e $\beta = 0.9$) e para valores crescentes de We . Verifica-se que para valores de $We \geq 45$ ($E \geq 0.1$) o vórtice mais pequeno adjacente à parede superior muda abruptamente de uma forma mais alongada, típica do vórtice newtoniano ($We = 0$), para uma forma fortemente convexa, com a linha de corrente de separação a intersectar agora a parede num ângulo de quase 90° . A razão desta retracção elástica que se verifica no vórtice mais pequeno está relacionada com o fenómeno do dilatamento lateral (ou divergência) das linhas de corrente, tal como já foi atrás referido. Para $Re = 60$ (com $We = 2$, $\beta = 0.9 \Rightarrow E = (1 - 0.9) \times 2/60 = 0.003$) a perturbação na variação do tamanho do vórtice, que ocorria para $Re = 40$, não está presente, como se vê na Fig. 6.11(b). Neste caso, o comprimento do vórtice maior que surge na parede inferior tende a diminuir de tamanho para baixos valores de We , enquanto o vórtice mais pequeno da parede superior é ligeiramente estendido. Assim, ambos os efeitos actuam de forma a diminuir a assimetria do escoamento, mantendo-se todavia a assimetria para todos os valores de We calculados.

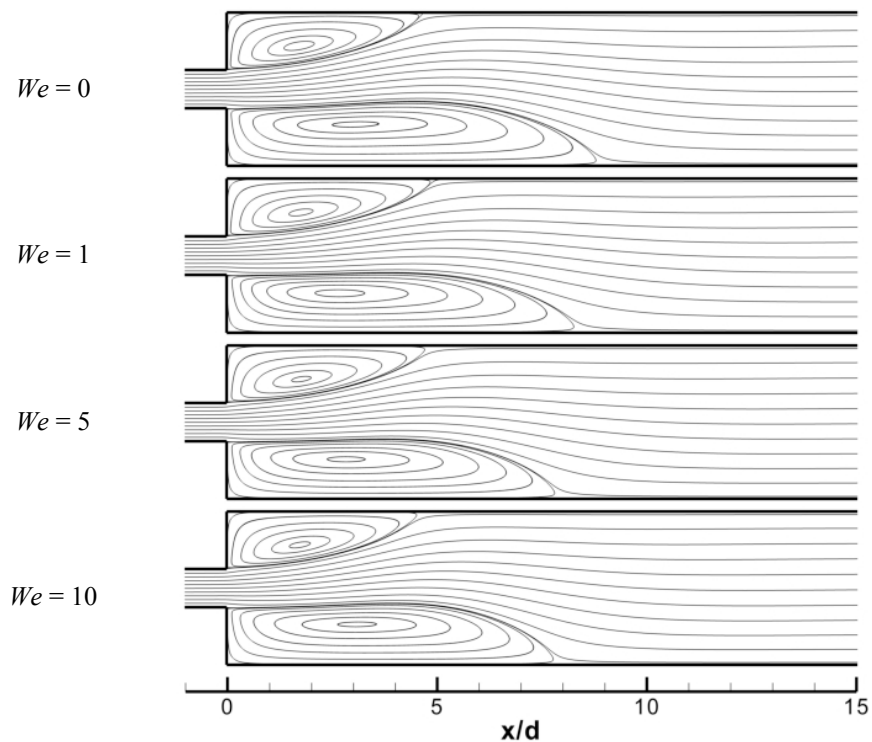


Figura 6.15 – Morfologia do vórtice à medida que aumenta o número de Weissenberg ($\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$) para o número de Reynolds constante ($Re = 40$). Não muda a partir de $We = 45$.

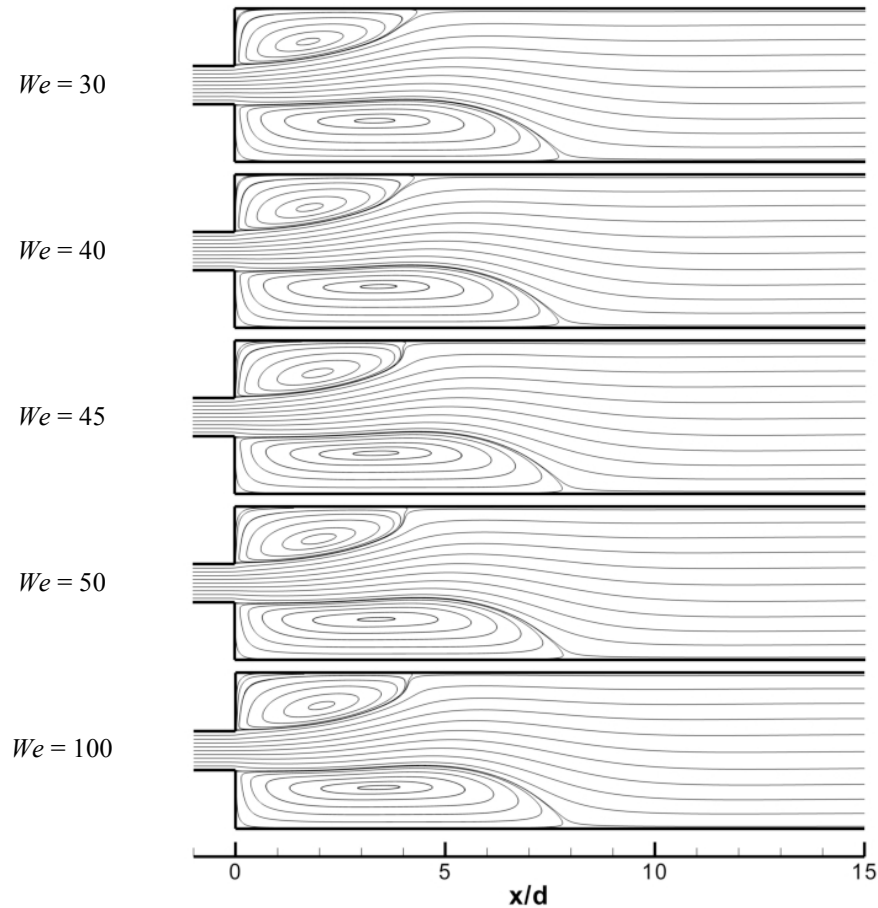


Figura 6.15 (cont.) – Morfologia do vórtice à medida que aumenta o número de Weissenberg ($\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$) para o número de Reynolds constante ($Re = 40$). Não muda a partir de $We = 45$.

6.3.2.2 – Efeito devido à concentração do solvente, β

Este parâmetro adimensional mede a concentração do solvente newtoniano existente na mistura polimérica, sendo definido pela razão entre a viscosidade do solvente (η_s) e a viscosidade total da mistura (η_0), de acordo com a Eq. (3.39). Valores elevados de β ($0 \leq \beta \leq 1$) denotam que a mistura polimérica é diluída. Os resultados obtidos, em termos de comprimentos (X_r) e intensidades de recirculação (ψ_r), estão apresentados numericamente na Tabela 6.5 e são ilustrados graficamente na Figura 6.16, variando o parâmetro β entre 1 (fluido newtoniano) e 0.3, para valores fixos de $Re = 40$, $We = 2$ e $L^2 = 100$.

Tabela 6.5 – Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação para o caso viscoelástico: efeito do parâmetro de concentração β , para $Re = 40$, $We = 2$ e $L^2 = 100$.

β	X_{r1}	X_{r2}	$\Psi_{r1}(\times 10^{-2})$	$\Psi_{r2}(\times 10^{-2})$
1.0	8.929	4.681	11.203	9.290
0.9	8.101	5.086	10.279	8.983
0.8	6.644	6.129	9.189	8.967
0.7	5.993	6.059	8.601	8.639
0.6	5.659	5.693	8.158	8.178
0.5	5.319	5.336	7.662	7.671
0.4	4.979	4.989	7.035	7.041
0.3	4.651	4.659	6.321	6.325

Analisando a Figura 6.16 pode concluir-se que a diminuição de β faz com que o escoamento tenda a ficar novamente simétrico. Com $Re = 40$ e $We = 2$, para valores de $\beta \leq 0.8$ o escoamento é simétrico, enquanto para valores de $\beta > 0.8$ o escoamento fica assimétrico nas mesmas condições. Lembra-se que no caso newtoniano o número de Reynolds crítico é $Re_{cr} \approx 36$, e portanto o valor aqui utilizado é ligeiramente superior. Pode também verificar-se que a assimetria é maior no caso em que o escoamento é newtoniano ($\beta = 1.0$) comparativamente ao caso não newtoniano viscoelástico, ver as linhas de corrente na Fig. 6.17(a). À medida que β vai diminuindo e há uma maior concentração de polímero na mistura, reduz-se a tendência para o aparecimento de instabilidades: a elasticidade do fluido tende a atenuar assimetrias, tendo um papel estabilizador no efeito inercial de Coanda. Com uma definição alternativa do número de Weissenberg baseado no tempo de relaxação do modelo de Maxwell (que é definido como: $\lambda_0 = \Psi_1/2\eta_0$, onde Ψ_1 corresponde ao coeficiente da primeira diferença de tensões normais dado pela Eq. (4.12)), a influência de β pode ser introduzida num número de Weissenberg modificado: $We' = (1 - \beta)We$. Desta forma, para $\beta = 1.0$ tem-se que $We' = 0$ não ocorrendo nenhum efeito devido à viscoelasticidade. Para $\beta < 1.0$ e à medida que β vai diminuindo We' aumenta, e uma maior concentração de polímero na mistura fica associada a maior elasticidade. Para valores de $\beta < 0.3$ começaram a aparecer falhas na convergência numérica, para as condições apresentadas na Tabela 6.5. Este problema de convergência iterativa poderá estar associado a alguma deficiência no método numérico ou, em alternativa, ao facto de fisicamente o escoamento começar a ficar não estacionário (dependente do tempo) ou tridimensional.

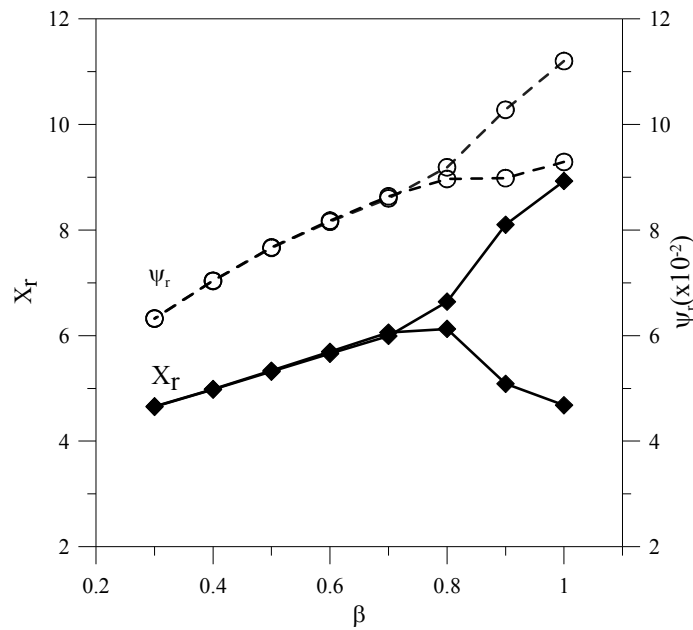


Figura 6.16 – Efeito da concentração do solvente ($\beta = \eta_s / \eta_0$) sobre o tamanho (X_r) e intensidade (ψ_r) dos vórtices ($Re = 40$, $We = 2$ e $L^2 = 100$).

Na Figura 6.17(a) faz-se uma comparação das linhas de corrente do escoamento resultante para os casos newtoniano ($We = 0$ e $\beta = 1.0$) e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$) para $Re = 40$. Apresentam-se também na Figura 6.17(b) as linhas de corrente do escoamento em dois casos viscoelásticos, com $\beta = 0.9$ e 0.6 ($We = 2$, $Re = 40$ e $L^2 = 100$).

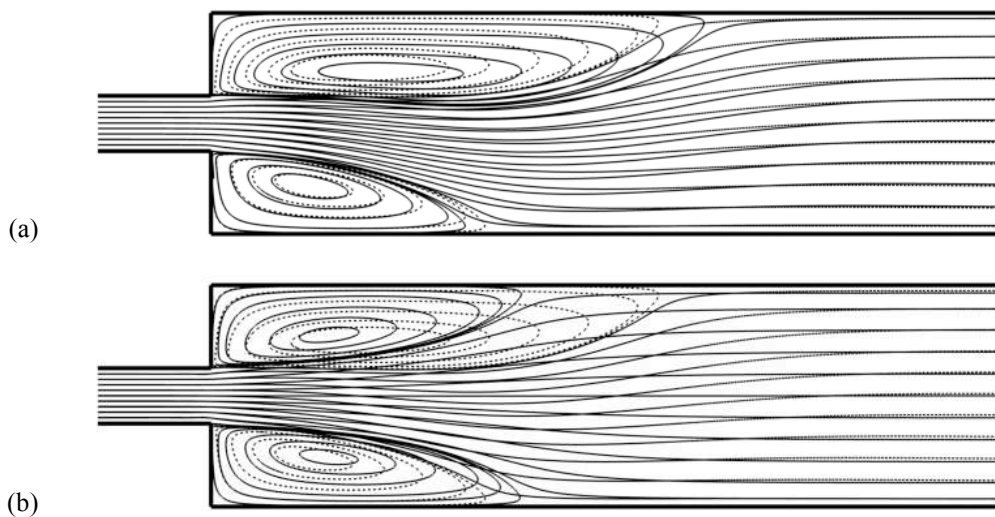


Figura 6.17 – Comparação das linhas de corrente para $Re = 40$: (a) caso newtoniano (linha sólida) e viscoelástico (linha tracejada) ($We = 2$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.9$); e (b) influência da concentração do solvente, $\beta = 0.9$ (linha tracejada) e $\beta = 0.6$ (linha sólida) ($We = 2$ e $L^2 = 100$).

Na Figura 6.17(a) verifica-se que o escoamento newtoniano exibe uma maior assimetria após a expansão, e que esta assimetria diminui quando o fluido possui propriedades viscoelásticas (tal como visto na subsecção 6.3.2.1). Por outro lado, para ambos os casos viscoelásticos, constata-se da Figura 6.17(b) que à medida que β vai decrescendo aumenta a tendência para se atingir a simetria do escoamento, sendo que para $\beta = 0.6$ o escoamento é já visivelmente simétrico.

6.3.2.3 – Efeito devido à extensibilidade, L^2

Este parâmetro adimensional descreve o comportamento extensional do fluido e quanto maior for o seu valor maior será a viscosidade extensional. Tipicamente, $L^2 = 100$ é o valor utilizado em soluções poliméricas diluídas (Oliveira [97] e Rocha *et al.* [128,133]), permitindo ainda extensões moleculares consideráveis antes de se atingir o estado completamente estendido da molécula do polímero. Porém, é interessante avaliar a importância que este parâmetro adimensional possa provocar no comportamento do escoamento. Para isso, foram utilizadas as mesmas condições do caso base da subsecção 6.3.2.2 (com $Re = 40$, $We = 2$ e $\beta = 0.9$) para simular a variação L^2 , entre 100 e 500, numa situação em que o escoamento já se encontra assimétrico. Na Tabela 6.6 apresentam-se os resultados previstos para os comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação do escoamento viscoelástico, para as condições atrás enunciadas, estando estes resultados ilustrados graficamente na Fig. 6.18.

Tabela 6.6 – Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação para o caso viscoelástico: efeito do parâmetro de extensibilidade L^2 , para $Re = 40$, $We = 2$ e $\beta = 0.9$.

L^2	X_{r1}	X_{r2}	$\psi_{r1} (\times 10^{-2})$	$\psi_{r2} (\times 10^{-2})$
100	8.101	5.086	10.280	8.983
200	7.945	5.287	9.858	8.731
300	7.899	5.383	9.605	8.525
400	8.038	5.210	9.558	8.256
500	8.208	4.973	9.537	7.975

Os resultados da Figura 6.18 mostram que as intensidades dos vórtices diminuem ligeiramente quando se aumenta a viscosidade extensional. Em relação aos comprimentos de recirculação, a variação com o parâmetro de extensibilidade não é monótona, mas é pouco

significativa. Em suma, para valores superiores a 100 a influência do parâmetro L^2 no escoamento é mínima.

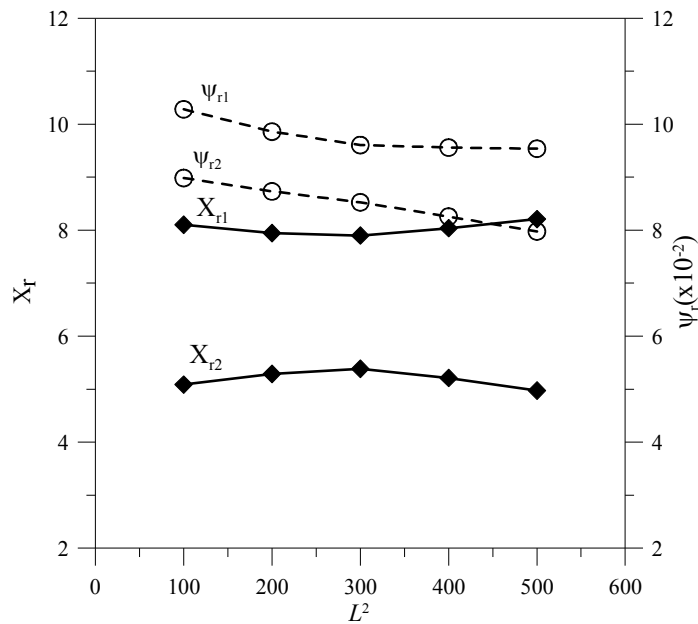


Figura 6.18 – Efeito do parâmetro de extensibilidade L^2 sobre os tamanhos (X_r) e intensidades (ψ_r) dos vórtices ($Re = 40$, $We = 2$ e $\beta = 0.9$).

6.3.2.4 – Efeito devido à inércia, Re

Nesta subsecção faz-se a análise dos efeitos provocados pelo aumento do número de Reynolds sobre as características do escoamento não newtoniano viscoelástico, para os valores típicos utilizados de $L^2 = 100$ e $We = 2$, usando um valor moderado para a concentração do solvente newtoniano $\beta = 0.5$. Como é sabido, o número de Reynolds mede a razão entre as forças viscosas e inerciais e é o parâmetro essencial a controlar a ocorrência da bifurcação de Coanda em escoamento newtoniano. Os resultados numéricos obtidos estão indicados na Tabela 6.7 e são ilustrados graficamente na Fig. 6.19. Na Figura 6.19(a) apresentam-se os comprimentos dos vórtices na parede superior e inferior, após a zona de expansão, em função do número de Reynolds. A variação das respectivas intensidades de recirculação é apresentada na Fig. 6.19(b). Pode observar-se na Tabela 6.7 algumas pequenas diferenças entre os valores dos comprimentos de recirculação para baixos números de Re , valores esses que deveriam ser coincidentes mas que estão dentro de uma incerteza numérica aceitável ($\approx 0.2 - 2.0\%$).

Tabela 6.7 – Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação para o caso viscoelástico: efeito de inércia ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

Re	X_{r1}	X_{r2}	X_{r3}	X_{r4}	$\psi_{r1} (\times 10^{-2})$	$\psi_{r2} (\times 10^{-2})$
0.01	0.605	0.619	---	---	0.024	0.026
0.1	0.607	0.621	---	---	0.024	0.027
5	0.749	0.747	---	---	0.062	0.062
10	0.957	0.955	---	---	0.188	0.187
20	2.156	2.158	---	---	2.616	2.615
30	3.703	3.708	---	---	5.863	5.868
40	5.316	5.331	---	---	7.677	7.686
42	5.646	5.666	---	---	7.942	7.954
44	5.970	6.006	---	---	8.179	8.200
45	6.128	6.166	---	---	8.286	8.310
46	6.345	6.296	---	---	8.426	8.399
47	7.363	5.490	---	---	9.179	8.340
48	7.891	5.161	---	---	9.705	7.942
50	8.627	4.849	---	---	10.647	7.884
60	10.835	4.564	---	---	14.574	8.022
70	12.272	4.651	---	---	17.010	8.198
73	12.619	4.691	---	---	17.537	8.239
73.5	12.673	4.698	13.387	13.533	17.618	8.245
74	12.729	4.705	12.937	14.179	17.694	8.250
75	12.834	4.719	12.637	14.802	17.850	8.264
80	13.322	4.794	12.215	16.767	18.526	8.313
85	13.751	4.871	12.154	18.304	19.089	8.352
90	14.137	4.948	12.213	19.654	19.574	8.384
100	14.829	5.100	12.466	22.151	20.546	8.418

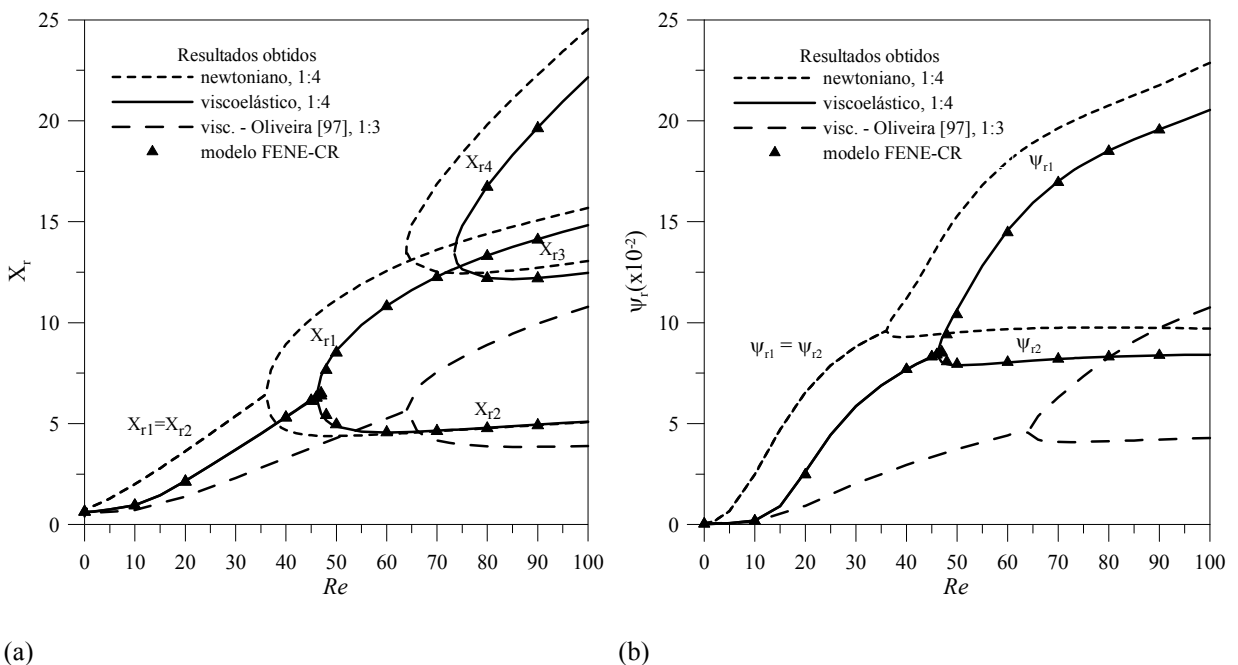


Figura 6.19 – Comparação das características dos vórtices em função do número de Reynolds para o fluido newtoniano e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$), e resultados viscoelásticos de Oliveira [97] para a expansão plana 1:3: (a) comprimento dos vórtices; e (b) intensidade dos vórtices. Resultados obtidos para o modelo FENE-CR são apresentados por triângulos.

Comprova-se da Figura 6.19 que, para o caso do fluido não newtoniano viscoelástico, os efeitos provocados pelo aumento do número de Reynolds sobre o escoamento são semelhantes aos que foram descritos na subsecção 6.3.1, quando se estudou o caso newtoniano. Numa primeira análise constata-se que devido à presença da viscoelasticidade a bifurcação do escoamento é retardada quando comparada com o fluido newtoniano. De resto, o desenrolar dos vários padrões de escoamento é semelhante. Para valores de Reynolds abaixo de um certo valor crítico ($Re_{cr} \approx 46$) o escoamento mantém-se estável e simétrico, enquanto para valores superiores o escoamento fica assimétrico, com o aparecimento de uma recirculação maior e outra mais pequena, mantendo-se também estável. Para valores de Re acima de 73.5 aparece uma recirculação adicional na parede superior do canal de saída. Na Figura 6.22 são comparadas as linhas de corrente do escoamento para os casos newtoniano e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) para valores crescentes do número de Reynolds, sendo possível destacar claramente os vários padrões de escoamento referidos acima.

A Figura 6.19 inclui os resultados obtidos em Oliveira [97] para escoamento viscoelástico através de expansão com razão 1:3. Os resultados revelam que reduzindo a razão de expansão de 1:4 para 1:3 ocorre um atraso no ponto crítico de transição do regime simétrico para o regime assimétrico estacionário, de forma análoga ao observado no caso newtoniano. Os tamanhos e intensidades das recirculações são menores para a expansão de razão 1:3. Por fim, a Figura 6.19 ilustra o efeito do modelo constitutivo FENE-MCR versus FENE-CR. As diferenças entre os modelos FENE-MCR e FENE-CR foram discutidas no Capítulo 3 quando se apresentaram as equações constitutivas. Os símbolos triangulares apresentados na Figura 6.19 correspondem aos resultados obtidos por aplicação do modelo FENE-CR e observa-se que as diferenças entre os modelos (FENE-MCR e FENE-CR) são mínimas, ocorrendo para valores de Reynolds baixos e moderados, em torno do ponto crítico de bifurcação. Para valores superiores as diferenças não são significativas. Em simulações anteriores, onde foram desprezados os efeitos inerciais do escoamento, os resultados revelaram que os dois modelos produzem resultados muito próximos. Assim, a maior parte das conclusões apresentadas neste capítulo com o modelo FENE-MCR podem, de uma forma geral, ser estendidas para o modelo FENE-CR.

Para baixos números de Reynolds pode também fazer-se uma comparação dos resultados obtidos com os resultados apresentados por Cartalos & Piau [29], Szabo *et al.* [144] e Rothstein & McKinley [134], através de uma contracção/expansão 4:1:4. Estes autores apresentaram um estudo experimental [29,134] e numérico [144] para o escoamento viscoelástico de um fluido de Boger através de uma contracção/expansão axissimétrica, com

particular atenção no escoamento que ocorre à montante da contracção. Para baixos números de Weissenberg os resultados são independentes do tipo de escoamento, ou se ocorre numa expansão ou numa contracção. No trabalho de Rothstein & McKinley [134] foi medido o tamanho do vórtice e as correspondentes coordenadas do centro (posição do vórtice central), de acordo com a Fig. 6.20. Comparando os resultados previstos por estes autores com os resultados numéricos obtidos usando o modelo FENE-CR para $We = 0.5, 1.0$ e 1.5 (com $Re = 0.01, L^2 = 225$ e $\beta = 0.921$) verifica-se que estão em concordância, conforme apresentado na Fig. 6.21.

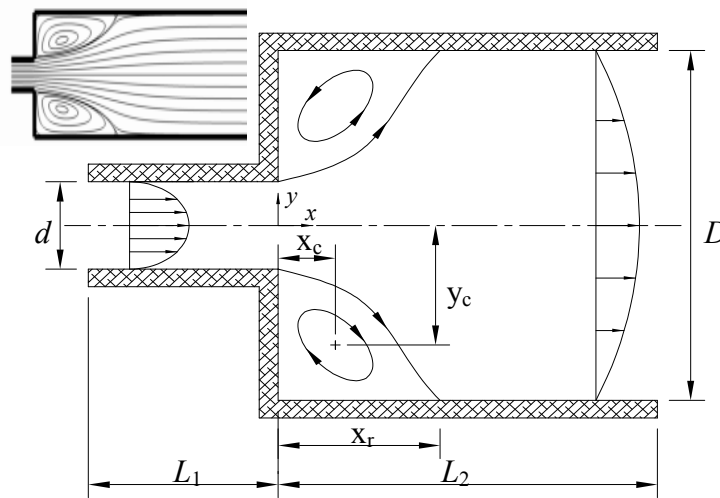


Figura 6.20 – Representação esquemática da expansão plana de escoamento simétrico newtoniano para um número de Reynolds moderado. Linhas de corrente do escoamento newtoniano para $Re = 20$.

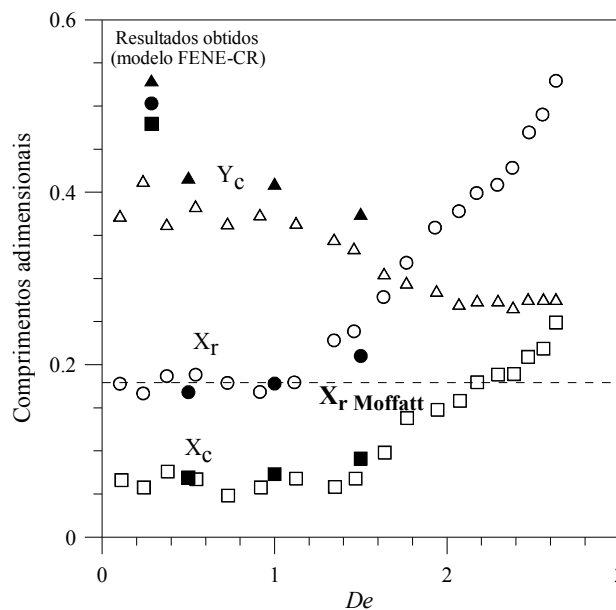


Figura 6.21 – Comparação dos resultados obtidos no caso simétrico do vórtice inferior na expansão plana 1:4 (símbolos fechados, modelo FENE-CR para $Re = 0.01, L^2 = 225$ e $\beta = 0.921$) com os resultados de Rothstein & McKinley [134] previstos à montante da contracção/expansão axissimétrica 4:1:4: (○) comprimentos de recirculação, $X_r = x_r/D$; (Δ) posição axial do vórtice central, $Y_c = y_c/D$; e (□) posição longitudinal do vórtice central, $X_c = x_c/D$.

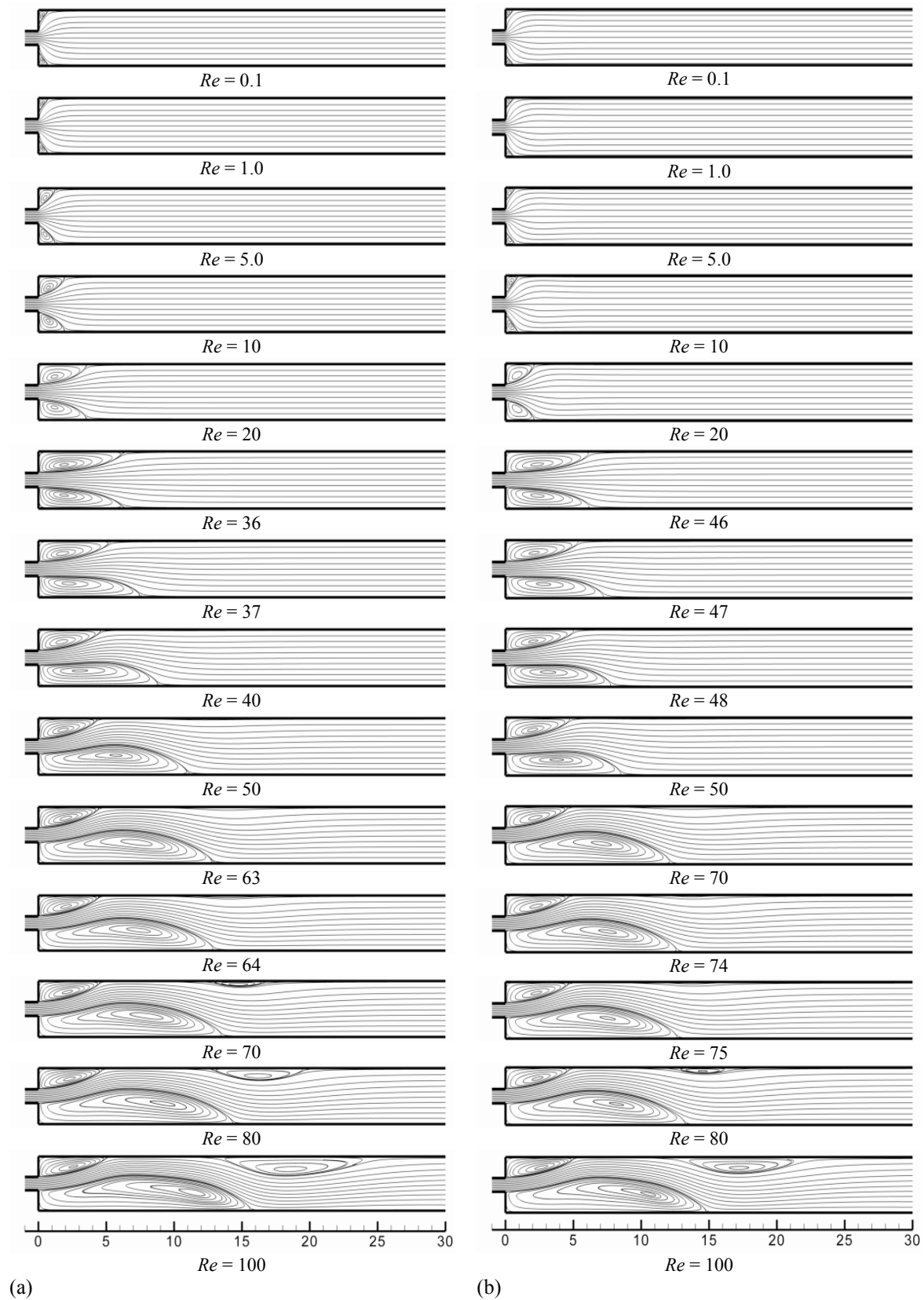


Figura 6.22 – Linhas de corrente para vários números de Re : (a) fluido newtoniano; e (b) fluido viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Na Figura 6.23 apresenta-se o diagrama de bifurcação (variação do parâmetro DX em função do número de Reynolds) para o fluido viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) e faz-se a comparação com o caso newtoniano.

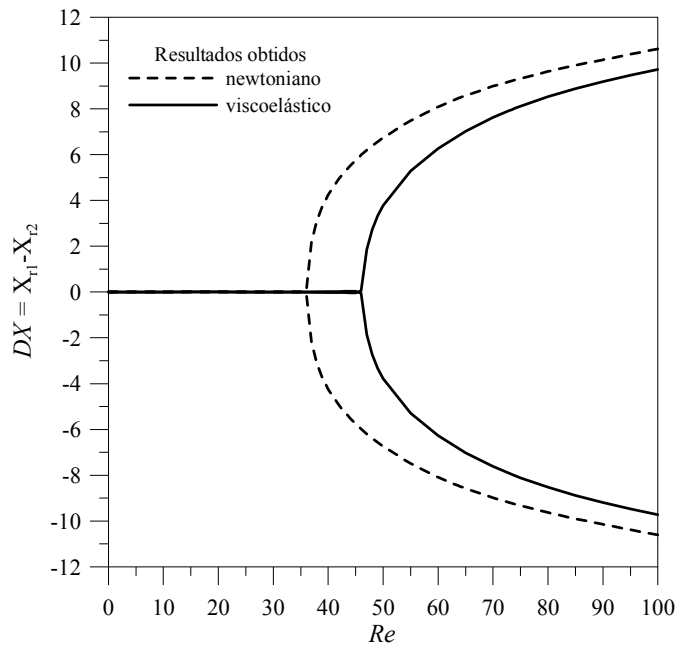


Figura 6.23 – Diagrama de bifurcação DX , para o caso do escoamento newtoniano e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) na expansão plana 1:4.

Como se pode constatar do gráfico da figura anterior (Fig. 6.23) existe um desfasamento induzido pelo efeito viscoelástico relativamente aos comprimentos de recirculação que se formam após a zona de expansão. Os resultados revelam que o ponto de transição entre os estados simétrico e assimétrico, definido pelo número de Reynolds crítico, é de $Re_{cr} \approx 36$ para o fluido newtoniano e $Re_{cr} \approx 46$ para o fluido viscoelástico, com $We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$. Isto significa que a presença de características elásticas no fluido provoca a tendência para estabilizar o escoamento, atrasando o ponto crítico de transição para o estado assimétrico. Os comprimentos e intensidades dos vórtices são mais pequenos para o fluido viscoelástico quando comparados com o fluido newtoniano (ver Fig. 6.22). Esta conclusão pode ser observada para toda a gama do número de Reynolds, desde 0.1 até 100, como se vê na Fig. 6.22(a) e (b) onde estão apresentadas as linhas de corrente para o fluido newtoniano e viscoelástico, respectivamente. Esta figura ilustra também o fenómeno da divergência das linhas de corrente que ocorre no escoamento após a zona de expansão para valores do número de Reynolds moderados ($Re \approx 5 - 20$), e que foi discutido anteriormente.

Seguidamente, discutem-se algumas características relativas aos campos de tensões que ocorrem na zona da expansão. A Figura 6.24 mostra as linhas de contorno adimensionais para a primeira diferença de tensões normais ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$) e a Figura 6.25 mostra as tensões de corte ou tangenciais (τ_{xy}), quando se aumenta o número de Weissenberg ($We = 0$ (fluido newtoniano), 2, 5 e 10), para $Re = 20$ ($\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). As tensões foram normalizadas com um factor de escala convectivo, ρU^2 , referido no Capítulo 3, em vez da escala difusiva $\eta_p U/d$. A adimensionalização entre estes dois tipos de adimensionalização relaciona-se como: $\tau_{ij}/(\eta_p U/d) \equiv (\tau_{ij}/\rho U^2) \times Re/(1-\beta)$.

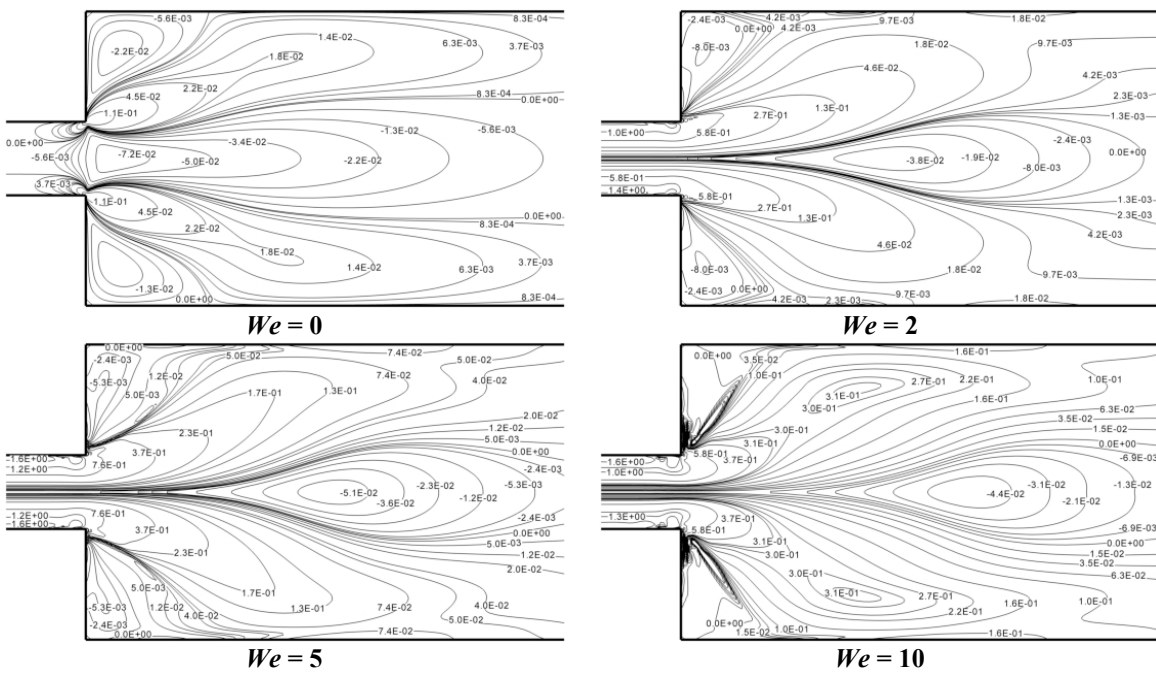


Figura 6.24 – Linhas de contorno adimensionais para a primeira diferença de tensões normais (N_1) com o aumento do número de Weissenberg ($Re = 20, \beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

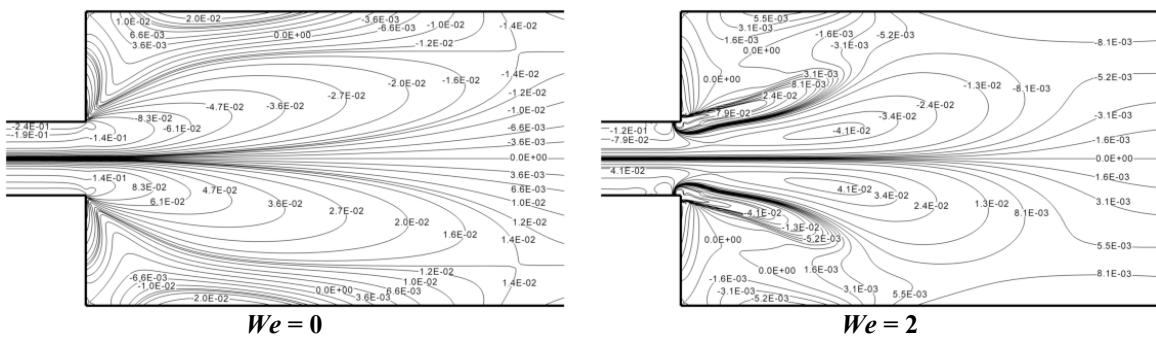


Figura 6.25 – Linhas de contorno adimensionais das tensões de corte (τ_{xy}) com o aumento do número de Weissenberg ($Re = 20, \beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

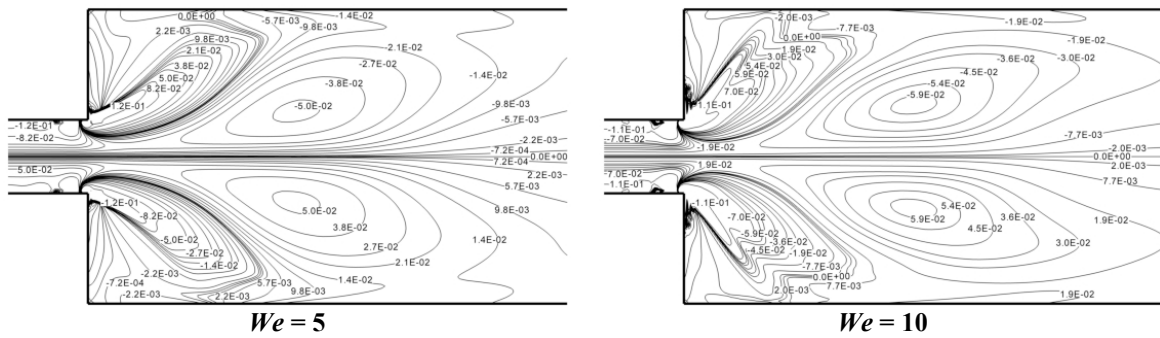


Figura 6.25 (cont.) – Linhas de contorno adimensionais das tensões de corte (τ_{xy}) com o aumento do número de Weissenberg ($Re = 20, \beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Analisando as Figuras 6.24 e 6.25 pode constatar-se que existe uma maior concentração de tensões junto aos cantos e na zona de entrada da expansão para o fluido viscoelástico, quer sejam tensões normais ou de corte. Por outro lado, os campos de tensão mantêm-se simétricos, demonstrando que para baixos números de Reynolds ($Re < Re_{cr}$) o fenómeno de bifurcação, no sentido da quebra de simetria, não está presente no escoamento. Outro pormenor que se pode destacar refere-se à deslocação da zona das tensões máximas, em módulo, que ocorrem à jusante da expansão plana (ver Fig. 6.24 para $We = 2$). Esse efeito resulta dos termos convectivos presentes na equação das tensões, que tendem a arrastar a zona das tensões máximas na direcção do escoamento, mesmo sendo o número de Reynolds constante, como é o caso em questão. Por último, pode verificar-se a progressiva concentração de tensões em torno dos cantos da expansão à medida que aumenta o grau de elasticidade.

A variação das tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} e da primeira diferença de tensões normais $N_1 (= \tau_{xx} - \tau_{yy})$ ao longo da linha central ($y = 0$) estão apresentadas na Figura 6.26, para vários valores do número de Weissenberg ($We = 0, 1, 2$ e 5) no caso do fluido viscoelástico ($Re = 20, \beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). Faz-se notar que o número de Reynolds é constante ($Re = 20$) e as tensões para o caso viscoelástico correspondem apenas a contribuição polimérica (não inclui a parte do solvente newtoniano). As tensões totais serão dadas pela soma destas contribuições poliméricas com a contribuição do solvente que será semelhante às tensões para $We = 0$ aqui apresentadas.

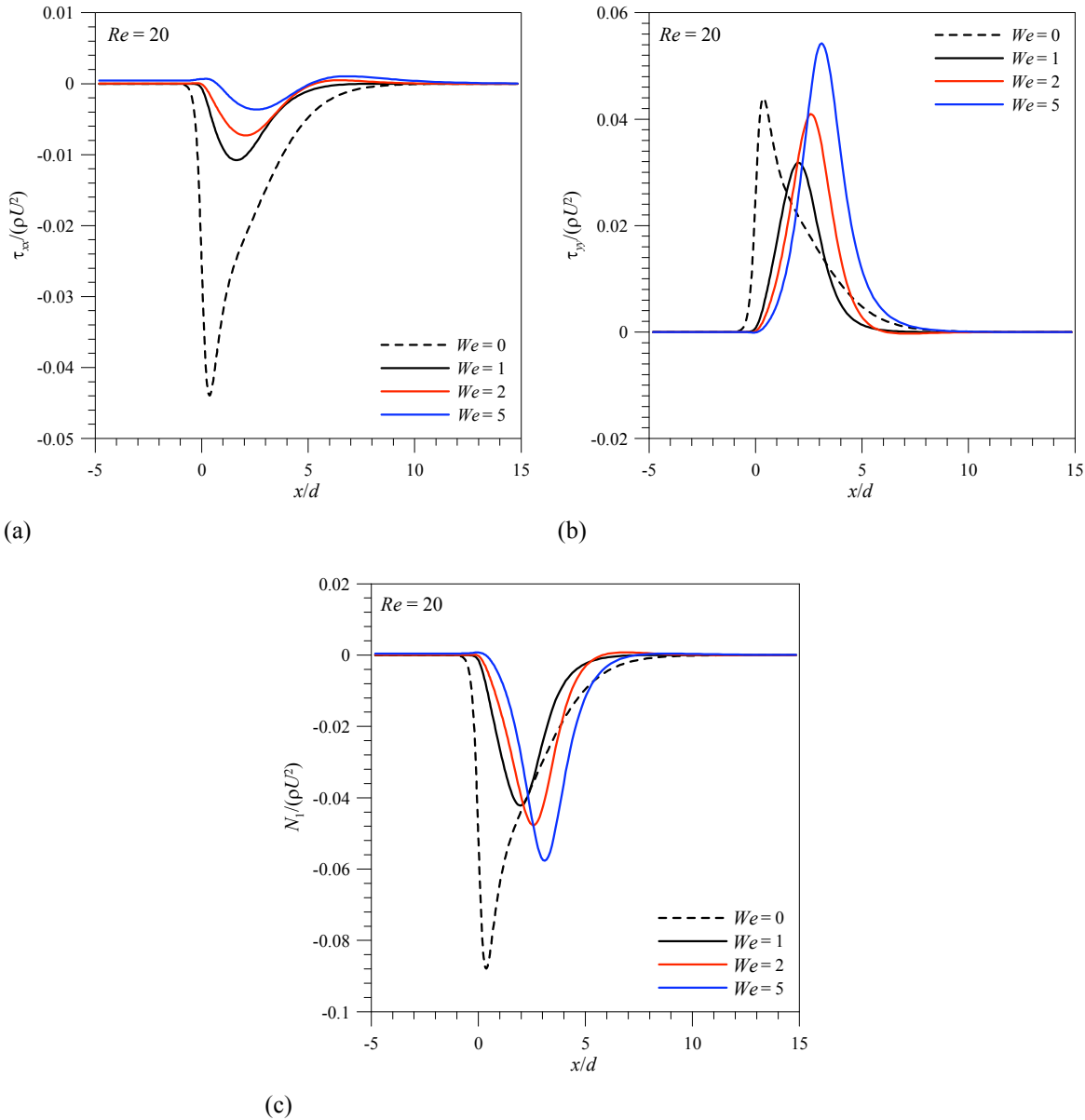


Figura 6.26 – Perfis ao longo do plano central ($y = 0$) para o fluido newtoniano ($We = 0$) e viscoelástico para vários We ($\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$), com $Re = 20$: (a) tensões normais, τ_{xx} ; (b) tensões normais, τ_{yy} ; e (c) primeira diferença de tensões normais, $N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$.

Verifica-se que existe um progressivo aumento do máximo das tensões elásticas de extensão lateral ($\tau_{yy} > 0$), sendo a localização do valor máximo movido para além da zona de expansão, no sentido do escoamento, com o aumento da elasticidade. Este comportamento resulta do efeito de “memória” presente na equação constitutiva reológica. A contribuição da tensão τ_{yy} é dominante no cálculo da primeira diferença de tensões normais ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$) e os valores máximos da componente τ_{yy} da tensão na Figura 6.26 correspondem à região com forma elíptica dos contornos apresentados na Figura 6.24, explicando assim a tendência para o aparecimento do dilatamento das linhas de corrente visto anteriormente (Figs. 6.12 e 6.22).

Finalmente, na Figura 6.27 investiga-se a influência do efeito de viscoelasticidade e de inércia na distribuição de pressão ao longo do plano central ($y = 0$) para o caso do fluido newtoniano e viscoelástico. Estes resultados foram analisados com detalhe no trabalho anteriormente apresentado em Rocha [128], fazendo-se aqui apenas uma breve resenha das conclusões mais relevantes.

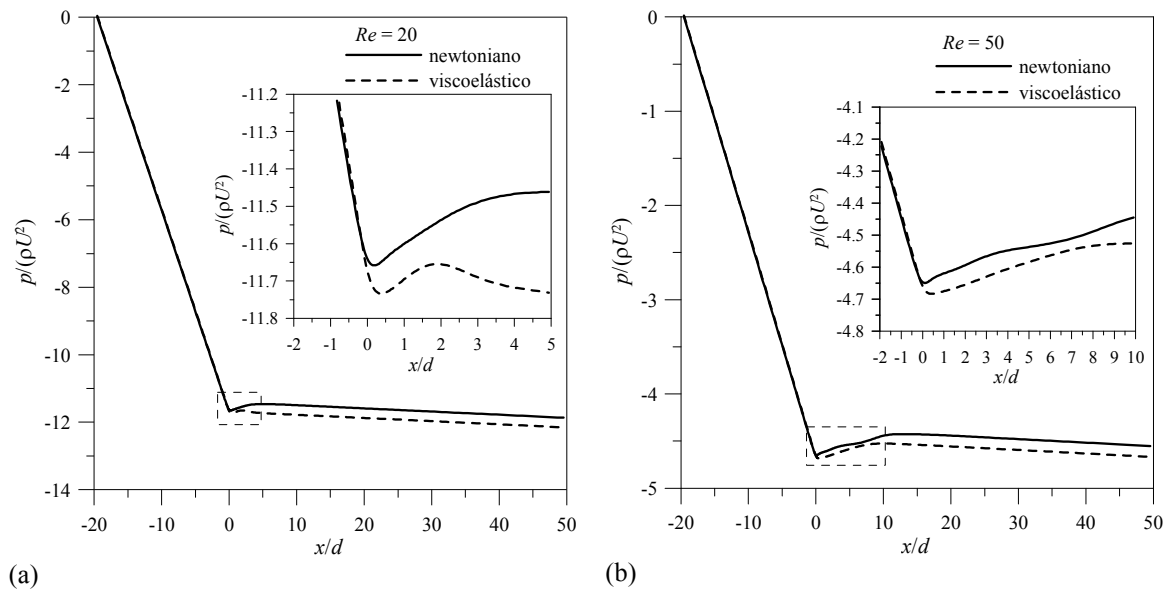


Figura 6.27 – Distribuição da pressão ao longo da linha central ($y = 0$) para o fluido newtoniano e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) para: (a) $Re = 20$; e (b) $Re = 50$.

Chama-se atenção para o efeito de “memória”, que se observa imediatamente a jusante da expansão plana, e que conduz a uma continuação do decréscimo da pressão para o fluido viscoelástico. De facto, para este tipo de fluido verifica-se que a pressão mínima que ocorre após a zona de expansão é menor do que no caso do fluido newtoniano, em que a recuperação de pressão inicia-se mais rapidamente. Verifica-se ainda que a recuperação de pressão após a zona de expansão é menor para o fluido viscoelástico, ou seja, há um aumento da queda de pressão para o caso viscoelástico quando comparado com o caso newtoniano. Este resultado é interessante porque para o caso correspondente do escoamento numa contracção, os resultados apresentados para vários modelos constitutivos similares revelaram que ocorre uma redução da queda de pressão no caso dos fluidos viscoelásticos (ver, por exemplo, o trabalho apresentado por Alves *et al.* [8]).

6.4 – Conclusões

Os resultados de simulação do escoamento foram efectuados na junção de um canal plano bidimensional de menor altura para outro de altura maior, sendo a razão de expansão de 1:4. Observou-se que utilizando fluidos newtonianos ou viscoelásticos esta geometria conduz a uma quebra de simetria do escoamento, para valores do número de Reynolds diferentes em cada um dos casos. Este fenómeno é caracterizado pela transição de escoamento simétrico para assimétrico a partir de um número de Reynolds crítico (Re_{cr}). No caso do escoamento newtoniano a bifurcação ocorre para um valor de $Re_{cr} \approx 36$, enquanto no caso viscoelástico verifica-se uma assimetria do escoamento para um valor de $Re_{cr} \approx 46$ ($L^2 = 100$, $\beta = 0.5$ e $We = 2$). O tamanho do maior comprimento de recirculação tende a diminuir quando se emprega um fluido viscoelástico, enquanto o tamanho da menor recirculação tende a aumentar, ou seja, a elasticidade reduz a assimetria. Por sua vez, a intensidade de recirculação dos vórtices é sempre menor para o fluido viscoelástico quando comparada com o caso newtoniano. Constatou-se também que o número de Reynolds crítico diminui com o aumento da razão de expansão, quando se comparam os valores obtidos neste trabalho para a expansão plana 1:4 com os resultados de Oliveira [97] para razão de expansão 1:3.

Após a bifurcação e à medida que o número de Reynolds vai aumentando, surge uma terceira recirculação do escoamento, posterior à zona de recirculação principal, que ocorre para um valores de $Re_{cr2} \approx 64$ (fluido newtoniano) e $Re_{cr2} \approx 73.5$ (fluido viscoelástico). Esta nova recirculação, que aparece mais distante do plano da expansão, surge na parede do canal de saída onde se forma a menor recirculação primária. Contudo, este efeito não foi observado no escoamento através de uma expansão plana 1:3 para $Re \leq 100$ (Oliveira [97]). Comparando as simulações com fluidos newtoniano e viscoelástico conclui-se que o efeito da elasticidade, tal como medido pelo número de Weissenberg, atrasa o processo de bifurcação do escoamento, e que no caso do fluido viscoelástico existe uma maior concentração de tensões normais e de corte na região próxima à zona de expansão. Outro efeito observado foi a deslocação da zona das máximas tensões compressivas no sentido da direcção do escoamento, para jusante do plano da expansão, à medida que aumenta a elasticidade. Por fim, constatou-se que o parâmetro de concentração do solvente β impõe sobre o escoamento um forte efeito; para valores de $\beta > 0.8$, com $Re = 40$, o escoamento é assimétrico, mas à medida que β vai decrescendo até 0.5 a assimetria tende a desaparecer e o escoamento passa a ficar simétrico.

Capítulo 7

Efeitos de extensibilidade na bifurcação do escoamento através da junção de dois canais planos*

Este capítulo trata de um fenómeno de bifurcação matemática que ocorre no escoamento de um fluido não newtoniano com propriedades viscoelásticas através da junção de dois canais planos. Os resultados obtidos por simulação numérica quantificam a influência da extensibilidade, do parâmetro de concentração polimérica e da curvatura dos cantos, sobre o aparecimento da bifurcação do escoamento, que ocorre acima de um certo valor crítico do número de Débora. Em estudos prévios foram utilizados os modelos convectivo superior de Maxwell e Oldroyd-B, ambos os modelos com extensibilidade infinita. Neste trabalho o fluido viscoelástico é regido pela aplicação de dois modelos constitutivos reológicos: FENE-CR e FENE-P, do tipo FENE, com extensibilidade elástica finita e não-linear. Na intersecção dos canais planos a análise do escoamento é feita tendo em conta três casos possíveis da geometria: um caso considerando o cruzamento dos canais sem cantos arredondados, e outros dois casos com arredondamento: um arredondamento suave e outro mais acentuado. As previsões revelaram que o fenómeno da bifurcação é basicamente controlado pelas propriedades extensionais do modelo constitutivo e que o número de Débora crítico, que define o ponto de transição do escoamento simétrico para assimétrico, diminui à medida que a extensibilidade L^2 aumenta. Em contrapartida, o arredondamento dos cantos apenas tem uma pequena influência no mecanismo que provoca a bifurcação do escoamento, que parece ser essencialmente restrito à zona central próxima do ponto de estagnação.

* Este capítulo é baseado no artigo “Rocha, G.N., R.J. Poole, M.A. Alves e P.J. Oliveira (2009). On extensibility effects in the cross-slot flow bifurcation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **156**: 58-69”.

7.1 – Introdução

O movimento de fluidos viscoelásticos através de dispositivos com cruzamento de canais para valores baixos do número de Reynolds é um dos problemas típicos da mecânica de fluidos não newtonianos. Esta configuração de escoamento permite obter valores muito elevados das taxas extensionais junto ao ponto de estagnação no centro do cruzamento, o que tende a promover instabilidades de origem elástica. A motivação deste estudo surgiu do trabalho de Arratia *et al.* [15], onde foi feita a descrição de um novo tipo de instabilidade que está associado a viscoelasticidade para uma geometria deste tipo, em forma de cruz. Os resultados experimentais mostraram que o escoamento sofre uma primeira instabilidade, com o escoamento a deformar-se e a ficar assimétrico, mantendo-se todavia estacionário. Uma segunda instabilidade aparece para taxas de deformação mais elevadas, conduzindo a um campo de velocidades oscilante mas não periódico no tempo. No seguimento desse estudo surge o trabalho teórico/numérico publicado por Poole *et al.* [118] que mostraram que essa instabilidade elástica pode ser prevista com um modelo de extensibilidade infinita (UCM) para um fluido viscoelástico. Os resultados previstos por estes autores mostraram que o escoamento passa do estado simétrico a assimétrico para números de Deborah superiores a 0.31.

O objectivo deste capítulo prende-se com a análise dos efeitos provocados pela extensibilidade elástica finita, pela concentração polimérica na mistura e pelo arredondamento dos cantos interiores no cruzamento dos canais. Os resultados aqui obtidos permitem complementar os resultados previstos em Poole *et al.* [118], que usaram o modelo convectivo superior de Maxwell, ao se utilizar um modelo constitutivo mais realista de extensibilidade elástica finita e não-linear (FENE). Aqui serão aplicadas duas versões deste modelo reológico: o modelo original FENE-P reofluidificante (Bird *et al.* [22,23]) e o modelo FENE-CR (Chilcott & Rallison [31]), com viscosidade de corte constante.

7.2 – Descrição do problema

Considera-se o escoamento bidimensional de fluido não newtoniano viscoelástico, em regime laminar, através de um cruzamento de canais planos, tal como representado esquematicamente na Fig. 7.1. O domínio do escoamento assemelha-se a uma cruz, com o fluido a entrar pelos canais da direita e da esquerda e a sair pelos canais superior e inferior. Os

dois canais de entrada encontram-se alinhados segundo a direcção x , enquanto os canais de saída estão alinhados segundo a direcção y , e o sistema de coordenadas tem origem no ponto central do cruzamento dos canais (bloco II da Fig. 7.2). Todos os canais têm larguras constantes e unitárias d (que será usado como valor característico), e comprimentos $10d$, sendo estes suficientemente longos de forma a garantir condições de escoamento completamente desenvolvido.

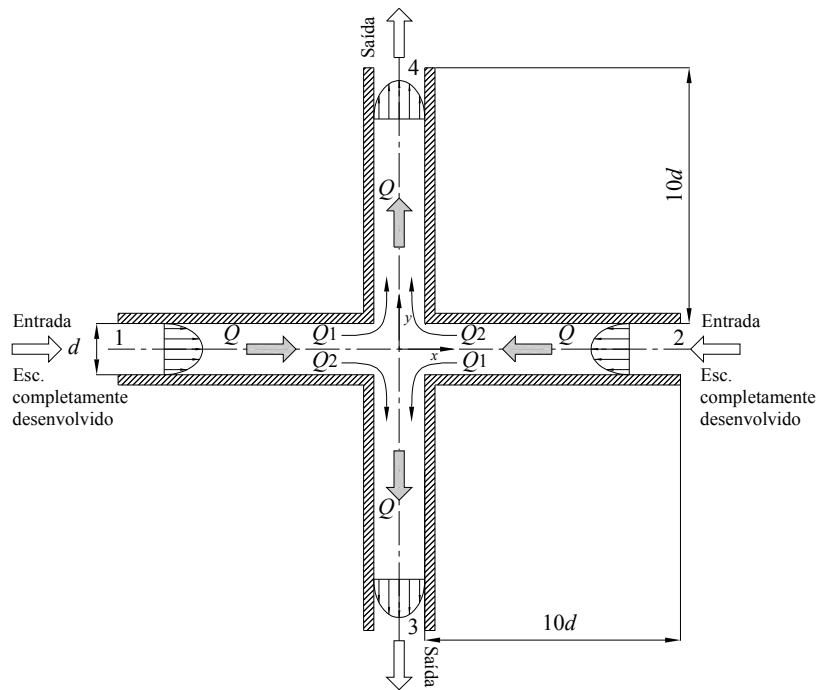


Figura 7.1 – Representação esquemática do domínio de cálculo.

As condições de entrada com velocidade média U (usada como velocidade característica do problema) são impostas em $x = \pm 10.5d$ (ver Fig. 7.1), e as condições de saída, baseadas em gradientes axiais nulos (condições de Neumann), são impostas em $y = \pm 10.5d$. Como condição adicional de saída impôs-se também que metade do caudal total introduzido sai pelo canal superior e a outra metade pelo canal inferior. Nas paredes foram impostas condições de não escorregamento (com $u = v = 0$). Maiores detalhes sobre as condições de fronteira foram dadas no Capítulo 5.

O interesse essencial deste estudo prende-se com a simulação do comportamento do escoamento na zona central da junção dos canais planos, onde se cruzam os escoamentos de entrada e ocorrem os fenómenos de instabilidade que se pretendem analisar. Nas restantes partes dos canais o escoamento não revela efeitos de realce, processando-se em condições próximas de desenvolvimento completo. O domínio de cálculo foi dividido em 5 blocos de

forma a gerar uma malha computacional que cubra completamente toda a geometria, conforme ilustrado na Fig. 7.2.

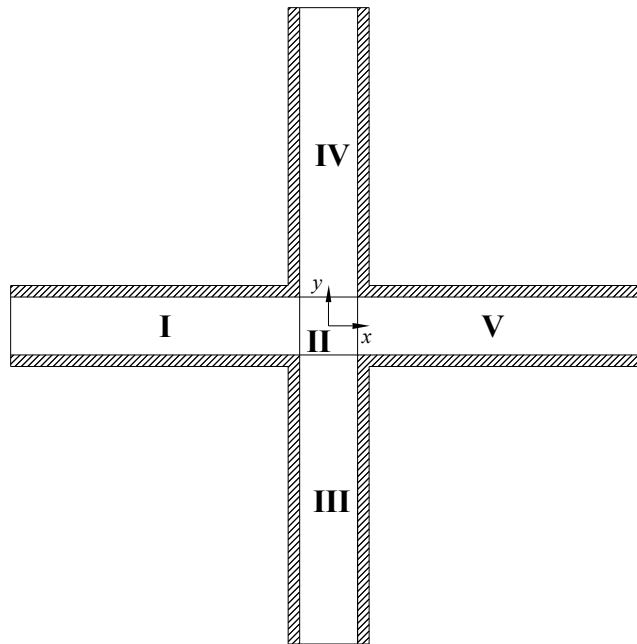


Figura 7.2 – Representação esquemática da geometria em blocos.

As principais características geométricas da malha computacional estão apresentadas na Tabela 7.1. Os blocos I e V correspondem aos troços de entrada de comprimentos $10d$; o bloco II é o quadrado situado na zona de intersecção dos canais; e os blocos III e IV correspondem aos troços de saída de comprimentos $10d$. Esta malha computacional base (com 51 células ao longo das direcções x - y no quadrado central) foi implementada tendo em conta estudos prévios (Poole *et al.* [118]) realizados na mesma geometria. Esta malha foi implementada depois de feitos alguns estudos de refinamento, garantindo-se assim que, aplicando uma malha mais refinada, os resultados não sofrem grandes alterações. Alguns resultados sobre o refinamento de malha serão apresentados mais adiante, de forma a quantificar a precisão numérica das soluções deste trabalho. A Tabela 7.1 contém o número de células para cada bloco, N_x ao longo da direcção x , N_y ao longo da direcção y e o número total de volumes de controlo (NVC) utilizados para descrever a malha computacional. Estão também indicados os factores de progressão geométrica de expansão ou compressão (f_x e f_y) do espaçamento das células ao longo das direcções x e y , que foram usados para concentrar um maior número de células junto à zona central do cruzamento dos canais. Esta malha computacional contém 76806 graus de liberdade.

Tabela 7.1 – Características geométricas da malha computacional.

Blocos	N_x	N_y	f_x	f_y
I	50	51	0.929296	1.0
II	51	51	1.0	1.0
III	51	50	1.0	0.929296
IV	51	50	1.0	1.075369
V	50	51	1.075369	1.0

NVC = 12801

Como se pode constatar da Tabela 7.1 as células colocadas uniformemente ao longo da secção transversal de cada canal são ímpares, 51 células, correspondendo a um espaçamento nominal entre células de $\Delta y_{\min} = \Delta x_{\min} \cong 0.02d$. Isto foi intencionalmente implementado de forma a se poder ter uma linha de células colocadas exactamente ao longo da linha central dos canais de entrada e saída.

Na Figura 7.3 apresenta-se a malha computacional utilizada para cobrir o domínio de cálculo, sendo de realçar que a malha é ortogonal e não uniforme ao longo dos comprimentos dos canais de entrada e saída. Na zona de intersecção dos canais (Bloco II na Fig. 7.2 para $|x/d| \leq 0.5$ e $|y/d| \leq 0.5$) existe uma maior concentração de volumes de controlo, alargando-se progressivamente à medida que se avança para as entradas ou para as saídas, a partir da região central de cruzamento, de forma a ser possível resolver com precisão adequada os elevados gradientes de tensão que aí ocorrem.

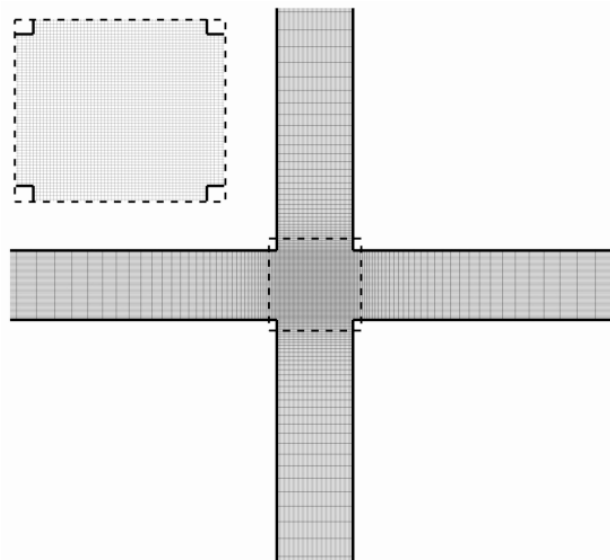


Figura 7.3 – Detalhe da malha utilizada no cálculo computacional.
 $(-4 \leq x/d, y/d \leq +4)$

Quando as simulações têm como base o modelo FENE-CR (com viscosidade de corte constante) o perfil de velocidades imposto na entrada dos canais é parabólico (definido pela

Eq. (6.1)) como no caso newtoniano ($\beta = 0$). As equações que definem as tensões de corte τ_{xy} (Eq. (6.2)) e normais τ_{xx} foram deduzidas no Capítulo 6. No caso do modelo FENE-P (especialmente quando $\beta \neq 0$) a obtenção das soluções completamente desenvolvidas para os perfis de velocidade e tensões (τ_{xy} e τ_{xx}) é mais complicada, tendo sido impostas na entrada as soluções analíticas de Cruz *et al.* [37]. Com a imposição destas soluções analíticas nas entradas torna-se mais fácil avaliar a perda de pressão localizada (subsecção 7.3.5) uma vez que o decaimento da pressão é imediatamente linear.

7.3 – Resultados

A variável adimensional que quantifica o grau de assimetria (ou de bifurcação) do escoamento é definida em termos de fluxos volumétricos, $DQ = (Q_1 - Q_2)/Q$, e será estudada em função do número de Débora, $De = \lambda U/d$, que toma valores entre 0 e 1.

De acordo com a Figura 7.1, o fluxo total que escoar em cada um dos canais de entrada é $Q = Q_1 + Q_2 = Ud$, dividindo-se em dois fluxos Q_1 e Q_2 na zona de cruzamento dos canais, que seguem para os canais de saída superior e inferior. A variável adimensional DQ varia entre 0 no caso em que o escoamento é simétrico, indicando que não ocorre bifurcação, até ± 1 no limite em que o escoamento é completamente assimétrico. A situação $DQ \neq 0$ ocorre para valores do número de Débora superiores a um valor crítico (De_{cr}) podendo nessa altura haver três soluções possíveis: uma solução bifurcada com mais fluxo vindo do canal da esquerda e saindo pelo canal superior ($Q_1 > Q_2$); a solução oposta, com mais fluxo vindo do canal da esquerda e saindo pelo canal inferior ($Q_2 > Q_1$); e, por fim, a solução (instável) em que o escoamento é simétrico.

A escolha das propriedades do fluido e dos parâmetros do modelo depende das características do escoamento que se pretende modelar. Uma vez que o escoamento em estudo se processa a velocidades muito baixas, assumiu-se que o número de Reynolds do escoamento é exactamente igual a zero (i.e. $Re = \rho Ud/\eta_0 = 0$), indicando a inexistência de efeitos inerciais. Isto é imposto no código computacional anulando-se apenas os termos convectivos ($\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{0}$) da equação de conservação da quantidade de movimento, mas mantendo-se as equações constitutivas. No trabalho de Poole *et al.* [118] foi feito um estudo dos efeitos inerciais no escoamento, para baixos valores do número de Reynolds (entre 0 e 3). Os resultados revelaram que à medida que Re vai aumentando a assimetria do escoamento vai-se

atenuando. Em simulações numéricas que contenham um valor de inércia muito baixo (mas finito, por exemplo $Re = 0.01$) os resultados obtidos são muito próximos dos resultados em que se despreza totalmente o efeito de inércia ($Re = 0$).

7.3.1 – Efeitos devido ao parâmetro de extensibilidade, L^2

O parâmetro de extensibilidade molecular do modelo L^2 influencia os efeitos extensionais (ou elongacionais) do escoamento e é proporcional à viscosidade extensional limite prevista pelo modelo constitutivo. Esta pode ser entendida como a resistência de um elemento de fluido polimérico quando este está a ser estendido. No Capítulo 4 descreve-se, com algum detalhe, o comportamento dos efeitos provocados por este parâmetro num escoamento extensional uniaxial. Em termos quantitativos apresenta-se na Figura 7.4 os resultados obtidos usando o modelo FENE-CR para três valores crescentes do parâmetro de extensibilidade, $L^2 = 50$, 100 e 200, em função do número de Débora (De), para uma razão de viscosidades do solvente constante ($\beta = 0.1$). Na Tabela 7.2 estão registados os resultados obtidos para o caso típico do parâmetro de extensibilidade $L^2 = 100$, que é utilizado em muitos outros estudos (Bird *et al.* [23], Remmelgas *et al.* [125] e Oliveira [94]), juntamente com resultados para o dobro e metade do valor base. No trabalho de Poole *et al.* [118], em que foi utilizado o modelo convectivo superior de Maxwell (modelo UCM, obtido com $L^2 \rightarrow \infty$ e $\beta = 0$), a ocorrência da bifurcação do escoamento dá-se para um número Débora crítico $De_{cr} \approx 0.31$.

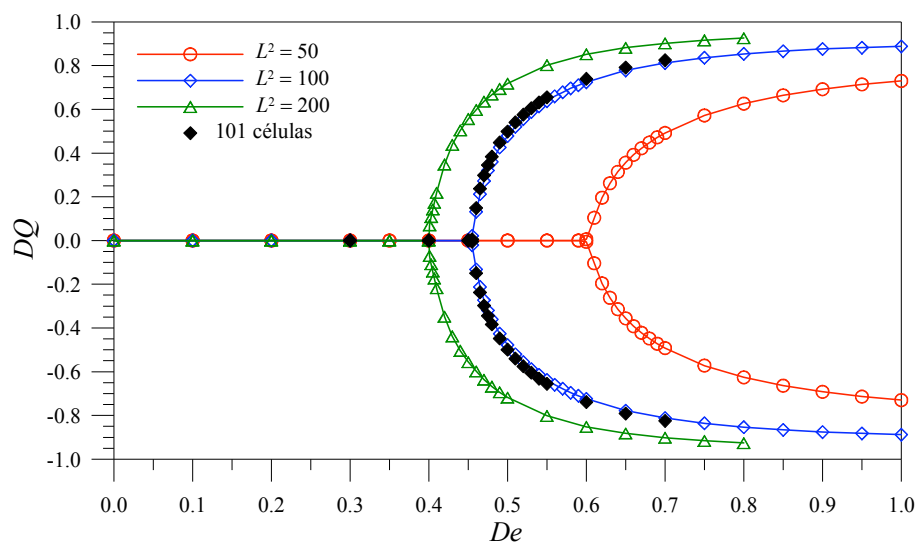


Figura 7.4 – Variação do parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora, para o modelo FENE-CR: influência da extensibilidade L^2 ($\beta = 0.1$). Símbolo (\blacklozenge): malha mais refinada (101 células), com $L^2 = 100$.

Tabela 7.2 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o fluido FENE-CR: influência da extensibilidade L^2 ($\beta = 0.1$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$L^2 = 50$		$L^2 = 100$				$L^2 = 200$	
51 células		51 células		101 células		51 células	
De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.070
0.50	0.000	0.455	0.021	0.45	0.000	0.41	0.218
0.60	0.006	0.46	0.132	0.46	0.149	0.42	0.348
0.61	0.104	0.47	0.272	0.47	0.298	0.43	0.438
0.62	0.196	0.48	0.360	0.48	0.384	0.44	0.504
0.63	0.262	0.49	0.426	0.49	0.448	0.45	0.556
0.64	0.314	0.50	0.478	0.50	0.499	0.46	0.598
0.65	0.356	0.51	0.520	0.51	0.540	0.47	0.636
0.66	0.392	0.52	0.556	0.52	0.575	0.48	0.668
0.67	0.422	0.53	0.588	0.53	0.605	0.49	0.694
0.68	0.448	0.54	0.614	0.54	0.632	0.50	0.718
0.69	0.472	0.55	0.638	0.55	0.655	0.55	0.802
0.70	0.492	0.60	0.724	0.60	0.739	0.60	0.852
0.75	0.572	0.70	0.812	0.70	0.825	0.65	0.882
0.80	0.626	0.80	0.854	---	---	0.70	0.902
0.90	0.692	0.90	0.876	---	---	0.75	0.916
1.00	0.730	1.00	0.888	---	---	0.80	0.926

Analisando a Figura 7.4 verifica-se que a variação do parâmetro de assimetria DQ em função de De retrata um caso típico de bifurcação em forma de forquilha supercrítica, com duas possíveis soluções bifurcadas e estáveis quando $De > De_{cr}$: uma solução com maior fluxo do canal de entrada da esquerda a sair pelo canal superior ($DQ \rightarrow +1$) e outra correspondente à solução oposta, com maior fluxo do canal de entrada da esquerda a sair pelo canal inferior ($DQ \rightarrow -1$). Qualquer uma destas soluções pode ser obtida numericamente, dependendo das condições iniciais impostas ou valores de variáveis numéricas como, por exemplo, o passo no tempo ou qualquer outro parâmetro de cariz numérica aplicado ao problema. Pode também constatar-se que o aumento do parâmetro de extensibilidade do modelo L^2 tende a acentuar o fenómeno da bifurcação do escoamento e a acelerar o ponto crítico para a sua ocorrência. Deste modo, os resultados do diagrama de bifurcação da Figura 7.4 demonstram que a causa física geradora da instabilidade do escoamento decorre não só da presença da viscoelasticidade, sem qualquer papel da inércia, mas também das características extensionais do fluido. O diagrama de bifurcação relativo ao escoamento que ocorre na zona central do cruzamento dos canais é muito semelhante ao decorrente do efeito

de Coanda no escoamento através de expansão plana bidimensional (Oliveira [97] e Rocha *et al.* [133] - comparar, por exemplo, a Fig. 7.4 aqui apresentada com a Fig. 6.23 do Capítulo 6, para a expansão 1:4). Contudo, existem algumas diferenças importantes em cada um dos casos que são aqui descritas. No caso da expansão plana, a bifurcação em forma de forquilha que ocorre é originada essencialmente pelo efeito inercial do fluido (aumento de Re), e a elasticidade de facto actua de forma a estabilizar a bifurcação do escoamento. A instabilidade que ocorre aqui, no escoamento na zona central do cruzamento dos canais, é de natureza puramente elástica (tem-se $Re = 0$) e a elasticidade, essencialmente através da viscosidade extensional (recorda-se que η_E aumenta com L^2), tem um efeito destabilizador e apressador do ponto crítico estabilidade/instabilidade. O estiramento de um filamento de fluido alcança valores elevados na região central do cruzamento dos canais porque as moléculas poliméricas tendem a permanecer junto ao ponto de estagnação central por algum tempo. Assim, as moléculas desenrolam e ficam completamente estendidas, induzindo valores elevados da viscosidade extensional e fazendo com que a bifurcação ocorra para baixas taxas de escoamento. Isto significa que quando L^2 aumenta o De_{cr} diminui, conforme se pode observar na Fig. 7.4.

De forma a quantificar os erros de discretização envolvidos nas simulações fizeram-se algumas simulações usando uma malha mais refinada, possuindo o dobro de volumes de controlo ao longo de cada uma das direcções x e y (Malha 2 – com 50601 volumes de controlo no total, quase quatro vezes mais do que a Malha 1, e espaçamento mínimo entre as células $\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min} \cong 0.01d$). Os resultados previstos com esta malha mais refinada (101×101 células no Bloco II da Fig. 7.2) forneceram um parâmetro de bifurcação em função do número de Débora representado com símbolos fechados na Fig. 7.4 (para o caso $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). Como se pode observar na Figura 7.4, comparando os resultados obtidos para cada uma das malhas (Malha 1 – 51 células e Malha 2 – 101 células) as diferenças são mínimas e visualmente são insignificantes. Desta forma, pode concluir-se que a malha base utilizada na maior parte das simulações viscoelásticas (Malha 1) apresenta uma precisão numérica aceitável, justificando assim a utilização desta malha nos cálculos numéricos. Deste modo, reduz-se para cerca de metade os tempos de cálculo e os requisitos computacionais em termos de memória. A fim de quantificar a incerteza numérica, a Tabela 7.3 apresenta o erro de refinamento referente ao parâmetro de bifurcação DQ em cada uma das malhas computacionais, para alguns casos viscoelásticos após bifurcação do escoamento ($De = 0.5, 0.6$ e 0.7 , com condições de $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Tabela 7.3 – Efeito do refinamento de malha: valores de DQ para $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$.

De	Malha 1 (51 células)	Malha 2 (101 células)	Extrapolação	Erro Malha 1 (%)	Erro Malha 2 (%)
0.5	0.478	0.499	0.506	5.5	1.4
0.6	0.724	0.739	0.744	2.7	0.7
0.7	0.812	0.825	0.829	2.2	0.5

Os resultados apresentados na tabela anterior (Tabela 7.3) mostram que a maior diferença entre as malhas (Malha 1 e Malha 2) verifica-se na região perto do ponto crítico ($De_{cr} \approx 0.46$), com um erro de 5% na Malha 1 para $De = 0.5$, na zona em que a variação de DQ se processa de forma mais intensa, como se vê na Fig. 7.4. Em geral a incerteza ronda os 2–3%.

Teoricamente, para uma instabilidade em forma de forquilha, é esperado que o parâmetro de bifurcação DQ varie da seguinte forma $DQ \sim \sqrt{De - De_{cr}}$, para valores de De acima de De_{cr} (ponto crítico). Esta variação do parâmetro de bifurcação DQ com a raiz quadrada do diferencial de De relativamente ao valor crítico está evidente na Figura 7.4 e será discutida com mais detalhe na próxima subsecção, onde serão analisadas as influências do parâmetro de extensibilidade L^2 e da razão de viscosidades do solvente β .

Na Figura 7.5 apresentam-se as linhas de corrente do escoamento, normalizadas com o caudal de entrada, previstas na proximidade do cruzamento dos canais, para o caso base, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, e para quatro valores de Débora: $De = 0$ (newtoniano), 0.4 (antes do ponto crítico), 0.46 (imediatamente acima do valor crítico) e 0.7 (quase completamente bifurcado). Estas quatro representações do escoamento mostram como as linhas de corrente evoluem do escoamento simétrico newtoniano (fluido apenas composto por solvente e sem soluto polimérico diluído) para o escoamento fortemente assimétrico do fluido viscoelástico. Constata-se também que o grau de bifurcação aumenta rapidamente para uma pequena gama de variação do número de Débora imediatamente acima do valor crítico ($De_{cr} \approx 0.46$), de acordo com o que foi descrito anteriormente.

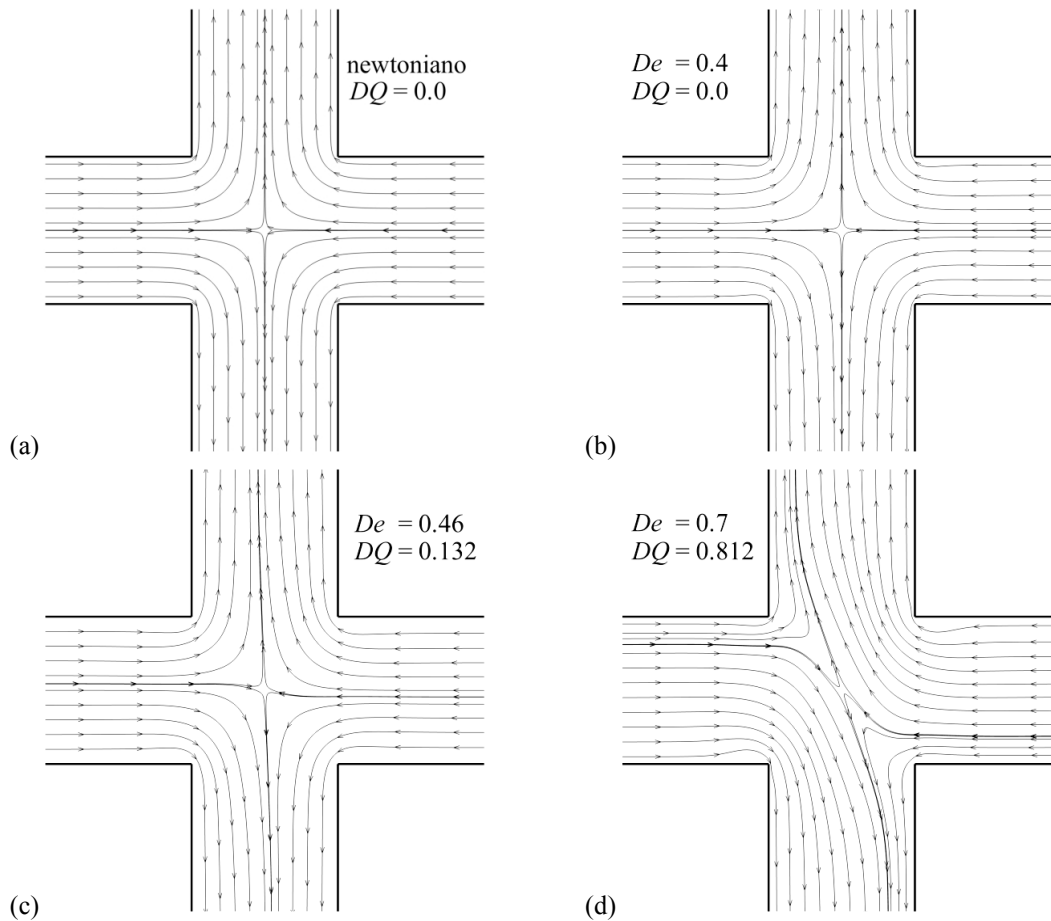


Figura 7.5 – Evolução das linhas de corrente do escoamento para os casos: (a) newtoniano; (b) $De = 0.40$; (c) $De = 0.46$; e (d) $De = 0.70$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Os resultados acabados de apresentar permitem concluir que:

- O número de Débora crítico, que define o ponto de transição do escoamento simétrico para o escoamento assimétrico, é $De_{cr} \approx 0.46(\pm 0.005)$ (no caso concreto de $\beta = 0.1$ e $L^2 = 100$);
- À medida que o número de Débora aumenta, acima de De_{cr} , o parâmetro de assimetria (DQ) cresce rapidamente, como se vê com maior detalhe através do gráfico da Fig. 7.4.

Os campos de tensão τ_{xx} e τ_{yy} , normalizados com um factor de escala difusivo ($\eta_0 U/d$), estão representados nas Figuras 7.6 e 7.7, para valores crescentes de De correspondentes aos quatro casos ilustrados na Fig. 7.5. Os contornos das tensões normais evoluem desde a situação completamente simétrica do escoamento newtoniano – note-se que

ao anularem-se os termos convectivos com $Re = 0$, as equações da quantidade de movimento tornam-se lineares, satisfazendo a simetria do escoamento em torno dos eixos x e y (e também segundo as diagonais, $y = \pm x$) – até ao caso viscoelástico com elevadas tensões compressivas ao longo dos canais de entrada. Pode observar-se (Fig 7.7(b), (c) e (d)) que no caso do escoamento ser viscoelástico surge, na zona central da junção dos canais, uma camada típica composta por uma elevada concentração de tensões normais (designação inglesa de *birefringence strand*), devido ao aparecimento de um forte e localizado escoamento extensional ao longo dos canais de saída verticais. Esta camada típica que surge na região central do escoamento quando se está na presença de fluidos com propriedades viscoelásticas (Harlen *et al.* [58]) é devida às moléculas poliméricas sofrerem um forte estiramento uniaxial, e serviu como motivação para os diversos estudos numéricos anteriormente efectuados neste tipo de geometria. Alguns destes estudos foram efectuados usando modelos reológicos com viscosidade de corte constante modificados de forma a preverem os comprimentos dessas camadas que contêm uma forte concentração de tensões normais e que podem ser observadas experimentalmente por meios ópticos (Rommelgas *et al.* [125]). Todavia, este fenómeno que ocorre em fluidos viscoelásticos pode não estar directamente relacionado com a origem do aparecimento da bifurcação na geometria em forma de cruz. De acordo com as conclusões de Poole *et al.* [118] o aparecimento da bifurcação estará relacionado com o escoamento compressivo que se verifica na linha central do cruzamento dos canais de entrada. A Figura 7.6 mostra ainda uma forte concentração de tensões em torno dos cantos no cruzamento dos canais (ponto de singularidade) e, particularmente, ao longo das paredes dos canais de entrada. Estas particularidades do campo de tensões não devem afectar de forma significativa a ocorrência da instabilidade que conduz à bifurcação do escoamento.

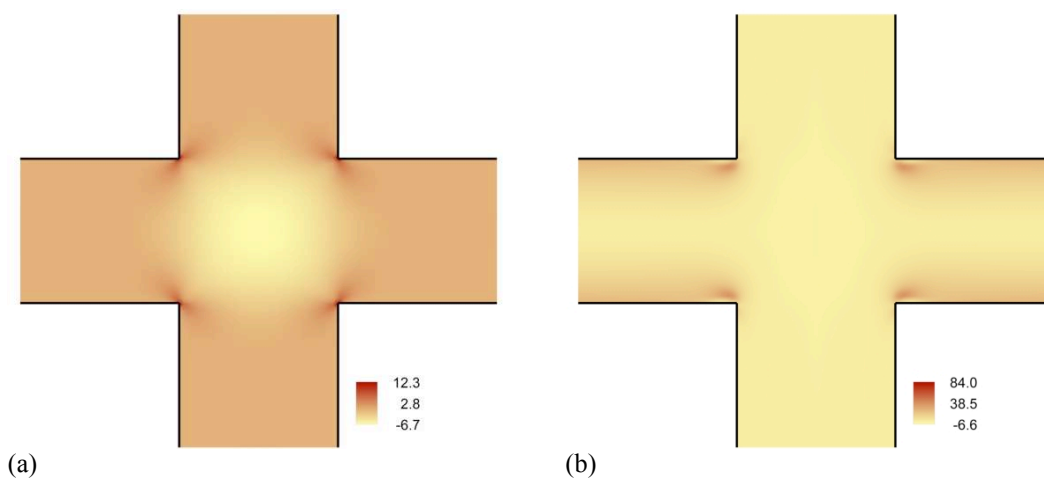


Figura 7.6 – Evolução dos campos da tensão normal horizontal $\tau_{xx}/(\eta_0 U/d)$ para os casos: (a) newtoniano; (b) $De = 0.40$; (c) $De = 0.46$; e (d) $De = 0.70$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

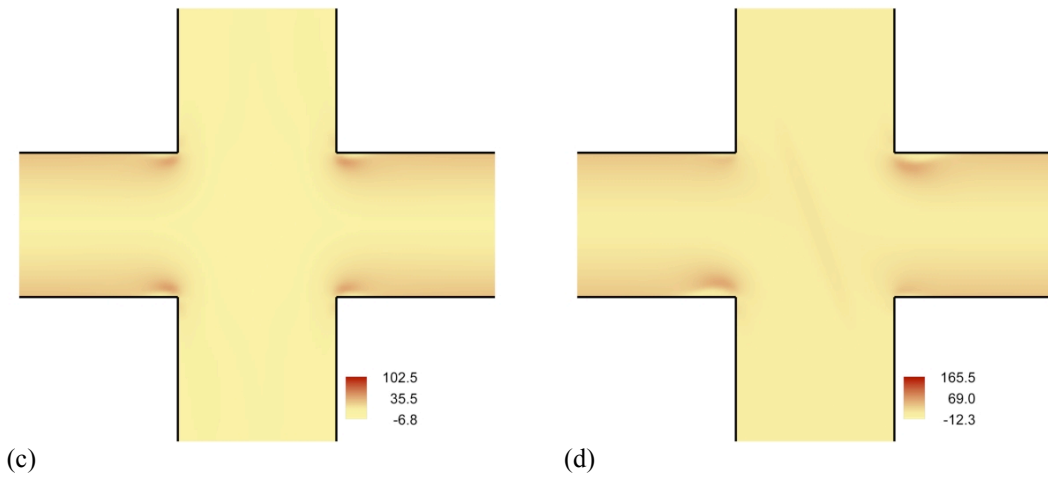


Figura 7.6 (cont.) – Evolução dos campos da tensão normal horizontal $\tau_{xx}/(\eta_0 U/d)$ para os casos: (a) newtoniano; (b) $De = 0.40$; (c) $De = 0.46$; e (d) $De = 0.70$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

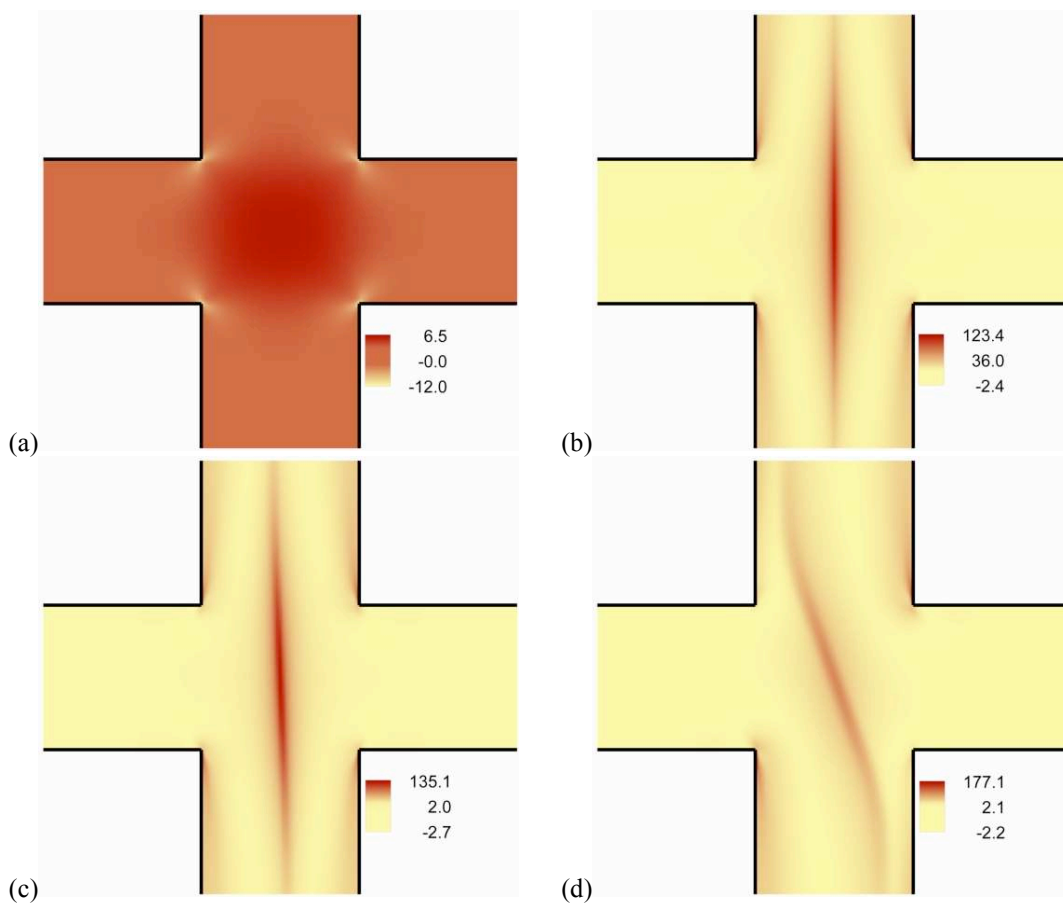


Figura 7.7 – Evolução dos campos da tensão normal vertical $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ para os casos: (a) newtoniano; (b) $De = 0.40$; (c) $De = 0.46$; e (d) $De = 0.70$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Na Figura 7.8 mostra-se o diagrama de contornos do traço das tensões poliméricas ($\tau_{xx} + \tau_{yy}$) referente aos casos analisados anteriormente. Esta figura é útil uma vez que o estiramento molecular é proporcional ao traço do tensor das tensões poliméricas. No entanto, pode observar-se que os contornos de $\tau_{xx} + \tau_{yy}$ não sofrem grande alteração quando comparados com os contornos de τ_{yy} apresentados na Fig. 7.7, o que é de esperar pois no canal de saída $\tau_{yy} \gg \tau_{xx}$. A condição de incompressibilidade implica que no caso newtoniano se tenha $tr(\boldsymbol{\tau}) \approx 0$, como se vê na parte (a) da figura.

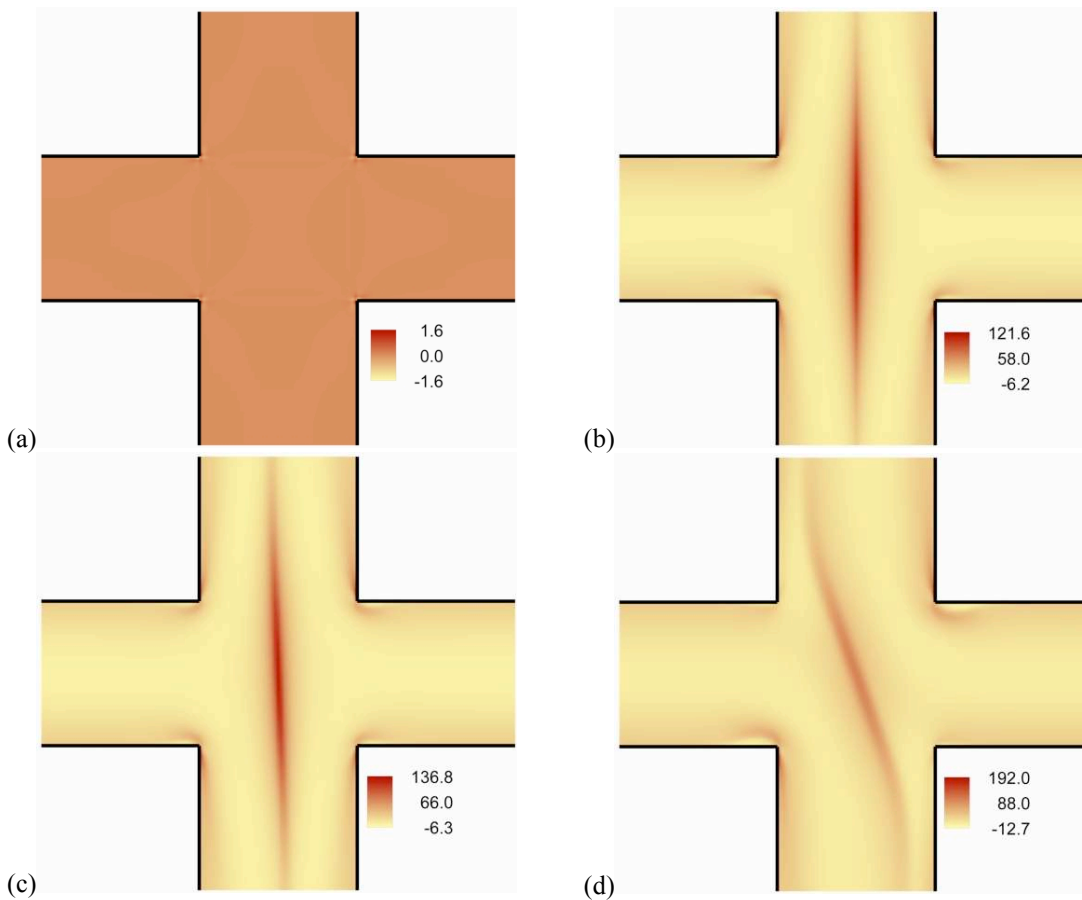


Figura 7.8 – Evolução dos campos do traço do tensor das tensões poliméricas $(\tau_{xx} + \tau_{yy})/(\eta_0 U/d)$ para os casos: (a) newtoniano; (b) $De = 0.40$; (c) $De = 0.46$; e (d) $De = 0.70$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Na Figura 7.9 são apresentadas as distribuições dos perfis de velocidade axial para vários valores do número de Débora, $De = 0.0$ (newtoniano), 0.40, 0.46 e 0.70, correspondendo às situações anteriores, em quatro posições transversais do canal de saída superior, $y/d = 0.6, 1.0, 1.5$ e 2.5 . As posições transversais estão indicadas na Figura 7.10,

onde também estão representadas as linhas de corrente do escoamento para $De = 0.70$ (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$ fixos).

Os resultados estão praticamente sobrepostos na posição $y/d = 2.5$ para qualquer um dos casos, indicando que nessas condições o escoamento já está completamente desenvolvido, estando sobreposto ao perfil parabólico teórico (válido para fluido newtoniano e FENE-CR em canal comprido). A assimetria imposta pela bifurcação do escoamento é claramente patente nos perfis em $y/d = 0.6$ e 1.0 para $De = 0.70$ (e também $De = 0.46$). Os perfis newtonianos são sempre simétricos em relação à linha $x = 0$. O perfil para FENE-CR com $De = 0.40$ (abaixo do De_{cr}) é ainda simétrico mas apresenta um mínimo na linha central, contrariamente ao perfil cheio do fluido newtoniano.

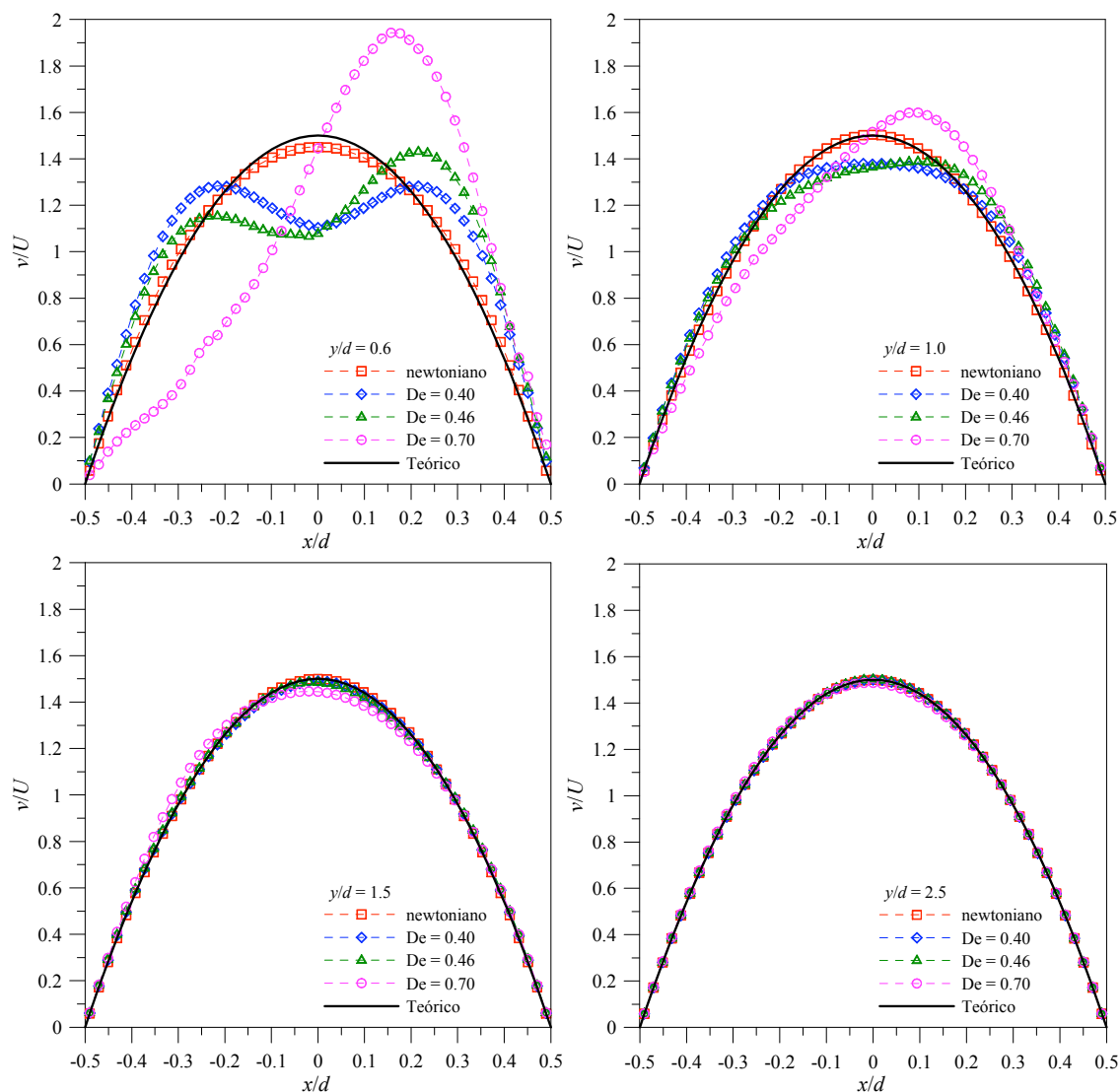


Figura 7.9 – Perfis de velocidade axial em quatro estações ao longo do canal de saída superior para $De = 0.0$ (newtoniano), 0.40, 0.46 e 0.70 (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

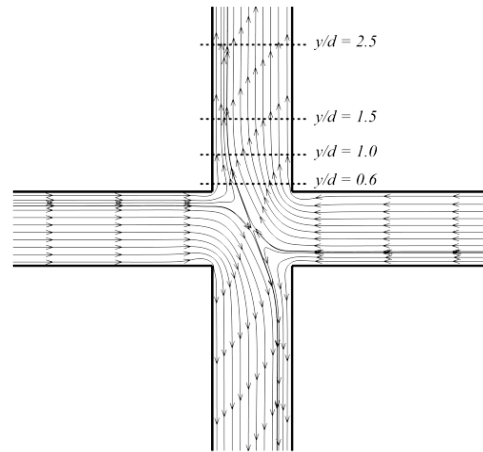


Figura 7.10 – Representação das localizações dos perfis axiais da distribuição de velocidade para $y/d = 0.6$, 1.0, 1.5 e 2.5. Linhas de corrente para $De = 0.7$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$.

7.3.2 – Efeitos devido à concentração polimérica

Nesta subsecção apresentam-se os resultados numéricos relativos ao efeito da concentração polimérica no escoamento. Define-se um parâmetro de concentração polimérica adimensional, $c = \eta_p / \eta_s$, que se pode escrever em termos da razão de viscosidades do solvente β como $c = (1/\beta) - 1$, uma vez que $\beta = \eta_s / \eta_0$ e $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$. Este parâmetro de concentração foi utilizado em trabalhos de Leal e co-autores (Singh & Leal [139], Rummelgas *et al.* [124,125] e Feng & Leal [48]). Os fluidos de Boger, cujo comportamento reofluidificante da viscosidade de corte é predominantemente dissimulado pela viscosidade do solvente, têm valores de β próximos da unidade, resultando numa concentração polimérica c muito baixa. Por outro lado, partindo do caso newtoniano ($\beta = 1$) e diminuindo progressivamente o valor de β , o parâmetro de concentração aumenta até infinito ($\beta \rightarrow 0 \Rightarrow c \rightarrow \infty$). Espera-se assim que à medida que β vai diminuindo os efeitos elásticos se tornem cada vez mais dominantes e que o comportamento de DQ em função de De siga qualitativamente a tendência da subsecção anterior com o aumento de L^2 .

Na Tabela 7.4 são apresentados os resultados obtidos do parâmetro de bifurcação DQ em função do número de Débora (De) no caso viscoelástico, para três valores da razão de viscosidades do solvente, $\beta = 0.05$, 0.10 e 0.20 (com $L^2 = 100$ constante), que correspondem às seguintes concentrações poliméricas $c = 19$, 9 e 4, respectivamente. Estes resultados estão graficamente ilustrados na Figura 7.11, podendo, desde já, verificar-se que estes diagramas de bifurcação apresentam a mesma configuração dos da Fig. 7.4 onde foi estudada a variação de L^2 .

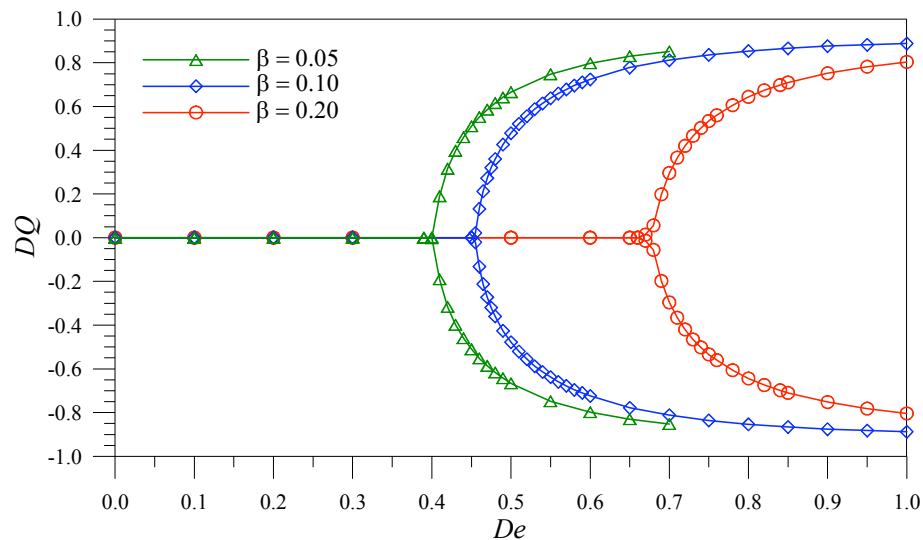


Figura 7.11 – Variação do parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o modelo FENE-CR: influência da concentração polimérica através da razão de viscosidades do solvente β ($L^2 = 100$).

Tabela 7.4 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o fluido FENE-CR: influência da concentração polimérica através da razão de viscosidades do solvente β ($L^2 = 100$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$\beta = 0.05$		$\beta = 0.10$		$\beta = 0.20$	
De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.002	0.40	0.000	0.40	0.000
0.41	0.190	0.455	0.021	0.50	0.000
0.42	0.316	0.46	0.132	0.60	0.000
0.43	0.398	0.47	0.272	0.65	0.000
0.44	0.460	0.48	0.360	0.67	0.014
0.45	0.510	0.49	0.426	0.68	0.056
0.46	0.552	0.50	0.478	0.69	0.198
0.47	0.586	0.51	0.520	0.70	0.296
0.48	0.616	0.52	0.556	0.71	0.366
0.49	0.642	0.53	0.588	0.72	0.420
0.50	0.666	0.54	0.614	0.73	0.446
0.55	0.748	0.55	0.638	0.74	0.502
0.60	0.798	0.60	0.724	0.75	0.534
0.65	0.830	0.70	0.812	0.80	0.644
0.70	0.852	0.80	0.854	0.85	0.710
---	---	0.90	0.876	0.90	0.752
---	---	1.00	0.888	1.00	0.804

Com base na Figura 7.11, conclui-se que a diminuição de concentração de polímero na solução tende a retardar o despoletar da instabilidade que conduz ao fenômeno de assimetria do escoamento. Fica assim estabelecido que o parâmetro β é uma das variáveis independentes que determina o número de Débora crítico a partir do qual ocorre a transição

do escoamento simétrico para assimétrico. É também notório que a influência de β no De_{cr} não é linear: quando se dobra β de 0.05 para 0.1 ocorre um aumento de De_{cr} inferior ao que ocorre quando β é dobrado de 0.1 para 0.2. Na Figura 7.12 são apresentadas as linhas de corrente do escoamento correspondentes às situações críticas da Fig. 7.11.

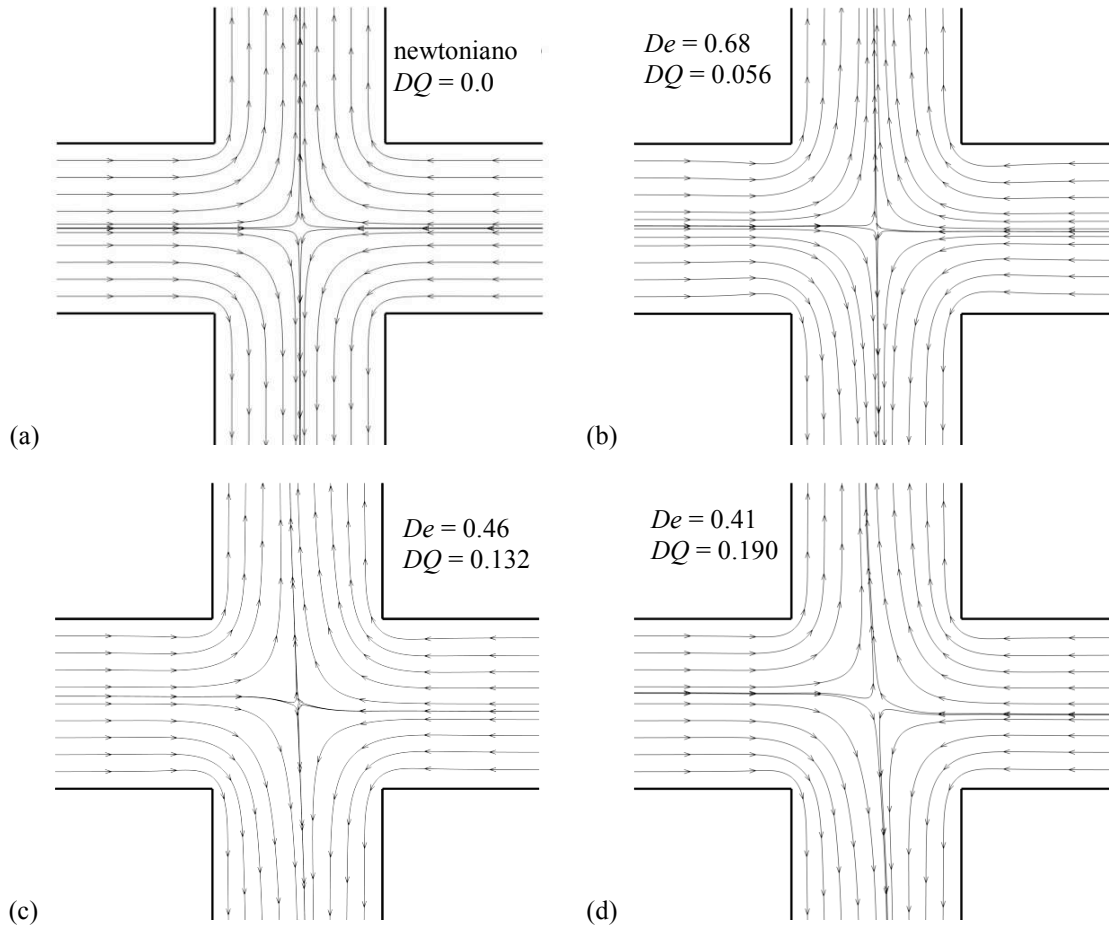


Figura 7.12 - Linhas de corrente do escoamento na situação imediatamente pós-crítica em função da concentração polimérica ($L^2 = 100$): (a) newtoniano, $\beta = 1.0$; (b) $\beta = 0.20$; (c) $\beta = 0.10$; e (d) $\beta = 0.05$. O caso newtoniano é apresentado como referência.

Para se entender a influência de L^2 e β sobre a bifurcação é útil relembrar que enquanto o parâmetro L^2 está relacionado com a elasticidade através de efeitos extensionais, a razão de viscosidades β está relacionada com elasticidade por efeitos de tensões normais ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$). Assim, pode ser possível separar estes dois efeitos introduzindo a contribuição de β numa definição diferente do número de Débora, por exemplo $De' = De(1 - \beta)$. Desta forma, isola-se completamente a elasticidade extensional e a elasticidade das tensões normais. Todavia, os modelos FENE não permitem uma separação

clara destas duas influências e, por isso, a redefinição do número de Débora não se traduz num colapso completo dos efeitos elásticos. O que se consegue, com base nos resultados obtidos, nomeadamente nos das Figuras 7.4 e 7.11 e nas Tabelas 7.2 e 7.4, e Tabelas 7.5 e 7.6 apresentadas abaixo, é incluir essa dualidade de efeitos numa expressão de DQ em função de De com a seguinte forma:

$$DQ \propto A(L^2) \sqrt{De - De_{cr}(\beta, L^2)} \quad (7.1)$$

onde as dependências estão explicitamente indicadas. O número de Débora crítico é controlado pelas tensões normais e pela elasticidade extensional, e a magnitude da bifurcação A é controlada principalmente pela extensibilidade. Os resultados previstos para De_{cr} e A estão apresentados nas Tabelas 7.5 e 7.6, onde se encontram também indicados os resultados obtidos no caso do arredondamento dos cantos ($R = 0.05d$ e $0.5d$), que serão discutidos com mais detalhe na próxima subsecção. Na Tabela 7.5 o número de Débora crítico é obtido directamente dos resultados apresentados nas Tabelas 7.2, 7.4, 7.7 e 7.8, sendo dependente do incremento adoptado para a variação do número de Débora. Na Tabela 7.6 os valores de A e De_{cr} apresentados são estimados da Eq. (7.1) através de correlação linear entre o quadrado do parâmetro de assimetria e o número de Débora, para valores de De próximos do número de Débora crítico.

Tabela 7.5 – Números de Débora críticos para bifurcação do escoamento: (a) variação de L^2 , com $\beta = 0.1$; e (b) variação de β , com $L^2 = 100$.

L^2	sem arredondamento		com arredondamento	
	$R = 0.0d$	$R = 0.05d$	$R = 0.05d$	$R = 0.5d$
50	0.61	0.62	0.62	0.85
100	0.46	0.47	0.47	0.62
200	0.41	0.42	0.42	0.54

β	sem arredondamento		com arredondamento	
	$R = 0.0d$	$R = 0.05d$	$R = 0.05d$	$R = 0.5d$
0.05	0.41	0.42	0.42	0.56
0.10	0.46	0.47	0.47	0.62
0.20	0.68	0.70	0.70	0.86

Tabela 7.6 – Parâmetros obtidos por ajuste de mínimos quadrados segundo a Eq. (7.1): (a) variação de L^2 ($\beta = 0.1$); e (b) variação de β ($L^2 = 100$).

(a)	L^2 ($\beta = 0.1$)	sem arredondamento		com arredondamento			
		$R = 0.0d$		$R = 0.05d$		$R = 0.5d$	
		De_{cr}	A	De_{cr}	A	De_{cr}	A
	50	0.607	1.74	0.625	1.69	0.849	1.34
	100	0.456	2.32	0.468	2.26	0.618	1.80
	200	0.402	2.58	0.410	2.47	0.539	2.11

(b)	β ($L^2 = 100$)	sem arredondamento		com arredondamento			
		$R = 0.0d$		$R = 0.05d$		$R = 0.5d$	
		De_{cr}	A	De_{cr}	A	De_{cr}	A
	0.05	0.402	2.36	0.412	2.31	0.554	1.93
	0.10	0.456	2.32	0.468	2.26	0.618	1.80
	0.20	0.682	2.18	0.698	2.11	0.855	1.61

Na Figura 7.13 apresenta-se o parâmetro de bifurcação (DQ) em função do número de Débora (De), em situação após bifurcação do escoamento, dados pela Tabela 7.2, onde está indicada a linha correspondente ao ajuste proveniente da Eq. (7.1) (linha contínua) tal como traçado pelo programa de gráficos. Estes resultados foram calculados para três casos em que foi variado o parâmetro de extensibilidade, $L^2 = 50$, 100 e 200 (com $\beta = 0.1$ fixo) e correspondem a valores de De superiores a De_{cr} . Os valores de Débora críticos estão indicados na Tabela 7.5, como referido atrás.

A linha contínua traçada no gráfico da Figura 7.13(a) foi efectuada tendo em conta que $DQ^2 = A^2 (De - De_{cr})$, para se chegar aos valores de A e De_{cr} através da técnica de regressão linear. Desta forma, o ponto crítico definido pelo número de Débora não é baseado no incremento usado em corridas sucessivas quando se faz aumentar De , que foi o mesmo para ambas as malhas (onde se variou através de passos $\Delta De = 0.01$), mas sim através de uma correlação particular, $DQ \approx \sqrt{De - De_{cr}}$ (Eq. (7.1)), válida para bifurcações em forma de forquilha e que foi discutido na subsecção anterior. A linha contínua traçada no gráfico da Figura 7.13(b) representa a mesma correlação, reescrita de forma linear como DQ^2 vs. De , e foi ajustada por aplicação do método dos mínimos quadrados. Assim, para o caso base em que $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, obtiveram-se os seguintes resultados:

- Malha 1 (malha base – 51 células): $A = 2.344$ e $De_{cr} = 0.457$, com o coeficiente de correlação linear $r = 0.999$;

- Malha 2 (101 células): $A = 2.437$ e $De_{cr} = 0.456$, com o coeficiente de correlação linear $r = 0.997$.

Partindo destes resultados, pode medir-se um erro mais preciso para o número de Débora crítico de $0.001/0.456 = 0.2\%$. No caso do coeficiente de amplitude A o erro é superior, sendo de $0.093/2.437 = 3.8\%$. É visível da Figura 7.13(a) que a correlação teórica dada pela Eq. (7.1) representa bem os resultados das simulações numa gama de, aproximadamente, $-0.4 < DQ < 0.4$, em torno do ponto de bifurcação, afastando-se fora dessa gama.

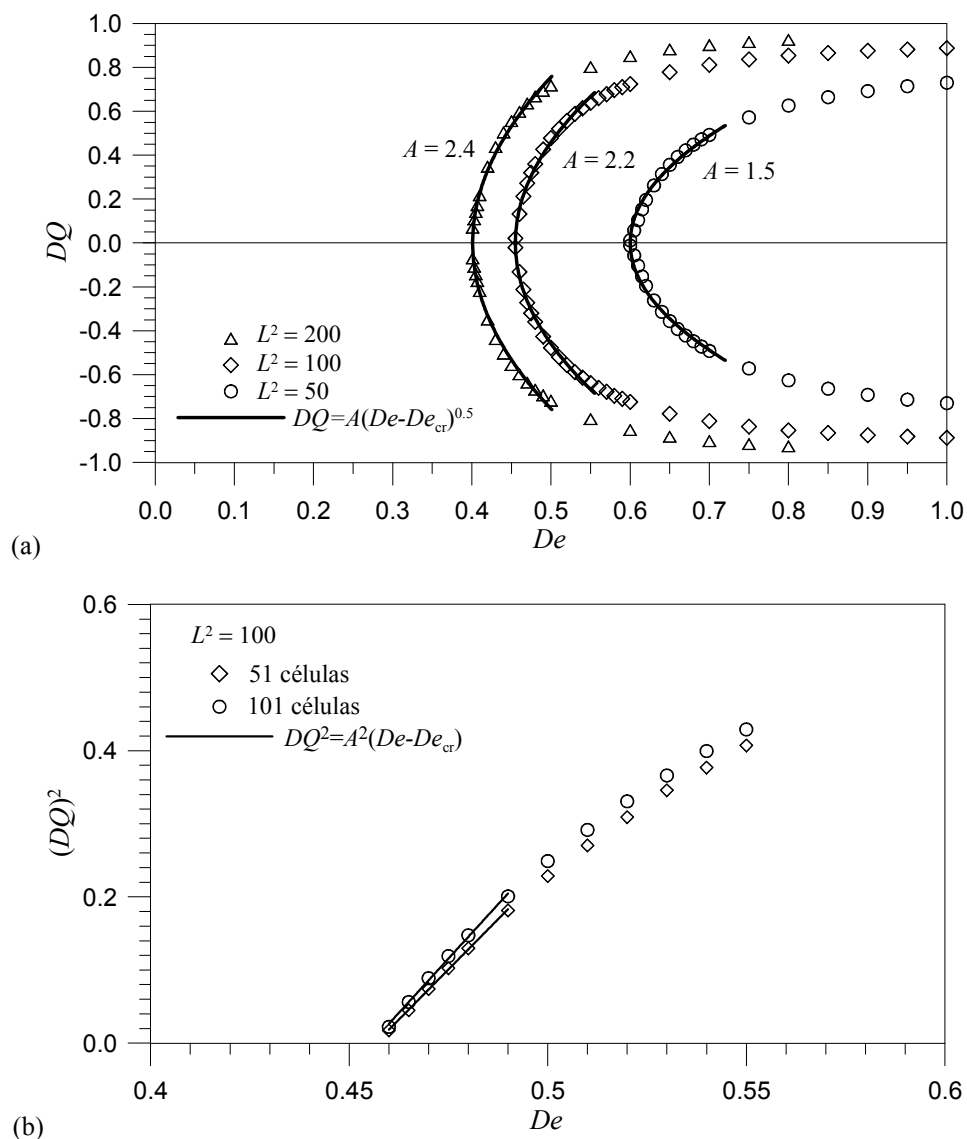


Figura 7.13 – (a) Ajuste proveniente da Eq. (7.1) para os valores da bifurcação do escoamento do fluido FENE-CR, utilizando três valores do parâmetro de extensibilidade e (b) Detalhe da variação de DQ^2 vs. De para as duas malhas (Malha 1 com 51 células e Malha 2 com 101 células), com a apresentação da linha correspondente à regressão linear.

7.3.3 – Efeitos devidos ao arredondamento dos cantos: $R = 0.05d$ e $0.5d$

Nesta subsecção será analisado o efeito provocado no escoamento quando se procede ao arredondamento dos cantos internos no cruzamento dos canais, medido pelo raio de curvatura R , evitando-se problemas numéricos que possam ocorrer junto ao ponto de singularidade, ver Fig. 7.14. Desta forma, pretende-se verificar se o fenómeno da bifurcação que ocorre no escoamento viscoelástico é provocado por um desequilíbrio das tensões elevadas que se geram nos cantos não arredondados (cantos vivos ou quinas, $R = 0.0d$). Como é sabido, os cantos vivos (sem arredondamento) podem provocar perturbações nas soluções numéricas, sobretudo quando o fluido tem propriedades viscoelásticas (Owens & Phillips [105]). Nos estudos anteriormente efectuados neste tipo de geometria alguns autores optaram por considerar apenas um quarto da geometria total nas suas simulações numéricas, tendo sido aplicado um pequeno arredondamento do canto saliente (por exemplo no trabalho de Remmelgas *et al.* [125]), de forma a ser possível obter soluções estáveis para elevados números de Débora. A principal desvantagem deste tipo de simplificação reside na impossibilidade de se preverem eventuais assimetrias no escoamento induzidas por efeitos elásticos. Mesmo em estudos experimentais como, por exemplo, em Schoonen *et al.* [136], os autores optaram por arredondar os cantos internos dos canais de modo a evitarem elevadas concentrações de tensão que surgem inevitavelmente próximo dessas zonas. Isto permite uma melhor interpretação na visualização da região central onde ocorre um elevado estiramento das tensões normais em direcção aos canais de saída. Uma vez que o aparecimento da bifurcação do escoamento estará ligado ao que ocorre na zona central do cruzamento dos canais, nomeadamente à presença de tensões compressivas e extensionais fortes, espera-se que o arredondamento dos cantos não afecte directamente o fenómeno da bifurcação. Para se verificar este pressuposto optou-se por considerar duas geometrias com os cantos arredondados: uma com um arredondamento ligeiro dos cantos internos, $R = 0.05d$; e outra com um arredondamento mais intenso, $R = 0.5d$, conforme ilustrado na Fig. 7.14.

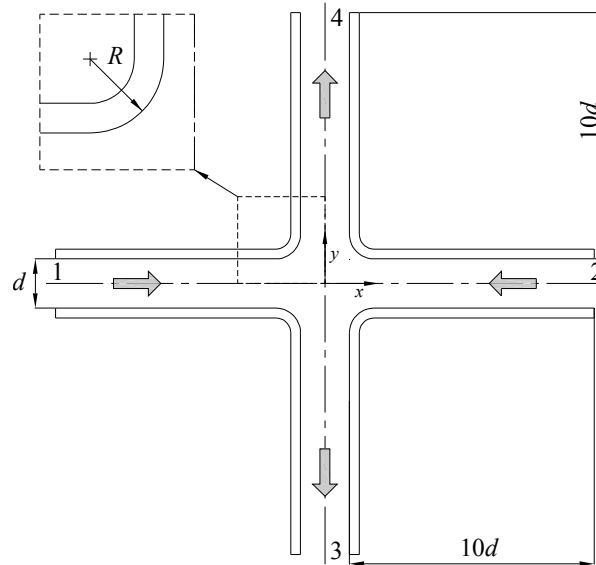


Figura 7.14 – Representação esquemática da geometria com os cantos arredondados.

Para mapear a geometria do escoamento com os cantos arredondados utilizou-se as mesmas características geométricas que foram utilizadas na malha sem cantos arredondados ($R = 0.0d$) e que estão descritas na Tabela 7.1. Apresenta-se na Figura 7.15 a malha computacional utilizada para ambos os casos em que foram arredondados os cantos da geometria: curvatura suave indicada na Figura 7.15(a) (para $R = 0.05d$); e curvatura intensa correspondente à Figura 7.15(b) (para $R = 0.5d$).

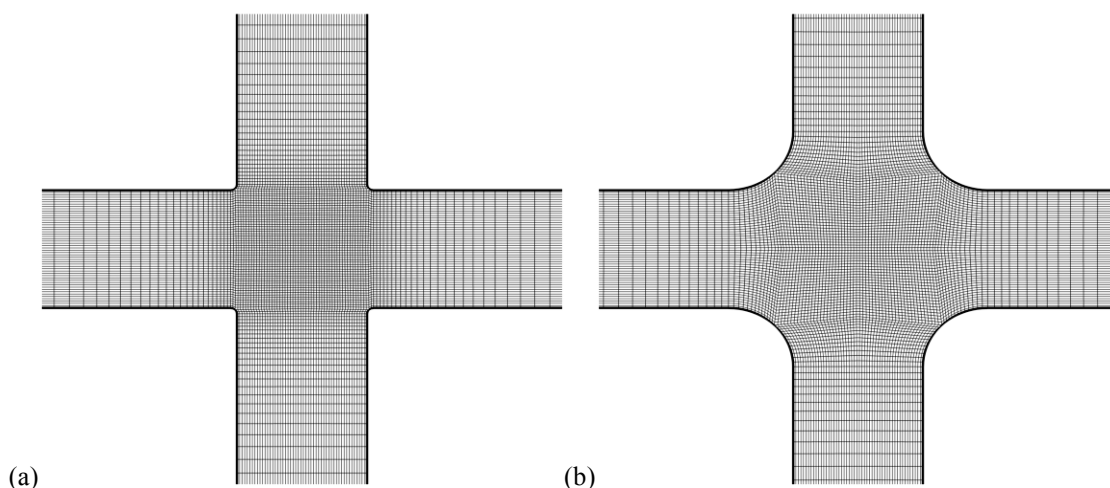


Figura 7.15 – Detalhe da malha computacional ($-2d \leq x, y \leq +2d$) com os cantos arredondados: (a) $R = 0.05d$ (raio de curvatura pequeno); e (b) $R = 0.5d$ (raio de curvatura maior).

Os números de Débora críticos obtidos para estas geometrias estão indicados nas Tabelas 7.5 e 7.6, partes (a) e (b) para os casos em que se variou o parâmetro de extensibilidade L^2 (com β constante e igual a 0.1) e a razão de viscosidades do solvente β (com L^2 constante e igual a 100), respectivamente. Os resultados previstos para o parâmetro de bifurcação em função do número de Débora estão indicados nas Tabelas 7.7 e 7.8 para ambos os casos ($R = 0.05d$ e $0.5d$). Na Tabela 7.7(a) e (b) apresentam-se os valores obtidos de DQ na geometria em que o arredondamento tem um raio de curvatura mais pequeno ($R = 0.05d$) para três casos em que se variou o parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR: $L^2 = 50, 100$ e 200 (com $\beta = 0.1$ fixo); e a razão de viscosidades do solvente: $\beta = 0.05, 0.1$ e 0.2 (com $L^2 = 100$ fixo), de forma avaliar o comportamento do escoamento. Na Tabela 7.8 procedeu-se a avaliação similar mas considerando a geometria com raio de curvatura maior ($R = 0.5d$).

Tabela 7.7 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o fluido FENE-CR com o arredondamento menor ($R = 0.05d$): (a) influência da extensibilidade L^2 ($\beta = 0.1$); e (b) influência da razão de viscosidades do solvente β ($L^2 = 100$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

(a)						(b)					
$L^2 = 50$		$L^2 = 100$		$L^2 = 200$		$\beta = 0.05$		$\beta = 0.10$		$\beta = 0.20$	
De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000
0.50	0.000	0.45	0.000	0.41	0.000	0.41	0.000	0.45	0.000	0.50	0.000
0.60	0.000	0.46	0.000	0.42	0.226	0.42	0.184	0.46	0.000	0.60	0.000
0.61	0.000	0.47	0.108	0.43	0.344	0.43	0.310	0.47	0.108	0.65	0.000
0.62	0.052	0.48	0.248	0.44	0.426	0.44	0.390	0.48	0.248	0.69	0.000
0.63	0.128	0.49	0.336	0.45	0.490	0.45	0.450	0.49	0.336	0.70	0.114
0.64	0.206	0.50	0.404	0.46	0.542	0.46	0.500	0.50	0.404	0.71	0.228
0.65	0.270	0.51	0.456	0.47	0.586	0.47	0.540	0.51	0.456	0.72	0.314
0.66	0.316	0.52	0.500	0.48	0.622	0.48	0.576	0.52	0.500	0.73	0.376
0.67	0.354	0.53	0.538	0.49	0.654	0.49	0.606	0.53	0.538	0.74	0.424
0.68	0.388	0.54	0.570	0.50	0.682	0.50	0.632	0.54	0.570	0.75	0.466
0.69	0.416	0.55	0.597	0.55	0.782	0.55	0.726	0.55	0.597	0.80	0.598
0.70	0.441	0.60	0.696	0.60	0.834	0.60	0.782	0.60	0.696	0.85	0.674
0.75	0.536	0.70	0.796	0.65	0.870	0.65	0.816	0.70	0.796	0.90	0.724
0.80	0.598	0.80	0.842	0.70	0.892	0.70	0.842	0.80	0.842	0.95	0.758
0.90	0.672	0.90	0.868	0.75	0.908	---	---	0.90	0.868	1.00	0.782
1.00	0.716	1.00	0.882	0.80	0.918	---	---	1.00	0.882	---	---

Tabela 7.8 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o fluido FENE-CR com o arredondamento maior ($R = 0.5d$): (a) influência da extensibilidade L^2 ($\beta = 0.1$); e (b) influência da razão de viscosidades do solvente β ($L^2 = 100$).

(a)						(b)					
$L^2 = 50$		$L^2 = 100$		$L^2 = 200$		$\beta = 0.05$		$\beta = 0.10$		$\beta = 0.20$	
De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000
0.50	0.000	0.50	0.000	0.50	0.000	0.50	0.000	0.50	0.000	0.50	0.000
0.60	0.000	0.60	0.000	0.53	0.000	0.55	0.000	0.60	0.000	0.60	0.000
0.70	0.000	0.61	0.000	0.54	0.066	0.56	0.146	0.61	0.000	0.70	0.000
0.80	0.000	0.62	0.076	0.55	0.218	0.57	0.244	0.62	0.076	0.80	0.000
0.85	0.056	0.63	0.200	0.56	0.304	0.58	0.312	0.63	0.200	0.85	0.000
0.86	0.138	0.64	0.268	0.57	0.370	0.59	0.366	0.64	0.268	0.86	0.110
0.87	0.192	0.65	0.324	0.58	0.422	0.60	0.410	0.65	0.324	0.87	0.198
0.88	0.234	0.66	0.372	0.59	0.468	0.61	0.448	0.66	0.372	0.88	0.256
0.89	0.268	0.67	0.412	0.60	0.505	0.62	0.480	0.67	0.412	0.89	0.302
0.90	0.296	0.68	0.444	0.65	0.638	0.63	0.510	0.68	0.444	0.90	0.342
0.91	0.322	0.69	0.474	0.70	0.719	0.64	0.534	0.69	0.474	0.91	0.376
0.92	0.346	0.70	0.501	0.75	0.772	0.65	0.558	0.70	0.500	0.92	0.406
0.93	0.366	0.75	0.600	0.80	0.810	0.70	0.644	0.75	0.600	0.93	0.434
0.94	0.384	0.80	0.666	0.85	0.836	---	---	0.80	0.666	0.94	0.458
0.95	0.402	0.90	0.746	0.90	0.856	---	---	0.90	0.746	0.95	0.480
1.00	0.470	1.00	0.790	1.00	0.884	---	---	1.00	0.790	1.00	0.566

Na Figura 7.16 apresenta-se graficamente os resultados fornecidos nas tabelas anteriores (Tabela 7.7 e 7.8), mostrando a variação do parâmetro de bifurcação (DQ) em função do número de Débora (De) para $R = 0.05d$ e $0.5d$. Verifica-se destes resultados que, no caso com menor arredondamento ($R = 0.05d$), o número de Débora crítico (De_{cr}) e a variação do parâmetro de bifurcação em função do número de Débora mantêm-se praticamente inalterados quando comparados com o caso em que não há arredondamento dos cantos ($R = 0.0d$, analisado na subsecção 7.3.1). Aí, tinha-se $R = 0.0d \rightarrow De_{cr} \approx 0.46$; e agora tem-se $R = 0.05d \rightarrow De_{cr} \approx 0.47$, de acordo com a Fig. 7.5(c) e 7.17(c), respectivamente. Assim, é lícito concluir-se que o mecanismo que provoca a bifurcação do escoamento não é controlado pelos efeitos que ocorrem próximo dos cantos dos canais de entrada. Para maior arredondamento dos cantos o efeito visível é haver um atraso no ponto crítico de bifurcação (De_{cr} aumenta), mas a influência de β e L^2 permanece inalterada.

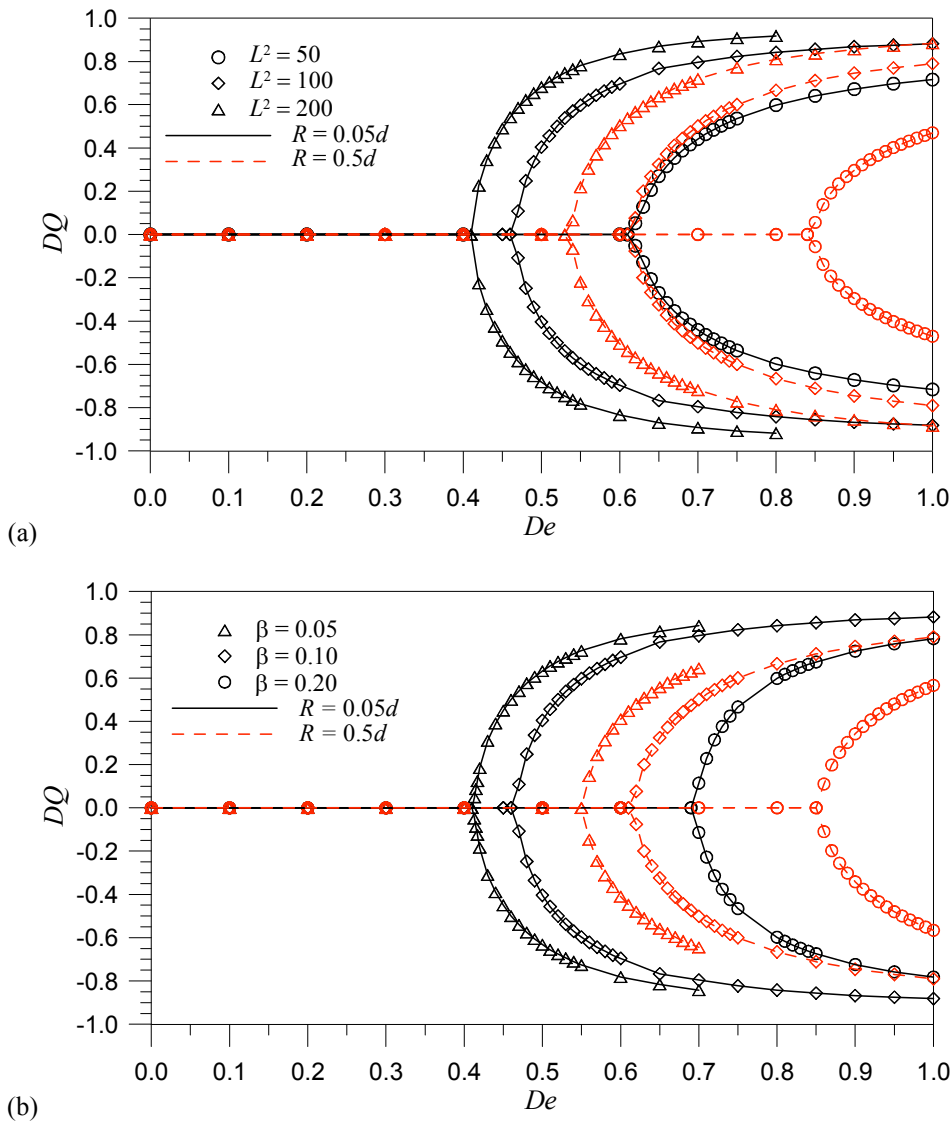


Figura 7.16 – Efeito do arredondamento dos cantos sobre a bifurcação do escoamento do fluido FENE-CR para os dois casos em que foi modificada a curvatura dos cantos ($R = 0.05d$ e $0.5d$): (a) $L^2 = 50, 100$ e 200 , com $\beta = 0.1$; e (b) $\beta = 0.05, 0.1$ e 0.2 , com $L^2 = 100$.

Na Figura 7.17 mostram-se as linhas de corrente previstas na proximidade da zona central do cruzamento dos canais, para o caso base $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, com o menor arredondamento dos cantos $R = 0.05d$, para quatro valores de Débora: $De = 0$ (fluido newtoniano), 0.45 (antes do ponto crítico), 0.47 (imediatamente acima do valor crítico) e 0.7 (quase completamente bifurcado). Qualitativa e quantitativamente, estes gráficos são muito parecidos com os correspondentes da Figura 7.5 onde os cantos não estavam arredondados ($R = 0.0d$), o que dá suporte acrescido à conclusão anterior.

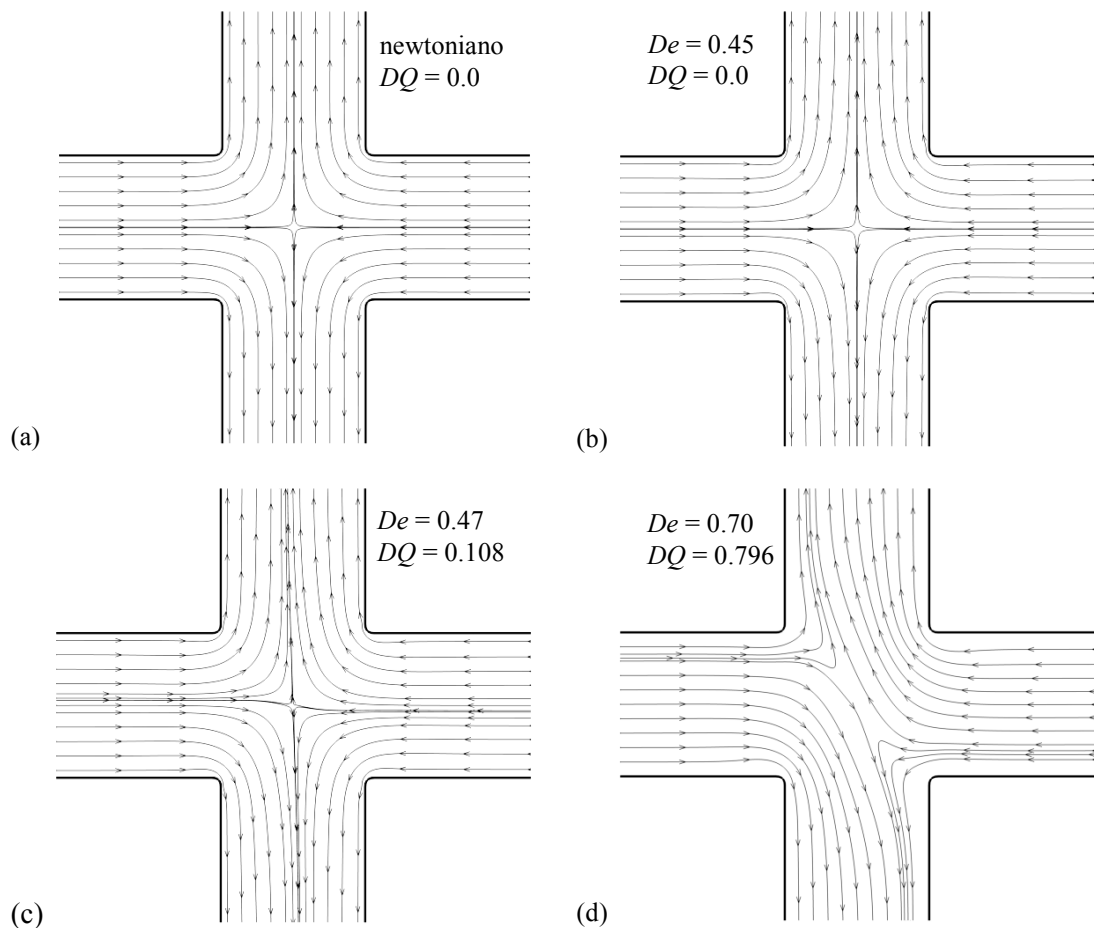


Figura 7.17 – Evolução das linhas de corrente para o caso com menor arredondamento dos cantos $R = 0.05d$ ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.45$; (c) $De = 0.47$; e (d) $De = 0.70$.

Nas Figuras 7.18 e 7.19 mostram-se algumas características relativas aos campos de tensão, nomeadamente os contornos das tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} , quando se aumenta o número de Débora, para os casos correspondentes aos anteriormente apresentados. Verifica-se que mesmo com um ligeiro arredondamento dos cantos ($R = 0.05d$) aparecem algumas concentrações de tensão próximas à zona de arredondamento. Comparando com as correspondentes figuras sem arredondamento dos cantos (Figs. 7.6 e 7.7) o que sobressai é a quase igualdade entre gráficos equivalentes.

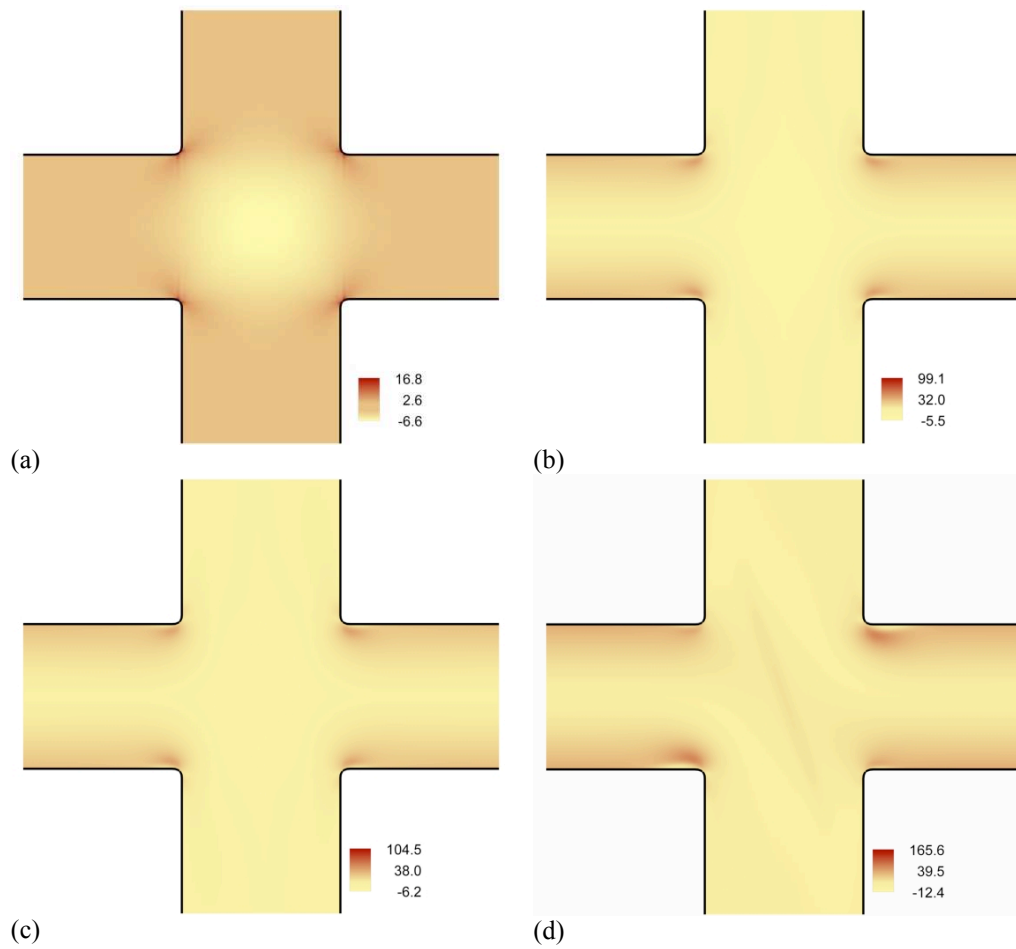


Figura 7.18 – Evolução dos campos da tensão normal horizontal $\tau_{xx}/(\eta_0 U/d)$ para menor arredondamento dos cantos, $R = 0.05d$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.45$; (c) $De = 0.47$; e (d) $De = 0.70$.

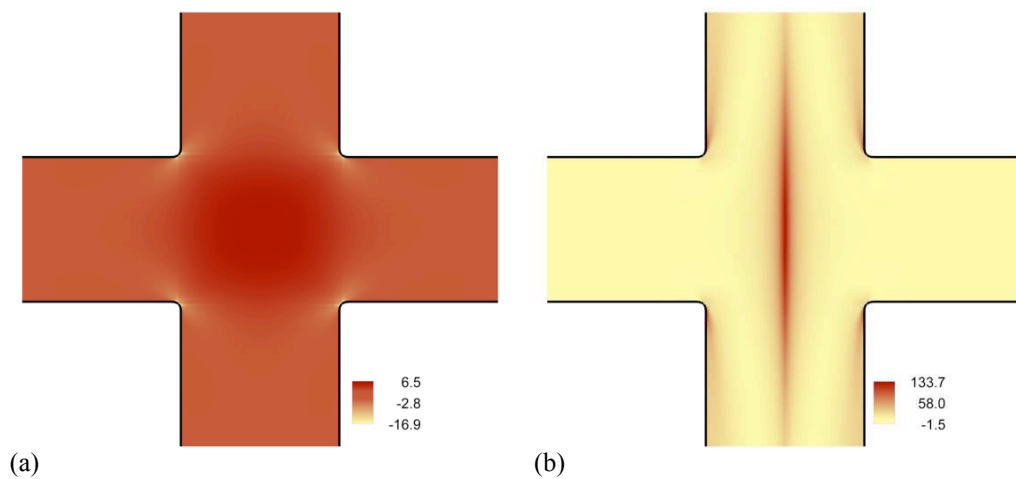


Figura 7.19 – Evolução dos campos da tensão normal vertical $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ para menor arredondamento dos cantos, $R = 0.05d$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.45$; (c) $De = 0.47$; e (d) $De = 0.70$.

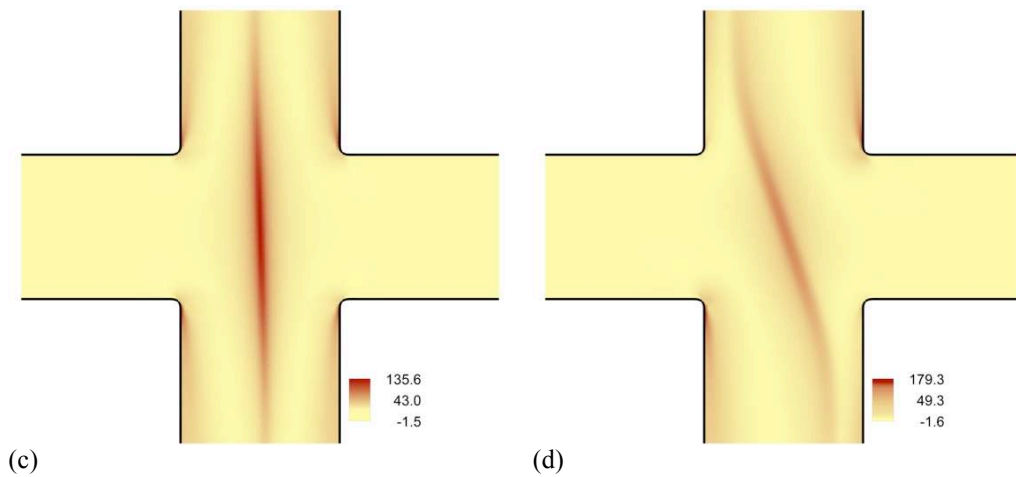


Figura 7.19 (cont.) – Evolução dos campos da tensão normal vertical $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ para menor arredondamento dos cantos, $R = 0.05d$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.45$; (c) $De = 0.47$; e (d) $De = 0.70$.

Da mesma forma, apresenta-se na Figura 7.20 a evolução das linhas de corrente do escoamento previstas na proximidade da zona central do cruzamento dos canais também para o caso base de $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, com a curvatura mais acentuada nos cantos $R = 0.5d$, para quatro valores de Débora: $De = 0$ (fluido newtoniano), 0.60 (antes do ponto crítico), 0.62 (imediatamente acima do valor crítico) e 0.80 (quase completamente bifurcado).

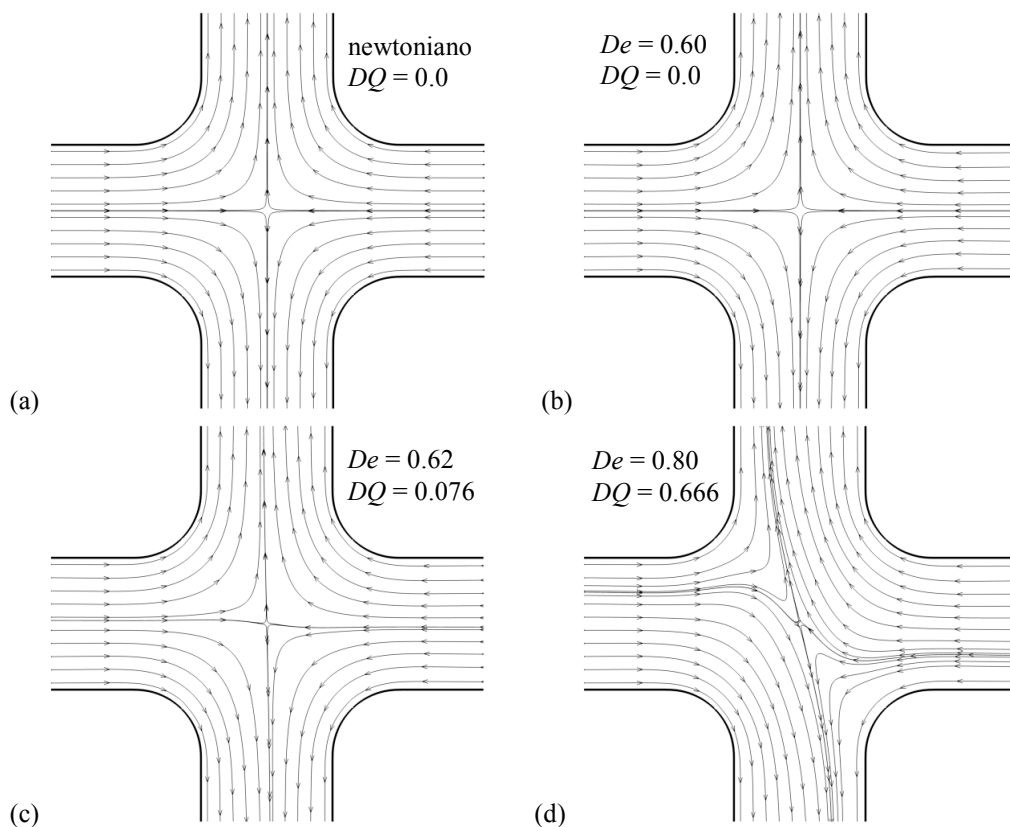


Figura 7.20 – Evolução das linhas de corrente para o caso com maior arredondamento dos cantos, $R = 0.5d$ ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.60$; (c) $De = 0.62$; e (d) $De = 0.80$.

Nas Figuras 7.21 e 7.22 estão representadas as respectivas características dos campos de tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} . Comprova-se, desta forma, que o arredondamento mais acentuado dos cantos ($R = 0.5d$) reduz de forma substancial a concentração de tensões que se verificava no caso em que não havia arredondamento dos cantos ($R = 0.0d$). Tirando isso, as estruturas junto à zona central do cruzamento dos canais são similares, mas ocorrendo para valores do número de Débora diferentes: a zona de tensões extensionais importantes em forma de S, denotando padrão de bifurcação, ocorre agora para $De = 0.80$ (Fig. 7.22(d)), enquanto na geometria com pequeno raio de curvatura ocorria para $De = 0.70$ (Fig. 7.19(d)).

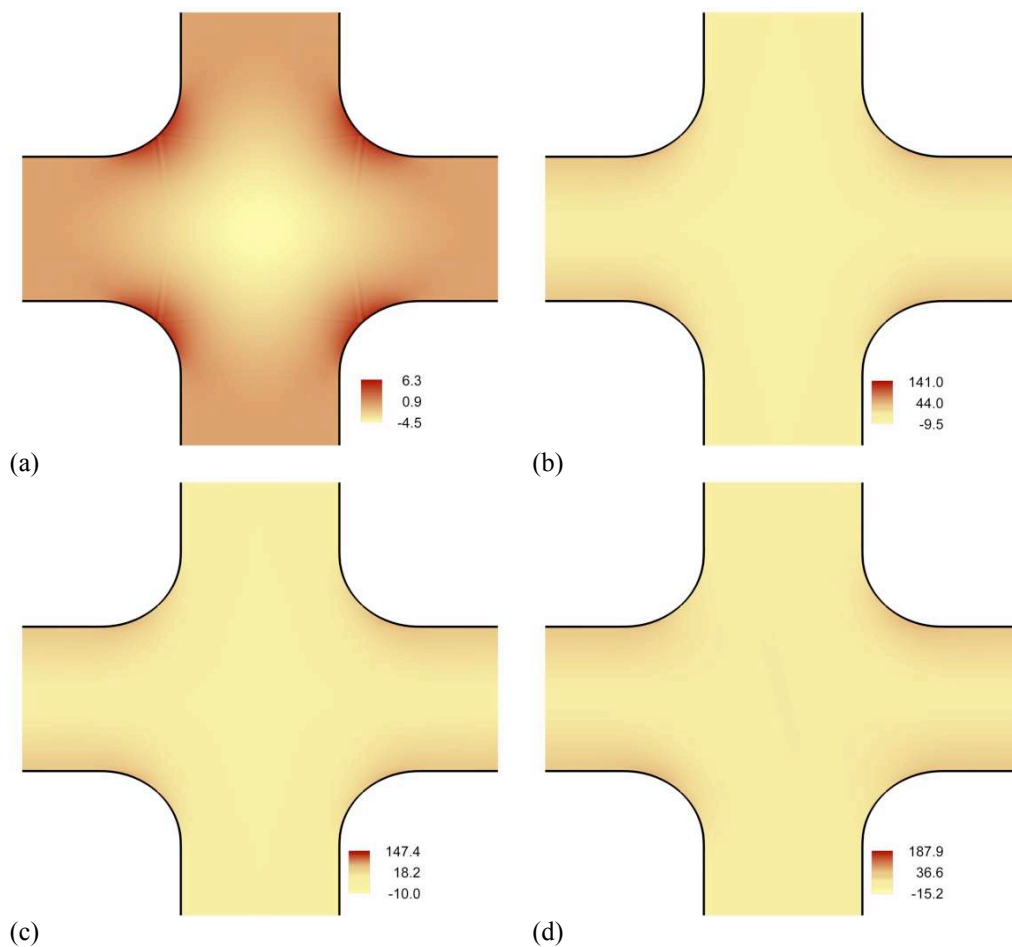


Figura 7.21 – Evolução dos campos da tensão normal horizontal $\tau_{xx} / (\eta_0 U / d)$ para o caso com maior arredondamento dos cantos, $R = 0.5d$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.60$; (c) $De = 0.62$; e (d) $De = 0.80$.

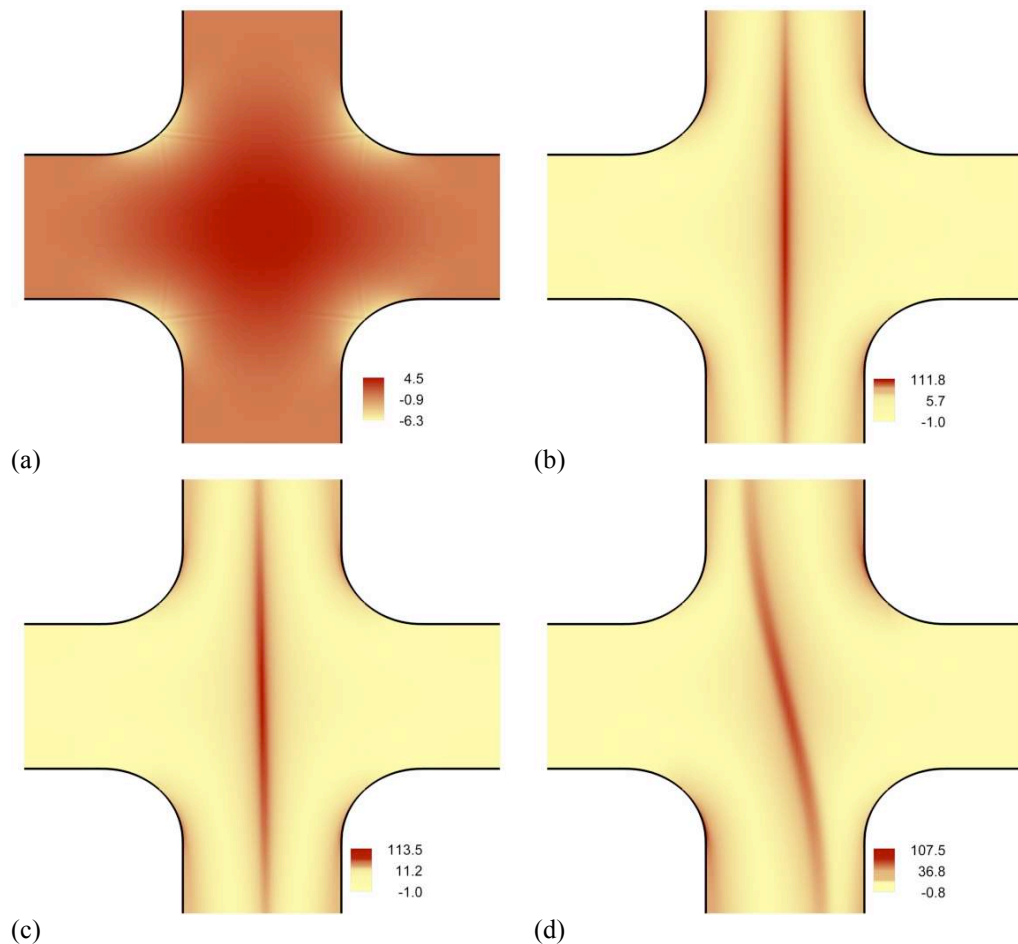


Figura 7.22 – Evolução dos campos da tensão normal vertical $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ para o caso com maior arredondamento dos cantos, $R = 0.5d$ (modelo FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$): (a) newtoniano; (b) $De = 0.60$; (c) $De = 0.62$; e (d) $De = 0.80$.

O atraso do aparecimento da bifurcação do escoamento para os três casos analisados, sem arredondamento dos cantos ($R = 0.0d$) e com aumento progressivo do arredondamento ($R = 0.05d$ e $0.5d$), resulta da alteração do campo de velocidades, sobretudo da variação da velocidade axial ao longo da linha central dos canais, como mostrado na Fig. 7.23(b). O que se espera é que haja uma redução da taxa de deformação ($\dot{\epsilon} = \partial u / \partial x$) ao longo da linha central dos canais de entrada, na zona próxima ao ponto de estagnação no centro do cruzamento dos canais, para a geometria com cantos muito arredondados, como se pode ver pela Fig. 7.23(a).

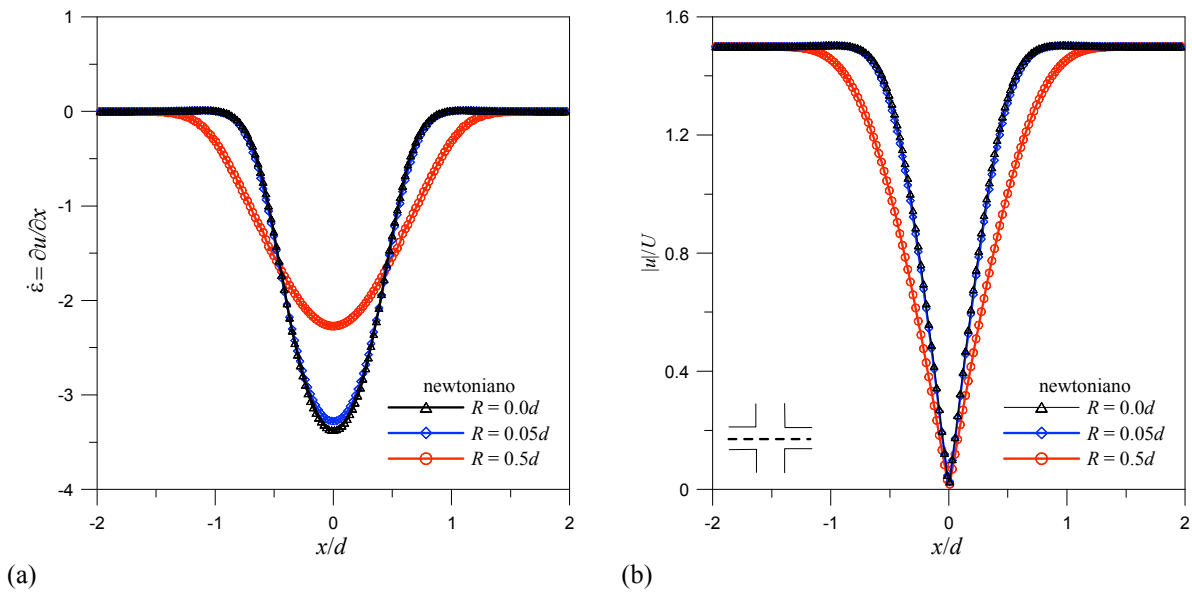


Figura 7.23 – Influência da curvatura dos cantos, $R/d = 0.0$ (sem arredondamento), 0.05 e 0.5 , para o fluido newtoniano ao longo da linha central dos canais de entrada: (a) perfis da taxa de deformação ($\dot{\epsilon} = \partial u / \partial x$); e (b) perfis de velocidade.

Os valores máximos da taxa de deformação obtidos no ponto de estagnação estão apresentados na Tabela 7.9 para os três casos estudados: $R = 0.0d$ (sem arredondamento) e $R = 0.05d$ e $0.5d$ (com arredondamentos sucessivos) para o fluido newtoniano, onde $\dot{\epsilon}$ foi normalizado com U/d .

Tabela 7.9 – Taxa de deformação para o fluido newtoniano no ponto de estagnação.

Geometria	$\dot{\epsilon}$
$R = 0.0d$	-3.346
$R = 0.05d$	-3.255
$R = 0.5d$	-2.261

Pode concluir-se, com base na Figura 7.23 e Tabela 7.9, que quando o raio de curvatura dos cantos é pequeno ($R = 0.05d$) os resultados obtidos são próximos do caso em que não há arredondamento porque a evolução da taxa de deformação é quase igual, a diferença no valor máximo é de 2.7%. Todavia, quando se compara o caso em que não há arredondamento dos canais com o caso em que a curvatura é maior ($R = 0.5d$), a diferença nas taxas de deformação é já mais significativa, próximo ao ponto de estagnação é de 32%. Isto faz com que ocorra um atraso no aparecimento da bifurcação do escoamento, tal como se pode constatar pelos resultados apresentados nas Tabelas 7.5 e 7.6.

Tem interesse investigar a forma como os parâmetros do modelo constitutivo (β e L^2) afectam De_{cr} . A Figura 7.24(a) mostra a variação do número de Débora crítico (De_{cr}) em função do parâmetro de extensibilidade L^2 (com $\beta = 0.1$ constante) e da concentração polimérica (através do parâmetro β , com $L^2 = 100$ constante), para os três casos em que se variou a curvatura dos cantos ($R/d = 0.0, 0.05$ e 0.5). Diferenças na evolução da taxa de deformação do escoamento estão relacionadas com as características extensionais do fluido, como se pode deduzir por análise da Fig. 7.24(a). A variação do declive do número de Débora crítico (De_{cr}) em função do parâmetro de extensibilidade L^2 (linha sólida) para o caso com curvatura acentuada ($R = 0.5d$) é significativamente diferente do caso em que não há curvatura dos canais ($R = 0.0d$), especialmente para valores de L^2 muito baixos. Verifica-se também que o aumento de L^2 tende a antecipar a assimetria do escoamento que, por outro lado, é retardada quando se aumenta a curvatura dos cantos, conforme já referido anteriormente. A concentração polimérica (linha tracejada) influencia a variação do De_{cr} de forma independente da existência ou não de curvatura dos cantos. Na Figura 7.24(b) representam-se os mesmos resultados para a variação do número de Débora crítico, mas neste caso são apresentados em função do seguinte grupo adimensional: $(1-\beta)L^2/\beta$. Obtém-se uma boa correlação que indica que o número de Débora crítico é de facto controlado pela razão entre as viscosidades elongacionais máximas que resultam do polímero ($\eta_{E_{max}} \sim (1-\beta)L^2$) e do solvente ($\eta_{E_{max}} \sim \beta$). Fica assim estabelecida a forma funcional de dependência do De_{cr} em relação a L^2 e β .

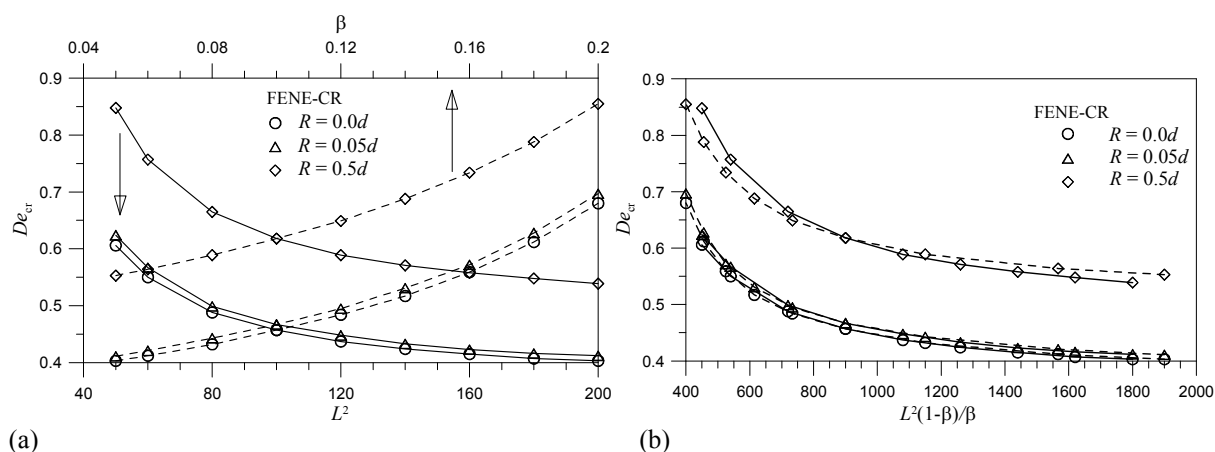


Figura 7.24 – Números de Débora críticos (De_{cr}) para modelo FENE-CR com várias curvaturas dos cantos em função de: (a) extensibilidade e concentração polimérica, representados em separado; e (b) grupo adimensional proporcional às tensões extensionais máximas $(1-\beta)L^2/\beta$. Nota: na parte (b) as linhas sólidas são para $\beta = 0.1$ (vários L^2); as linhas interrompidas são para $L^2 = 100$ (vários β).

7.3.4 – Efeitos devido ao modelo viscoelástico: FENE-CR e FENE-P

Nos modelos constitutivos reológicos FENE-P e FENE-CR as propriedades materiais de um escoamento de corte simples ou extensional uniaxial são muito semelhantes, excepto a viscosidade de corte que tem um comportamento reofluidificante (a viscosidade diminui com a taxa de deformação) no modelo FENE-P e é constante no modelo FENE-CR, conforme enunciado anteriormente. O Capítulo 4 faz uma descrição detalhada das funções materiais destes modelos reológicos em escoamento de corte simples e extensional uniaxial. Uma vez que a bifurcação ocorre na zona central do cruzamento de canais planos, é controlada essencialmente pelos efeitos compressivos/extensionais ao longo da linha central dos canais e espera-se que não surjam diferenças significativas entre estes dois modelos reológicos (FENE-P e FENE-CR).

Na Figura 7.25 faz-se uma comparação entre os resultados da variação do parâmetro de assimetria em função do número de Débora previstos para o modelo FENE-P (representado por símbolos) e o modelo FENE-CR (linha sólida).

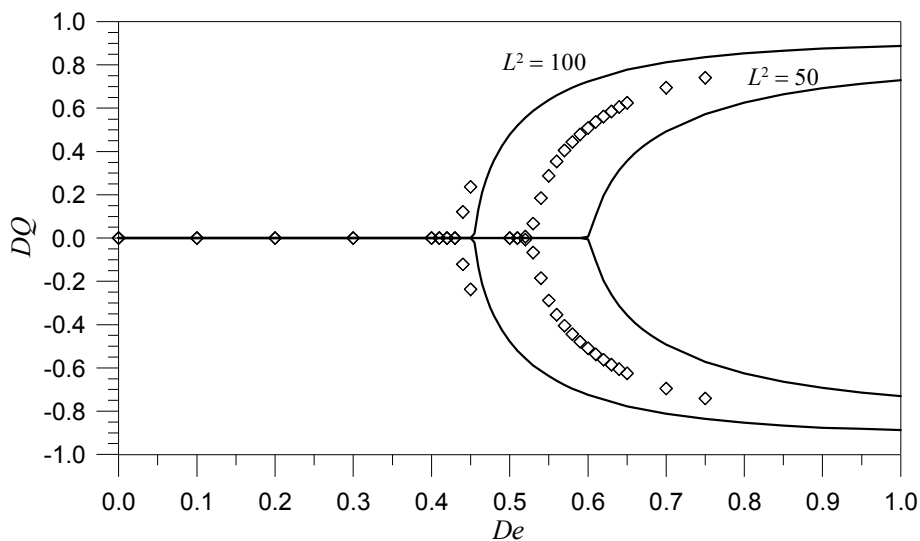


Figura 7.25 – Variação do parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para os modelos FENE-P (símbolos) e FENE-CR (linha contínua) para $L^2 = 50$ e 100 ($\beta = 0.1$).

Os resultados referentes ao modelo FENE-P estão indicados na Tabela 7.10 para dois valores de extensibilidade $L^2 = 50$ e 100 (com $\beta = 0.1$ fixo), enquanto os resultados previstos pelo modelo FENE-CR encontram-se representados na Tabela 7.2, analisados na subsecção 7.3.1.

Tabela 7.10 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o fluido FENE-P: influência da extensibilidade L^2 (com $\beta = 0.1$ fixo). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$L^2 = 50$		$L^2 = 100$	
De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000
0.45	0.000	0.43	0.000
0.50	0.000	0.44	0.121
0.52	0.007	0.45	0.237
0.53	0.067	0.46	*
0.54	0.185		
0.55	0.288		
0.56	0.354		
0.57	0.405		
0.58	0.444		
0.59	0.479		
0.60	0.509		
0.61	0.537		
0.62	0.562		
0.63	0.585		
0.64	0.606		
0.65	0.625		
0.70	0.695		
0.75	0.741		

* dependente do tempo (ver Fig. 7.26)

A Figura 7.25 mostra que no modelo FENE-P reofluidificante a assimetria do escoamento ocorre para valores de Débora críticos mais baixos do que no caso do modelo FENE-CR, para os dois valores de extensibilidade simulados $L^2 = 50$ e 100 (com $\beta = 0.1$ fixo). Assim, no modelo FENE-P a bifurcação do escoamento é antecipada comparativamente com o modelo FENE-CR, para as mesmas condições e com o número de Débora baseado nas propriedades para $\dot{\gamma} = 0$. Verificou-se também que para valores do parâmetro de extensibilidade elevados o modelo FENE-P tem tendência a fornecer soluções dependentes do tempo (não estacionárias), enquanto no caso do modelo FENE-CR a bifurcação mantém-se sempre estacionária até valores de $De \approx 1.0$. Os resultados previstos pelo modelo FENE-P propiciam o aparecimento de um regime flutuante da assimetria do escoamento mesmo para baixos valores de Débora. De forma a ilustrar esta solução não estacionária, que foi também observada experimentalmente por Arratia *et al.* [15], apresenta-se na Figura 7.26 a previsão de DQ em função do tempo (adimensionalizado com U/d) para um valor de $De = 0.46$ imediatamente acima do valor crítico para a bifurcação ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

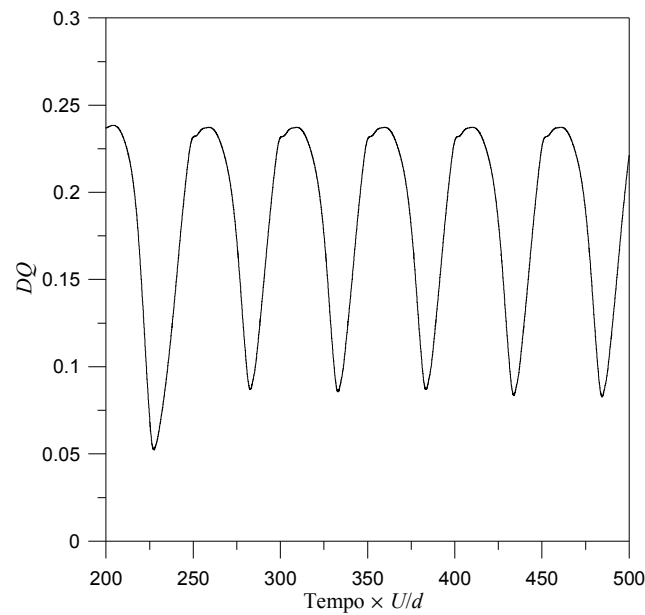


Figura 7.26 – Evolução temporal do parâmetro de assimetria DQ para o modelo FENE-P em condições de $De = 0.46$ ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Pode observar-se assim uma evolução periódica, mas não sinusoidal, da assimetria do escoamento, que apresenta um período de cerca de 50 unidades de tempo. Deve referir-se que esta situação, em que se verifica uma oscilação de DQ com o modelo FENE-P, não era de esperar uma vez que este modelo tem um comportamento refluidificante da viscosidade de corte. Geralmente, tende a melhorar o comportamento numérico, permitindo atingir condições de números de Débora mais elevados. A causa para estas oscilações temporais poderá estar ligada com o facto do campo de velocidades exibir algumas perturbações localmente, próximo dos pontos de singularidade, que serão geradas pelos elevados gradientes de tensão que aí ocorrem. Desta forma, ou este fenómeno é puramente numérico sem realidade física, ou poderá estar relacionado com o aparecimento da segunda instabilidade observada experimentalmente em Arratia *et al.* [15]. Neste caso, as oscilações no tempo das soluções numéricas têm realidade física. Para verificar se os cantos vivos da geometria seriam responsáveis pela instabilidade temporal, fizeram-se algumas simulações com o modelo FENE-P considerando a geometria com arredondamento dos cantos ($R = 0.5d$, ver Fig. 7.15(b)). Procedeu-se então ao estudo da variação do parâmetro de assimetria do escoamento com o parâmetro de extensibilidade do modelo, $L^2 = 50, 100$ e 200 (para um valor fixo de $\beta = 0.1$), e com a razão de viscosidades do solvente newtoniano, $\beta = 0.05, 0.10$ e 0.20 (para um valor fixo de $L^2 = 100$). Os resultados previstos estão apresentados nas Tabelas 7.11 e 7.12, respectivamente.

Tabela 7.11 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para fluido FENE-P e geometria com cantos arredondados ($R = 0.5d$): influência da extensibilidade L^2 (com $\beta = 0.1$ fixo). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$L^2 = 50$		$L^2 = 100$		$L^2 = 200$	
De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000	0.40	0.000
0.60	0.000	0.55	0.000	0.51	0.000
0.65	0.000	0.56	0.000	0.52	0.012
0.70	0.000	0.57	0.000	0.53	0.100
0.71	0.030	0.58	0.048	0.54	0.238
0.72	0.166	0.59	0.148	0.55	0.322
0.73	0.244	0.60	0.252	0.56	0.388
0.74	0.294	0.61	0.322	0.57	0.440
0.75	0.336	0.62	0.376	0.58	0.486
0.76	0.372	0.63	0.422	0.59	0.522
0.77	0.402	0.64	0.458	0.60	0.556
0.78	0.430	0.65	0.492	0.65	0.674
0.79	0.454	0.66	0.522	0.70	0.748
0.80	0.476	0.67	0.548	0.75	0.796
0.85	0.564	0.68	0.572	0.80	0.832
0.90	0.624	0.69	0.594	0.85	*
0.95	0.670	0.70	0.614	---	---
1.00	0.704	0.75	0.690	---	---
---	---	0.80	0.742	---	---
---	---	0.85	0.778	---	---
---	---	0.90	0.806	---	---
---	---	0.95	*	---	---

* dependente do tempo (Ver Fig. 7.28)

Tabela 7.12 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para fluido FENE-P e geometria com cantos arredondados ($R = 0.5d$): influência da razão de viscosidades do solvente β (com $L^2 = 100$ fixo).

Os valores para $\beta = 0.10$ estão indicados na Tabela 7.11 referentes a $L^2 = 100$.

$\beta = 0.05$		$\beta = 0.20$	
De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000
0.20	0.000	0.40	0.000
0.40	0.000	0.60	0.000
0.50	0.000	0.70	0.000
0.51	0.000	0.75	0.000
0.52	0.000	0.76	0.000
0.53	0.062	0.77	0.000
0.54	0.222	0.78	0.026
0.55	0.308	0.79	0.132
0.56	0.372	0.80	0.224
0.57	0.424	0.81	0.284
0.58	0.466	0.82	0.332
0.59	0.502	0.83	0.372
0.60	0.532	0.84	0.408
0.61	0.560	0.85	0.438
0.62	0.586	0.86	0.466
0.63	0.608	0.87	0.490
0.64	0.628	0.88	0.512
0.65	0.646	0.89	0.534
0.70	0.718	0.90	0.552

Tabela 7.12 (cont.) – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para fluido FENE-P e geometria com cantos arredondados ($R = 0.5d$): influência da razão de viscosidades do solvente β (com $L^2 = 100$ fixo). Os valores para $\beta = 0.10$ estão indicados na Tabela 7.11 referentes a $L^2 = 100$.

$\beta = 0.05$		$\beta = 0.20$	
De	DQ	De	DQ
0.75	0.768	0.91	0.570
0.80	0.802	0.92	0.586
0.85	0.828	0.93	0.600
0.90	0.846	0.94	0.614
0.95	0.862	0.95	0.626
1.00	0.874	1.00	0.680

Na Tabela 7.12 estão apenas indicados os valores para $\beta = 0.05$ e 0.20 , uma vez que para $\beta = 0.10$ já se encontram apresentados na Tabela 7.11 (na coluna $L^2 = 100$). Seguidamente, apresenta-se na Figura 7.27 a evolução do parâmetro de assimetria em função do número de Débora para as duas situações analisadas com o modelo FENE-P (variação de L^2 e variação de β), fazendo-se a comparação com os resultados obtidos para o modelo FENE-CR.

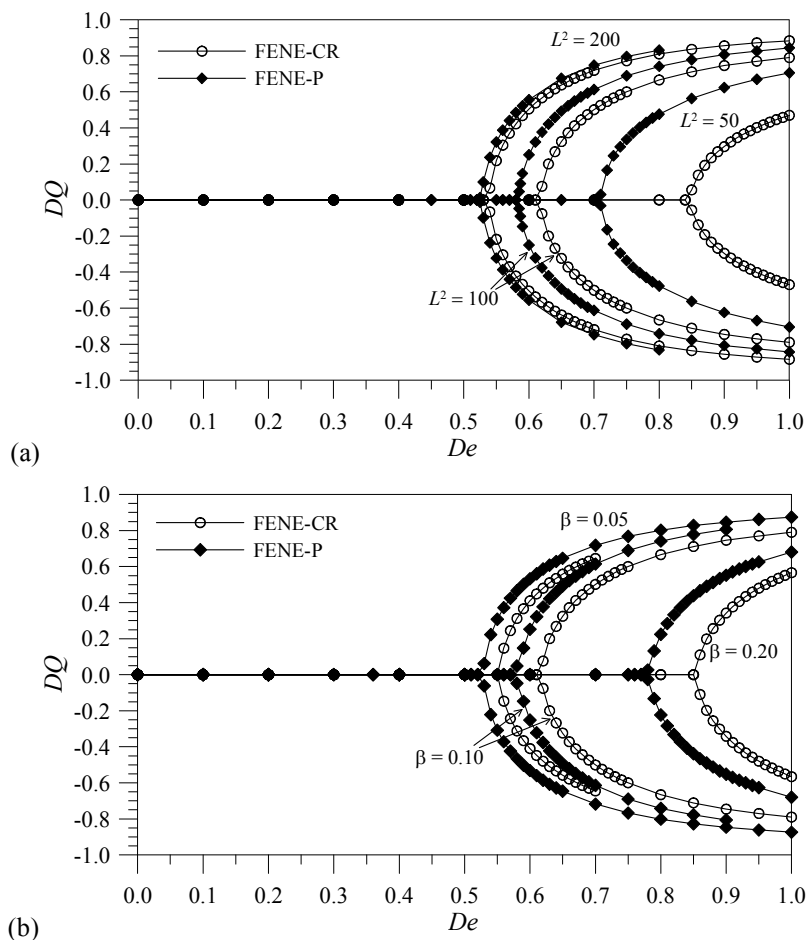


Figura 7.27 – Variação do parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora referente a geometria com curvatura maior ($R = 0.5d$) para os modelos FENE-CR e FENE-P: (a) influência da extensibilidade L^2 ($\beta = 0.1$); e (b) influência da razão de viscosidades do solvente β ($L^2 = 100$).

Com base nas Figuras 7.27(a) e (b) pode concluir-se uma vez mais que o modelo FENE-P provoca uma antecipação da assimetria do escoamento quando comparado com o modelo FENE-CR. As diferenças entre modelos reduzem-se quando L^2 aumenta (ver resultados para $L^2 = 200$ na Fig. 7.27(a)). Comprova-se que os cantos poderão estar ligados à obtenção de uma solução estável com o modelo FENE-P, uma vez que o arredondamento dos cantos ($R = 0.5d$) proporciona simulações para valores de De superiores ao caso em que não há arredondamento ($R = 0.0d$) e, por vezes, superiores aos casos correspondentes com o modelo FENE-CR. Contudo, verifica-se também que aparecem soluções não estacionárias para elevados valores de Débora; designando-se o De crítico para assimetria não estacionária por De_{cr1} , tem-se: para $L^2 = 100 \rightarrow De_{cr1} \approx 0.95$ e para $L^2 = 200 \rightarrow De_{cr1} \approx 0.85$. A Figura 7.28 mostra a variação do parâmetro de assimetria DQ nestas situações, em que a solução é função do tempo, quando a razão de viscosidades do solvente é $\beta = 0.1$. Os períodos obtidos são aproximadamente 15 unidades de tempo da Fig. 7.28(a) e 20 unidades de tempo da Fig. 7.28(b).

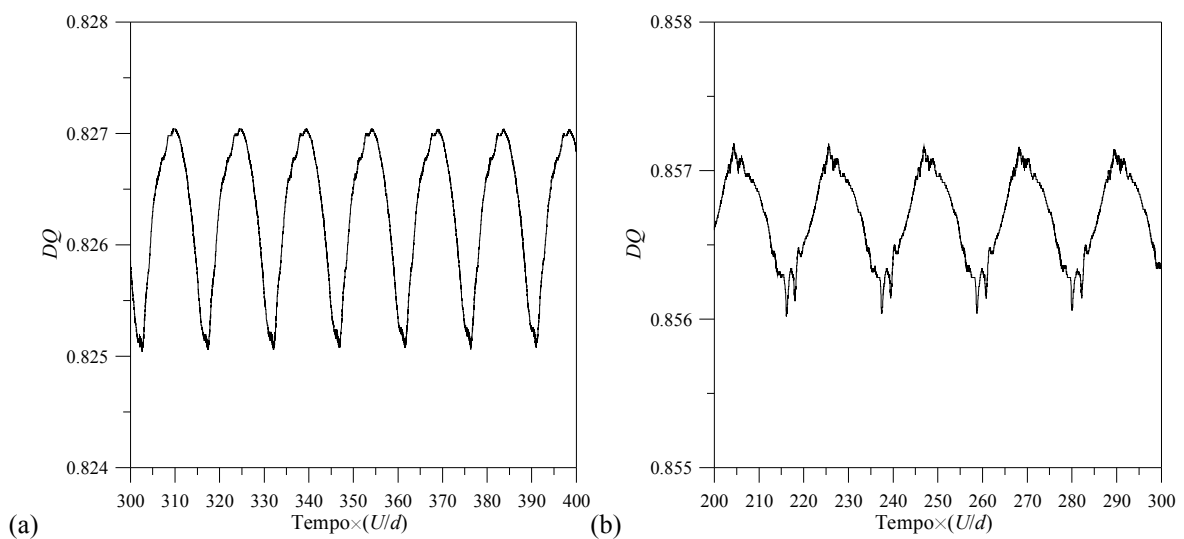


Figura 7.28 – Evolução do parâmetro de assimetria DQ em situações dependentes do tempo para o modelo FENE-P na geometria com os cantos arredondados ($R = 0.5d$, com $\beta = 0.1$ fixo) em condições de: (a) $De = 0.95$ e $L^2 = 100$; e (b) $De = 0.85$ e $L^2 = 200$.

7.3.5 – Energia dissipada

Seria útil ter-se uma explicação abrangente sobre o mecanismo que provoca o aparecimento da bifurcação observada no escoamento através do cruzamento de canais planos, para os dois modelos constitutivos analisados neste capítulo (FENE-CR e FENE-P). A argumentação poderá ser baseada no princípio da energia mínima: se o escoamento bifurcado consumir menos energia do que o escoamento simétrico, então será o que ocorrerá na realidade. Uma maneira adequada de quantificar este efeito é avaliar a perda de pressão no escoamento, desde um dos canais de entrada, até uma das saídas, sendo esta directamente proporcional à energia dissipada. Em termos adimensionais, a perda de pressão é dada pela correcção de Couette (C), que pode ser calculada para a geometria total (na qual ocorre assimetria), ou para geometria com simetria imposta. Neste caso, apenas se considerou um quarto da geometria total do escoamento, sendo o plano central considerado como uma fronteira de simetria, conforme ilustrado na Fig. 7.29(a).

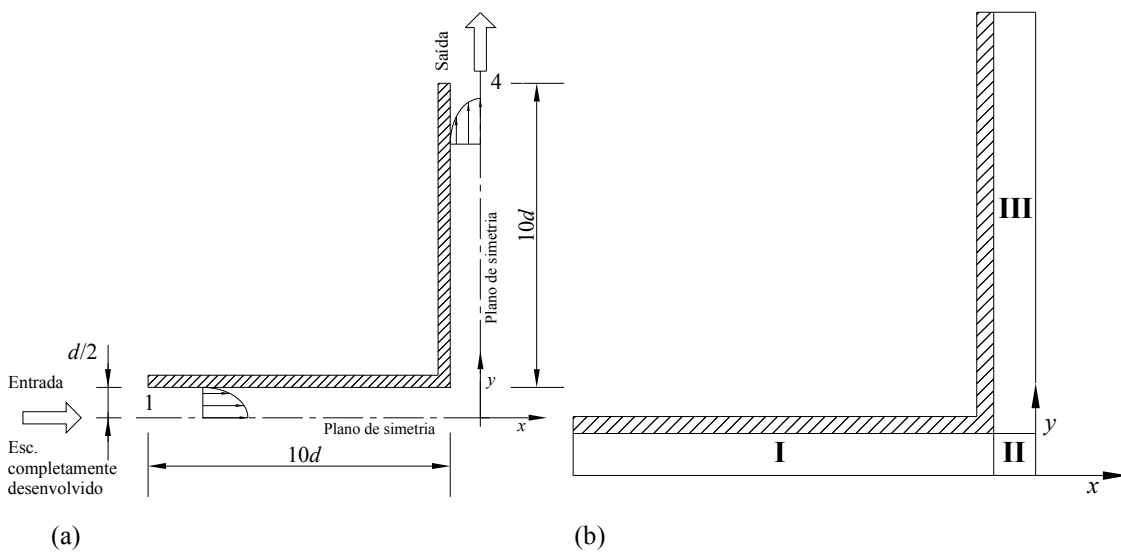


Figura 7.29 – (a) Representação da geometria com simetria imposta e (b) ilustração do domínio de cálculo dividido em blocos.

Na Figura 7.29(b) está representada a geometria dividida em blocos que foi utilizada para mapear o domínio de cálculo e gerar a malha computacional, cujas características geométricas são apresentadas na Tabela 7.13.

Tabela 7.13 – Características geométricas da malha computacional (domínio simétrico).

Blocos	N_x	N_y	f_x	f_y
I	50	25	0.929296	1.0
II	25	25	1.0	1.0
III	25	50	1.0	1.075369
NVC = 3125				

A malha computacional ilustrada na Figura 7.30 contém 3125 volumes de controlo, correspondendo a 18750 graus de liberdade. As linhas de fronteira inferior e lateral direita correspondem a planos de simetria (tensões de corte nulas, gradientes laterais de velocidade nulos).

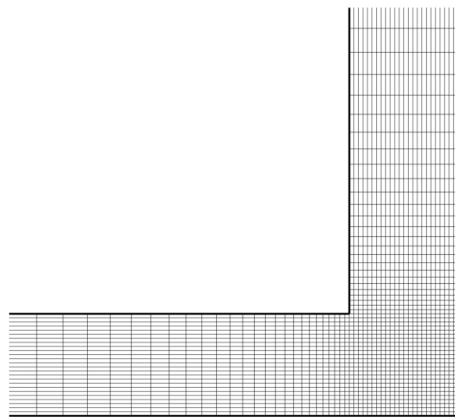


Figura 7.30 – Detalhe da malha computacional utilizada no cálculo do escoamento com simetria imposta ($-2 \leq x/d \leq 0$ e $0 \leq y/d \leq +2$).

A correcção de Couette é a perda de carga localizada através do cruzamento dos canais escrita em termos adimensionais. Este parâmetro é definido pela seguinte expressão:

$$C = \frac{\Delta p - \Delta p_{FD}}{2\tau_w} \quad (7.2)$$

onde $\Delta p = p_1 - p_4$ refere-se à diferença de pressão entre uma das entradas e uma das saídas (neste caso entre a entrada do canal da esquerda (1) e a saída superior (4), ver Figura 7.1 ou 7.29), Δp_{FD} representa a variação de pressão entre os mesmos pontos para escoamento completamente desenvolvido e τ_w é a magnitude da tensão de corte na parede em condições de escoamento completamente desenvolvido. O índice inferior *FD* representa a designação em inglês de *Fully Developed*.

Uma vez que a viscosidade de corte do modelo FENE-CR é constante, a tensão de corte na parede τ_w é idêntica à newtoniana com a mesma viscosidade de corte total η_0 , $\tau_w = 3\eta_0 U / (d/2)$. O gradiente de pressão em condições de escoamento completamente desenvolvido relaciona-se com a tensão de corte na parede (τ_w) da seguinte forma:

$$-\left(\frac{dp}{dx}\right)_{FD} = \frac{2\tau_w}{d} \quad (7.3)$$

Fisicamente, o termo $dp/dx = \Delta p/L$ representa o gradiente de pressão imposto e que vai produzir o movimento do fluido. A expressão final para o gradiente de pressão em desenvolvimento completo nos dois canais de comprimento $10d$ é dada por:

$$\frac{\Delta p_{FD}}{\eta_0 U/d} = 2 \frac{(L/d)\tau_w}{\eta_0 U/d} = 240 \quad (7.4)$$

Quando se está na presença do modelo FENE-P a viscosidade de corte tem um comportamento reofluidificante e os parâmetros Δp_{FD} e τ_w já não são os mesmos que no caso newtoniano. É possível obter a solução analítica explícita para o escoamento do FENE-P em canal (ver Cruz *et al.* [37]). No entanto, é mais fácil reinterpretar a Eq. (7.2) e C vem dado como o acréscimo do gradiente de pressão sobre o valor completamente desenvolvido, escrito como um comprimento adimensional:

$$C = \left(\frac{L}{d}\right) \left(\frac{\Delta p}{\Delta p_{FD}} - 1\right) \quad (7.5)$$

Desta forma, evita-se o cálculo da tensão de corte na parede (τ_w) que não é evidente para o modelo FENE-P.

Na Figura 7.31 mostra-se a evolução da correcção de Couette com o número de Débora para alguns dos casos simulados, avaliando-se assim a queda de pressão entre a entrada (ponto (1)) e a saída (ponto (4)) após remoção da parte da queda de pressão devida ao escoamento completamente desenvolvido. As quatro sub-figuras mostram separadamente os efeitos de L^2 , de β , do arredondamento dos cantos R , e do modelo constitutivo (FENE-CR e FENE-P), sobre a correcção de Couette.

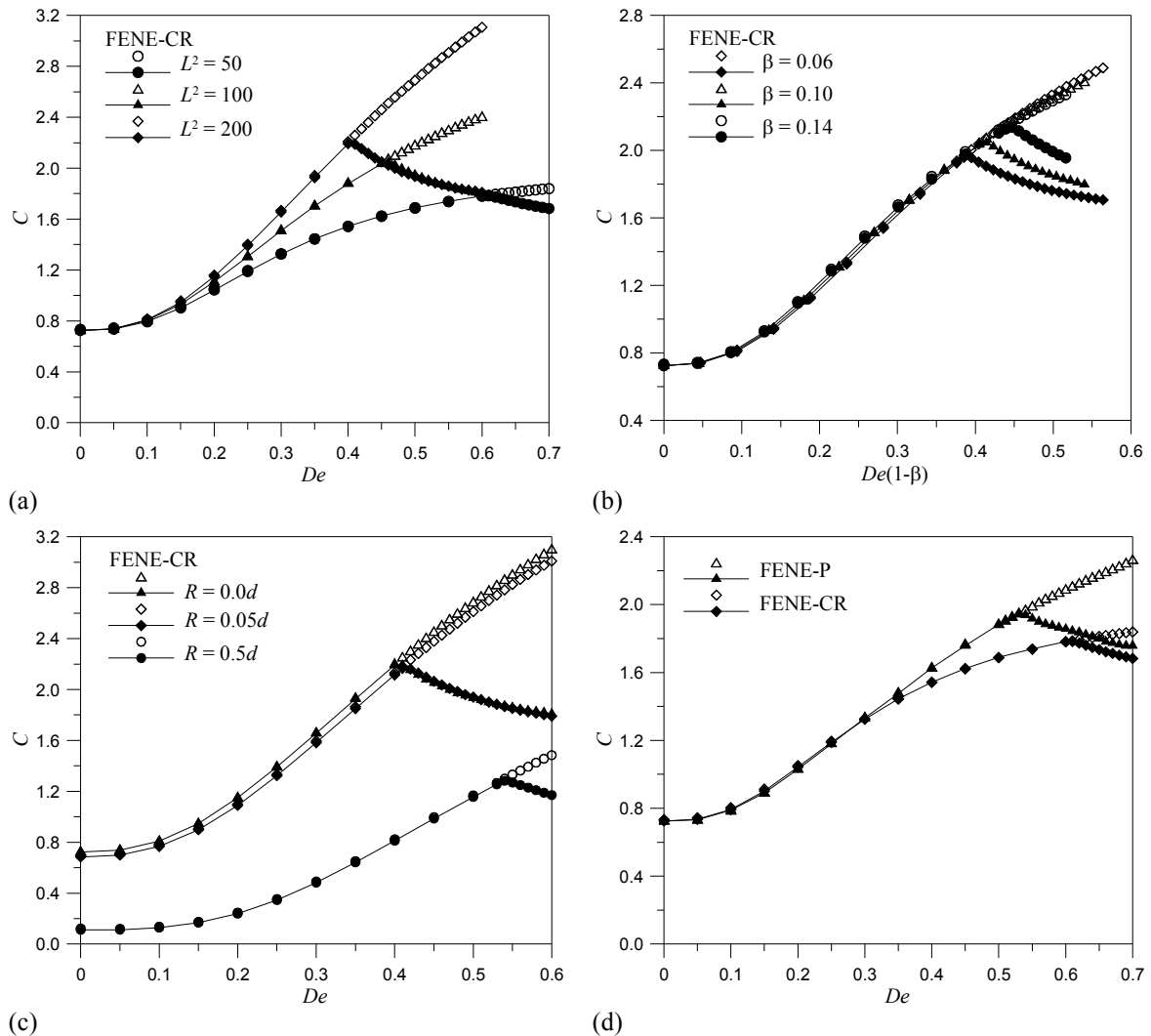


Figura 7.31 – Variação da correcção de Couette em função do número de Débora para a geometria total (símbolos fechados) e com simetria imposta (símbolos abertos): (a) efeito do parâmetro de extensibilidade L^2 (FENE-CR, $\beta = 0.1$); (b) influência da razão de viscosidades do solvente β (FENE-CR, $L^2 = 100$); (c) efeito da curvatura dos cantos R (FENE-CR, $L^2 = 200$ e $\beta = 0.1$); e (d) modelos FENE-P e FENE-CR ($L^2 = 50$ e $\beta = 0.1$).

Os resultados referentes à perda de carga localizada para o caso base (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, e sem arredondamento dos cantos) do FENE-CR estão indicados na Figura 7.31(a) por símbolos fechados, enquanto o caso correspondente à simulação de um quarto da geometria (forçando a simetria do escoamento) estão representados por símbolos abertos. Os valores previstos de C em função do número de Débora estão indicados na Tabela 7.14.

Tabela 7.14 – Correção de Couette (C) em função do número de Débora para geometria total e para geometria com simetria imposta: influência da extensibilidade L^2 (com $\beta = 0.1$ fixo). Os valores críticos estão indicados a negrito.

$L^2 = 50$			$L^2 = 100$			$L^2 = 200$		
De	C_{GT}	C_{SI}	De	C_{GT}	C_{SI}	De	C_{GT}	C_{SI}
0.00	0.725	0.733	0.00	0.724	0.733	0.00	0.723	0.733
0.05	0.735	0.744	0.05	0.738	0.745	0.05	0.739	0.746
0.10	0.793	0.803	0.10	0.805	0.811	0.10	0.809	0.816
0.15	0.902	0.913	0.15	0.931	0.940	0.15	0.947	0.956
0.20	1.043	1.051	0.20	1.108	1.117	0.20	1.150	1.159
0.25	1.188	1.195	0.25	1.306	1.316	0.25	1.391	1.402
0.30	1.325	1.327	0.30	1.509	1.520	0.30	1.656	1.668
0.35	1.444	1.444	0.35	1.703	1.714	0.35	1.926	1.941
0.40	1.543	1.542	0.40	1.878	1.892	0.40	2.192	2.208
0.45	1.624	1.621	0.45	2.034	2.048	0.41	2.189	2.258
0.50	1.689	1.686	0.46	2.046	2.077	0.42	2.153	2.308
0.55	1.739	1.737	0.47	2.022	2.104	0.43	2.115	2.359
0.60	1.782	1.780	0.48	1.995	2.131	0.44	2.080	2.410
0.61	1.783	1.786	0.49	1.969	2.158	0.45	2.051	2.459
0.62	1.773	1.794	0.50	1.947	2.185	0.46	2.024	2.510
0.63	1.760	1.800	0.51	1.925	2.210	0.47	1.998	2.557
0.64	1.747	1.806	0.52	1.906	2.235	0.48	1.972	2.602
0.65	1.735	1.812	0.53	1.889	2.259	0.49	1.954	2.647
0.66	1.722	1.818	0.54	1.872	2.283	0.50	1.935	2.691
0.67	1.712	1.824	0.55	1.857	2.305	0.51	1.916	2.737
0.68	1.701	1.829	0.56	1.845	2.328	0.52	1.899	2.782
0.69	1.692	1.835	0.57	1.831	2.350	0.53	1.884	2.825
0.70	1.683	1.839	0.58	1.821	2.371	0.54	1.870	2.868
---	---	---	0.59	1.809	2.391	0.55	1.858	2.908
---	---	---	0.60	1.798	2.409	0.56	1.845	2.950
---	---	---	---	---	---	0.57	1.835	2.990
---	---	---	---	---	---	0.58	1.826	3.031
---	---	---	---	---	---	0.59	1.819	3.069
---	---	---	---	---	---	0.60	1.810	3.107

Correção de Couette: C_{GT} – geometria total do escoamento; C_{SI} – simetria imposta

O primeiro ponto de interesse relativo à Figura 7.31 é que para valores de Débora abaixo do Débora crítico ($De \leq De_{cr} \approx 0.46$) o coeficiente da perda de carga localizada é semelhante para os dois casos simulados (com geometria total do escoamento, ou usando só um quarto da geometria e impondo simetria). Contudo, para valores de Débora superiores ao valor crítico ($De > De_{cr}$) há uma redução da perda de carga no escoamento na geometria total, ao passo que no caso da simetria imposta o valor de C continua a crescer progressivamente com o aumento de De . Isto está evidenciado na Figura 7.31(a) para valores crescentes do parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR ($L^2 = 50, 100$ e 200 , com $\beta = 0.1$ fixo), onde a bifurcação do escoamento vem acompanhada por uma redução da perda de pressão (diminuição de C acima de Débora crítico). Assim, manter o escoamento assimétrico requer menos energia do que manter o escoamento simétrico correspondente, com a simetria imposta

de forma artificial. Faz-se também notar que não houve sinais de efeitos de histerese: os cálculos foram repetidos a partir da solução completamente bifurcada ($De > De_{cr}$), com a diminuição de De feita usando intervalos de De pequenos ($\Delta De = 0.01$) e recuperou-se exactamente a solução de escoamento simétrico ($De < De_{cr}$). Deste modo, sem ter em conta as condições iniciais do problema, não foi possível manter a assimetria do escoamento abaixo do limiar crítico.

Os gráficos da Figura 7.31 podem ser interpretados como uma manifestação do princípio da energia mínima, apresentando duas curvas que se intersectam no ponto crítico (De_{cr}): uma referente à configuração simétrica (simetria imposta) e a outra referente à configuração assimétrica (esta curva só aparece nos gráficos para $De > De_{cr}$). Quando o escoamento é simétrico, o consumo de energia é menor para valores do número de Débora inferiores ao valor crítico (De_{cr}), sendo por isso preferível. Todavia, para valores de De superiores a De_{cr} surge a situação oposta, com uma diminuição acentuada da correcção de Couette no caso da geometria total, indicando que o escoamento assimétrico necessita de menos energia. Na Figura 7.31(a) apresenta-se também um estudo sobre o aumento da extensibilidade L^2 do modelo FENE-CR. Comprova-se que a extensibilidade máxima das moléculas poliméricas do modelo FENE-CR tem uma influência importante sobre o coeficiente de perda de pressão localizada para valores de Débora acima do valor crítico, após a assimetria do escoamento. Para valores de L^2 baixos, correspondendo a viscosidades extensionais pequenas, verifica-se que há uma redução da correcção de Couette, constatando-se uma vez mais que a assimetria do escoamento na evolução de C em função do número de Débora é independente da extensibilidade.

Para além do que foi anteriormente descrito, a Figura 7.31 ilustra influências devidas a concentração polimérica (Fig. 7.31(b)), curvatura dos cantos (Fig. 7.31(c)) e modelos constitutivos (Fig. 7.31(d)), cujos resultados numéricos são dados nas Tabelas 7.15, 7.16 e 7.17, respectivamente. A razão de viscosidades do solvente β (Fig. 7.31(b)) tem uma fraca influência sobre C abaixo das condições críticas, especialmente quando os resultados são apresentados em função de um número de Débora modificado $De' = De(1 - \beta)$. A variação de C em função de $De(1 - \beta)$ para valores do número de Débora superiores ao valor crítico ($De \geq De_{cr}$) segue caminhos diferentes porque, para uma concentração polimérica elevada (baixos valores de β), a bifurcação do escoamento é antecipada (ocorrência da assimetria para valores de De mais baixos). Tem interesse referir que os gráficos da Figura 7.31(a) e (b) fornecem uma distinção clara entre dois factores que contribuem para a viscoelasticidade:

elasticidade relacionada com as tensões normais (relacionada com β) e elasticidade extensional (relacionada com L^2). A Figura 7.31(c) mostra uma vez mais que o arredondamento ligeiro dos cantos ($R = 0.05d$) tem apenas um efeito ligeiro no escoamento e na queda de pressão. Quando a curvatura dos cantos é mais intensa ($R = 0.5d$) existe uma forte redução na taxa de deformação do escoamento ao longo da linha central dos canais, o que implica num crescimento mais pequeno da queda de pressão em toda a gama de variação de De , em ambas as condições sub- e supercríticas. Finalmente, o gráfico da Figura 7.31(d) mostra o efeito induzido pelo modelo constitutivo: até valores de $De \approx 0.35$ (que corresponde a $We \approx 1$, com $We = 2kDe$, sendo $k = 1.5$ para canais planos (Oliveira [93])) ambos os modelos FENE-CR e FENE-P produzem os mesmos valores de C . Porém, para valores de De mais elevados os resultados da queda de pressão previstos pelo modelo FENE-P são mais elevados. Isto pode parecer contra intuitivo atendendo às características reofluidificantes presentes neste modelo, comparado com o modelo FENE-CR em que a viscosidade de corte é constante. Contudo, a definição de C contabiliza esse efeito reofluidificante tendo em conta a tensão de corte na parede (τ_w no denominador da Eq. (7.2)). Tal como foi referido anteriormente, a correcção de Couette (C) pode ser escrita como um comprimento de canal adicional devido a um gradiente de pressão mais acentuado comparado com a situação de desenvolvimento completo. Neste caso, o valor elevado de C no modelo FENE-P poderá estar relacionado com o forte crescimento da viscosidade extensional deste modelo, que antecipa a transição para o escoamento assimétrico, tal como foi observado anteriormente (ver Fig. 7.25).

Tabela 7.16 – Correção de Couette (C) em função de De para geometria total e para geometria com simetria imposta: influência do arredondamento dos cantos ($L^2 = 200$ e $\beta = 0.1$). Os valores críticos estão indicados a negrito.

$R = 0.0d$			$R = 0.05d$			$R = 0.5d$		
De	C_{GT}	C_{SI}	De	C_{GT}	C_{SI}	De	C_{GT}	C_{SI}
0.00	0.723	0.733	0.00	0.684	0.694	0.00	0.112	0.120
0.05	0.739	0.746	0.05	0.699	0.705	0.05	0.113	0.120
0.10	0.807	0.816	0.10	0.766	0.733	0.10	0.129	0.136
0.15	0.947	0.956	0.15	0.898	0.905	0.15	0.168	0.175
0.20	1.150	1.159	0.20	1.089	1.098	0.20	0.239	0.247
0.25	1.391	1.402	0.25	1.323	1.333	0.25	0.346	0.353
0.30	1.656	1.668	0.30	1.582	1.595	0.30	0.483	0.492
0.35	1.926	1.941	0.35	1.850	1.864	0.35	0.642	0.651
0.40	2.192	2.208	0.40	2.115	2.130	0.40	0.812	0.823
0.41	2.189	2.258	0.41	2.167	2.181	0.45	0.986	0.997
0.42	2.153	2.308	0.42	2.160	2.233	0.50	1.156	1.168
0.43	2.115	2.359	0.43	2.128	2.281	0.53	1.255	1.266
0.44	2.080	2.410	0.44	2.096	2.329	0.54	1.283	1.300
0.45	2.051	2.459	0.45	2.065	2.378	0.55	1.269	1.332
0.46	2.024	2.510	0.46	2.036	2.427	0.56	1.249	1.363
0.47	1.998	2.557	0.47	2.009	2.473	0.57	1.229	1.393
0.48	1.972	2.602	0.48	1.984	2.520	0.58	1.209	1.425
0.49	1.954	2.647	0.49	1.960	2.567	0.59	1.189	1.456
0.50	1.935	2.691	0.50	1.940	2.612	0.60	1.170	1.484
0.51	1.916	2.737	0.51	1.919	2.656	---	---	---
0.52	1.899	2.782	0.52	1.901	2.699	---	---	---
0.53	1.884	2.825	0.53	1.883	2.741	---	---	---
0.54	1.870	2.868	0.54	1.866	2.782	---	---	---
0.55	1.858	2.908	0.55	1.852	2.824	---	---	---
0.56	1.845	2.950	0.56	1.838	2.865	---	---	---
0.57	1.835	2.990	0.57	1.825	2.903	---	---	---
0.58	1.826	3.031	0.58	1.814	2.939	---	---	---
0.59	1.819	3.069	0.59	1.802	2.975	---	---	---
0.60	1.810	3.107	0.60	1.791	3.009	---	---	---

Tabela 7.17 – Correção de Couette (C) em função de De para geometria total e para geometria com simetria imposta: influência do modelo constitutivo FENE-CR e FENE-P ($L^2 = 50$ e $\beta = 0.1$). Os valores críticos estão indicados a negrito.

FENE-CR			FENE-P		
De	C_{GT}	C_{SI}	De	C_{GT}	C_{SI}
0.00	0.725	0.733	0.00	0.724	0.733
0.05	0.735	0.744	0.05	0.732	0.738
0.10	0.793	0.803	0.10	0.789	0.792
0.15	0.902	0.913	0.15	0.891	0.898
0.20	1.043	1.051	0.20	1.030	1.038
0.25	1.188	1.195	0.25	1.180	1.189
0.30	1.325	1.327	0.30	1.332	1.341
0.35	1.444	1.444	0.35	1.476	1.486
0.40	1.543	1.542	0.40	1.627	1.633
0.45	1.624	1.621	0.45	1.758	1.772
0.50	1.689	1.686	0.50	1.883	1.890
0.55	1.739	1.737	0.51	1.905	1.912
0.60	1.782	1.780	0.52	1.926	1.934
0.61	1.783	1.786	0.53	1.943	1.955
0.62	1.773	1.794	0.54	1.939	1.973
0.63	1.760	1.800	0.55	1.918	1.994
0.64	1.747	1.806	0.56	1.901	2.017
0.65	1.735	1.812	0.57	1.886	2.038
0.66	1.722	1.818	0.58	1.877	2.056
0.67	1.712	1.824	0.59	1.866	2.075
0.68	1.701	1.829	0.60	1.857	2.093
0.69	1.692	1.835	0.61	1.845	2.111
0.70	1.683	1.839	0.62	1.837	2.130
---	---	---	0.63	1.824	2.147
---	---	---	0.64	1.812	2.164
---	---	---	0.65	1.800	2.179
---	---	---	0.66	1.783	2.196
---	---	---	0.67	1.774	2.213
---	---	---	0.68	1.765	2.229
---	---	---	0.69	1.758	2.248
---	---	---	0.70	1.758	2.268

7.4 – Conclusões

Neste capítulo apresentou-se um estudo sobre o comportamento em escoamento de um fluido viscoelástico quando flui através de um cruzamento de canais planos. Em particular, aferiu-se a influência da extensibilidade da molécula e da concentração polimérica na bifurcação do escoamento que ocorre neste tipo de geometria, considerando um caso sem arredondamento dos cantos (cantos vivos) e outros dois casos com arredondamento, um mais suave ($R = 0.05d$) e outro mais intenso ($R = 0.5d$). Os modelos reológicos aplicados para descrever a física do fluido foram os modelos FENE-CR e FENE-P, que apresentam viscosidade de corte constante e viscosidade de corte refluidificante, respectivamente. Neste

estudo desprezaram-se efeitos inerciais, tendo sido aplicado exactamente $Re = 0$. Apesar da geometria ser simétrica verificou-se que o escoamento bifurca tornando-se assimétrico para valores do número de Débora acima de um certo valor crítico (De_{cr}), em conformidade qualitativa com os resultados experimentais de Arratia *et al.* [15], os quais motivaram o estudo. Comparando os resultados previstos com os modelos FENE-CR e FENE-P constatou-se que o modelo FENE-P, sendo reofluidificante, apresenta assimetria do escoamento para valores de De_{cr} mais baixos do que no caso do modelo FENE-CR. Analisando a influência do parâmetro de extensibilidade L^2 sobre o padrão de escoamento, conclui-se que o valor de De_{cr} diminui com o aumento do parâmetro L^2 dos modelos FENE, mostrando que quanto maior a viscosidade extensional máxima mais cedo o escoamento se destabiliza e se torna assimétrico. Olhando para a influência da concentração polimérica, o efeito é semelhante ao que acontece com a extensibilidade L^2 , o que não é surpreendente, uma vez que um aumento da quantidade de polímero na mistura de solvente newtoniano e soluto polimérico torna o fluido globalmente mais elástico. A introdução de um pequeno arredondamento nos cantos da geometria, de forma a verificar se a origem da bifurcação estaria relacionada com a presença de pontos singulares, conduziu a resultados que revelaram que a influência sobre a configuração do escoamento assimétrico era mínima, ou seja, o número Débora crítico não sofria uma alteração significativa. Assim, estas previsões corroboram de certa forma as explicações apresentadas no trabalho de Poole *et al.* [118] sobre o mecanismo que provoca a assimetria do escoamento viscoelástico. Segundo estes autores esse fenómeno está relacionado com o forte escoamento compressivo que surge perto do ponto de estagnação nos canais de entrada, o qual, com o aumento da elasticidade, força o escoamento a bifurcar. Por último, verificou-se que no regime em que o escoamento é simétrico a perda de carga localizada é igual na geometria completa e em $\frac{1}{4}$ da geometria. No entanto, quando o escoamento fica assimétrico a perda de carga localizada diminui na geometria completa quando comparada com $\frac{1}{4}$ da geometria (simetria imposta).

Capítulo 8

Escoamento tridimensional através da junção de dois canais planos*

Este capítulo dá continuidade ao estudo de instabilidades puramente elásticas que ocorrem na junção de dois canais planos bidimensionais e que foi analisado com algum detalhe no capítulo anterior. A motivação deste estudo é avaliar eventuais efeitos tridimensionais no escoamento num cruzamento de canais planos, generalizando os resultados anteriores onde se assumiu a bidimensionalidade (2D). Do Capítulo 7 viu-se que na geometria 2D ocorre inicialmente, quando se aumenta o caudal, uma primeira instabilidade que torna o escoamento assimétrico mas ainda estacionário. Posteriormente, surge uma segunda instabilidade para valores maiores da taxa de deformação, ou do caudal, que faz com que o campo de velocidades assimétrico fique também não estacionário. Os resultados tridimensionais do presente capítulo revelam que, tal como acontece no caso bidimensional, a assimetria do escoamento ocorre em condições geométricas e de fronteira perfeitamente simétricas, mas para valores críticos do número de Débora diferentes do caso 2D. Em geral, a presença das paredes de fundo, que induzem a tridimensionalidade, tendem a estabilizar o escoamento e a atrasar a transição para o regime assimétrico estacionário. Os resultados aqui previstos são consistentes com os resultados experimentais de Arratia et al. [15] e as simulações numéricas bidimensionais de Poole et al. [118] e Rocha et al. [132] (discutidas no Capítulo 7).

* Este capítulo é baseado no artigo “Rocha, G.N., R.J. Poole, M.A. Alves e P.J. Oliveira (2008). *Three-dimensional FENE-CR flow in a cross-slot*. Rheology in Product Design and Engineering (IBEREO 2008), Madrid, Spain”.

8.1 – Introdução

Muitos dos escoamentos viscoelásticos utilizados na indústria, envolvendo líquidos que apresentam simultaneamente propriedades viscosas e elásticas, tendem a desenvolver instabilidades elásticas que podem ser limitadores em processos operacionais. Actualmente, começam a surgir muitos estudos sobre o comportamento de escoamento não newtoniano viscoelástico à micro-escala, onde dispositivos de dimensões muito pequenas apresentam formas geométricas em cruzamento de canais. Os estudos de escoamentos viscoelásticos em cruzamentos de canais tridimensionais são escassos. Poole *et al.* [117] demonstraram numericamente, usando o modelo convectivo superior de Maxwell (UCM), que o escoamento viscoelástico num cruzamento de canais planos tridimensional (3D) fica também assimétrico em condições de geometria perfeitamente simétricas. Estes autores analisaram o efeito provocado no escoamento quando há uma variação da razão de aspecto da geometria, e os resultados mostraram que as paredes têm um efeito estabilizador. Outros autores fizeram simulações 3D de escoamento viscoelástico na geometria em forma de cruz, mas usando um quarto da geometria total e, portanto, sem preocupações de prever a instabilidade assimétrica (por exemplo Puangkird *et al.* [121]). O presente capítulo vem dar um contributo adicional sobre o comportamento do escoamento não newtoniano através de um cruzamento de canais planos. A motivação vem no seguimento dos resultados apresentados no Capítulo 7 para o escoamento bidimensional (2D). Como extensão lógica pretende-se agora estudar numericamente o comportamento de fluidos viscoelásticos através de um cruzamento de canais planos tridimensional. Os resultados mostram que acima de um certo valor crítico de De o escoamento fica assimétrico, mas estável até um certo De (tal como acontecia no escoamento bidimensional). Uma segunda instabilidade ocorre para elevados valores da taxa de deformação, originando um campo de velocidades não periódico no tempo (escoamento dependente do tempo). Estas conclusões são consistentes com as visualizações de Arratia *et al.* [15], que deram origem ao interesse renovado na geometria em forma de cruz, e com os resultados numéricos de Poole *et al.* [118] e Rocha *et al.* [132] (ver Capítulo 7).

As simulações aqui discutidas foram efectuadas tendo em conta a variação da razão de aspecto da geometria tridimensional (AR), para situações em que a secção dos canais é quadrada ou rectangular e a zona da região central fica cúbica ($AR = 1$) ou paralelepipedica.

8.2 – Descrição do problema

As equações que determinam o fluxo tridimensional incompressível do fluido viscoelástico foram descritas no Capítulo 3. O fluido segue o modelo FENE-CR, que inclui efeitos de elasticidade e de refluidificação nas tensões normais, sendo a viscosidade de corte constante, igual a $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ com $\eta_s = \beta\eta_0$ e $\eta_p = (1 - \beta)\eta_0$. Uma representação esquemática da geometria tridimensional (3D) é dada na Figura 8.1, onde estão indicadas algumas quantidades relevantes. Em termos de dimensões esta geometria tem as mesmas dimensões que no caso bidimensional estudado no Capítulo 7, com excepção da introdução de um comprimento de profundidade (H), devido à presença de uma nova direcção do escoamento, segundo z (escoamento 3D). A relação entre a profundidade e a altura da secção recta dos canais influenciará os efeitos tridimensionais, sendo a razão de aspecto definida como: $AR = H/d$. Neste capítulo analisa-se o efeito da variação do parâmetro AR considerando-se valores de $AR = 1$ (secção quadrada), 2 e 4 (secção rectangular). No caso limite quando a razão de aspecto tende para infinito ($AR \rightarrow \infty$), tem-se o caso bidimensional analisado no Capítulo 7, onde foi considerado apenas uma linha de células ao longo da direcção z . Neste caso tridimensional (3D) foram impostas condições de não escorregamento nas faces superior e inferior, que correspondem a paredes em $z/H = \pm 1/2$. O sistema de coordenadas encontra-se situado na zona central do cruzamento dos canais.

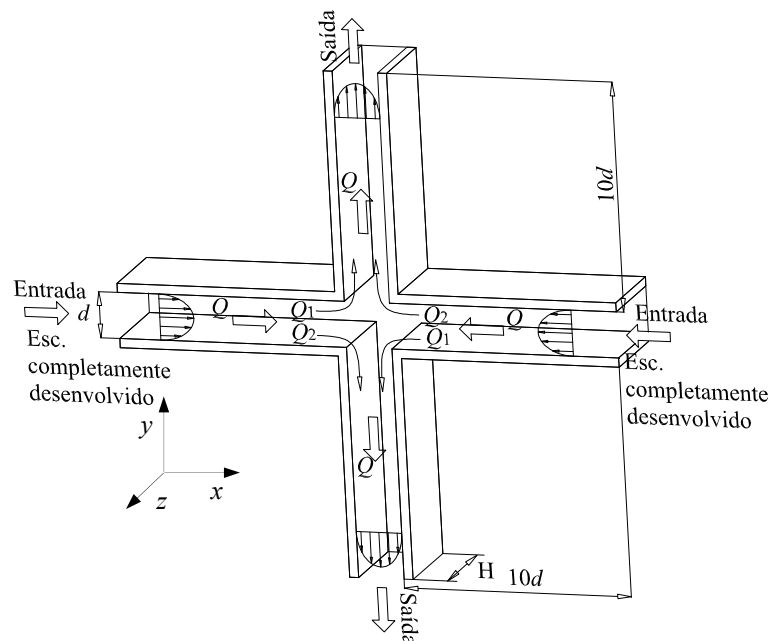


Figura 8.1 – Configuração esquemática da geometria tridimensional.

Nos canais de entrada da esquerda e da direita (Fig. 8.1) foram impostas como condições de fronteira as soluções analíticas para as velocidades e tensões de corte em escoamento newtoniano completamente desenvolvido. Usaram-se as soluções analíticas apresentadas em White [157], aplicadas a condutas com secção rectangular: $-a \leq y \leq +a$ e $-b \leq z \leq +b$, conforme ilustrado na Fig. 8.2.

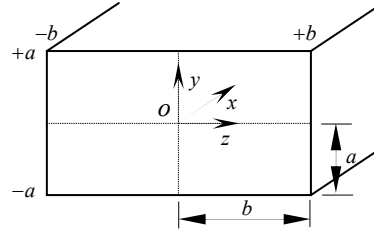


Figura 8.2 – Representação tridimensional do canal plano rectangular.

A distribuição de velocidades ($u(y,z)$) e o caudal volúmico (Q) correspondente a um fluido newtoniano ou FENE-CR para um canal com secção rectangular (Fig. 8.2) é dado por (White [157]):

$$u(y,z) = \frac{16a^2}{\eta\pi^3} \left(-\frac{dp}{dx} \right) \sum_{n=1,3,5}^N (-1)^{\frac{n-1}{2}} \left[1 - \frac{\cosh(n\pi z/2a)}{\cosh(n\pi b/2a)} \right] \times \frac{\cos(n\pi y/2a)}{n^3} \quad (8.1)$$

$$Q = \frac{4ba^3}{3\eta} \left(-\frac{dp}{dx} \right) \left[1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{n=1,3,5}^N \frac{\tanh(n\pi b/2a)}{n^5} \right] \quad (8.2)$$

onde N é o número inteiro limite usado no somatório; teoricamente $N = \infty$, na prática $N = 10$ dá resultados adequados. A velocidade média do canal plano tridimensional é definida a partir do caudal como: $U_{3D} = Q/A = Q/4ab$, sendo A a área da secção rectangular. Na maior parte dos gráficos a distribuição de velocidades (Eq. (8.1)) será apresentada de forma adimensional por divisão com a velocidade média do canal de entrada, o que resulta na seguinte expressão final:

$$\frac{u(y,z)}{U_{3D}} = \frac{48 \sum_{n=1,3,5}^N (-1)^{\frac{n-1}{2}} \left[1 - \frac{\cosh(n\pi z/2a)}{\cosh(n\pi b/2a)} \right] \times \frac{\cos(n\pi y/2a)}{n^3}}{\pi^3 \left[1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{n=1,3,5}^N \frac{\tanh(n\pi b/2a)}{n^5} \right]} \quad (8.3)$$

As tensões de corte para o fluido newtoniano ou FENE-CR τ_{xy} e τ_{xz} são calculadas da seguinte forma:

$$\tau_{xy} = \eta \frac{\partial(u/U_{3D})}{\partial y} = \frac{48\eta}{\pi^3} \frac{\sum_{n=1,3,5}^N (-1)^{\frac{n-1}{2}} \left[1 - \frac{\cosh(n\pi z/2a)}{\cosh(n\pi b/2a)} \right] \times \left(-\frac{(n\pi/2a) \sin(n\pi y/2a)}{n^3} \right)}{1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{n=1,3,5}^N \frac{\tanh(n\pi b/2a)}{n^5}} \quad (8.4)$$

$$\tau_{xz} = \eta \frac{\partial(u/U_{3D})}{\partial z} = \frac{48\eta}{\pi^3} \frac{\sum_{n=1,3,5}^N (-1)^{\frac{n-1}{2}} \left[-\frac{(n\pi/2a) \sinh(n\pi z/2a)}{\cosh(n\pi b/2a)} \right] \times \left(\frac{\cos(n\pi y/2a)}{n^3} \right)}{1 - \frac{192a}{\pi^5 b} \sum_{n=1,3,5}^N \frac{\tanh(n\pi b/2a)}{n^5}} \quad (8.5)$$

A partir das equações anteriores foram calculados os perfis de velocidade e tensões de corte nos planos de simetria $[oxy]$ e $[oxz]$ (ver Fig. 8.2). No caso do escoamento viscoelástico com o modelo FENE-CR, uma vez que este apresenta uma viscosidade de corte constante, foram aplicadas as mesmas condições de fronteira na entrada dos canais (Eqs. (8.3)–(8.5)). Nos canais de saída superior e inferior foram aplicadas as condições de Neumann e nas paredes rígidas foram impostas condições de não deslizamento (velocidades nulas), tal como explicado no Capítulo 5.

8.3 – Validação preliminar

Estas soluções analíticas para escoamento laminar completamente desenvolvido em canais de secção rectangular foram usadas como condição de fronteira nas entradas da geometria em forma de cruz tridimensional. Por outro lado, serviram também para verificar a implementação correcta do programa de simulação para estes casos tridimensionais, uma vez que se espera que perto das saídas se estabeleça um escoamento completamente desenvolvido.

Na Figura 8.3 faz-se a comparação entre as previsões numéricas obtidas para escoamento newtoniano com razões de aspecto $AR = 1, 2, 4$ e ∞ (2D), e os perfis teóricos dados pelas equações anteriores. Os resultados referem-se aos perfis de velocidade e de tensões de corte nos planos centrais do canal de saída superior (plano xy , para $z = 0$; e plano yz , para $x = 0$). Pode observar-se que os resultados numéricos apresentam uma boa concordância com os resultados teóricos, concluindo-se a partir desta verificação preliminar a correcta implementação do código em 3D. Esta comparação e a Figura 8.3 são úteis por mostrarem como a solução 3D tende para a 2D quando a razão de aspecto aumenta e tende para infinito. No entanto, mesmo para $AR = 4$, existe uma diferença visível entre a

velocidade média em 3D, U_{3D} , e a velocidade média em 2D, que se nota pela discrepância no valor máximo da velocidade (1.5 em 2D e ≈ 1.75 com $AR = 4$). Este efeito deve ser levado em conta quando se comparam resultados bi- e tridimensionais, fazendo-se um ajuste à velocidade média, ou seja, ao caudal.

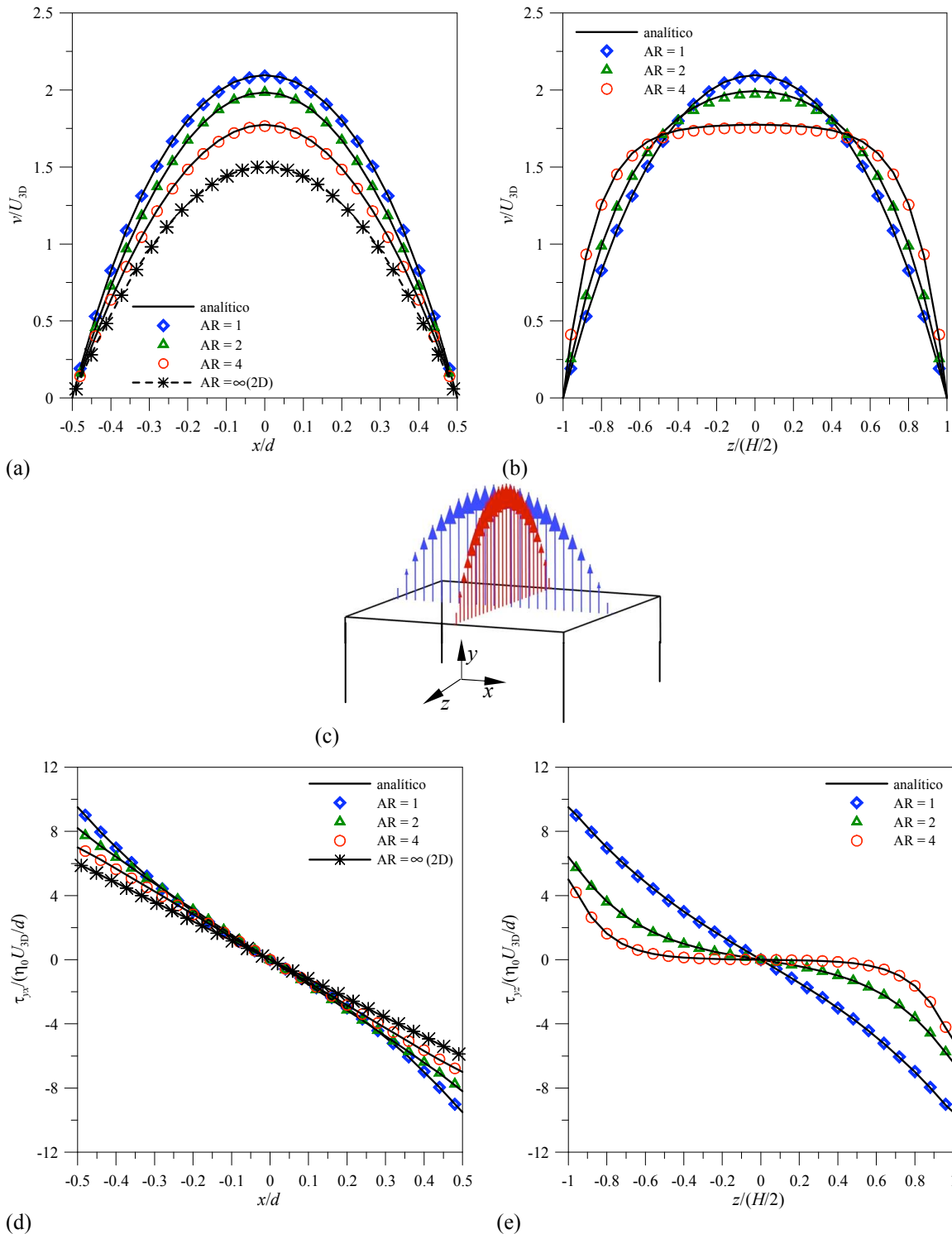


Figura 8.3 – Comparação entre resultados numéricos e analíticos para fluido newtoniano e várias razões de aspecto $AR = 1, 2$ e 4 : (a) perfis de velocidade no plano central $z = 0$; (b) perfis de velocidade no plano central $x = 0$; (c) representação dos perfis tridimensionais nos planos do canal de saída superior; e (d)-(e) perfis das tensões de corte nos planos centrais $z = 0$ (d) e $x = 0$ (e).

8.4 – Malha e refinamento de malha

A malha computacional usada nas simulações numéricas é composta por 78125 volumes de controlo, correspondendo a 781250 graus de liberdade, e as suas características principais estão apresentadas na Tabela 8.1.

Tabela 8.1 – Características geométricas da malha computacional.

Blocos	N_x	N_y	N_z	f_x	f_y	f_z
I	25	25	25	0.929296	1.0	1.0
II	25	25	25	1.0	1.0	1.0
III	25	25	25	1.0	0.929296	1.0
IV	25	25	25	1.0	1.075369	1.0
V	25	25	25	1.075369	1.0	1.0
NVC = 78125						

Esta malha tem as mesmas características geométricas da malha que foi implementada no trabalho de Poole *et al.* [117], onde foi apresentado um estudo preliminar do escoamento tridimensional através de um cruzamento de canais planos usando como equação constitutiva reológica o modelo viscoelástico convectivo superior de Maxwell. Na Figura 8.4 mostra-se um detalhe da malha computacional, onde se pode verificar uma maior concentração de células na secção cúbica central do cruzamento dos canais (com $AR = 1$). Na secção central cúbica utilizou-se 25 células ao longo de cada direcção (x , y e z), resultando num espaçamento mínimo entre as células de $\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min} = \Delta z_{\min} = 0.04d$. Na Figura 8.6 faz-se uma análise do efeito de refinamento da malha tridimensional, por comparação com uma malha possuindo o dobro de volumes de controlo ao longo de cada uma das direcções x , y e z . Pode verificar-se que os valores da distribuição do perfil de velocidades e da tensão normal axial ao longo da linha central (conforme representado na Fig. 8.5) para a Malha 1 (25 células, com 78125 volumes de controlo) e para a Malha 2 (51 células, com 652851 volumes de controlo) estão muito próximos. Uma vez que o escoamento é tridimensional e que o refinamento exagerado da malha requer memória computacional e tempos de CPU para os cálculos numéricos excessivos, optou-se por usar a Malha 1 (25 células) que, de acordo com os resultados da Fig. 8.6, apresenta um compromisso razoável entre meios computacionais e precisão numérica.

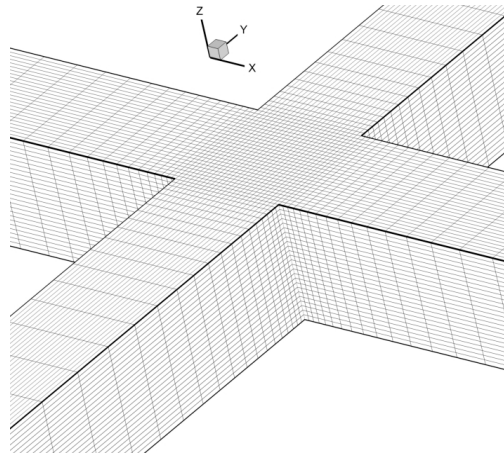


Figura 8.4 – Detalhe da Malha 1 utilizada no cálculo computacional para o caso $AR = 1.0$.

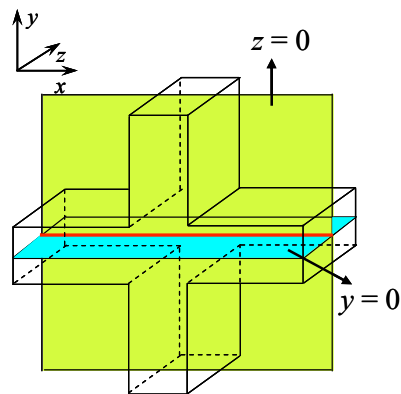


Figura 8.5 – Representação da linha central ao longo dos canais de entrada usada nos gráficos dos perfis de velocidade e tensão normal (linha vermelha), correspondente à intersecção entre o plano $z = 0$ (verde) e $y = 0$ (azul).

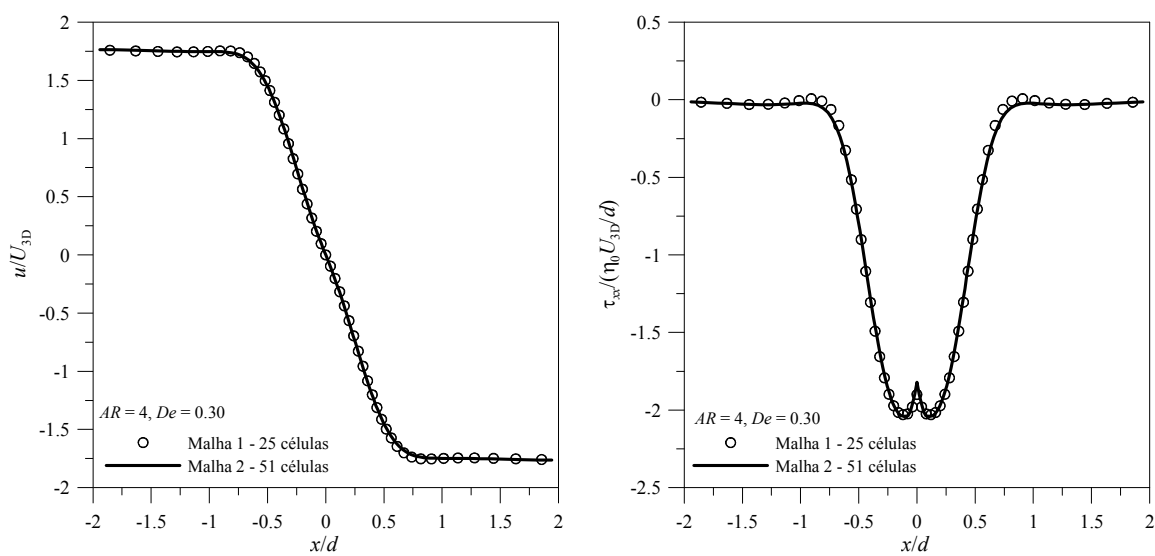


Figura 8.6 – Representação dos perfis na linha central ($y = 0$ e $z = 0$) ao longo dos canais de entrada ($AR = 4$, $De = 0.30$, $\beta = 0.1$ e $L^2 = 100$) para a Malha 1 (símbolos redondos) e Malha 2 (linha sólida): (a) velocidade; e (b) tensão normal, τ_{xx} .

8.5 – Resultados

De forma a quantificar o grau de assimetria do escoamento definiu-se o mesmo parâmetro adimensional $DQ = (Q_1 - Q_2)/Q$ usado no capítulo anterior (Capítulo 7), onde os fluxos Q_1 e Q_2 estão indicados na Fig. 8.1. O fluxo total que entra por cada um dos canais de entrada é $Q = Q_1 + Q_2 = UdH$. No caso do escoamento ser simétrico $Q_1 = Q_2 \Rightarrow DQ = 0$, enquanto se for assimétrico $Q_1 \neq Q_2 \Rightarrow DQ \neq 0$. Na Figura 8.7 apresentam-se os resultados previstos da variação do parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora para o caso limite de $AR \rightarrow \infty$ (bidimensional), usando a Malha 1 com 25 células na região central do cruzamento dos canais. Nesta figura comparam-se os resultados previstos com os resultados obtidos no Capítulo 7 (51 células), para as condições de $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$. Pode constatar-se que o número de De_{cr} obtido em ambas as malhas é semelhante (≈ 0.46). Contudo, após a bifurcação do escoamento os resultados são ligeiramente diferentes, havendo uma diferença de aproximadamente 7% no caso de escoamento bifurcado para $De = 0.70$.

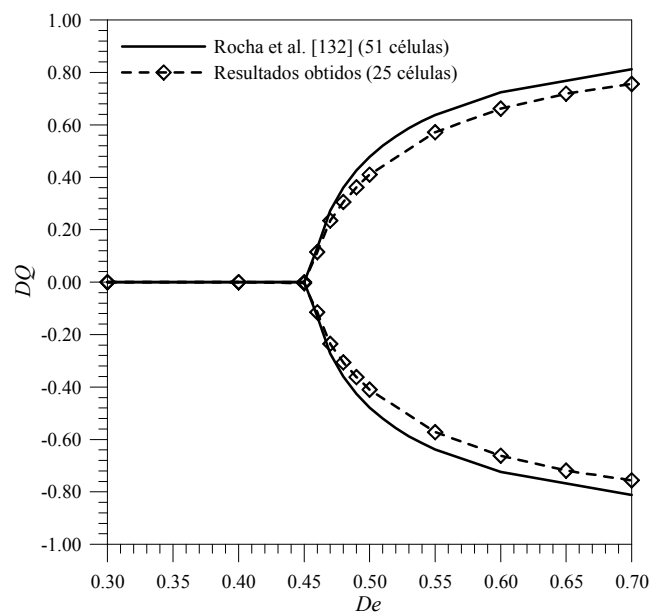


Figura 8.7 – Comparação do parâmetro de bifurcação DQ para a malha utilizada com 25 células no caso limite bidimensional ($AR \rightarrow \infty$) com os resultados bidimensionais previstos por Rocha *et al.* [132] (Capítulo 7) usando uma malha com 51 células ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Para futuras comparações, os resultados da variação do parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora, para o modelo FENE-CR em condições de $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, estão indicados na Tabela 8.2.

Tabela 8.2 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora no caso limite bidimensional ($AR \rightarrow \infty$) para as malhas com 25 e 51 células (Cap. 7) na região central ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

25 células		51 células	
De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000
0.45	0.000	0.45	0.000
0.46	0.138	0.46	0.132
0.47	0.230	0.47	0.272
0.48	0.302	0.48	0.360
0.49	0.362	0.49	0.426
0.50	0.410	0.50	0.478
0.55	0.572	0.55	0.638
0.60	0.664	0.60	0.724
0.65	0.718	0.65	0.778
0.70	0.758	0.70	0.812

Como se viu no Capítulo 7 no caso limite bidimensional, quando $AR \rightarrow \infty$, o escoamento fica assimétrico e estacionário para $De_{cr} \approx 0.46$ ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$) como indicado na Tabela 8.2 para as duas malhas. A partir do momento em que ocorre a assimetria do escoamento o valor de DQ aumenta progressivamente à medida que o número de Débora é também aumentado. Para as simulações tridimensionais, a Figura 8.8 mostra as linhas de corrente no plano central ($z = 0$), para razões de aspecto $AR = 1$ (secção quadrada), 2 e 4, e a forma como variam com o aumento do número de Débora (para $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$ fixos).

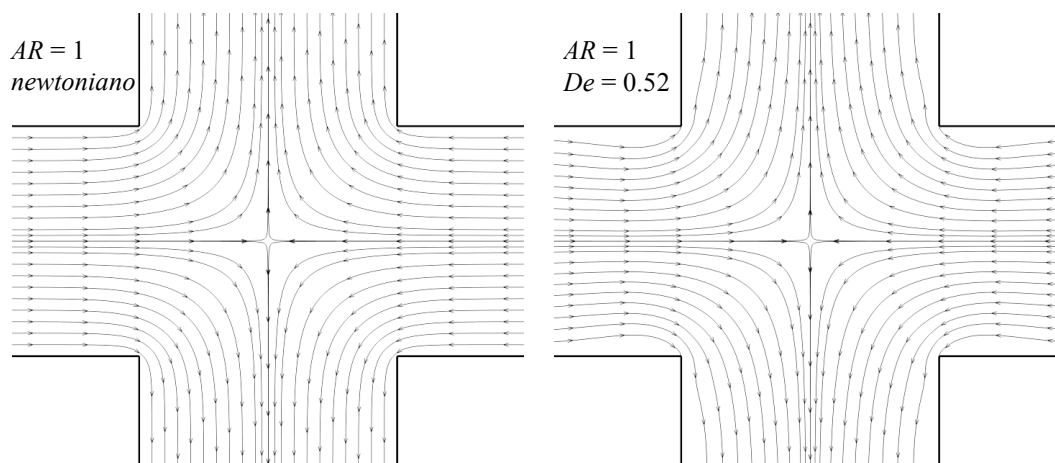
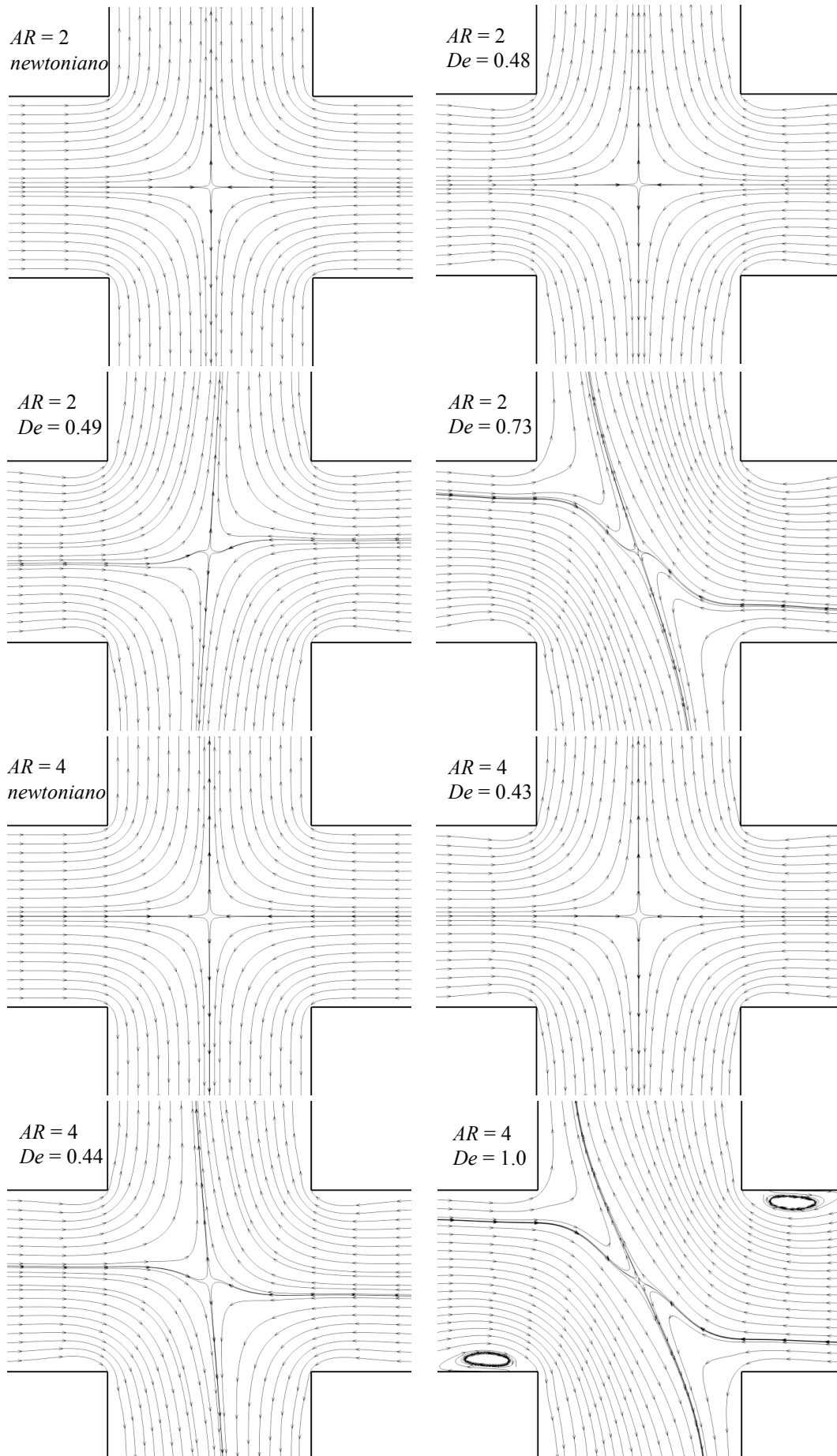


Figura 8.8 – Linhas de corrente do escoamento no plano central ($z = 0$) para razões de aspecto crescentes.

Figura 8.8 (cont.) – Linhas de corrente do escoamento no plano central ($z = 0$) para razões de aspecto crescentes.

Pode observar-se da Figura 8.8, quando se passa para o caso tridimensional com $AR = 1$ (secção quadrada), que o escoamento se mantém perfeitamente simétrico e sem sinais de bifurcação até ao ponto em que fica periódico (dependente do tempo), o que ocorre para valores de $De \geq 0.52$. Já para valores da razão de aspecto um pouco maiores, $AR = 2$ e 4 (secção rectangular), ocorrem duas instabilidades, a primeira das quais é a bifurcação estacionária do caso bidimensional, e que são quantificadas de seguida:

- Escoamento assimétrico e estacionário:
 - $AR = 2 \rightarrow De_{cr} \approx 0.49$;
 - $AR = 4 \rightarrow De_{cr} \approx 0.44$.
- Escoamento periódico ou variável (instabilidade dependente do tempo):
 - $AR = 2 \rightarrow De_{crl} \geq 0.73$;
 - $AR = 4 \rightarrow De_{crl} \geq 1.0$.

No caso em que $AR = 2$, os resultados apresentados em termos de linhas de corrente do escoamento na Figura 8.8 correspondem à situação de $De = 0$ (caso newtoniano – escoamento simétrico), 0.48 (antes da bifurcação), 0.49 (imediatamente após a bifurcação) e 0.73 (transição para o escoamento periódico). Nesta geometria a assimetria do escoamento é provocada pela elasticidade do fluido, tal como medida pelo número de Débora, uma vez que as simulações foram feitas para $Re = 0$, tendo-se desprezado os efeitos inerciais. Em termos gerais as visualizações do escoamento da Figura 8.8 mostram que um aumento da razão de aspecto da geometria tende a acentuar o fenómeno de bifurcação, enquanto a presença das paredes de fundo provocam uma estabilização do escoamento, que aumenta à medida que a distância entre as paredes vai diminuindo. Por outro lado, a ocorrência da instabilidade não estacionária é antecipada com a diminuição da razão de aspecto. De facto, para condutas quadradas a primeira instabilidade que conduz à bifurcação estacionária não foi detectada, e o escoamento ficou imediatamente não estacionário a partir de $De = 0.52$.

Na Figura 8.9 mostram-se as linhas de corrente em planos próximos da parede para $|z/d| \rightarrow 1/2$ ($AR = 1$), 1 ($AR = 2$) e 2 ($AR = 4$) (para os mesmos casos apresentados na Fig. 8.8), de forma a analisar a natureza tridimensional do escoamento. Comparando as Figuras 8.8 e 8.9 torna-se possível visualizar os efeitos tridimensionais que ocorrem ao longo da profundidade do canal, segundo a direcção z , e que pode ser visto com mais detalhe pela sequência de planos (com $\Delta z/(H/2) = 0.25$) da Fig. 8.10, onde se mostram os contornos das tensões normais. Um dos efeitos tridimensionais perceptível no escoamento é que, em todos

os casos com assimetria do escoamento ($AR = 2$ e 4), os resultados segundo os vários planos na direcção z revelam uma assimetria mais acentuada no plano central do canal ($z = 0$), enquanto perto das paredes as linhas de corrente ficam mais simétricas. Desta forma conclui-se, a partir da Figura 8.9, que o efeito de parede tende a estabilizar o escoamento para valores de $AR = 2$ e 4 , e que para $AR = 1$ esse efeito é tão acentuado que a assimetria do escoamento não se verifica. Para $AR = 1$ a única conclusão que se pode tirar é que a partir de $De \geq 0.52$ o escoamento continua simétrico mas fica não estacionário (dependente do tempo).

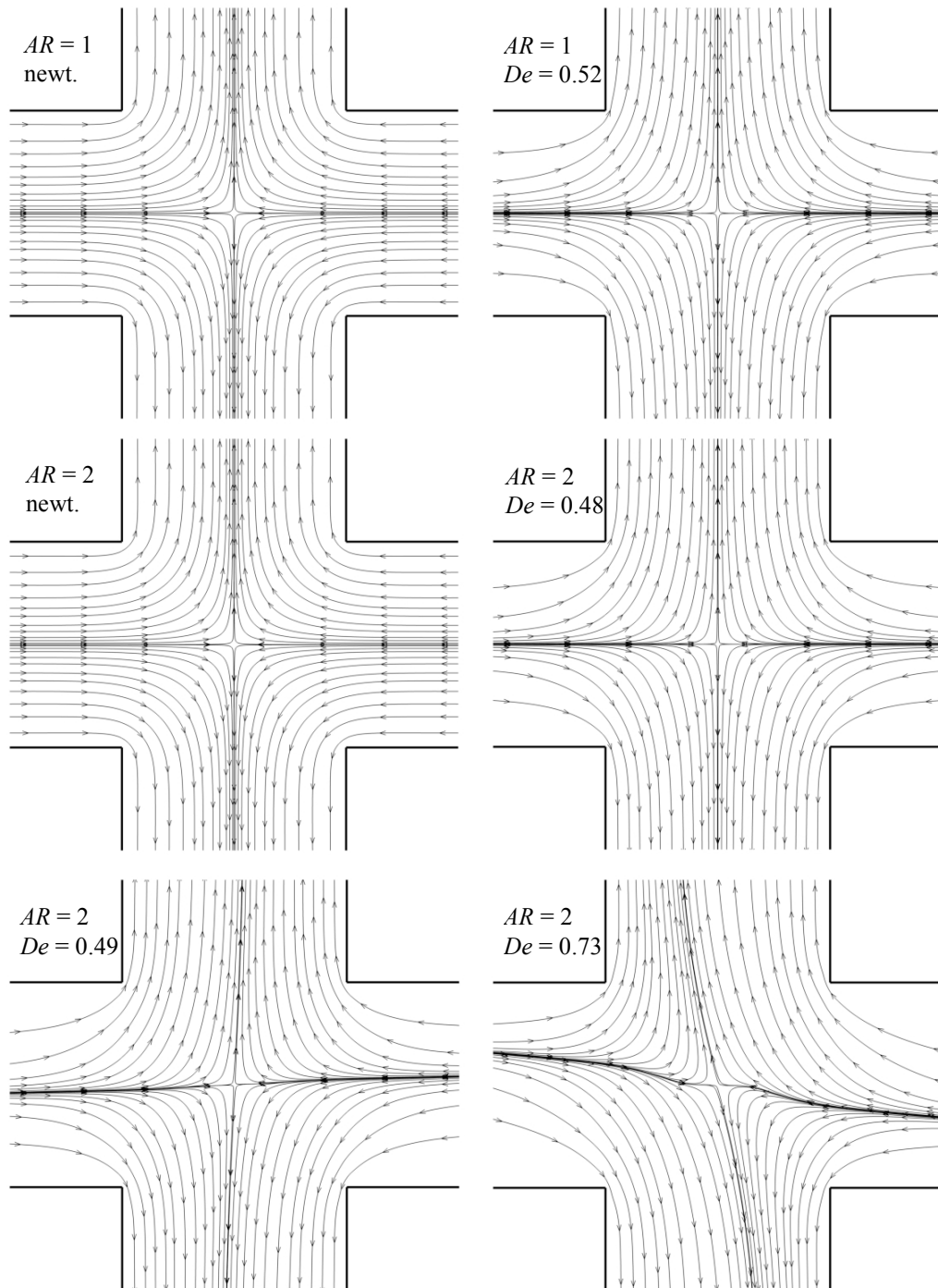


Figura 8.9 – Linhas de corrente dos casos da Figura 8.8 em planos adjacentes às paredes de fundo, $z \approx H/2$.

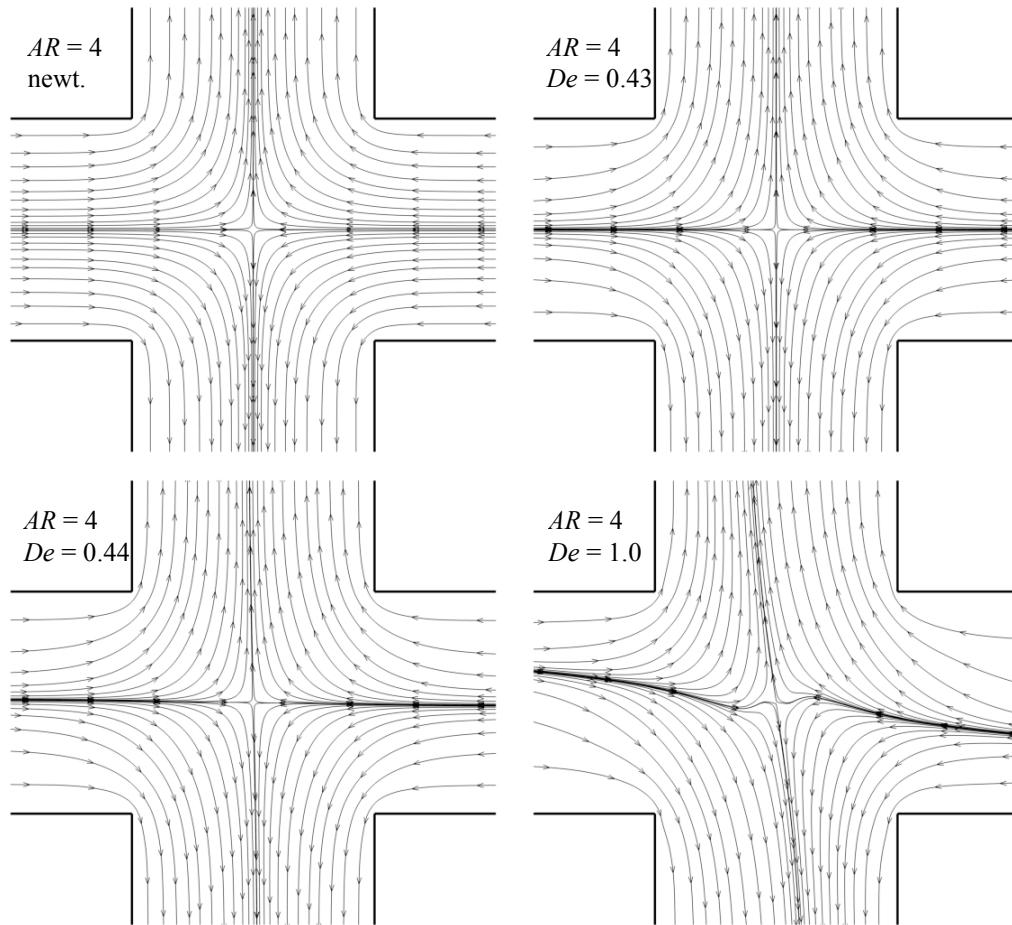


Figura 8.9 (cont.) – Linhas de corrente dos casos da Figura 8.8 em planos adjacentes às paredes de fundo, $z \approx H/2$.

A Figura 8.10 apresenta uma sequência de planos ao longo da direcção z com incremento $\Delta z/(H/2) = 0.25$ para $AR = 4$ que mostram os contornos da primeira diferença de tensões normais ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$) com sobreposição das linhas de corrente do escoamento (situação imediatamente após a bifurcação $De_{cr} \approx 0.44$). Tal como já foi referido acima, comprova-se que as paredes do canal tendem a estabilizar a assimetria do escoamento e que essa assimetria é mais acentuada no plano central ($z = 0$). Um último comentário sobre a instabilidade não estacionária que acontece nos últimos estágios de aumento de De para $AR = 2$ ($De_{cr1} \approx 0.73$) e 4 ($De_{cr1} \approx 1.0$) na Fig. 8.8. Nessa altura é visível uma forte curvatura na trajectória do fluido FENE-CR junto ao ponto central da intersecção dos canais. Segundo o critério de McKinley *et al.* [80] essa curvatura tenderá a induzir instabilidades na acção das tensões de tracção ao longo dessas linhas de corrente. Isto significa que é provável que esta instabilidade seja uma manifestação do mecanismo mais típico para instabilidades em escoamentos viscoelástico: tracção mais curvatura.

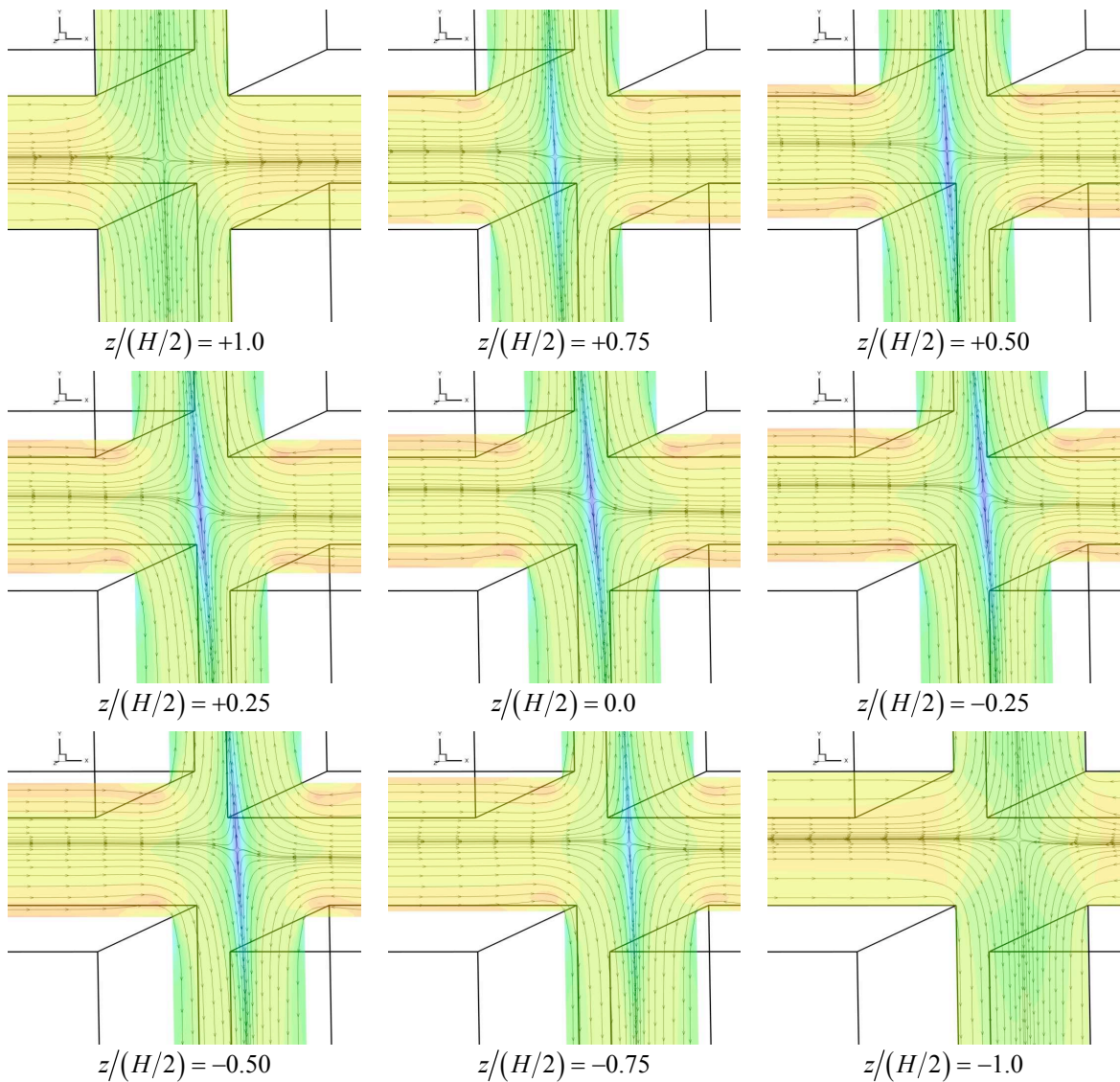


Figura 8.10 – Mapas de contornos da primeira diferença de tensões normais $(\tau_{xx} - \tau_{yy})/(\eta_0 U_{3D}/d)$ ao longo do plano z , com linhas de corrente sobrepostas, para $AR = 4$, $De = 0.44$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$.

8.6 – Conclusões

O propósito deste capítulo foi entender os resultados bidimensionais do Capítulo 7 para a situação tridimensional que reflecte melhor a realidade das experiências laboratoriais de Arratia *et al.* [15]. A razão de aspecto dos canais 3D foi alterada de $AR = \infty$ (caso bidimensional), para $AR = 4, 2$ (canais de secção rectangular) e 1 (canal de secção quadrada). À medida que esta razão de aspecto diminuía, a presença das paredes de fundo ($z = \pm H/2$) fazia-se sentir de forma mais acentuada, e os resultados das simulações mostraram que a

bifurcação estacionária tendia a atenuar-se até que desaparecia totalmente para $AR = 1$. A instabilidade não estacionária ocorreu sempre, para um certo valor do número de Débora crítico. A trajectória das linhas de corrente está mais próxima de ortogonal em planos junto às paredes de fundo do que nos planos centrais, onde a bifurcação era clara (casos de $AR = 2$ e 4).

Capítulo 9

Escoamento de fluido newtoniano através da junção de dois canais planos: Estudo do efeito de inércia*

Pretende-se neste capítulo fazer um estudo numérico do escoamento newtoniano através da junção de dois canais planos quando se faz variar o número de Reynolds $200 \leq Re \leq 2000$. O escoamento assume-se como bidimensional e o estudo vem na sequência do apresentado no Capítulo 7 onde se desprezaram efeitos inerciais, uma vez que aí o interesse era capturar instabilidades puramente elásticas. Verificou-se que mesmo para fluido newtoniano, para valores de Reynolds elevados ($Re > 1490 \pm 10$), o escoamento bifurca para uma solução assimétrica, com o comprimento da recirculação a tornar-se maior num dos lados da parede do canal de saída comparativamente à parede oposta. Esta instabilidade tem semelhanças com a que ocorre numa expansão plana, sendo feita a conexão com o estudo apresentado no Capítulo 6.

* Este capítulo é baseado no artigo “Rocha, G.N. e P.J. Oliveira (2009). *Escoamento de fluido newtoniano através da junção de dois canais planos: Estudo numérico do efeito de inércia*. III Conferência Nacional em Mecânica de Fluidos, Termodinâmica e Energia (MEFTE 09), Bragança, Portugal”.

9.1 – Introdução

Este estudo dá seguimento ao Capítulo 7 e aos trabalhos publicados por Arratia *et al.* [15], Poole *et al.* [118] e Rocha *et al.* [132], onde se consideraram escoamentos viscoelásticos com velocidades muito baixas, desprezando-se assim os efeitos inerciais do fluido, medidos pelo número de Reynolds, Re . Nesses trabalhos o intuito foi averiguar a influência da elasticidade do fluido de forma a verificar se o escoamento seria susceptível a uma instabilidade puramente elástica ficando assimétrico (ocorreria uma bifurcação), o que se verificou. O efeito de inércia, mesmo para fluido newtoniano, não foi estudado. Uma resenha bibliográfica não permitiu também encontrar trabalhos, numéricos ou experimentais, envolvendo escoamentos laminares em cruzamento de canais planos e que refiram eventual instabilidade do escoamento para números de Reynolds elevados. Pretende-se então neste capítulo analisar o comportamento do escoamento newtoniano através da mesma geometria, uma junção de dois canais planos em forma de cruz, quando se aumenta progressivamente a inércia do escoamento, ou seja, os resultados serão agora avaliados em função do número de Reynolds. Tal como no Capítulo 7, o escoamento é bidimensional, com o fluido a entrar pelos canais da esquerda e da direita e a sair pelos canais superior e inferior, conforme a representação esquemática da Fig. 9.1. É necessário resolver as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, juntamente com uma equação constitutiva, que no caso presente se reduz à lei de Newton da viscosidade (definidas no Capítulo 3).

Adiantando as conclusões, os resultados numéricos revelam que a partir de um certo valor de Reynolds ($Re > 200$) surge uma recirculação do escoamento após o cruzamento dos canais em direcção à saída, cujas linhas de corrente são ilustradas na Fig. 9.8. Para valores de Reynolds (Re) mais elevados (entre 1400 e 1500) o escoamento bifurca para uma solução assimétrica estacionária, com o comprimento de recirculação maior num dos lados do canal de saída, comparativamente ao outro lado oposto (ver linhas de corrente do escoamento da Fig. 9.12).

Este capítulo será organizado da seguinte forma: na Secção 9.2 faz-se uma descrição do problema em estudo; na Secção 9.3 apresentam-se e discutem-se os resultados numéricos obtidos; e na Secção 9.4 apontando-se as principais conclusões.

9.2 – Descrição do problema

Na Figura 9.1 apresenta-se esquematicamente a geometria do escoamento bidimensional com a indicação de algumas quantidades relevantes. O domínio de cálculo corresponde a um cruzamento de canais planos com o fluido a entrar pelos canais da esquerda e da direita e a sair pelos canais superior e inferior, tal como a geometria analisada no Capítulo 7. O interesse deste estudo prende-se com a análise do comportamento do escoamento nos canais de saída (superior e inferior) após o aparecimento de zonas de recirculação que se mantêm colados às paredes, imediatamente à jusante dos quatro cantos que compõem a geometria em forma de cruz. As recirculações estão indicadas no esquema da Fig. 9.1. Os canais de entrada e saída têm alturas unitárias ($d = 1$) e os comprimentos dos canais foram de $10d$ na entrada e $60d$ na saída.

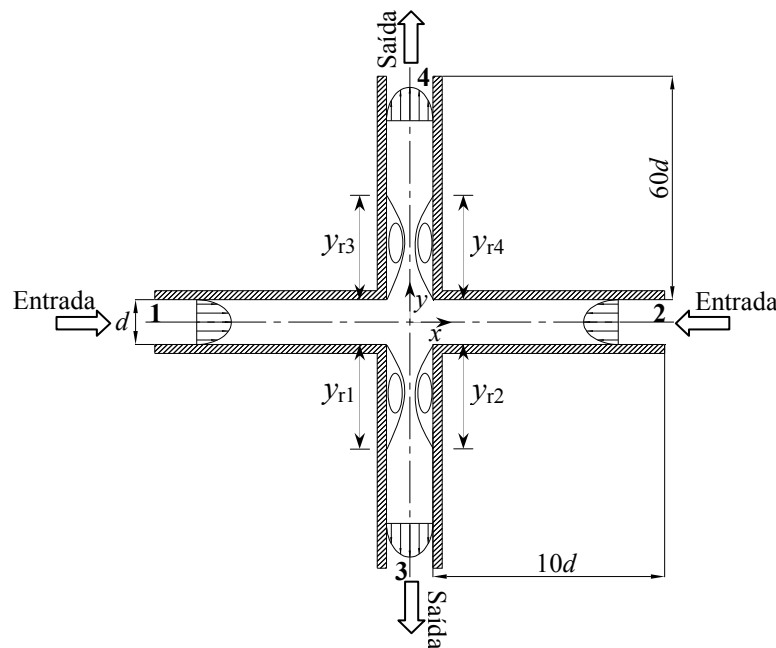


Figura 9.1 – Representação esquemática da geometria do escoamento com a indicação de algumas quantidades relevantes.

Inicialmente utilizaram-se os mesmos comprimentos para os canais de entrada e de saída, de $10d$ tal como na geometria utilizada no Capítulo 7. Todavia, constatou-se que esse comprimento não garantia condições de escoamento completamente desenvolvido nas saídas, ver Fig. 9.2(a). Esta figura mostra o perfil de velocidades previsto junto à saída superior, para um comprimento de canais de $10d$, e compara-o com o perfil parabólico teórico, observando-se que existe diferenças significativas. Para assegurar que nas saídas dos canais superior e

inferior o escoamento ficava completamente desenvolvido, mesmo para os números de Reynolds mais elevados, aumentou-se o comprimento dos canais de forma a verificar a relação $L/d \approx 0.03Re$ (ver, por exemplo, White [157]). Para um comprimento de $60d$ consegue-se evitar perturbações junto às saídas, como se pode observar pela Fig. 9.2(b).

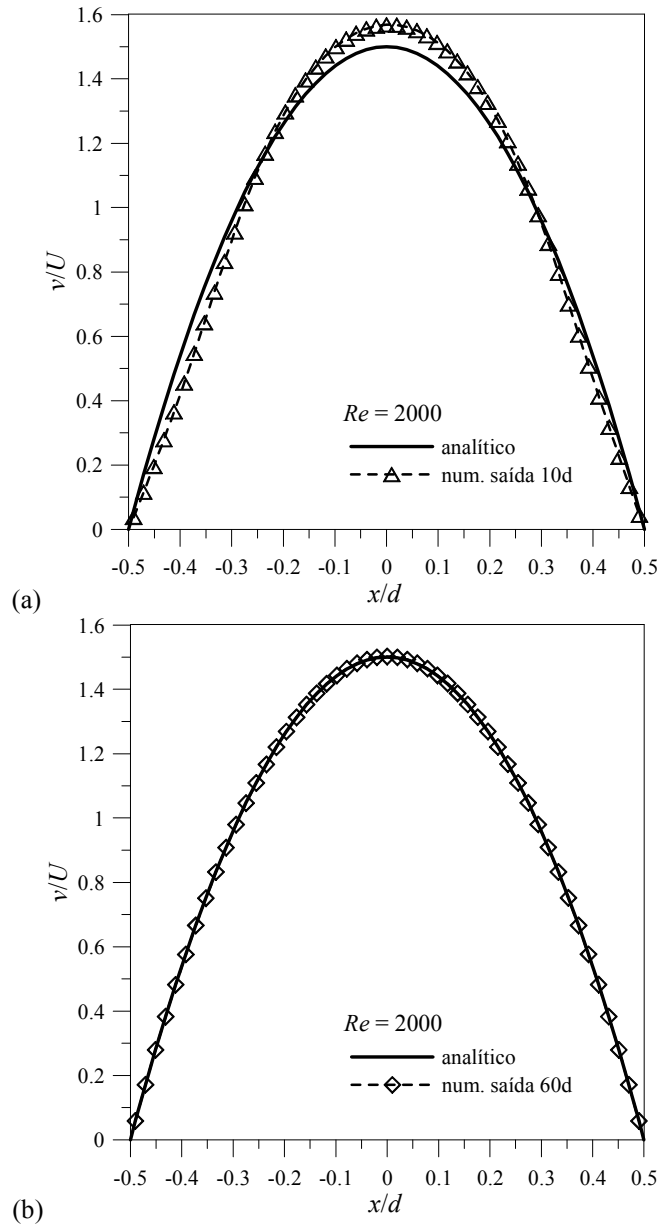


Figura 9.2 – Comparação entre os perfis de velocidade previstos na saída do canal superior e a solução analítica para: (a) comprimento do canal de saída $10d$; e (b) comprimento do canal de saída $60d$.

As condições de fronteira aplicadas neste problema são idênticas às do Capítulo 7 pelo que não é necessário discuti-las novamente.

A malha computacional foi também gerada de forma análoga ao explicado em capítulos anteriores, mas como os canais de saída são muito mais compridos os detalhes são

diferentes. Na Figura 9.3(a) apresenta-se a malha computacional utilizada nas simulações numéricas, que foi gerada por divisão do domínio de cálculo em cinco blocos (conforme a Fig. 9.3(b)) e cujas características geométricas mais relevantes estão representadas na Tabela 9.1.

Tabela 9.1 – Características geométricas da malha computacional.

Blocos	N_x	N_y	f_x	f_y
I	50	51	0.929296	1.0
II	51	51	1.0	1.0
III	51	300	1.0	0.987882
IV	51	300	1.0	1.012270
V	50	51	1.075369	1.0

NVC = 38301

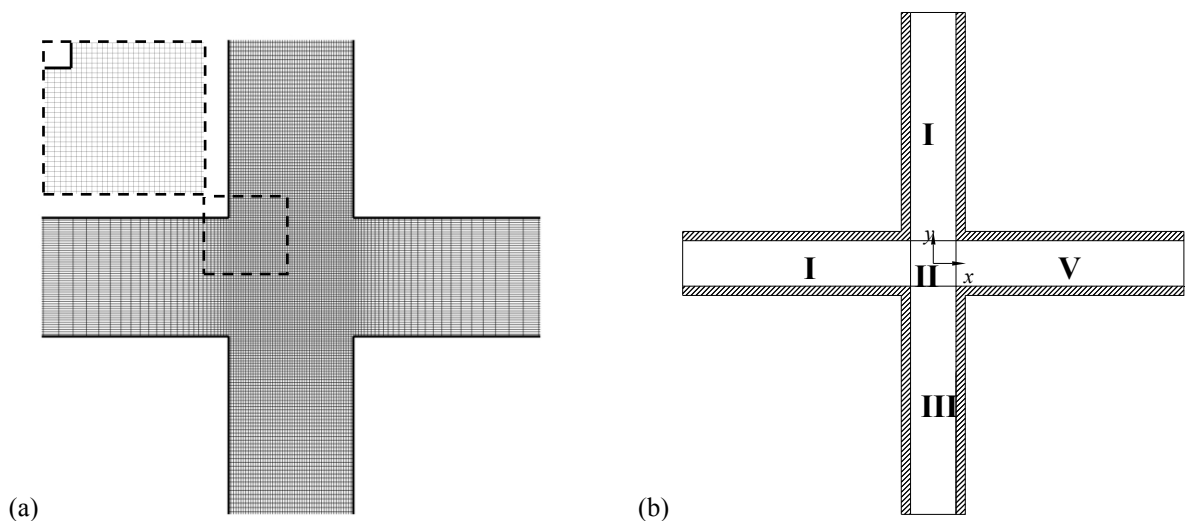


Figura 9.3 – Representação esquemática: (a) detalhe da malha computacional ($-2 \leq x/d; y/d \leq +2$); e (b) domínio de cálculo dividido em blocos.

Antes de se passar à apresentação dos resultados obtidos faz-se uma análise sucinta do efeito de refinamento de malha. Para isso, utilizou-se uma malha mais refinada (malha M2, com 101×101 células no quadrado central do cruzamento dos canais (bloco II da Fig. 9.3(b)) ao longo das direcções x e y) com o dobro do número de volumes de controlo ao longo de cada uma das direcções x e y , o que implica cerca de quatro vezes mais volumes de controlo totais (151601 células). Na Figura 9.4 apresentam-se os perfis de velocidade ao longo da linha central ($y = 0$) para as duas malhas, sendo o número de Reynolds $Re = 1400$. Existe uma boa concordância entre os resultados obtidos para ambas as malhas, justificando assim o uso da malha menos refinada (M1) para todos os cálculos numéricos posteriores. A estimativa da incerteza numérica nesta malha M1 é de 3.4%, que corresponde à maior diferença relativa nos valores da velocidade mostrados na Fig. 9.4.

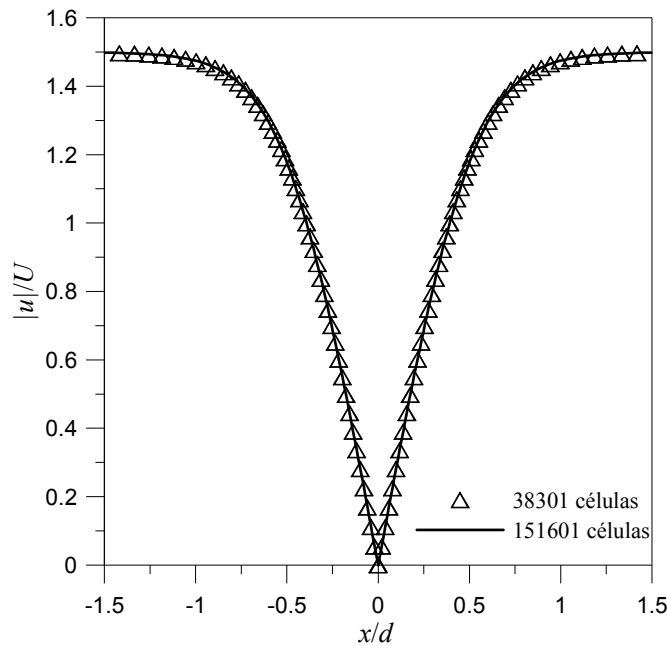


Figura 9.4 – Comparação dos perfis de velocidade ao longo da linha central ($y = 0$) para a malha M1 (38301 células) e M2 (151601 células), com $Re = 1400$.

9.3 – Resultados

Foram efectuadas várias corridas computacionais em regime estacionário fazendo variar o número de Reynolds. Este parâmetro adimensional controla o tamanho das zonas de separação a jusante dos cantos na região central da geometria em forma de cruz.

9.3.1 – Vórtices e linhas de corrente

Resultados representativos do comprimento dos vórtices que aparecem colados nas paredes dos canais de saída são apresentados na Tabela 9.2, com: $Y_{r1} = y_{r1}/d$ (tamanho do vórtice formado na parede esquerda do canal de saída inferior); $Y_{r2} = y_{r2}/d$ (tamanho do vórtice formado na parede direita do canal de saída inferior); $Y_{r3} = y_{r3}/d$ (tamanho do vórtice formado na parede esquerda do canal de saída superior); e $Y_{r4} = y_{r4}/d$ (tamanho do vórtice formado na parede direita do canal de saída superior), como representado na Fig. 9.1. De forma arbitrária consideram-se negativos os comprimentos de recirculação dos vórtices no canal de saída inferior (Y_{r1} e Y_{r2}) e positivos no canal de saída superior (Y_{r3} e Y_{r4}).

Verificou-se que o escoamento se tornava assimétrico acima de um valor crítico do número de Reynolds (Re_{cr}), bifurcando para uma solução ainda estacionária mas com tamanhos de vórtices diferentes: os dois do lado direito maiores do que os dois do lado esquerdo (ou vice-versa). Para $Re = 1500$ o escoamento já é assimétrico, enquanto para $Re = 1480$ ainda se mantém simétrico.

Tabela 9.2 – Comprimentos de recirculação nos canais de saída em função do número de Reynolds ($200 \leq Re \leq 2000$). O ponto crítico está indicado a negrito.

Re	Y_{r1}	Y_{r2}	Y_{r3}	Y_{r4}
200	-0.339	-0.339	+0.339	+0.339
400	-0.761	-0.761	+0.761	+0.761
600	-1.157	-1.157	+1.157	+1.157
800	-1.554	-1.554	+1.554	+1.554
1000	-1.957	-1.957	+1.957	+1.957
1200	-2.362	-2.362	+2.362	+2.362
1400	-2.769	-2.769	+2.769	+2.769
1480	-2.937	-2.937	+2.937	+2.937
1500	-2.952	-2.996	+2.951	+2.996
1520	-2.790	-3.226	+2.790	+3.226
1540	-2.521	-3.525	+2.521	+3.525
1560	-2.348	-3.734	+2.348	+3.734
1580	-2.242	-3.886	+2.242	+3.886
1600	-2.167	-4.011	+2.167	+4.011
1700	-1.978	-4.467	+1.978	+4.467
1800	-1.900	-4.804	+1.900	+4.804
1900	-1.862	-5.084	+1.862	+5.084
2000	-1.844	-5.327	+1.844	+5.327

Na Figura 9.5 apresenta-se a evolução dos comprimentos das recirculações que ocorrem nas paredes do canal de saída superior (Y_{r3} e Y_{r4} , indicados com símbolos triangulares) com o aumento da inércia (controlado pelo número de Reynolds, Re). Comprimentos idênticos (embora negativos por definição) verificam-se nas paredes do canal de saída inferior ($Y_{r3} = -Y_{r1}$ e $Y_{r4} = -Y_{r2}$), uma vez que os resultados mostram haver uma simetria em torno do plano horizontal x (isto é, $y = 0$). Uma forma artificial de evitar a bifurcação é impor simetria ao escoamento. Estão também indicados na figura os comprimentos de recirculação quando se utiliza apenas $\frac{1}{4}$ da geometria total do cruzamento de canais (indicados com símbolos redondos) e que serão discutidos mais adiante. Chama-se somente a atenção para o facto de, ao forçar a simetria, as recirculações continuam a ser iguais e crescem linearmente segundo a mesma recta que seguiam para valores de Re baixos ($Re < Re_{cr}$).

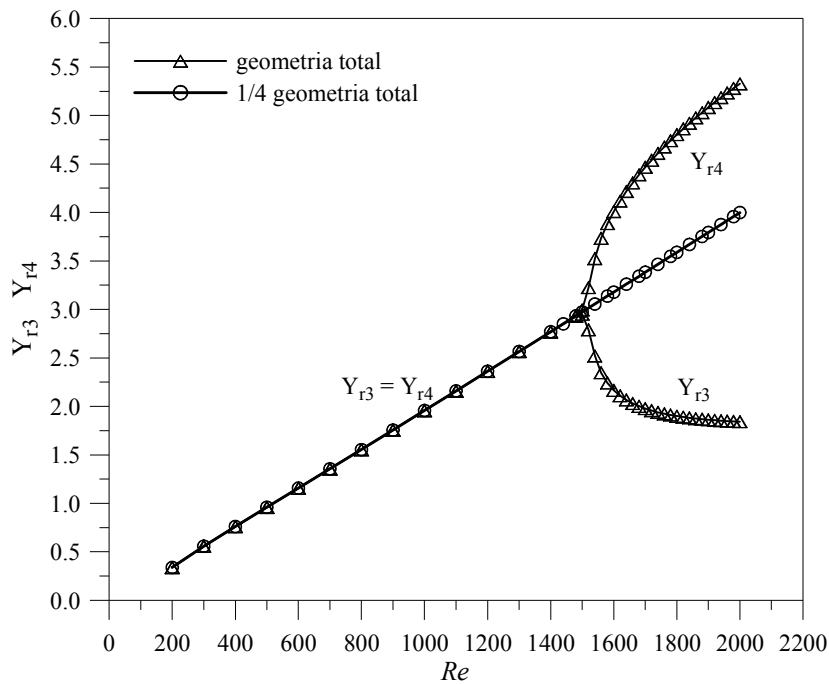


Figura 9.5 – Efeito da inércia (Re) sobre os comprimentos dos dois vórtices que aparecem colados nas paredes do canal de saída superior (Y_{r3} e Y_{r4}). Indicação do comprimento do vórtice para $1/4$ da geometria total do escoamento.

Os resultados obtidos revelam que o comprimento de recirculação cresce de forma linear à medida que o número de Reynolds aumenta, até que se atinge um limite a partir do qual o escoamento se torna assimétrico. Neste caso, apresenta um comprimento de recirculação maior numa das paredes relativamente à parede oposta (ver Fig. 9.12, por exemplo para $Re = 1700$). O ponto de transição em que ocorre a bifurcação de escoamento simétrico para assimétrico é designado como número de Reynolds crítico (Re_{cr}), sendo aproximadamente igual a 1500 (os resultados da Tabela 9.2 fornecem um valor de $Re_{cr} = 1490 \pm 10$).

Para quantificar o grau de bifurcação do escoamento utilizou-se um parâmetro adimensional baseado na diferença entre os tamanhos de recirculações opostas: $DY = -(Y_{r2} - Y_{r1}) / (1/2(Y_{r2} + Y_{r1})) = (Y_{r4} - Y_{r3}) / (1/2(Y_{r4} + Y_{r3}))$. Desta forma, no caso do escoamento ser simétrico tem-se: $-Y_{r1} = -Y_{r2} = Y_{r3} = Y_{r4}$ e $DY = 0$, enquanto para o caso em que há bifurcação $-Y_{r1} = Y_{r3}$ e $-Y_{r2} = Y_{r4}$, com $DY \neq 0$ e $DY = \pm 1$ (no limite – completamente assimétrico). Os resultados das previsões do parâmetro de bifurcação são apresentados na Fig. 9.6. Esta figura mostra um diagrama de bifurcação típico em forma de forquilha, correspondente a uma instabilidade estacionária supercrítica, com três soluções possíveis: uma solução em que o comprimento de recirculação maior aparece na parede

direita do canal de saída inferior (e na parede direita do canal de saída superior) e a recirculação mais pequena ocorre na parede esquerda do mesmo canal de saída; a solução oposta; e a última em que o escoamento seria simétrico. Esta é instável e não ocorre na prática; quando se força a simetria usando $\frac{1}{4}$ da geometria total, consegue-se obter artificialmente esta solução mostrada pela linha interrompida na Fig. 9.6 para $Re > Re_{cr}$.

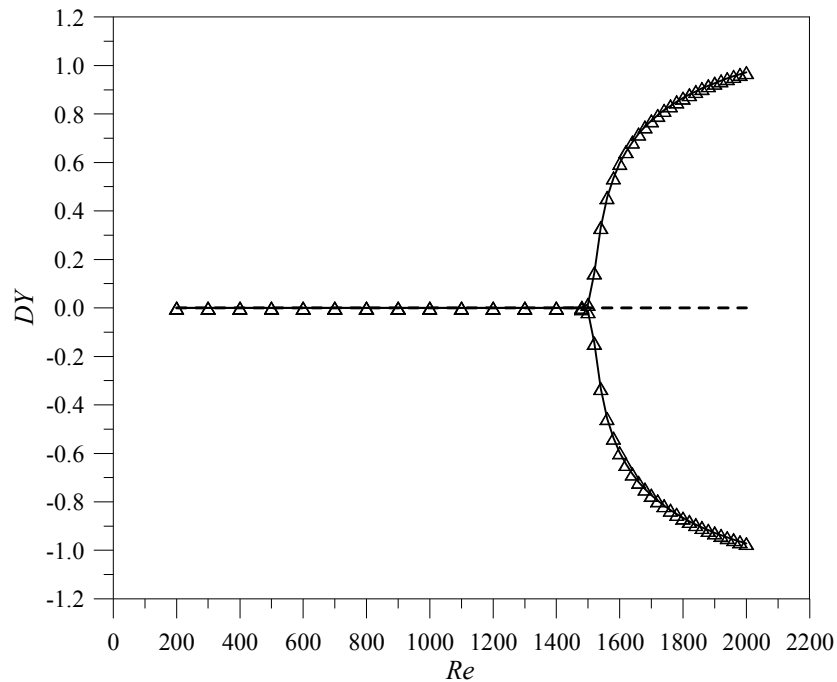


Figura 9.6 – Diagrama de bifurcação: DY em função do número de Reynolds.

Como já foi referido anteriormente e mostrado na Figura 9.5, no regime pré-crítico o comprimento das recirculações aumenta linearmente com o aumento do número de Reynolds, sendo bem correlacionado pela seguinte expressão:

$$Y_r = -0.0574 + 0.002Re \quad (9.1)$$

válida para $200 \leq Re < Re_{cr} \approx 1500$. Os resultados de Y_r obtidos da correlação são comparados com os valores numéricos (Tabela 9.2) no gráfico da Fig. 9.7, para a região em que o escoamento se encontra simétrico ($200 \leq Re \leq 1400$). Verifica-se que os valores de Y_r provenientes da correlação (Eq. (9.1)) apresentam uma boa aproximação quando comparados com os resultados numéricos.

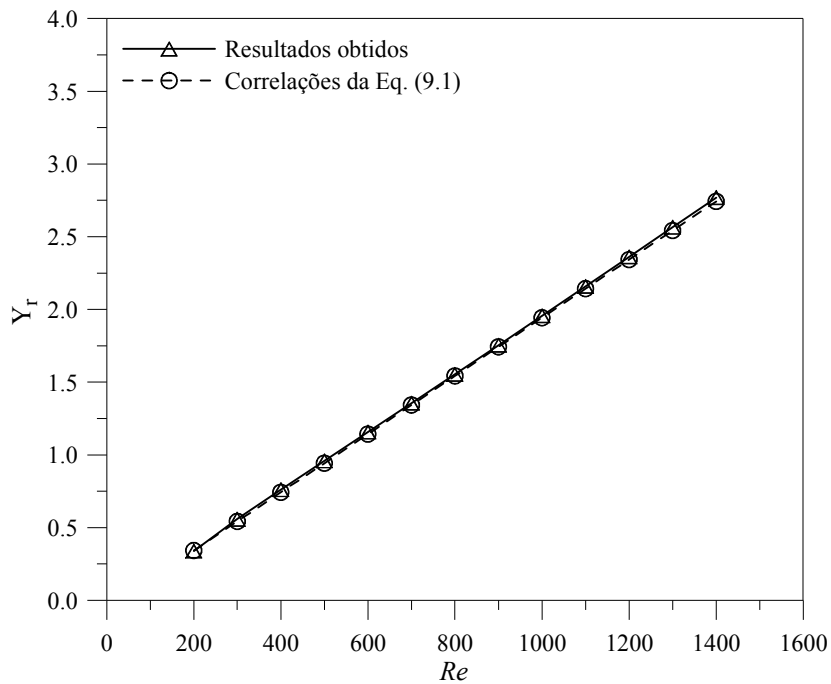


Figura 9.7 – Comprimentos dos vórtices de recirculação em função do número de Reynolds para escoamento simétrico ($Re < Re_{cr}$).

Quando se atinge o ponto crítico a partir do qual esses comprimentos são diferentes, depois da bifurcação para escoamento assimétrico a $Re_{cr} \approx 1500$, o aumento de Y_r deixa ser linear com Re . Teoricamente a variação de DY na Figura 9.6 para $Re > Re_{cr}$ deve seguir uma evolução em raiz quadrada, $DY \sim \sqrt{Re - Re_{cr}}$, tal como acontecia na bifurcação em forma de forquilha de origem elástica dos capítulos anteriores.

Na Figura 9.8 apresentam-se as linhas de corrente do escoamento resultantes das simulações numéricas quando se faz variar o número de Reynolds entre 200 e 1400. As linhas de corrente apenas estão representadas na parede esquerda do canal de saída inferior uma vez que o tamanho da bolha de recirculação é igual para as restantes paredes dos canais de saída, pois nesta fase o escoamento ainda é simétrico.

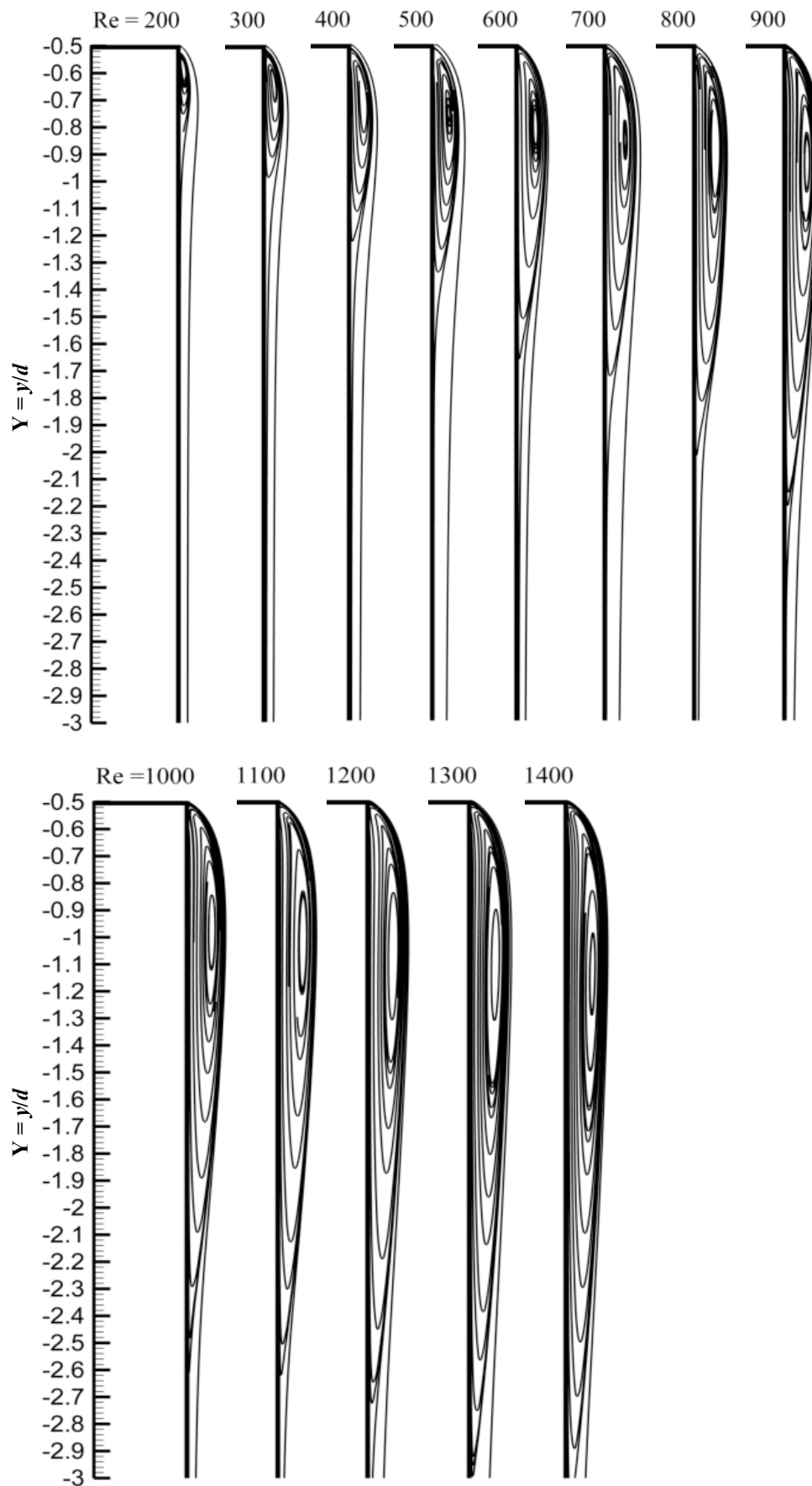


Figura 9.8 – Detalhe da bolha de recirculação formada sobre a parede esquerda do canal de saída inferior, para $200 \leq Re \leq 1400$ (escoamento simétrico).

O escoamento separa-se imediatamente após o canto reentrante da geometria, e a zona de separação prolonga-se cada vez mais ao longo do canal de saída inferior à medida que o número de Reynolds aumenta. Para $Re=1400$ o ponto de recolamento ocorre a $Y = -0.5 - 2.769 = -3.269$ (ver Tabela 9.2), já fora da zona apresentada na Fig. 9.8. Foi por isso necessário aumentar o comprimento desses canais por forma a evitar que erros junto às saídas se propagassem para a zona das recirculações e do centro da geometria em forma de cruz. Nota-se também que as recirculações são estacionárias e coladas na parede (*standing eddies* na designação inglesa) e que o seu centro é gradualmente deslocado no sentido do escoamento por efeito do aumento da inércia.

Seguidamente, apresentam-se na Tabela 9.3 os resultados obtidos referentes à posição central do vórtice de recirculação ($X_c = x_c/d$ e $Y_c = y_c/d$, conforme ilustrado na Fig. 9.9) e intensidades de recirculação (ψ_r), que ocorrem na parede esquerda do canal de saída inferior, para valores crescentes do número de Reynolds, na situação em que o escoamento se encontra simétrico ($200 \leq Re \leq 1400$). Para as restantes paredes dos canais de saída (parede direita do canal de saída inferior e paredes esquerda/direita do canal de saída superior) o posicionamento central do vórtice comporta-se da mesma forma, com correspondente reajuste geométrico. Nas Figuras 9.10 (posição do ponto central do vórtice) e 9.11 (intensidade do vórtice) mostram-se, de forma qualitativa, os resultados listados na Tabela 9.3, como gráficos em função do número de Reynolds.

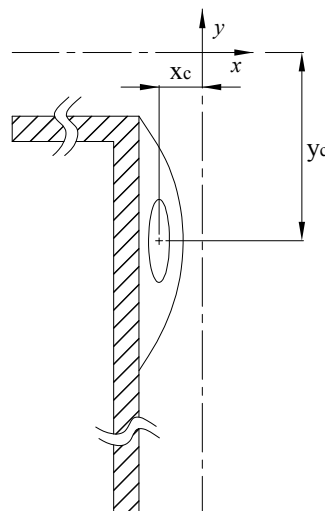


Figura 9.9 – Representação esquemática indicando a posição central do vórtice na parede esquerda do canal de saída inferior.

Tabela 9.3 – Posicionamento do vórtice na parede esquerda do canal de saída inferior para o escoamento simétrico ($200 \leq Re \leq 1400$). Indicação da intensidade de recirculação (ψ_r).

Re	X_c	Y_c	$\psi_r (\times 10^{-3})$
200	-0.482	-0.605	0.3579
300	-0.459	-0.676	1.1239
400	-0.447	-0.725	2.0393
500	-0.437	-0.779	3.0485
600	-0.432	-0.812	3.9003
700	-0.423	-0.886	4.9282
800	-0.420	-0.903	5.6346
900	-0.418	-0.935	6.1829
1000	-0.415	-0.974	6.6843
1100	-0.413	-1.014	7.1458
1200	-0.408	-1.048	7.5954
1300	-0.408	-1.095	7.9779
1400	-0.408	-1.134	8.3063

Na Figura 9.10 as coordenadas cartesianas do ponto central da recirculação são referidas relativamente à posição do canto, isto é $X'_c = X_c - (-0.5)$ e $Y'_c = -(Y_c - (-0.5))$. Constata-se dos resultados obtidos que à medida que o número de Reynolds aumenta a posição central do vórtice tende a afastar-se da parede onde se encontra colado mas, para $Re \approx 800$, a distância da parede já aumenta pouco ficando-se por $\approx 0.09d$. Em relação à sua variação segundo y , verifica-se que esta aumenta quase linearmente com o número de Reynolds, na direcção da saída do canal. Assim, Y'_c tem andamento idêntico ao comprimento da recirculação (Fig. 9.5) e o facto do crescimento ser linear em ambos os casos justifica a argumentação de dependência directa nos efeitos inerciais. A variação de X'_c e Y'_c pode também ser vista indirectamente pelas linhas de corrente do escoamento ilustradas na Figura 9.8, com a bolha a aumentar segundo as direcções x e y com o crescimento da inércia do escoamento.

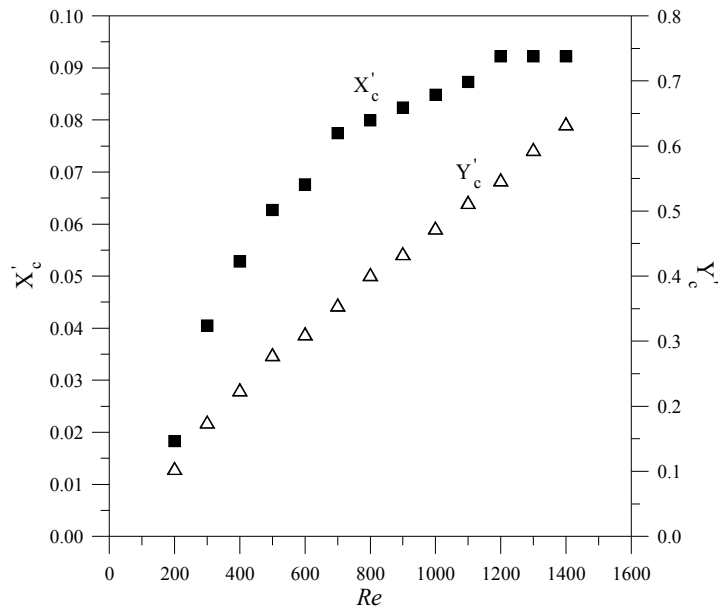


Figura 9.10 – Variação do posicionamento do vórtice na parede esquerda do canal de saída inferior em função do número de Reynolds para o caso do escoamento simétrico ($200 \leq Re \leq 1400$).

Observa-se da Figura 9.11 um aumento progressivo da intensidade do vórtice com o crescimento do número de Reynolds ($200 \leq Re \leq 1400$), mas de forma não linear, ou pelo menos com uma inflexão a ocorrer para $Re \approx 800$. A diminuição da taxa de aumento de ψ_r com o número de Reynolds, que acontece para $Re \approx 800$, estará relacionada com a curva de X'_c na Figura 9.10, tendo que ver com a limitação espacial imposta ao crescimento do vórtice segundo x , a direcção normal à parede.

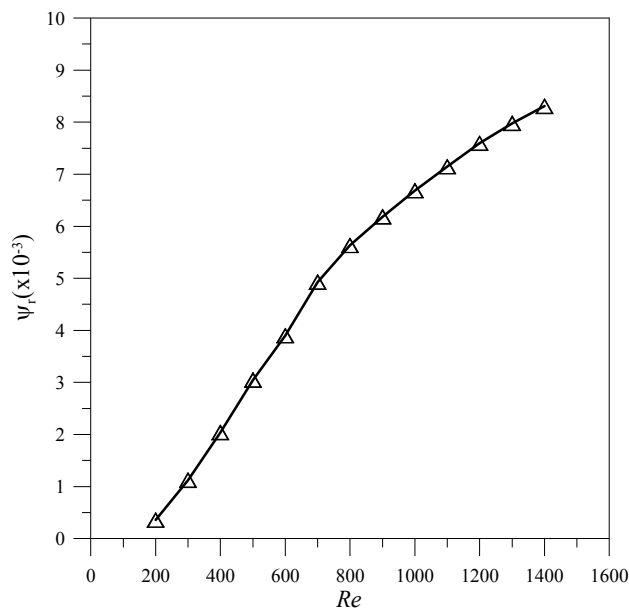


Figura 9.11 – Intensidade do vórtice na parede esquerda do canal de saída inferior em função do número de Reynolds para o caso do escoamento simétrico ($200 \leq Re \leq 1400$).

Na Figura 9.12 mostram-se as linhas de corrente do escoamento após a bifurcação para o caso assimétrico ($Re_{cr} \approx 1500$), com valores do número de Reynolds a variarem entre 1500 e 2000. Os comprimentos de recirculação são idênticos no canal de saída superior pelo que apenas se apresenta a sua variação no canal de saída inferior. Nas condições das presentes simulações, a maior recirculação ocorre na parede direita dos canais de saída superior e inferior ($-Y_{r2} = Y_{r4}$, ver Fig. 9.1), enquanto a menor recirculação dá-se na parede oposta do canal ($-Y_{r1} = Y_{r3}$, parede esquerda). Esta situação pode inverte-se, com a bolha de separação maior a ocorrer na parede da esquerda, e isso dependerá seguramente das condições iniciais e dos parâmetros numéricos (passo no tempo utilizado, por exemplo).

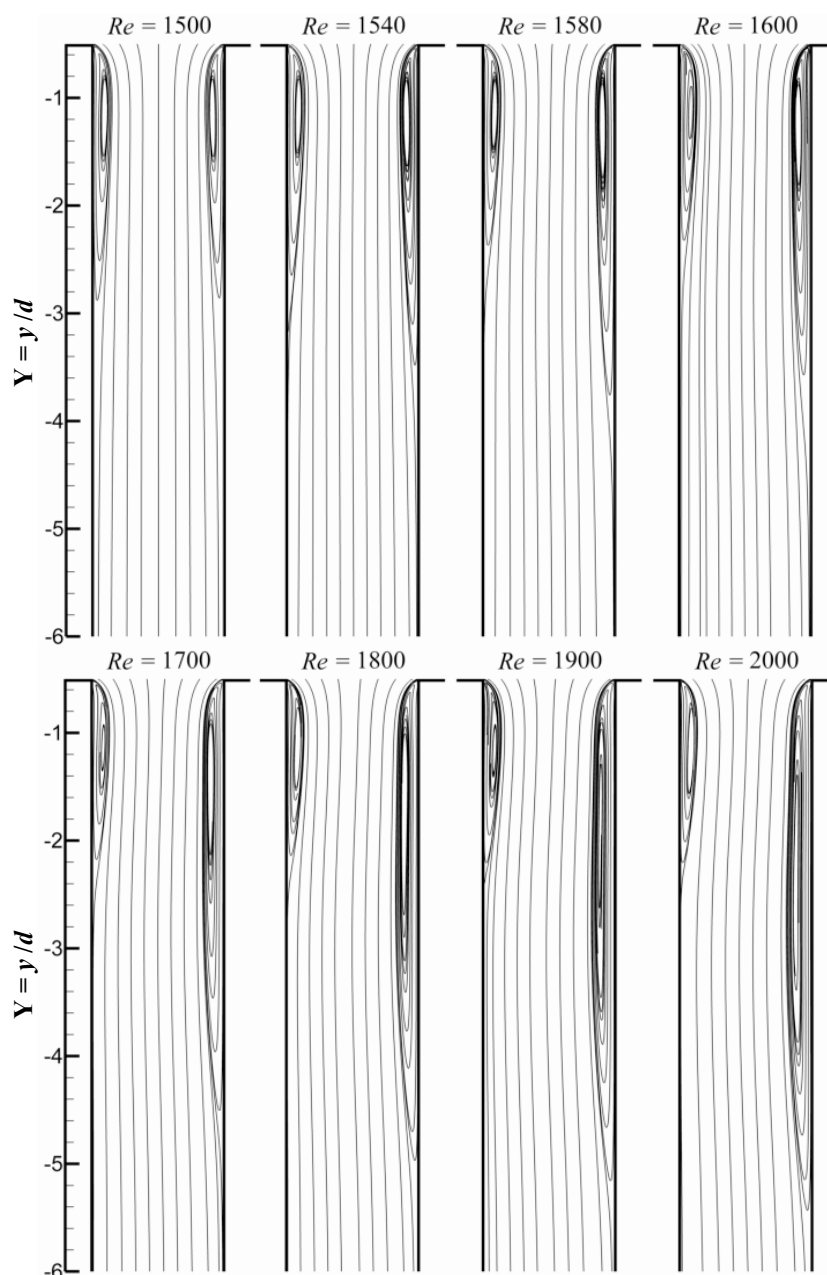


Figura 9.12 – Linhas de corrente e recirculação do escoamento no canal de saída inferior em função do número de Reynolds para situação pós-crítica ($Re_{cr} \approx 1500$).

Os resultados mostram haver uma simetria relativamente ao plano horizontal x ($y = 0$), o que contrasta com a bifurcação puramente elástica discutida nos capítulos anteriores, que ocorria mesmo para $Re = 0$ e que exibia uma anti-simetria (simetria em torno do plano $y = -x$): as recirculações maior e menor formavam-se no mesmo lado da parede dos canais de saída. Constata-se ainda desta figura e da Figura 9.5 que, após a ocorrência da bifurcação, a recirculação de menor tamanho tende a estabilizar a sua dimensão longitudinal, enquanto a recirculação de maior tamanho continua a aumentar com Re . Verifica-se também que nesta situação, para valores de Re superiores a Re_{cr} , o ponto de estagnação do escoamento deslocase ligeiramente da posição central correspondente ao cruzamento das linhas de “simetria” dos canais (ponto com $x = y = 0$), como é mostrado na Fig. 9.13. Uma vez que a maior recirculação surge na parede direita dos canais de saída (como se constata pelas linhas de corrente da Fig. 9.12), o ponto de estagnação é trasladado no sentido do vórtice mais pequeno (parede esquerda dos canais de saída). Na Figura 9.13 mostra-se a variação com Re da posição do ponto de estagnação (x_c, y_c) do escoamento quando este fica assimétrico, para as duas soluções numéricas estacionárias possíveis: uma com aparecimento do comprimento de recirculação maior na parede direita e menor na parede esquerda dos canais de saída (caso presente, indicado com símbolos fechados); e a situação oposta (mostrada com símbolos abertos).

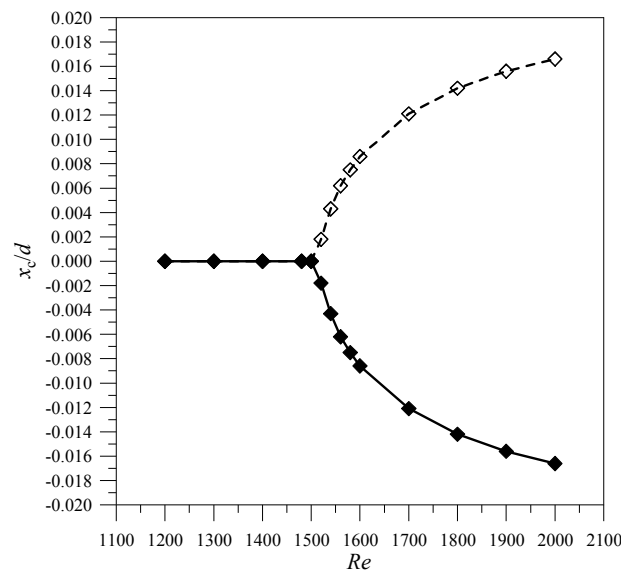


Figura 9.13 – Evolução da posição do ponto de estagnação em função do número de Reynolds ($1200 \leq Re \leq 2000$).

Na Tabela 9.4 listam-se os resultados numéricos correspondentes à Fig. 9.13. Esta figura faz lembrar imediatamente um diagrama de bifurcação supercrítica em forma de forquilha, como o da Fig. 9.6 neste capítulo, ou da Fig. 7.4 no Capítulo 7. No entanto, convém

precisar que o ponto de estagnação da instabilidade descrita no Capítulo 7 se manteve sempre na posição central $x_c = y_c = 0$ (devido até à anti-simetria observada).

Tabela 9.4 – Posicionamento do ponto de estagnação em função do número de Reynolds ($1200 \leq Re \leq 2000$).

Re	x_c/d
1200	0.0000
1300	0.0000
1400	0.0000
1480	0.0000
1500	0.0000
1520	-0.0018
1540	-0.0043
1560	-0.0062
1580	-0.0075
1600	-0.0086
1700	-0.0121
1800	-0.0142
1900	-0.0156
2000	-0.0166

9.3.2 – Pressão e coeficiente de perda

Discute-se agora a evolução da pressão ao longo dos canais, uma vez que está intimamente relacionada com a perda de energia localizada devido ao cruzamento do escoamento. A Figura 9.14 mostra os resultados relativos à evolução das distribuições de pressão (adimensionalizada com ρU^2) ao longo da linha central do canal de entrada da esquerda, até a saída superior, de acordo com a Fig. 9.1 (corresponde ao trajecto entre o ponto (1) e o ponto (4)). Pode observar-se a alteração qualitativa da distribuição de pressão com o aumento do número de Reynolds ($Re = 200, 500, 1000$ e 1600), sendo comparada com a distribuição de pressão teórica no caso do escoamento num canal plano recto (sem o cruzamento) para as mesmas condições. O declive do decréscimo da pressão teórica diminui com o aumento do número de Reynolds de acordo com a relação $f = 12/Re$ e $\frac{\Delta p / \rho U^2}{L/d} = f$.

Para os valores de $Re = 200, 500, 1000$ e 1600 tem-se, respectivamente, $f = 0.06, 0.024, 0.012$ e 0.0075 , que são os declives das linhas a cheio na Fig. 9.14. Na zona do cruzamento dos canais há uma recuperação de pressão, seguida por um decaimento. Os declives das curvas p em função de x (ou y) têm de ser iguais antes e depois do cruzamento do escoamento. No entanto, vai haver uma ligeira separação entre as linhas tangentes aos pontos de p em função de x (ou y) na Fig. 9.14, para $x < 0$ e x (ou y) > 0 . Essa separação é já notória na figura para $Re = 1000$ e 1600 , e é proporcional à perda de carga localizada.

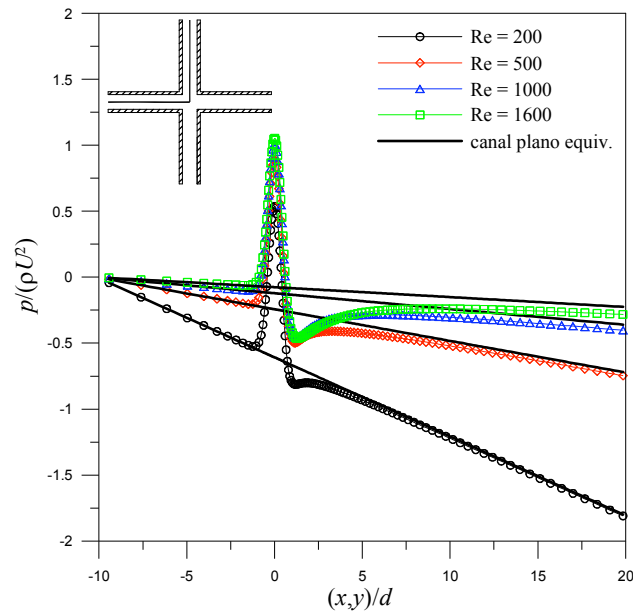


Figura 9.14 – Distribuição da pressão adimensional ao longo da linha central do canal de entrada da esquerda até à saída superior, para o caso do cruzamento de canais (símbolos) e do canal plano equivalente (sem cruzamento: linha). Parametrização em função do número de Reynolds.

Na Figura 9.15 mostra-se a distribuição do gradiente axial de pressão para os quatro casos atrás descritos. Esta representação ilustra bem a desaceleração do escoamento ($\partial p/\partial x > 0$) antes de $x = 0$, seguido por aceleração ($\partial p/\partial y < 0$) depois de $y = 0$. Para valores de y elevados ($y > 10d$) os $\partial p/\partial y$ da parte direita têm de ser iguais aos $\partial p/\partial x$ da parte esquerda da figura.

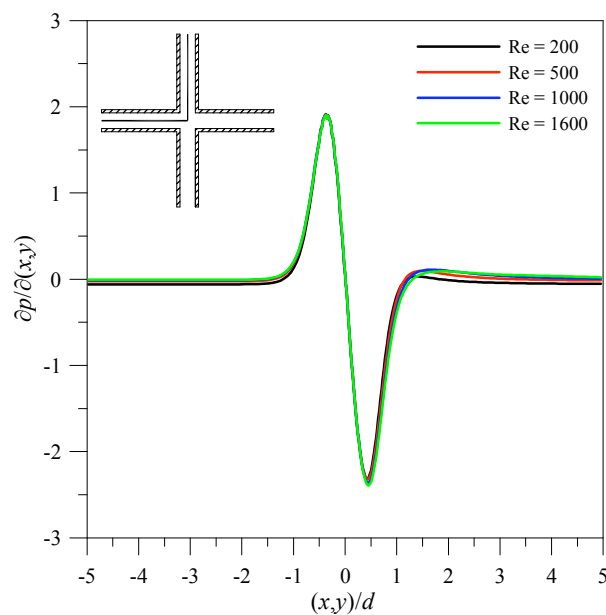


Figura 9.15 – Distribuição do gradiente de pressão adimensional ao longo da linha central do canal de entrada da esquerda até à saída superior, em função do número de Reynolds.

Faz-se agora a avaliação detalhada da queda de pressão presente no escoamento desde a entrada esquerda (ponto (1)) até a saída superior (ponto (4)) do canal. Para quantificar esta perda de pressão localizada, que é devida a irreversibilidades no escoamento na intersecção dos dois canais planos, vai calcular-se a correcção de Couette (C) como indicado pela Eq. (7.2) (Cap. 7). No entanto, a normalização será feita agora com uma escala convectiva (ρU^2) em vez da escala difusiva ($\eta_0 U/d$). O valor de C será calculado usando as previsões da pressão ao longo da linha central do canal de entrada esquerdo até a saída do canal superior na geometria total do escoamento, e também para uma geometria considerando apenas um quarto do domínio de cálculo (simetria imposta). Na Figura 9.16(a) apresenta-se esquematicamente a geometria utilizada para simular o escoamento referente à simetria imposta (um quarto da geometria total). A geometria dividida em blocos está ilustrada na Fig. 9.16(b), com as características geométricas mais relevantes apresentadas na Tabela 9.5.

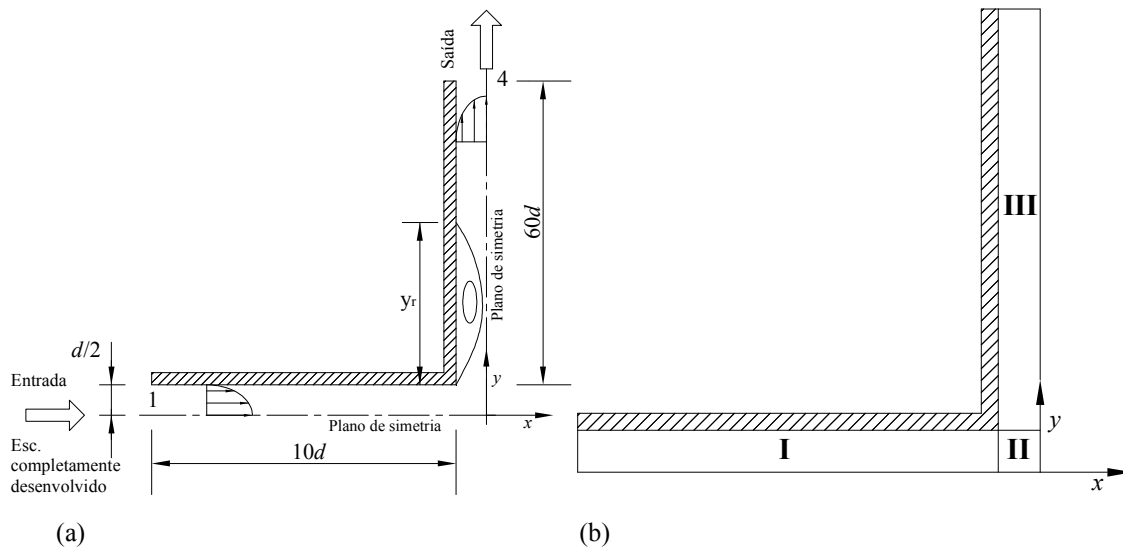


Figura 9.16 – (a) Representação da geometria do escoamento com simetria imposta e (b) ilustração do domínio de cálculo dividido em blocos.

Tabela 9.5 – Características geométricas da malha computacional .

Blocos	N_x	N_y	f_x	f_y
I	50	25	0.929296	1.0
II	25	25	1.0	1.0
III	25	300	1.0	1.01218
NVC = 9375				

Na Figura 9.17 apresenta-se a malha computacional (com 9375 células) utilizada para o cálculo do escoamento impondo simetria relativamente aos planos centrais do canal de entrada e de saída, onde estes são considerados como fronteira de simetria.

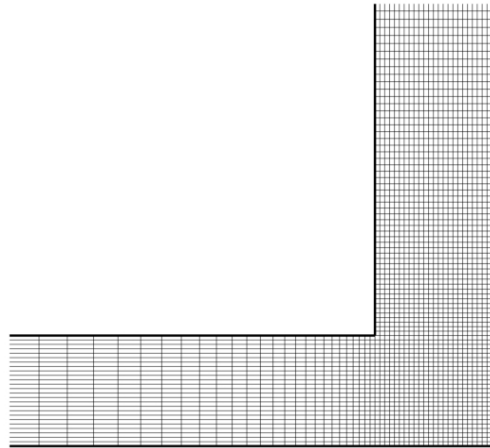


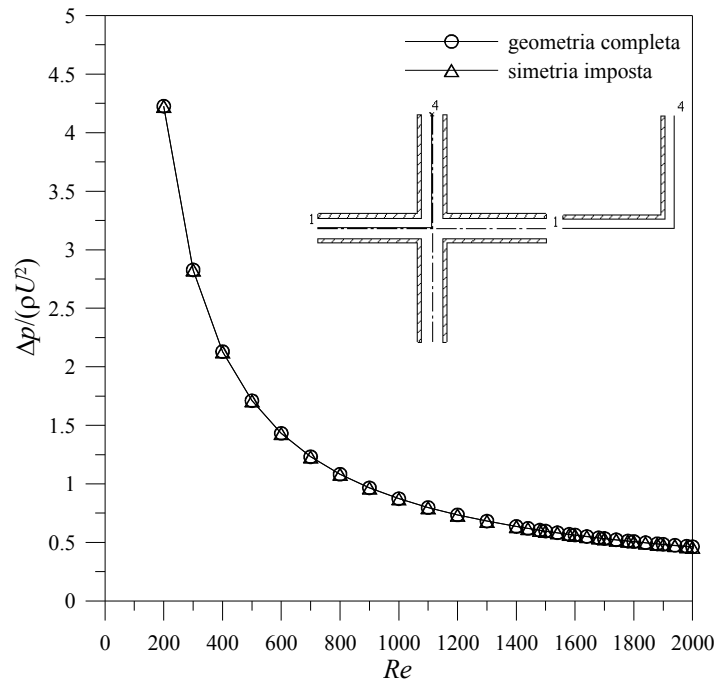
Figura 9.17 – Detalhe da malha computacional utilizada no cálculo do escoamento com simetria imposta ($-2 \leq x/d \leq 0$ e $0 \leq y/d \leq +2$).

Alguns dos resultados obtidos para o comprimento de recirculação que ocorre na parede esquerda do canal de saída superior da geometria com simetria imposta (ver Fig. 9.16(a)) em função do número de Reynolds estão indicados na Tabela 9.6. Os resultados encontram-se representados graficamente na Figura 9.5, onde se vê que coincidem com os resultados da geometria total no regime pré-crítico e seguem a mesma linha recta de evolução no regime pós-crítico.

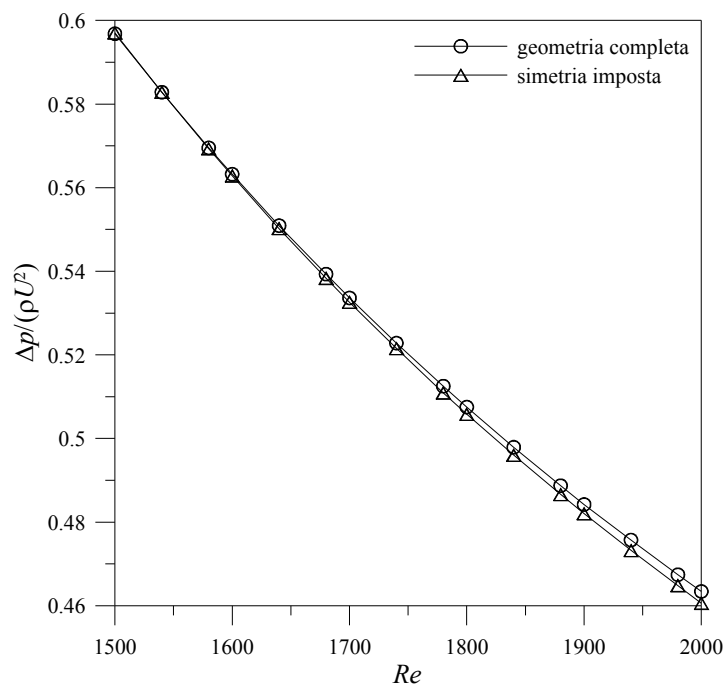
Tabela 9.6 – Comprimento de recirculação em função do número de Reynolds considerando $\frac{1}{4}$ da geometria total do escoamento.

Re	Y_r
200	0.339
400	0.761
600	1.157
800	1.554
1000	1.957
1200	2.363
1400	2.770
1500	2.974
1520	3.015
1540	3.056
1560	3.097
1580	3.138
1600	3.178
1700	3.383
1800	3.588
1900	3.793
2000	3.999

Na Figura 9.18 mostra-se a queda de pressão ($\Delta p = p_1 - p_4$) entre a entrada esquerda do canal (ponto (1)) e saída superior (ponto (4)) em função do número de Reynolds, para a geometria completa e a geometria com simetria imposta. A pressão é tornada adimensional com a pressão dinâmica (ρU^2), ou energia cinética, como é próprio de escoamento inercial.



(a)



(b)

Figura 9.18 – (a) Evolução da queda de pressão ao longo da linha central dos canais em função do número de Reynolds e (b) detalhe da queda de pressão para a situação de escoamento assimétrico ($1500 \leq Re \leq 2000$).

Os resultados da Figura 9.18(a) mostram que a evolução da queda de pressão é coincidente para ambos os casos (geometria total e simetria imposta) até Re perto do valor crítico ($Re_{cr} \approx 1500$) e que, a partir daí, parece haver uma diferenciação do Δp que não é perceptível na escala da parte (a) da figura. Todavia, pode verificar-se pela parte (b) que, quando o escoamento fica assimétrico, a queda de pressão é ligeiramente superior ao caso em que se considera a geometria total do escoamento. Como a maior parte do valor de Δp é constituído pela perda de carga ao longo dos $70d$ de comprimento dos canais devido ao atrito nas paredes (o $\Delta p_{FD} = (L/d)f$ referido antes), que é igual nos dois casos, as diferenças entre os dois, que resultam das irreversibilidades no cruzamento, são muito pequenas. Os resultados numéricos estão listados na Tabela 9.7 para futuras comparações.

Tabela 9.7 – Valores da queda de pressão (Δp), adimensionalizada com ρU^2 , e do parâmetro da correcção de Couette (C), em função do número de Reynolds, para a geometria total e $\frac{1}{4}$ da geometria.

Re	Geometria total		$\frac{1}{4}$ da geometria total	
	Δp	C	Δp	C
400	2.1293	0.0211	2.1293	0.0211
500	1.7103	0.0238	1.7103	0.0238
600	1.4314	0.0260	1.4314	0.0260
700	1.2318	0.0271	1.2318	0.0271
800	1.0823	0.0282	1.0825	0.0284
900	0.9661	0.0291	0.9663	0.0293
1000	0.8736	0.0303	0.8736	0.0303
1100	0.7979	0.0313	0.7980	0.0314
1200	0.7348	0.0321	0.7349	0.0322
1300	0.6817	0.0330	0.6818	0.0331
1400	0.6362	0.0339	0.6363	0.0340
1500	0.5968	0.0346	0.5970	0.0348
1540	0.5828	0.0352	0.5826	0.0350
1580	0.5695	0.0358	0.5693	0.0356
1600	0.5632	0.0362	0.5628	0.0358
1640	0.5509	0.0367	0.5502	0.0360
1680	0.5393	0.0374	0.5383	0.0364
1700	0.5336	0.0376	0.5326	0.0366
1740	0.5228	0.0382	0.5215	0.0369
1780	0.5125	0.0388	0.5109	0.0372
1800	0.5075	0.0390	0.5058	0.0373
1840	0.4979	0.0396	0.4960	0.0377
1880	0.4887	0.0402	0.4866	0.0381
1900	0.4842	0.0404	0.4820	0.0382
1940	0.4757	0.0410	0.4732	0.0386
1980	0.4674	0.0415	0.4648	0.0389
2000	0.4634	0.0418	0.4606	0.0390

A perda de carga localizada é medida pela correcção de Couette, obtida após descontar a perda de pressão para escoamento completamente desenvolvido da diminuição total da pressão. Na Figura 9.19 apresenta-se a evolução da correcção de Couette ($C = (\Delta p - \Delta p_{FD}) / \rho U^2$) com o aumento do número de Reynolds, avaliando-se assim a queda de pressão entre a entrada (ponto (1)) e a saída (ponto (4)), após a contabilização da queda de pressão no caso completamente desenvolvido (Δp_{FD}).

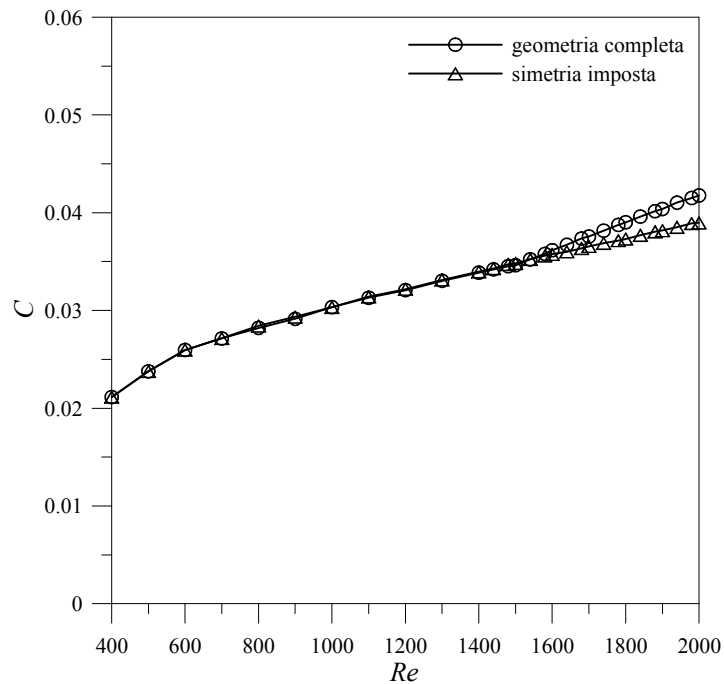


Figura 9.19 – Variação da correcção de Couette em função do número de Reynolds para a geometria total (símbolos redondos) e simetria imposta (símbolos triangulares).

A primeira constatação é que C , ou a perda de carga, aumenta com a inércia, como seria de esperar. Verifica-se também dos resultados obtidos que para valores de Reynolds abaixo do valor crítico ($Re \leq Re_{cr} \approx 1500$) o coeficiente da perda de carga localizada é semelhante para os dois casos simulados, considerando a geometria total do escoamento e $1/4$ da geometria total com simetria imposta. Todavia, comprova-se que para valores de Reynolds superiores ao valor crítico (quando $Re > Re_{cr}$ e o escoamento se torna assimétrico) há uma ligeira redução da perda de carga quando se impõe a simetria do escoamento ($1/4$ da geometria total), ao passo que no caso da geometria total do escoamento o valor de C cresce a uma taxa maior após $Re > Re_{cr}$. É visível da figura uma inflexão no andamento de C em função do número de Reynolds no ponto $Re = Re_{cr}$, com aumento do respectivo gradiente. Conclui-se

então que conduzir o escoamento para a configuração assimétrica requer mais energia do que seria necessário para manter o escoamento simétrico. A conclusão contrária foi observada no caso da bifurcação puramente elástica, quando se analisou o comportamento do escoamento ao se variar o número de Débora e onde se desprezaram os efeitos inerciais (Cap. 7).

9.4 – Conclusões

O escoamento laminar newtoniano através da geometria em forma de cruz apresenta também uma instabilidade inercial, que acontece para um valor crítico do número de Reynolds de $Re_{cr} \approx 1500$, e que se revela como uma bifurcação em forma de forquilha supercrítica. De um dos lados do eixo vertical ocorrem duas zonas de recirculação adjacentes às paredes dos canais de saída de tamanho superior (ou inferior) às recirculações do outro lado do eixo vertical. Nesse sentido, a assimetria é diferente da que ocorria na instabilidade puramente elástica do Capítulo 7: agora existe simetria por reflexão no plano horizontal x ($y=0$), e não no plano diagonal ($y=-x$). Esta instabilidade inercial é acompanhada por um aumento da perda de carga localizada, ou seja, o escoamento assimétrico requer agora mais energia do que o correspondente escoamento simétrico. Por fim, o ponto de estagnação deixa de se manter no centro geométrico do cruzamento dos canais ($x=0$ e $y=0$), e desloca-se para um lado, ou outro, ao longo do eixo x . Esse deslocamento apresenta comportamento típico de uma variável de bifurcação.

Capítulo 10

Bifurcação elástica num cruzamento de canais planos modificado com quatro saídas *

Este estudo vem no seguimento do trabalho apresentado no Capítulo 7 referente ao escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais planos bidimensional (caso padrão, com duas saídas). Nesse capítulo constatou-se que acima de um certo valor do número de Débora (Débora crítica) o escoamento fica assimétrico mas estacionário, originando nas saídas uma fina camada vertical típica, com uma forte extensão molecular polimérica (birefringence strand). De forma a verificar se o fenómeno de bifurcação é despoletado, ou condicionado, pela presença e extensão dessa camada extensional que ocorre no plano central do cruzamento dos canais, em direcção às saídas, optou-se por considerar uma geometria que limitasse fisicamente essa extensão. Neste capítulo apresenta-se um estudo numérico do escoamento não newtoniano viscoelástico através de um cruzamento de canais planos modificado, que consiste em dois canais de entrada segundo a horizontal e quatro saídas dispostas também segundo a horizontal.

* Este capítulo é baseado no trabalho “Rocha, G.N. e P.J. Oliveira (2009). *Elastic bifurcation in a modified cross-slot geometry with four exits*. III Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería (SEMNI 09), Barcelona, Espanha”.

10.1 – Introdução

Foi visto no Capítulo 7 que fluidos viscoelásticos originam instabilidades no escoamento em cruzamento de canais planos; ver também Arratia *et al.* [15], Poole *et al.* [118] e Rocha *et al.* [132]. Os mecanismos que estão na origem de instabilidades elásticas em escoamentos com curvatura das linhas de corrente são razoavelmente conhecidos, ver Pakdel & Mckinley [106], Larson *et al.* [73] e Joo & Shaqfeh [67]. No caso do arranjo geométrico formado por um cruzamento de canais planos o escoamento apresenta uma forte camada extensional formada na região central ($x = 0$, ver Fig. 10.1), que emana verticalmente ao longo dos canais de saída e que pode ser observada com técnicas ópticas de birefringência. Esta camada central com uma elevada concentração de tensões normais extensionais que surge no escoamento viscoelástico foi estudada por muitos autores (por exemplo Harlen *et al.* [58], Remmelgas *et al.* [125], Lee *et al.* [75], etc). Este fenómeno pode estar relacionado com o mecanismo que provoca a instabilidade observada ou, de alguma forma, pode condicionar essa instabilidade. Assim, para verificar estes pressupostos concebeu-se uma geometria que consiste num cruzamento de canais modificado, de forma a limitar a camada extensional que ocorre na região central.

O objectivo deste capítulo é estudar numericamente o escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais planos modificado, conforme representado na Fig. 10.1. O número de Débora ($De = \lambda U/d$), que caracteriza os efeitos elásticos do fluido, será variado para velocidades muito baixas, de forma a que se possam desprezar efeitos inerciais no escoamento ($Re = 0$). O problema em estudo é bidimensional, foi assumido que o fluido segue a equação constitutiva reológica do modelo FENE-CR. Os resultados das previsões mostraram que para fluido newtoniano, em condições de $Re = 0$, o escoamento se mantém perfeitamente simétrico e sem sinais de instabilidade. Todavia, quando o fluido é não newtoniano, segundo o modelo FENE-CR, o escoamento torna-se assimétrico mas mantém-se estacionário acima de um certo valor do número de Débora crítico. Como conclusão regista-se que mesmo nesta geometria modificada existe uma assimetria no escoamento provocada pela elasticidade do fluido. Por isso, a presença da região extensional à saída não pode ser a (única) causa da instabilidade, uma vez que está aqui muito limitada (não ultrapassa um comprimento de $1d$).

10.2 – Descrição do problema

A geometria em estudo está apresentada esquematicamente na Figura 10.1, onde são definidas algumas quantidades relevantes. O escoamento entra pelos canais centrais da esquerda e da direita e sai pelos dois canais superiores e os dois canais inferiores. A separação das paredes entre os canais de entrada e de saída têm uma espessura adimensional de $\Lambda = a/d$ e um espaçamento central adimensional de $\Theta = b/d$. Os canais de entrada e de saída do escoamento encontram-se alinhados na direcção x , estando o referencial cartesiano situado na zona central da junção dos canais (bloco II da Fig. 10.2). Todos os canais apresentam iguais alturas (d) e comprimentos ($10d$).

O escoamento é bidimensional, incompressível e estacionário, de acordo com a situação $Re = 0$, e o modelo FENE-CR foi aplicado com parâmetros $\beta = 0.1$ e $L^2 = 50, 100$ e 200 , no seguimento do estudo do Capítulo 7.

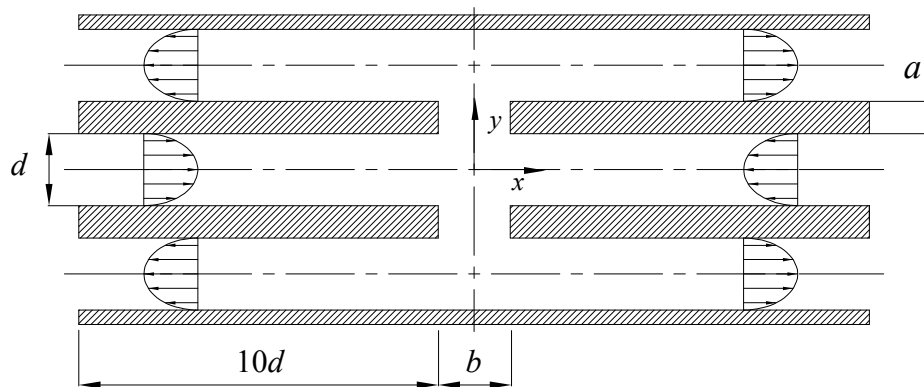


Figura 10.1 – Representação esquemática da geometria do escoamento.

Para gerar a malha computacional sobre o domínio de cálculo, dividiu-se a geometria em onze blocos de acordo com a Figura 10.2, considerando $\Lambda = a/d = 0.1$ e $\Theta = b/d = 1.0$. As características geométricas aplicadas para a geração da malha computacional estão representadas pela Tabela 10.1, tendo em conta as condições atrás enunciadas.

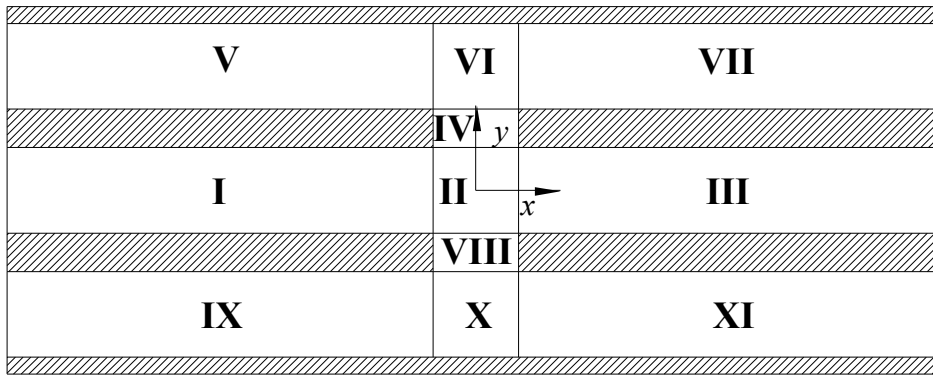


Figura 10.2 – Esquema dos blocos para gerar a malha.

Tabela 10.1 – Características geométricas da malha computacional para $\Lambda = a/d = 0.1$ e $\Theta = b/d = 1.0$
($\Delta x_{\min} \approx \Delta y_{\min} \approx 0.02d$).

Blocos	N_x	N_y	f_x	f_y
I	50	51	0.929313	1.000000
II	51	51	1.000000	1.000000
III	50	51	1.076060	1.000000
IV	51	5	1.000000	1.000000
V	50	51	0.929313	1.000000
VI	51	51	1.000000	1.000000
VII	50	51	1.076060	1.000000
VIII	51	5	1.000000	1.000000
IX	50	51	0.929313	1.000000
X	51	51	1.000000	1.000000
XI	50	51	1.076060	1.000000
NVC = 23613				

A espessura das paredes entre os canais de entrada e saída manteve-se sempre constante, tomando um valor $\Lambda = a/d = 0.1$ para todos os cálculos aqui apresentados. Em relação ao espaçamento central entre os canais de entrada fez-se um estudo para três valores de $\Theta = b/d$ ($= 0.5, 1.0$ (características indicadas na Tabela 10.1) e 1.5) de forma a avaliar o seu efeito sobre o escoamento. A malha utilizada nos cálculos numéricos é ortogonal e não uniforme. Na Figura 10.3 apresenta-se um detalhe das três malhas computacionais utilizadas nas simulações numéricas, para os três valores de $\Theta = b/d$. Cada uma das malhas foi refinada localmente na região central do escoamento, de forma a resolver numericamente com precisão adequada os elevados gradientes de tensão que possam ocorrer nos cantos de intersecção dos canais.

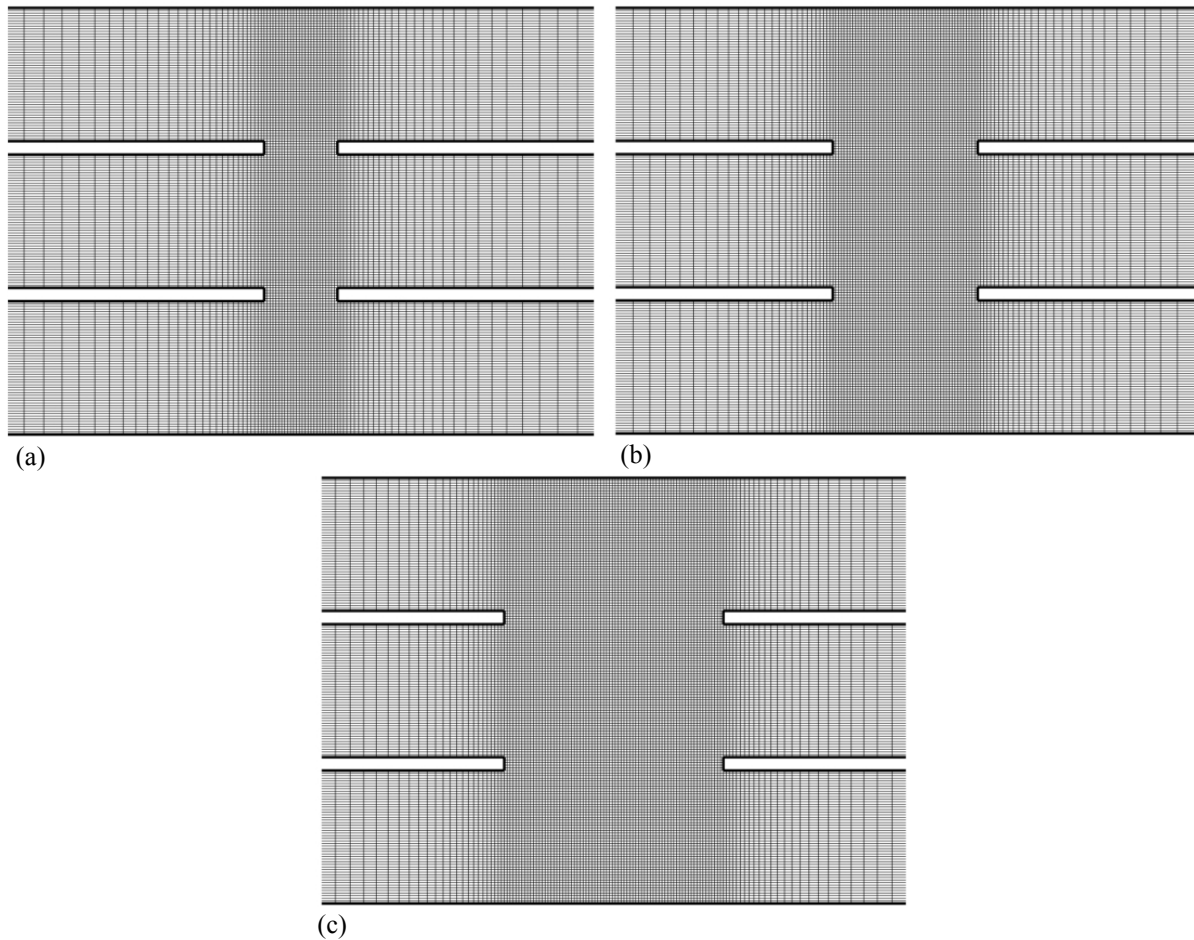


Figura 10.3 – Detalhe da malha computacional ($-2.0 \leq x/d \leq +2.0$) para três espaçamentos centrais:
(a) $b/d = 0.5$; (b) $b/d = 1.0$; e (c) $b/d = 1.5$.

As condições de fronteira aplicadas neste problema são idênticas às que foram aplicadas anteriormente e que se encontram descritas no Capítulo 5. Uma condição adicional que foi necessário impor nas saídas do escoamento foi a de garantir que por cada canal sai $\frac{1}{4}$ do caudal total de entrada, de forma a evitar soluções múltiplas. Os comprimentos dos canais de entrada e de saída são suficientemente longos de forma a garantir que não ocorrem efeitos indesejáveis na zona central do cruzamento dos canais (nas saídas são garantidas aproximadamente condições de escoamento completamente desenvolvido). Em todas as paredes dos canais foram consideradas as condições de não escorregamento (velocidades nulas).

10.3 – Estudo de refinamento de malha

Por forma a ter-se uma ideia quantitativa da imprecisão numérica, fez-se um estudo de refinamento de malha por aplicação duma malha mais refinada (Malha 2), possuindo o dobro de volumes de controlo ao longo de cada uma das direcções x e y relativamente à malha base (Malha 1 da Tabela 10.1). Assim, a Malha 2 terá cerca de quatro vezes mais volumes de controlo do que a Malha 1. A comparação entre os perfis de velocidade e de tensão normal (τ_{xx}) ao longo da linha central ($y = 0$) para ambas as malhas computacionais (Malha 1 (M1) e Malha 2 (M2), com 23613 e 93223 células, respectivamente) está apresentada na Fig. 10.4, para as condições de $De = 0.3$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $b/d = 1.0$. Os resultados apresentados na figura comprovam que as previsões da Malha 1 apresentam uma boa concordância quando comparadas com as obtidas usando a malha mais refinada (Malha 2, com 93223 volumes de controlo). Desta forma, todos os resultados apresentados neste capítulo foram calculados numericamente tendo como base a Malha 1. As estimativas da incerteza numérica desta malha (Malha 1) são de 3.5% e 2.3% correspondentes à maior diferença relativa nos valores da velocidade (Fig. 10.4(a)) e da tensão normal (Fig. 10.4(b)), respectivamente.

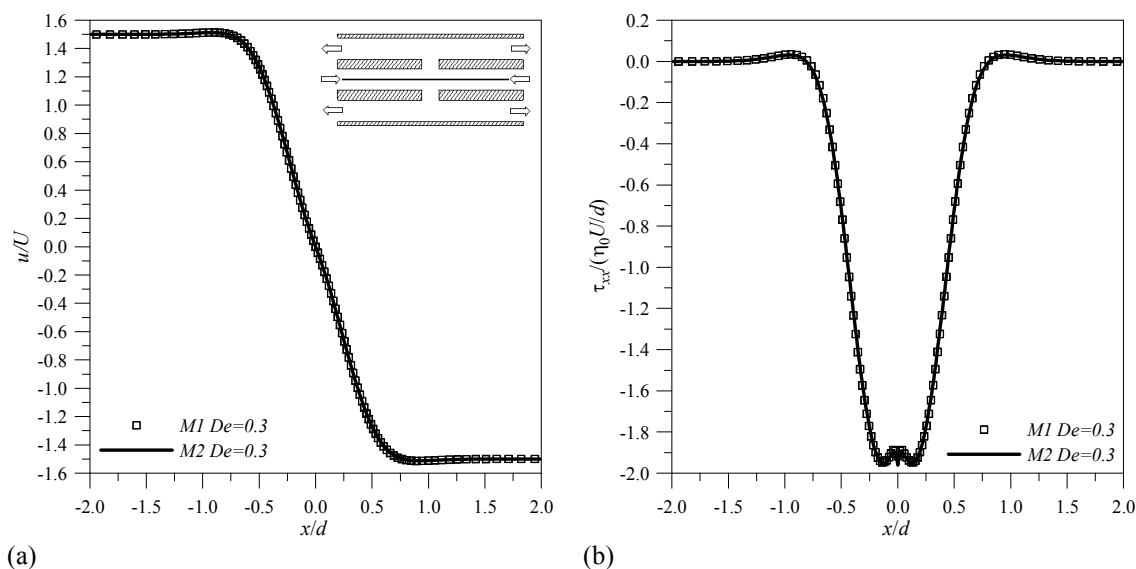


Figura 10.4 – Comparação ao longo da linha central dos canais de entrada para a malha M1 (23613 células) e M2 (93223 células) referente ao fluido viscoelástico ($De = 0.3$, $\beta = 0.1$, $L^2 = 100$ e $\Theta = 1.0$): (a) velocidade; e (b) tensões normais, τ_{xx} .

10.4 – Resultados

A análise do comportamento do escoamento não newtoniano viscoelástico nesta geometria faz-se em duas etapas: primeiro faz-se variar a elasticidade do fluido (controlada pelo número de Débora) juntamente com o espaçamento central dos canais de entrada (b/d); posteriormente, analisa-se o comportamento do escoamento quando se faz variar a extensibilidade do fluido (L^2), utilizando como geometria base o caso em que $\Theta = b/d = 1.0$ e $\Lambda = a/d = 0.1$.

Para quantificar o grau de assimetria do escoamento definiu-se um parâmetro adimensional $DQ = (q_{sup.} - q_{inf.})/q_{ent.} = [(q_1 + q_3) - q_2]/Q$, de acordo com a Fig. 10.5(b). Este parâmetro adimensional permite descrever se o escoamento é simétrico (Fig. 10.5(a)) ou assimétrico (Fig. 10.5(b)), onde $q_{sup.} = q_1 + q_3$ corresponde à parte do fluxo de entrada que sai pelos canais superiores da direita e da esquerda, $q_{inf.}$ diz respeito à parte do fluxo que sai pelo canal inferior e $q_{ent.} = Q$ refere-se ao fluxo total de entrada. O fluxo total que escoa em cada um dos canais de entrada está relacionado com a velocidade média por: $Q = Ud$. No caso do escoamento ser simétrico $Q = q_1 + q_2 \Rightarrow DQ = 0$ (com $q_1 = q_2$ e $q_3 = 0$), enquanto no caso assimétrico $Q = q_1 + q_2 + q_3 \Rightarrow DQ \neq 0$.

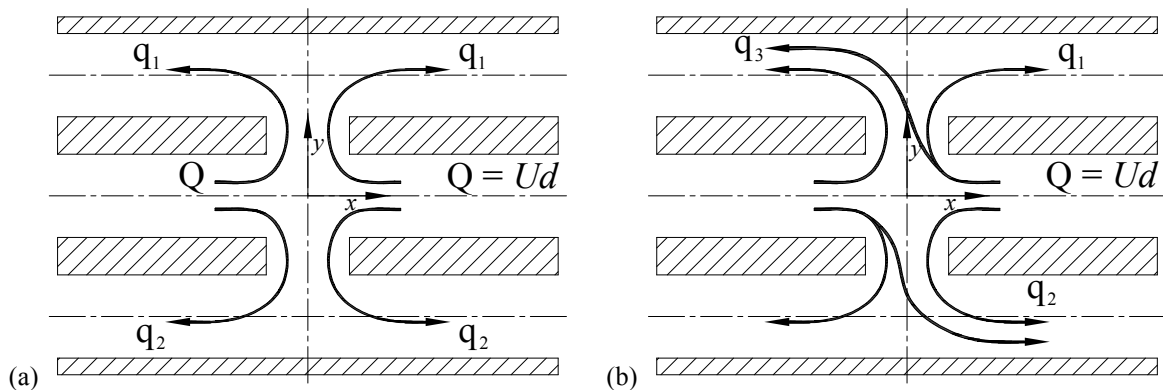


Figura 10.5 – Representação esquemática do escoamento: (a) simétrico; e (b) assimétrico.

10.4.1 – Efeitos devido ao parâmetro de elasticidade, De

Os fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas quando submetidos a um estado de tensão apresentam efeitos não-lineares que estão relacionados com as diferenças de

tensões normais. Nesta subsecção será feita uma análise sobre a influência da elasticidade, através do número de Débora, que mede esses efeitos não-lineares.

Na Tabela 10.2 apresentam-se os resultados previstos do parâmetro de assimetria quando se faz variar o número de Débora entre 0 e 1 ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $\Lambda = 0.1$) para os três valores de espaçamento central simulados, $\Theta = 0.5$, 1.0 e 1.5. O número de Reynolds considerado nas simulações é nulo ($Re = 0$).

Tabela 10.2 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora, para o fluido FENE-CR ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $\Lambda = 0.1$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$\Theta = 0.5$		$\Theta = 1.0$		$\Theta = 1.5$	
De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.24	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000
0.25	0.134	0.40	0.000	0.40	0.000
0.26	0.314	0.41	0.322	0.50	0.000
0.27	0.436	0.42	0.438	0.60	0.000
0.28	0.522	0.43	0.516	0.66	0.000
0.29	0.590	0.44	0.578	0.67	0.348
0.30	0.642	0.45	0.626	0.68	0.438
0.35	0.792	0.50	0.772	0.69	0.516
0.40	0.868	0.55	0.844	0.70	0.566
0.45	0.910	0.60	0.886	0.75	0.714
0.50	0.938	0.65	0.910	0.80	0.766
0.55	0.952	0.70	0.928	0.85	0.806
0.60	0.962	0.75	0.940	0.90	0.834
0.65	0.968	0.80	0.948	0.95	0.856
0.70	0.972	0.85	0.956	1.00	0.872
---	---	0.90	0.960	---	---
---	---	0.95	0.964	---	---
---	---	1.00	0.968	---	---

Esses resultados são apresentados graficamente na Figura 10.6, que mostra a evolução de DQ quando se faz variar o número de Débora. Analisando esta figura constata-se, uma vez mais, que para valores de Débora abaixo de um valor crítico (De_{cr}) o escoamento mantém-se estável e simétrico ($DQ = 0$), mas para valores de De acima de De_{cr} o escoamento fica assimétrico, tal como se verificou no caso do cruzamento de canais planos padrão (analisado no Cap. 7). Tem-se assim novamente a forma gráfica típica da evolução correspondente a uma bifurcação supercrítica em forma de forquilha (ver, por exemplo, Fig. 7.4), com duas soluções estacionárias possíveis para $De > De_{cr}$. A elasticidade do fluido aparece como responsável pelo despoletar da assimetria do escoamento. Esta bifurcação surge independentemente de se ter limitado a extensão possível para as camadas de tensões extensionais que emanam do

ponto de estagnação na direcção das saídas. A Figura 10.6 mostra ainda que à medida que o espaçamento entre os canais de entrada (b/d) vai aumentando, atrasa-se o ponto crítico de bifurcação do escoamento. Isto significa que maiores espaçamentos centrais (b/d) implicam uma estabilização do escoamento, com a possibilidade de se atingirem números de Débora maiores sem que surja a bifurcação. Esta constatação é compatível com o facto já referido das propriedades extensionais do fluido e do escoamento serem preponderantes como factores influenciadores da bifurcação; quando b aumenta, a taxa extensional $\partial v/\partial y$ diminui e, consequentemente, a tendência de instabilidade atenua-se.

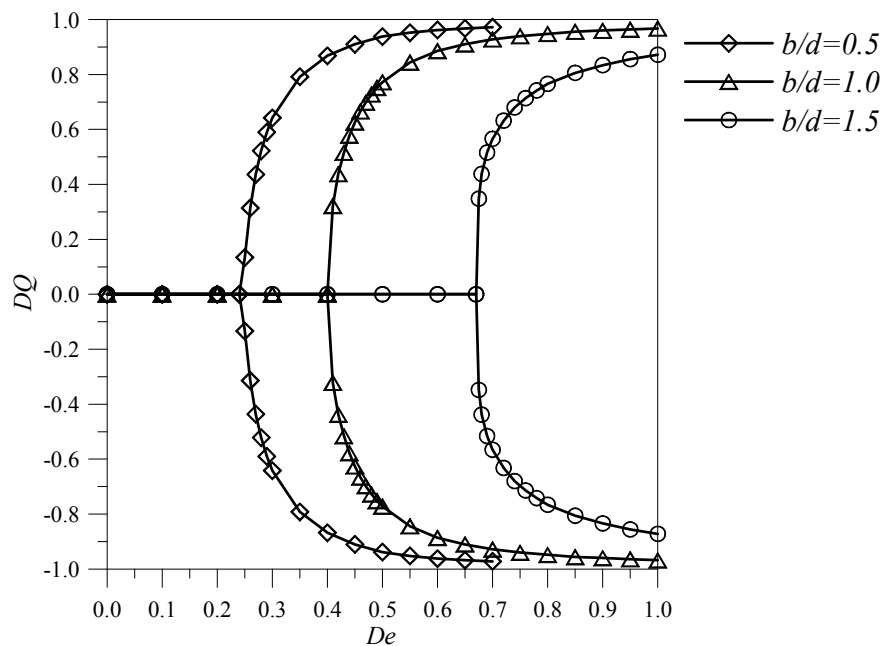


Figura 10.6 – Diagrama de bifurcação, DQ em função do número de Débora, para três valores do espaçamento central dos canais: $\Theta = 0.5, 1.0$ e 1.5 ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $\Lambda = 0.1$).

Os comentários anteriores são clarificados e substanciados através da visualização do escoamento. A visualização numérica das características do escoamento (linhas de corrente) perto da zona central do cruzamento dos canais, para valores crescentes da elasticidade (proporcional ao número de Débora), é apresentada nas Figuras 10.7, 10.8 e 10.9, para $\Theta = 0.5, 1.0$ e 1.5 , respectivamente. O espaçamento entre as linhas de corrente do escoamento é constante e igual a 0.05 (a função de corrente ψ , normalizada com Ud , toma valores entre 0 e 1 nos canais de entrada). Desta forma, linhas de corrente mais apertadas indicam velocidades maiores e mais afastadas indicam velocidades menores, pois o caudal que flui entre elas é sempre o mesmo.

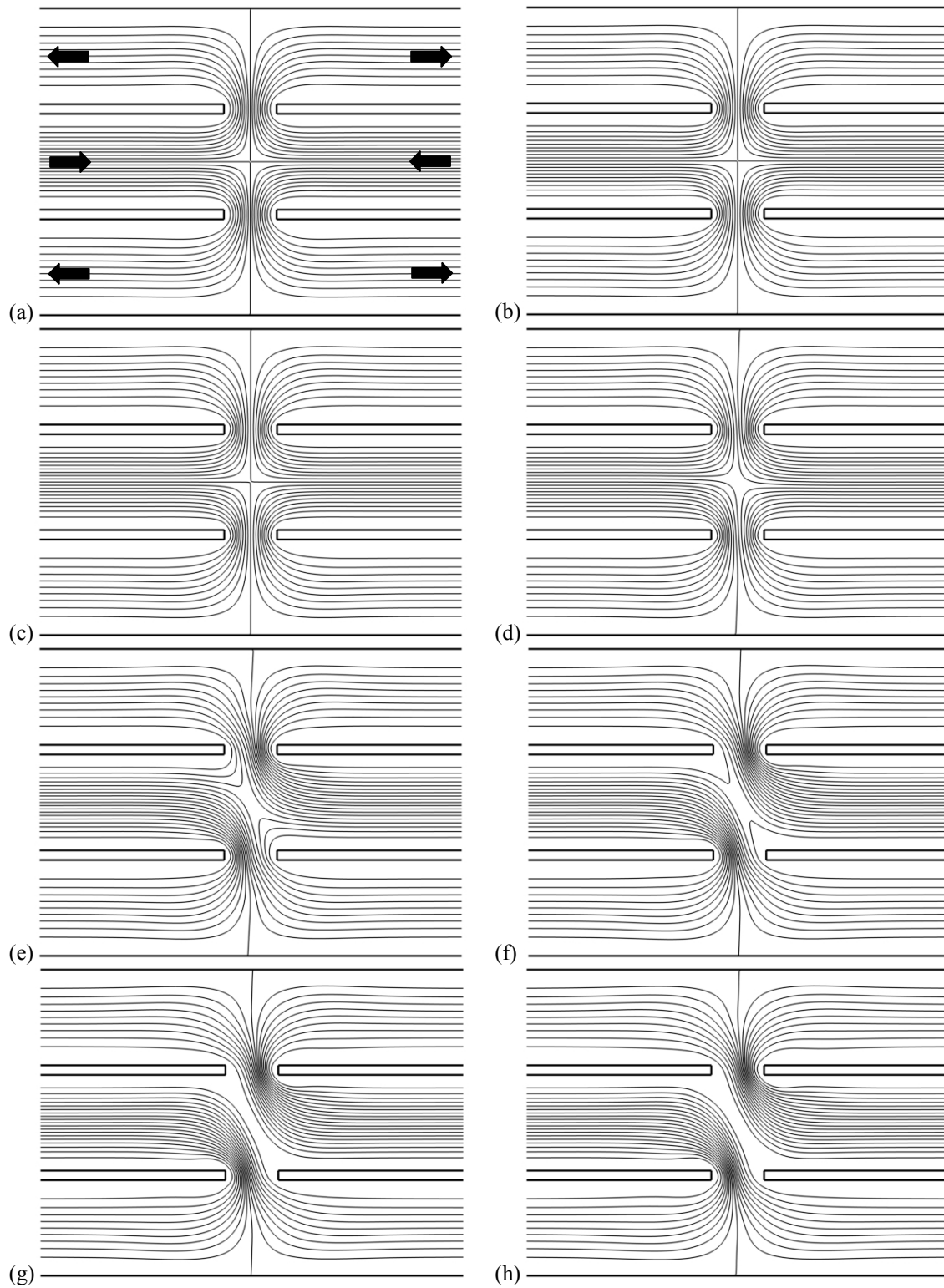


Figura 10.7 – Evolução das linhas de corrente do escoamento para valores crescentes de elasticidade na geometria com $\Theta = 0.5$: (a) $De = 0.0$ (fluido newtoniano); (b) $De = 0.20$; (c) $De = 0.24$; (d) $De = 0.25$; (e) $De = 0.30$; (f) $De = 0.40$; (g) $De = 0.50$; e (h) $De = 0.60$.

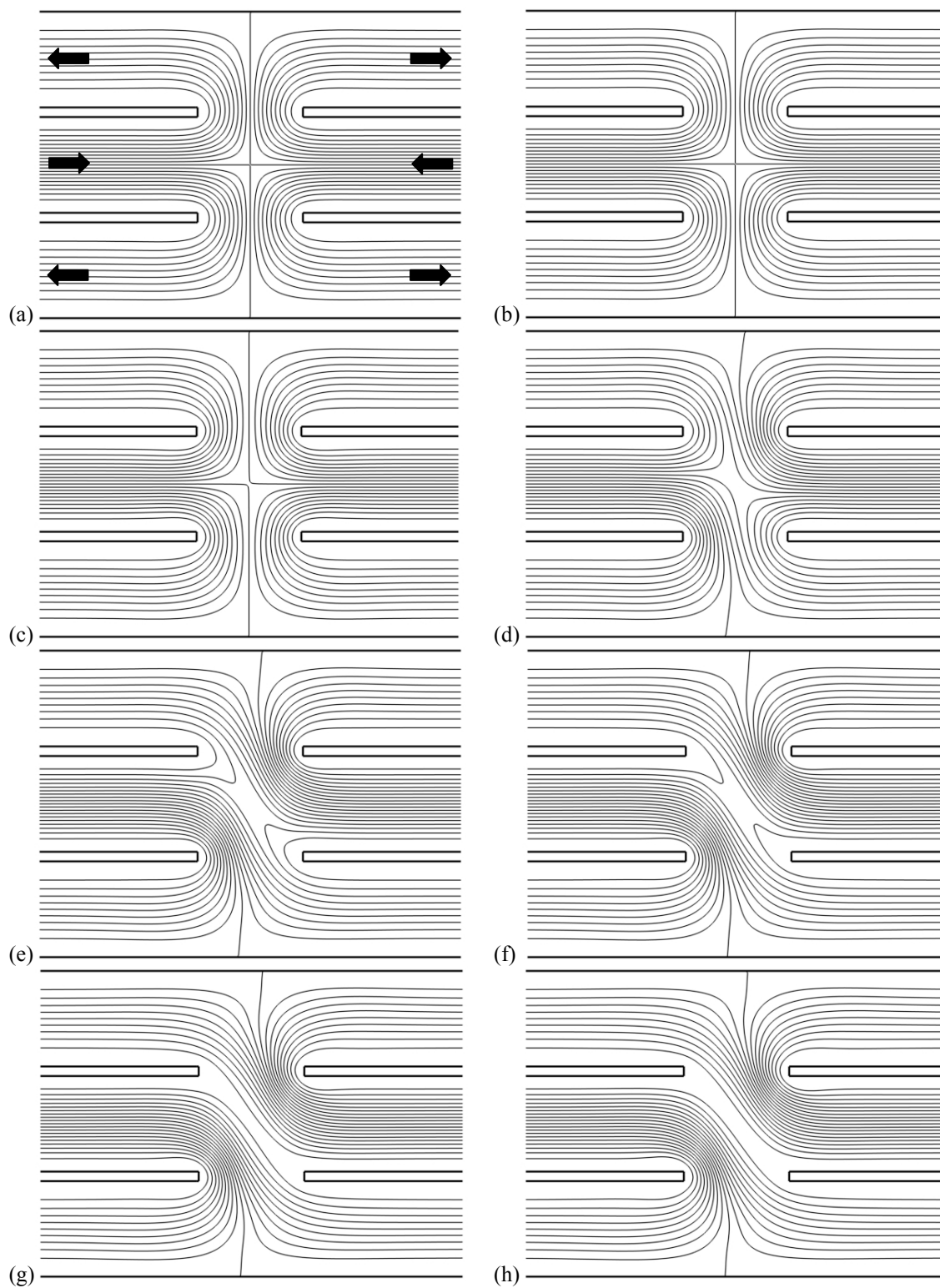


Figura 10.8 – Evolução das linhas de corrente do escoamento para valores crescentes de elasticidade na geometria com $\Theta = 1.0$: (a) $De = 0.0$ (fluido newtoniano); (b) $De = 0.20$; (c) $De = 0.40$; (d) $De = 0.41$; (e) $De = 0.50$; (f) $De = 0.60$; (g) $De = 0.70$; e (h) $De = 0.80$.

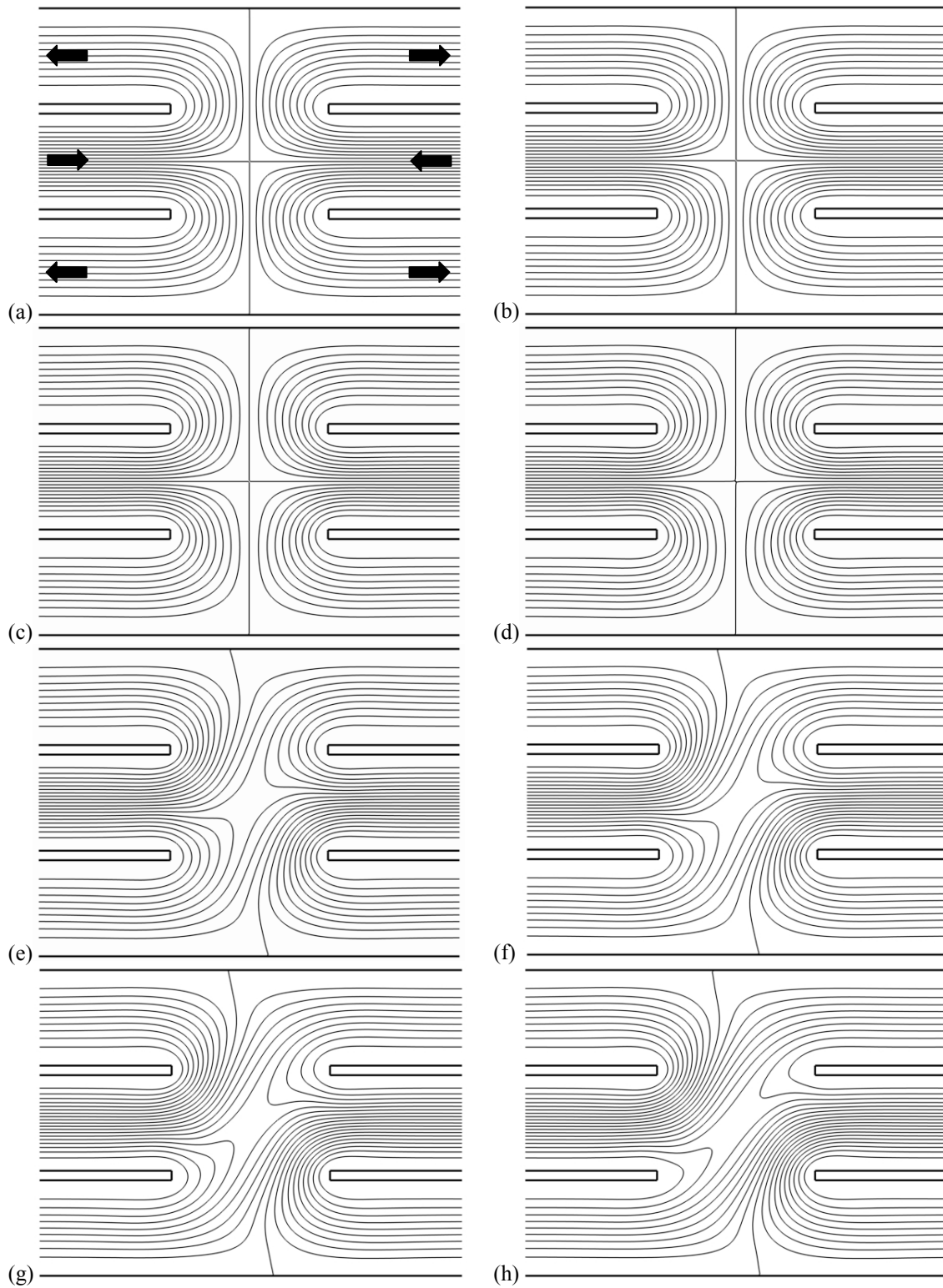


Figura 10.9 – Evolução das linhas de corrente do escoamento para valores crescentes de elasticidade na geometria com $\Theta = 1.5$: (a) $De = 0.0$ (fluido newtoniano); (b) $De = 0.20$; (c) $De = 0.50$; (d) $De = 0.66$; (e) $De = 0.67$; (f) $De = 0.68$; (g) $De = 0.70$; e (h) $De = 0.80$.

Tal como foi referido anteriormente, constata-se pela evolução das linhas de corrente do escoamento ilustradas nas Figuras 10.7, 10.8 e 10.9 que o aumento da elasticidade tende a provocar uma assimetria no escoamento para um certo valor de Débora crítico (De_{cr}). É interessante observar que por vezes a bifurcação ocorre de forma a fazer com que a maior parte do escoamento que entra pelo canal da direita saia pelo canal superior também da direita (por exemplo, Fig. 10.8(f)); outras vezes a maior parte desse fluxo sai pelo canal inferior da direita (Fig. 10.9(g)). Contudo, quando se altera o espaçamento central entre os canais de entrada, verifica-se que um aumento de Θ provoca um atraso na bifurcação do escoamento. As taxas elongacionais ($\partial v/\partial y$) mais elevadas ocorrem quando o espaçamento entre canais é menor, como se vê comparando a Figura 10.7 com as Figuras 10.8 ou 10.9 (por exemplo, para $De = 0.50$). Este efeito pode ser contabilizado pela utilização de um número de Débora modificado. Definindo o número de Débora, tendo em conta o espaçamento central da junção dos canais (b), tem-se $De' = \lambda U/b \Rightarrow De' = De/\Theta$. Neste caso o tempo característico do escoamento b/U depende do espaçamento central b ou, visto de outra forma, a taxa elongacional principal $\partial v/\partial y \sim U/b$ é introduzida na definição de De' . Os resultados obtidos com esta nova formulação do número de Débora (De') estão listados na Tabela 10.3 e são apresentados graficamente na Fig. 10.10.

Tabela 10.3 – Parâmetro de assimetria DQ em função da nova formulação para o número de Débora ($De' = \lambda U/b$), fluido FENE-CR ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $\Lambda = 0.1$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$\Theta = 0.5$		$\Theta = 1.0$		$\Theta = 1.5$	
De'	DQ	De'	DQ	De'	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.000	0.000
0.20	0.000	0.10	0.000	0.067	0.000
0.40	0.000	0.20	0.000	0.133	0.000
0.48	0.000	0.30	0.000	0.200	0.000
0.50	0.134	0.40	0.000	0.267	0.000
0.52	0.314	0.41	0.322	0.333	0.000
0.54	0.436	0.42	0.438	0.400	0.000
0.56	0.522	0.43	0.516	0.440	0.000
0.58	0.590	0.44	0.578	0.447	0.347
0.60	0.642	0.45	0.626	0.453	0.438
0.70	0.792	0.50	0.772	0.460	0.516
0.80	0.868	0.55	0.844	0.467	0.566
0.90	0.910	0.60	0.886	0.500	0.714
1.00	0.938	0.65	0.910	0.533	0.766
1.10	0.952	0.70	0.928	0.567	0.806
1.20	0.962	0.75	0.940	0.600	0.834
1.30	0.968	0.80	0.948	0.633	0.856
1.40	0.972	0.85	0.956	0.667	0.872
---	---	0.90	0.960	---	---
---	---	0.95	0.964	---	---
---	---	1.00	0.968	---	---

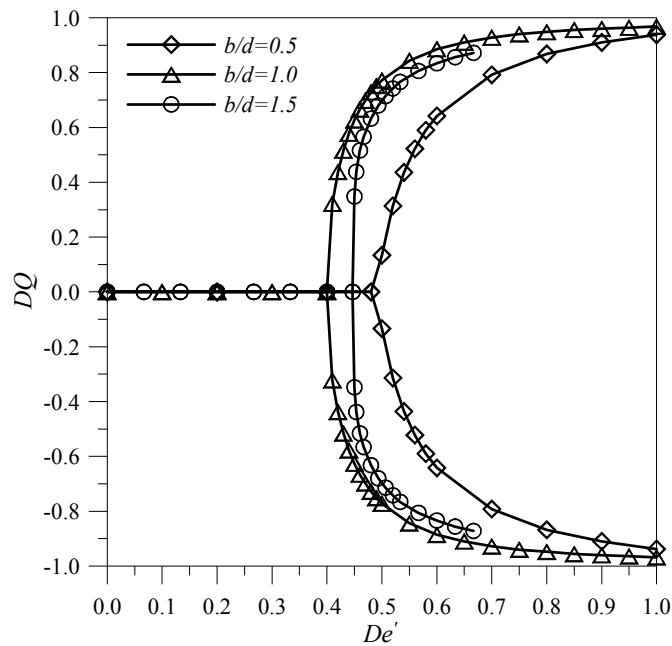


Figura 10.10 – Diagrama de bifurcação, DQ em função do número de Débora modificado De' , para três valores do espaçamento central dos canais: $\Theta = 0.5, 1.0$ e 1.5 ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Esta figura de bifurcação deve ser comparada com a Figura 10.6 dada atrás. Conclui-se que com esta nova formulação do número de Débora ($De' = De/\Theta$) existe uma maior aproximação dos valores críticos de bifurcação do escoamento (De'_{cr}) para os três valores do espaçamento central ($\Theta = b/d = 0.5, 1.0$ e 1.5). Embora o colapso entre as três curvas de bifurcação não seja perfeita, é claramente superior ao da Figura 10.6, que não capturava de forma nenhuma o efeito da variação do espaçamento. A Tabela 10.4 fornece os valores críticos do número de Débora para cada um dos casos anteriormente analisados.

Tabela 10.4 – Valores do número de Débora críticos para o fluido FENE-CR em função do espaçamento dos canais Θ ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $\Lambda = 0.1$).

Θ	De_{cr}	De'_{cr}
0.50	0.25	0.50
1.00	0.41	0.41
1.50	0.67	0.45

A questão da região de concentração de tensões elongacionais e sua dimensão longitudinal, motivo de partida para se ter modificado a geometria, é agora analisada. Na Figura 10.11 apresentam-se os contornos adimensionais da tensão normal τ_{yy} (normalizado com $\eta_0 U/d$) para o caso do escoamento newtoniano ($De = 0$) e dois casos viscoelásticos

($De = 0.40$ e 0.70 , com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$ fixos), considerando o cruzamento de canais planos modificado com quatro saídas e a configuração padrão (tratada no Cap. 7).

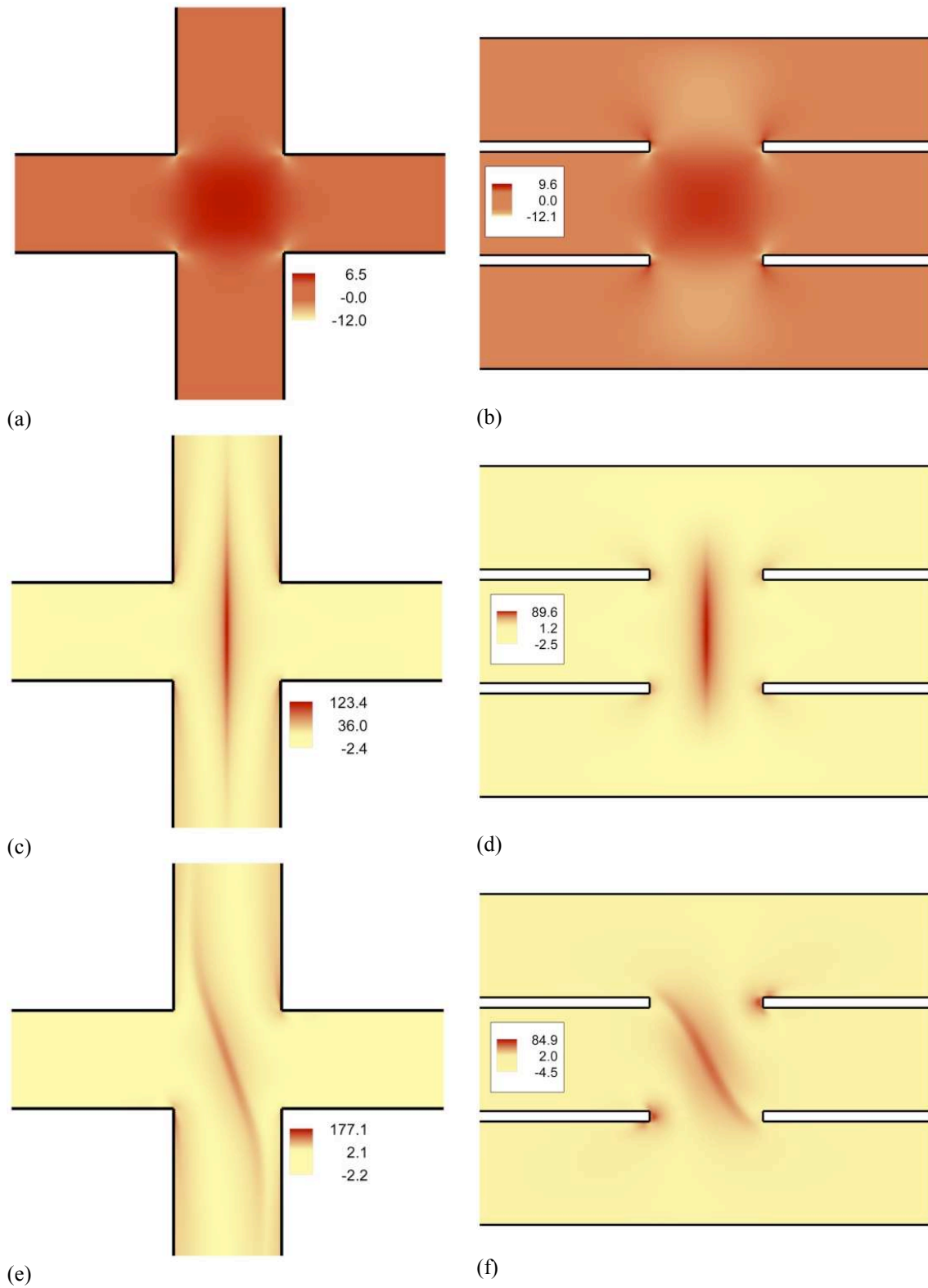


Figura 10.11 – Contornos adimensionais da tensão normal vertical $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ para o caso do cruzamento de canais padrão (2 saídas) e modificado (4 saídas): (a)-(b) fluido newtoniano ($De = 0$); (c)-(d) $De = 0.40$; e (e)-(f) $De = 0.70$ (FENE-CR, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

Tendo em conta os mapas de tensões normais adimensionais apresentados na Figura 10.11, pode verificar-se que para fluido não newtoniano viscoelástico aparece uma camada fina característica, com elevada concentração de tensões normais, para ambas as geometrias (cruzamento de canais padrão (2 saídas) e modificado (4 saídas)). Nesta zona, centrada no ponto de estagnação, as moléculas poliméricas sofrem um forte estiramento ao longo dos canais de saída ficando totalmente estendidas e gerando a referida camada, com tensões normais de elevada magnitude (*birefringence strand*). Comprova-se também que limitando a zona de extensão possível nos canais de saída (na geometria modificada com 4 saídas) o comprimento da camada de tensões normais elevadas fica significativamente reduzido (passa de aproximadamente $3.8d$ para $1.6d$, no caso de $De = 0.40$), mas a bifurcação do escoamento ocorre na mesma (como é o caso da Fig. 10.11(f)). Assim, é lícito concluir-se que a assimetria do escoamento, embora provocada pela elasticidade presente no fluido, não é causada pela longa camada de tensões elongacionais, pois mesmo limitando a zona eventualmente ocupada por essa camada, essa instabilidade ocorre. Contudo, o valor de Débora crítico aqui obtido ($De_{cr} \approx 0.41$, para $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$) é ligeiramente menor do que o valor obtido com a geometria padrão ($De_{cr} \approx 0.46$, para $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$).

10.4.2 – Efeitos devido à extensibilidade, L^2

Já se sabe do Capítulo 7 que as propriedades extensionais do modelo reológico têm uma importante influência sobre a transição do escoamento. Na presente geometria, os resultados decorrentes da variação do parâmetro de extensibilidade do modelo L^2 (= 50, 100 e 200) estão apresentados no gráfico de bifurcação da Figura 10.12 em função do número de Débora, para as condições de $\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$, e são fornecidos numericamente na Tabela 10.5. Pode observar-se que o aumento da extensibilidade (L^2) do fluido FENE-CR (directamente ligado à viscosidade extensional) tende a acentuar o fenómeno de bifurcação do escoamento, com maiores magnitudes de DQ após $De > De_{cr}$, e a acelerar o ponto crítico para a sua ocorrência. Pode também salientar-se que a causa física geradora da instabilidade decorre não só da presença da viscoelasticidade mas também das características extensionais do fluido. Embora seja difícil na prática separar os dois efeitos. Isto foi também comentado quando da análise da geometria padrão (em relação com a Fig. 7.4). É ainda de referir que a variação de DQ em função do número de Débora na Figura 10.12 é já pouco alterada quando

se passa de $L^2 = 100$ para 200. Isto mostra que há um efeito de saturação e aumentar mais a extensibilidade L^2 não provoca mais variação. Assim, espera-se que os resultados com o modelo Oldroyd-B sejam já pouco diferentes destes.

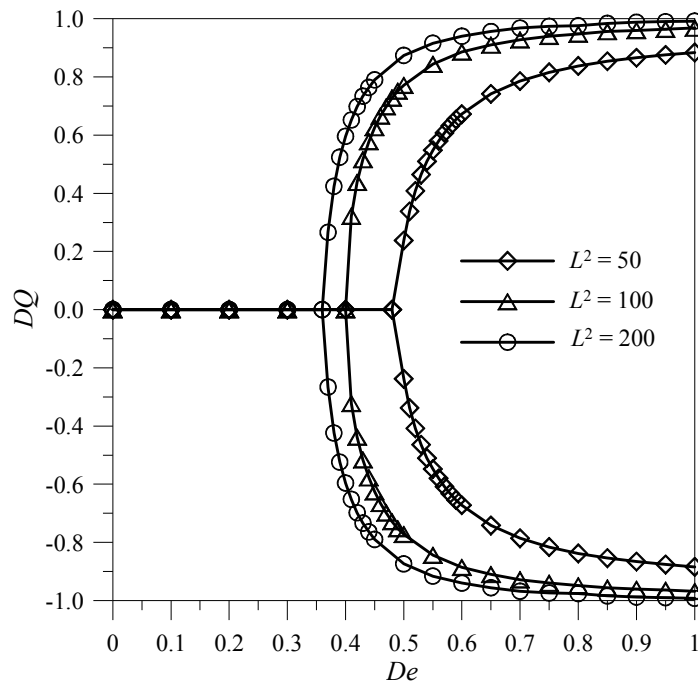


Figura 10.12 – Diagrama de bifurcação, DQ em função do número de Débora De , para três valores da extensibilidade $L^2 = 50$, 100 e 200 ($\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$).

Na Figura 10.13 comparam-se os perfis de velocidade (v) e do gradiente de velocidades ($\partial v / \partial y$) ao longo da linha central $x = 0$ para o caso da geometria com cruzamento de canais padrão (2 saídas) e modificado (4 saídas) em função de L^2 ($= 50$ e 100), para condições de $De = 0.7$, $\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$. Como se vê, apesar do gradiente axial de velocidades não ser muito diferente próximo da região central do cruzamento dos canais, $\partial v / \partial y$ é superior no caso da geometria modificada. O que explica uma tendência para que a instabilidade ocorra mais cedo, e assim o valor do número de Débora crítico será menor.

Tabela 10.5 – Parâmetro de assimetria DQ em função do número de Débora De : efeito da extensibilidade para o fluido FENE-CR ($\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$). Os pontos críticos estão indicados a negrito.

$L^2 = 50$		$L^2 = 100$		$L^2 = 200$	
De	DQ	De	DQ	De	DQ
0.00	0.000	0.00	0.000	0.00	0.000
0.10	0.000	0.10	0.000	0.10	0.000
0.20	0.000	0.20	0.000	0.20	0.000
0.30	0.000	0.30	0.000	0.30	0.000
0.40	0.000	0.40	0.000	0.36	0.000
0.49	0.000	0.41	0.322	0.37	0.266
0.50	0.238	0.42	0.438	0.38	0.424
0.51	0.338	0.43	0.516	0.39	0.524
0.52	0.408	0.44	0.578	0.40	0.596
0.53	0.464	0.45	0.626	0.45	0.790
0.54	0.510	0.50	0.772	0.50	0.874
0.55	0.548	0.55	0.844	0.55	0.916
0.60	0.672	0.60	0.886	0.60	0.940
0.65	0.742	0.65	0.910	0.65	0.956
0.70	0.786	0.70	0.928	0.70	0.968
0.75	0.816	0.75	0.940	0.75	0.974
0.80	0.838	0.80	0.948	0.80	0.976
0.85	0.854	0.85	0.956	0.85	0.984
0.90	0.866	0.90	0.960	0.90	0.988
0.95	0.876	0.95	0.964	0.95	0.990
1.00	0.884	1.00	0.968	1.00	0.992

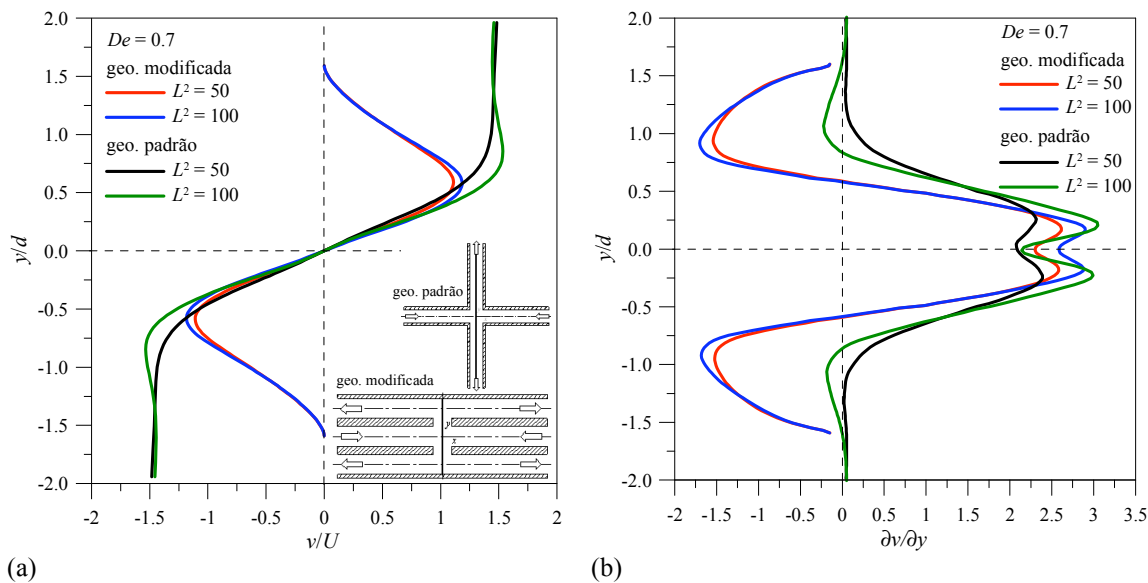


Figura 10.13 – Distribuição de perfis ao longo da linha central $x = 0$ para: (a) velocidade; e (b) gradientes de velocidade. Comparação entre a geometria modificada e padrão em função de L^2 ($= 50$ e 100), com $\beta = 0.1$, $De = 0.7$ e $\Theta = 1.0$.

Na Tabela 10.6 apresentam-se os valores de Débora críticos previstos na geometria modificada (4 saídas) e na geometria padrão (2 saídas, estudada no Cap. 7) quando se procede à variação da extensibilidade em condições de $\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$. Os valores críticos são

agora algo menores, 10 a 18% inferiores, o que é um pouco surpreendente, mas mostra uma vez mais que a camada extensional à saída não é determinante para a bifurcação.

Tabela 10.6 – Valores de Débora críticos para a geometria modificada e padrão: influência da extensibilidade L^2 (FENE-CR, $\beta = 0.1$ e $\Theta = 1.0$).

L^2	Geometria modificada (4 saídas)	Geometria padrão (2 saídas)
50	0.50	0.61
100	0.41	0.46
200	0.37	0.41

10.5 – Conclusões

Comprova-se, dos resultados obtidos para a geometria modificada, que o mecanismo que provoca a bifurcação do escoamento não está directamente ligado ao comprimento da camada fina com elevada concentração de tensões normais que se verifica na zona central do cruzamento dos canais (ver, por exemplo, Fig. 10.11(f)). De facto, verificou-se que mesmo limitando o comprimento dos canais de saída (transformando a geometria padrão na geometria modificada) a instabilidade mantém-se. Todavia, pôde verificar-se que essa limitação provoca uma ligeira alteração nos valores críticos do número de Débora, que estará relacionada com mudanças da taxa extensional ($\partial u/\partial x$ e $\partial v/\partial y$) ao longo das linhas centrais, $x = 0$ e $y = 0$.

Capítulo 11

Estudo do escoamento pulsante laminar através de um cruzamento de canais planos *

Neste capítulo faz-se um estudo numérico do escoamento viscoelástico em regime não estacionário através de um cruzamento de canais planos. Este trabalho vem na sequência de um artigo recentemente publicado por Phelan et al. [114] em que foi analisado o comportamento em termos de mistura caótica do escoamento newtoniano que se processa num micro-dispositivo em forma de cruz. Isto serviu de motivação para verificar o que acontecia ao escoamento viscoelástico dos capítulos anteriores quando existe uma pulsação imposta externamente. Pretende-se com este estudo analisar qual o efeito provocado no escoamento viscoelástico quando este é submetido a condições de gradientes de pressão oscilantes nos canais de entrada.

* Este capítulo é baseado no trabalho “Rocha, G.N., R.J. Poole, M.A. Alves e P.J. Oliveira (2009). *Numerical study of a laminar pulsating flow through a cross-slot channel*. 5th Annual European Rheology Conference (AERC 09), Cardiff (País de Gales), Reino Unido”.

11.1 – Introdução

Este trabalho tem como objectivo dar continuidade ao estudo numérico de instabilidades elásticas que ocorrem em escoamento não newtoniano viscoelástico através de um cruzamento de canais planos. O domínio de cálculo é bidimensional, com o escoamento a processar-se em regime não estacionário e em condições de inércia desprezável ($Re = 0$), para um tipo particular de fluido elástico que apresenta viscosidade constante e tempo de relaxação variável. Pretende-se verificar de que forma é que a elasticidade afecta a capacidade de mistura do escoamento proveniente dos canais de entrada na zona de intersecção e a dinâmica da bifurcação. Uma questão pertinente é saber se a viscoelasticidade poderá ter um papel importante na mistura caótica dos fluxos vindos de cada entrada.

A equação constitutiva reológica que rege o fluido viscoelástico é a do modelo FENE-CR, com extensibilidade elástica finita e não-linear, sendo um modelo apropriado para soluções poliméricas diluídas. A condição de não estacionariedade foi aplicada através de um escoamento periódico pulsante (ou oscilante) na entrada dos canais da esquerda e da direita da geometria, de acordo com a Fig. 11.1. Esse fluxo periódico foi obtido analiticamente da solução teórica para escoamento newtoniano completamente desenvolvido em canal plano sujeito a um gradiente de pressões a variar sinusoidalmente no tempo $-\partial p/\partial x = K_e + K_o \cos(\omega t)$. Os fluxos injectados pelas duas entradas na geometria em forma de cruz estão em fase. Com estas condições implementadas pretende-se avaliar o comportamento do escoamento quando se altera algumas variáveis do problema, tais como o período de oscilação ($\omega = 2\pi f$ e $T = 1/f$), o parâmetro oscilatório ($AK = K_o/K_e$), entre outras.

O principal interesse deste estudo é investigar como é que o grau de assimetria (ou bifurcação) varia com a introdução de condições pulsantes no escoamento viscoelástico, quando este já se encontra assimétrico e em condições base de $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$ (ver diagrama de bifurcações da Fig. 7.4). A motivação para este trabalho surgiu do estudo recentemente apresentado por Phelan *et al.* [114]. Estes autores mostraram que um escoamento oscilatório num micro-dispositivo provoca uma mistura caótica no escoamento, tornando-o instável com flutuações dependentes do tempo e da posição no espaço. Este fenómeno pode ter alguma aplicabilidade prática, por exemplo quando se pretende obter uma mistura de reagentes em análises químicas ou em reacções mais complexas num *lab-on-a-chip* (Stone *et al.* [143]). No caso do trabalho de Phelan *et al.* [114] o fluido considerado era newtoniano. No estudo apresentado neste capítulo pretende-se verificar se o mesmo tipo de

fenómeno caótico acontece num escoamento algo diferente usando um fluido viscoelástico (modelo FENE-CR). As não-linearidades presentes nas equações dos modelos não newtonianos viscoelásticos conduzem ao aparecimento de escoamentos secundários e podem, só por si, promover instabilidades eventualmente úteis para misturas em dispositivos muito pequenos.

Neste estudo apenas se considerou que a perturbação ao escoamento viscoelástico era provocada nos canais de entrada, da esquerda e da direita da geometria, através da aplicação de um gradiente de pressão pulsante mas em fase. Existe entrada simultânea de fluido pelos canais horizontais e saída pelos canais verticais; o ponto central da geometria comporta-se como um ponto de estagnação. Ao contrário, no trabalho de Phelan *et al.* [114], foi considerado que o escoamento oscila na direcção vertical com uma defasagem de 90° relativamente às oscilações na direcção horizontal. Isto implica que o movimento do fluido no sistema é oscilante, indo alternadamente de um lado para outro na vertical e na horizontal, não existindo fluxo total *net* a sair do dispositivo em forma de cruz. O ponto central não é ponto de estagnação; em parte do ciclo o fluido movimenta-se da esquerda para a direita e de baixo para cima, e na outra parte do ciclo movimenta-se de forma inversa.

11.2 – Descrição do problema

A Figura 11.1 mostra o domínio de cálculo utilizado para simular o escoamento viscoelástico pulsante num cruzamento de canais planos, com o fluido a entrar pelos canais da esquerda e da direita e a sair pelos canais superior e inferior. Esta geometria tem as mesmas características geométricas que a geometria estudada no Capítulo 7. Assim, a descrição do domínio de cálculo e da malha computacional utilizada nas simulações não será feita com grande detalhe neste capítulo, uma vez que já foi extensivamente explicada atrás.

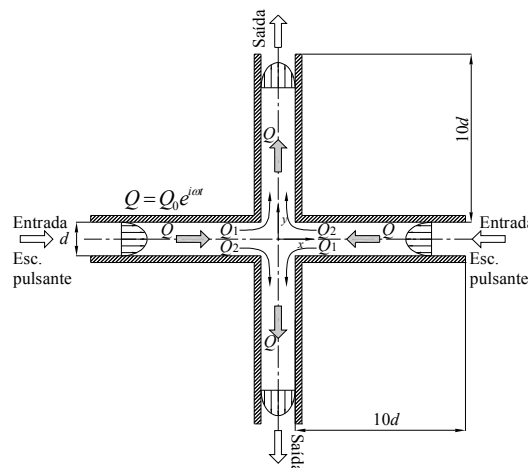


Figura 11.1 – Representação esquemática do domínio de cálculo do escoamento pulsante através de um cruzamento de canais planos.

De seguida passa-se a expor as equações relevantes que serviram de base à implementação das condições do fluxo à entrada para este estudo. Para simplificar o problema as condições de fronteira de entrada são baseadas em fluido newtoniano. Na entrada dos canais situada em $x/d = \pm 10.5$ o fluido é submetido a um gradiente de pressão que varia sinusoidalmente no tempo de acordo com a seguinte expressão (Miranda *et al.* [84] e Duarte *et al.* [43]):

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} = K_e + K_o \cos(\omega t) \quad (11.1)$$

onde ρK_o e ρK_e representam a amplitude oscilante e estacionária, respectivamente. A variável ω corresponde à frequência angular do gradiente de pressão oscilante imposto.

Neste problema considera-se que a velocidade $u(y, t)$ é decomposta em duas componentes:

$$u(y, t) = u_e(y) + u_o(y, t) \quad (11.2)$$

em que u_e representa a velocidade estacionária que resulta da aplicação do gradiente de pressão estacionário ($(-dp/dx)_e \equiv \rho K_e$) e u_o corresponde a velocidade oscilante que resulta da aplicação do gradiente de pressão oscilante ($(-dp/dx)_o \equiv \rho K_o \cos(\omega t)$). O perfil de velocidades estacionário é definido pela expressão clássica parabólica, que normalizado com K_o/ω resulta em (Laudau & Lifshitz [74]):

$$\frac{u_e(y)}{K_o/\omega} = \frac{\alpha^2}{2} \frac{K_e}{K_o} (1 - Y^2) \quad (11.3)$$

onde $Y = y/h$, sendo $h(=d/2)$ metade da altura do canal de entrada d .

A frequência de oscilação imposta no escoamento poderá ser controlada pelo número de Womersley (também denominado por número de Stokes), definido de acordo com a seguinte expressão:

$$\alpha = d \sqrt{\frac{\pi \rho}{2T\eta_0}} \quad (11.4)$$

ou pelo número de Strouhal dado por:

$$St = \frac{UT}{d} \quad (11.5)$$

sendo o período de oscilação $T = 2\pi/\omega$, com a frequência oscilatória do gradiente de pressão $f = 1/T$ ($\omega = 2\pi f$). O gradiente de pressão oscilante é controlado pelo seguinte parâmetro adimensional:

$$AK = \frac{K_o}{K_e} \quad (11.6)$$

que no caso do escoamento estacionário assume o valor $AK = 0$ e no caso oscilante toma um valor $AK \neq 0$.

A parte constante do gradiente de pressão ρK_e corresponde a velocidade média estacionária do canal $U = \rho h^2 K_e / 3\eta_0$. A solução analítica referente à contribuição oscilante é dada por uma expressão mais complicada que no caso newtoniano expressa da seguinte forma (Laudau & Lifshitz [74]):

$$\frac{u_o(y,t)}{K_o/\omega} = \left(1 - \frac{M(Y,\xi)}{J(\xi)}\right) \sin(\omega t) - \frac{N(Y,\xi)}{J(\xi)} \cos(\omega t) \quad (11.7)$$

com $\xi = \alpha/\sqrt{2}$. Os restantes parâmetros da Eq. (11.7) são definidos por:

$$J(\xi) = C^2(\xi) + S^2(\xi), \quad C(x) = \cosh(x)\cos(x), \quad S(x) = \sinh(x)\sin(x)$$

$$M(Y,\xi) = C(\xi Y)C(\xi) + S(\xi Y)S(\xi), \quad N(Y,\xi) = C(\xi Y)S(\xi) + S(\xi Y)C(\xi)$$

A tensão de corte é obtida a partir da diferenciação do perfil velocidades da Eq. (11.2) ($\tau_{xy} = \eta_s \partial u / \partial y$) que resulta em (Miranda *et al.* [84]):

$$\frac{\tau_{xy}}{\eta_s K_o / (\omega h)} = -\frac{\xi}{J(\xi)} \left\{ [(A-B)C(\xi) + (A+B)S(\xi)] \sin(\omega t) + [(A-B)S(\xi) - (A+B)C(\xi)] \cos(\omega t) \right\} - \alpha^2 \frac{K_e}{K_o} Y \quad (11.8)$$

onde $A = \sinh(\xi Y)\cos(\xi Y)$ e $B = \cosh(\xi Y)\sin(\xi Y)$.

De forma idêntica aos casos anteriores, nas saídas foram impostas condições de Neumann para todas as variáveis de cálculo, isto é, gradientes axiais nulos ($\partial/\partial y = 0$). As restantes condições impostas referem-se às paredes sólidas dos canais de entrada e saída, onde se considerou a condição de não deslizamento ($u = v = 0$).

A malha computacional utilizada neste estudo é a mesma dos cálculos do escoamento estacionário no Capítulo 7, contendo 12801 volumes de controlo e cuja representação esquematicamente encontra-se ilustrada na Fig. 7.3.

11.3 – Resultados

Nesta secção apresentam-se os resultados para fluido viscoelástico do tipo FENE-CR quando submetido a condições de entrada pulsantes. Como se viu no Capítulo 7, no caso estacionário o escoamento nesta geometria apresenta uma assimetria para valores de Débora acima de um certo valor crítico ($De_{cr} \approx 0.46$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$), com maior porção do fluxo de entrada a mover-se para uma das saídas (ver, por exemplo, as linhas de corrente da Fig. 7.5(d)). Esta assimetria só se verifica quando o escoamento é não newtoniano viscoelástico. No caso newtoniano o escoamento encontra-se perfeitamente simétrico e estável. Para este estudo partiu-se duma situação assimétrica do escoamento, tendo como base condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, para as quais a assimetria é bem notória.

Seguidamente, apresenta-se na Figura 11.2 o perfil oscilatório da velocidade média obtida por integração do perfil de velocidades (normalizado com a velocidade média em condições estacionárias, U) nos canais de saída da geometria ($y/d = \pm 10.5$), ao longo de um período de tempo, para o caso viscoelástico base ($De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$), com o parâmetro oscilatório a assumir o valor de $AK = 1.0$ e $\alpha = 1.253$. Esses resultados numéricos apresentados a símbolos foram comparados com os resultados analíticos do caso newtoniano indicados à linha contínua provenientes da Eq. (11.2) (após integração numérica). Os cálculos do escoamento não estacionário foram obtidos para um passo no tempo normalizado com o período oscilante $\Delta t/T = 0.01$. Observa-se que durante todo o ciclo existe uma boa concordância entre ambos os resultados (numéricos e analíticos), o que permite concluir que o passo no tempo de 0.01 é suficiente para aproximar a solução teórica.

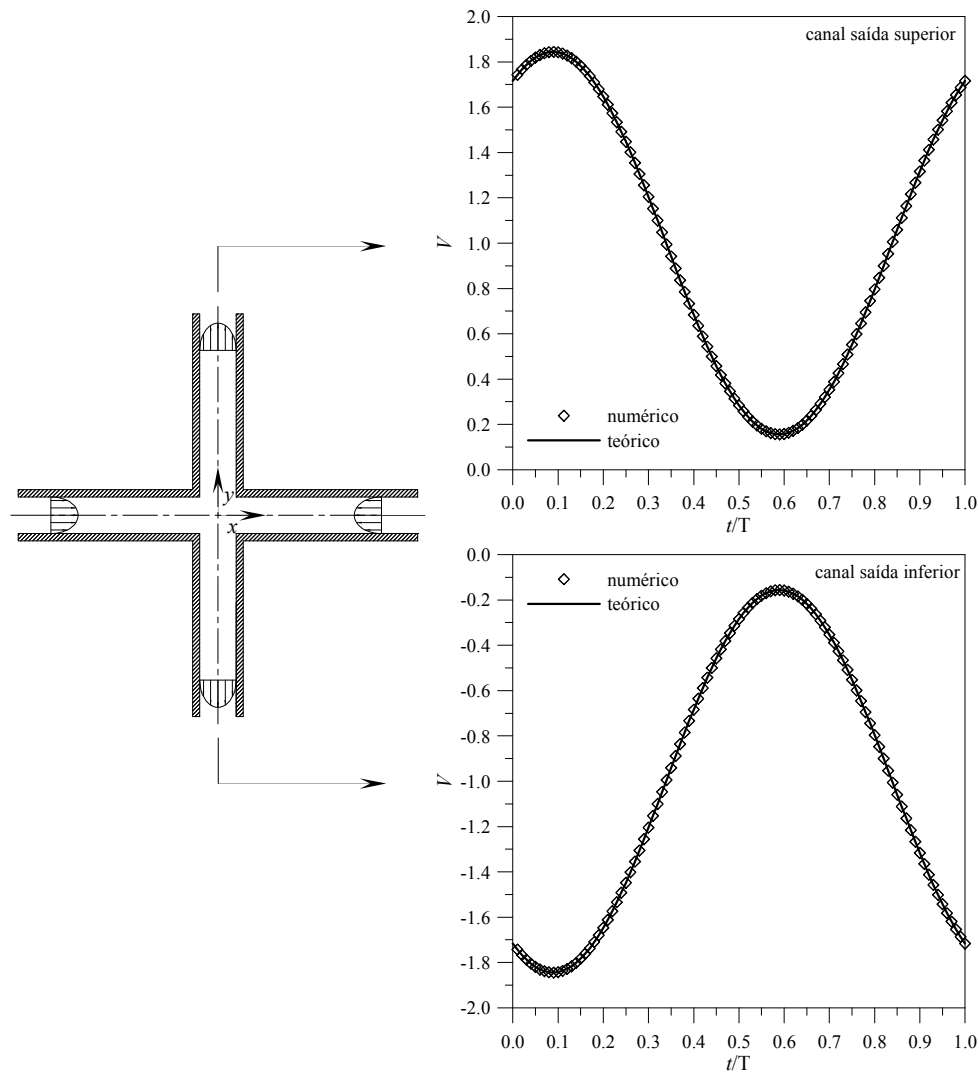


Figura 11.2 – Perfis da velocidade média na secção, nos canais de saída superior e inferior da geometria ($De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$): comparação com a solução analítica.

Na Figura 11.3 mostra-se a evolução da função de corrente localizada no ponto central do cruzamento dos canais planos (ψ_c , em $x = y = 0$) ao longo do tempo (com um passo no tempo $\Delta t/T = 0.01$ e em condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). A razão de amplitudes do gradiente de pressão foi tomada como $AK = 1.0$ e o número de Stokes ou Womersley assume o valor $\alpha = 1.253$. Outro parâmetro adimensional que serviu de referência foi o número de Strouhal assumindo o valor $St = 1.0$. A evolução oscilatória de ψ_c é bem visível nesta figura. A simulação não estacionária foi efectuada partindo do caso em que o escoamento já se encontrava assimétrico: caso do escoamento viscoelástico estacionário (sem a parte oscilante $AK = 0$) analisado no Capítulo 7, em que se obteve um valor de $\psi_c = 0.862$

para as condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$. A função de corrente no centro do cruzamento dos canais, ψ_c , está relacionada com o parâmetro de bifurcação por $\psi_c = (1 + DQ)/2$. No caso do fluido newtoniano, tem-se $\psi_c = 0.5$ indicando que o escoamento se encontra simétrico ($DQ = 0$). De acordo com a Figura 11.3, a evolução de ψ_c é oscilatória, mas não sinusoidal como o gradiente de pressão aplicado nas entradas, e o valor máximo de ψ_c vai decaindo, mas claramente ψ_c não tende para 0.5. Isto significa que a bifurcação mantém-se no caso não estacionário, e irá evoluir ao longo do tempo.

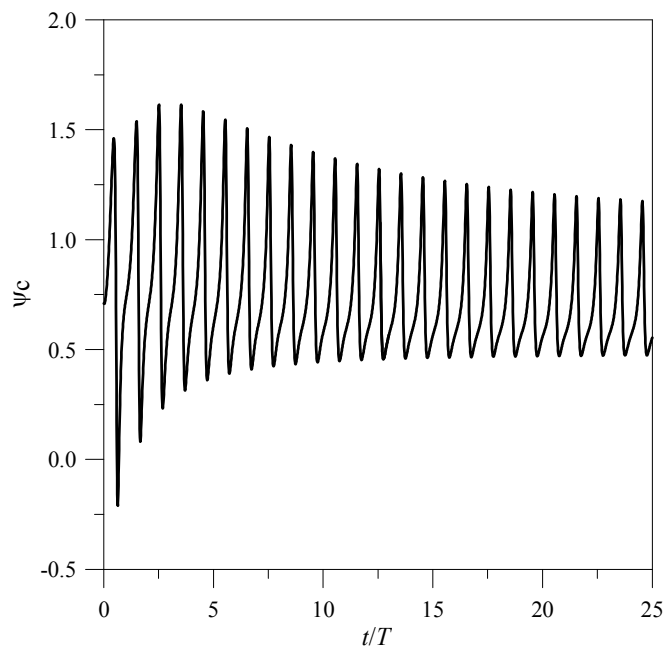


Figura 11.3 – Evolução com o tempo da função de corrente calculada no centro do cruzamento dos canais ($x = y = 0$) para $De = 0.6$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$.

Pode constatar-se, com base na Fig. 11.3, que inicialmente a função de corrente sofre uma variação abrupta, mas após decorridos 25 ciclos o escoamento começa a estabilizar e a ficar periódico no tempo. Neste capítulo está-se essencialmente interessado na solução completamente estabelecida no tempo, que se repete de ciclo para ciclo. Na Figura 11.4 apresentam-se as previsões da evolução da função de corrente ψ_c para os dois últimos ciclos, com o tempo reajustado para zero no início do ciclo.

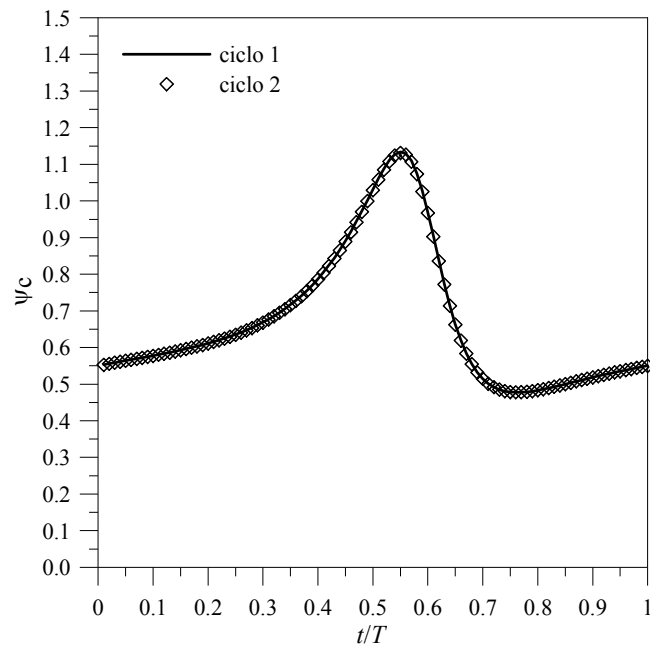


Figura 11.4 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo de um ciclo para $De = 0.6$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$. Repetibilidade entre ciclos.

Verifica-se, dos resultados ilustrados na Figura 11.4, que os valores da função de corrente no centro do cruzamento dos canais (ψ_c) em função do tempo nos dois ciclos são coincidentes. Desta forma, comprova-se a repetibilidade entre ciclos, indicando que o escoamento apresenta um comportamento periódico, repetindo-se a variação de ψ_c ao longo de cada período T .

Tendo em atenção alguns dos aspectos numéricos do escoamento pulsante, na Figura 11.5 mostra-se a variação do número de iterações internas dentro de cada passo no tempo $\Delta t/T = 0.01$ ao longo de um ciclo. Os resultados dizem respeito a dois valores de Débora ($De = 0.5$ e 0.6), para ilustrar o efeito provocado pela elasticidade do fluido, e do parâmetro adimensional oscilante $AK = 0.5$ e 1.0 ($\alpha = 1.253$ ou $St = 1.0$). Ambas estas influências serão analisadas em separado mais à frente. Com base nos resultados apresentados, verifica-se que o caso em que se considera $De = 0.6$ e $AK = 1.0$ necessita de um maior número de iterações internas para atingir o critério de convergência, com um valor residual de 1×10^{-2} . Este número de iterações é proporcional ao tempo de CPU necessário para se obter a solução do problema. A figura mostra ainda que o tempo de processamento se reduz quando AK diminui ou quando De decresce. Estas diferenças para os três casos estudados e a variação do número de iterações ao longo do período estão relacionados com o grau de assimetria a que o escoamento se encontra, o que se torna claro ao observar a evolução de ψ_c em função do tempo ilustrada na Fig. 11.6.

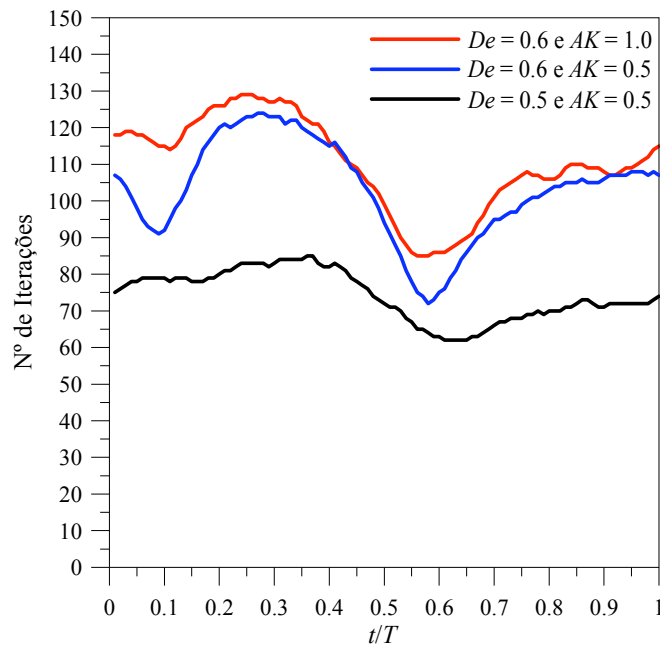


Figura 11.5 – Número de iterações internas dentro de cada passo no tempo ($\Delta t/T = 0.01$) para $De = 0.5$ ($AK = 0.5$) e $De = 0.6$ ($AK = 0.5$ e 1.0).

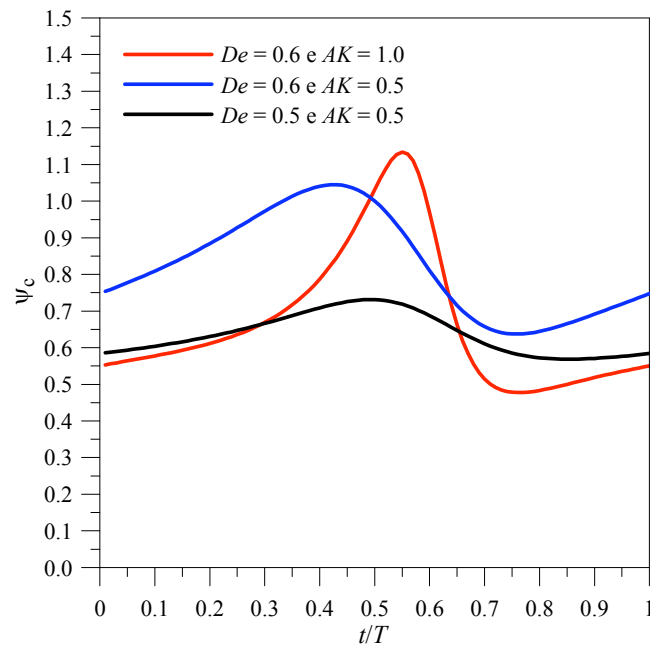


Figura 11.6 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo de um ciclo para $De = 0.5$ ($AK = 0.5$) e $De = 0.6$ ($AK = 0.5$ e 1.0). Influência da elasticidade (De) e do parâmetro oscilante (AK).

As variações do caudal ($Q(t)$) e da velocidade máxima no centro do canal (u_{\max}), ambos normalizados com a velocidade média estacionária, U , na estação junto à entrada do canal situada no lado esquerdo ($x/d \approx -10.137$), ao longo de um ciclo, para dois valores de $AK = 0.5$ e 1.0 ($De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$), são apresentadas na Fig. 11.7(a) e (b),

respectivamente. Além disso, mostram-se os resultados obtidos das soluções teóricas indicados por símbolos abertos. Os resultados para a variação do caudal de entrada apresentam uma boa concordância entre numérico e teórico para ambas as situações ($AK = 1.0$ e 0.5). No entanto, a comparação referente à variação da velocidade máxima no centro do canal junto à entrada apresenta uma ligeira discrepância entre as soluções numéricas e teóricas. Isso torna-se mais evidente para o valor de $AK = 1.0$. Este facto estará relacionado com as condições de fronteira de entrada corresponderem à solução teórica para um fluido newtoniano e não para o FENE-CR (para este não há solução teórica conhecida). Desta forma, como o perfil numérico mostrado na Figura 11.7(b) é para o modelo FENE-CR e está a alguma distância do plano de entrada (distância de $0.363d$), não é surpreendente haver alguma diferença nos valores locais da velocidade. O caudal, na Figura 11.7(a), sendo conservado, é igual nos dois casos, newtoniano e viscoelástico.

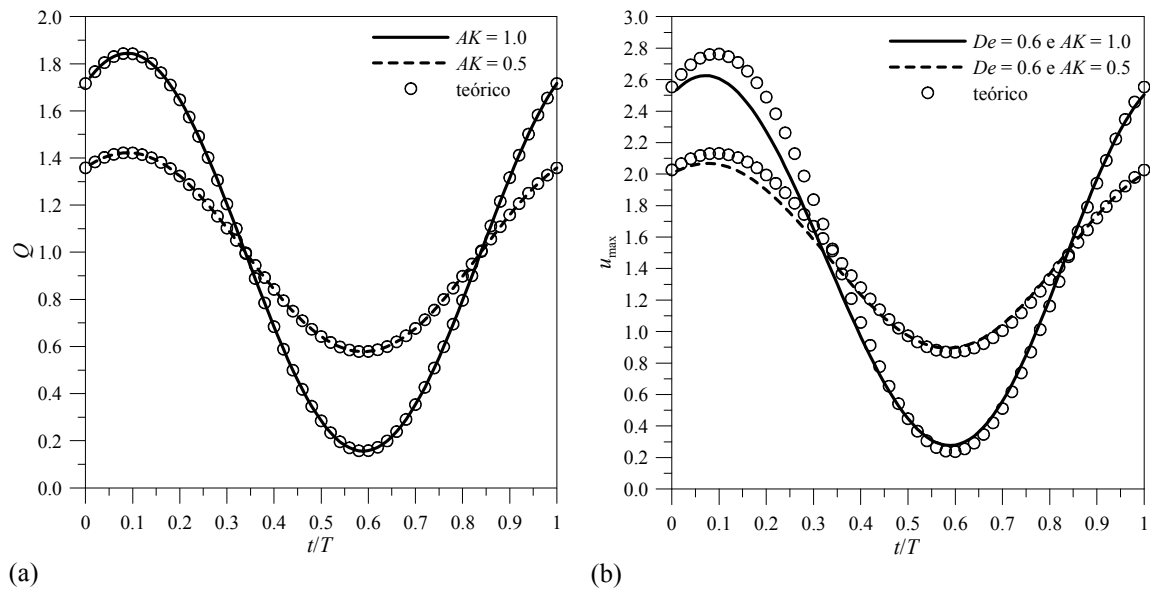


Figura 11.7 – Evolução ao longo de um ciclo para $AK = 0.5$ e 1.0 : (a) caudal de entrada (Q); e (b) velocidade máxima no centro do canal (u_{\max}) para $De = 0.6$.

O efeito da discretização temporal sobre o valor numérico do resultado da função de corrente no centro do cruzamento dos canais (ψ_c) está representado na Fig. 11.8. De acordo com os resultados obtidos, verifica-se que um valor do passo no tempo de $\Delta t = 0.01T$ é suficiente para se obter uma boa resolução nos valores de ψ_c ao longo do tempo, quando se emprega o esquema regressivo de segunda ordem (3NT). Por outro lado, como se aplica o esquema de alta resolução CUBISTA (Alves *et al.* [7]) para a discretização dos fluxos

convectivos os resultados obtidos oferecem uma boa resolução espacial, tal como foi verificado em trabalhos anteriores (ver, por exemplo, Oliveira [94]).

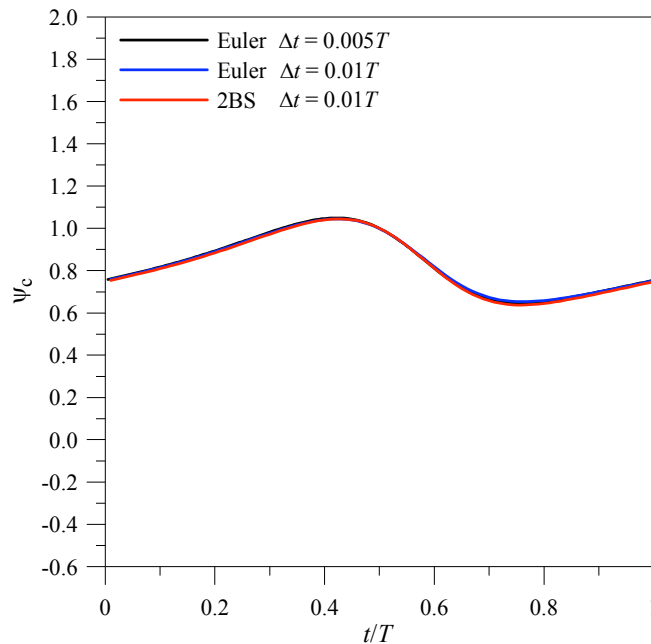


Figura 11.8 – Discretização temporal para $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0.5$.

Seguidamente, apresenta-se na Figura 11.9 a evolução das linhas de corrente do escoamento previstas ao longo de um ciclo separadas por intervalos de tempo $\Delta t = 0.1$ (normalizado com o período T), em condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$. Comprova-se que o escoamento se mantém assimétrico ao longo de todo o ciclo, como já se tinha percebido pela Figura 11.6 que mostrava $\psi_c \neq 0.5$, com uma porção de caudal de entrada a sair mais por um dos canais de saída. Neste caso, verifica-se que o caudal de entrada do canal da esquerda sai em maior quantidade pelo canal de saída inferior. Isto é visível, por exemplo, para a situação em que $t = 0.4$. Por outro lado, observa-se que as condições pulsantes alteram de forma significativa o grau de assimetria do escoamento, como seria de esperar tendo como base os resultados da Fig. 11.6. As linhas de corrente mostram que a assimetria do escoamento aumenta com o tempo até atingir uma gama de valores ($0.4 < t < 0.7$) a partir do qual ocorre uma recirculação no centro do cruzamento dos canais (ver Fig. 11.9 para $t = 0.6$). O aparecimento desta bolha implica que $\psi_c > 1$, de forma que o parâmetro de bifurcação fica superior à unidade ($DQ > 1$) perdendo o significado original. Daí que a maior parte dos resultados apresentados neste capítulo são referentes a ψ_c em vez de DQ . Para valores de $t \geq 0.7$ isso já não se verifica e a assimetria do escoamento começa a

reduzir até atingir o fim do ciclo, mantendo-se todavia o escoamento ligeiramente assimétrico, com quase simetria para $t = 1.0$ ($\psi_c \approx 0.5$).

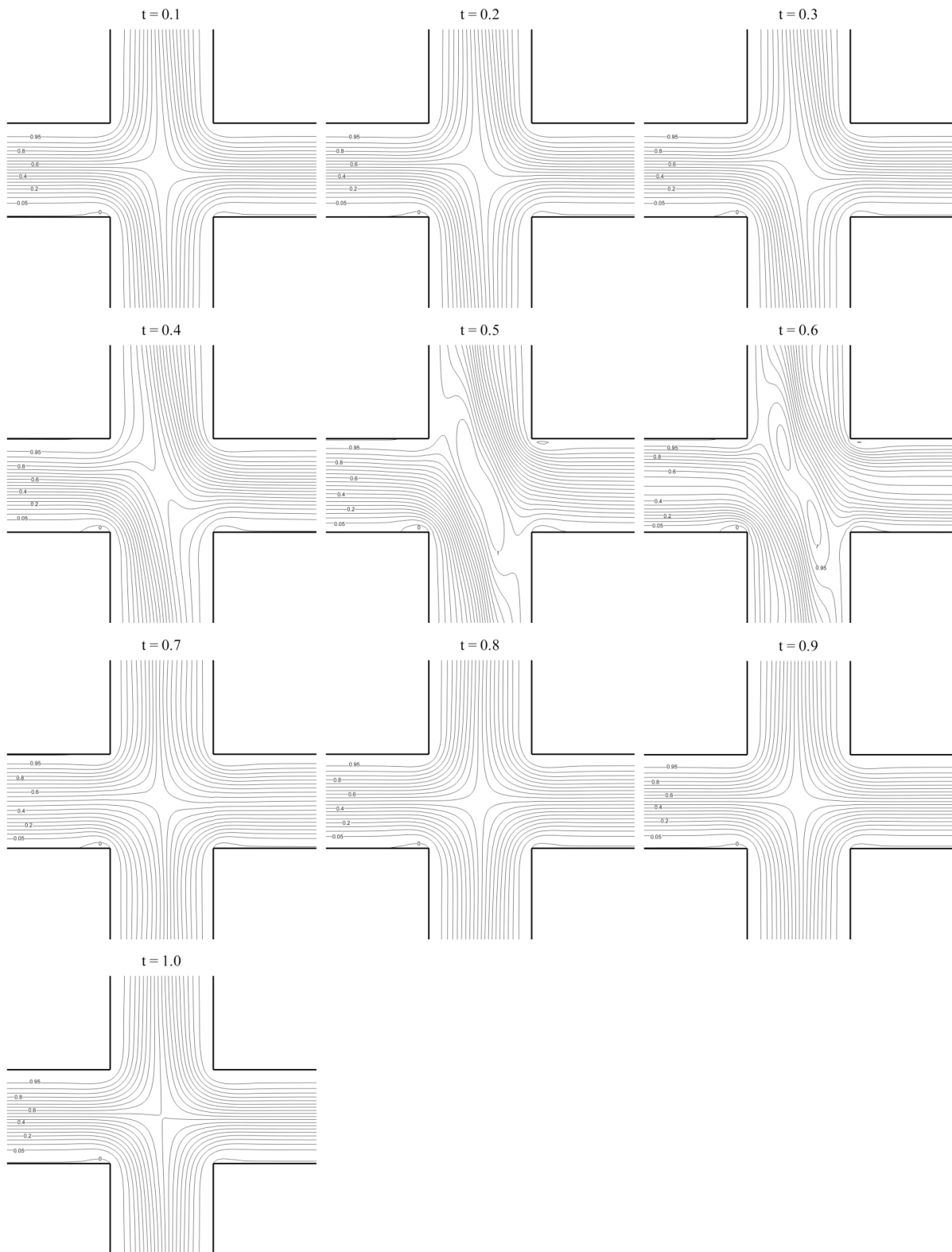


Figura 11.9 – Evolução das linhas de corrente ao longo de um ciclo para $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$.

Na Figura 11.10 apresenta-se a evolução dos contornos adimensionais da tensão normal $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ ao longo do tempo (normalizado com o período T) para a mesma situação da Fig. 11.9. Como pode ser observado, na região central da intersecção dos canais surge uma camada avermelhada (quando os gráficos são vistos a cores). Este fenómeno é típico no escoamento de fluidos viscoelásticos numa junção em forma de cruz (Rommelgas *et al.* [125]), estando directamente ligado à forte concentração de tensões extensionais que aí se verifica e que se estende ao longo dos canais de saída. Consta-se que à medida que o tempo avança essa região começa a sofrer uma ligeira rotação, com origem no ponto de estagnação central, e a se deslocar em direcção a uma das paredes.

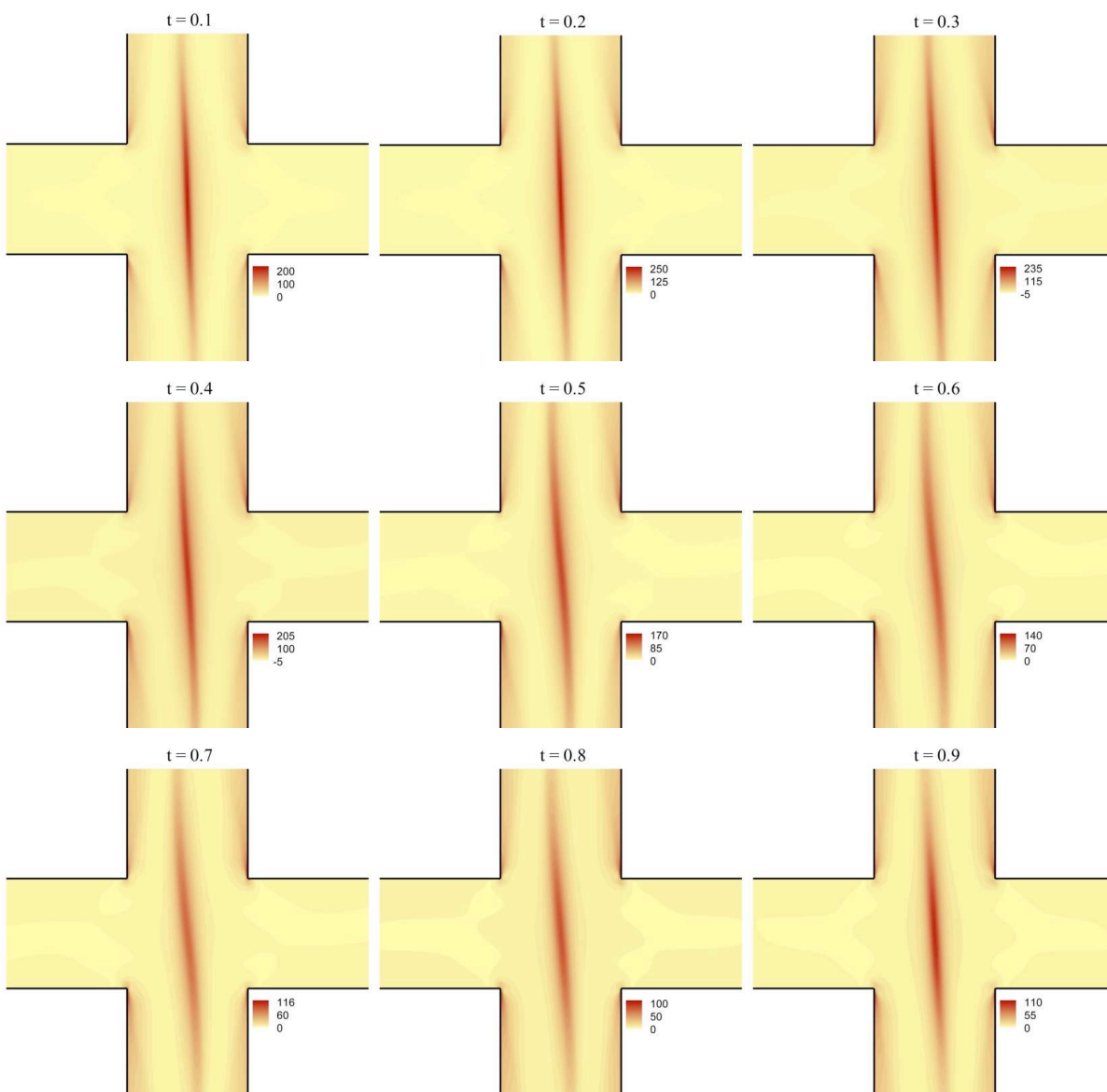


Figura 11.10 – Evolução dos contornos das tensões normais $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ ao longo de um ciclo para $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$.

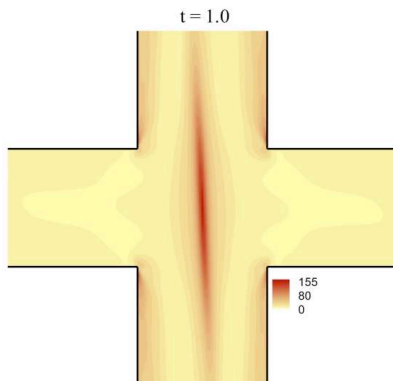


Figura 11.10 (cont.) – Evolução dos contornos das tensões normais $\tau_{yy}/(\eta_0 U/d)$ ao longo de um ciclo para $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$.

Para quantificar o grau de assimetria do escoamento pode usar-se também o parâmetro adimensional $DQ = (Q_1 - Q_2)/Q$ dos capítulos anteriores. O fluxo total que entra por cada um dos canais de entrada é agora variável $Q(t) = Ud = Q_1 + Q_2$, dividindo-se em dois fluxos Q_1 e Q_2 na zona de intersecção dos canais para os canais de saída superior e inferior, ver Fig. 11.1. Como foi já referido atrás, o parâmetro de bifurcação DQ não é usado neste capítulo porque, devido à bolha que se forma no centro mencionada atrás, DQ pode vir superior a +1 ou inferior a -1, perdendo assim o significado original. Tendo em conta que a função de corrente no ponto central é $\psi_c = Q_1/Q$, existe a seguinte relação com o parâmetro de assimetria $DQ = (\psi_c - 0.5)/0.5$. No caso do escoamento ser simétrico o fluxo total que escoar nos canais de entrada divide-se na mesma proporção pelos canais de saída superior e inferior $DQ = 0$ e $\psi_c = 0.5$. Para a situação em que o escoamento fica assimétrico o fluxo total de entrada divide-se em quantidades diferentes resultando num valor de $DQ \neq 0$, com $\psi_c \neq 0.5$; assimetria total dará $DQ = 1$ e $\psi_c = 1.0$.

Na Figura 11.11 encontra-se ilustrada a variação do parâmetro de assimetria dos caudais DQ em função do tempo ao longo de um ciclo, em condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$. Dos resultados obtidos, constata-se que para valores de t/T entre 0.46 e 0.62 aparece na zona central do cruzamento dos canais uma bolha de recirculação, ver as linhas de corrente do escoamento na Figura 11.13. Essa recirculação ocorre para valores de $DQ > 1$, zona acima da linha tracejada indicada na Fig. 11.11.

Na Figura 11.12 apresenta-se graficamente a fracção de caudal ($DQ_{rec} = (\psi_{rec} - \psi_1) \times 100$, ver Fig. 11.13 para $t/T = 0.48$) que recircula dentro da bolha formada na zona central do cruzamento dos canais. Nesta região a fracção de caudal vai

crescendo com o tempo até atingir um máximo de 20% para t/T entre 0.55 e 0.56. Após atingir esse limite o caudal que recircula no interior da bolha vai diminuindo até desaparecer para valores de $t/T \geq 0.63$. O aparecimento desta recirculação apenas se verifica quando se utiliza como condição de entrada um escoamento pulsante (ou oscilante). Para as mesmas condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$ (sem a parte oscilante $AK = 0$) este fenómeno não se verifica, conforme analisado no Capítulo 7. Nesta situação o escoamento fica perfeitamente assimétrico e estacionário (não depende do tempo), com o valor do parâmetro de assimetria do escoamento $DQ = 0.724$. O escoamento pulsante apresenta um DQ médio de 0.342 (obtido pela média aritmética dos valores de DQ ao longo de um ciclo), atingindo um valor máximo de 1.268 para $t/T = 0.55$.

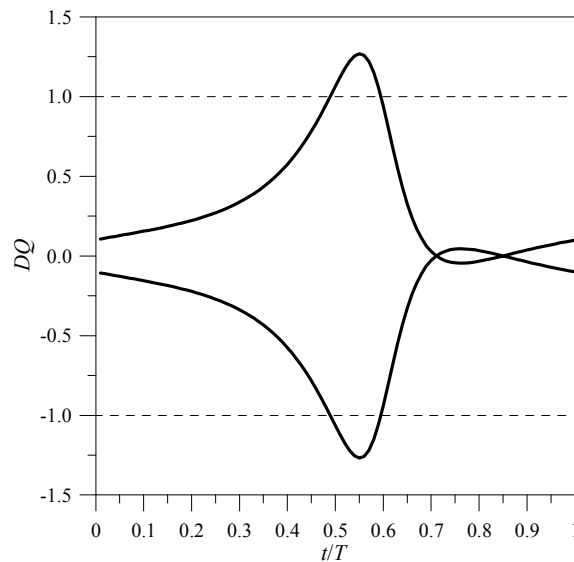


Figura 11.11 – Diagrama de bifurcação do escoamento viscoelástico para $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$.

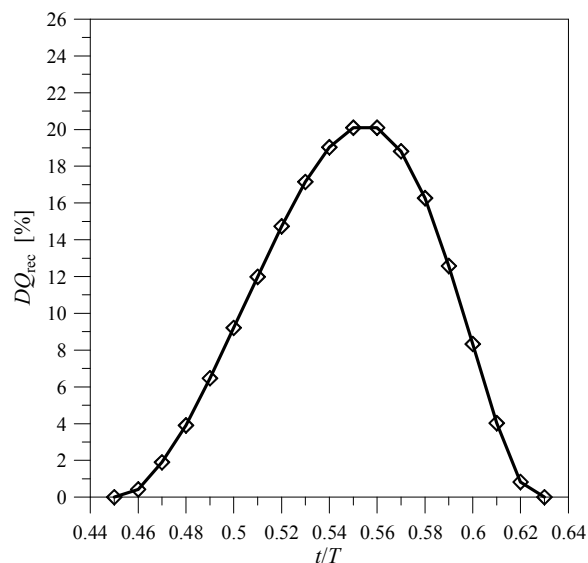


Figura 11.12 – Fração de caudal (DQ_{rec}) que recircula no centro do cruzamento dos canais: aparecimento de uma bolha (recirculação do escoamento).

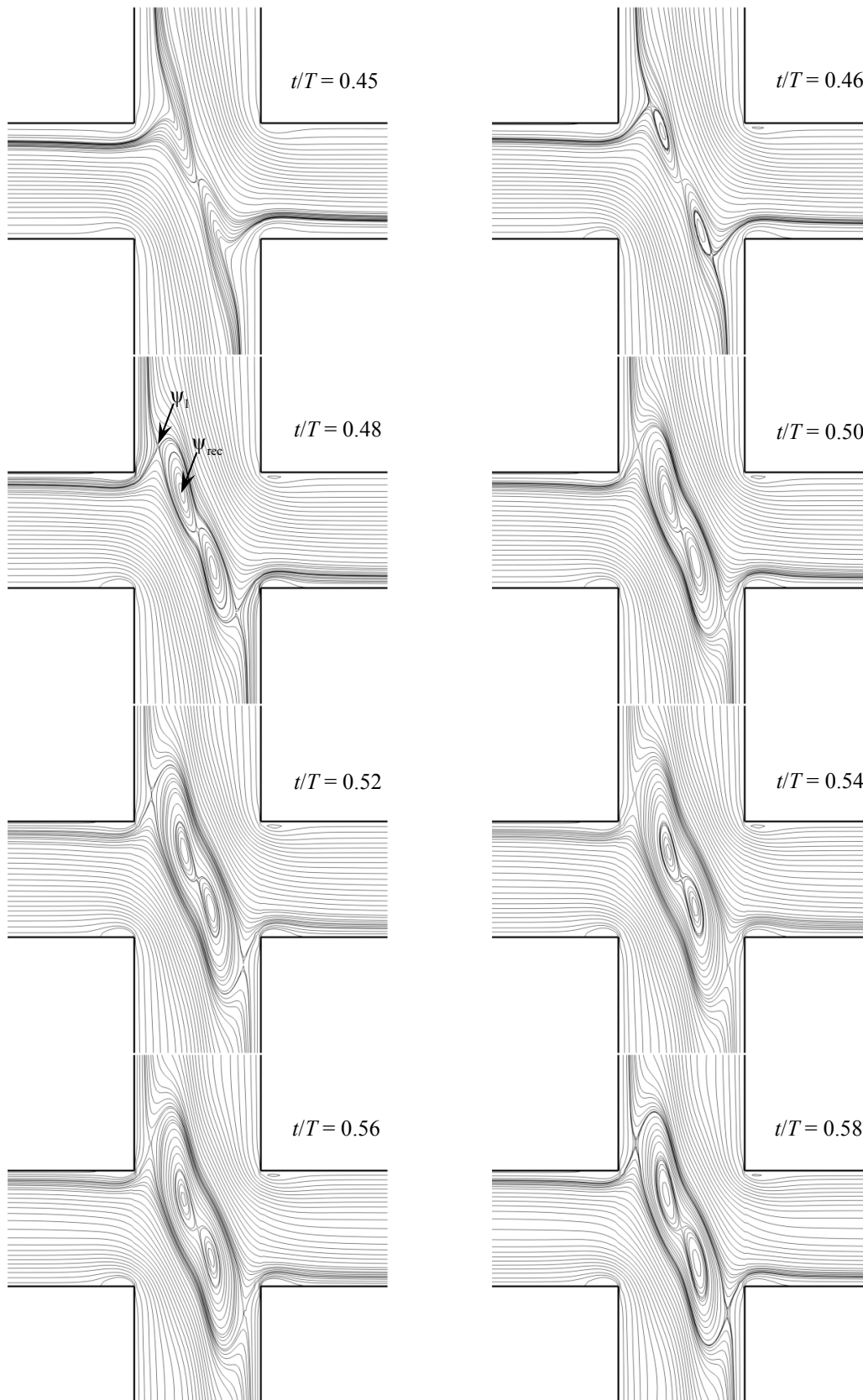


Figura 11.13 – Evolução das linhas de corrente para valores de tempo entre $0.45 \leq t/T \leq 0.63$ ($De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$): aparecimento de uma recirculação na zona central do cruzamento dos canais.

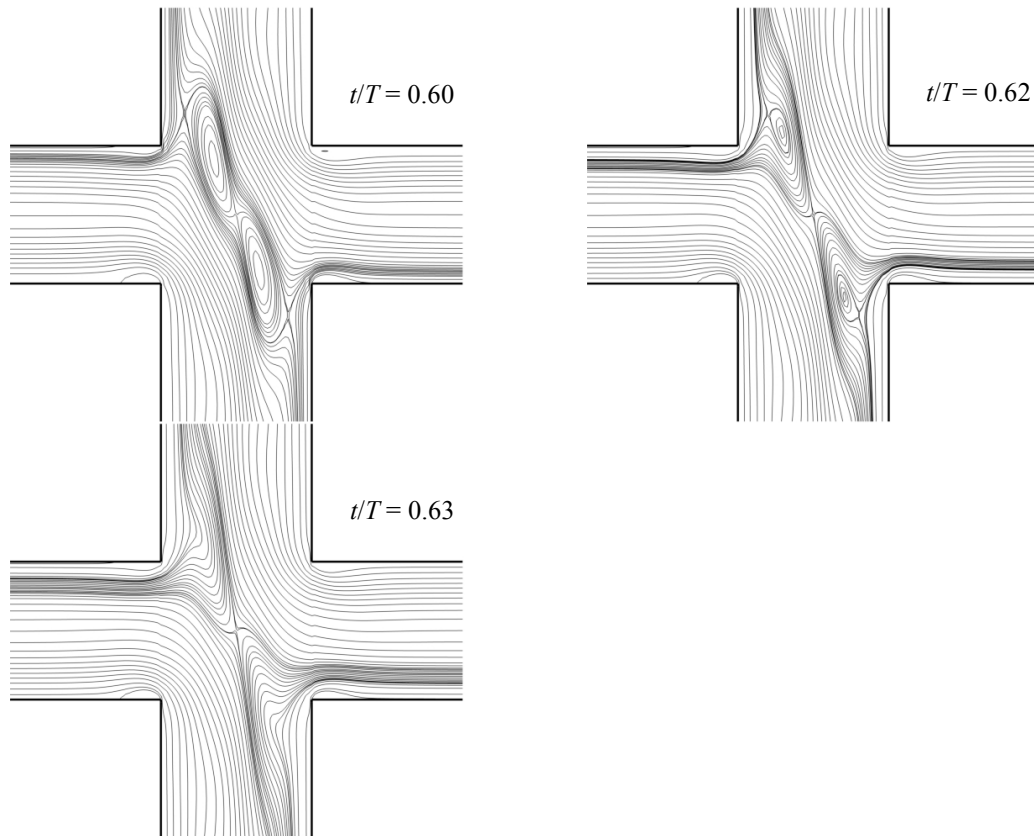


Figura 11.13 (cont.) – Evolução das linhas de corrente para valores de tempo entre $0.45 \leq t/T \leq 0.63$ ($De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$): aparecimento de uma recirculação na zona central do cruzamento dos canais.

É interessante observar a Figura 11.13 e ver como o par de vórtices se forma devido à pulsação do escoamento à entrada, que faz dobrar as linhas de corrente segundo uma das diagonais na zona do cruzamento. Diagonal essa definida pela forma de bifurcação (Q_1 maior que Q_2 , ou vice-versa). Posteriormente, os vórtices são arrastados pelo escoamento e acabam por se desfazer de encontro às paredes laterais dos canais de saída.

11.3.1 – Influência do período de oscilação, T

Nesta subsecção apresenta-se um estudo do comportamento do escoamento pulsante quando se faz variar o período de oscilação para valores de $T = 0.5$, 1.0 e 2.0 , com a frequência de oscilação $f = 2.0$, 1.0 e 0.5 , respectivamente. O caso base que será aqui analisado refere-se às condições de $De = 0.6$ e $AK = 0.5$ fixos (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). A diminuição da frequência de oscilação corresponde a um aumento do período, definido pelos números de Womersley ou de Strouhal, que assumem os seguintes valores:

- $T = 0.5 \Rightarrow \alpha = 1.772$ e $St = 0.5$;
- $T = 1.0 \Rightarrow \alpha = 1.253$ e $St = 1.0$;
- $T = 2.0 \Rightarrow \alpha = 0.886$ e $St = 2.0$.

Na Figura 11.14 estão as previsões da variação de ψ_c em função do tempo, durante um ciclo, com o parâmetro T a tomar valores de $T = 0.5$, 1.0 e 2.0 . Como se pode observar, o aumento do período (directamente ligado ao aumento de St , ou diminuição em raiz quadrada de α) tende a atenuar o valor máximo de ψ_c , fazendo com que se processe melhor a mistura na junção dos caudais, como ilustrado na Fig. 11.16 que será comentada de seguida. Os resultados relevantes para a situação em que se faz variar o período oscilatório, no que respeita aos valores de ψ_c médio (ψ_{c_med} , obtido pela média aritmética dos valores de ψ_c ao longo de um ciclo) e máximo (ψ_{c_max}), são:

- Para $T = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.872$ e $\psi_{c_max} = 1.097$ para $t/T = 0.60$;
- Para $T = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.826$ e $\psi_{c_max} = 1.045$ para $t/T = 0.43$;
- Para $T = 2.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.814$ e $\psi_{c_max} = 0.923$ para $t/T = 0.25$.

Para a condição estacionária ($AK = 0$) obteve-se $\psi_c = 0.862$ (Cap. 7). De acordo com estes resultados, verifica-se que os valores médios de ψ_c são próximos dos obtidos em condições estacionárias, sobretudo para a frequência maior. Por outro lado, verifica-se que à medida que o período aumenta o valor máximo de ψ_c diminui, antecipando-se no tempo.

A variação do caudal de entrada (Q) em função do tempo encontra-se representado na Figura 11.15 para valores crescentes de T , e em dois ciclos consecutivos. No primeiro ciclo (há repetição de ciclo para ciclo) faz-se a comparação entre os resultados numéricos (linha contínua) e teóricos (símbolos redondos abertos), que se relembra terem sido deduzidos para fluido newtoniano. Observa-se que existe uma boa concordância quantitativa entre resultados numéricos e teóricos. Faz-se notar que os números indicados no segundo ciclo (símbolos fechados) correspondem aos instantes captados da evolução das partículas apresentada na Fig. 11.16 discutida de seguida. Vê-se ainda, da Figura 11.15, que a variação do período de oscilação do gradiente de pressões à entrada induz de facto um atraso na evolução da onda de velocidade média (Q). Além disso, a magnitude da variação de Q aumenta apreciavelmente.

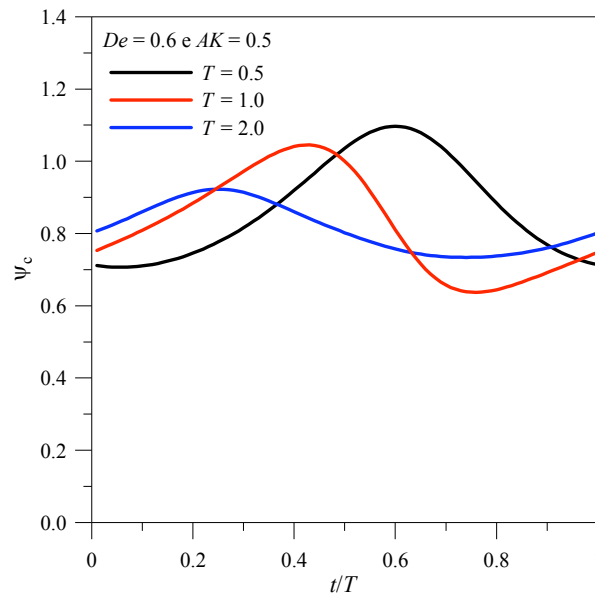


Figura 11.14 – Evolução da função de corrente ψ_c com o tempo ao longo de um ciclo para $De = 0.6$ e $AK = 0.5$ (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). Influência do período oscilatório $T = 0.5, 1.0$ e 2.0 .

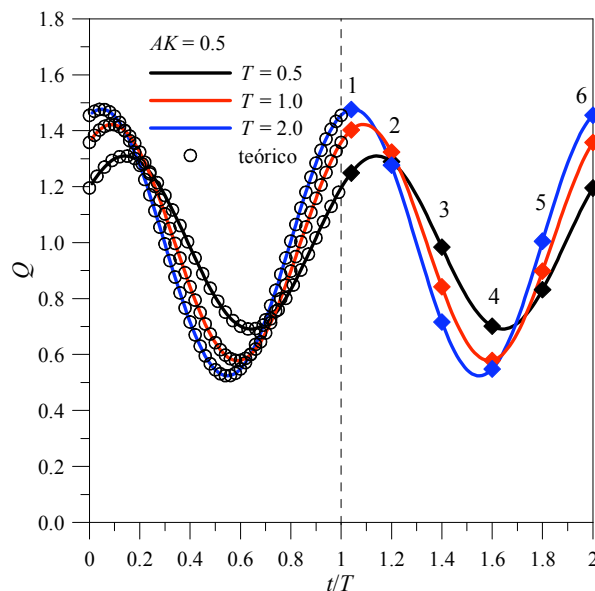


Figura 11.15 – Variação do caudal de entrada (Q) ao longo do tempo para $AK = 0.5$. Influência do período oscilatório $T = 0.5, 1.0$ e 2.0 .

Na Figura 11.16 encontra-se representada a evolução da trajectória das partículas (*streaklines*) largadas à entrada dos canais, para valores de T crescentes ($T = 0.5, 1.0$ e 2.0). Os tempos correspondem aos instantes indicados por números de 1 a 6 no segundo ciclo da Fig. 11.15. Este tipo de representação é mais adequado do ponto de vista de visualização do escoamento, em comparação à utilização de linhas de corrente, pois permite analisar de forma mais clara como é que o escoamento se processa quando se aplica um gradiente de pressão oscilante nas entradas.

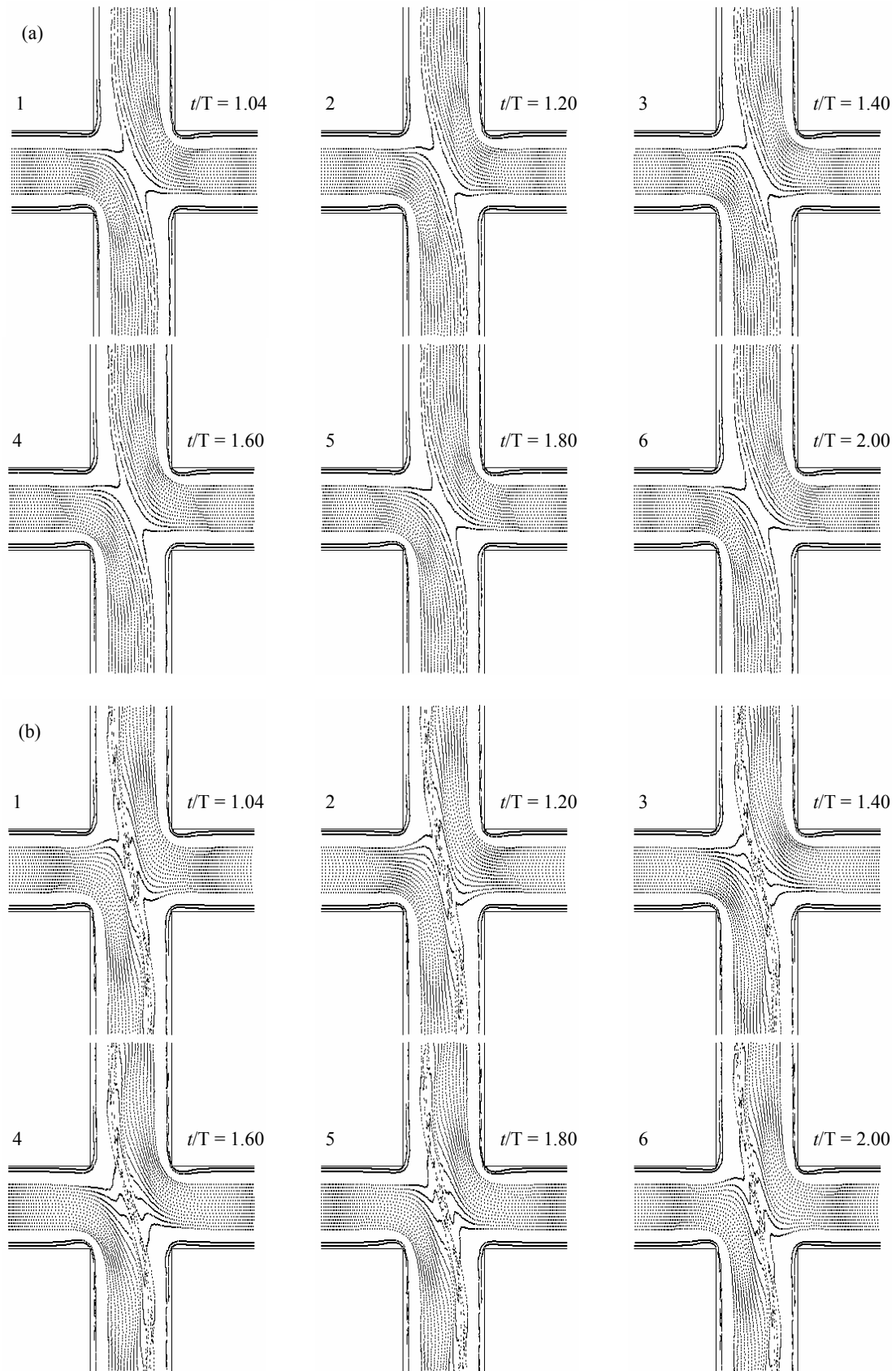


Figura 11.16 – Evolução da trajetória das partículas (*streaklines*) ao longo do tempo para $De = 0.6$ e $AK = 0.5$ (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). Influência do período para: (a) $T = 0.5$; (b) $T = 1.0$; e (c) $T = 2.0$.

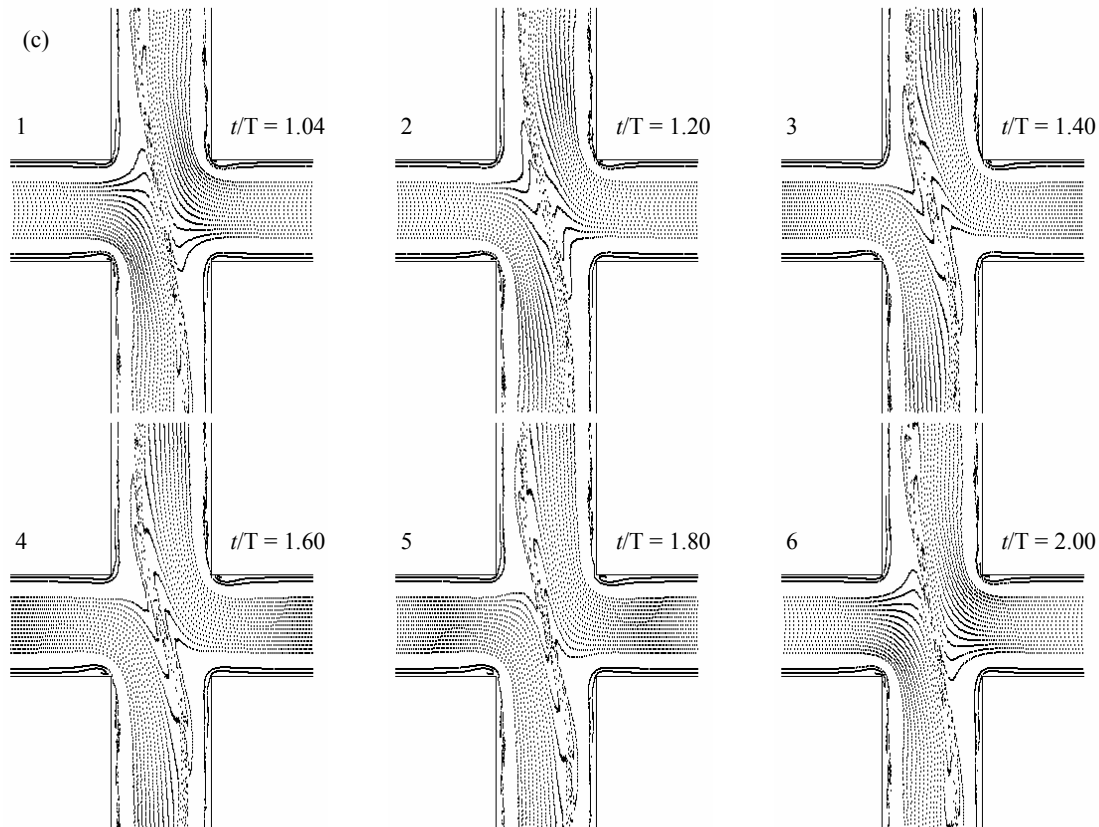


Figura 11.16 (cont.) – Evolução da trajetória das partículas (*streaklines*) ao longo do tempo para $De = 0.6$ e $AK = 0.5$ (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). Influência do período para: (a) $T = 0.5$; (b) $T = 1.0$; e (c) $T = 2.0$.

Com base na Figura 11.16, conclui-se que o aumento do período tende a promover a formação de mais estruturas vorticais e assim provocar uma maior mistura e concentração de partículas na zona de intersecção dos canais, propagando-se posteriormente ao longo dos canais de saída. Por outro lado, a natureza pulsante presente no escoamento encontra-se perfeitamente evidente nestas trajetórias de partículas.

11.3.2 – Influência do parâmetro oscilatório, AK

Nesta fase do trabalho pretende-se avaliar o comportamento do escoamento viscoelástico quando se faz variar o parâmetro oscilatório AK . Tal como já foi definido anteriormente na Eq. (11.6), este parâmetro adimensional corresponde à razão entre a amplitude do gradiente de pressão oscilante (ρK_o) e a amplitude do gradiente de pressão estacionário (ρK_e). Os resultados aqui apresentados foram simulados para as seguintes condições: $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $T = 1.0$. Em termos adimensionais, com as restantes propriedades unitárias ($U = d = \eta_0 = 1$), obtém-se uma amplitude estacionária de $\rho K_e = 12$

(constante) e fez-se variar apenas o valor $\rho K_o = 6, 12$ e 18 para se obter, respectivamente, $AK = 0.5, 1.0$ e 1.5 . O número de Womersley assume o valor $\alpha = 1.253$ e o número de Strouhal toma o valor $St = 1.0$, ambos fixos. Na Figura 11.17 apresentam-se os resultados obtidos da evolução de ψ_c em função do tempo ao longo de um ciclo (com um passo no tempo $\Delta t = 0.01T$). Observa-se que o valor máximo de ψ_c aumenta com o crescimento de AK para as condições em que toma os valores de 0.5 e 1.0 . Todavia, quando $AK = 1.5$ a assimetria do escoamento desaparece, o que implica $\psi_c = 0.5$. Isto poderá ser visualizado, com mais detalhe, na evolução da trajectória das partículas da Fig. 11.19. Verifica-se também que o valor máximo de ψ_c desloca-se no tempo (ocorre para tempos mais tardios no ciclo) quando AK cresce, ou seja, para:

- $AK = 0.5 \Rightarrow \psi_{c_max} = 1.045$ para $t/T = 0.43$;
- $AK = 1.0 \Rightarrow \psi_{c_max} = 1.131$ para $t/T = 0.55$;
- $AK = 1.5 \Rightarrow \psi_{c_max} = \psi_c = 0.500$ ao longo de todo o ciclo $0 \leq t/T \leq 1$.

Tendo em conta os valores médios de ψ_c tem-se:

- $AK = 0.5 \Rightarrow \psi_{c_med} = 0.826$;
- $AK = 1.0 \Rightarrow \psi_{c_med} = 0.670$;
- $AK = 1.5 \Rightarrow \psi_{c_med} = 0.500$.

Para a situação estacionária e em condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$ o valor de ψ_c é de 0.862 . O que mostra que no caso de $AK = 0.5$ os valores de ψ_c (médio e estacionário) são muito próximos, mas à medida que AK aumenta a diferença é maior.

A variação do caudal de entrada para cada uma das situações atrás enunciadas encontra-se ilustrada na Figura 11.18, onde se vê o esperado aumento dos valores máximos da velocidade média (média no espaço) à medida que a parte oscilante se vai tornando mais preponderante (é controlada pelo parâmetro AK). Tal como já apresentado na subsecção 11.3.1, no primeiro ciclo faz-se uma comparação entre os resultados numéricos (linha contínua) e teóricos (símbolos redondos abertos). Verifica-se que existe uma concordância perfeita entre ambos, o que de alguma forma é consequência da conservação exacta do caudal.

Na Figura 11.19 encontra-se apresentada a evolução da trajectória das partículas ao longo do tempo para seis instantes que se encontram indicados por números no segundo ciclo da Fig. 11.18, quando se faz variar o valor de AK . Nesta figura apenas está ilustrada a evolução da trajectória das partículas para $AK = 1.0$ (Fig. 11.19(a)) e 1.5 (Fig. 11.19(b)), uma vez que para $AK = 0.5$ esta já se encontra representada na Fig. 11.16(b). De acordo com estas visualizações, constata-se que no caso em que $AK = 1.0$ a mistura de partículas na intersecção dos canais é mais intensa do que na situação em que $AK = 0.5$. No entanto, para $AK = 1.5$ o escoamento fica simétrico e as linhas de partículas sobrepõem-se ao longo do ciclo, não havendo qualquer mistura.

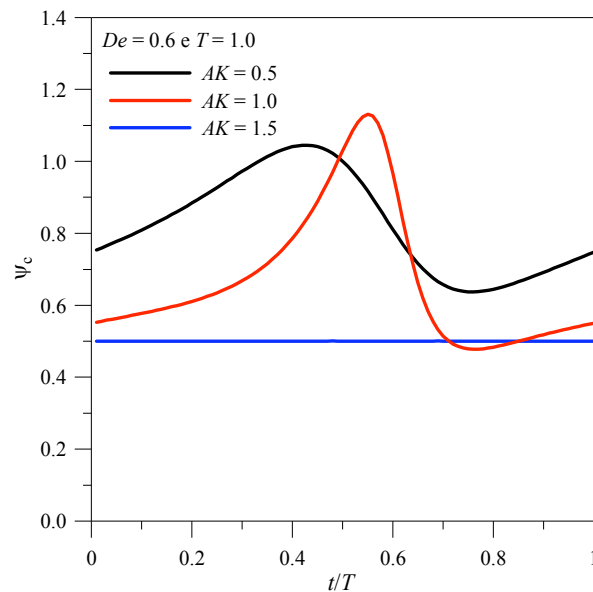


Figura 11.17 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo de um ciclo para $De = 0.6$ e $T = 1.0$ (com $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$). Influência do parâmetro oscilatório $AK = 0.5, 1.0$ e 1.5 .

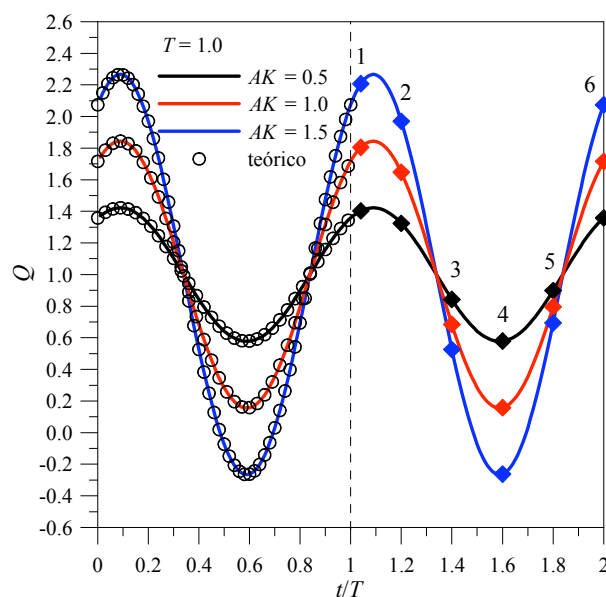


Figura 11.18 – Variação do caudal de entrada (Q) ao longo do tempo para $T = 1.0$. Influência do parâmetro oscilatório $AK = 0.5, 1.0$ e 1.5 .

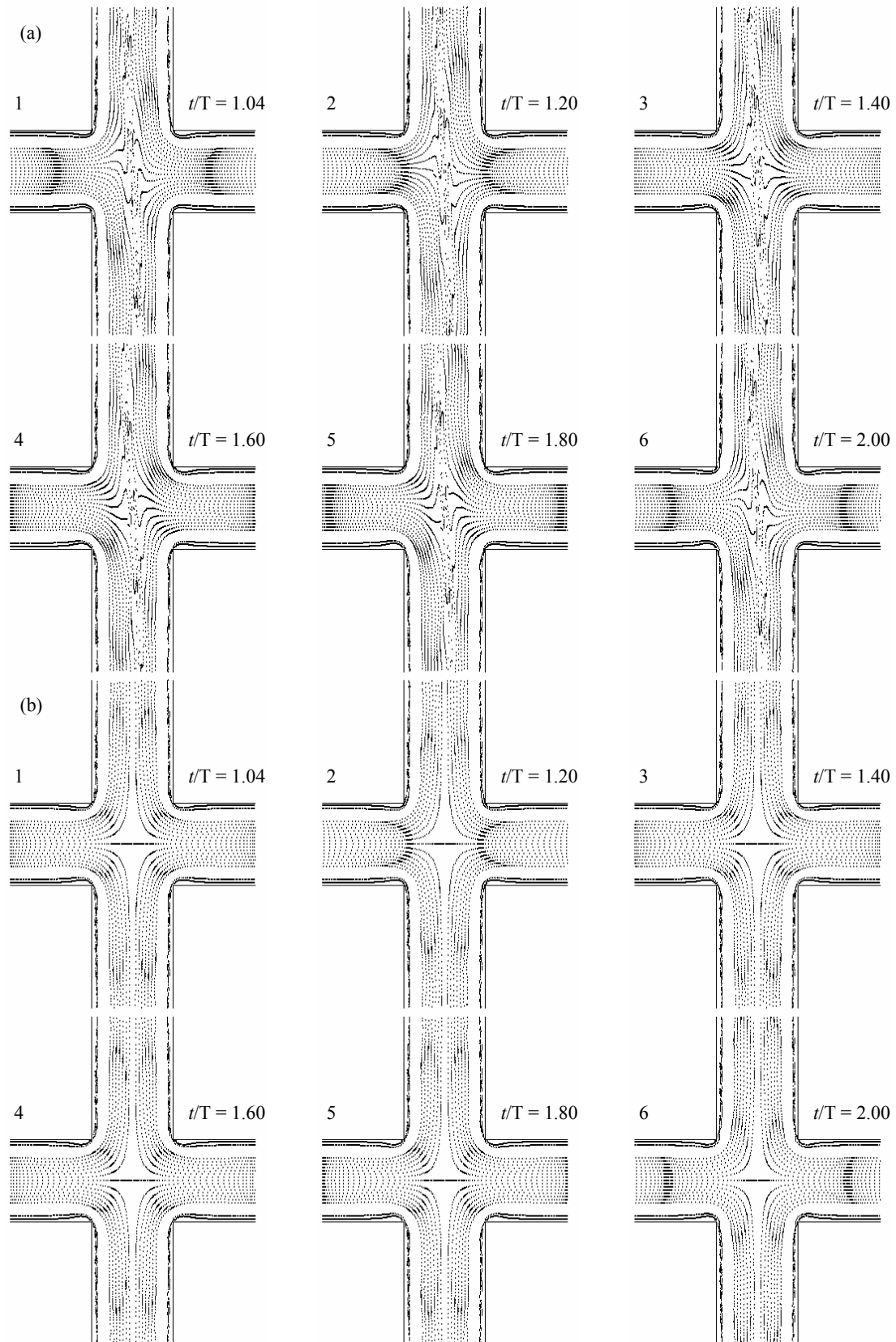


Figura 11.19 – Evolução da trajetória das partículas (*streaklines*) ao longo do tempo para $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $T = 1.0$. Influência do parâmetro oscilatório: (a) $AK = 1.0$; e (b) $AK = 1.5$.

11.3.3 – Influência do efeito de inércia, Re

Todos os resultados anteriormente apresentados neste capítulo foram calculados para um número de Reynolds exactamente igual a zero ($Re = \rho U d / \eta_0 = 0$). Esta condição foi imposta no programa de cálculo fazendo com que o termo convectivo na equação da quantidade de movimento fosse nulo ($\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{0}$), mantendo-se apenas presente o da equação constitutiva. Para alterar este parâmetro adimensional (Re) faz-se variar a viscosidade total de corte η_0 , uma vez que os restantes parâmetros foram assumidos constantes e unitários ($U = \rho = d = 1$).

As simulações numéricas apresentadas nesta subsecção referem-se a um caso com $Re = 0$ (usou-se $\eta_0 = 1.0$, mas os termos convectivos foram desligados) e outras seis situações em que o termo convectivo foi ligado e se variou ligeiramente o número de Reynolds, $Re = 0.001$ (com $\eta_0 = 1000$), 0.01 (com $\eta_0 = 100$), 0.1 (com $\eta_0 = 10$), 0.5 (com $\eta_0 = 2.0$), 1.0 (com $\eta_0 = 1.0$) e 5.0 (com $\eta_0 = 0.2$). O objectivo foi o de aferir o efeito que a introdução de inércia possa ter sobre o despoletar de instabilidades puramente elásticas e a assimetria do escoamento. Uma vez que o intuito era variar a inércia sem simultaneamente variar outro parâmetro, por exemplo a frequência adimensional, decidiu-se nestes cálculos manter o número de Womersley constante no valor $\alpha = 1.253$. Como consequência, o número de Strouhal toma os seguintes valores:

- $St = 1.0$ para $Re = 0.0$ e $T = 1.0$;
- $St = 0.001$ para $Re = 0.001$ e $T = 0.001$;
- $St = 0.01$ para $Re = 0.01$ e $T = 0.01$;
- $St = 0.1$ para $Re = 0.1$ e $T = 0.1$;
- $St = 0.5$ para $Re = 0.5$ e $T = 0.5$;
- $St = 1.0$ para $Re = 1.0$ e $T = 1.0$;
- $St = 5.0$ para $Re = 5.0$ e $T = 5.0$.

Os resultados apresentados na Figura 11.20 permitem comparar os valores de ψ_c obtidos quando se faz variar o número de Reynolds, em condições de $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0.5$. Com base na Figura 11.20(a), que mostra a evolução dos valores de ψ_c ao longo de um ciclo, verifica-se que o caso com $Re = 0.1$ apresenta valores extremos de ψ_c ligeiramente superiores aos obtidos para os restantes casos de outros Re . Verifica-se também que a inércia do escoamento viscoelástico, quando se aumenta o número de Reynolds de um

valor próximo de zero ($Re = 0.001$ e 0.01) até $Re = 0.1$, faz aumentar o valor de ψ_c , possibilitando assim que o fenómeno do aparecimento de recirculações na zona central da geometria possa ser benéfico na mistura do escoamento. Todavia, para valores de $Re > 0.1$ existe uma tendência para atenuar os valores máximos de ψ_c no ciclo, até que o escoamento se torna simétrico para $Re = 5.0$ (com $\psi_c = 0.5$). Para as condições analisadas os valores médios e máximos de ψ_c são:

- $Re = 0.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.826$ e $\psi_{c_max} = 1.045$ para $t/T = 0.43$;
- $Re = 0.001$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.900$ e $\psi_{c_max} = 1.128$ para $t/T = 0.59$;
- $Re = 0.01$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.900$ e $\psi_{c_max} = 1.135$ para $t/T = 0.59$;
- $Re = 0.1$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.905$ e $\psi_{c_max} = 1.199$ para $t/T = 0.57$;
- $Re = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.860$ e $\psi_{c_max} = 1.153$ para $t/T = 0.51$;
- $Re = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.738$ e $\psi_{c_max} = 0.910$ para $t/T = 0.51$;
- $Re = 5.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.500$ (sem máximo) ao longo de todo o ciclo $0 \leq t/T \leq 1$.

É claro também da Figura 11.20(b) que o caso $Re = 0$ (com termo convectivo desligado) não apresenta uma variação de ψ_c em função do tempo análoga aos outros três casos apresentados para valores de Re próximos de zero ($Re = 0.001, 0.01$ e 0.1). Esta discrepância poderá estar relacionada com o facto dos valores assumidos de St e E serem diferentes.

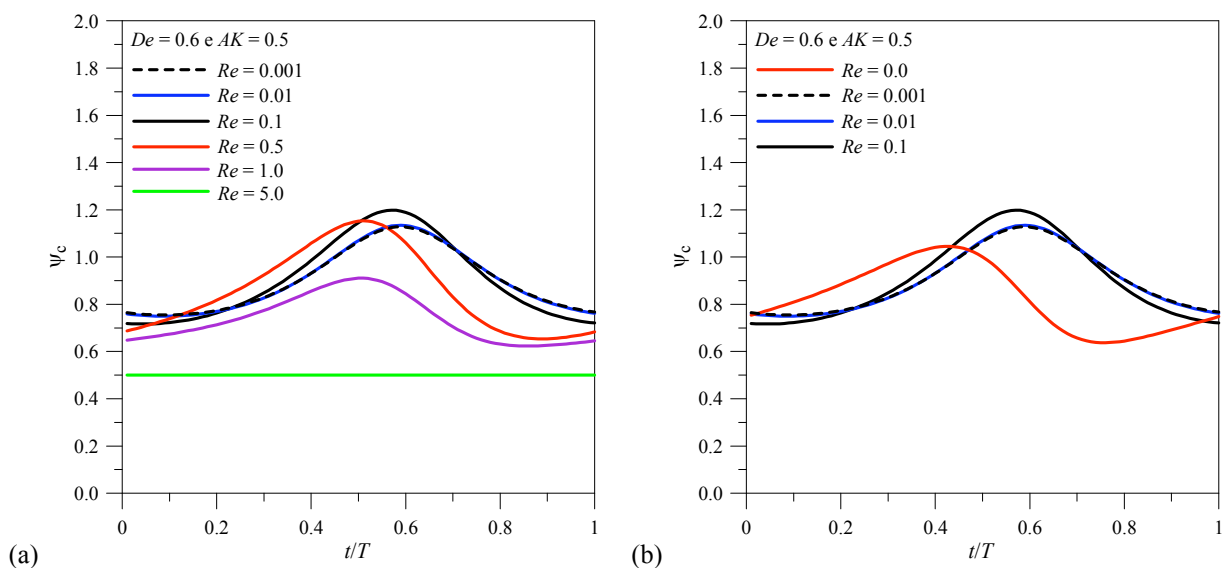


Figura 11.20 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo do tempo para $De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0.5$. Efeito de inércia: (a) $Re = 0.001, 0.01, 0.1, 0.5, 1.0$ e 5.0 ; e (b) $Re = 0.0, 0.001, 0.01$ e 0.1 .

Na Figura 11.21 apresentam-se as linhas de corrente do escoamento previstas para $Re = 0.0, 0.01$ e 0.1 de forma a se visualizar, com maior detalhe, o fenómeno que ocorre no escoamento em função do tempo. De facto, verifica-se que para um certo intervalo de tempo, durante um ciclo, aparece na região central do cruzamento dos canais uma recirculação interna que produz uma bolha, em forma de elipse, contendo uma determinada quantidade de fluido a recircular dentro. Esta estrutura torna-se mais intensa quando o número de Reynolds aumenta ligeiramente (comparar, por exemplo, Fig. 11.21(b) e (c) para $Re = 0.01$ e 0.1 no instante de tempo $t/T = 0.5$), estando correlacionada com valores de $\psi_c \geq 1$, como se viu na Fig. 11.20.

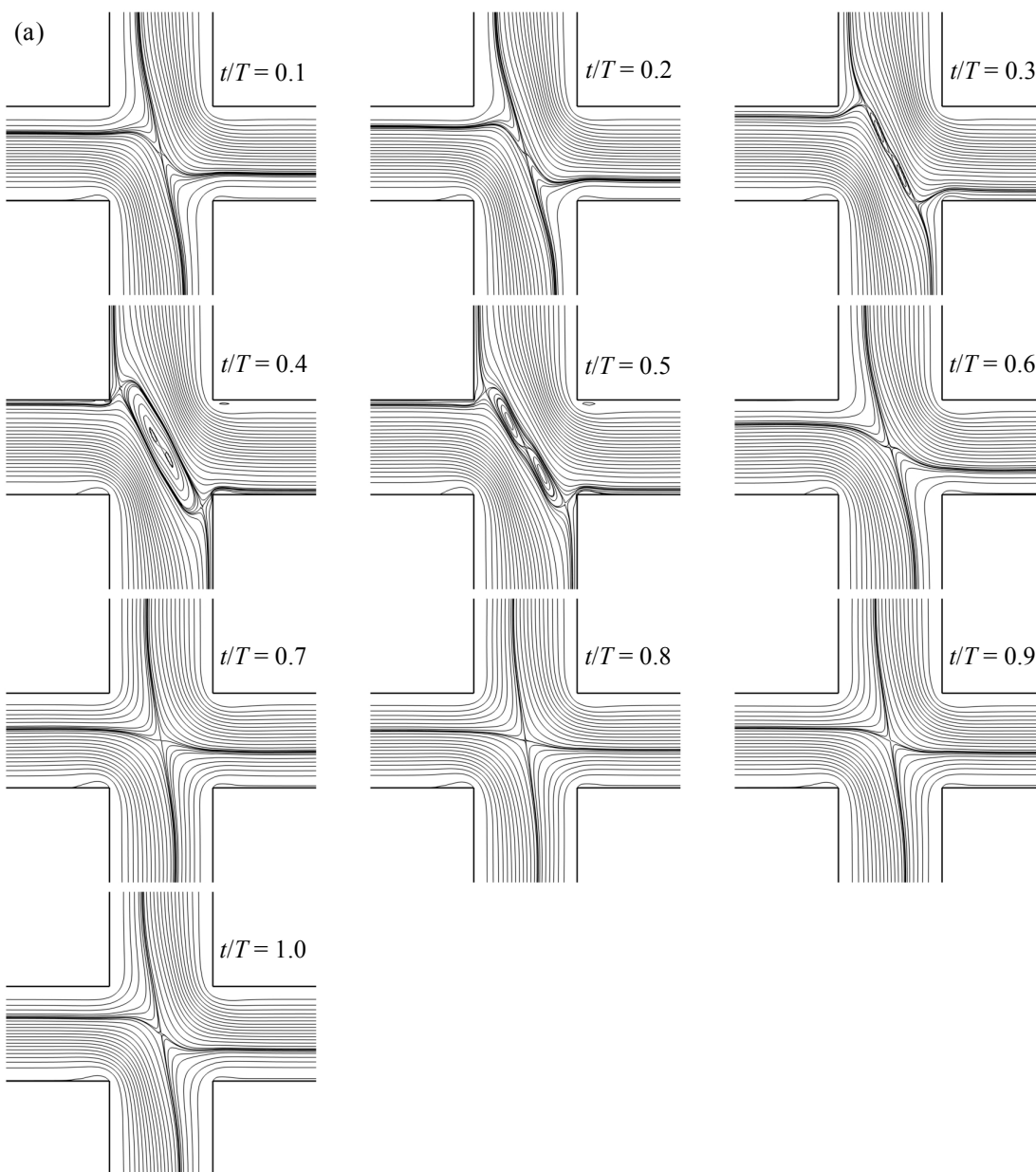


Figura 11.21 – Evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo ($De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0.5$). Efeito de inércia: (a) $Re = 0.0$, (b) $Re = 0.01$ e (c) $Re = 0.1$.

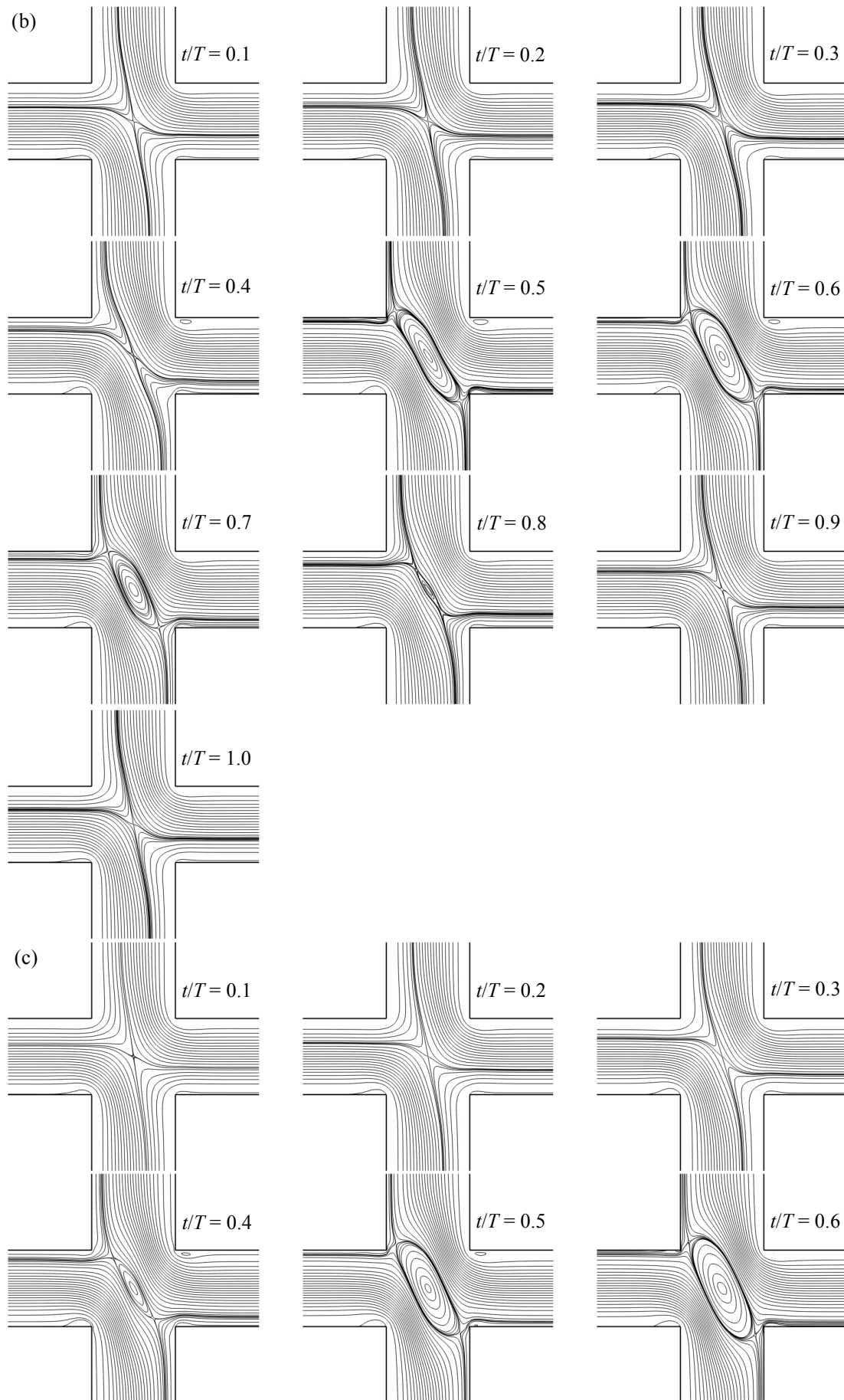


Figura 11.21 (cont.) – Evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo ($De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0.5$). Efeito de inércia: (a) $Re = 0.0$, (b) $Re = 0.01$ e (c) $Re = 0.1$.

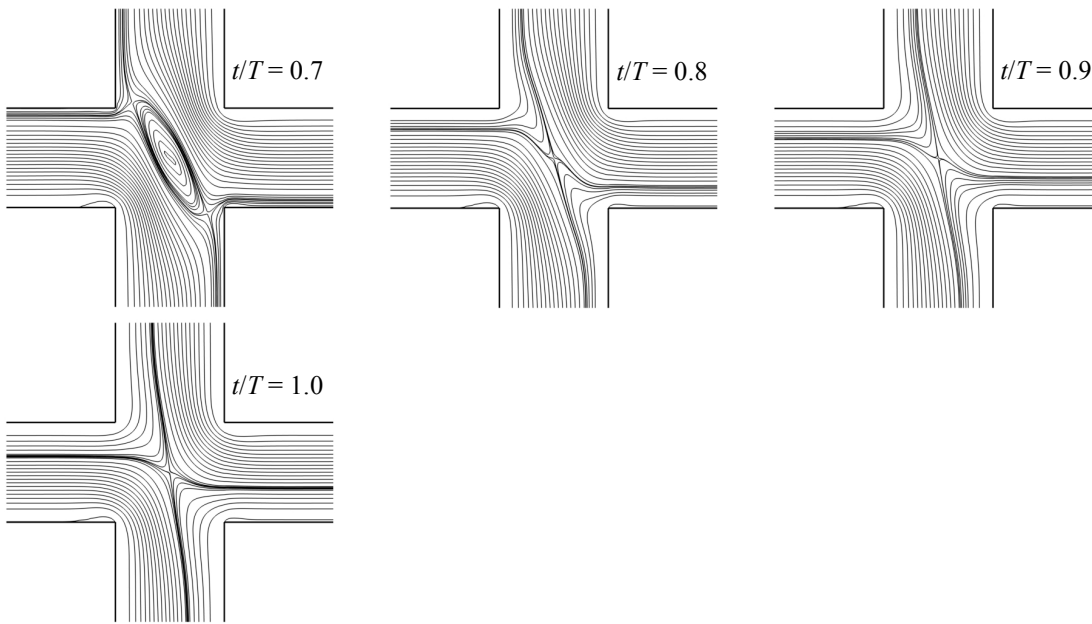


Figura 11.21 (cont.) – Evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo ($De = 0.6$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0.5$). Efeito de inércia: (a) $Re = 0.0$, (b) $Re = 0.01$ e (c) $Re = 0.1$.

11.3.4 – Influência do parâmetro de extensibilidade, L^2

Nesta subsecção pretende-se avaliar o comportamento do escoamento quando se faz variar o parâmetro de extensibilidade L^2 do modelo FENE-CR. Tal como já foi referido anteriormente, este parâmetro adimensional mede a extensibilidade das moléculas de polímero e um crescimento de L^2 implica um aumento da viscosidade extensional do fluido. Para estudar a influência que este parâmetro possa causar no comportamento do escoamento pulsante viscoelástico L^2 toma valores 50, 100 e 200, para condições base de $\beta = 0.1$, $Re = 0$, $De = 0.6$, $\alpha = 1.253$ e $St = 1.0$. Na Figura 11.22 encontram-se ilustrados os resultados das previsões para a evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais (ψ_c) em função do tempo ao longo de um ciclo (com $T = 1.0$), para dois valores do parâmetro do gradiente de pressão, $AK = 0.5$ e 1.0 . Esta figura é muito importante por ilustrar claramente o efeito da extensibilidade como influência principal sobre o padrão de escoamento e existência, ou não, de bifurcação e assimetrias. A diminuição do parâmetro L^2 (proporcional à viscosidade extensional) tende a atenuar o valor máximo de ψ_c , de tal forma que para $L^2 = 50$ o escoamento mantém-se sempre simétrico. Essa atenuação é mais evidente quando o parâmetro adimensional oscilatório toma o maior valor, $AK = 1.0$, para as duas situações com $L^2 = 100$ e 200 . No caso em que $L^2 = 50$ o escoamento fica

totalmente simétrico ($\psi_c = 0.5$) para $AK = 0.5$ e 1.0 . Os valores médios e máximos de ψ_c previstos nesta situação, em que se faz variar o parâmetro de extensibilidade L^2 , são:

Para $L^2 = 50$:

- com $AK = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.500$ (sem máximo);
- com $AK = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.500$ (sem máximo).

Para $L^2 = 100$:

- com $AK = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.826$ e $\psi_{c_max} = 1.045$ para $t/T = 0.43$;
- com $AK = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.670$ e $\psi_{c_max} = 1.131$ para $t/T = 0.55$.

Para $L^2 = 200$:

- com $AK = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.898$ e $\psi_{c_max} = 1.121$ para $t/T = 0.37$;
- com $AK = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.848$ e $\psi_{c_max} = 1.746$ para $t/T = 0.49$.

No caso estacionário (para as mesmas condições e com $AK = 0$) obteve-se para $L^2 = 50, 100$ e 200 , respectivamente, $\psi_c = 0.500, 0.862$ e 0.926 . Portanto, verifica-se que o aumento de AK , de 0 (sem parte oscilante) para 0.5 e 1.0 , faz diminuir o ψ_{c_med} .

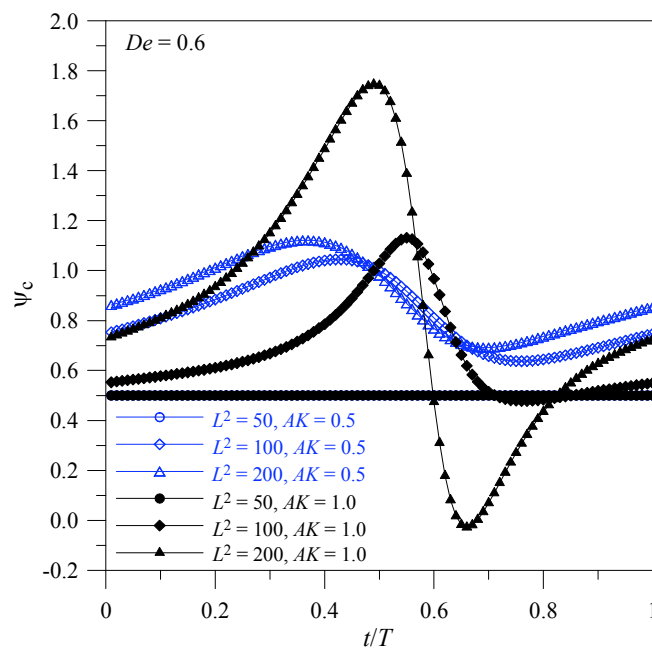


Figura 11.22 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo do tempo para $De = 0.6$ e $AK = 0.5$ e 1.0 . Influência da extensibilidade $L^2 = 50, 100$ e 200 .

A evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo ao longo de um ciclo (com intervalos de tempo entre figuras de $0.1T$), em condições de $L^2 = 200$ e $AK = 1.0$, encontra-se ilustrada na Fig. 11.23.

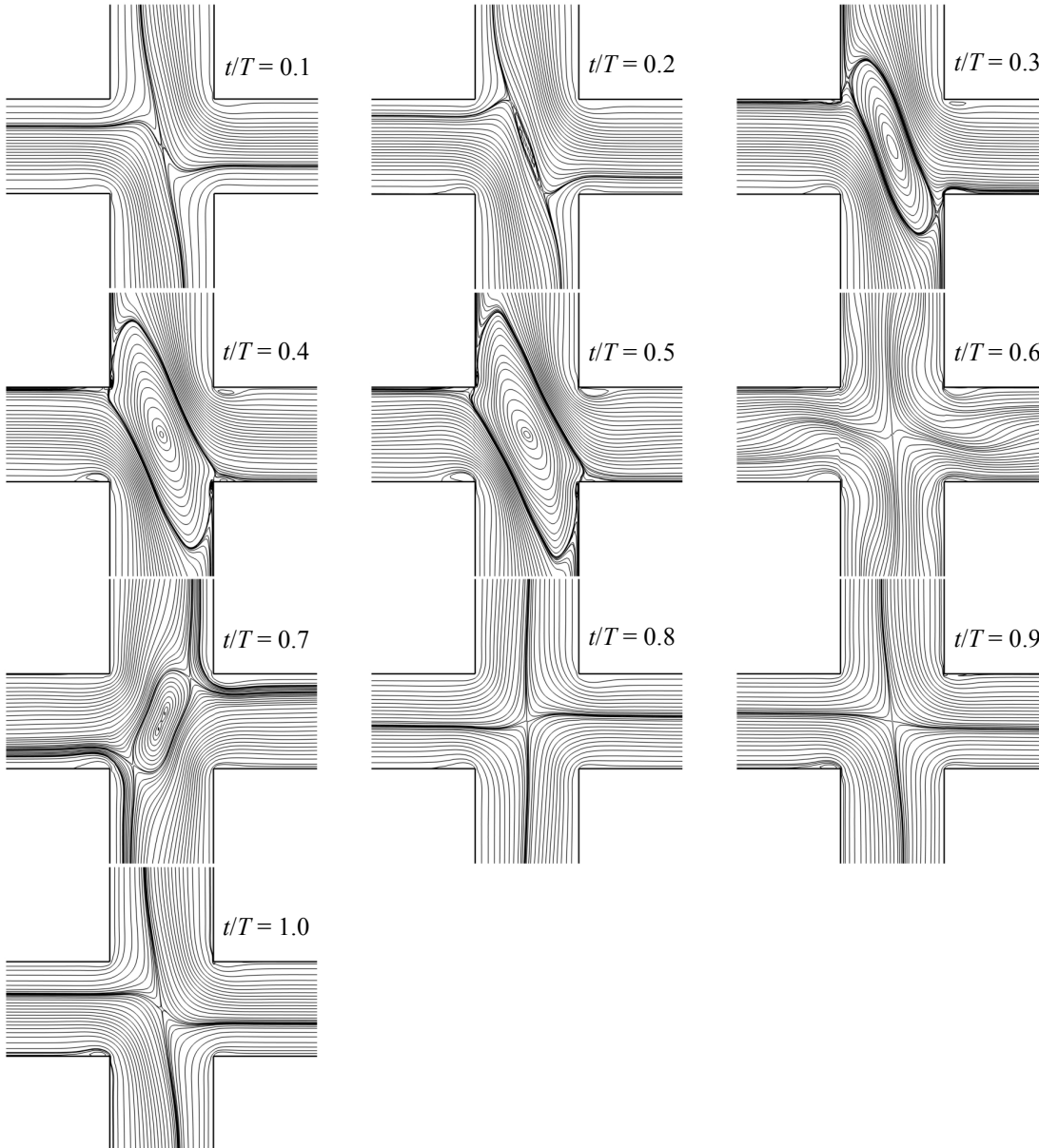


Figura 11.23 – Evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo para $De = 0.6$, $\beta = 0.1$, $L^2 = 200$ e $AK = 1.0$.

Através desta sequência de figuras, correspondente à evolução das linhas de corrente em função do tempo, observa-se como o aumento da viscosidade extensional do fluido (controlado pelo L^2) tem uma forte influência no escoamento, sendo útil fazer a comparação com a evolução das linhas de corrente da Figura 11.9, para a condição de $L^2 = 100$ e $AK = 1.0$. Constata-se que no início do período o escoamento vai aumentando o grau de assimetria e

aparece logo uma pequena recirculação fechada no centro do cruzamento dos canais. À medida que o tempo avança essa recirculação torna-se mais intensa, tendo um máximo de actividade em $t/T \approx 0.5$, após isso decai rapidamente e desfaz-se, até que ψ_c atinge um mínimo a partir do qual se verifica uma transição na configuração da bifurcação (para $t/T \geq 0.6$). Nessa altura tem-se $\psi_c < 0.5$, o que implica que a maior parte do caudal vindo do ramal da direita sai agora por baixo (canal de saída inferior). Em $t/T \approx 0.7$ tem-se mesmo uma nova recirculação fechada no centro, com vorticidade contrária à recirculação original. Após algum avanço no tempo e na situação em que $\psi_c \geq 0.5$ (para $t/T > 0.8$) a bifurcação volta à configuração inicial.

11.3.5 – Influência da elasticidade, De

O intuito desta subsecção é avaliar a resposta do escoamento pulsante viscoelástico quando se procede à alteração do número de Débora (De) para condições de inércia desprezável ($Re = 0$). Os resultados em termos do parâmetro ψ_c obtidos em função do tempo estão apresentados na Figura 11.24, para valores de $De = 0.5, 0.6$ e 0.7 e em condições de $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$, $\alpha = 1.253$ e $St = 1.0$. Para estas condições variou-se também o parâmetro oscilatório para $AK = 0.5$ e 1.0 . De acordo com os resultados obtidos, verifica-se que o valor de ψ_c aumenta, em geral, com o crescimento da elasticidade, sendo isso perfeitamente claro para o valor máximo de ψ_c . Isto poderá ser observado na Figura 11.24, por exemplo, na evolução de ψ_c quando se aumenta De , que é indicada a linha contínua com símbolos abertos para $AK = 0.5$. A figura mostra também que para $AK = 1.0$ o aumento de ψ_c é mais forte com o crescimento de De , comparativamente ao caso $AK = 0.5$. Contudo, constata-se que para $AK = 1.0$ e $De = 0.5$ o escoamento fica simétrico (mantendo-se $\psi_c = 0.5$ constante). A evolução desde uma situação de escoamento assimétrico (partindo do caso estacionário $De = 0.5$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 0$) até à situação simétrica ($St = 1.0$ e $AK = 1.0$) encontra-se ilustrada na Figura 11.25, que mostra a variação de ψ_c ao longo de 30 ciclos. Inicialmente, observa-se que ocorre uma forte variação de ψ_c , mas com o passar do tempo as condições oscilatórias tendem a atenuar-se e após 20 ciclos o escoamento passa a ficar simétrico, com o valor de $\psi_c = 0.5$. Mesmo partindo de condições iniciais diferentes, o regime

final para este conjunto de parâmetros ($De = 0.5$, $L^2 = 100$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$) é de escoamento simétrico sem bifurcação ao longo de todo o ciclo.

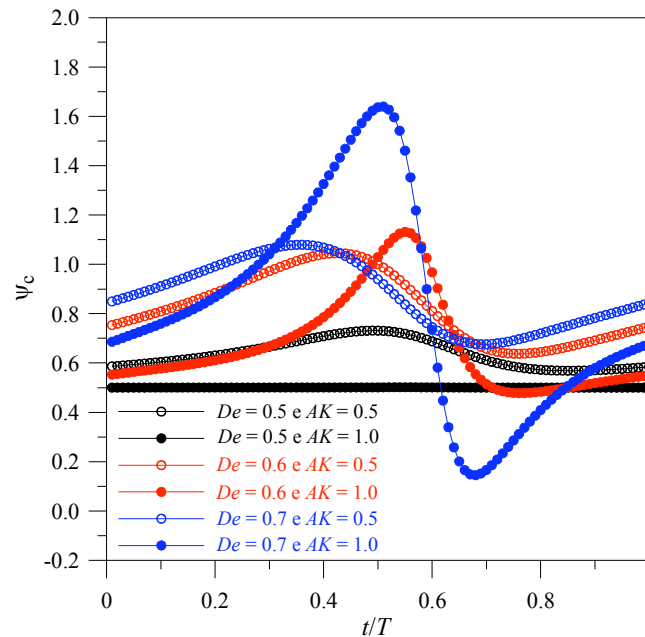


Figura 11.24 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo do tempo para $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, e para dois valores de $AK = 0.5$ e 1.0 . Influência da elasticidade $De = 0.5$, 0.6 e 0.7 .

Os valores médios e máximos de ψ_c quando se faz variar a elasticidade do fluido são:

Para $De = 0.5$:

- com $AK = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.637$ e $\psi_{c_max} = 0.731$ para $t/T = 0.49$;
- com $AK = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.500$ (sem máximo).

Para $De = 0.6$:

- com $AK = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.826$ e $\psi_{c_max} = 1.045$ para $t/T = 0.43$;
- com $AK = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.670$ e $\psi_{c_max} = 1.131$ para $t/T = 0.55$.

Para $De = 0.7$:

- com $AK = 0.5$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.874$ e $\psi_{c_max} = 1.079$ para $t/T = 0.36$;
- com $AK = 1.0$ tem-se: $\psi_{c_med} = 0.821$ e $\psi_{c_max} = 1.639$ para $t/T = 0.51$.

Para a situação estacionária obteve-se para $De = 0.5$, 0.6 e 0.7 ($L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$), respectivamente, $\psi_c = 0.739$, 0.862 e 0.906 . Consta-se que o grau de assimetria em regime estacionário é sempre superior à assimetria média do regime cíclico.

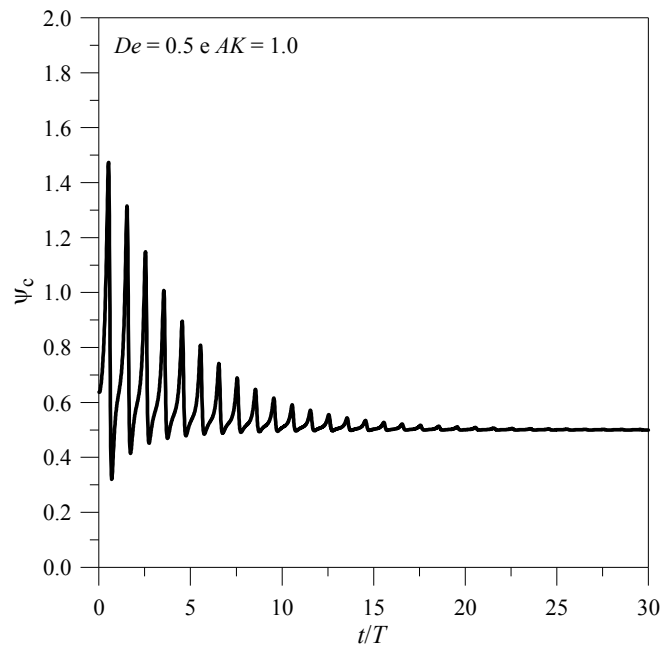


Figura 11.25 – Evolução da função de corrente no ponto central do cruzamento dos canais ao longo do tempo para $De = 0.5$, $L^2 = 100$, $St = 1.0$ e $AK = 1.0$.

Na Figura 11.26 encontra-se representada a evolução das linhas de corrente do escoamento para vários instantes de tempo ao longo de um ciclo (o intervalo de tempo entre gráficos é $0.1T$), no caso em que ψ_c apresenta valores mais intensos ($De = 0.7$ e $AK = 1.0$).

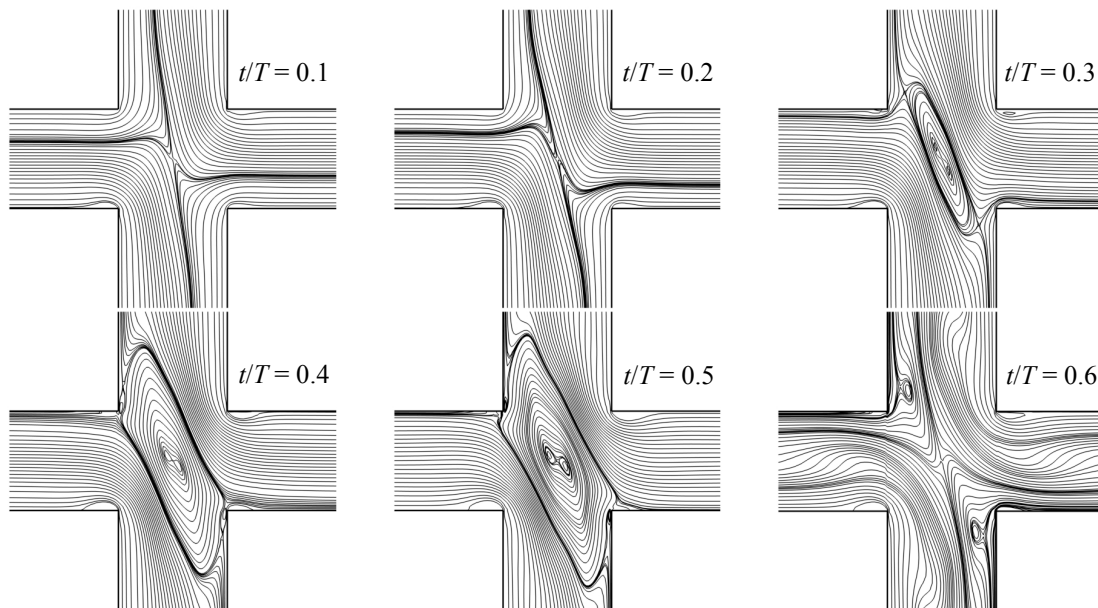


Figura 11.26 – Evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo para $De = 0.7$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 1.0$.

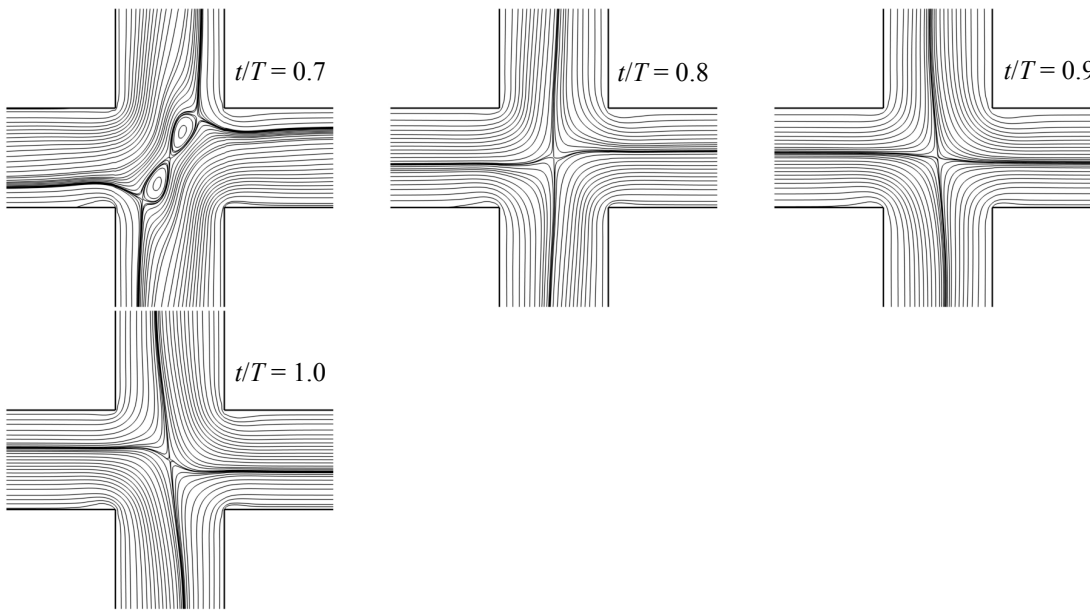


Figura 11.26 (cont.) – Evolução das linhas de corrente do escoamento em função do tempo para $De = 0.7$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 1.0$.

A sequência de imagens da Figura 11.26 ilustra padrões complexos de escoamento ao longo do ciclo, de certa forma semelhante às linhas de corrente do escoamento no estudo efectuado na subsecção 11.3.4 quando se analisou a influência da extensibilidade L^2 . Aparece um vórtice de maiores dimensões na zona central, orientado segundo uma das diagonais, que faz com que $\psi_c > 1.0$. Surgem depois dois vórtices de menores dimensões, que são convectados até às paredes laterais, mesmo depois do vórtice maior já ter desaparecido. A direcção da bifurcação muda de sentido, quando $\psi_c < 0.5$, aparecendo outros dois vórtices de menores dimensões orientados agora segundo a outra diagonal. A bifurcação volta a mudar de ramo e o ciclo termina com ψ_c pouco superior ao valor simétrico ($\psi_c = 0.5$).

11.3.6 – Condições puramente oscilatórias

Por último, apresenta-se nesta subsecção um estudo sobre o efeito provocado ao escoamento viscoelástico quando se aplicam condições puramente oscilatórias na entrada da geometria. Para tal, apenas se considera a parte oscilante e retira-se a parte estacionária presente nas condições de entrada do problema. Neste caso, o gradiente de pressão oscilatório (da Eq. (11.1)) fica expresso da seguinte forma (retirando-se a parte estacionária):

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} = K_o \cos(\omega t) \quad (11.9)$$

onde as variáveis de entrada (u , τ_{xy} e τ_{xx}) dependem somente das variações provenientes da parte oscilante. Neste caso não há um caudal *net* a circular pela geometria em forma de cruz. Há uma oscilação pura, com o fluido viscoelástico a entrar pelos canais horizontais durante metade do período oscilatório e a sair então pelos canais verticais (como nos casos anteriores). Durante a outra metade do ciclo o fluido entra pelos canais verticais e sai pelos canais horizontais. Desta forma, o caudal *net* integrado durante um período é consequentemente igual a zero. Seguidamente, apresenta-se na Figura 11.27 a evolução da função de corrente ψ_c em função do tempo quando se faz variar o número de Débora ($De = 0.5$ (Fig. 11.27(a)) e 0.6 (Fig. 11.27(b)) para valores fixos de $L^2 = 100$, $AK = 1.0$, $\beta = 0.1$, $Re = 0.0$, $\alpha = 1.253$ e $St = 1.0$. As condições iniciais nestes dois casos foram: $De = 0.5$ e 0.6 , com $\beta = 0.1$ e $L^2 = 100$ fixos (referentes ao caso estacionário, Cap. 7), o que correspondia a regimes assimétricos.

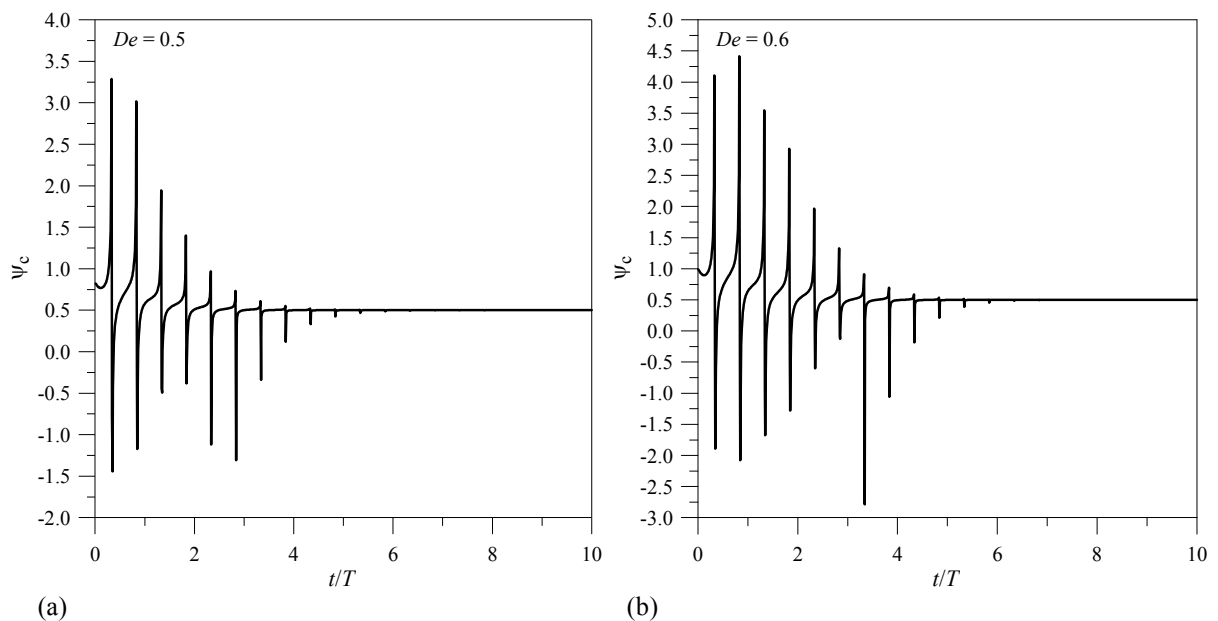


Figura 11.27 – Evolução da função de corrente ψ_c em função do tempo para condições puramente oscilantes ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 1.0$): (a) $De = 0.5$; e (b) $De = 0.6$.

A variação do caudal de entrada (Q) nestas condições encontra-se apresentado na Figura 11.28, sendo o caudal médio nulo, como discutido atrás.

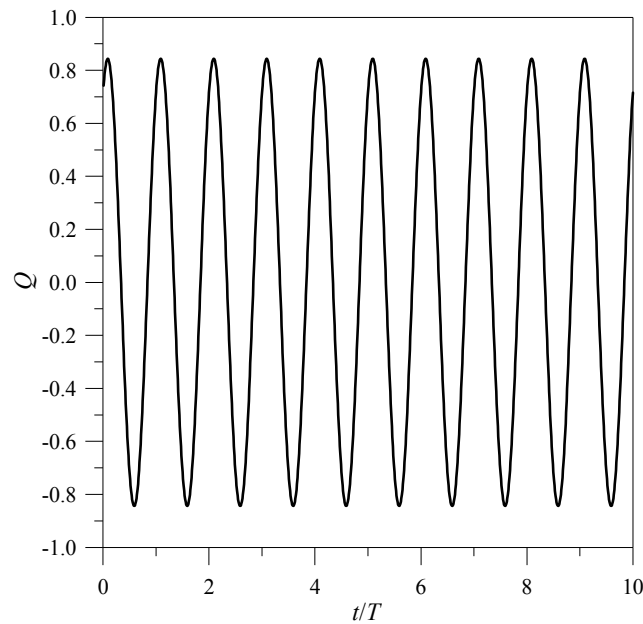


Figura 11.28 – Evolução do caudal de entrada (Q) em função do tempo para condições puramente oscilantes ($L^2 = 100$, $\beta = 0.1$ e $AK = 1.0$).

De acordo com os resultados obtidos, conclui-se que aplicando condições puramente oscilatórias a um escoamento que esteja em situação assimétrica, passado um determinado tempo de adaptação, a configuração assimétrica passa a simétrica e estacionária, para ambos os casos analisados ($De = 0.5$ e 0.6). Verifica-se que inicialmente há uma forte variação do valor de ψ_c , devido à formação e dissipação de vórtices na zona central do cruzamento dos canais, mas após uns quatro ciclos as condições puramente oscilantes aplicadas nas entradas tendem a atenuar os picos de ψ_c . Acima de uns seis ciclos, o escoamento já se encontra estabilizado, e fica simétrico com $\psi_c = 0.5$. Assim, resultados similares aos de Phelan *et al.* [114] não foram aqui verificados. O que mostra que a configuração destes autores, com entrada simultânea pelo canal vertical superior e horizontal da direita, é radicalmente diferente no que respeita a capacidade de mistura quando comparada com o aqui utilizado, onde a entrada simultânea se faz pelas extremidades direita e esquerda do canal horizontal. No caso de Phelan *et al.* [114] há cruzamento das linhas de corrente na zona central, enquanto no caso presente o ponto central é sempre um ponto de estagnação.

11.4 – Conclusões

Neste capítulo apresentou-se um estudo do escoamento viscoelástico em regime variável cíclico de forma a avaliar qual o efeito provocado sobre o padrão do escoamento, quando este já se encontra assimétrico sob regime permanente correspondente. De acordo com os resultados obtidos, verificou-se que o escoamento se torna mais complexo quando se implementam condições de gradiente de pressão oscilantes na entrada da geometria em forma de cruz. Contudo, não se pode afirmar que estas condições propiciem uma boa mistura do escoamento na região central do cruzamento dos canais, antes deste progredir em direção às saídas. Verificou-se que o aumento do período oscilatório, T , tem um efeito atenuador sobre a instabilidade e tendência para assimetria do escoamento viscoelástico, fazendo com que o valor máximo de ψ_c obtido ao longo de um ciclo diminua. Por outro lado, o crescimento inicial do parâmetro oscilatório AK , que representa a razão entre as magnitudes oscilatória e estacionária do gradiente de pressão à entrada, provoca um aumento no valor máximo da função de corrente no ponto central ψ_c , para valores de $AK = 0.5$ e 1.0 , sendo esse máximo obtido para tempos mais tardios no ciclo. No entanto, quando AK toma o valor de 1.5 a assimetria do escoamento desaparece, com ψ_c a assumir um valor constante de 0.5 ao longo de todo o ciclo. Uma vez que a maioria das simulações foram obtidas para $Re = 0$ fez-se um estudo sobre a influência deste parâmetro no escoamento. Para isso, foram simulados alguns casos fazendo variar ligeiramente o número de Reynolds e observou-se que para valores próximos de zero ($Re = 0.001$ e 0.01) a evolução de ψ_c era muito próxima. No entanto, aumentando o valor de Re para 0.1 isso já não se verificou, sendo agora o valor máximo de ψ_c superior em relação ao valores máximos de ψ_c obtidos para Re inferiores e ocorrendo mais cedo no ciclo. Aumentando Re acima deste valor ($Re = 0.1$) a tendência que se verifica é uma atenuação na evolução de ψ_c até que o escoamento fica completamente simétrico, para $Re = 5.0$.

A análise da influência do parâmetro de extensibilidade, L^2 , sobre o escoamento mostra que este tem um efeito contrário ao de Re . Isto é, existe uma atenuação de ψ_c quando L^2 diminui, de tal forma que para $L^2 = 50$ o escoamento volta a ficar simétrico. Em relação a elasticidade, medida pelo número de Débora, verifica-se que o valor máximo de ψ_c aumenta, em geral, com o crescimento de De .

Para finalizar, considerando apenas condições puramente oscilatórias na entrada dos canais, sem qualquer componente estacionária do gradiente de pressão, verificou-se que a configuração assimétrica desaparece durante o período transitório de estabelecimento do escoamento, passando este a ficar sempre simétrico e cíclico nos casos aqui analisados ($De = 0.5$ e 0.6). Observam-se inicialmente fortes oscilações na evolução de ψ_c , mas as condições puramente oscilatórias impostas à entrada vão atenuando essas oscilações bruscas até se atingir a configuração simétrica, ou seja, ψ_c constante e igual a 0.5 .

Capítulo 12

Conclusões e sugestões para trabalho futuro

Este capítulo dá por terminado este trabalho, encerrando com a exposição das conclusões mais relevantes a partir dos resultados apresentados ao longo do trabalho, indicando-se, também, algumas sugestões para trabalhos futuros que poderão dar seguimento a este. Pode ainda destacar-se que os objectivos inicialmente propostos foram maioritariamente alcançados.

12.1 - Conclusões

O principal contributo desta tese consistiu na análise de determinados tipos de instabilidades puramente elásticas ou inércio/elásticas que surgem quando fluidos não newtonianos com características viscoelásticas fluem através de dois tipos de configuração geométrica: uma geometria com expansão plana de razão 1:4, e um cruzamento de canais planos 2D e 3D. A discretização das equações de governo foi feita utilizando o método dos volumes finitos juntamente com a aplicação de um esquema de alta resolução (CUBISTA), por forma a ser possível obter resultados com boa precisão numérica. Dois novos modelos constitutivos reológicos de tipo diferencial foram implementados no programa de computador que faz as simulações, o modelo FENE-CR e o modelo FENE-P, tendo sido testados em exercícios de verificação preliminares. De seguida, passam-se a citar as principais conclusões que advêm dos estudos apresentados ao longo desta tese. Começando pelo estudo apresentado no Capítulo 6, sobre o comportamento de escoamentos newtoniano e não newtoniano viscoelástico através de uma geometria plana com razão de expansão 1:4, verificou-se que o padrão de escoamento fica assimétrico para valores do número de Reynolds acima de um certo valor crítico (Re_{cr}). No caso do escoamento newtoniano a assimetria ocorre para valores acima de $Re_{cr} \approx 36$, enquanto no escoamento viscoelástico esse fenómeno verifica-se para valores superiores a $Re_{cr} \approx 46$ (com $L^2 = 100$, $We = 2$ e $\beta = 0.5$). Portanto, conclui-se que a elasticidade presente no fluido atrasa o processo de assimetria do escoamento. Aumentando o número de Re após a bifurcação, para a gama de valores simulados ($0.01 \leq Re \leq 100$), verificou-se o aparecimento de uma terceira recirculação do escoamento, já mais distante da zona de expansão, para os dois tipos de escoamento (newtoniano e viscoelástico). Esta nova recirculação forma-se na parede do canal de saída oposta aquela onde ocorre a maior recirculação primária e o seu tamanho aumenta com o número de Reynolds. Este fenómeno é controlado por um segundo número de Reynolds crítico Re_{cr2} . No caso newtoniano essa recirculação aparece para valores de Reynolds superiores a 64, enquanto no caso viscoelástico só se verifica para valores de Re superiores a 73.5. Mais uma vez se constata que a elasticidade tem um efeito estabilizador e atrasa o aparecimento desta nova recirculação. Analisando os resultados do estudo sobre a influência da razão de viscosidades do solvente β observa-se que este parâmetro afecta de forma marcante o escoamento. Para a condição particular de $Re = 40$, com β a assumir valores entre 0.3 e 1.0 (a que corresponde o fluido newtoniano), o efeito que se verificou foi que à medida que β diminui o escoamento tende a

tornar-se simétrico. Mais concretamente, as previsões mostram que para valores de $\beta \leq 0.8$ o escoamento é simétrico, mas para valores de $\beta > 0.8$ o escoamento passa a ficar assimétrico. A Figura 6.16 ilustra esse efeito. Isto explica-se pelo facto de valores baixos de β corresponderem a uma maior concentração de polímero na mistura e, como a elasticidade tende a atenuar a assimetria do escoamento, uma diminuição de β tenderá a reduzir o aparecimento desse fenómeno. Procedeu-se ainda a uma variação do parâmetro de extensibilidade L^2 , entre 100 e 500, de forma a avaliar qual o efeito provocado no escoamento. De acordo com os resultados previstos, simulando um caso em que o escoamento já se encontrava assimétrico ($Re = 40$, $We = 2$ e $\beta = 0.9$), verificou-se que a variação deste parâmetro é pouco significativa.

Passando ao estudo apresentado no Capítulo 7, referente ao escoamento através de um cruzamento de canais planos, observou-se que mesmo sendo a geometria simétrica o escoamento viscoelástico bifurca para valores do número de Débora superiores a um certo valor crítico (De_{cr}). Nesta geometria, ao contrário da expansão plana do capítulo anterior, a elasticidade actua de forma a despoletar a bifurcação e a fazer aumentar a assimetria do escoamento, tratando-se de um fenómeno puramente elástico, uma vez que a inércia é desprezada (usou-se $Re = 0$). Para valores de De inferiores a De_{cr} o escoamento mantém-se simétrico e estacionário, enquanto para valores acima de De_{cr} o escoamento passa a ter uma configuração assimétrica mas mantém-se estacionário. Este parâmetro define o ponto de transição entre o escoamento simétrico e assimétrico. Contudo, De_{cr} depende de ambos os parâmetros β (concentração polimérica) e L^2 (extensibilidade elástica). À medida que se aumenta a extensibilidade do fluido, medida pelo parâmetro L^2 , há uma tendência para se antecipar o aparecimento da bifurcação do escoamento, acelerando-se, deste modo, a instabilidade que conduz à sua ocorrência. Em termos concretos, a redução do valor crítico de De é quantificada como: para $L^2 = 100$ tem-se $De_{cr} \approx 0.46$, e para $L^2 = 200$ tem-se $De_{cr} \approx 0.41$, com $\beta = 0.1$ fixo. Por sua vez, a concentração polimérica, através do parâmetro β , tem um forte efeito sobre o escoamento: para $\beta = 0.20$, com $L^2 = 100$, o escoamento é simétrico e estável até valores de De inferiores a $De_{cr} \approx 0.68$, mas se β diminuir para 0.10 (aumentando-se a concentração polimérica) a assimetria do escoamento surge para valores de De muito mais baixos ($De_{cr} \approx 0.46$).

De forma a avaliar se os cantos salientes (sem arredondamento) da geometria estão na base do mecanismo que provoca a assimetria do escoamento fez-se um estudo para dois casos

com arredondamento, um ligeiro e outro mais intenso. Como é sabido, os cantos salientes conduzem a uma forte concentração de tensões no fluido que se move em seu redor, as quais poderão alterar a configuração do escoamento. Dos resultados obtidos, verificou-se que apesar de se arredondar os cantos da geometria, o escoamento continua a apresentar padrões assimétricos acima de um certo valor do número de Débora (De_{cr}). Os valores de De_{cr} são praticamente os mesmos para o caso sem arredondamento e o caso em que o arredondamento é ligeiro. Este resultado mostra que as concentrações de tensões junto aos cantos, ou seja, as singularidades locais criadas pelos cantos, não são responsáveis pelo despoletar da bifurcação. Acentuando o arredondamento dos cantos observou-se que provoca um atraso na bifurcação do escoamento. Este efeito está certamente relacionado com a alteração significativa do campo de velocidades, uma vez que implica uma redução antecipada da taxa de deformação ao longo da linha central próximo do ponto de estagnação.

Os efeitos tridimensionais do escoamento viscoelástico foram analisados no Capítulo 8. O intuito deste estudo era verificar de que forma é que as paredes de fundo alteravam a configuração da assimetria do escoamento que ocorria no caso bidimensional. De acordo com os resultados tridimensionais obtidos, observou-se que, da mesma forma que se verificou no caso 2D, existe uma assimetria do escoamento mesmo em condições geométricas perfeitamente simétricas. Contudo, os valores previstos para o número de Débora crítico são diferentes dos que aconteciam no caso 2D. Na geometria 3D com razão de aspecto $AR = 1$ (secção quadrada) o escoamento manteve-se sempre simétrico e sem sinais de bifurcação, mas para valores de $De \geq 0.52$ passou a ficar dependente do tempo. Nas outras duas alterações geométricas testadas, em que AR tomou valores de 2 e 4 (secções rectangulares), ocorreram duas instabilidades no escoamento: uma em que o escoamento fica assimétrico e estacionário; e outra situação em que o escoamento está assimétrico mas não estacionário (isto é, o campo de velocidades dependente do tempo). Em geral, pode concluir-se que a presença das paredes de fundo, que conduzem ao aparecimento de escoamentos secundários de carácter tridimensional, tende a estabilizar globalmente o escoamento e a retardar o ponto crítico de transição para o regime assimétrico do escoamento.

No Capítulo 9 simulou-se o escoamento através de um cruzamento de canais planos onde apenas se fez variar o número de Reynolds para fluido newtoniano. O objectivo deste estudo foi aferir que possíveis efeitos inerciais possam existir no escoamento nesta geometria, uma vez que nos estudos anteriores tinham sido desprezados ($Re = 0$). Pode concluir-se, com base nos resultados obtidos, que o efeito de inércia provoca o aparecimento de recirculações nas paredes dos canais de saída coladas junto aos cantos do cruzamento dos canais. O

tamanho destas recirculações aumenta de forma linear com o crescimento do número de Reynolds, mantendo-se um padrão simétrico até ao ponto em que ocorre uma bifurcação que se revela como uma assimetria do escoamento para valores de Reynolds acima de $Re_{cr} \approx 1500$. Observou-se também que após a bifurcação do escoamento, com o aparecimento de uma recirculação maior num dos lados da parede em relação à parede oposta, a recirculação mais pequena tende a manter-se constante com o aumento do número de Reynolds, ao passo que a recirculação maior continua a aumentar de comprimento. Esta assimetria inercial do caso newtoniano é diferente da assimetria elástica e sem inércia. Enquanto no primeiro continua a haver simetria em torno do plano horizontal que passa nas entradas, no segundo a simetria que se mantém é em torno dos planos diagonais que passam nos cantos dos cruzamentos.

Os resultados das previsões para o escoamento viscoelástico através de um cruzamento de canais modificado são apresentados e discutidos no Capítulo 10. Neste estudo pretendia-se verificar se a fina camada de tensões que aparece na zona central do cruzamento dos canais estava na origem do mecanismo que provoca a assimetria do escoamento viscoelástico. Esta camada apresenta uma forte concentração de tensões normais, forma-se no ponto de estagnação e estende-se em direcção aos canais de saída. Para isso, alterou-se a geometria de forma a limitar o comprimento dessa camada. Observou-se que, mesmo confinando o comprimento possível da camada de tensões nos canais de saída da geometria, continua a ocorrer a instabilidade que conduz à assimetria do escoamento. Isto dá indicação que a bifurcação do escoamento não está directamente ligada com a formação dessa camada. Contudo, os valores críticos do número de Débora são ligeiramente diferentes para ambas as situações (geometria padrão e geometria modificada), o que deverá estar relacionado com diferenças da taxa extensional perto da região central do cruzamento dos canais.

Para finalizar, destacam-se as principais conclusões do estudo do escoamento em regime não estacionário através de um cruzamento de canais planos bidimensional, apresentado no Capítulo 11. Neste problema impôs-se na entrada dos canais um campo de velocidades pulsante e pretendeu-se verificar qual o efeito que estas condições provocariam sobre a estabilidade do escoamento, nomeadamente quando este já se encontra assimétrico. Os resultados mostraram que estas condições tornam o escoamento mais complexo e que a configuração assimétrica altera-se significativamente ao longo do ciclo da pulsação imposta. Pela visualização das linhas de corrente do escoamento observou-se que em certos casos, indicados por valores da função de corrente no ponto central (ψ_c) acima de 1, formavam-se na região central do cruzamento dos canais duas bolhas de recirculação do escoamento. O

aumento do período provoca uma redução no valor máximo de ψ_c e o crescimento do parâmetro oscilatório (razão entre os gradientes de pressão estacionário e oscilatório, AK) tende a tornar o escoamento simétrico. Por exemplo, para $AK = 1$ o escoamento apresenta uma assimetria, mas para $AK = 1.5$ torna-se simétrico, nas condições de $De = 0.6$ e $T = 1.0$. Para valores de Reynolds próximos de zero o aumento da inércia tende a aumentar o valor máximo de ψ_c , mas para valores de Re acima de 0.1 a tendência é começar a atenuar o valor máximo de ψ_c , de forma a que para $Re = 5.0$ o escoamento fica simétrico. Por último, em qualquer uma das simulações efectuadas considerando condições puramente oscilatórias (sem gradiente de pressão estacionário imposto à entrada) e partindo de um estado inicial correspondente a escoamento assimétrico, observou-se que ao fim de poucos ciclos o escoamento ficava sempre simétrico.

12.2 – Sugestões para trabalho futuro

Após a realização de um trabalho de doutoramento é normal surgirem novas ideias para trabalhos futuros que permitam dar seguimento aos estudos realizados. De seguida, apresentam-se algumas sugestões nesse sentido. Começando pela geometria com expansão plana 1:4, e uma vez que as simulações apresentadas foram obtidas para o caso bidimensional, seria interessante analisar os efeitos tridimensionais neste escoamento, o que implica passar para o caso da geometria tridimensional. Por outro lado, como a geometria apresenta uma configuração plana, seria útil estudar a configuração axissimétrica que ocorre em diversos processos com aplicação industrial como, por exemplo, na injeção e extrusão de polímeros, através de tubos de secção circular. Dando ainda continuidade ao estudo nesta geometria poder-se-ia continuar a aumentar o número de Reynolds de forma a obter-se o próximo ponto crítico a partir do qual o escoamento passaria ao regime turbulento ou então à condição não estacionária.

No caso da geometria formada por um cruzamento de canais planos os estudos aqui apresentados já foram mais explorados. Contudo, no escoamento dependente do tempo (pulsante) seria útil definir uma variável que medisse, de forma adequada, a mistura do escoamento na região central do cruzamento dos canais. Este parâmetro seria benéfico para avaliar qual a quantidade exacta de fluido que se mistura na região central dos canais quando os fluxos de caudal de entrada se cruzam. Seria também interessante alterar a configuração geométrica dos canais e estudar o escoamento viscoelástico num cruzamento de canais axissimétricos.

Referências bibliográficas

- [1] Abbott, D.E. e S.J. Kline (1962). Experimental investigation of subsonic turbulent flow over single and double backward facing steps. *J. Basic Eng.* **84**: 317-325.
- [2] Abedijaberi, A., J. Soulages, M. Kröger e B. Khomami (2009). Flow of branched polymer melts in a lubricated cross-slot channel: a combined computational and experimental study. *Rheol. Acta* **48**: 97-108.
- [3] Aboubacar, M., H. Matallah e M.F. Webster (2002). Highly elastic solutions for Oldroyd-B and Phan-Thien/Tanner fluids with a finite volume/element method: planar contraction flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **103**: 65-103.
- [4] Afonso, A., M.A. Alves, F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2008). Uniform flow of viscoelastic fluids past a confined falling cylinder. *Rheol. Acta* **47**: 325-348.
- [5] Alleborn, N., K. Nandakumar, H. Raszillier e F. Durst (1997). Further contributions on the two-dimensional flow in a sudden expansion. *J. Fluid Mech.* **330**: 169-188.
- [6] Alves, M.A. (2004). Escoamentos de fluidos viscoelásticos em regime laminar: análise numérica, teórica e experimental. *Tese de doutoramento*, FEUP, Porto, Portugal.
- [7] Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2003). A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **41**: 47-75.
- [8] Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2003). Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **110**: 45-75.
- [9] Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2004). On the effect of contraction ratio in viscoelastic flow through abrupt contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **122**: 117-130.
- [10] Alves, M.A., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2005). Visualizations of Boger fluid flows in a 4:1 square/square contraction. *AIChE Journal* **51**(11): 2908-2922.
- [11] Alves, M.A., F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2000). Effect of high-resolution differencing scheme on finite-volume method predictions of viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **93**: 287-314.
- [12] Alves, M.A., F.T. Pinho e P. J. Oliveira (2001). Study of steady pipe and channel flows of a single-mode Phan-Thien-Tanner fluid. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **101**: 55-76.
- [13] Alves, M.A. e R.J. Poole (2007). Divergent flow in contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **144**: 140-148.
- [14] Apostol, T.M. (1969). *Calculus*, Volume II: Multi Variable Calculus and Linear Algebra, with Applications to Differential Equations and Probability (Second Edition). John Wiley & Sons.
- [15] Arratia, P.E., C.C. Thomas, J. Diorio e J.P. Gollub (2006). Elastic instabilities of polymer solutions in cross-channel flow. *Phys. Rev. Lett.* **96**: 144502.
- [16] Baaijens, F.P.T. (1998). Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**(2): 361-385.
- [17] Baloch, A., P. Townsend e M.F. Webster (1996). On vortex development in viscoelastic expansion and contraction flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **65**: 133-149.

- [18] Barnes, H.A., J.F. Hutton e K. Walters (1989). *An Introduction to Rheology*. Elsevier Science Publishers, Amsterdam.
- [19] Battaglia, F., S.J. Tavener, A.K. Kulkarni e C.L. Merkle (1997). Bifurcation of low Reynolds number flows in symmetric channels. *AIAA Journal* **35**(1): 99-105.
- [20] Bell, B.C. e K.S. Surana (1994). p-Version least squares finite element formulation for two-dimensional, incompressible, non-Newtonian isothermal and non-isothermal fluid flow. *Int. J. Numer. Methods Fluids* **18**: 127-162.
- [21] Bird, R.B., R.C. Armstrong e O. Hassager (1977). *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol 1: Fluid Mechanics*. John Wiley & Sons, New York.
- [22] Bird, R.B., C.F. Curtiss, R.C. Armstrong e O. Hassager (1987). *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol. 2: Kinetic Theory*. 2nd Edition, John Wiley & Sons, New York.
- [23] Bird, R.B., P.J. Dotson e N.L. Johnson (1980). Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead-spring chain model. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **7**: 213-235.
- [24] Bird, R.B. e T.W. Spriggs (1965). Elongational viscosity of viscoelastic fluids. *Phys. Fluids* **8**: 1390-1392.
- [25] Bird, R.B., W.E. Stewart e E.N. Lightfoot (2002). *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, 2nd Ed., New York.
- [26] Bird, R.B. e J.M. Wiest (1995). Constitutive equations for polymeric liquids. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **27**: 169-193.
- [27] Boger, D.V. e K. Walters (1993). *Rheological Phenomena in Focus*. Rheology Series, vol. 4, Elsevier.
- [28] Byars, J.A., A. Oztekin, R.A. Brown e G.H. McKinley (1994). Spiral instabilities in the flow of highly elastic fluids between rotating parallel disks. *J. Fluids* **271**: 173-218.
- [29] Cartalos, U. e J.M. Piau (1992). Creeping flow regimes of low concentration polymer solutions in thick solvents through an orifice die. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **45**: 231-285.
- [30] Cherdron, W., F. Durst e J.H. Whitelaw (1978). Asymmetric flows and instabilities in symmetric ducts with sudden expansions. *J. Fluid Mech.* **84**: 13-31.
- [31] Chilcott, M.D. e J.M. Rallison (1988). Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **29**: 381-432.
- [32] Coates, P.J., R.C. Armstrong e R.A. Brown (1992). Calculation of steady-state viscoelastic flow through axisymmetric contraction with the EEME formulation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **42**: 141-188.
- [33] Courant, R., E. Isaacson e M. Rees (1982). On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite differences. *Comm. Pure Appl. Math.* **5**: 243-255.
- [34] Coventry, K.D. e M.R. Mackley (2008). Cross-slot extensional flow birefringence observations of polymer melts using a multi-pass rheometer. *J. Rheol.* **52**(2): 401-415.
- [35] Crochet, M.J., A.R. Davies e K. Walters (1984). *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*. Ed. Elsevier, Amsterdam.
- [36] Crochet, M.J. e G. Pilate (1976). Plane flow of a fluid of second grade through a contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **1**: 247-258.
- [37] Cruz, D.O.A., F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2005). Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a Newtonian solvent contribution. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **132**: 28-35.
- [38] Darwish, M.S. e F. Moukalled (1997). Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes. *Numer. Heat Transfer B* **26**: 79-96.

- [39] Darwish, M.S., J.R. Whiteman e M.J. Bevis (1992). Numerical modelling of viscoelastic liquids using a finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **45**: 311-337.
- [40] De Souza, P.H.R., R.C. de Lima e J.B.C. Silva (2004). *Simulação numérica do escoamento de um fluido numa expansão assimétrica pelo método de elementos finitos baseado em volumes de controle*. XI CREEM, ABCM, Brasil.
- [41] De Zilwa, S.R.N., L. Khezzer e J.H. Whitelaw (2000). Flows through plane sudden-expansions. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **32**: 313-329.
- [42] Drikakis, D. (1997). Bifurcation phenomena in incompressible sudden expansion flows. *Phys. Fluids* **9**(1): 76-87.
- [43] Duarte, A.S.R., A.I.P. Miranda e P.J. Oliveira (2008). Numerical and analytical modeling of unsteady viscoelastic flows: The start-up and pulsating test case problems. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **154**: 153-169.
- [44] Durst, F., A. Melling e J.H. Whitelaw (1974). Low Reynolds number flow over a plane symmetric sudden expansion. *J. Fluid Mech.* **84**: 111-128.
- [45] Durst, F., J.C.F. Pereira e C. Tropea (1993). The plane symmetric sudden-expansion flow of low Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.* **248**: 567-581.
- [46] Fan, Y., R.I. Tanner e N. Phan-Thien (1999). Galerkin/least-square finite-element methods, for steady viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **84**: 233-256.
- [47] Fearn, R.M., T. Mullin e K.A. Cliffe (1990). Nonlinear flow phenomena in a symmetric sudden expansion. *J. Fluid Mech.* **211**: 595-608.
- [48] Feng, J. e L.G. Leal (2000). Transient extension and relaxation of a dilute polymer solution in a four-roll mill. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **90**: 117-123.
- [49] Ferziger, J.H. e M. Perić (1996). *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, Berlin.
- [50] Foumeny, E.A., D.B. Ingham e A.J. Walker (1996). Bifurcations of incompressible flow through plane symmetric channel expansions. *Computers & Fluids* **25**(3): 335-351.
- [51] Gaskell, P.H. e A.K.C. Lau (1988). Curvature compensated convective transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **8**: 617-641.
- [52] Giesekus, H. (1962). Elasto-viskose Flüssigkeiten, für die in stationären Schichtströmungen Sämtliche Normalspannungskomponenten verschieden groß sind. *Rheologica Acta* **2**: 50-62.
- [53] Giesekus, H. (1982). A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of the deformation dependent tensorial mobility. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **11**: 69-109.
- [54] Gomes de Castro, A., J.A. Covas e A.C. Diogo (2001). *Reologia e suas Aplicações Industriais*. Ciência e Técnica, Instituto Piaget, Lisboa.
- [55] Halmos, A.L. e D.V. Boger (1975). The behaviour of a power law fluid flowing through a sudden expansion. Part II. Experimental verification. *AIChEJ* **21**: 550-553.
- [56] Halmos, A.L. e D.V. Boger (1976). Flow of viscoelastic polymer solutions through an abrupt 2-to-1 expansion. *Trans. Soc. Rheol.* **20**: 253-264.
- [57] Halmos, A.L., D.V. Boger e A. Cabelli (1975). The behaviour of a power law fluid flowing through a sudden expansion. Part I. Numerical solution. *AIChEJ* **21**: 540-549.
- [58] Harlen, O.G., J.M. Rallison e M.D. Chilcott (1990). High-Deborah-number flows of dilute polymer solutions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **34**: 319-349.

- [59] Hassell, D.G., D. Auhl, T.C.B. McLeish e M.R. Mackley (2008). The effect of viscoelasticity on stress fields within polyethylene melt flow for a cross-slot and contraction-expansion slit geometry. *Rheol. Acta* **47**: 821-834.
- [60] Hawa, T. e Z. Rusak (2001). The dynamics of a laminar flow in a symmetric channel with a sudden expansion. *J. Fluid Mech.* **436**: 283-320.
- [61] Herrchen, M. e H.C. Öttinger (1997). A detailed comparison of various FENE dumbbell models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **68**: 17-42.
- [62] Housiadas, K.D. e A.N. Beris (2006). Extensional behaviour influence on viscoelastic turbulent channel flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **140**: 41-56.
- [63] Hu, H.H. e D.D. Joseph (1990). Numerical simulation of viscoelastic flow past a cylinder. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **37**: 347-377.
- [64] Huang, X., N. Phan-Thien e R.I. Tanner (1996). Viscoelastic flow between eccentric rotating cylinders: unstructured control volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **64**: 71-92.
- [65] Issa, R.I. e P.J. Oliveira (1994). Numerical predictions of phase separation in two-phase flow through T-junctions. *Comput. Fluids* **23**: 347-372.
- [66] James, D.F. (2009). Boger Fluids. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **41**: 129-142.
- [67] Joo, Y.L. e E.S.G. Shaqfeh (1991). Viscoelastic Poiseuille flow through a curved channel: A new elastic instability. *Phys. Fluids A* **3**(9): 2043-2046
- [68] Keunings, R. (1997). On the peterlin approximation for finitely extensible dumbbells. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **68**: 85-100.
- [69] Khosla, P.K. e S.G. Rubin (1974). A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. *Comput. Fluids* **2**: 207-209.
- [70] Kramers, H.A. (1944). The viscosity of macromolecules in a streaming fluid. *Physica* **11**: 1-19.
- [71] Larson, R.G. (1988). *Constitutive Equations for Polymer Melts Solutions*. Butterworths, London.
- [72] Larson, R.G. (1991). Review: instabilities in viscoelastic flows. *Rheo. Acta* **31**: 213-263.
- [73] Larson, R.G., E.S.G. Shaqfeh e S.J. Muller (1990). A purely elastic instability in Taylor-Couette flow. *J. Fluid Mech.* **218**: 573-600.
- [74] Laudau, L.D. e E.M. Lifshitz (1959). *Fluid Mechanics*, Pergamon Press, Addison-Wesley: London, Reading, MA. Translation from Russian edition of 1953; 95.
- [75] Lee, I.C.Y., N. Kapur, P.H. Gaskell, M.D. Savage e G.M. Homsy (2002). Birefringent strands in polymer flows in a co-rotating two-roll mill. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **104**: 33-51.
- [76] Leonard, B.P. (1988). Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **8**: 1291-1318.
- [77] Leonard, B.P. (1991). The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **88**: 17-74.
- [78] Lielens, G., R. Keunings e V. Legat (1999). The FENE-L and FENE-LS closure approximations to the kinetic theory of finitely extensible dumbbells. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **87**: 179-196.
- [79] Manica, R. e A.L. de Bortoli (2004). Simulation of sudden expansion flows for power-law fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **121**: 35-40.
- [80] McKinley, G.H., P. Pakdel e A. Oztekin (1996). Rheological and geometric scaling of purely elastic flow instabilities. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **67**: 19-47.
- [81] McLeish, T.C.B. e R.G. Larson (1998). Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer. *J. Rheol.* **42**: 81-110.

- [82] Meijerink, J.A. e H.A. Van der Vorst (1977). An iterative solution method for linear system which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix. *Math. Comp.* **31**(137): 148-162.
- [83] Miranda, A.I.P. (2007). Modelação matemática de escoamentos não estacionários de fluidos complexos com vista a aplicações hemodinâmicas. *Tese de doutoramento*, Universidade da Beira Interior.
- [84] Miranda, A.I.P., P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2008). Steady and unsteady laminar flows of newtonian and generalized newtonian fluids in a planar T-junction. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **57**: 295-328.
- [85] Mishra, S. e K. Jayaraman (2002). Asymmetric flows in planar symmetric channels with large expansion ratio. *Int. J. Numer. Methods Fluids* **38**: 945-962.
- [86] Missirlis, K.A., D. Assimacopoulos e E. Mitsoulis (1998). A finite volume approach in the simulation of viscoelastic expansion flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **78**: 91-118.
- [87] Mompean, G. e M. Deville (1997). Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **72**: 253-279.
- [88] Neofytou, P. e D. Drikakis (2003). Non-Newtonian flow instability in a channel with sudden expansion. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **111**: 127-150.
- [89] Oldroyd, J.G. (1950). On the formulation of rheological equations of state. *Proc. R. Soc. Lond. A* **200**: 523-541.
- [90] Oldroyd, J.G. (1955). The effect of interfacial stabilizing films on the elastic and viscous properties of emulsions. *Proc. R. Soc. Lond. A* **232**: 567-577.
- [91] Oliveira, P.J. (1992). Computer Modelling of Multidimensional Multiphase Flow and Applications to T-junctions. *PhD Thesis*, Imperial College, University of London.
- [92] Oliveira, P.J. (1999). *Métodos Numéricos em Engenharia*. Reprografia da Universidade da Beira Interior, Departamento de Eng.^a Electromecânica.
- [93] Oliveira, P.J. (2000). *Justification for using a variable Deborah number function of the shear-rate to characterise viscoelastic fluids*. 2º Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Reologia, Porto, Portugal.
- [94] Oliveira, P.J. (2001). Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: vortex shedding behind cylinder. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **101**: 113-137.
- [95] Oliveira, P.J. (2001). On the numerical implementation of nonlinear viscoelastic models in a finite-volume method. *Numer. Heat Transfer B* **40**: 283-301.
- [96] Oliveira, P.J. (2002). An exact solution for tube and slit flow of a FENE-P fluid. *Acta Mechanica* **158**: 157-167.
- [97] Oliveira, P.J. (2003). Asymmetric flows of viscoelastic fluids in symmetric planar expansion geometries. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **114**: 33-63.
- [98] Oliveira, P.J. (2009). Alternative derivation of differential constitutive equations of Oldroyd-B type. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **160**: 40-46.
- [99] Oliveira, P.J., P.M. Coelho e F.T. Pinho (2004). The Graetz problem with viscous dissipation for FENE-P fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **121**: 69-72.
- [100] Oliveira, P.J. e A.I.P. Miranda (1996). *Manual for the Flow Code ONEPF*, relatório para o projecto PBIC/C/QUI/1980/95.
- [101] Oliveira, P.J. e A.I.P. Miranda (2005). A numerical study of steady and unsteady viscoelastic flow past bounded cylinders. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **127**: 51-66.
- [102] Oliveira, P.J. e F.T. Pinho (1999). Numerical procedure for the computation of fluid flow with arbitrary stress-strain relationships. *Numerical Heat Transfer, Part B* **35**: 295-315.

- [103] Oliveira, P.J., F.T. Pinho e G.A. Pinto (1998). Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**: 1-43.
- [104] Oliveira, M.S.N., F.T. Pinho, R.J. Poole, P.J. Oliveira e M.A. Alves (2009). Purely elastic flow asymmetries in flow-focusing devices. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **160**: 31-39.
- [105] Owens, R.G. e T.N. Phillips (2005). *Computational Rheology*. Imperial College Press, London.
- [106] Pakdel, P. e G.H. McKinley (1996). Elastic instability and curved streamlines. *Phys. Rev. Lett.* **77**: 2459.
- [107] Patankar, S.V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC.
- [108] Patankar, S.V. e D.B. Spalding (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Transfer* **25**: 17-87.
- [109] Perera, M.G.N. e K. Walters (1977). Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry: Part I: flows associated with I-shaped and T-shaped geometries. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **2**: 49-81.
- [110] Peterlin, A. (1966). Hydrodynamics of macromolecules in a velocity field with longitudinal gradient. *J. Polym. Sci. Part B – Polym. Lett.* **4B**: 287-291.
- [111] Peters, G.W.M., J.F.M. Schoonen, F.P.T. Baaijens e H.E.H. Meijer (1999). On the performance of enhancement constitutive models for polymer melts in a cross-slot flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **82**: 387-427.
- [112] Phan-Thien, N. (1978). A non-linear network viscoelastic model. *J. Rheol.* **22**: 259-283.
- [113] Phan-Thien, N. e R.I. Tanner (1977). A new constitutive equation derived from network theory. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **2**: 353-365.
- [114] Phelan, F.R., N.R. Hughes e J. A. Phatak (2008). Chaotic mixing in microfluidic devices driven by oscillatory cross flow. *Physics of Fluids* **20**: 023101.
- [115] Phillips, T.N. e A.J. Williams (1999). Viscoelastic flow through a planar contraction using semi-Lagrangian finite volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **87**: 215-246.
- [116] Pinho, F.T. e P.J. Oliveira (2001). A metodologia dos volumes finitos aplicada à reologia computacional: I – Introdução. *e-rheo.pt* **1**: 1-15.
- [117] Poole, R.J., M.A. Alves, A.P. Afonso, F.T. Pinho e P.J. Oliveira (2007). *Purely-elastic flow instabilities in a microfluidic cross-slot geometry*. AIChE Annual Meeting, Salt Lake City, USA.
- [118] Poole, R.J., M.A. Alves e P.J. Oliveira (2007). Purely elastic flow asymmetries. *Phys. Rev. Lett.* **99**: 164503.
- [119] Poole, R.J., M.A. Alves, P.J. Oliveira e F.T. Pinho (2007). Plane sudden expansion flows of viscoelastic liquids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **146**: 79-91.
- [120] Poole, R.J., F.T. Pinho, M.A. Alves e P.J. Oliveira (2009). The effect of expansion ratio for creeping expansion flows of UCM fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **163**: 35-44.
- [121] Puangkird, B., F. Belblidia e M.F. Webster (2009). Numerical simulation of viscoelastic fluids in cross-slot devices. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **162**: 1-20.
- [122] Purnode, B. e M.J. Crochet (1998). Polymer solution characterization with the FENE-P model. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **77**: 1-20.
- [123] Purnode, B. e V. Legat (1996). Hyperbolicity and change of type in flows of FENE-P fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **65**: 111-129.

- [124] Remmelgas, J. e L.G. Leal (2000). Computational studies of the FENE-CR model in a two-roll mill. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **89**: 231-249.
- [125] Remmelgas, J., P. Singh e L.G. Leal (1999). Computational studies of nonlinear dumbbell models of Boger fluids in a cross-slot flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **88**: 31-61.
- [126] Rhie, C.M. e W.L. Chow (1983). Numerical study of turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA J.* **21**: 1525-1532.
- [127] Richardson, L.F. (1910). The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Trans. R Soc. Lond.* **210**: 307-357.
- [128] Rocha, G.N. (2005). Estudo numérico de escoamentos de líquidos newtonianos e não newtonianos numa expansão plana. *Tese de Mestrado*, Universidade da Beira Interior, Covilhã.
- [129] Rocha, G.N. e P.J. Oliveira (2005). *Investigação computacional do escoamento viscoelástico numa expansão plana para números de Reynolds baixos e moderados*. Congresso de Métodos Numéricos em Ingeniería (SEMNI e APMTAC), Granada, Espanha.
- [130] Rocha, G.N. e P.J. Oliveira (2006). *Fenómeno da bifurcação em expansões planas com fluidos viscoelásticos*. Conferência Nacional de Métodos Numéricos em Mecânica dos Fluidos e Termodinâmica, Monte de Caparica, Lisboa, Portugal.
- [131] Rocha, G.N., R.J. Poole, M.A. Alves e P.J. Oliveira (2008). *Numerical study of the flow of FENE-CR viscoelastic fluids in a planar cross-slot geometry*. II Conferência Nacional de Métodos Numéricos em Mecânica de Fluidos e Termodinâmica, Aveiro, Portugal.
- [132] Rocha, G.N., R.J. Poole, M.A. Alves e P.J. Oliveira (2009). On extensibility effects in the cross-slot flow bifurcation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **156**: 58-69.
- [133] Rocha, G.N., R.J. Poole e P.J. Oliveira (2007). Bifurcation phenomena in viscoelastic flows through a symmetric 1:4 expansion. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **141**: 1-17.
- [134] Rothstein, J. P. e G.H. McKinley (1999). Extensional flow of a polystyrene Boger fluid through a 4:1:4 axisymmetric contraction/expansion. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **86**: 61-88.
- [135] Schoonen, J.F.M. (1998). Determination of rheological constitutive equations using complex flows. *Ph.D. Thesis*. Technische Universiteit Eindhoven.
- [136] Schoonen, J.F.M., F.H.M. Swartjes, G.W.M. Peters, F.P.T. Baaijens e H.E.H. Meijer (1999). A 3D numerical/experimental study on a stagnation flow of a polyisobutylene solution. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**: 529-561.
- [137] Scott, P.S., F.A. Mirza e J. Vlachopoulos (1986). A finite element analysis of laminar flows through planar and axisymmetric abrupt expansions. *Computers and Fluids* **14**: 423-432.
- [138] Shapira, M., M. Degani e D. Weihs (1990). Stability and existence of multiple solutions for viscous flow in suddenly enlarged channels. *Computers & Fluids* **18**(3): 239-258.
- [139] Singh, P. e L.G. Leal (1995). Finite element simulation of flow around a $3\pi/2$ corner using the FENE dumbbell model. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **58**: 279-313.
- [140] Soulages, J., T. Schweizer, D.C. Venerus, J. Hostettler, F. Mettler, M. Kröger e H.C. Öttinger (2007). Lubricated optical rheometer for the study of two-dimensional complex flows of polymer melts. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **150**: 43-55.
- [141] Soulages, J., T. Schweizer, D.C. Venerus, M. Kröger e H.C. Öttinger (2008). Lubricated cross-slot flow of a low density polyethylene melt. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **154**: 52-64.

- [142] Stone, H.L. (1968). Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations. *SIAM J. Numer. Anal.* **5**: 530-558.
- [143] Stone, H.A., A.D. Stroock e A. Ajdari (2004). Engineering flows in small devices: microfluidics toward a Lab-on-a-chip. *Annu. Rev. Fluid. Mech.* **36**: 381-411.
- [144] Szabo, P., J.M. Rallison e E.J. Hinch (1997). Start-up flow of a FENE-fluid through a 4:1:4 constriction in a tube. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **72**: 73-86.
- [145] Tanner, R.I. (1992). *Engineering Rheology*. Revised edition. Oxford Press, Oxford (UK).
- [146] Ternik, P. (2009). Planar sudden symmetric expansion flows and bifurcation phenomena of purely viscous shear-thinning fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **157**: 15-25.
- [147] Ternik, P., J. Marn e Z. Žunič (2006). Non-Newtonian fluid flow through a planar symmetric expansion: Shear-thickening fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **135**: 136-148.
- [148] Townsend, P. e K. Walters (1994). Expansion flows of non-Newtonian liquids. *Chem. Eng. Sci.* **49**(5): 749-763.
- [149] Van den Brule, B.H.A.A. (1993). Brownian dynamics simulation of finitely extensible bead-spring chains. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **47**: 357-378.
- [150] Van Doormaal, J.P. e G.D. Raithby (1984). Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer Part A: Applications*, **7**: 147-163.
- [151] Verbeeten, W.M.H. (1976). *Computational Polymer Melt Rheology*. Technische Universiteit Eindhoven.
- [152] Verbeeten, W.M.H., G.W.M. Peters e F.P.T. Baaijens (2002). Viscoelastic analysis of complex polymer melt flows using the eXtended Pom-Pom model. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **108**: 301-326.
- [153] Versteeg, H.K. e W. Malalasekera (1995). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Prentice Hall.
- [154] Vinokur, M. (1989). An analysis of finite-difference and finite-volume formulations of conservation laws. *J. Comp. Phy.* **81**: 1-52.
- [155] Wahba, E.M. (2007). Iterative solvers and inflow boundary conditions for plane sudden expansion flow. *Applied Mathematical Modelling* **31**: 2553-2563.
- [156] Warner, H.R. (1972). Kinetic theory and rheology of dilute suspensions of finitely extendible dumbbells. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **11**: 379-387.
- [157] White, Y. (1974). *Viscous Fluid Flow*, McGraw-Hill, New York.
- [158] Xi, L. e M.D. Graham (2009). A mechanism for oscillatory instability in viscoelastic cross-slot flow. *J. Fluid Mech.* **622**: 145-165.
- [159] Yasuda, K., R.C. Armstrong e R.E. Cohen (1981). Shear flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes. *Rheol. Acta* **20**: 163-178.
- [160] Yoo, J.Y. e Y. Na (1991). A numerical study of a planar contraction flow of viscoelastic fluids using the SIMPLER algorithm. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **39**: 89-106.