

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

**Desenvolvimento de uma Metodologia
Numérica para Escoamentos Viscoelásticos
Não-Isotérmicos**

Hemily Munhoz Gentile

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

Presidente Prudente, Junho de 2014

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

Desenvolvimento de uma Metodologia Numérica para Escoamentos Viscoelásticos Não-Isotérmicos

Hemily Munhoz Gentile

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, Junho de 2014

Dedico à minha família,
Vânio, Marisa e Guilherme!

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por iluminar o meu caminho durante todo esse tempo, dando-me força, sabedoria, paciência e persistência durante todo esse período. À Nossa Senhora que me cobre com seu manto sagrado e me guia em todos os dias da minha vida.

A minha família, aos meus pais Vânio Cristovão Gentile e Marisa Henrique Munhoz Gentile, ao meu irmão Guilherme Munhoz Gentile, alicerces da minha vida, que desde sempre nunca mediram esforços para que eu continuasse a estudar. Muito obrigada pela paciência, perseverança, apoio e amor incondicional, de fundamental importância em todos os momentos da minha vida.

Como parte da minha família, agradeço também aos avôs(ós), tios(as), primos(as) pelo apoio, amor e carinho dedicados durante esse período.

Ao meu namorado Vitor pelo amor, companheirismo, paciência e apoio nos momentos finais do mestrado.

Ao Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi pela orientação e contribuição para o meu crescimento científico e profissional.

Aos professores do curso de graduação em Matemática da UEM e os amigos que por lá fiz, pelo apoio e incentivo dados durante o meu curso de graduação.

À todos os professores do posMAC/FCT-UNESP e funcionários da Seção de Pós-Graduação, pelo convívio e ensinamentos no decorrer do curso. Em especial, agradeço à professora Gilcilene Sanchez de Paulo e ao Fernando Pacanelli Martins pela colaboração, paciência e orientação durante todo o trabalho, sendo de fundamental importância para a sua conclusão.

Aos amigos de curso do posMAC: Clóvis, Juliano, Pedro, Reginaldo, José, Alisson, Daiane, Gabriela, Irineu, Luciene, Mariane, Marília, Patricia, Rafael, Renata, Wesley, Adriano, Carol, Crislaine, Gustavo, Heloisa, Jonas, Junior e Rafael pela companhia e constante troca de conhecimento. Aos amigos de São Carlos: Giseli(*in memoriam*), Laís e Rafael, pela ajuda no início do trabalho.

A Pró-Reitoria de Pós-Graduação da Unesp pelo apoio financeiro.

Finalmente agradeço a todos que direta ou indiretamente me ajudaram na elaboração deste trabalho.

“E tudo o que pedirdes na oração,
crendo, o recebereis.”

Mateus 21:22

Resumo

Esta dissertação apresenta uma metodologia para a simulação de escoamentos incompressíveis viscoelásticos não-isotérmicos, onde a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido são dependentes da temperatura. A viscoelasticidade do fluido é modelada pelas equações constitutivas Oldroyd-B e PTT (Phan-Thien-Tanner), onde os parâmetros dependentes da temperatura são modelados pela relação WLF (Williams-Landel-Ferry).

A metodologia numérica empregada para resolver o modelo não-isotérmico é baseada no método MAC para escoamentos viscoelásticos via método de projeção. Nesta metodologia, as equações de Navier-Stokes e as equações constitutivas Oldroyd-B e PTT são discretizadas pelo método de diferenças finitas em uma malha deslocada. A metodologia foi verificada na simulação do escoamento não-isotérmico bidimensional entre placas paralelas *Poiseuille Flow*. Finalmente, a metodologia numérica foi aplicada para resolver o problema da contração 4:1, onde são analisados os efeitos das variações de parâmetros na dinâmica dos vórtices.

Palavras-Chave: Escoamento Não-Isotérmico, Relação WLF, Escoamento Viscoelástico, Equações de Navier-Stokes, Método de Diferenças Finitas.

Abstract

This monograph presents a methodology for simulating non-isothermal viscoelastic incompressible fluid flows where the viscosity and the relaxation time of the fluid are temperature-dependent. The viscoelasticity of the fluid is modeled by the Oldroyd-B and PTT (Phan-Thien-Tanner) models, where the temperature-dependent parameters are modeled by the WLF (Williams-Landel-Ferry) formulation.

The numerical methodology used to solve the non-isothermal model is based on the MAC method for viscoelastic fluid flows via projection method. In this methodology, the Navier-Stokes equations and the Oldroyd-B and PTT constitutive equations are discretized by the finite difference method on a staggered grid. The numerical method was verified by simulation two-dimensional non-isothermal *Poiseuille* flow. Finally, the numerical methodology was applied for solving the 4 : 1 contraction problem in order to analyze the influence of parameters on the vortex dynamic.

Keywords: Non-Isothermal Flows, WLF equation, Viscoelastic flows, Navier-Stokes equations, Finite Differences.

Lista de Figuras

1	Tipos de fronteiras consideradas neste trabalho.	17
2	Representação do armazenamento das propriedades em uma célula de uma malha deslocada.	24
3	Classificação das células para escoamentos confinados.	25
4	Ilustração de uma célula do Injetor paralela ao eixo x	33
5	Ilustração de uma célula do ejetor paralelo ao eixo x	34
6	Ilustração de uma célula de contorno rígido paralelo ao eixo- x (a), paralelo ao eixo- y (b) e em quina (c)	35
7	Ilustração de uma célula de contorno rígido paralelo ao eixo- x (a), paralelo ao eixo- y (b) e em quina (c) com valores TT e TR na fronteira das células [B] com as células [F]	37
8	Escoamento entre placas paralelas paralelo ao eixo- x	40
9	Comparação entre a solução numérica em diferentes malhas e a solução de referência da velocidade u para o escoamento <i>Poiseuille</i> de um fluido Oldroyd-B com $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $Br = 1.0$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 0.5$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).	42
10	Perfil da solução numérica da temperatura T no escoamento <i>Poiseuille</i> nas malhas $M1$ e $M2$ de um fluido Oldroyd-B com $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $Br = 1.0$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 0.5$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).	43
11	Comparação entre a solução numérica em diferentes malhas e a solução de referência da componente $\tau_p^{xx}(a)$ e $\tau_p^{xy}(b)$ para o escoamento <i>Poiseuille</i> de um fluido Oldroyd-B com $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $Br = 1.0$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 0.5$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).	44
12	Comparação entre a solução de referência e a solução numérica em diferentes malhas da velocidade u para o escoamento <i>Poiseuille</i> do fluido tipo PTT com $Pe = 400.0$, $\epsilon = 0.5$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $\beta = 0.6$ e $Br = 1.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).	45

13	Perfil da solução numérica da temperatura T no escoamento <i>Poiseuille</i> nas malhas $M1$ e $M2$ no fluido PTT com $Pe = 400.0$, $\epsilon = 0.5$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $\beta = 0.6$ e $Br = 1.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).	46
14	Comparação entre a solução de referência e a solução numérica em diferentes malhas da componente $\tau_p^{xx}(a)$ e $\tau_p^{xy}(b)$ para o escoamento <i>Poiseuille</i> do fluido PTT com $Pe = 400.0$, $\epsilon = 0.5$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $\beta = 0.6$ e $Br = 1.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).	47
15	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a velocidade $u(y)$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	49
16	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	49
17	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	50
18	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a velocidade $u(y)$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	51
19	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	52
20	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	52
21	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com os modelos newtoniano, Oldroyd-B e PTT para temperatura T no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	53

22	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo Newtoniano para a temperatura T no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ com variação do número de Peclet: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	54
23	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com os modelos newtoniano 23(a) e não-newtonianos Oldroyd-B e PTT 23(b) para a temperatura T no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ com o valor $Pe = 10.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	54
24	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a velocidade u no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	55
25	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para as componentes τ_p^{xx} 25(a) e τ_p^{xy} 25(b) do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	56
26	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a temperatura T no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$	57
27	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a velocidade u no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50$	58
28	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a temperatura no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50$	58
29	Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para as componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento <i>Poiseuille</i> na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50$. . .	59
30	Geometria da contração planar 4 : 1. Fonte: F. Habla et al. [7].	61
31	Posição da linha $r = 0.0114m$ na contração planar 4 : 1.	62
32	Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a velocidade v no tempo final $t = 50s$	63

33	Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a temperatura T no tempo final $t = 50s$	63
34	Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo final $t = 50s$	64
35	Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a componente τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo final $t = 50s$	64
36	Perfil das soluções numéricas obtidas no modelo não-isotérmico na contração 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para o fluido Oldroyd-B com tempo final $t = 50s$	65
37	Comprimento do vórtex adimensional ζ em função dos valores do número de <i>Weissenberg</i> : $Wi = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ e 10	66

Lista de Tabelas

3.1	Características das malhas espaciais usadas para o cálculo da solução numérica no canal.	40
3.2	Erros nas malhas $M1$ e $M2$ para o escoamento do fluido Oldroyd-B para a componente u da velocidade e componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} de $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo $t = 50$	43
3.3	Erros nas malhas $M1$ e $M2$ para o escoamento do fluido PTT para a componente u da velocidade e componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} de $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo $t = 50.0$	46

Sumário

Introdução	1
1 Formulação matemática	4
1.1 Equações Governantes	4
1.1.1 Modelos viscoelásticos: PTT e Oldroyd-B	8
1.1.2 Equação da Temperatura	9
1.1.3 Modelando o fluido viscoelástico não-isotérmico	11
1.2 Adimensionalização	12
1.3 Simplificação do Modelo	16
1.4 Condições iniciais e condições de contorno	16
2 Método computacional	23
2.1 Malha computacional	24
2.2 Classificação das células	24
2.3 Método de projeção	25
2.4 Integração temporal da equação da quantidade de movimento	27
2.5 Integração temporal da equação constitutiva	28
2.6 Integração temporal da equação da temperatura	29
2.7 Ciclo Computacional	30
2.8 Discretização espacial	31
2.8.1 Equações de aproximação para a temperatura	32
2.8.2 Equações de aproximação nos injetores	33
2.8.3 Equações de aproximação nos ejetores	34
2.8.4 Equações de aproximação no contorno rígido	34
3 Verificação da metodologia numérica	39
3.1 Escoamento entre placas paralelas: <i>Poiseuille flow</i>	39
3.1.1 Resultados numéricos para o modelo Oldroyd-B	41
3.1.2 Resultados numéricos para o modelo PTT	44
3.1.3 Comparação dos modelos isotérmico e não-isotérmico no fluido Oldroyd-B	47

<i>SUMÁRIO</i>	1
3.1.4 Comparação dos modelos isotérmico e não-isotérmico no fluido PTT	50
3.1.5 Comparação dos modelos Newtoniano e viscoelástico não-isotérmicos	53
3.1.6 Influência da variação dos valores da temperatura na parede no fluido Oldroyd-B	55
3.1.7 Influência da variação dos valores da temperatura na parede no fluido PTT	57
4 Simulação numérica de escoamento não-isotérmico viscoelástico em uma contração 4 : 1	60
5 Considerações finais	67
A Adimensionalização	69
B Equação da Temperatura: Produto escalar duplo	72
B.1 Produto escalar duplo $\tau_s : D$	72
B.2 Produto escalar duplo $\tau_p : D$	73
Referências Bibliográficas	74

Introdução

As investigações sobre a transferência de calor em um escoamento newtoniano são encontradas com maior facilidade quando comparadas as investigações envolvendo escoamento viscoelástico. Tal fato acontece pela dificuldade de obter modelos constitutivos não-isotérmicos aceitos para divulgação. Trabalhos como [5], [8], [14] e [20] apresentam desenvolvimentos atuais sobre essa discussão.

A questão por volta de soluções de equações diferenciais parciais desperta grande interesse na comunidade científica. Estas equações são utilizadas em problemas de importância industrial e de engenharia, o que torna o assunto ainda mais relevante. Em particular, a modelagem matemática dos efeitos da temperatura tem sido objeto de estudo em aplicações industriais, químicas, assim como no processamento de alimentos.

Além do interesse na determinação dos efeitos da variação da temperatura, outras propriedades, como a transferência de calor e a elasticidade em um fluido tem motivado o estudo dos escoamentos não-isotérmicos.

O estudo de fluidos não-newtonianos é de fundamental importância em áreas que lidam com o escoamento de fluidos incompressíveis. Reologia do sangue, engenharia de petróleo e desenvolvimento de produtos farmacêuticos são apenas algumas áreas em que os fluidos não-newtonianos têm um papel importante.

Fluidos que apresentam efeitos elásticos constituem os chamados fluidos viscoelásticos dentro da classe de fluidos não-newtonianos. Dentre as propriedades desse tipo de fluido, densidade e viscosidade, por exemplo, variam no espaço e/ou no tempo com mudanças no valor da temperatura. Considerando essa discussão, o foco deste trabalho é o estudo de escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos cujos tempo de relaxação e viscosidade do fluido são considerados dependentes da temperatura. As investigações feitas mostram as características da transferência de calor em escoamentos viscoelásticos Oldroyd-B e PTT.

Trabalhos recentes [28],[29] têm investigado sobre quais condições um fluido newtoniano e um fluido não-newtoniano sofrem influência perante propriedades térmicas de um escoamento não-isotérmico, bem como os parâmetros que caracterizam o fluido em tais condições.

A análise da temperatura em fluidos viscoelásticos tem sido investigada por muitos autores que propõem diferentes modelos não-isotérmicos [14], [22], [27]. Alguns trabalhos

investigam o escoamento não-isotérmico de um fluido Oldroyd-B, como em [3], [7], [49], onde a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido são dependentes da temperatura.

A maior parte dos trabalhos encontrados utilizam o fluido PTT [10], [28], [29], [41], quando comparado com trabalhos envolvendo escoamentos não-isotérmicos que utilizam o modelo Oldroyd-B. Essa facilidade em encontrar tais trabalhos é justificada por uma das dificuldades encontradas com o desenvolvimento do modelo viscoelástico não-isotérmico Oldroyd-B: as falhas na simulação numérica com números elevados de Weissenberg. A não-linearidade do modelo PTT evita parcialmente essa dificuldade.

Outros fluidos e modelos são investigados quando o escoamento envolve calor. Em [26] é feito um estudo com escoamento Newtoniano com condição de contorno adiabática para a temperatura utilizando a geometria de uma cavidade trapezoidal. O fluido PIB-Boger [55] é analisado em uma contração assimétrica mostrando instabilidades elásticas com a variação da temperatura na fronteira. Em [17], as simulações do escoamento não-isotérmico são realizadas utilizando o modelo FENE-P, investigando o efeito da temperatura sobre algumas variáveis como a velocidade e a tensão, comparando os resultados em situações isotérmicas e não-isotérmicas. Uma investigação utilizando o método Level Set [23] é feita comparando os fluidos Newtoniano e não-newtoniano em um “*Poiseuille flow*” em um tubo e em uma cavidade. Outra análise de modelos não-isotérmicos é feita em [46], onde as simulações são feitas em uma contração planar tridimensional com modelos constitutivos PTT, Giesekus e FENE-P.

As três leis fundamentais da física são traduzidas pelas equações de conservação de massa, quantidade de movimento e conservação de energia. Para que esse sistema de equações determine os efeitos desejados pelas mudanças de temperatura no escoamento, essas equações devem ser alteradas convenientemente. Assim, para descrever matematicamente a variação de parâmetros dados em função da temperatura, tais como a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido, objetos de estudo neste trabalho, modelos matemáticos são utilizados para a modelagem no conjunto das equações de Navier-Stokes. Esses modelos utilizam equações que devem ser escolhidas adequadamente de acordo com o conjunto de dados conhecidos para o problema.

Em [14], essa modelagem é feita admitindo que a contribuição do solvente tem baixo peso molecular. Em trabalhos recentes [7], [28], [29], a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido são modelados pela equação WLF. Em [49] a equação de Arrhenius é utilizada para essa modelagem. Outros modelos podem ser vistos em [21].

Uma das geometrias amplamente estudadas na literatura é a contração, seja ela planar ou assimétrica. Isso se deve ao fato do problema da contração ser utilizado como um problema de referência para avaliar a estabilidade de algoritmos numéricos. Trabalhos recentes [19], [20], [49], têm estudado simulações de escoamentos não-isotérmicos utilizando a contração como geometria. Um dos efeitos analisados nesse tipo de simulação é o efeito da viscoelasticidade do fluido. Essa investigação tem relação com a formação de

vórtices nos cantos da contração. Esses tipos de análises são encontradas em [7], [20] e serão também investigadas aqui como uma aplicação do estudo realizado com escoamento não-isotérmico.

Neste trabalho, apresentamos o desenvolvimento de um método numérico para escoamentos de fluidos viscoelásticos não-isotérmicos para o fluido do tipo Oldroyd-B [7] e PTT [28]. A equação WLF é usada para modelar a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido nas equações de Navier-Stokes. Para a verificação da metodologia numérica, as equações são implementadas na plataforma FREEFLOW-2D. A discretização das equações é feita pelo método de diferenças finitas em uma malha deslocada. O problema é aplicado para o escoamento “*Poiseuille flow*” em um canal com placas paralelas e em uma contração planar 4 : 1.

Formulação matemática

Este capítulo tem por objetivo apresentar a modelagem matemática adotada para escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos bidimensionais usando a equação constitutiva Oldroyd-B e a equação constitutiva PTT (Phan-Thien-Tanner).

Inicialmente são descritas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento na forma dimensional, assim como as equações constitutivas que representam a parte elástica do escoamento. Esta última, possui parâmetros definidos em função da temperatura.

A equação da temperatura é construída com base na equação da conservação de energia. O modelo WLF (Willian-Landel-Ferry) é aplicado para modelar a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido em função da temperatura. Neste trabalho, a viscosidade do fluido será decomposta em duas contribuições: viscosidade do solvente e viscosidade do polímero. As equações de conservação de quantidade de movimento e temperatura serão simplificadas quanto a viscosidade do solvente após a adimensionalização das mesmas. Por fim, são apresentadas as condições iniciais e de contorno do problema.

1.1 Equações Governantes

Alguns tipos de escoamentos podem ser descritos pelas equações de Navier-Stokes. Essas equações traduzem, em linguagem matemática, as três leis fundamentais da física [38]. A primeira é a lei de conservação de massa, que afirma não existir variação de massa em um sistema fechado, quaisquer que sejam as transformações ocorridas dentro dele. A segunda é a conservação de movimento, que afirma que a quantidade de movimento de um sistema mecanicamente isolado é constante. A terceira lei é sobre a conservação de energia, que afirma que em um sistema isolado, a energia total permanece constante.

Neste trabalho, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia que descrevem escoamentos incompressíveis não-isotérmicos, na forma dimensional

conservativa, são dadas, respectivamente, por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + Q, \quad (1.3)$$

sendo $\mathbf{x} = [x \ y]^t$ é o vetor posição transposto, $\mathbf{u} = [u \ v]^t$ o vetor velocidade transposto. Considerando escoamentos bidimensionais e o sistema cartesiano de coordenadas, o vetor velocidade possui componentes $u = u(\mathbf{x}, t)$ e $v = v(\mathbf{x}, t)$ ao longo das direções x e y , respectivamente. A densidade do fluido ρ é tratada como constante, $t \geq 0$ o tempo, e a energia interna, \mathbf{q} o fluxo de calor e Q o termo fonte de energia interna.

O tensor tensão total $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$ pode ser decomposto por

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I} \quad (1.4)$$

sendo $p = p(\mathbf{x}, t)$ é a pressão, \mathbf{I} o tensor identidade e $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \tau^{xx} & \tau^{xy} \\ \tau^{yx} & \tau^{yy} \end{bmatrix}$ o tensor das tensões. Em coordenadas Cartesianas bidimensionais, substituindo (1.4) na equação (1.2) tem-se

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau^{xy}}{\partial y}, \quad (1.5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau^{yy}}{\partial y}. \quad (1.6)$$

O tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ será decomposto em duas partes: uma contribuição newtoniana (viscosa) com viscosidade η_s e uma parte não-newtoniana (elástica) com viscosidade η_p . A viscosidade total do fluido η_0 é capturada em uma temperatura de referência T_0 .

Dessa forma, o tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ pode ser escrito como

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}_p, \quad (1.7)$$

sendo $\boldsymbol{\tau}_s = 2\eta_s \mathbf{D}$, ou ainda,

$$\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

e $\boldsymbol{\tau}_p = \begin{bmatrix} \tau_p^{xx} & \tau_p^{xy} \\ \tau_p^{xy} & \tau_p^{yy} \end{bmatrix}$ a contribuição não-newtoniana do tensor das tensões definida por uma equação constitutiva descrita na próxima seção.

O tensor taxa de deformação \mathbf{D} é dado por

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t), \quad (1.9)$$

sendo $\nabla \mathbf{u}$ o tensor gradiente da velocidade e $(\nabla \mathbf{u})^t$ o seu transposto,

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad (\nabla \mathbf{u})^t = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (1.10)$$

Além disso, a derivada material e sua derivada convectiva para um tensor $\boldsymbol{\Omega}$, respectivamente, é definida por

$$\frac{D\boldsymbol{\Omega}}{Dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\Omega}), \quad (1.11)$$

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\Omega}} = \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\Omega}) - (\nabla \mathbf{u}\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{\Omega}(\nabla \mathbf{u})^t), \quad (1.12)$$

sendo

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\Omega}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial(u\Omega^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega^{xx})}{\partial y} & \frac{\partial(u\Omega^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega^{xy})}{\partial y} \\ \frac{\partial(u\Omega^{yx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega^{yx})}{\partial y} & \frac{\partial(u\Omega^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega^{yy})}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (1.13)$$

$$\nabla \mathbf{u}\boldsymbol{\Omega} = \begin{bmatrix} \Omega^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega^{yx} \frac{\partial u}{\partial y} & \Omega^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \\ \Omega^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega^{yx} \frac{\partial v}{\partial y} & \Omega^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (1.14)$$

$$\boldsymbol{\Omega} \nabla \mathbf{u}^t = \begin{bmatrix} \Omega^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega^{yx} \frac{\partial u}{\partial y} & \Omega^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega^{yx} \frac{\partial v}{\partial y} \\ \Omega^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} & \Omega^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (1.15)$$

A viscosidade de um fluido Newtoniano pode sofrer variações com o efeito da temperatura e da densidade. Para escoamentos incompressíveis de um fluido Newtoniano não-isotérmico, o tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ é definido como

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{D}, \quad (1.16)$$

onde η_s é a viscosidade do solvente constante, ou seja, não é dada em função da temperatura. Esta estratégia é adotada devido a pouca influência da viscosidade do solvente quando comparada a influência da viscosidade polimérica η_p . Simulações feitas em [13] e [14] adotam a mesma estratégia.

Dessa forma, para escoamentos Newtonianos não-isotérmicos incompressíveis, a equação (1.2) na forma conservativa é dada por

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (1.17)$$

ou em coordenadas cartesianas bidimensionais juntamente com a equação (1.1),

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.18)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (1.19)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \quad (1.20)$$

Para escoamentos não-newtonianos não-isotérmicos, utilizando (1.7), a equação da quantidade de movimento (1.17) é redefinida como

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p. \quad (1.21)$$

1.1.1 Modelos viscoelásticos: PTT e Oldroyd-B

A contribuição não-newtoniana $\boldsymbol{\tau}_p$ na equação de conservação de quantidade de movimento exprime o comportamento elástico do fluido por meio de equações constitutivas. Para o modelo PTT, a equação constitutiva não-linear que descreve $\boldsymbol{\tau}_p$ é da forma

$$f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p})\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1(T)\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2\eta_p(T)\mathbf{D}, \quad (1.22)$$

sendo $\lambda_1(T)$ o tempo de relaxação do fluido e $\eta_p(T)$ a viscosidade polimérica do fluido obtidos em função da temperatura.

A função $f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p})$ determina a forma do modelo PTT, tais como

- Forma linear: $f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}) = 1 + \epsilon \frac{\lambda_1(T)}{\eta_p(T)} Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}$
- Forma exponencial: $f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}) = \exp\left(\epsilon \frac{\lambda_1(T)}{\eta_p(T)} Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}\right)$
- Forma quadrática: $f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}) = 1 + \epsilon \frac{\lambda_1(T)}{\eta_p(T)} Tr_{\boldsymbol{\tau}_p} + \frac{1}{2} \left(\epsilon \frac{\lambda_1(T)}{\eta_p(T)} Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}\right)^2$

onde o parâmetro ϵ está relacionado com o comportamento elongacional do modelo e $Tr_{\boldsymbol{\tau}_p}$ representa o traço do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$. Neste trabalho, vamos considerar o modelo PTT com a forma linear, o qual foi proposto originalmente para escoamentos isotérmicos por [16].

Assim, a equação constitutiva PTT, na forma dimensional, em coordenadas Cartesianas bidimensionais é dada por

$$f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p})\tau_p^{xx} + \lambda_1(T) \left(\frac{D\tau_p^{xx}}{Dt} - 2\tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} - 2\tau_p^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 2\eta_p(T) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1.23)$$

$$f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p})\tau_p^{xy} + \lambda_1(T) \left(\frac{D\tau_p^{xy}}{Dt} - \tau_p^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} - \tau_p^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \eta_p(T) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (1.24)$$

e

$$f(Tr_{\boldsymbol{\tau}_p})\tau_p^{yy} + \lambda_1(T) \left(\frac{D\tau_p^{yy}}{Dt} - 2\tau_p^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - 2\tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 2\eta_p(T) \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (1.25)$$

Para o modelo viscoelástico Oldroyd-B [7], a equação constitutiva que caracteriza $\boldsymbol{\tau}_p$ é dada por

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1(T)\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2\eta_p(T)\mathbf{D}. \quad (1.26)$$

Perceba que, a equação constitutiva do modelo Oldroyd-B pode ser redefinida a partir da equação (1.22) tomando $f(Tr_{\tau_p}) = 1$, ou seja, $\epsilon = 0$.

Em coordenadas cartesianas bidimensionais, a equação (1.26) é dada por

$$\tau_p^{xx} + \lambda_1(T) \left(\frac{D\tau_p^{xx}}{Dt} - 2\tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} - 2\tau_p^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 2\eta_p(T) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1.27)$$

$$\tau_p^{xy} + \lambda_1(T) \left(\frac{D\tau_p^{xy}}{Dt} - \tau_p^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} - \tau_p^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \eta_p(T) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (1.28)$$

$$\tau_p^{yy} + \lambda_1(T) \left(\frac{D\tau_p^{yy}}{Dt} - 2\tau_p^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - 2\tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 2\eta_p(T) \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (1.29)$$

1.1.2 Equação da Temperatura

Dependendo da aplicação, a equação da energia pode ser escrita de diversas formas [12], [18]. Neste trabalho, com a ajuda da termodinâmica, a equação da temperatura é derivada a partir da equação do balanço da energia [10].

Considerando que a energia interna e é dada somente em função da temperatura e introduzindo a hipótese de entalpia $h = e + \frac{p}{\rho}$ e $h = c_p T$ [38] à pressão constante, a equação (1.3) pode ser reescrita, obedecendo a Lei de Fourier da condução, como

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + Q. \quad (1.30)$$

A equação acima é chamada de equação reduzida de balanço de energia ou ainda a equação da temperatura, onde c_p é o calor específico.

O termo $\mathbf{q} = -k\nabla T$ é uma generalização da Lei de Fourier, em que a condução de calor pode depender da deformação elástica do fluido e k é a condutividade térmica do fluido. O termo $\nabla \cdot \mathbf{q} = -k\nabla^2 T$ representa a transferência de calor por condução devido à presença do gradiente de temperatura e Q é o termo fonte de produção de energia interna, que inclui qualquer outra parte, por exemplo a geração de calor por uma reação química.

Do termo fonte Q pode-se extrair uma interação entre o tensor das tensões e o tensor taxa de deformação. Em [19], o termo fonte compreende duas contribuições quando considera-se a sua produção de calor interno: uma parte irreversível positiva e uma parte reversível. Para o caso de fluidos puramente viscosos, a interação representa a dissipação viscosa, mas no caso de fluidos viscoelásticos pode ocorrer transferência de energia me-

cânica na dissipação viscosa, e assim o fenômeno é irreversível. Este caso corresponde a elasticidade entrópica pura.

Para materiais elásticos, toda a energia mecânica é armazenada como energia elástica [14], [15] e pode ser revertida em energia mecânica (fenômeno reversível). Este caso corresponde à energia elástica pura. Em aplicações de Engenharia com fluidos elásticos [51], esse fenômeno é capaz de produzir metade da energia necessária para a extrusão de polímero fundido. Dessa forma, para fluidos viscoelásticos, a energia interna Q depende do comportamento mais viscoso ou mais elástico do escoamento.

Levando em consideração os casos apresentados, o termo-fonte Q para o modelo viscoelástico Oldroyd-B é escrito como

$$Q = \boldsymbol{\tau}_s : \mathbf{D} + \alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2\lambda_1(T)}. \quad (1.31)$$

O parâmetro α é um coeficiente de energia particionada e a operação “:” denota o produto escalar duplo de dois tensores. Detalhes de como obter o produto escalar duplo dos tensores na equação (1.31) são encontrados no Apêndice B. Se $\alpha = 0$ tem-se energia elástica pura correspondente ao comportamento elástico do material puro. Se $\alpha = 1$ trata-se de entropia pura [10], correspondente ao comportamento viscoso do material puro.

Assim, a equação da temperatura dimensional para um escoamento viscoelástico de um fluido Oldroyd-B é dada por

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) \right) = -k \nabla^2 T + (2\eta_s \mathbf{D}) : \mathbf{D} + \alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2\lambda_1(T)}, \quad (1.32)$$

ou ainda, em coordenadas Cartesianas bidimensionais,

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} &= k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \\ 2\eta_s \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right] &+ \\ \alpha \left[\tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \left(\frac{\tau_p^{xy}}{2} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] &+ (1 - \alpha) \frac{\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}}{2\lambda_1(T)}. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Considerando a equação da temperatura (1.30), o termo fonte Q para o modelo PTT é reescrito em (1.31) da forma [28]

$$Q = \alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2\lambda_1(T)}. \quad (1.34)$$

Assim, a equação da temperatura para esse fluido é dada por

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) \right) = -k \nabla^2 T + \alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2\lambda_1(T)}, \quad (1.35)$$

ou em coordenadas Cartesianas bidimensionais,

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} &= k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \\ \alpha \left[\tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \left(\frac{\tau_p^{xy}}{2} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] &+ (1 - \alpha) \frac{\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}}{2\lambda_1(T)}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

1.1.3 Modelando o fluido viscoelástico não-isotérmico

Os modelos matemáticos podem ser utilizados para representar matematicamente a variação de alguns parâmetros, tais como a velocidade ou a densidade de um fluido, com a variação de uma condição ambiental. Esses modelos são chamados de Modelos Secundários [21] e uma das condições ambientais é a temperatura.

Esses modelos podem ser descritos através de equações polinomiais, exponenciais, lineares ou potenciais, conforme o ajuste dos dados propostos. Entre os principais modelos secundários descritos na literatura, tem-se o modelo de Arrhenius [35] e o modelo WLF (Williams-Landel-Ferry)[4]. Esses modelos são descritos pelo fator de deslocamento (f_T).

A viscosidade do polímero, viscosidade do solvente e o tempo de relaxação do fluido obtidos para diferentes temperaturas podem ser superpostos em uma curva mestra (Princípio da superposição tempo-temperatura) ao longo de um eixo logarítmico da frequência ou do tempo [9], [32], [36].

A equação de Arrhenius é amplamente utilizada para descrever a variação da taxa de reação química com a temperatura, ou ainda com parâmetros microbiológicos. Seu fator de deslocamento é dado por

$$f_T = \exp \left(\frac{E}{2,303R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right), \quad (1.37)$$

sendo E a energia de ativação, R a constante dos gases ideais ($8,314 J/mol.K$) e $2,303$ o valor do logaritmo natural de 10.

A equação WLF é muito utilizada no deslocamento de materiais viscoelásticos quando as temperaturas são inferiores ou próximas à temperatura de transição vítrea (T_g) do material.

A transição vítrea é característica de materiais amorfos, sendo definida como a passagem de um estado desordenado rígido (vítreo) para um estado desordenado no qual as cadeias poliméricas possuem uma mobilidade maior. Em algumas classes de polímeros, essa mobilidade dá origem ao comportamento de elasticidade da borracha [11].

De acordo com [4], quando $T > T_g + 100K$, ou seja, a temperatura é maior que a temperatura de transição vítrea, as moléculas movem-se através de saltos e utiliza-se o modelo de Arrhenius, por exemplo. Por outro lado, quando $T_g < T < T_g + 100K$ a diminuição da viscosidade é justificada pelo volume criado pela expansão térmica. Neste caso, utiliza-se, por exemplo, o modelo Williams-Landel-Ferry.

A equação WLF é descrita a partir da equação de Doolittle, usada na descrição da viscosidade de líquidos de baixa massa molecular [24].

Para a modelagem dos fluidos Oldroyd-B e PTT, o tempo de relaxação $\lambda_1(T)$ do fluido e a viscosidade do polímero $\eta_p(T)$, dados em função da temperatura, são definidos pelas equações, respectivamente por

$$\lambda_1(T) = f_T \lambda_1(T_0), \quad (1.38)$$

$$\eta_p(T) = f_T \eta_p(T_0), \quad (1.39)$$

sendo $\lambda_1(T_0)$ e $\eta_p(T_0)$, respectivamente, o tempo de relaxação e a viscosidade do polímero na temperatura de referência T_0 .

O fator deslocamento f_T obedece a relação WLF, definido por

$$f_T = \exp \left(-\frac{C_1(T - T_0)}{C_2 + T - T_0} \right) \quad (1.40)$$

sendo C_1 e C_2 parâmetros do modelo adotados como em [28].

1.2 Adimensionalização

No mundo real dos projetos em mecânica dos fluidos é comum estabelecer relações entre as grandezas físicas através de uma equação dimensional. Isso pode ser feito se a dimensão de cada termo da equação não for alterada, ou seja, a similaridade com a equação dimensional deve ser preservada.

A adimensionalização dessas equações é realizada para que se possa estudar escoamentos em escala reduzida. Isso reduz os custos, por exemplo, em experimentos de grande escala e permite a análise de várias configurações ou condições de escoamento.

Para que a equação dimensional se transforme em uma equação adimensional, é preciso estabelecer um conjunto de variáveis e constantes que aparecem como coeficientes nas equações adimensionalizadas. Esses coeficientes são agrupados em parâmetros adimensionais que passarão a caracterizar o escoamento [38].

As equações do modelo apresentadas anteriormente estão na forma dimensional. Nesta seção, as equações são expostas na forma adimensional.

As relações entre as variáveis dimensionais e adimensionais (*) do problema estudado são definidas como:

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L_0}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_0}, \quad t^* = \frac{tU_0}{L_0}, \quad (1.41)$$

$$p^* = \frac{p}{\rho_0 U_0^2}, \quad \tau_p^* = \frac{\tau_p}{\rho_0 U_0^2}, \quad T^* = \frac{T - T_0}{T_w - T_0}.$$

As escalas de grandeza adotadas para o escoamento não-isotérmico são T_0 , L_0 , U_0 , ρ_0 e T_w , representando, respectivamente, a temperatura de referência, o comprimento, a velocidade, a densidade do fluido e a temperatura na parede. Admitindo, por hipótese, que o escoamento é incompressível, adota-se $\rho = \rho_0$.

Com a introdução das variáveis adimensionais, alguns parâmetros adimensionais surgem de acordo com o modelo utilizado. Para um escoamento viscoelástico não-isotérmico, define-se os seguintes parâmetros:

- *Número de Reynolds (Re)* - Razão entre as forças inerciais e as forças viscosas do escoamento, expresso por

$$Re = \frac{\rho U_0 L_0}{\eta_0},$$

sendo η_0 a viscosidade dinâmica total do fluido capturada em $T = T_0$. Observe que Re é um parâmetro constante do modelo adotado como em [13].

- *Número de Prandtl (Pr)*- Relaciona a viscosidade cinemática e a difusividade térmica do fluido, dependendo apenas de propriedades do fluido

$$Pr = \frac{\nu}{\chi}$$

sendo $\chi = \frac{k}{\rho_0 c_p}$ o coeficiente de difusividade térmica do fluido e $\nu = \frac{\eta_0}{\rho_0}$ a viscosidade cinemática. O número de Prandtl é um parâmetro adimensional característico de escoamentos não-isotérmicos.

- *Número de Peclet (Pe)*- Similar ao número de Reynolds, agora utilizando a difusividade térmica, é a razão entre o calor transferido por convecção e o calor transferido por condução, ou seja,

$$Pe = \frac{U_0 L_0}{\chi}.$$

Ainda, o número de Peclet equivale ao produto dos números adimensionais Reynolds e Prandtl, isto é,

$$Pe = RePr.$$

Altos valores de Pe indicam a predominância do transporte de calor convectivo, enquanto valores baixos indicam a predominância do transporte condutivo.

- *Número de Brinkman* (Br)- Quantifica a relação entre o calor gerado pela dissipação viscosa e o calor na parede, resultante da diferença da temperatura imposta na parede e a temperatura de referência, ou seja, aquecimento interno (auto-aquecimento) e aquecimento externo. É definido por

$$Br = \frac{\eta_0 U_0^2}{k(T_w - T_0)}.$$

- *Parâmetro* (β)- Parâmetro que controla a quantidade de contribuição newtoniana do fluido dada por

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0}.$$

Para um escoamento Newtoniano, $\beta = 1$.

Adotando que as propriedades do fluido $\lambda_1(T)$ e $\eta_p(T)$ são dependentes da temperatura, dois parâmetros adimensionais surgem dependentes da temperatura:

- *Número de Weissenberg* (Wi) - Parâmetro adimensional característico de escoamentos viscoelásticos representando a razão entre uma escala de tempo característico do fluido $\lambda_1(T)$, em função da temperatura, e a escala de tempo característico do escoamento $\left(\frac{U_0}{L_0}\right)$, isto é,

$$Wi(T) = \frac{\lambda_1(T)U_0}{L_0}.$$

e

- *Parâmetro de retardação* (ω_r)- relaciona as viscosidades polimérica e total

$$\omega_r(T) = \frac{\eta_p(T)}{\eta_0},$$

onde $\omega_r \in]0, 1[$.

O processo de adimensionalização das equações utilizadas é apresentado no Apêndice A. As equações adimensionalizadas do modelo são dadas a seguir.

Equação da Continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.42)$$

Equação de Conservação de Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p, \quad (1.43)$$

Equação Constitutiva Oldroyd-B

$$\boldsymbol{\tau}_p + Wi(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2 \frac{\omega_r(T)}{Re} \mathbf{D}. \quad (1.44)$$

Equação Constitutiva PTT

$$Re \left(\epsilon \frac{Wi(T)}{\omega_r(T)} Tr \boldsymbol{\tau}_p \boldsymbol{\tau}_p \right) + \boldsymbol{\tau}_p + Wi(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2 \frac{\omega_r(T)}{Re} \mathbf{D}, \quad (1.45)$$

sendo

$$Wi(T) = Wi(T_0) f_T \quad \text{e} \quad \omega_r(T) = \omega_r(T_0) f_T. \quad (1.46)$$

Equação da Temperatura para o fluido Oldroyd-B

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 T + 2\beta \frac{Br}{Pe} (\mathbf{D} : \mathbf{D}) + \frac{Br Re}{Pe} \left(\alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2Wi(T)} \right) \quad (1.47)$$

Função WLF

$$f_T = \exp \left[-\frac{C_1 T}{\frac{C_2}{(T_w - T_0)} + T} \right]. \quad (1.48)$$

A forma adimensional da equação da temperatura do fluido PTT é obtida a partir da equação da temperatura do modelo Oldroyd-B (1.47) retirando o termo $2\beta \frac{Br}{Pe} (\mathbf{D} : \mathbf{D})$. Dessa forma, não há necessidade de descrevê-la no conjunto de equações acima.

1.3 Simplificação do Modelo

Para simplificação do modelo [10], a viscosidade do polímero e o tempo de relaxação do fluido, presentes na equação da temperatura para o modelo viscoelástico Oldroyd-B e PTT, serão considerados constantes. Assim, as equações da temperatura para os dois modelos viscoelásticos serão reescritas com o parâmetro adimensional Wi não dependente da temperatura.

Novamente, a equação da temperatura para o modelo viscoelástico PTT será omitida, uma vez que, a partir da equação (1.50) pode-se obter a forma simplificada da equação para o modelo PTT, considerando as mesmas hipóteses de simplificação do modelo Oldroyd-B. Na equação (1.48) adota-se a simplificação $T_w - T_0 = 1$ como em [10].

A viscosidade do polímero e o tempo de relaxação do fluido são dados em função da temperatura nas equações constitutivas, ou seja, as equações constitutivas de $\boldsymbol{\tau}_p$ não serão modificadas.

Equação de conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p \quad (1.49)$$

Equação da temperatura para o fluido Oldroyd-B

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 T + 2\beta \frac{Br}{Pe} (\mathbf{D} : \mathbf{D}) + \frac{BrRe}{Pe} \left(\alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2Wi} \right). \quad (1.50)$$

Fator deslocamento

$$f_T = \exp \left[-\frac{C_1 T}{C_2 + T} \right] \quad (1.51)$$

1.4 Condições iniciais e condições de contorno

Para resolver as equações do modelo simplificado (seção 1.3) é necessário impor condições auxiliares adequadas para a velocidade \mathbf{u} , a pressão p , a contribuição não-newtoniana $\boldsymbol{\tau}_p$ e a temperatura T .

As condições iniciais fornecem informações sobre o estado inicial do problema, sendo relevantes para a convergência do método numérico [43]. Elas devem ser satisfeitas no instante em que o sistema é inicializado $t = t_0$ e em todo o domínio. Além disso, é necessário que o campo de velocidade inicial \mathbf{u}_0 satisfaça a equação da continuidade (1.42). A pressão e a contribuição não-newtoniana devem ser compatíveis com o campo de velocidade, geralmente, consideradas nulas no instante inicial t_0 [38], [4].

Dessa forma, as condições iniciais para \mathbf{u} , p , $\boldsymbol{\tau}$ e T são dadas por

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad p = 0, \quad (1.52)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.53)$$

$$T = 0. \quad (1.54)$$

As condições de fronteira são determinadas na fronteira de entrada do fluido (injetor ou *inflow*), na saída de fluido (ejetor ou *outflow*) e na fronteira rígida (*boundary*), especificadas como na Figura (1).

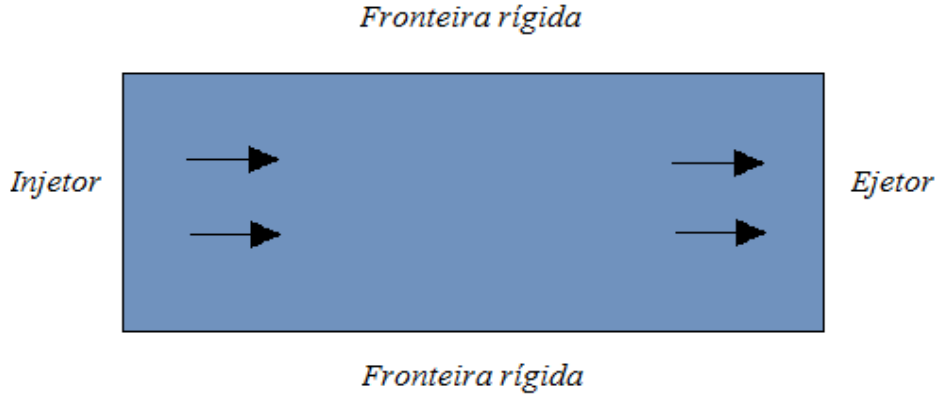


Figura 1: Tipos de fronteiras consideradas neste trabalho.

Nas condições de fronteira de entrada de fluido, as componentes da velocidade normal $u_{\vec{n}}$ e da velocidade tangencial $u_{\vec{t}}$ são definidas como

$$u_{\vec{n}} = u_{inflow}, \quad (1.55)$$

$$u_{\vec{t}} = 0, \quad (1.56)$$

onde u_{inflow} é a velocidade prescrita na fronteira de entrada da geometria. Se a velocidade na fronteira de entrada de fluido é constante, utiliza-se a estratégia [45] adotando $\boldsymbol{\tau}_p = 0$. Para a temperatura, é usada a condição de Dirichlet no injetor.

Considerando o escoamento totalmente desenvolvido, uma solução com perfil parabólico para o modelo Oldroyd-B isotérmico é imposto no injetor [4] para as velocidades u e

v

$$u(y) = 4U_0 \frac{y}{L_0} \left(1 - \frac{y}{L_0}\right), \quad v(y) = 0, \quad (1.57)$$

e para as componentes do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$

$$\tau_p^{xx} = 2 \frac{Wi}{Re} \omega_r \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \quad (1.58)$$

$$\tau_p^{xy} = \frac{\omega_r}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right), \quad (1.59)$$

e

$$\tau_p^{yy} = 0. \quad (1.60)$$

Para o fluido PTT, as soluções analíticas das componentes u e v da velocidade \mathbf{u} e as componentes τ_p^{xx} , τ_p^{xy} e τ_p^{yy} de $\boldsymbol{\tau}_p$ na fronteira de entrada de fluido são impostas seguindo a metodologia de Pinho et al. [33]. Estas soluções são dadas para um canal bidimensional com escoamento totalmente desenvolvido paralelo ao eixo $-x$ para o modelo isotérmico.

Sendo assim, na fronteira de entrada de fluido, a velocidade v é imposta

$$v(y) = 0, \quad (1.61)$$

enquanto para a velocidade u , a solução analítica é dada por

$$\begin{aligned} u(y) = & \left(\frac{\frac{\partial p}{\partial x} Re}{8\beta} \right) (1 - 4y) + \\ & - \frac{1.5\epsilon}{\frac{\partial p}{\partial x} (1 - \beta^3) Re Wi^2} \left(\pm |C - \sqrt[2]{A + C^2}|^{\frac{1}{3}} (3C + \sqrt[2]{A + C^2}) \right) \\ & - \frac{1.5\epsilon}{\frac{\partial p}{\partial x} (1 - \beta^3) Re Wi^2} \left(\pm |C - \sqrt[2]{A + C^2}|^{\frac{1}{3}} (-3C + \sqrt[2]{A + C^2}) \right) \\ & - \frac{1.5\epsilon}{\frac{\partial p}{\partial x} (1 - \beta^3) Re Wi^2} \left(\pm |2Cy + \sqrt[2]{A + (2Cy)^2}|^{\frac{1}{3}} (-6Cy + \sqrt[2]{A + (2Cy)^2}) \right) \\ & - \frac{1.5\epsilon}{\frac{\partial p}{\partial x} (1 - \beta^3) Re Wi^2} \left(\pm |2Cy - \sqrt[2]{A + (2Cy)^2}|^{\frac{1}{3}} (6Cy + \sqrt[2]{A + (2Cy)^2}) \right), \end{aligned}$$

com as constantes

$$A = \frac{\omega_r^6}{(6\epsilon\beta)^{\frac{1}{3}}} \quad (1.62)$$

e

$$C = \frac{-WiRe(\omega_r)^3 \frac{\partial p}{\partial x}}{8\epsilon\beta}. \quad (1.63)$$

Para as componentes do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$ são empregadas as soluções analíticas

$$\tau_p^{xy} = \pm |W + \sqrt[2]{P + W^2}|^{\frac{1}{3}} \pm |W - \sqrt[2]{P + W^2}|^{\frac{1}{3}}, \quad (1.64)$$

$$\tau_p^{xx} = 2WiRe \frac{\tau_p^{xy^2}}{\omega_r} \quad \text{e} \quad \tau_p^{yy} = 0, \quad (1.65)$$

sendo

$$W = \frac{-\omega_r^3 \frac{\partial p}{\partial x} y}{4\beta\epsilon Wi^2 Re^2} \quad (1.66)$$

e

$$P = \frac{\omega_r^6}{(6\beta\epsilon Wi^2 Re^2)^3}. \quad (1.67)$$

As soluções analíticas apresentadas acima para os modelos Oldroyd-B e PTT serão utilizadas como soluções de referência nas simulações numéricas do próximo Capítulo.

Na fronteira de saída de fluido do domínio do escoamento, definindo \vec{n} a direção normal a fronteira do ejetor, é considerada a condição do tipo Neumann homogênea para as componentes da velocidade, da contribuição não-newtoniana $\boldsymbol{\tau}_p$ e para a temperatura T , dadas respectivamente, por

$$\frac{\partial \mathbf{u}_{\vec{t}}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}_{\vec{n}}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_p}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0. \quad (1.68)$$

Na fronteira rígida adota-se a condição de não-escorregamento (*no-slip*) para a velocidade, ou seja, a velocidade tangencial $\mathbf{u}_{\vec{t}}$ é a mesma que a velocidade na fronteira do fluido \mathbf{u}_f . Como a fronteira rígida está em repouso, consideramos $\mathbf{u} = 0$ e então,

$$\mathbf{u}_{\vec{t}} = 0. \quad (1.69)$$

Também adota-se a condição de fronteira impermeável para a velocidade, isto é, não há fluxo de massa na direção normal ao longo da fronteira,

$$\mathbf{u}_{\vec{n}} = 0. \quad (1.70)$$

Para a temperatura é aplicada a condição adiabática na fronteira rígida considerando que não há fluxo de calor entre o fluido e a parede [31],

$$-k \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (1.71)$$

ou ainda pode-se considerar a condição de Dirichlet,

$$T_w = T_{w0}, \quad (1.72)$$

onde T_w é a temperatura na parede com valor T_{w0} .

Pelas condições de contorno na fronteira rígida para a velocidade, a contribuição não-newtoniana τ_p pode ser calculada por simplificações levando em consideração a direção da fronteira rígida. Assim, dois casos devem ser analisados:

- Fronteira rígida paralela ao eixo- x

Pela condição de não-escorregamento

$$u = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (1.73)$$

e pela condição de impermeabilidade

$$v = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (1.74)$$

Pela equação da continuidade,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (1.75)$$

Portanto, para a contribuição não-newtoniana τ_p , as componentes da equação (1.44) do fluido Oldroyd-B são simplificadas e escritas na fronteira rígida como

$$\frac{\partial \tau_p^{xx}}{\partial t} = 2 \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yx} - \frac{1}{Wi(T)} \tau_p^{xx}, \quad (1.76)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yy} + \frac{\omega_r(T)}{ReWi(T)} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\tau_p^{xy}}{Wi(T)}, \quad (1.77)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{yy}}{\partial t} = -\frac{\tau_p^{yy}}{Wi(T)}. \quad (1.78)$$

Para o modelo PTT, de forma similar a simplificação do modelo Oldroyd-B, a equação (1.45) é simplificada e reescrita na fronteira rígida, em coordenadas Cartesianas bidimensionais, como

$$\frac{\partial \tau_p}{\partial t} = 2 \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yx} - \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r(T)}{Wi(T)} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xx}, \quad (1.79)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yy} + \frac{\omega_r(T)}{Re Wi(T)} \frac{\partial u}{\partial y} - \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r(T)}{Wi(T)} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xy}, \quad (1.80)$$

e

$$\frac{\partial \tau_p^{yy}}{\partial t} = \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r(T)}{Wi(T)} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xy}. \quad (1.81)$$

- Fronteira rígida paralela ao eixo- y

Pela condição de não-escorregamento,

$$v = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.82)$$

e pela condição de impermeabilidade

$$u = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial y} = 0. \quad (1.83)$$

Pela equação da continuidade,

$$\frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1.84)$$

Simplificando de forma similar ao caso em que a fronteira rígida é paralela ao eixo- x , as equações de τ_p^{xx} , τ_p^{xy} e τ_p^{yy} para o fluido Oldroyd-B são dadas por,

$$\frac{\partial \tau_p^{xx}}{\partial t} = -\frac{\tau_p^{xx}}{Wi(T)}, \quad (1.85)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x} \tau_p^{xx} + \frac{\omega_r(T)}{Re Wi(T)} \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\tau_p^{xy}}{Wi(T)}, \quad (1.86)$$

e

$$\frac{\partial \tau_p^{yy}}{\partial t} = 2 \frac{\partial v}{\partial x} \tau_p^{xy} - \frac{1}{Wi(T)} \tau_p^{yy}. \quad (1.87)$$

Para o modelo PTT,

$$\frac{\partial \tau_p^{xx}}{\partial t} = \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r(T)}{Wi(T)} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xx}, \quad (1.88)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x} \tau_p^{xx} + \frac{\omega_r(T)}{Re Wi(T)} \frac{\partial v}{\partial x} - \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r(T)}{Wi(T)} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xy}, \quad (1.89)$$

e

$$\frac{\partial \tau_p^{yy}}{\partial t} = 2 \frac{\partial v}{\partial x} \tau_p^{xy} - \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r(T)}{Wi(T)} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{yy}. \quad (1.90)$$

No próximo capítulo, o método numérico utilizado para as simulações de escoamento de fluido incompressível não-isotérmico será apresentado.

Método computacional

A metodologia MAC (*Marker-and-Cell*) [40] foi uma das primeiras metodologias para a simulação de escoamentos de fluido newtoniano com superfície livre. O método MAC [44] é um esquema explícito que utiliza diferenças finitas como método de discretização para as equações de Navier-Stokes, sendo normalmente implementado em uma malha deslocada. Originalmente foi descrito para o tratamento de escoamentos com superfície livre em que, partículas marcadoras definem inclusive a posição da superfície livre do fluido ¹(Além da região onde possui fluido). Para escoamentos confinados as partículas marcadoras não são necessárias.

Após o desenvolvimento do método MAC, outros métodos foram desenvolvidos, entre eles, o método SMAC (*Simplified Marker-And-Cell*)[2]. Tal metodologia, simplifica as condições de contorno utilizadas no MAC e introduz o conceito de métodos de projeção. Dessa forma, é introduzido um potencial auxiliar (então denominado pseudo-pressão) para a formulação da equação de Poisson dividindo o ciclo computacional em duas partes, de tal forma que a velocidade e pressão não sejam calculadas no mesmo processo iterativo.

Estendendo o método SMAC, surge o método GENSMAC (*Generalized-Simplified-Marker-and-Cell*) desenvolvido por [52], onde partículas virtuais são empregadas para representar apenas a superfície livre do fluido. Outras extensões do método MAC e SMAC podem ser encontradas em [39], [44].

Este capítulo tem por objetivo apresentar detalhes do método numérico adotado neste trabalho. A formulação numérica é baseada em métodos de projeção para a solução do sistema de equações (Seção 1.4).

¹Este tipo de fronteira não será estudada neste trabalho

2.1 Malha computacional

A malha onde as equações do modelos são discretizadas é fixa (euleriana) com espaçamento δ uniforme nas direções x e y admitindo que $\delta x = \delta y$. A malha fixa é composta por células deslocadas (*staggered grid*) onde a velocidade $\mathbf{u} = (u, v)$ é calculada na face da célula, enquanto as outras propriedades do fluido são calculadas no centro da célula.

A Figura 2 ilustra a estrutura de uma célula deslocada, no caso bidimensional, onde φ representa o armazenamento das propriedades: temperatura, pressão e tensor polimérico.

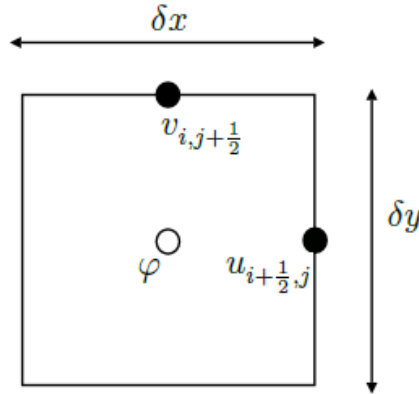


Figura 2: Representação do armazenamento das propriedades em uma célula de uma malha deslocada.

2.2 Classificação das células

As propriedades do escoamento são representadas em uma malha de células mantidas em todo o domínio computacional considerando escoamentos confinados.

Classifiquemos as células **[F]**(*Full*) como células cheias de fluido, células de contorno **[B]**(*Boundary*) determinam a configuração dos contornos rígidos, enquanto que as células no injetor **[I]**(*Inflow*) definem a entrada de fluido no domínio. As células do ejetor **[O]**(*Outflow*) demarcam a saída do fluido no domínio. Como o escoamento é confinado, todas as células possuem fluido, ou seja, não há células vazias no domínio.

A Figura 3 ilustra um exemplo da classificação das células em um domínio computacional.

O	O	O	O	O	O
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	F	F	F	F	B
B	I	I	I	I	B

Figura 3: Classificação das células para escoamentos confinados.

2.3 Método de projeção

A pressão em escoamentos incompressíveis tem como objetivo garantir que a equação da continuidade, sob o ponto de vista da modelagem matemática, seja satisfeita em cada passo do tempo. Sendo assim, a solução numérica das equações (1.42) e (1.49) acopla os campos de pressão e velocidade. Devido a esse acoplamento, estabelecemos dois tipos de métodos: os acoplados e os segregados.

Os métodos acoplados resolvem, em um mesmo processo, o cálculo dos campos de velocidade e de pressão. Tal fato é bastante incomodo do ponto de vista computacional pelo tamanho e não-linearidade do sistema obtido. Já nos métodos segregados, a solução se faz de maneira separada, ou seja, utiliza-se a estratégia de desacoplamento dos campos de velocidade \mathbf{u} e pressão p . Essa estratégia, conhecida como método de projeção, foi proposta por [30] fundamentada pelo Teorema da Decomposição de Helmholds-Hodge (TDHH).

O TDHH afirma que, seja Ω uma região com fronteira $\partial\Omega$ suave e $\tilde{\mathbf{u}}$ um campo vetorial definido em Ω . Nestes termos, a decomposição de $\tilde{\mathbf{u}}$ na forma

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \nabla\psi, \quad (2.1)$$

existe e é única, sendo ϕ um campo escalar também definido em Ω . O campo vetorial \mathbf{u} é solenoidal ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$) e, ao longo de $\partial\Omega$, $\vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{n}} = 0$, onde $\vec{\mathbf{n}}$ é a normal exterior a $\partial\Omega$.

A demonstração deste teorema pode ser encontrado em [30].

A essência do método de projeção consiste em calcular um campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}$ utilizando a equação da quantidade de movimento (1.49), com exceção do termo convectivo da equação,

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p \quad (2.2)$$

e um campo de pressão tentativa $\tilde{p} \neq p$. Essa estratégia desacopla os campos de pressão e velocidade.

Em muitos casos, $\tilde{\mathbf{u}}$ não é solenoidal, pois consideramos a pressão como uma aproximação. Admitindo-se a decomposição do TDHH e aplicando-se o divergente em (2.1) tem-se

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla^2 \psi. \quad (2.3)$$

Impondo a equação da continuidade (1.42) em (2.3), ψ é determinado pela equação de Poisson

$$\nabla^2 \psi = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}, \quad (2.4)$$

com condições de contorno nas fronteiras rígidas e no *inflow*,

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (2.5)$$

enquanto no *outflow*

$$\psi = 0. \quad (2.6)$$

Após o cálculo de ψ , a velocidade \mathbf{u} é obtida por

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \psi. \quad (2.7)$$

Até o momento, apenas o campo de pressão tentativo \tilde{p} e a velocidade \mathbf{u} foram calculados. Para obter o valor corrigido da pressão p , substitui-se (2.7) na equação da quantidade de movimento (2.2) e compara-se com a equação (1.43), resultando na equação

$$p = \tilde{p} + \frac{\psi}{\delta t} - \left(\frac{\beta}{Re} \right) \nabla^2 \psi. \quad (2.8)$$

2.4 Integração temporal da equação da quantidade de movimento

Proposta por Oishi et al. nos trabalhos [48] e [47], a integração temporal da equação da quantidade de movimento é feita de forma semi-implícita, onde os termos convectivos da equação (1.49) são integrados explicitamente enquanto os termos difusivos da equação da quantidade de movimento são integrados implicitamente.

Utilizando o método de Euler implícito (EI) na integração temporal da equação de quantidade de movimento (1.49), considerando $\tilde{\tau}_p$ uma aproximação para τ_p , tem-se

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n = -\nabla p^{n+1} + \left(\frac{\beta}{Re}\right) \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} + \nabla \cdot \tilde{\tau}_p^{n+1}, \quad (2.9)$$

e reescrevendo a equação (2.9) para o campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$,

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n = -\nabla \tilde{p}^{n+1} + \left(\frac{\beta}{Re}\right) \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \nabla \cdot \tilde{\tau}_p^{n+1}, \quad (2.10)$$

onde $\tilde{\mathbf{u}}^n = \mathbf{u}^n$ e $\tilde{p}^{n+1} = p^n$.

A correção da pressão é feita substituindo a equação da atualização da velocidade

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \nabla \psi^{n+1}, \quad (2.11)$$

na equação (2.10),

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{u} + \nabla \psi)^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n &= -\nabla \tilde{p}^{n+1} + \left(\frac{\beta}{Re}\right) \nabla^2 (\mathbf{u} + \nabla \psi)^{n+1} + \nabla \cdot \tilde{\tau}_p^{n+1} \quad \Rightarrow \\ \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n &= -\nabla \left(\tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1} \right) + \nabla \cdot \tilde{\tau}_p^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Comparando a equação (2.12) com a equação (2.9), obtêm-se o valor da pressão corrigida

$$p^{n+1} = \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \left(\frac{\beta}{Re}\right) \nabla^2 \psi^{n+1}. \quad (2.13)$$

Aplicando o método implícito para resolver a equação da quantidade de movimento, faz-se necessário respeitar a condição CFL (Corant-Friedrichs-Lewy)[37] imposta para o cálculo de δt . Esta condição está relacionada aos termos não-lineares da equação da quantidade de movimento, expressa por

$$\delta t_{CFL} = \min\{\delta t_{CFL_x}, \delta t_{CFL_y}\}, \quad (2.14)$$

onde

$$\delta t_{CFL_x} = \frac{\delta x}{|u|_{max}}, \quad (2.15)$$

$$\delta t_{CFL_y} = \frac{\delta y}{|v|_{max}}, \quad (2.16)$$

e, $|u|_{max}$ e $|v|_{max}$ representam, os valores máximos que as velocidades u e v atingem em módulo nas direções x e y , respectivamente.

2.5 Integração temporal da equação constitutiva

As equações constitutivas (1.44) e (1.45) que definem $\boldsymbol{\tau}_p$ são resolvidas utilizando o método de Runge-Kutta de segunda ordem de precisão na sua integração temporal. Para um fluido Oldroyd-B, a equação (1.44) pode ser reescrita na forma de uma equação diferencial parcial

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}_p}{\partial t} = G(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T), \quad (2.17)$$

onde $G(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T)$ é dado por

$$G(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T) = \frac{\omega_r(T)}{Re} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] - \frac{1}{Wi(T)} (\nabla \cdot (\mathbf{u} \boldsymbol{\tau}_p) - ((\nabla \mathbf{u})^T \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \nabla \mathbf{u})) \cdot \quad (2.18)$$

Para o modelo viscoelástico PTT, a equação (1.45) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}_p}{\partial t} = F(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T), \quad (2.19)$$

onde

$$F(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T) = \frac{\omega_r(T)}{Re} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] - \frac{1}{Wi(T)} (\nabla \cdot (\mathbf{u} \boldsymbol{\tau}_p) - ((\nabla \mathbf{u})^T \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \nabla \mathbf{u})) \quad (2.20)$$

$$- Re \epsilon \frac{Wi(T)}{\omega_r(T)} Tr_{\boldsymbol{\tau}_p} \boldsymbol{\tau}_p.$$

O esquema Runge-Kutta é aplicado em duas etapas para o cálculo de τ_p . Na primeira etapa, calcula-se primeiramente $\tilde{\tau}_p^{n+1}$ por Euler Explícito,

$$\frac{\tilde{\tau}_p^{n+1} - \tau_p^n}{\delta t} = G(\mathbf{u}^n, \tau_p^n, T^n) \quad (2.21)$$

e na segunda etapa, calcula-se τ_p^{n+1} de forma semelhante a Regra do Trapézio

$$\frac{\tau_p^{n+1} - \tau_p^n}{\delta t} = \frac{1}{2} \left[G(\mathbf{u}^n, \tau_p^n, T^n) + G(\mathbf{u}^{n+1}, \tilde{\tau}_p^{n+1}, \tilde{T}^{n+1}) \right]. \quad (2.22)$$

As equações (2.21) e (2.22), respectivamente, são redefinidas para o modelo PTT por

$$\frac{\tilde{\tau}_p^{n+1} - \tau_p^n}{\delta t} = F(\mathbf{u}^n, \tau_p^n, T^n), \quad (2.23)$$

e

$$\frac{\tau_p^{n+1} - \tau_p^n}{\delta t} = \frac{1}{2} \left[F(\mathbf{u}^n, \tau_p^n, T^n) + F(\mathbf{u}^{n+1}, \tilde{\tau}_p^{n+1}, \tilde{T}^{n+1}) \right]. \quad (2.24)$$

2.6 Integração temporal da equação da temperatura

A integração temporal da equação da temperatura dos modelos Oldroyd-B e PTT será feita de forma semelhante a integração temporal das equações constitutivas para o tensor polimérico τ_p .

Assim, reescrevendo a equação da temperatura (1.50) do modelo Oldroyd-B, primeiramente, na forma de uma equação diferencial parcial, tem-se

$$\frac{\partial T}{\partial t} = W(\mathbf{u}, \tau_p, T), \quad (2.25)$$

onde

$$W(\mathbf{u}, \tau_p, T) = -\frac{\partial u T}{\partial x} - \frac{\partial v T}{\partial y} + \frac{1}{Pe} \nabla^2 T + \quad (2.26)$$

$$2\beta \frac{Br}{Pe} (\tau_s : \mathbf{D}) + \frac{Br Re}{Pe} \left(\alpha \tau_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \tau_p}{2Wi} \right).$$

A equação da temperatura (1.45) do modelo PTT pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} = P(\mathbf{u}, \tau_p, T) \quad (2.27)$$

onde

$$P(\mathbf{u}, \tau_p, T) = -\frac{\partial u T}{\partial x} - \frac{\partial v T}{\partial y} + \frac{1}{Pe} \nabla^2 T + \quad (2.28)$$

$$\frac{BrRe}{Pe} \left(\alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2Wi} \right).$$

Aplicando Euler explícito, na primeira etapa, o cálculo de \tilde{T}^{n+1} é feito por

$$\frac{\tilde{T}^{n+1} - T^n}{\delta t} = W(\mathbf{u}^n, \tilde{\boldsymbol{\tau}}_p^{n+1}, T^n) \quad (2.29)$$

no modelo Oldroyd-B, enquanto no modelo PTT

$$\frac{\tilde{T}^{n+1} - T^n}{\delta t} = P(\mathbf{u}^n, \tilde{\boldsymbol{\tau}}_p^{n+1}, T^n). \quad (2.30)$$

Na segunda etapa, pela regra do Trapézio, calcula-se T^{n+1} para o modelo Oldroyd-B por

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\delta t} = \frac{1}{2} \left[W(\mathbf{u}^n, \boldsymbol{\tau}_p^n, T^n) + W(\mathbf{u}^{n+1}, \boldsymbol{\tau}_p^{n+1}, \tilde{T}^{n+1}) \right] \quad (2.31)$$

e

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\delta t} = \frac{1}{2} \left[P(\mathbf{u}^n, \boldsymbol{\tau}_p^n, T^n) + P(\mathbf{u}^{n+1}, \boldsymbol{\tau}_p^{n+1}, \tilde{T}^{n+1}) \right] \quad (2.32)$$

para o modelo PTT.

2.7 Ciclo Computacional

Suponha que \mathbf{u}^n , p^n , $\boldsymbol{\tau}_p^n$ e T^n são conhecidos no tempo $t = t_n$. O ciclo computacional que será executado para calcular \mathbf{u}^{n+1} , p^{n+1} , $\boldsymbol{\tau}_p^{n+1}$ e T^{n+1} em $t_{n+1} = t_n + \delta t$ é dado, simplifcadamente pra o modelo Oldroyd-B, pelos seguintes passos:

- **Passo 1-O:** Calcula-se $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_p^{n+1}$ através de (2.21).
- **Passo 2-O:** Calcula-se \tilde{T}^{n+1} por (2.29).
- **Passo 3-O:** Calcula-se $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ por (2.10) com $\tilde{\mathbf{u}}^n = \mathbf{u}^n$ e $\tilde{p}^{n+1} = p^n$.
- **Passo 4-O:** Cálculo de ψ^{n+1} pela solução da equação de Poisson $\nabla^2 \psi^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ com condições de contorno (2.5) e (2.6).

- **Passo 5-O:** Atualização de \mathbf{u}^{n+1} usando (2.11).
- **Passo 6-O:** Atualização do campo de pressão por (2.13).
- **Passo 7-O:** Cálculo de $\boldsymbol{\tau}_p^{n+1}$ por (2.22).
- **Passo 8-O:** Cálculo de T^{n+1} por (2.31).
- **Passo 9-O:** Atualizar as propriedades (1.46) assim como as condições de contorno expostas na Seção 1.5.

Para o cálculo de $\boldsymbol{\tau}_p$ definido pela equação constitutiva do modelo PTT, as mudanças surgem no ciclo computacional com a alteração do **Passo 1-O**, **Passo 2-O**, **Passo 7-O** e **Passo 8-O** para:

- **Passo 1-P:** Calcula-se $\tilde{\boldsymbol{\tau}}_p^{n+1}$ através de (2.23).
- **Passo 2-P:** Calcula-se \tilde{T}^{n+1} por (2.30).
- **Passo 7-P:** Cálculo de $\boldsymbol{\tau}_p^{n+1}$ por (2.24).
- **Passo 8-P:** Cálculo de T^{n+1} por (2.32).

2.8 Discretização espacial

Definida as equações apresentadas para a solução do modelo não-isotérmico, é necessário ressaltar alguns aspectos da discretização por diferenças finitas. Quando analisamos modelos viscoelásticos [48] alguns cuidados devem ser tomados principalmente nas condições de contorno por apresentarem não linearidades nas equações.

A discretização espacial da equação da continuidade, equação de quantidade de movimento, equação para a contribuição não-newtoniana, assim como a discretização do campo de pressão e equação de Poisson para o potencial auxiliar e suas respectivas discretizações para a fronteira rígida, injetores e ejetores, podem ser encontradas em [43] e [50]. Detalhes sobre a discretização das equações no GENSMAC podem ser encontradas em [53].

É importante ressaltar que os trabalhos citados abordam discretizações para o modelo viscoelástico isotérmico. Para o modelo viscoelástico não-isotérmico, os termos são discretizados de forma semelhante, salvo alguns parâmetros que merecem ajustes.

Neste capítulo será apresentado a discretização espacial da equação da temperatura e do modelo WLF. A análise da discretização na fronteira rígida, injetores e ejetores é feita com certo cuidado considerando as possíveis direções x e y para o escoamento.

2.8.1 Equações de aproximação para a temperatura

No capítulo anterior foi apresentado métodos para a integração temporal da equação da temperatura. Agora, será definido aproximações para as derivadas espaciais da equação da temperatura (1.50), assim como as equações (1.46) do modelo WLF discretizadas no centro da célula. Por simplicidade, será omitido o tempo na discretização das equações.

De acordo com a célula apresentada na Figura 2, a temperatura é avaliada no centro da célula ($T_{i,j}$). Considerando o sistema de coordenadas cartesianas bidimensionais, a equação (2.26) em (2.25) para o fluido Oldroyd-B é dada por

$$\begin{aligned}
 W(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T) = & -\frac{\partial(uT)}{\partial x} - \frac{\partial(vT)}{\partial y} + \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \\
 & \frac{2\beta Br}{Pe} \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right] \right\} + \\
 & \alpha \frac{Br Re}{Pe} \left\{ \left[\tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \left(\frac{\tau_p^{xy}}{2} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + (1 - \alpha) \frac{\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}}{2Wi} \right\}. \quad (2.33)
 \end{aligned}$$

Discretizando as derivadas espaciais da equação acima no centro das células **[F]** e com interface com células **[F]**, segue

$$\begin{aligned}
 W(\mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}_p, T)|_{i,j} = & -\frac{\partial(uT)}{\partial x} \Big|_{i,j} - \frac{\partial(vT)}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{1}{Pe} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \Big|_{i,j} \right) + \\
 & \frac{2\beta Br}{Pe} \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right)^2 \right] \right\} + \quad (2.34) \\
 & \alpha \frac{Br Re}{Pe} \left\{ \left[\tau_p^{xx} \Big|_{i,j} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} + \tau_p^{yy} \Big|_{i,j} \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} + \left(\frac{\tau_p^{xy} \Big|_{i,j}}{2} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \right) \right] + (1 - \alpha) \frac{\tau_p^{xx} \Big|_{i,j} + \tau_p^{yy} \Big|_{i,j}}{2Wi} \right\}
 \end{aligned}$$

Os termos convectivos $\frac{\partial(uT)}{\partial x} \Big|_{i,j}$ e $\frac{\partial(vT)}{\partial y} \Big|_{i,j}$ são aproximados pelo método *upwind* de alta ordem CUBISTA [1]. Os termos difusivos da equação (2.34) são aproximados pelo método de diferenças centradas de segunda ordem, enquanto as derivadas espaciais da equação (2.34) são discretizadas por diferenças centradas de segunda ordem.

A contribuição não-newtoniana avaliada no centro da célula, é calculada de acordo com a equação constitutiva do modelo Oldroyd-B. Mais detalhes sobre a discretização desses termos podem ser encontrados em [50] e [43].

As equações (1.46) são discretizadas no espaço por

$$Wi(T)|_{i,j} = Wi(T_0)exp\left[-\frac{C_1 T|_{i,j}}{C_2 + T|_{i,j}}\right], \quad (2.35)$$

$$\omega_r(T)|_{i,j} = \omega_r(T_0)exp\left[-\frac{C_1 T|_{i,j}}{C_2 + T|_{i,j}}\right]. \quad (2.36)$$

A discretização espacial dos termos da equação da temperatura (2.28) para o modelo PTT é feita da mesma forma como apresentado para o modelo Oldroyd-B.

2.8.2 Equações de aproximação nos injetores

As células do injetor **[I]** possui face com o interior do domínio de acordo com a geometria adotada para o problema (Figura 2). Sendo assim, deve-se considerar quatro possíveis configurações de células do contorno de entrada de fluido. A Figura 4 ilustra uma situação para a configuração da célula **[I]**, de tal forma que os demais casos podem ser obtidos de forma análoga.

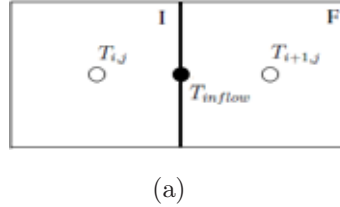


Figura 4: Ilustração de uma célula do Injetor paralela ao eixo x

Ao longo da fronteira do injetor, considera-se a condição de Dirichlet homogênea para temperatura como visto na Seção 1.5. Sendo assim, quando a aresta da célula **[I]** está em contato com células **[F]** paralelo ao eixo- x , a temperatura $T|_{i,j}$ é obtida por média aritmética,

$$T|_{i,j} = 2T_{inflow} - T|_{i+1,j}, \quad (2.37)$$

onde T_{inflow} é o valor da temperatura de acordo com o problema.

2.8.3 Equações de aproximação nos ejetores

Neste tipo de contorno, a Figura 5 ilustra duas das quatro possíveis configurações de células de contorno de saída de fluido, onde as células **[O]** estão em contato com as células **[F]**.

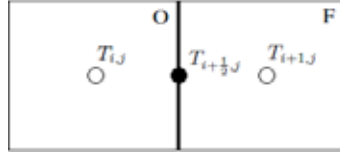


Figura 5: Ilustração de uma célula do ejetor paralelo ao eixo x .

Para a temperatura nos ejetores considera-se a condição do tipo Neumann homogênea apresentada na equação (1.68). Quando a aresta da célula **[O]** está em contato com células **[F]** paralelo ao eixo- x (Ver Figura 5), calcula-se $T|_{i,j}$ aplicando o método de diferenças centradas de segunda ordem,

$$\frac{T|_{i,j} - T|_{i+1,j}}{\delta x} = 0 \quad (2.38)$$

e então,

$$T|_{i,j} = T|_{i+1,j}. \quad (2.39)$$

2.8.4 Equações de aproximação no contorno rígido

Neste tipo de contorno, a equação da temperatura é discretizada no centro da célula do contorno rígido **[B]** em contato com uma célula **[F]** do interior do domínio. Para a temperatura, considera-se dois tipos de aproximação para a fronteira rígida: condição adiabática (1.71) e condição de Dirichlet (1.72). Veja os casos a seguir:

1. Condição adiabática na fronteira rígida.

Para analisar a aproximação para a temperatura na fronteira rígida aplicando a condição adiabática,

$$-k \frac{\partial T|_{i,j}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (2.40)$$

onde \vec{n} é a orientação em que o fluido escoar, sendo necessário a análise das possíveis configurações de células como ilustrado na Figura 6.

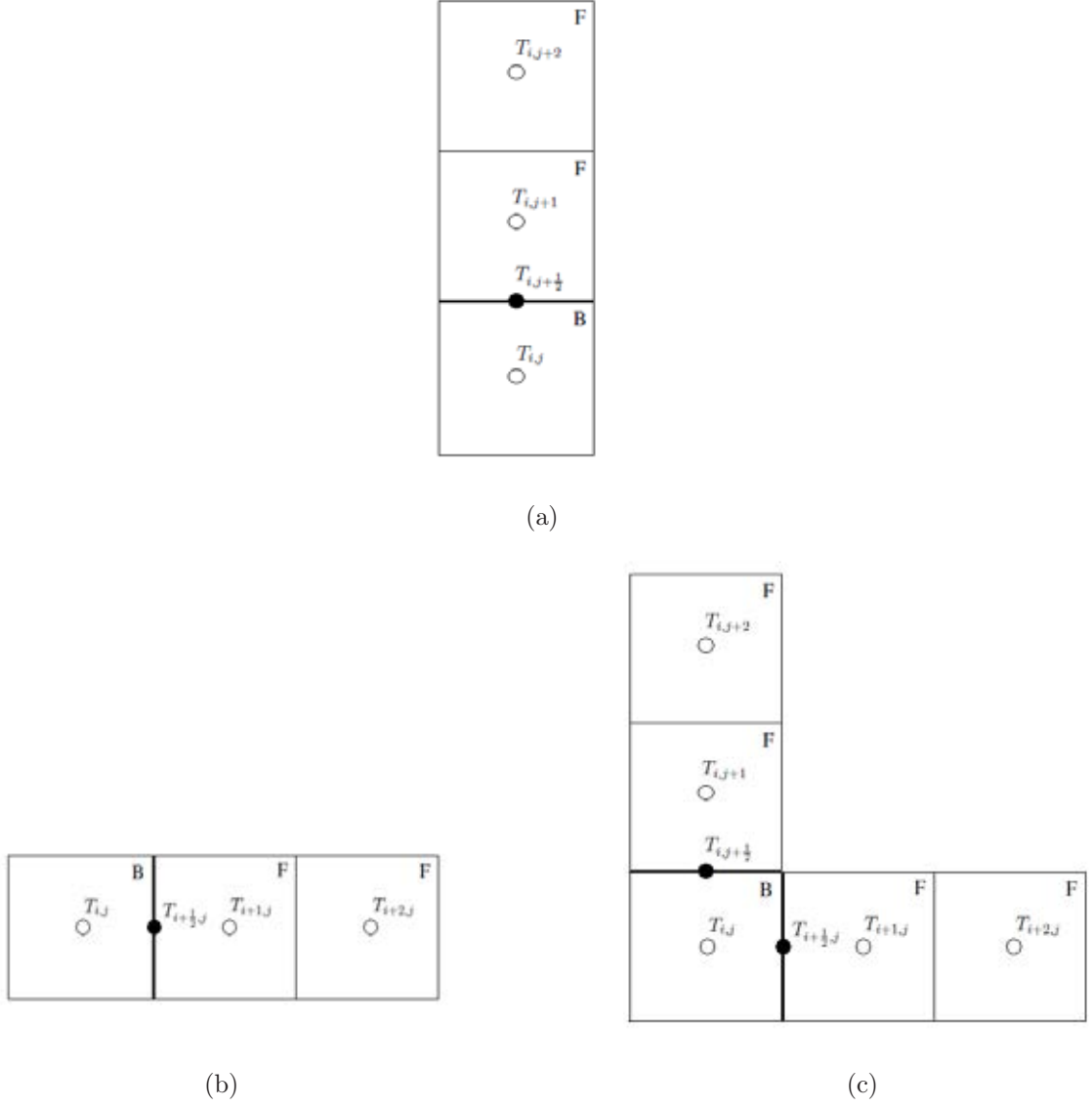


Figura 6: Ilustração de uma célula de contorno rígido paralelo ao eixo- x (a), paralelo ao eixo- y (b) e em quina (c)

Considere a fronteira rígida paralelo ao eixo- x como na Figura 6(a). Então a equação (2.40) torna-se

$$k \left(\frac{T|_{i,j+1} - T|_{i,j}}{\delta y} \right) = 0 \quad (2.41)$$

e então,

$$T|_{i,j} = T|_{i,j+1}. \quad (2.42)$$

Observe que na Figura 6(a), as células do tipo **[F]** tem em comum a aresta inferior as células **[B]**. No caso em que o contato é feita pela aresta superior, os cálculos de $T|_{i,j}$ foram omitido pois o processo é análogo.

Na Figura 6(b), onde a fronteira rígida é paralela ao eixo- y , a equação (2.40) é dada por

$$-k \frac{\partial T|_{i,j}}{\partial x} = 0, \quad (2.43)$$

e aplicando o método de diferenças centradas de segunda ordem,

$$\left(\frac{T|_{i+1,j} - T|_{i,j}}{\delta x} \right) = 0 \quad (2.44)$$

e então,

$$T|_{i,j} = T|_{i+1,j}. \quad (2.45)$$

Para o caso em que a célula **[B]** está em contato com as células **[F]** pela aresta à esquerda, o processo para o cálculo de $T|_{i,j}$ é feito de forma análoga.

A aproximação feita nas células **[B]** quando tem-se uma quina, como mostra a Figura 6(c), é feita calculando $T|_{i,j}$ nas duas faces de **[B]** em contato com as células **[F]** de forma independente,

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T|_{i+1,j} - T|_{i,j}}{\delta x} = 0 \quad \Rightarrow \quad (2.46)$$

$$T|_{i,j} = T|_{i+1,j} \quad (2.47)$$

e

$$-k \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{T|_{i,j+1} - T|_{i,j}}{\delta y} = 0 \quad \Rightarrow \quad (2.48)$$

$$T|_{i,j} = T|_{i+1,j}. \quad (2.49)$$

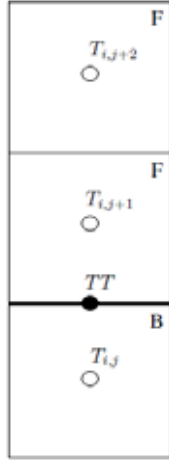
Logo, utilizando média aritmética, tem-se

$$T|_{i,j} = \frac{T|_{i+1,j} + T|_{i,j+1}}{2}. \quad (2.50)$$

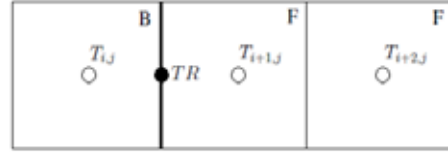
As outras possibilidades de quinas entre as células **[B]** e **[F]** são omitidas pelo fato de serem calculadas de forma análoga.

2. Condição Dirichlet na fronteira rígida.

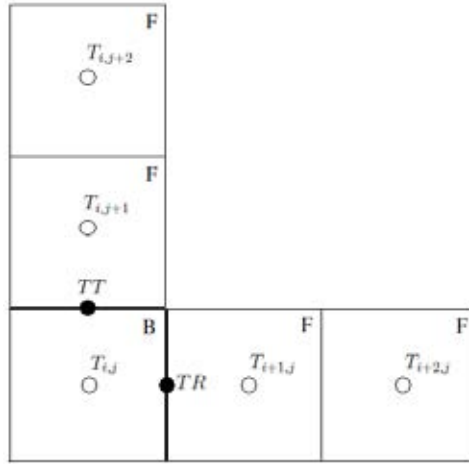
Para analisar as aproximações para a temperatura na fronteira rígida aplicando a condição Dirichlet, é necessário analisar as possíveis orientações de células na qual o fluido escoa, conforme Figura 7.



(a)



(b)



(c)

Figura 7: Ilustração de uma célula de contorno rígido paralelo ao eixo- x (a), paralelo ao eixo- y (b) e em quina (c) com valores TT e TR na fronteira das células **[B]** com as células **[F]**.

Os termos TT e TR representam os valores da temperatura na face superior e na face direita das células **[B]**, respectivamente. Considere a fronteira rígida paralelo ao eixo- x como na Figura 7(a).

O cálculo de $T|_{i,j}$ é feito por

$$TT = \frac{T|_{i,j} + T|_{i,j+1}}{2}, \quad (2.51)$$

obtendo

$$T|_{i,j} = 2TT - T|_{i,j+1}. \quad (2.52)$$

Observe que na Figura 7(a), as células do tipo **[F]** tem em comum a aresta inferior as células **[B]**. No caso em que o contato é feito pela aresta superior, os cálculos de $T|_{i,j}$ são feitos de forma análoga.

Na Figura 7(b), onde a fronteira rígida é paralela ao eixo- y , $T|_{i,j}$ é dada por

$$TR = \frac{T|_{i,j} + T|_{i+1,j}}{2} \quad (2.53)$$

e então

$$T|_{i,j} = 2TR - T|_{i+1,j}. \quad (2.54)$$

Para o caso em que a célula **[B]** está em contato com as células **[F]** pela aresta comum à esquerda, o processo para o cálculo de $T|_{i,j}$ é feito de forma análoga.

Conforma a Figura 7(c), onde as células **[B]** estão em quina com as células **[F]**, $T|_{i,j}$ é aproximado nas duas faces de **[B]** em contato com as células **[F]** de forma independente.

Usando média aritmética, tem-se

$$2(TT + TB) = 2T|_{i,j} + T|_{i,j+1} + T|_{i+1,j} \quad (2.55)$$

resultando em

$$T|_{i,j} = (TT + TB) - \frac{T|_{i,j+1}}{2} - \frac{T|_{i+1,j}}{2}. \quad (2.56)$$

As outras possíveis possibilidades de quinas entre as células **[B]** e **[F]** são omitidas por serem calculadas de forma análoga.

Verificação da metodologia numérica

Este Capítulo é dedicado a validação da metodologia numérica estudada utilizando a simulação de escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos modelados pelas equações constitutivas Oldroyd-B e PTT. Estes resultados, todos na forma adimensional, serão ilustrados numericamente verificando o comportamento do modelo não-isotérmico.

Dessa forma, na seção 3.1 são considerados e descritos a geometria do canal utilizado, as condições iniciais e condições de contorno do problema, assim como a forma como o erro relativo é calculado, com o objetivo de demonstrar a convergência espacial do modelo.

A seção 3.2 apresenta as simulações feitas no canal para o modelo Oldroyd-B, enquanto a seção 3.3 apresenta os resultados do modelo PTT. A seção 3.4 é destinada a comparação entre os modelos isotérmico e não-isotérmico nos dois modelos viscoelásticos, com o objetivo de ilustrar a diferença que a temperatura exerce no escoamento, adicionando a equação da energia nas equações de Navier-Stokes.

3.1 Escoamento entre placas paralelas: *Poiseuille flow*

Para as simulações, o caso teste de um escoamento entre placas paralelas será utilizado. Sua geometria é apresentada na Figura 8. Este escoamento é caracterizado pelo fato de que o canal está inicialmente cheio de fluido denotando, assim, escoamento confinado.

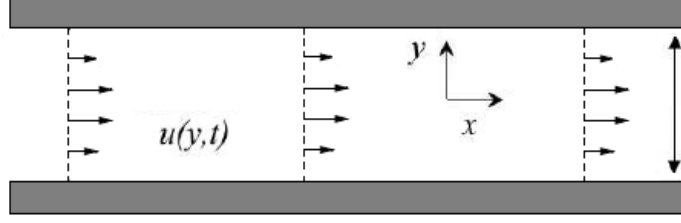


Figura 8: Escoamento entre placas paralelas paralelo ao eixo- x .

O canal tem dimensões $10L_0 \times 1L_0$, onde L_0 é distância entre as placas do canal e $10L_0$ o comprimento das placas.

As condições iniciais e de contorno para a solução das equações são as mesmas apresentadas na seção 1.4 do capítulo 1. No injetor, considerando o escoamento em regime permanente no canal, assume-se $v = 0$ e impõe-se um perfil parabólico para $u(y)$ dada pelas equações (1.57) para o modelo Oldroyd-B e equações (1.61)-(1.63) para o modelo PTT.

Os valores das componentes τ_p^{xx} , τ_p^{xy} e τ_p^{yy} do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$ são impostas no injetor pelas equações (1.58) - (1.60) e (1.64) - (1.67), caso isotérmico, para os modelos Oldroyd-B e PTT, respectivamente. Nos ejetores, a condição de contorno do tipo Neumann homogênea é utilizada, equações (1.68) para os dois modelos constitutivos.

Na fronteira rígida, assume-se a condição de impermeabilidade, equação (1.74), e condição de aderência completa (*no-slip*) para a velocidade u , equação (1.73). Neste caso, a equação da continuidade (1.42) é satisfeita e as equações dos componentes do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$ para o modelo Oldroyd-B reduz-se as equações (1.76) - (1.78). Para o modelo PTT, as equações de $\boldsymbol{\tau}_p$ são reduzidas as equações (1.79) - (1.81).

As condições de contorno acima expostas, para as variáveis da velocidade \mathbf{u} e do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$, são utilizadas nas próximas simulações nas sub-seções 3.1.1, 3.1.2 e 3.1.3. As condições impostas para a temperatura são descritas em cada sub-seção.

Para os cálculos computacionais são utilizadas malhas espaciais uniformes, como mostra a Tabela 3.1, as quais possibilitam analisar de forma quantitativa a convergência das soluções numéricas obtidas com a formulação viscoelástica.

Malhas	Células	Espaçamento adimensional
Malha 1 ($M1$)	20×200	$\delta x = \delta y = 0.05$
Malha 2 ($M2$)	40×400	$\delta x = \delta y = 0.025$

Tabela 3.1: Características das malhas espaciais usadas para o cálculo da solução numérica no canal.

Assumi-se passo temporal adimensional $\delta t = 0.001$ respeitando a condição de estabilidade (2.14). As simulações são feitas em um canal totalmente cheio de fluido, com tempo final adimensional de simulação $t = 50.0$, onde o escoamento atinge o estado estacionário. Em seguida é feito um corte transversal em $x = 5.0L_0$ para a comparação entre a solução de referência e a solução numérica. A solução de referência mencionada é a solução simplificada exposta na seção 1.4 do capítulo 1. Como a solução de referência para a temperatura não é conhecida neste problema, apenas os resultados com as soluções numéricas obtidas com a malha $M1$ e $M2$ são apresentados neste caso. Para a análise de convergência da temperatura, apresenta-se os resultados gráficos comparando a malha $M1$ e $M2$.

Para demonstrar a convergência do modelo, calculou-se o erro relativo na norma euclidiana l_2 , onde para uma variável genérica analisada ζ , é dado da seguinte maneira

$$E(\zeta)_2 = \frac{\|(\zeta)_{M_i} - (\zeta)_{\text{referência}}\|_2}{\|(\zeta)_{\text{referência}}\|_2}, \quad (3.1)$$

sendo $(\zeta)_{M_i}$ a solução numérica obtida da variável analisada na malha M_i , com $i = 1$ e 2 e $\zeta_{\text{referência}}$ a solução de referência da variável analisada.

O cálculo da taxa de convergência espacial é feito pela expressão

$$O(\zeta)_{\frac{M_i}{M_i}} = \frac{\ln\left(\frac{E(\zeta)_{N_i}}{E(\zeta)_{M_i}}\right)}{\ln(2)}. \quad (3.2)$$

A partir de agora denotaremos a solução simplificada por solução analítica por simplicidade.

3.1.1 Resultados numéricos para o modelo Oldroyd-B

Inicia-se as simulações impondo condição de Dirichlet $T = 1.0$ para a temperatura no injetor. Nas paredes do canal, temperatura constante $T = 0$, enquanto nos ejetores, emprega-se Neumann. Além das condições de contorno, adota-se $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$ para as constantes do fator de deslocamento f_T , equação (1.51). Assumi-se escoamento viscoelástico com parâmetros adimensionais $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.8$ e $Br = 1.0$. Para os parâmetros calculados em função da temperatura, adota-se $Wi = 0.4$ e $\omega_r = 0.2$ no instante inicial, de tal forma que a temperatura atualize esses parâmetros pela equação WLF.

A Figura 9 apresenta o perfil em $x = 5L_0$ da velocidade $u(y)$ no escoamento comparando a solução de referência com os resultados numéricos obtidos nas malhas $M1$ e $M2$. Com o refinamento da malha espacial é possível notar que as soluções numéricas possuem

similaridade com o comportamento da solução de referência. Com o refinamento da malha a solução numérica converge para a solução analítica. Essa convergência é mostrada na Tabela 3.2 onde é feito o cálculo do erro relativo. Pode-se observar que os erros decrescem quando a malha é refinada.

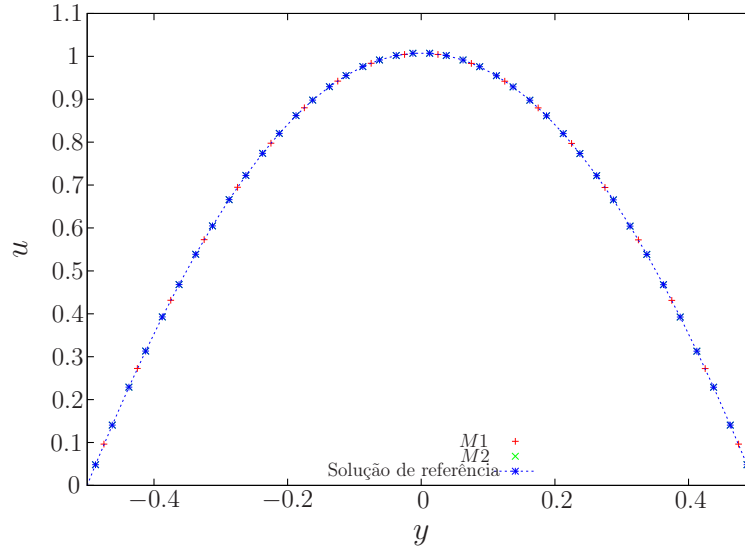


Figura 9: Comparação entre a solução numérica em diferentes malhas e a solução de referência da velocidade u para o escoamento *Poiseuille* de um fluido Oldroyd-B com $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $Br = 1.0$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 0.5$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).

A comparação entre o perfil dos resultados nas duas malhas $M1$ e $M2$ para a temperatura T é mostrado na Figura 10. De acordo com a Figura 10 é possível ver que houve convergência numérica para a temperatura. O perfil parabólico é caracterizado pela influência do termo difusivo da equação da temperatura. A orientação da parábola é obtida com os valores adotados no injetor e na fronteira rígida.

A Figura 11 apresenta a comparação entre a solução numérica e a solução de referência das componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} do tensor polimérico, respectivamente. Pode-se observar que houve convergência da solução numérica com o refinamento da malha espacial. De forma quantitativa, essa convergência pode ser notada na Tabela 3.2 onde é feito o cálculo do erro relativo. Os erros diminuem quando é feito o refinamento da malha.

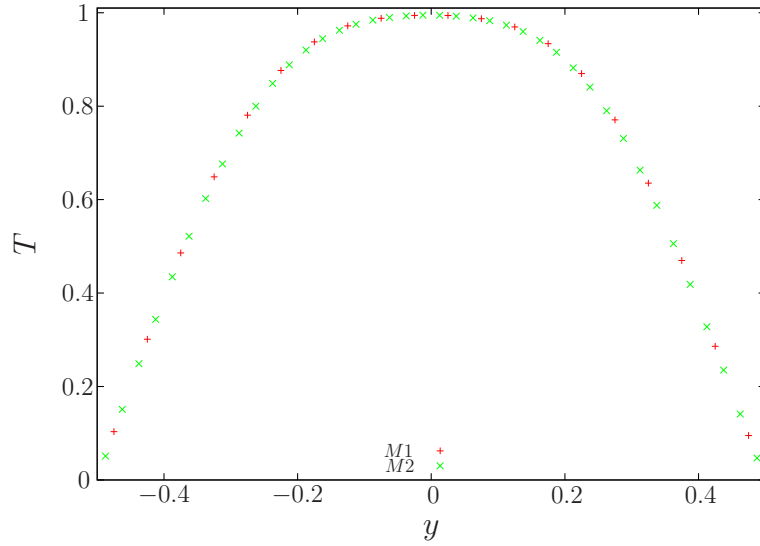


Figura 10: Perfil da solução numérica da temperatura T no escoamento *Poiseuille* nas malhas $M1$ e $M2$ de um fluido Oldroyd-B com $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $Br = 1.0$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 0.5$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).

M_i	$E(u)_{M_i}$	$E(\tau_p^{xx})_{M_i}$	$E(\tau_p^{xy})_{M_i}$
$i = 1$	1.32×10^{-1}	1.30×10^{-1}	1.37×10^{-1}
$i = 2$	3.40×10^{-2}	3.34×10^{-2}	3.60×10^{-2}

Tabela 3.2: Erros nas malhas $M1$ e $M2$ para o escoamento do fluido Oldroyd-B para a componente u da velocidade e componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} de $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo $t = 50$.

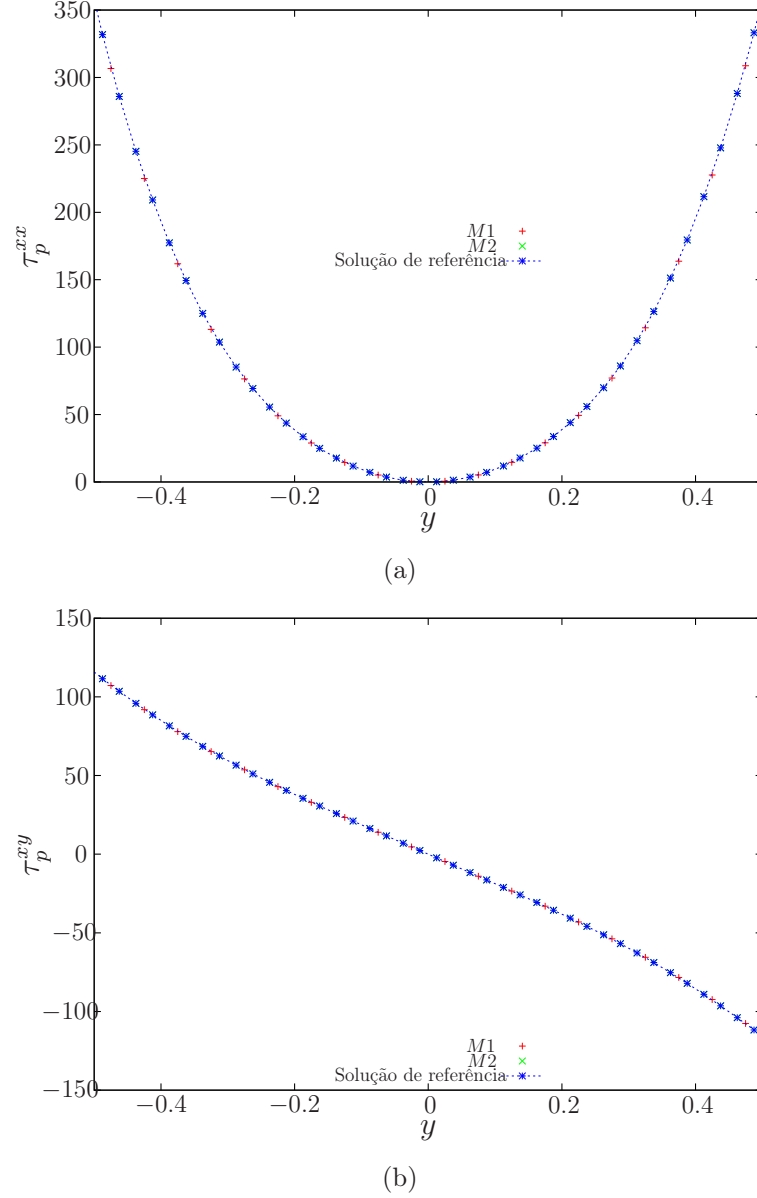


Figura 11: Comparação entre a solução numérica em diferentes malhas e a solução de referência da componente $\tau_p^{xx}(a)$ e $\tau_p^{xy}(b)$ para o escoamento *Poiseuille* de um fluido Oldroyd-B com $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $Br = 1.0$, $\beta = 0.8$ e $\alpha = 0.5$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).

3.1.2 Resultados numéricos para o modelo PTT

Esta seção apresenta as simulações do escoamento viscoelástico não-isotérmico no canal *Poiseuille* utilizando o modelo constitutivo PTT. A simulação é feita em um canal (Figura 8) totalmente cheio de fluido quando o escoamento atinge seu estado estacionário ($t = 50$) fazendo um corte vertical em $x = 5L_0$. Na entrada de fluido da geometria do canal impõe-se condição de Dirichlet $T = 1.0$. Na fronteira rígida do canal é imposto a temperatura

$T = 0$, enquanto nos ejetores aplica-se a condição de Neumann homogênea. Maiores detalhes são expostos na seção 1.4 do capítulo 1.

São utilizados os seguintes parâmetros adimensionais: $Re = 0.01$, $\epsilon = 0.5$, $\beta = 0.6$, $\alpha = 0.5$, $Pe = 400.0$ e $Br = 1.0$. No instante inicial do escoamento adota-se $W_i = 0.2$ e $\omega_r = 0.4$ para atualização em cada ciclo de simulação. As constantes utilizadas na equação do fator de deslocamento (equação (1.51)) são $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$.

A Figura 12 mostra a comparação da solução de referência com a solução numérica obtida utilizando as malhas $M1$ e $M2$ para a componente $u(y)$ da velocidade. Pode-se notar nesta figura que as soluções numéricas obtidas possuem uma similaridade com a solução de referência. Além disso, a Tabela 3.3 mostra que os erros decrescem com o refinamento de malha. Estes resultados demonstram que a solução numérica converge para a solução de referência quando a malha é refinada. O comportamento da solução numérica obtido na Figura 12 se assemelha qualitativamente ao perfil de solução numérica observado em [28].

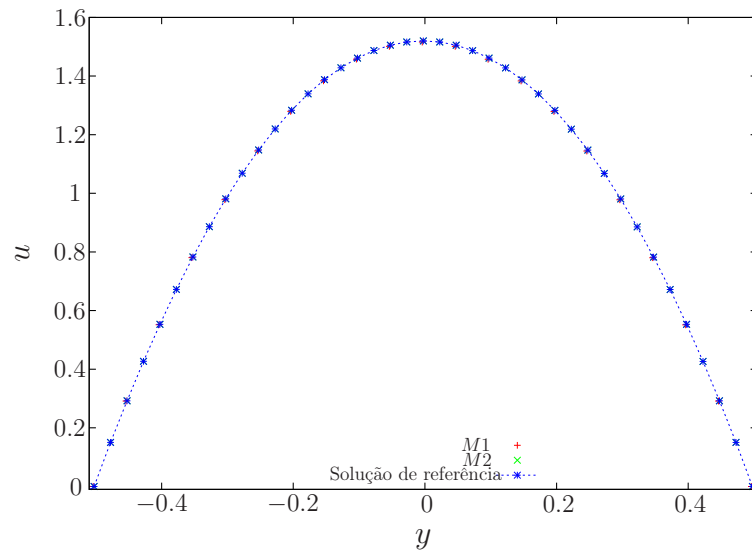


Figura 12: Comparação entre a solução de referência e a solução numérica em diferentes malhas da velocidade u para o escoamento *Poiseuille* do fluido tipo PTT com $Pe = 400.0$, $\epsilon = 0.5$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $\beta = 0.6$ e $Br = 1.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).

A Figura 13 apresenta o gráfico da solução numérica com comportamento similar nas malhas $M1$ e $M2$ para a temperatura. O perfil parabólico observado na Figura 13 mantém as características da equação da temperatura para o modelo PTT.

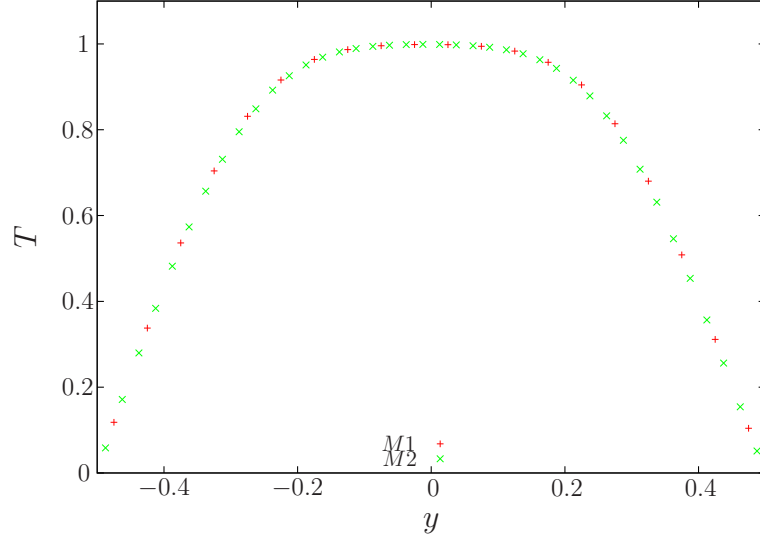


Figura 13: Perfil da solução numérica da temperatura T no escoamento *Poiseuille* nas malhas $M1$ e $M2$ no fluido PTT com $Pe = 400.0$, $\epsilon = 0.5$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $\beta = 0.6$ e $Br = 1.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).

M_i	$E(u)_{M_i}$	$E(\tau_p^{xx})_{M_i}$	$E(\tau_p^{xy})_{M_i}$
$i = 1$	1.46×10^{-01}	1.00×10^{-01}	2.50×10^{-01}
$i = 2$	3.76×10^{-02}	2.66×10^{-02}	6.66×10^{-02}

Tabela 3.3: Erros nas malhas $M1$ e $M2$ para o escoamento do fluido PTT para a componente u da velocidade e componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} de $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo $t = 50.0$.

A comparação entre a solução numérica e a solução de referência das componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} é mostrada na Figura 14. Pode-se notar que há convergência da solução numérica, obtidas com o refinamento de malha, para a solução de referência. Esta convergência também pode ser observada na Tabela 3.3, onde os erros decrescem com o refinamento da malha. Novamente, os perfis obtidos com a solução numérica na Figura 14 se assemelham qualitativamente aos resultados apresentados em [28].

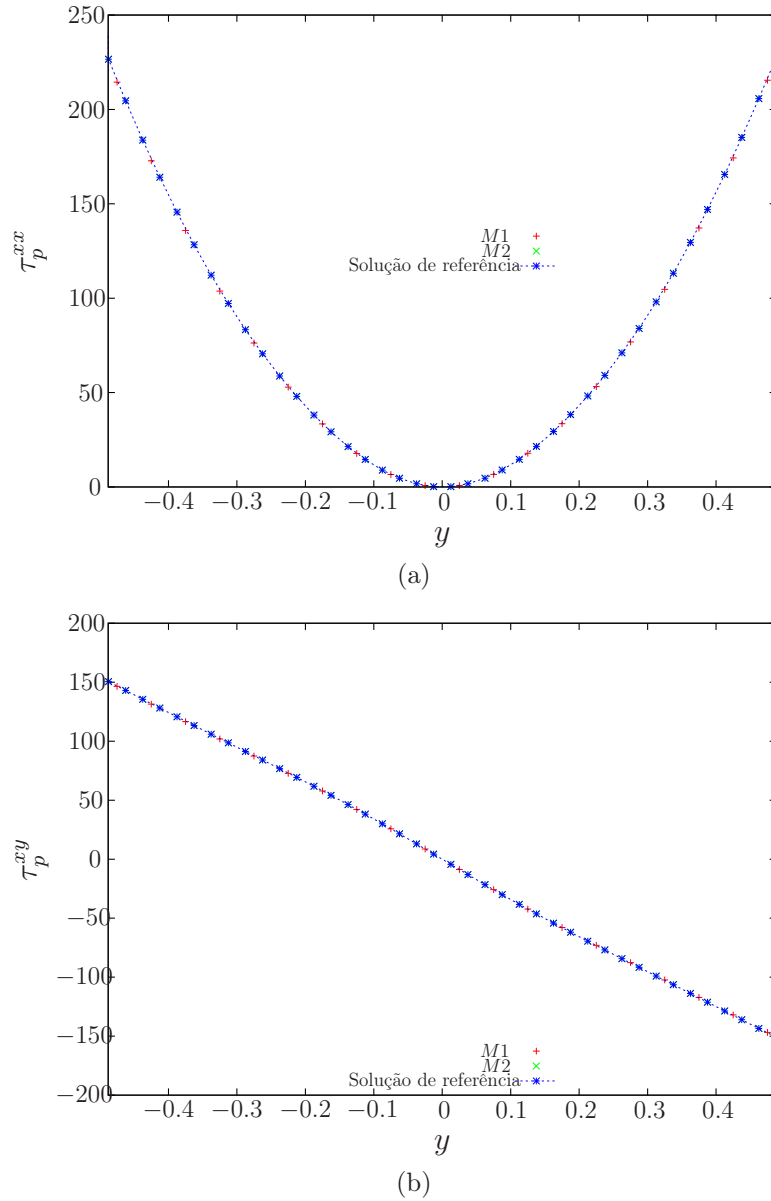


Figura 14: Comparação entre a solução de referência e a solução numérica em diferentes malhas da componente $\tau_p^{xx}(a)$ e $\tau_p^{xy}(b)$ para o escoamento *Poiseuille* do fluido PTT com $Pe = 400.0$, $\epsilon = 0.5$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $\beta = 0.6$ e $Br = 1.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida ($t = 50.0$).

3.1.3 Comparação dos modelos isotérmico e não-isotérmico no fluido Oldroyd-B

No modelo isotérmico, as equações de Navier-Stokes se reduzem apenas aos princípios de conservação de massa e conservação de quantidade de movimento, além de uma equação constitutiva que exprime o comportamento elástico do fluido. Neste caso, considere escoamentos incompressíveis e isotérmicos de fluidos viscoelásticos, assumindo a densidade e temperatura constantes.

Para obter a solução numérica do modelo isotérmico para o fluido Oldroyd-B, considere as equações (1.42), (1.44) e (1.49). Nota-se que, na equação (1.49) os parâmetros adimensionais Wi e ω_r agora são constantes, e não dependem da temperatura.

As condições iniciais e de contorno são impostas de forma análoga ao caso não-isotérmico, como descrito na seção 1.4 do capítulo 1.

As condições de contorno na fronteira rígida para as componentes do tensor polimérico para o fluido Oldroyd-B são impostos por

$$\frac{\partial \tau_p^{xx}}{\partial t} = 2 \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yx} - \frac{1}{Wi} \tau_p^{xx}, \quad \frac{\partial \tau_p^{yy}}{\partial t} = -\frac{\tau_p^{yy}}{Wi}, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yy} + \frac{\omega_r}{ReWi} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\tau_p^{xy}}{Wi}. \quad (3.4)$$

A metodologia numérica utilizada nas simulações para o modelo isotérmico é a mesma apresentada no capítulo 2.

Com o objetivo de identificar a influência da temperatura no escoamento viscoelástico Oldroyd-B, a comparação entre as soluções numéricas do modelo não-isotérmico e isotérmico é feita. Assumi-se escoamento viscoelástico com parâmetros de entrada adimensionais $Re = 0.01$, $\beta = 0.8$, $Wi = 0.4$ e $\omega_r = 0.2$. Para o modelo não-isotérmico, os parâmetros $Pe = 500.0$, $\alpha = 0.5$, $Br = 1.0$, $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$ são adicionados na simulação.

Nesta comparação utilizou-se a malha $M2$ nas simulações com passo temporal adimensional $\delta t = 0.001$. A Figura 15 mostra a comparação entre o modelo isotérmico e não-isotérmico para a componente u da velocidade. O perfil parabólico permanece com uma pequena alteração entre os dois modelos. Já na Figura 16, que mostra a comparação da componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ nos modelos isotérmico e não-isotérmico, a diferença entre as soluções numéricas é mais perceptível. Este fato é esperado já que a equação constitutiva do fluido sofre influência da temperatura nos parâmetros que definem a elasticidade do fluido. Essa mesma influência pode ser observada na Figura 17 no perfil de solução numérica da componente τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$.

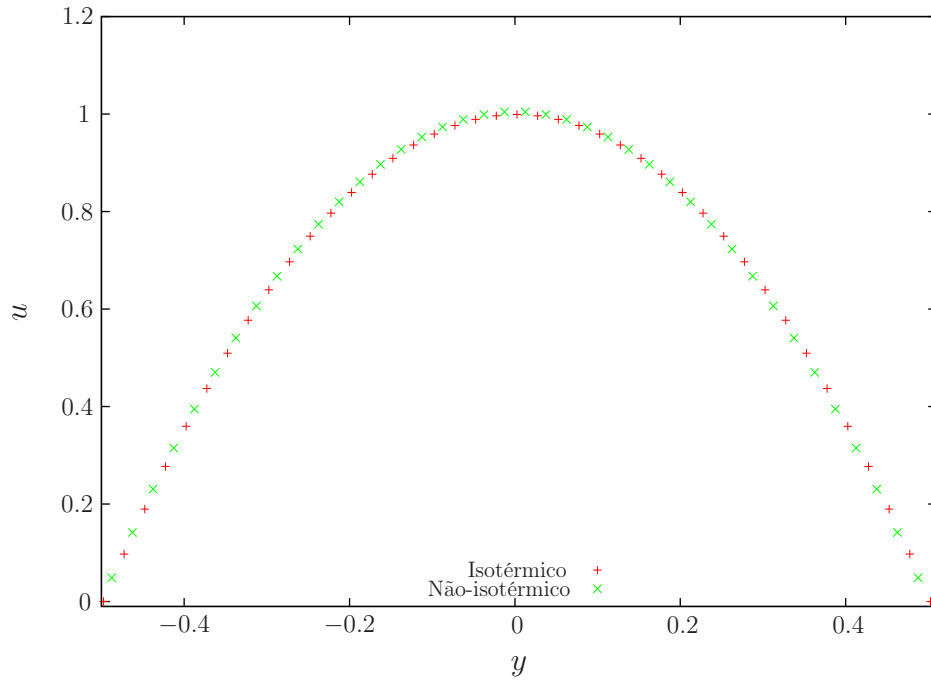


Figura 15: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a velocidade $u(y)$ no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

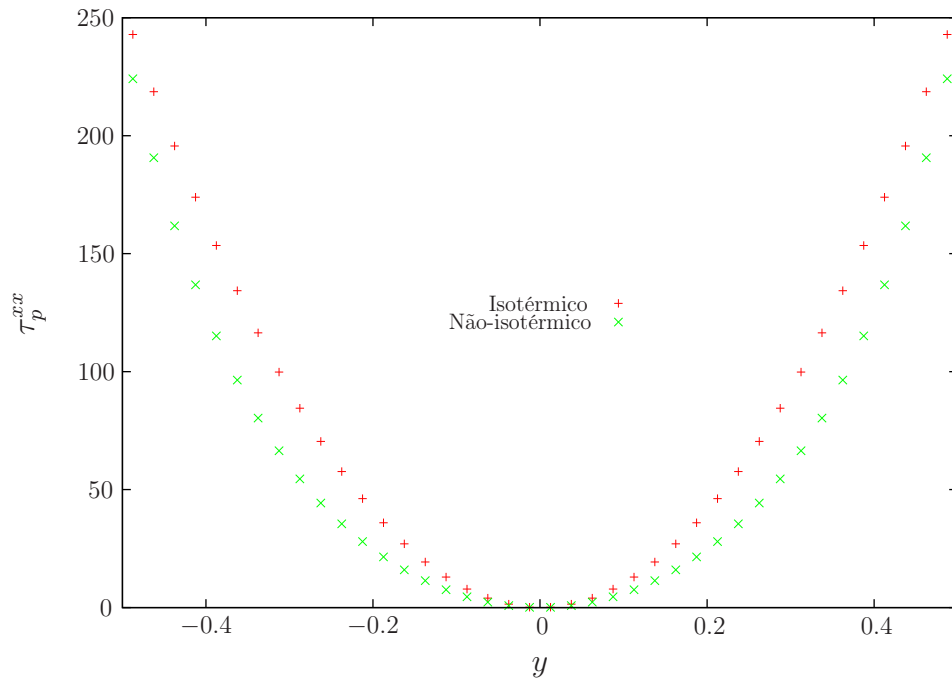


Figura 16: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

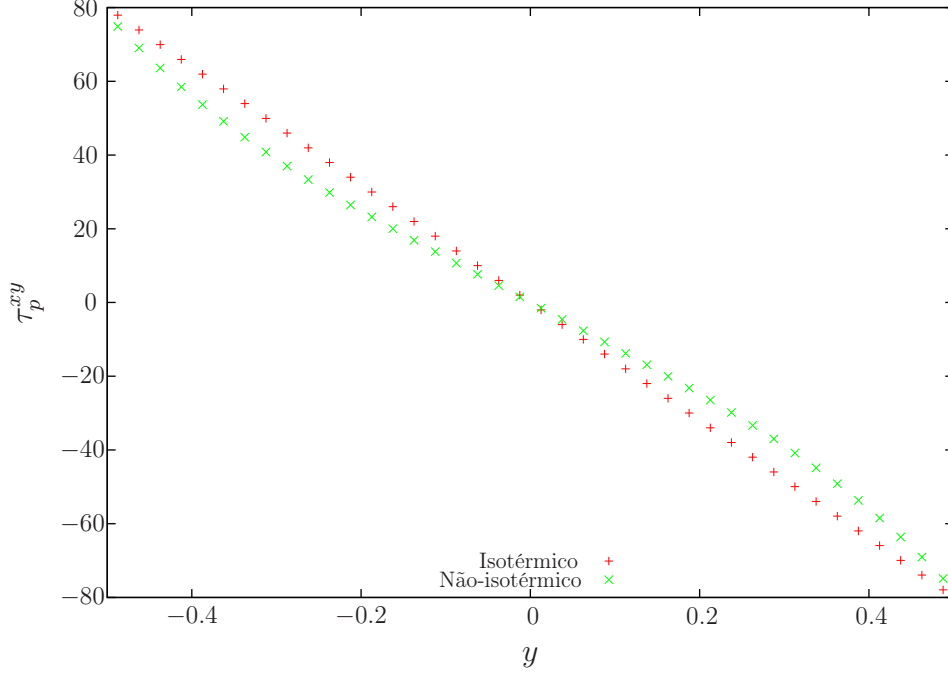


Figura 17: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xy} do tensor τ_p no escoamento *Poiseuille* na malha *M2* para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

3.1.4 Comparação dos modelos isotérmico e não-isotérmico no fluido PTT

Considerando escoamentos incompressíveis isotérmicos, da mesma forma como apresentado na sub-seção 3.1.3, considere as equações de Navier-Stokes (1.42), (1.45) e (1.49). Novamente, os parâmetros adimensionais Wi e ω_r são constantes, ou seja, não são dados em função da temperatura. As condições iniciais e de contorno são as mesmas apresentadas na seção 1.4 do capítulo 1. As equações simplificadas impostas ao longo da fronteira rígida para o tensor polimérico τ_p , agora são dadas por

$$\frac{\partial \tau_p}{\partial t} = 2 \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yx} - \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r}{Wi} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xx}, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \tau_p^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial y} \tau_p^{yy} + \frac{\omega_r}{Re Wi} \frac{\partial u}{\partial y} - \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r}{Wi} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xy}, \quad (3.6)$$

e

$$\frac{\partial \tau_p^{yy}}{\partial t} = \left[\left(\epsilon Re \frac{\omega_r}{Wi} (\tau_p^{xx} + \tau_p^{yy}) \right) + 1 \right] \tau_p^{xy}. \quad (3.7)$$

A metodologia utilizada no cálculo da solução numérica neste modelo está exposta no capítulo 2. Assim como foi feito a comparação entre o modelo isotérmico e não-isotérmico em um fluido Oldroyd-B, o mesmo é feito para o modelo PTT. Com essa comparação, é

possível identificar as diferenças entre os escoamentos isotérmico e não-isotérmico e quais variáveis sofrem maior influência quando o escoamento sofre variações de temperatura.

Os parâmetros adimensionais de entrada utilizados foram: $Re = 0.01$, $\epsilon = 0.5$, $\beta = 0.6$, $\omega_r = 0.4$ e $Wi = 0.2$. Para o modelo não-isotérmico, adota-se $Pe = 400.0$, $\alpha = 0.5$, $Br = 1.0$, $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$ além dos parâmetros adimensionais utilizados na simulação do modelo isotérmico. Novamente a malha $M2$ foi utilizada nas simulações com passo temporal adimensional $\delta t = 0.001$.

A Figura 18 mostra a comparação entre o modelo isotérmico e não-isotérmico da velocidade u . É possível observar que o perfil entre os dois modelos é o mesmo com uma pequena diferença do valor máximo da velocidade u . Com a influência da temperatura, a velocidade u aumenta com relação ao escoamento isotérmico. Quando observa-se a Figura 19 comparando a solução numérica da componente τ_p^{xx} , a diferença entre os modelos isotérmico e não-isotérmico aparece na região próxima a parede do canal, ficando semelhantes somente no centro do canal. A comparação entre os modelos para a componente τ_p^{xy} é apresentada na Figura 20. Novamente constatou-se uma diferença entre os dois modelos, caracterizando a influência da temperatura no escoamento.

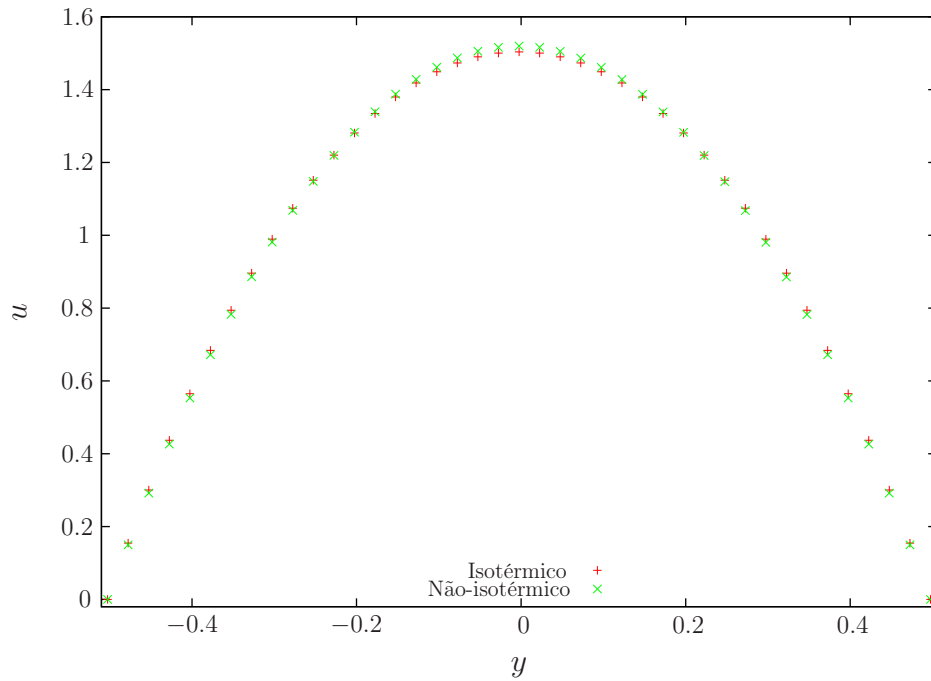


Figura 18: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a velocidade $u(y)$ no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

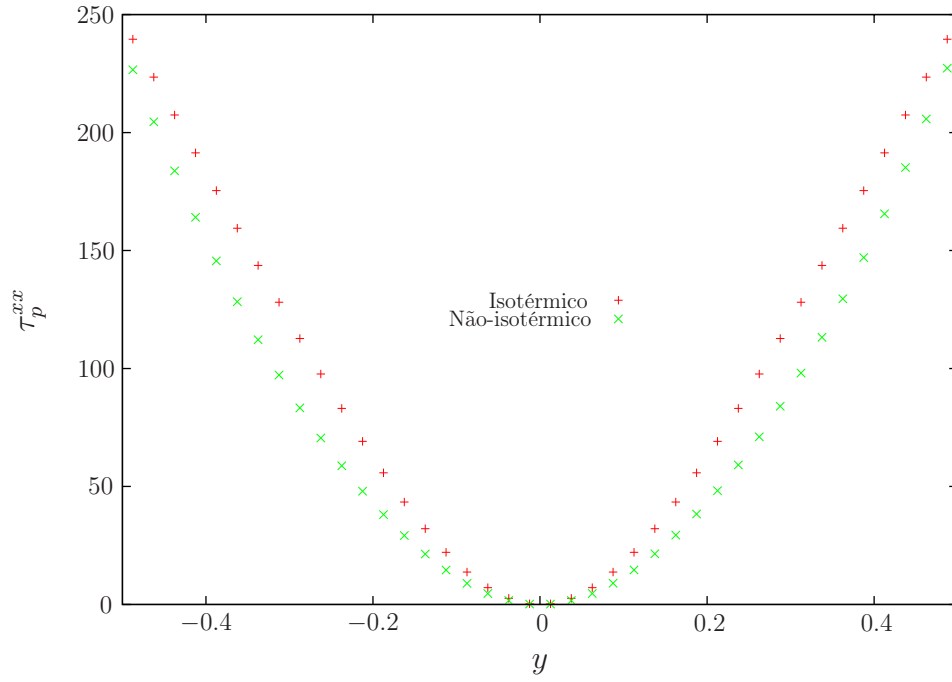


Figura 19: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento *Poiseuille* na malha *M2* para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

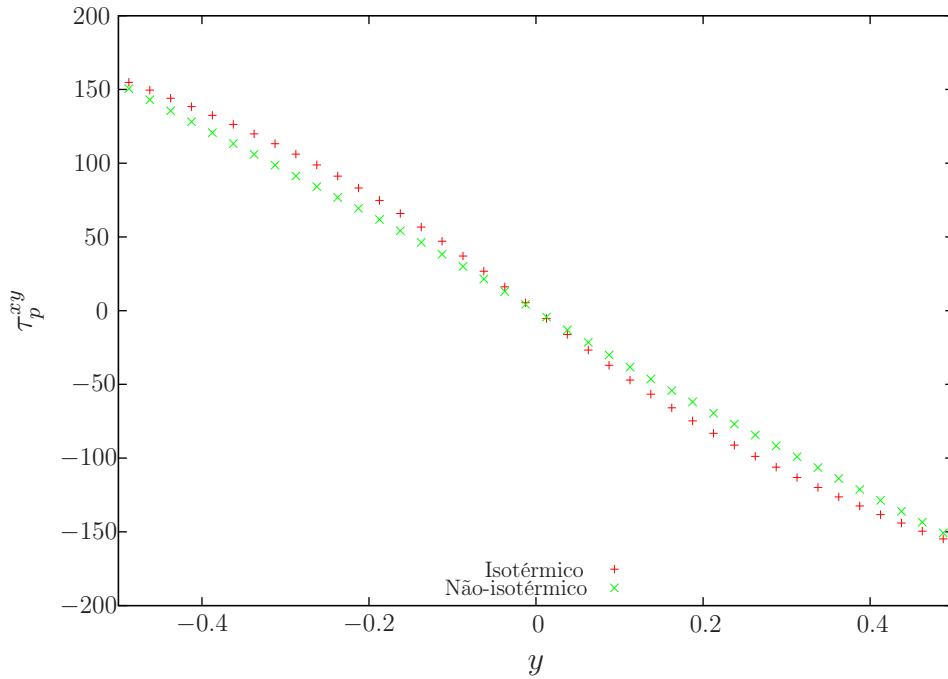


Figura 20: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo isotérmico e o modelo não-isotérmico para a componente τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no escoamento *Poiseuille* na malha *M2* para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

3.1.5 Comparação dos modelos Newtoniano e viscoelástico não-isotérmicos

Nesta sub-seção é feita a simulação dos escoamentos não-isotérmicos Newtoniano e viscoelásticos Oldroyd-B e PTT para análise da elasticidade do fluido. As condições iniciais e de contorno são as mesmas apresentadas na seção 1.4 do Capítulo 1 e utilizadas nas sub-seções anteriores.

Para a simulação do escoamento Newtoniano são utilizados os seguintes parâmetros adimensionais: $Re = 0.01$, $\alpha = 0.0$, $Pe = 400.0$, $\beta = 1.0$, $Wi = 0.0$ e $\omega_r = 0.0$ e $Br = 1000.0$. Para os escoamentos viscoelásticos foram utilizados $\epsilon = 0.5$, $\beta = 0.6$, $\omega_r = 0.4$, $Wi = 0.2$, $\alpha = 0.5$, $Re = 0.01$, $Pe = 400.0$, $Br = 1.0$ e constantes $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$ para a equação do fator de deslocamento (equação (1.51)). As simulações foram feitas na malha $M2$ utilizando passo temporal adimensional $\delta t = 0.001$.

A Figura 21 apresenta os resultados obtidos comparando os modelos Newtoniano e viscoelásticos PTT e Oldroyd-B para a temperatura. Pode-se perceber comportamento semelhante entre as soluções numéricas obtidas com os modelos viscoelásticos, mas no modelo Newtoniano esse comportamento não permanece. A elasticidade do fluido tem relação com o número de Peclet, ou seja, com o termo difusivo da equação da temperatura. Esse fato pode ser observado na Figura 22. Quando o número de Pe diminui, o termo difusivo aumenta e assim a temperatura no canal não sofre variação. O contrário também pode ser observado.

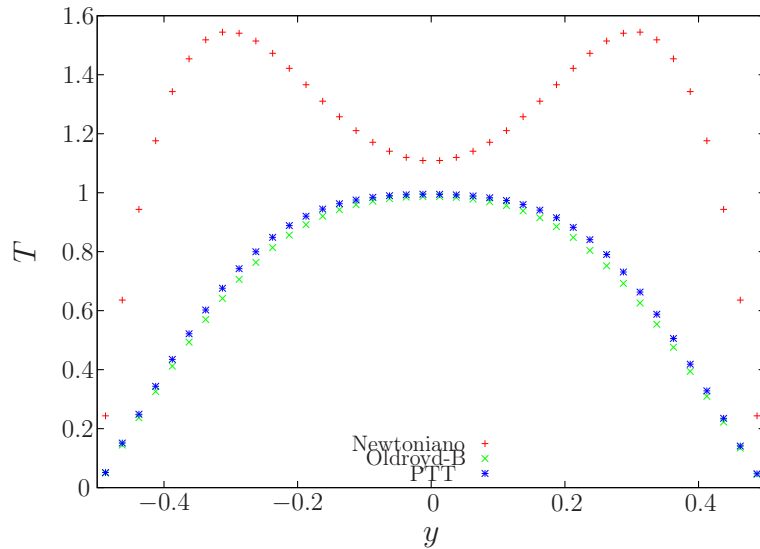


Figura 21: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com os modelos newtoniano, Oldroyd-B e PTT para temperatura T no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

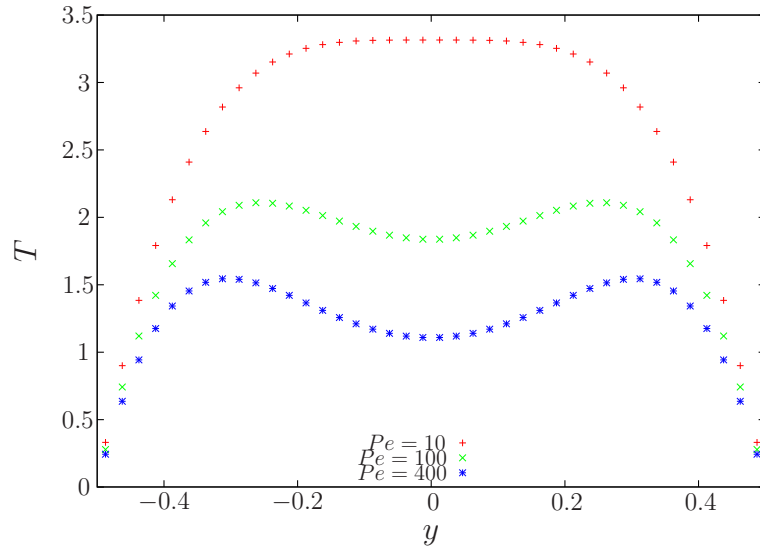
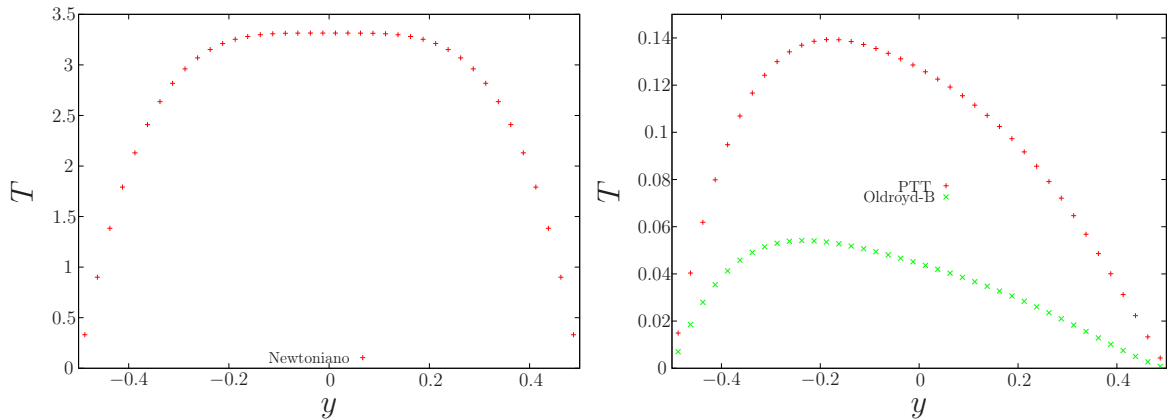


Figura 22: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com o modelo Newtoniano para a temperatura T no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ com variação do número de Peclet: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

A relação entre o escoamento não-newtoniano e Newtoniano com $Pe = 10.0$ para a temperatura pode ser observado na Figura 23. Para o escoamento viscoelástico, a relação do número de Peclet com o comportamento da temperatura é o inverso do que foi observado no escoamento newtoniano. Tomando $Pe = 10.0$ no escoamento viscoelástico, os valores da temperatura diminuem e o seu comportamento não é mais parabólico. Isso se deve ao fato a diminuição da influência do termo difusivo da equação da temperatura e ao aumento da influência do termo-fonte Q (equações (1.31) e (1.34)).



(a) Perfil modelo Newtoniano com $Pe = 10.0$ (b) Perfil modelos Não-newtoniano com $Pe = 10.0$

Figura 23: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com os modelos newtoniano 23(a) e não-newtonianos Oldroyd-B e PTT 23(b) para a temperatura T no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ com o valor $Pe = 10.0$: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

3.1.6 Influência da variação dos valores da temperatura na parede no fluido Oldroyd-B

Nesta sub-seção é feita a simulação do escoamento não-isotérmico viscoelástico Oldroyd-B com variação do valor da temperatura na fronteira rígida do canal *Poiseuille*. A mesma metodologia adotada nas simulações feitas na sub-seção 3.1.1 é adotada nesta sub-seção. Impõe-se condição de Dirichlet $T = 1$ para a temperatura no injetor em todas as simulações com variação do valor da temperatura na parede (T_w).

Assumi-se escoamento viscoelástico Oldroyd-B com parâmetros adimensionais $Pe = 500.0$, $Re = 0.01$, $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.8$ e $Br = 1.0$, $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$. No instante inicial adota-se $Wi = 0.4$ e $\omega_r = 0.2$.

A Figura 24 apresenta o comportamento da solução numérica da velocidade u com a variação dos valores da temperatura na parede. Pode-se notar que o perfil parabólico permanece sem sofrer mudanças significativas no valor da velocidade u .

O comportamento da solução numérica com a variação da temperatura na parede pode ser notada nas componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$, como mostra a Figura 25. Já na 26 o comportamento da solução numérica da temperatura sofre alterações mas segue corretamente os valores impostos na parede do canal.

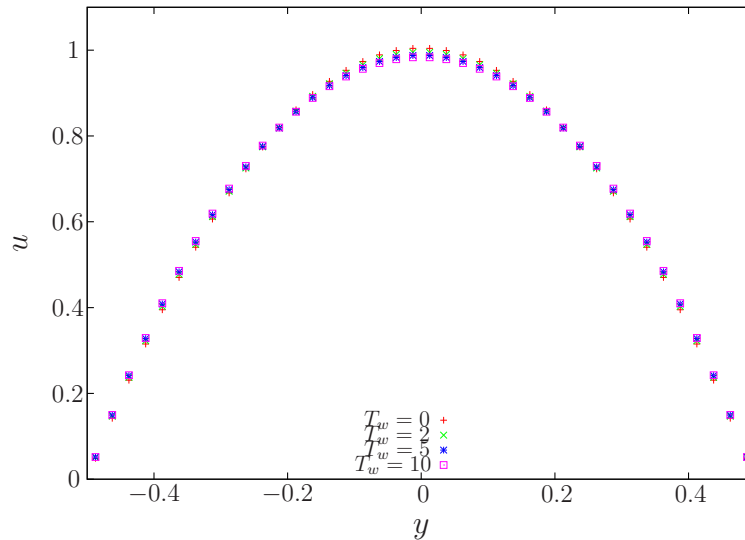


Figura 24: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a velocidade u no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

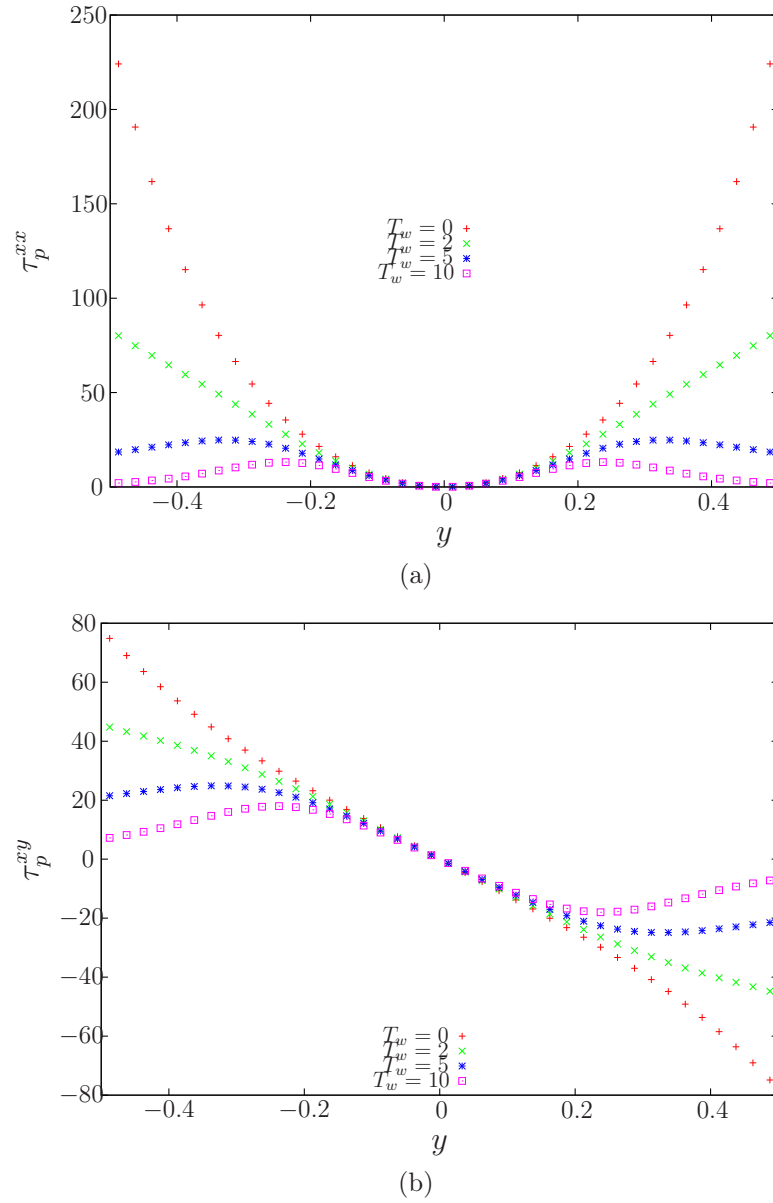


Figura 25: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para as componentes τ_p^{xx} 25(a) e τ_p^{xy} 25(b) do tensor τ_p no escoamento *Poiseuille* na malha *M2* para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

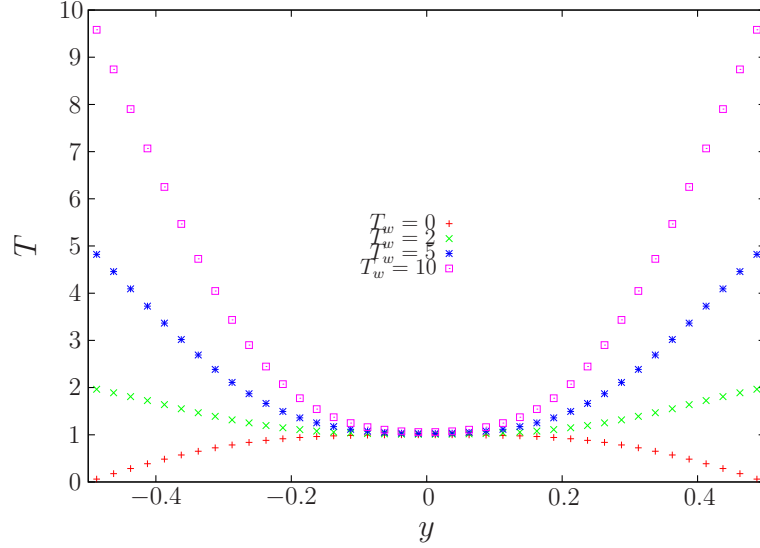


Figura 26: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a temperatura T no escoamento *Poiseuille* na malha *M2* para o fluido Oldroyd-B: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50.0$.

3.1.7 Influência da variação dos valores da temperatura na parede no fluido PTT

Esta sub-seção apresenta as simulações do escoamento não-isotérmico viscoelástico PTT com variação do valor da temperatura na fronteira rígida do canal *Poiseuille*. As simulações são feitas com variação do valor da temperatura na parede (T_w) do canal e condição de Dirichlet $T = 1$ no injetor. A metodologia e as condições iniciais e de contorno, não detalhadas aqui, é a mesma exposta na sub-seção 3.1.2.

Os parâmetros adimensionais utilizados são: $Re = 0.01$, $\epsilon = 0.5$, $\beta = 0.6$, $\alpha = 0.5$, $Pe = 400.0$ e $Br = 1.0$. No instante inicial do escoamento adota-se $W_i = 0.2$ e $\omega_r = 0.4$. As constantes utilizadas na equação do fator de deslocamento (equação (1.51)) são $C_1 = 15.0$ e $C_2 = 50.0$.

A Figura 27 ilustra o comportamento da solução numérica da velocidade u com a variação da temperatura na parede do canal. Nota-se que o perfil parabólico permanece enquanto a velocidade u máxima aumenta com a diminuição da temperatura T_w . Para a mesma variação dos valores T_w , o comportamento das soluções numéricas da temperatura não são similares (Figura 28). Com a variação de T_w , esse comportamento respeita os valores impostos na parede do canal. Para as componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} de $\boldsymbol{\tau}_p$, o comportamento da solução numérica varia significadamente com a alteração dos valores da temperatura na parede do canal. Essa variação de comportamento nas componentes dos tensores pode ser observado na Figura 29.

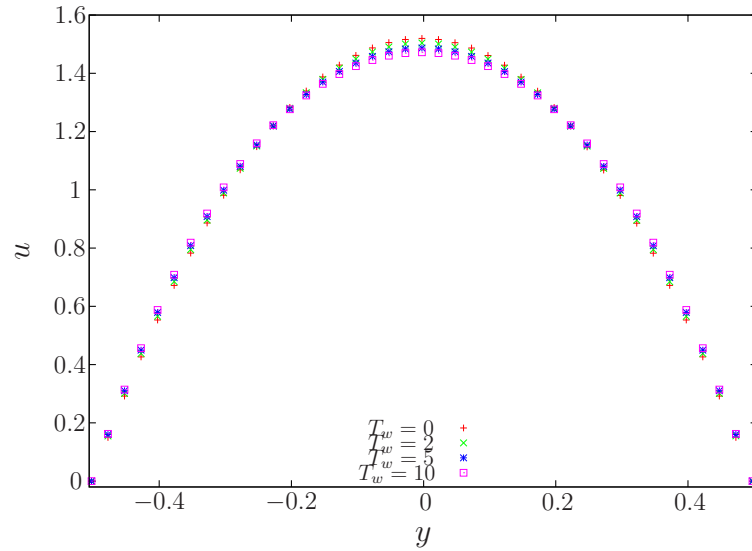


Figura 27: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a velocidade u no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50$.

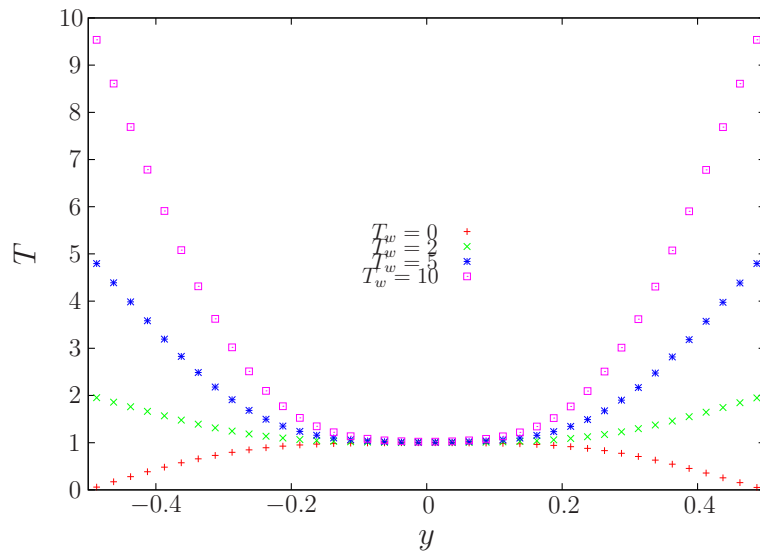


Figura 28: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para a temperatura no escoamento *Poiseuille* na malha $M2$ para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50$.

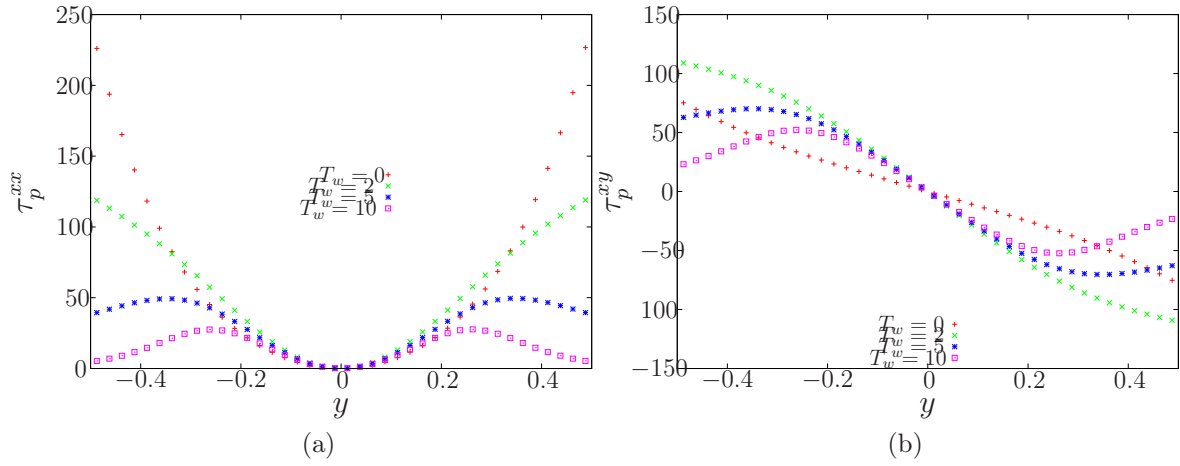


Figura 29: Comparação entre as soluções numéricas obtidas com a variação da temperatura na parede (T_w) no modelo não-isotérmico para as componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} do tensor τ_p no escoamento *Poiseuille* na malha *M2* para o fluido PTT: perfil de solução totalmente desenvolvida com tempo final $t = 50$.

Simulação numérica de escoamento não-isotérmico viscoelástico em uma contração 4 : 1

Neste Capítulo são apresentados os resultados numéricos obtidos utilizando o problema da contração planar 4 : 1 para um escoamento não-isotérmico viscoelástico Oldroyd-B.

Vários trabalhos têm sido feitos envolvendo simulações numéricas em um contração para vários fluidos [6], [42]. Entre eles, [6] apresenta simulações do modelo PTT utilizando o tensor conformação em sua formulação. Particularmente, escoamentos viscoelásticos com influência da temperatura têm sido estudados em [20], [25] para aplicações industriais, geralmente utilizando a técnica de elementos finitos. Em [34], resultados em uma contração com escoamento não-isotérmico viscoelástico são feitos analisando a viscoelasticidade do fluido. A mesma análise é feita em [54] para escoamentos isotérmicos e não-isotérmicos utilizando o método de volumes finitos e o código OpenFOAM.

A viscoelasticidade do fluido é um dos efeitos analisados em trabalhos que utilizam como geometria a contração 4 : 1. Em [19] é feito um estudo numérico de escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos utilizando o modelo constitutivo UCM com altos números de Weissenberg. Em [7], [20] também é feita uma análise da viscoelasticidade na contração 4 : 1. Outro aspecto que geralmente é investigado nos trabalhos envolvendo a contração e que também será investigado nesta seção é a geração dos vórtices. Esse efeito tem relação com a viscoelasticidade como será apresentado nas simulações feitas nesta seção.

A geometria da contração planar 4 : 1 utilizada nas simulações é demonstrada na Figura 30. São adotadas as seguintes medidas para a contração: $R_2 = 0.003m$, $R_1 = 4R_2 = 0.012m$, $l_1 = 80R_2 = 0.24m$ e $l_2 = 50R_2 = 0.15m$. Assim, o injetor tem largura $2R_1$ e o ejetor $2R_2$. A malha espacial tem espaçamento uniforme com $\delta x = \delta y = 0.0006m$.

Nesta seção, com o intuito de propor resultados que possam ser comparados nos futuros estudos de Reologia Computacional, utiliza-se valores dimensionais para a descrição do problema e das variáveis envolvidas na simulação. Os vórtices formados nas quinas da contração tem comprimento dimensional L_R e a temperatura nas paredes da contração tem valor T_w .

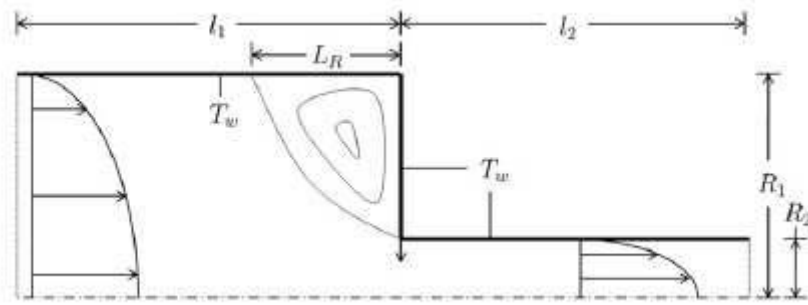


Figura 30: Geometria da contração planar 4 : 1. Fonte: F. Habla et al. [7].

Na entrada de fluido da contração, impõe-se a solução analítica do modelo isotérmico Oldroyd-B que considera o escoamento totalmente desenvolvido para um canal entre placas paralelas. Dessa forma, adota-se perfil parabólico para a velocidade, equação (1.57) enquanto para as componentes do tensor polimérico, equações (1.58) - (1.60). Para a temperatura, adota-se a condição de Dirichlet $T = 462K$ no injetor. Nos ejtores, adota-se a condição do tipo Neumann homogênea para a velocidade \mathbf{u} , o tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$ e a temperatura T .

Na fronteira rígida considera-se a hipótese de não-eskorregamento e de impermeabilidade para a velocidade. O tensor polimérico é calculado a partir de simplificações considerando a posição do contorno rígido (ver seção 1.4 do Capítulo 1). Impõe-se a temperatura $T_w = 462K$ nas paredes da contração.

As simulações são feitas na contração planar 4 : 1 inicialmente cheia de fluido, com tempo final de simulação $t = 50.0s$, onde o escoamento atinge o estado estacionário. As condições iniciais adotadas estão expostas na seção 1.4 do Capítulo 1. Adotou-se passo temporal dimensional $\delta t = 0.03425328$.

Assumiui-se escoamento viscoelástico com parâmetros [7]:

- Velocidade média do escoamento no canal menor: $U_0 = 0.020551968ms^{-1}$;
- Velocidade média no injetor: $U_i = 0.00129ms^{-1}$ com perfil de injeção parabólico;
- Diâmetro do canal menor: $L_0 = 0.006m$;
- Densidade $\rho_0 = 921Kg/m^3$ e viscosidade dinâmica $\eta_0 = 10^4Kg/ms$;
- Calor específico $c_p = 1500J/kgK$ e condutividade térmico do fluido $k = 0.17W/mK$;

- Parâmetros WLF: $C_1 = 4.54$ e $C_2 = 150.36$;
- Constantes adimensionais no instante inicial: $Re = 3.9 \times 10^{-6}$, $\omega_r = 0.05$, $\beta = 0.95$, $Br = 0.097888235$, $Pe = 345.0$, $Wi = 5.0$ e $\alpha = 0.5$.

Os resultados são apresentados com variáveis normalizadas. As velocidades e os tensores são normalizados com

$$\mathbf{U}^* = \frac{\mathbf{U}}{U_0} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\tau}_p^* = \frac{\boldsymbol{\tau}_p}{\rho_0 U_0^2} \quad (4.1)$$

e o comprimento do vórtice por $\Lambda = \frac{L_R}{2R_1}$.

Como em [7], considere o corte horizontal em $y = 0.0114m$ (Figura 31) e $0.18m \leq x \leq 0.3m$ para análise do comportamento da velocidade u , componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} do tensor polimérico $\boldsymbol{\tau}_p$ e a temperatura T na contração.

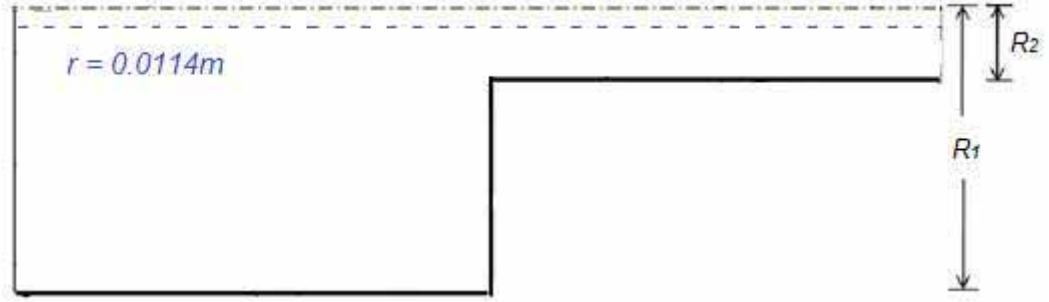


Figura 31: Posição da linha $r = 0.0114m$ na contração planar 4 : 1.

As Figuras 32, 34, 35 e 33 mostram, respectivamente, o perfil da velocidade, da componente τ_p^{xx} e componente τ_p^{xy} do tensor polimérico e o perfil da temperatura próximo da contração. O perfil dos resultados encontrados com a solução numérica são semelhantes qualitativamente aos perfis apresentados em [7].

A Figura 32 mostra que não há influência da temperatura sobre a velocidade v . Observando as Figuras 34 e 35, pode-se notar que os valores das componentes τ_p^{xx} e τ_p^{xy} aumentam pouco antes da contração. Isto ocorre porque o fluido precisa passar pela contração causada pela diferença entre o canal maior e menor. Depois do canto reentrante, a componente τ_p^{xx} aumenta devido a temperatura presente na função WLF enquanto a componente τ_p^{xy} decresce pela influência da diminuição da velocidade v depois da contração.

Observando o perfil da temperatura na Figura 33, pouco antes da contração há um aumento da temperatura causada pela deformação que o fluido sofre perto da contração. Logo depois do canto reentrante, a temperatura aumenta rapidamente com o aumento

dos valores do tensor polimérico (Figuras 34 e 35) resultando em uma grande quantidade de dissipação de calor.

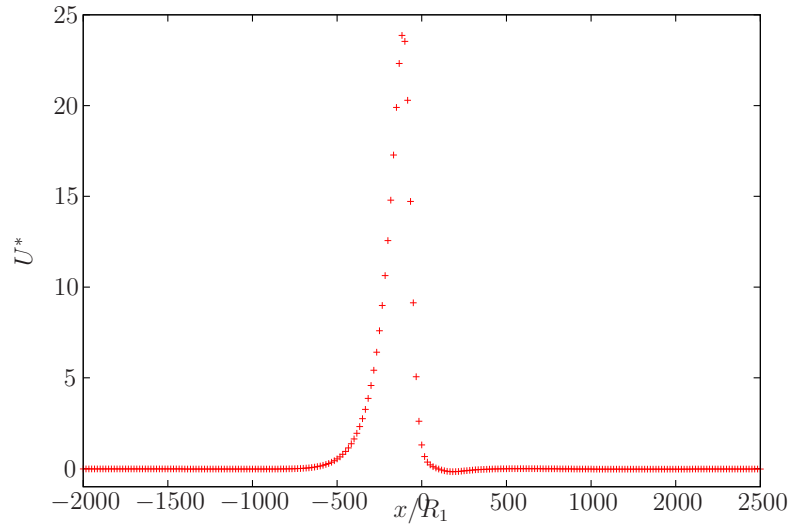


Figura 32: Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a velocidade v no tempo final $t = 50s$.

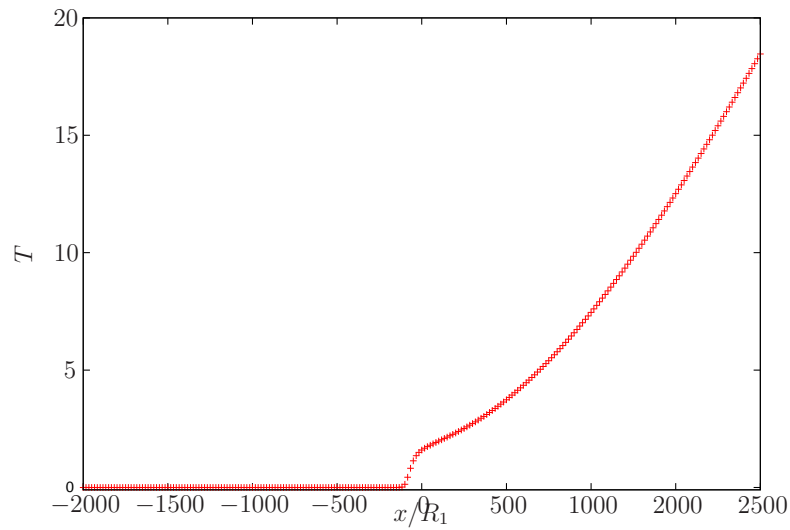


Figura 33: Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a temperatura T no tempo final $t = 50s$.

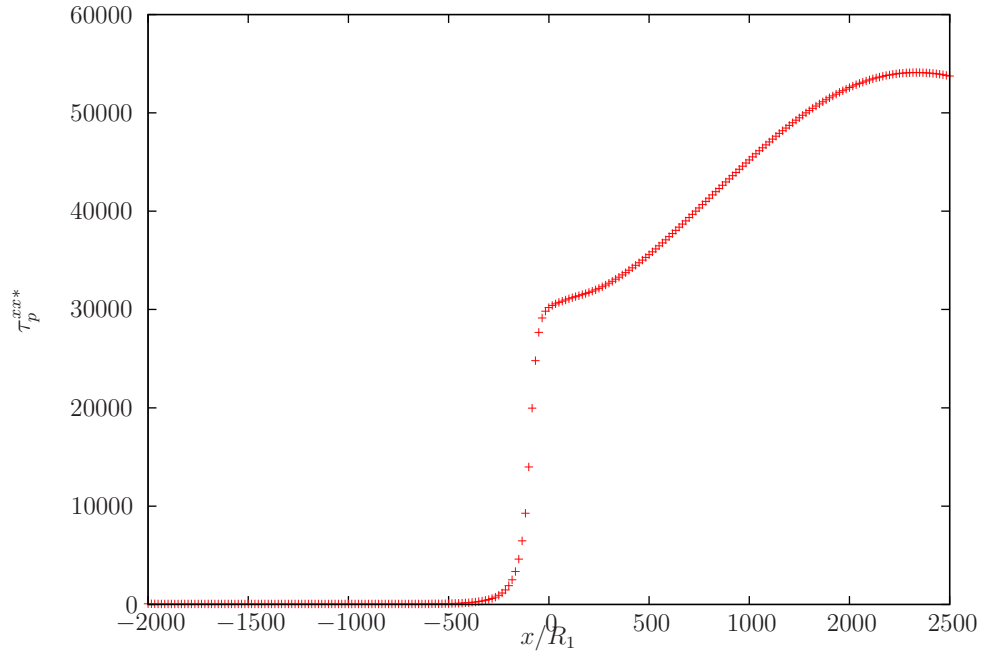


Figura 34: Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a componente τ_p^{xx} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo final $t = 50s$.

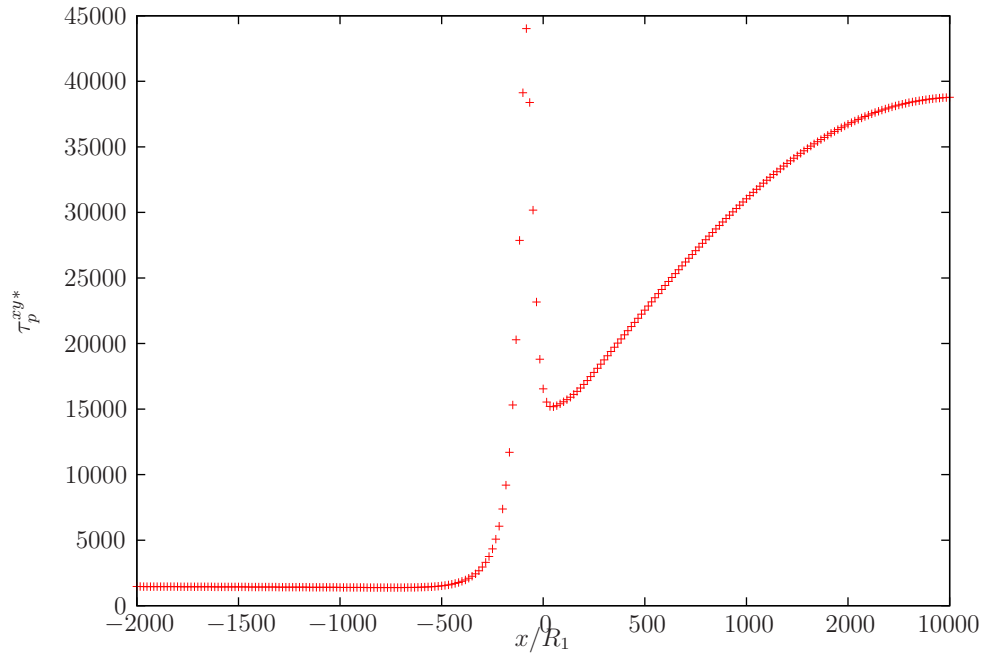


Figura 35: Resultados obtidos com a solução numérica do modelo não-isotérmico Oldroyd-B na contração planar 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para a componente τ_p^{xy} do tensor $\boldsymbol{\tau}_p$ no tempo final $t = 50s$.

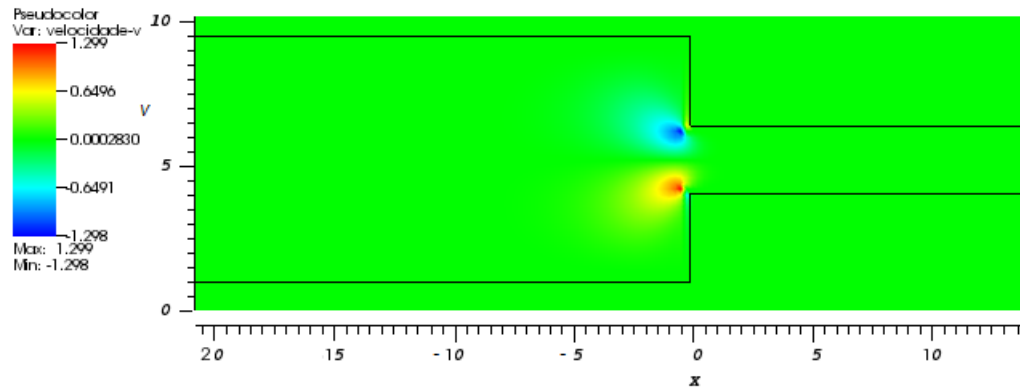
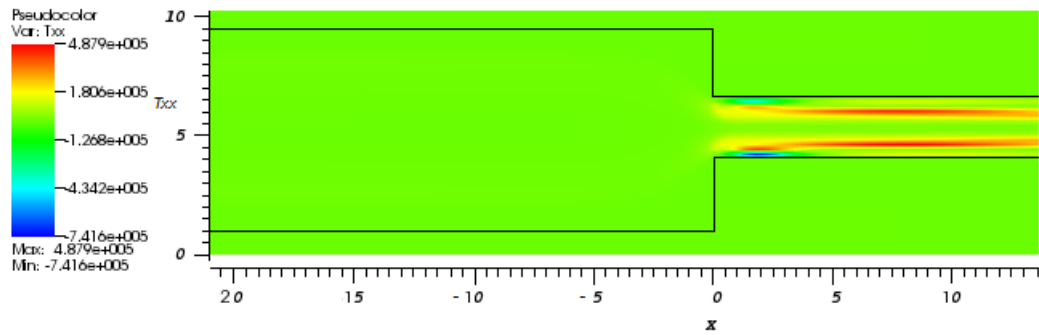
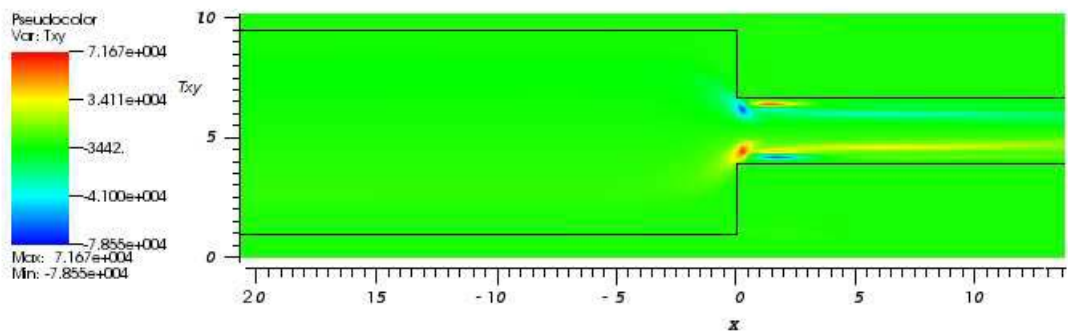
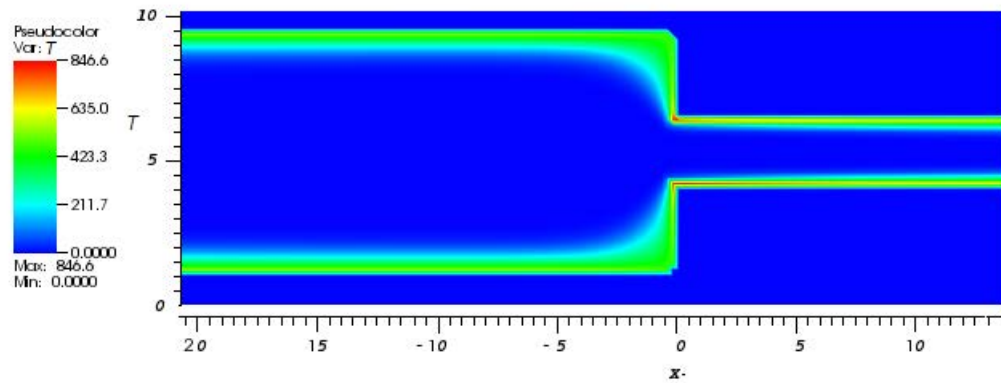
(a) v (b) τ_p^{xx} (c) τ_p^{xy} (d) T

Figura 36: Perfil das soluções numéricas obtidas no modelo não-isotérmico na contração 4 : 1 no corte $r = 0.0114m$ com $Wi = 5$ para o fluido Oldroyd-B com tempo final $t = 50s$.

A Figura 36 ilustra o perfil da velocidade $v(a)$, componentes $\tau_p^{xx}(b)$ e $\tau_p^{xy}(c)$ do tensor polimérico e temperatura $T(d)$. Com essas figuras, pode-se observar o aumento das variáveis na região próxima a contração.

A Figura 37 apresenta o comprimento adimensional do vórtice dado em função da variação do número de Weissenberg. Pode-se observar que com o aumento da viscoelasticidade do fluido, o comprimento dos vórtices aumentam. Este mesmo efeito pode ser visto nos resultados apresentados em Habla et al. [7].

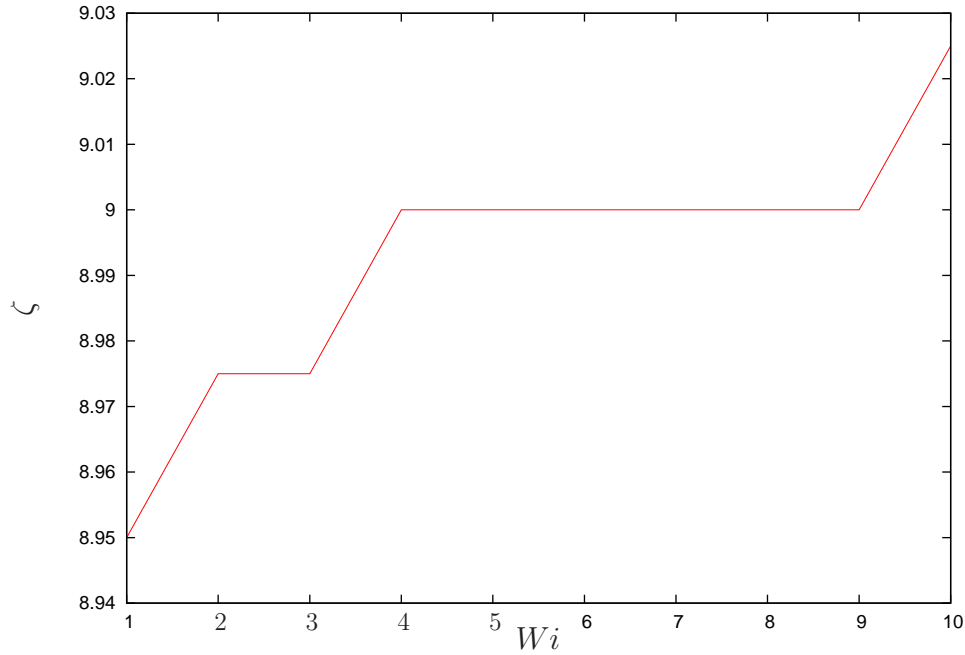


Figura 37: Comprimento do vórtice adimensional ζ em função dos valores do número de Weissenberg: $Wi = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ e 10 .

Considerações finais

Neste trabalho, uma metodologia numérica foi apresentada para a simulação de escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos a partir das equações constitutivas Oldroyd-B e PTT, desenvolvida e implementada na plataforma FREEFLOW-2D.

A verificação da metodologia numérica foi realizada na simulação de um escoamento confinado entre duas placas paralelas comparando os resultados numéricos dos dois modelos constitutivos com uma solução de referência. Essas comparações foram satisfatórias, pois com o refinamento de malha, as soluções numéricas apresentaram convergência para a solução de referência, fato que também pode ser observado com o cálculo dos erros relativos, bem como em resultados da literatura [28].

Simulações foram feitas com o objetivo de identificar diferenças no escoamento viscoelástico isotérmico e não-isotérmico. Com essa comparação, notou-se que os tensores apresentaram a maior diferença entre as variáveis analisadas.

Quando foi feita a investigação entre o escoamento viscoelástico e Newtoniano, uma questão foi levantada quanto ao termo difusivo da equação da temperatura, já que com a variação do mesmo, algumas alterações no comportamento do perfil numérico da temperatura foram observadas. Essas alterações foram observadas com a variação do número adimensional de Peclet presente na equação da temperatura. Quanto a variação da temperatura na parede do canal, os resultados estão condizentes com o que foi imposto nas simulações.

A análise da variação dos escoamentos e a variação dos parâmetros cumpriu o objetivo de apresentar alguns efeitos da temperatura no escoamento. Essas informações contribuem para alguns esclarecimentos das diferenças entre o escoamento viscoelástico isotérmico e o escoamento viscoelástico não-isotérmico, tais como a influência da temperatura e influência dos parâmetros adimensionais característicos do escoamento não-isotérmico.

Uma aplicação da metodologia foi feita no problema da contração planar 4 : 1, comparando resultados obtidos neste trabalho com os resultados apresentados em [7]. A

comparação foi satisfatória, já que o comportamento das variáveis analisadas estão qualitativamente semelhantes com o comportamento dos resultados apresentados no trabalho [7].

Os próximos passos a serem investigados neste projeto dizem respeito ao emprego de outras geometrias para aplicação do modelo não-isotérmico, bem como uma investigação mais detalhada sobre os modelos estudados do ponto de vista físico do escoamento. Além disso, o estudo do modelo não-isotérmico em escoamento com superfície livre também é de interesse e uma boa sugestão para os novos rumos deste projeto.

Adimensionalização

O processo de adimensionalização das equações do modelo não-isotérmico é feita resumidamente a seguir.

Equação da Continuidade

$$\frac{U_0}{L_0} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde por simplicidade eliminamos o símbolo (*).

Equação de Conservação de Quantidade de Movimento

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla \mathbf{p} + \eta_s (\nabla \cdot [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t]) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\rho U_0^2}{L_0} \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^* \right) = -\frac{\rho_0 U_0^2}{L_0} \nabla \mathbf{p}^* + \frac{U_0}{L_0^2} \eta_s (\nabla \cdot [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^t]) + \frac{\rho_0 U_0^2}{L_0} (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p^*) \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^* = -\nabla \mathbf{p}^* + \left(\frac{1}{Re} \frac{\eta_s}{\eta_0} \right) \nabla^2 \mathbf{u}^* + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p^*.$$

Portanto, obtemos a equação da quantidade de movimento na forma adimensional,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p, \quad (\text{A.2})$$

onde por simplicidade eliminamos o símbolo (*).

Equação Constitutiva Oldroyd-B

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p &= \eta_p(T) [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t] \quad \Rightarrow \\
\rho_0 U_0^2 \boldsymbol{\tau}_p^* + \frac{\rho_0 U_0^3}{L_0} \lambda_1(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p^* &= \frac{U_0}{L_0} \eta_p(T) [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^t] \quad \Rightarrow \\
\frac{\eta_0}{\eta_0} L_0 \rho_0 U_0 \boldsymbol{\tau}_p^* + \frac{\eta_0}{\eta_0} \frac{L_0 \rho_0 U_0^2}{L_0} \lambda_1(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p^* &= \eta_p(T) [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^t] \quad \Rightarrow \\
Re \eta_0 \boldsymbol{\tau}_p^* + Re Wi(T) \eta_0 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p^* &= \eta_p(T) [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^t] \quad \Rightarrow \\
\boldsymbol{\tau}_p^* + Wi(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p^* &= \frac{1}{Re} \frac{\eta_p(T)}{\eta_0} [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^t] \quad \Rightarrow \\
\boldsymbol{\tau}_p^* + Wi(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p^* &= \frac{1}{Re} \omega_r(T) [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^*)^t].
\end{aligned}$$

Finalmente, eliminando o símbolo (*), obtem-se a equação constitutiva Oldroyd-B na forma adimensional

$$\boldsymbol{\tau}_p + Wi(T) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2 \frac{\omega_r(T)}{Re} \mathbf{D}. \quad (\text{A.3})$$

Equação da Temperatura

$$\begin{aligned}
\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) \right) &= k \nabla^2 T + 2\eta_s \mathbf{D} : \mathbf{D} + \alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2\lambda_1(T)} \quad \Rightarrow \\
\rho c_p \frac{(T_w - T_0) U_0}{L_0} \frac{DT^*}{Dt} &= \frac{(T_w - T_0)}{L_0^2} k \nabla^2 T^* + 2\eta_s \frac{U_0^2}{L_0^2} (\mathbf{D}^* : \mathbf{D}^*) + \\
\rho_0 U_0^2 \frac{U_0}{L_0} (\alpha \boldsymbol{\tau}_p^* : \mathbf{D}^*) + \rho_0 U_0^2 (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p^*}{2\lambda_1(T)} &\quad \Rightarrow \\
\frac{DT^*}{Dt} &= \frac{L_0}{\rho c_p (T_w - T_0) U_0} \frac{(T_w - T_0)}{L_0^2} k \nabla^2 T^* + 2\eta_s \frac{L_0}{\rho c_p (T_w - T_0) U_0} \frac{U_0^2}{L_0^2} (\mathbf{D}^* : \mathbf{D}^*) + \\
\frac{L_0}{\rho c_p (T_w - T_0) U_0} \rho U_0^2 \frac{U_0}{L_0} (\alpha \boldsymbol{\tau}_p^* : \mathbf{D}^*) + \frac{L_0}{\rho c_p (T_w - T_0) U_0} \rho U_0^2 \frac{L_0}{L_0} (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p^*}{2\lambda_1(T)} &\quad \Rightarrow \\
\frac{DT^*}{Dt} &= \frac{1}{Pe} \nabla^2 T^* + \frac{1}{Pe} \frac{2\eta_s}{\eta_0} \frac{\eta_0 U_0^2}{k(T_w - T_0)} (\mathbf{D}^* : \mathbf{D}^*) + \frac{1}{Pe} \frac{\eta_0}{\eta_0} \frac{L_0 \rho_0 U_0^3}{k(T_w - T_0)} (\alpha \boldsymbol{\tau}_p^* : \mathbf{D}^*) +
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{Pe} \frac{\eta_0}{\eta_0} \frac{L_0 \rho_0 U_0^2 L_0}{(T_w - T_0)k} (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p^*}{2\lambda_1(T)}.$$

Assim, omitindo (*), a equação da energia na forma adimensional é dada por

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 T + 2\beta \frac{Br}{Pe} (\mathbf{D} : \mathbf{D}) + \frac{Br Re}{Pe} \left(\alpha \boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha) \frac{Tr \boldsymbol{\tau}_p}{2Wi(T)} \right). \quad (\text{A.4})$$

Função WLF

$$f_T = \exp \left[-\frac{C_1 T}{\frac{C_2}{(T_w - T_0)} + T} \right] \quad (\text{A.5})$$

Equação da Temperatura: Produto escalar duplo

B.1 Produto escalar duplo $\tau_s : D$

O produto escalar duplo $\tau_s : D$ presente na equação (1.32) é dado por

$$\eta_s : D = \quad (B.1)$$

$$\eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} : \frac{1}{2} \left\{ \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \right\} = \quad (B.2)$$

$$\eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (B.3)$$

$$\eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial v}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \end{bmatrix}. \quad (B.4)$$

No próximo passo, os elementos da diagonal principal da matriz anterior são somados:

$$2\eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\eta_s \left(\frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{2}\eta_s \left(\frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2\eta_s \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \in \mathbb{R}$$

$$2\eta_s \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} + \eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \eta_s \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2\eta_s \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + 2\eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \quad (\text{B.6})$$

$$2\eta_s \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right]. \quad (\text{B.7})$$

B.2 Produto escalar duplo $\tau_p : D$

O produto escalar duplo $\tau_p : D$ presente na equação (1.32) é dado por

$$\eta_p : D = \quad (\text{B.8})$$

$$\begin{bmatrix} \tau_p^{xx} & \tau_p^{xy} \\ \tau_p^{xy} & \tau_p^{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} = \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{bmatrix} \tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\tau_p^{xy}}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\tau_p^{xx}}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \tau_p^{xy} \frac{\partial v}{\partial y} \\ \tau_p^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\tau_p^{yy}}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\tau_p^{xy}}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.10})$$

somando os elementos da diagonal principal da matriz,

$$\tau_p^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\tau_p^{xy}}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\tau_p^{xy}}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \tau_p^{yy} \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (\text{B.11})$$

Referências Bibliográficas

- [1] M.A. Alves; F. T. Pinho; P.J. Oliveira. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Journal Numerical Methods Fluids*, 41:47–75, 2003.
- [2] A. Amsden; F.H. Harlow. A simplified MAC technique for incompressible fluid flow calculations. *Journal Computational Physics*, 6:332–335, 1970.
- [3] S.D. Besbes; C. Guillope. Non-isothermal flows of viscoelastic incompressible fluids. *Journal Nonlinear Analysis*, 44:919–942, 2001.
- [4] R.B. Bird; R.C. Armstrong; O. Hassanger. *Dynamics of polymeric liquids: Fluid dynamics*. John Wiley Sons, 1987.
- [5] M. Dressler; B.J. Edwards; H.C. Ottinger. Macroscopic thermodynamics of flowing polymeric liquids. *Rheology Acta*, 38:117–136, 1999.
- [6] R. Guenette; M. Fortin. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flow. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 60:27–52, 1995.
- [7] F. Habla; A. Woitalka; S. Neuner; O. Hinrichsen. Development of a methodology for numerical simulation of non-isothermal viscoelastic fluid flows with application to axisymmetric 4:1 contraction flows. *Journal Chemical Engineering*, 207:772–784, 2012.
- [8] M. Hutter; C. Luap; H.C. Ottinger. Energy elastic effects and the concept of temperature in flowing polymeric liquids. *Rheology Acta*, 48:301–316, 2009.
- [9] E.T.J. Klompen; L.E. Govaert. Nonlinear viscoelastic behaviour of thermorheologically complex materials. *Journal Mechanics of Time-Dependent Materials*, 3:49–69, 1999.
- [10] K. Kunisch; X. Marduel. Optimal control of non-isothermal viscoelastic fluid flow. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 88:261–301, 2000.
- [11] E.B. Mano; L.C. Mendes. *Introdução a polímeros*. Edgard Blucher, 1999.

-
- [12] R.B. Mechanics; W.E. Stewart; E.N. Lightfoot. *Transport phenomena*. John Willey Sons, 2002.
 - [13] H. Mercan; K. Atalik. Isothermal and non-isothermal viscoelastic flow of PTT fluid in lid-driven porlar cavity. *Journal Rheology*, 24:277–286, 2012.
 - [14] G.W.M. Peters; F.P.T. Baaijens. Modelling of Non-isothermal viscoelastic flows. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 68:205–224, 1997.
 - [15] E.A.J.F. Peters; M.A. Hulsen; B.H.A.A van den Brule. Instationary Eulerian viscoelastic flow simulations using time separable Rivlin-Sawyers constitutive equations. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 89:209–228, 2000.
 - [16] N. Phan-Thien; R.I. Tanner. A new constitutive equation derived from network theory. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2:353–365, 1977.
 - [17] C. Ruan; J. Ouyang. Entropy generation vs energy flow due to natural convection in a trapezoidal cavity with isothermal and non-isothermal hot bottom wall. *Journal Chinese of Chemical Engineering*, 18:177–184, 2010.
 - [18] H.K. Versteeg; W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. England and Longman Scientific e Technical, 1995.
 - [19] A. Wachs; J.R. Clermont. Non-isothermal viscoelastic flow computations in an axisymmetric contraction at high Weissenberg numbers by a finite volume method. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 95:147–184, 2000.
 - [20] P. Wapperom; M.A. Hulsen; J.P.P.M. van der Zanden. A numerical study for steady non-isothermal viscoelastic fluid for high deborah and peclet numbers. *Rheology Acta*, 37:119, 1998.
 - [21] R.C. Whitingand; J.C Orient. A classification of models for predictive microbiology. *Journal Food Microbiol*, 10:175–177, 1993.
 - [22] J.M. Wiest, N. Phan-Thien. Non-isothermal flow of polymer melts. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 27:333–347, 1989.
 - [23] B. Yang; J. Ouyang; C. Liu. Simulation of Non-isothermal injection molding for a Non-newtonian fluid by level set method. *Journal Chinese of Chemical Engineering*, 18:600–608, 2010.
 - [24] L. Akcelrud. *Fundamentos da ciência dos polímeros*. Manole, 2007.
 - [25] F.P.T. Baaijens. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 79:5–10, 2001.

-
- [26] T. Basak; R. Anandalakshmi; P. Kumar; S. Roy. Entropy generation vs energy flow due to natural convection in a trapezoidal cavity with isothermal and non-isothermal hot bottom wall. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 37:514–532, 2012.
 - [27] T.H. Braun. A model for the thermorheological behavior of viscoelastic fluids, 1991.
 - [28] T. Chinyoka. Poiseuille flow of reactive Phan-Thien-Tanner liquids in 1D channel flow. *Journal of Heat Transfer*, 132, 2010.
 - [29] T. Chinyoka. *Effects of fluid viscoelasticity in non-newtonian flows, evaporation, condensation and heat transfer*. InTech, 2011.
 - [30] A. Chorin. The numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Journal Mathematics Computations*, 22:745–762, 1968.
 - [31] T.J. Chung. *Computational fluid dynamics*. Cambridge University, 2002.
 - [32] R.P. Coutinho. Análise do comportamento viscoelástico de materiais asfálticos considerando o efeito da temperatura. Trabalho de conclusão de curso, Universidade Federal do Ceará, Ceará, 2009.
 - [33] D.O.A. Cruz; F. T. Pinho; P.J. Oliveira. Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a newtonian solvent contribution. *Journal Numerical Methods Fluids*, 132:28–35, 2005.
 - [34] H. Damanik. FEM simulation of non-isothermal viscoelastic fluids. Doutorado, Technischen Universit at Dortmund, Dortmund, 2011.
 - [35] C.É. Dannenhauer. Desenvolvimento de um aplicativo computacional para microbiologia preditiva. Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2010.
 - [36] J.D. Ferry. *Viscoelastic properties of polymers*. John Willey Sons, 1980.
 - [37] C.A.J. Fletcher. *Computational techniques for fluid dynamics 2: Specific techniques for different flow categories*. Springer, 1988.
 - [38] A. O. Fortuna. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. EDUSP, 2000.
 - [39] M. Griebel; T. Doornseifer; T. Neunhoeffler. *Numerical simulation in fluid dynamics: A practical introduction*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1988.
 - [40] F. H. Harlow; J. E. Welch. The MAC method. *Journal Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965.

-
- [41] A. Khalifeh; J.R. Clermont. Numerical simulations of non-isothermal three-dimensional flows in an extruder by finite-volume method. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 126:7–22, 2005.
 - [42] J.M. Marchal; M.J. Crochet. A new mixed finite element method for calculating viscoelastic flow. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 26:77–114, 1987.
 - [43] F.P. Martins. Desenvolvimento de um método numérico implícito para a simulação de escoamentos viscoelásticos com superfícies livres. Mestrado, ICMC-USP, São Carlos, 2009.
 - [44] S. McKee; M.F. Tomé; V.G. Ferreira; J.A. Cuminato; A. Castelo; F.S. Souza; N. Mangiavacchi. The MAC method. *Computers Fluids*, 37:907–930, 2008.
 - [45] G. Mompean; M. Deville. Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-b fluid through a three-dimensional planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 72:253–279, 1997.
 - [46] Y. Mua; G. Zhao; X. Wu; J. Zhai. Modelling and simulation of three-dimensional planar contraction flow of viscoelastic fluids with PTT, Giesekus and FENE-P constitutive models. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 218:8929–8443, 2012.
 - [47] C. Oishi. Análise e implementação de métodos implícitos no sistema FreeFlow2d. Mestrado, ICMC/USP, São Carlos, 2004.
 - [48] C. Oishi. Análise e implementação de métodos implícitos e de projeção para escoamentos com superfície livre. Doutorado, ICMC/USP, São Carlos, 2008.
 - [49] S.J. Park; S.J. Lee. On the use of the open boundary condition method in the numerical simulation of non-isothermal viscoelastic flow. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 87:197–214, 1999.
 - [50] G.S. de Paulo. Solução numérica do modelo PTT para escoamentos viscoelásticos com superfícies livres. Doutorado, ICMC/USP, São Carlos, 2006.
 - [51] F.M.C.T. de Pinho. Cálculo de escoamentos não newtonianos em regime laminar. Trabalho de conclusão de curso, Universidade do Porto, Porto, 2003.
 - [52] M.F. Tomé. *GENSMAC: a multiple free surface fluid flow solver*. Doctor of philosophy, University of Atrathclyde, Atrathclyde, 1993.
 - [53] M.F. Tomé. GENSMACVISCO: um método numérico para resolver escoamentos viscoelásticos não-estacionários com fronteiras livres. Livre docência, ICMC/USP, São Carlos, 2001.

- [54] P. Wapperom. Non-isothermal flows of viscoelastic fluids: Thermodynamics, analysis and numerical simulation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 20:61–106, 1995.
- [55] B. Yesilata; A. Oztekin; S. Neti. Non-isothermal viscoelastic flow through an axisymmetric sudden contraction. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 89:133–164, 2000.