

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “Júlio de Mesquita Filho”
Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente
Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

**Desenvolvimento de um método numérico para simular
escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres:
Modelo PTT**

Reginaldo Merejoli

Orientadora: Prof. Dra. Gilcilene Sanchez de Paulo

Co-orientador: Prof. Dr. José Roberto Nogueira

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “Júlio de Mesquita Filho”
Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente
Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

**Desenvolvimento de um método numérico para simular
escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres:
Modelo PTT**

Reginaldo Merejoli

Orientadora: Prof. Dra. Gilcilene Sanchez de Paulo

Co-orientador: Prof. Dr. José Roberto Nogueira

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” como requisito para a obtenção do Título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, Abril de 2013

FICHA CATALOGRÁFICA

M531d Merejoli, R.
Desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres : Modelo PTT / Reginaldo Merejoli. - Presidente Prudente : [s.n], 2013
00 f.

Orientador: Gilcilene Sanchez de Paulo
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências e Tecnologia
Inclui bibliografia

1. Escoamento axissimétrico . 2. Superfície livre. 3. Modelo PTT. I. Paulo, Gilcilene Sanchez de. II. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências e Tecnologia. III. Desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres: Modelo PTT.

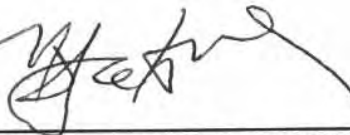
BANCA EXAMINADORA



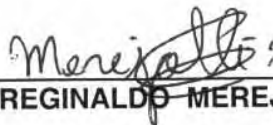
PROFA. DRA. GILCILENE SANCHEZ DE PAULO
ORIENTADORA



PROF. DR. MESSIAS MENEQUETTE JUNIOR
UNESP/FCT



PROF. DR. MURILO FRANCISCO TOMÉ
INSTITUTO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS E DE COMPUTAÇÃO- ICMC/USP



REGINALDO MEREJOLLI

PRESIDENTE PRUDENTE (SP), 24 DE ABRIL DE 2013

RESULTADO: Aprovado

Resumo

Neste trabalho é apresentado um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres modelados pela equação constitutiva PTT (Phan-Thien-Tanner). As equações governantes para escoamentos axissimétricos transientes incompressíveis de um fluido PTT são resolvidas utilizando o método de diferenças finitas numa malha deslocada. As derivadas temporais da equação do momento e da equação constitutiva são integradas pelo método de Euler explícito. Os termos convectivos são aproximados pelo método de alta ordem CUBISTA (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection), os termos difusivos e as derivadas espaciais são aproximados por diferenças centrais. O fluido é modelado utilizando a técnica *Marker-and-Cell* (MAC) o que permite visualizar e localizar a superfície livre do fluido. O método numérico descrito neste trabalho foi implementado na plataforma de alto desempenho denominada FREEFLOW-AXI e verificado comparando-se os resultados numéricos obtidos da simulação do escoamento totalmente desenvolvido em um tubo com a solução analítica deste problema. Foram obtidos alguns resultados numéricos para escoamentos axissimétricos com superfícies livres utilizando um fluido PTT, tais como, o impacto de uma gota esférica de fluido viscoelástico numa superfície rígida (*Impacting Drop*), o impacto de uma gota esférica numa superfície líquida (*Splashing Drop*) e o problema do inchamento do extrudado (*Dieswell*). Nestas simulações, o foco principal foi estudar numericamente os efeitos dos parâmetros do modelo PTT ε e ξ nestes escoamentos.

Palavras-Chave: modelo PTT, escoamentos axissimétricos, superfícies livres.

Abstract

In this work is presented a numerical method for simulating axisymmetric viscoelastic free surface flows modeled by the constitutive equation PTT (Phan-Thien-Tanner). The governing equations for incompressible transient axisymmetric flows of a PTT fluid are solved using the finite difference method in a staggered grid. The time derivatives on momentum and constitutive equations are integrated by forward Euler method. The convective terms are approximated by the high order method CUBISTA (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection), the diffusive terms and the spatial derivatives are approximated by central differences. The fluid is modeled using the strategy “Marker-and-Cell” (MAC) which allows to view and locate the free surface of the fluid. The numerical method described in this work was implemented on the high performance platform called FREEFLOW-AXI and verified by comparing the numerical results of fully developed tube flow with the analytic solution of this problem. Some numerical results for axisymmetric free surface flows using a PTT fluid were obtained, such as, impacting drop, splashing drop and the dieswell problems. In these simulations, the numerical studies about the influence that the parameters of the PTT model ε and ξ exert on the flows were the main focus.

Keywords: PTT model, axisymmetric flows, free surface.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus e à Nossa Senhora Aparecida por mais esta conquista, pela proteção e companhia sempre.

Aos meus pais, Luiz e Isabel, e meu irmão Ricardo pelo apoio e compreensão.

À minha orientadora, professora Gilcilene Sanchez de Paulo, pela paciência, dedicação, incentivo e pelo conhecimento compartilhado.

Aos professores e funcionários da FCT/UNESP, em especial ao funcionário e colega Fernando Pacanelli pela ajuda com o código, e ao professor José Roberto Nogueira pelas conversas e conselhos.

Aos amigos e professores do curso de Matemática da UFMS de Três Lagoas que sempre me incentivaram a fazer mestrado, em especial aos amigos Joel (Joe) e Aparecido (Cidão) e ao professor Antônio Carlos Tamarozzi.

Aos amigos que fiz em Presidente Prudente durante esse período, não vou citar nomes aqui para não cometer a injustiça de esquecer alguém, que me aguentaram e conviveram comigo (coisa não muito fácil) durante esses dois anos, pela compreensão, risadas e a constante troca de conhecimento.

Aos amigos de São Carlos, Giseli (*in memoriam*), Laís (Fiona) e Rafael (Goiabinha) que me ajudaram na reta final deste trabalho.

À CAPES e à FAPESP pelo apoio financeiro.

Lista de Figuras

1.1	Representação do impacto de uma gota numa superfície sólida <i>impacting drop</i>	5
1.2	Esquema de representação para <i>splashing drop</i> . (Fonte: Tomé et al. [45]) . . .	6
1.3	Observações experimentais do fenómeno <i>splashing drop</i> . (Fonte: Tomé et al. [45])	6
1.4	Representação do inchamento do extrudado <i>Dieswell</i> . (Fonte: Bird et al., [6])	7
2.1	Representação esquemática do escoamento de Couette entre duas placas paralelas.	10
2.2	Representação de um fluxo elongacional uniaxial. (Fonte: Pinho, [34]) . . .	11
2.3	Viscosidade de Corte	13
2.4	Coeficiente da Primeira Diferença de Tensões Normais	14
2.5	Viscosidade Elongacional	14
2.6	Viscosidade de Corte e Viscosidade Elongacional variando ε . (Fonte:Tomé et al. [41])	16
2.7	Viscosidade de Corte e Viscosidade Elongacional variando ξ . (Fonte:Tomé et al. [41])	16
4.1	Representação da malha deslocada	29
4.2	Tipos de células do domínio computacional	30
4.3	Aproximação de $\frac{\partial S^{rz}}{\partial z}$ em pontos adjacentes ao contorno rígido.	31
4.4	Aproximação de $\frac{\partial S^{rz}}{\partial z}$ em pontos adjacentes ao contorno rígido.	32
4.5	Célula B com a face inferior em contato com uma célula F/S	36
4.6	Célula B com a face direita em contato com uma célula F/S	37
4.7	Célula B com a face direita e a face inferior em contato com uma célula F/S	39
4.8	Célula <i>inflow</i> (I) com face inferior em contato com célula F/S.	40
4.9	Célula <i>outflow</i> (O) com face superior em contato com célula F/S.	40
4.10	Célula S com a face da direita em contato com uma célula E	41
4.11	Célula S com duas faces em contato com células E	42
5.1	Domínio computacional para simulação do escoamento num tubo.	46
5.2	Visualização frontal da simulação do escoamento num tubo. $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.5$, $\varepsilon = 0.0$ e $\xi = 0.0$	47

5.3	Comparação entre solução numérica e solução exata: $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.5$, $\varepsilon = 0.0$ e $\xi = 0.0$. (a) Perfil da velocidade $v(r)$; (b) Perfil da componente S_{rz} do tensor das tensões; (c) Perfil da componente S_{zz} do tensor das tensões.	47
5.4	(a) Visualização tridimensional do domínio; (b) Domínio computacional para simulação do impacto de uma gota numa superfície rígida.	49
5.5	Visualização do perfil da velocidade na direção radial em diferentes tempos. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$	50
5.6	Visualização do perfil dos tensores S^{rr} , S^{zz} , $S^{\theta\theta}$ e S^{rz} no tempo $t = 0.03s$. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$	50
5.7	Visualização tridimensional do impacto da gota numa superfície rígida em diferentes tempos. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$	51
5.8	(a) Comparação entre o comprimento da gota com 50% de polímero e 50% de solvente com uma gota Newtoniana; (b) Comparação entre o comprimento da gota Newtoniana e da gota 10% polímero 90% solvente; (c) Zoom da Figura (b).	52
5.9	Comparação entre o comprimento da gota em função do tempo analisando a influência do parâmetro ξ neste escoamento. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.0$	53
5.10	Comparação entre o comprimento da gota em função do tempo analisando a influência do parâmetro ε neste escoamento. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\xi = 0.0$	53
5.11	Visualização 3D e domínio computacional para simulação do <i>splashing drop</i> . 54	
5.12	Visualização 3D da simulação do <i>splashing drop</i> para $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$, $\varepsilon = 0.2$ e $\xi = 0.1$	55
5.13	Medida da altura do jato de Worthington na simulação do <i>splashing drop</i> em diferentes tempos. $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$. (a) variando ε , $\xi = 0.0$; (b) variando ξ , $\varepsilon = 0.0$	56
5.14	Visualização tridimensional do jato de Worthington na simulação do <i>splashing drop</i> . $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$ e $\xi = 0.0$. (a)Newtoniano; (b) $\varepsilon = 0.2$; (c) $\varepsilon = 0.05$	56
5.15	Visualização tridimensional do jato de Worthington na simulação do <i>splashing drop</i> . $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$ e $\varepsilon = 0.0$ (a) Newtoniano; (b) $\xi = 0.5$; (c) $\xi = 0.01$	56
5.16	Domínio computacional para simulação do inchamento do extrudado.	57
5.17	Resultados numéricos do inchamento do extrudado. $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\varepsilon = 0.01$ e $\xi = 0.1$. (a) Perfil da componente v da velocidade; (b) Perfil da componente u da velocidade; (c) Perfil da componente S^{rr} do tensor das tensões; (d) Perfil da componente S^{rz} do tensor das tensões; (e) Perfil da componente $S^{\theta\theta}$ do tensor das tensões; (f) Perfil da componente S^{zz} do tensor das tensões.	60
5.18	Simulação do inchamento do extrudado $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\xi = 0.01$. Variando ε ; (a) $\varepsilon = 0.01$; (b) $\varepsilon = 0.5$	62
5.19	Simulação do inchamento do extrudado $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\varepsilon = 0.01$. Variando ξ ; (a) $\xi = 0.01$; (b) $\xi = 0.5$	63

Sumário

Introdução	1
1 Pesquisa Bibliográfica	3
1.1 Introdução	3
1.2 Simulação Numérica de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos	3
1.3 Escoamentos com Superfície Livre	4
1.4 Trabalhos Pioneiros e Recentes	5
1.4.1 Impacto da Gota em Superfícies Sólidas	5
1.4.2 <i>Splashing Drop</i>	6
1.4.3 Inchamento do Extrudado (<i>Dieswell</i>)	7
2 Conceitos Elementares de Reologia	9
2.1 Reometria de Corte	9
2.1.1 Funções Materiais em Escoamento de Corte Simples Estacionário	10
2.2 Reometria Extensional ou Elongacional	11
2.3 Equações Governantes	11
2.4 Modelo Newtoniano Generalizado	12
2.5 Modelos Constitutivos para Fluidos Viscoelásticos	13
2.5.1 Modelo Convectivo Superior de Maxwell	13
2.5.2 Modelo de Oldroyd-B	14
2.5.3 Modelo de Phan - Thien - Tanner (PTT).	15
3 Formulação Matemática	17
3.1 Equações Governantes	17
3.2 Adimensionalização	21
3.3 Condições de Contorno	22
3.4 Cálculo do Tensor das Tensões em Contornos Rígidos	23
3.4.1 Contornos Rígidos Paralelos ao Eixo r	23
3.4.2 Contornos Rígidos Paralelos ao Eixo z	23
3.4.3 Cálculo do Tensor das Tensões em <i>Inflows</i> , <i>Outflows</i> e no Eixo de Simetria	24
3.5 Condições de Contorno na Superfície Livre	24
3.6 A metodologia GENSMAC-AXI	25
3.6.1 Algoritmo Computacional	26
4 Aproximação por Diferenças Finitas	29
4.1 Classificação das Células	29
4.2 Discretizações	30

4.2.1	Equações de Conservação da Quantidade de Movimento	30
4.2.2	Equações do Tensor das Tensões	33
4.2.3	Aproximação da Equação de Poisson para ψ	35
4.2.4	Aproximação da Equação da Velocidade Final	35
4.2.5	Aproximação da Equação da Pressão	35
4.2.6	Cálculo das Componentes do Tensor das Tensões em Contornos Rígidos.	35
4.2.7	Cálculo do Tensor das Tensões em <i>Inflows</i> e <i>Outflows</i>	40
4.2.8	Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre	41
4.2.9	Cálculo do Passo no Tempo	44
5	Resultados Numéricos	45
5.1	Escoamento Totalmente Desenvolvido em um Tubo: Verificação do Método Numérico	45
5.2	Impacto de uma Gota numa Superfície Rígida	48
5.3	<i>Splashing Drop</i>	53
5.4	Inchamento do Extrudado (<i>Dieswell</i>)	57
	Conclusão	65
	Trabalhos Futuros	67
	Referências Bibliográficas	69

Introdução

Um fluido é uma substância que se deforma continuamente quando submetido a uma tensão de cisalhamento. Os fluidos podem ser classificados em newtonianos e não newtonianos. Como uma primeira abordagem, os fluidos newtonianos são aqueles que podem ser representados por moléculas relativamente simples como é o caso do ar e da água. Os fluidos não newtonianos são aqueles com moléculas complexas, como tintas, óleos, vernizes, colas, massas alimentares, iogurtes, etc. Estes podem ser encontrados em vários processos industriais, tais como, das indústrias petroquímica, alimentícia, farmacêutica, das tintas e dos detergentes, entre outras.

Neste trabalho será apresentada uma classe particular de fluidos não newtonianos, designados por fluidos viscoelásticos. Tais fluidos apresentam simultaneamente comportamento viscoso e elástico quando sujeitos a uma deformação. Devido a esta combinação, os fluidos viscoelásticos, apresentam frequentemente comportamentos inesperados durante o escoamento. Estes comportamentos são estudados em Reologia, disciplina que ocupa-se do estudo da deformação e escoamento da matéria.

A análise do escoamento de um fluido viscoelástico pode ser feita de diferentes formas, por via teórica, experimental, numérica ou ainda por uma combinação destes métodos. De forma teórica, pode obter-se soluções analíticas. Este método, embora seja bastante atraente, normalmente restringe-se a escoamentos em geometrias simples. Por via experimental, o estudo do escoamento de fluidos viscoelástico é muito utilizado, pois qualquer trabalho com relevância industrial inicia-se normalmente por um estudo experimental do comportamento do material. Já a análise do escoamento de um fluido viscoelástico por simulação numérica vem ocupando um espaço cada vez maior nas comunidades científicas e tecnológicas, conhecida como Reologia Computacional.

O desenvolvimento de técnicas numéricas mais eficientes, computadores com maior capacidade de cálculos e essencialmente o desenvolvimento de equações constitutivas mais elaboradas, capazes de prever um número maior de efeitos viscoelásticos, tem contribuído para o crescimento das pesquisas na área de simulação numérica de escoamentos viscoelásticos.

Muitos modelos tridimensionais podem ser classificados como sendo axissimétricos devido à simetria radial. Esses modelos tridimensionais podem ser simulados em duas dimensões, tomando um corte longitudinal ao longo do eixo de simetria. A simulação de modelos axissimétricos em duas dimensões, em vez de três dimensões, permite a obtenção de resultados com o tempo de simulação reduzido significativamente.

A gama dos problemas com superfície livre é muito ampla. Esses problemas são aqueles em que a forma do domínio ocupado pelo fluido pode mudar com o tempo. Na natureza, o fluxo de um riacho, as ondas do mar e a queda de um pingo de chuva em uma poça são exemplos de problemas com superfície livre. Em aplicações de engenharia, a modelagem por injeção de plásticos, bem como processos de fusão, solidificação e revestimento podem

ser todos formulados como problemas de superfície livre.

Este trabalho propõe o desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres modelados pela equação constitutiva PTT (Phan - Thien - Tanner) [33].

O método numérico desenvolvido é baseado em métodos de projeção, originalmente proposto por Chorin [13] e Temam [40]. A ideia central é desacoplar velocidade e pressão, nas equações de Navier-Stokes e resolver essas variáveis separadamente. Neste trabalho, acrescentou-se a resolução da equação constitutiva de forma desacoplada seguindo as ideias de Tomé et.al. [43] em seus trabalhos pioneiros.

Um dos primeiros métodos utilizados para resolver as equações de Navier-Stokes foi o método MAC (Marker-and-Cell) [20] e [48]. Este método foi inicialmente desenvolvido para os problemas transientes envolvendo superfícies livres, para permitir a localização da superfície a ser determinada como uma função do tempo. O método é caracterizado pelo uso de uma malha deslocada. Neste trabalho utilizou-se uma extensão do método MAC, conhecida como a metodologia GENSMAC, desenvolvida por Tomé e Mckee [44].

A implementação do método numérico desenvolvido foi feita em uma plataforma de programação de alto desempenho denominada FREEFLOW-AXI [4].

Para verificar a técnica numérica, simulou-se o escoamento totalmente desenvolvido de um fluido viscoelástico em um tubo circular e os resultados foram comparados com soluções analíticas.

O modelo PTT apresenta dois parâmetros adimensionais, ε e ξ , que influenciam o comportamento do escoamento. Portanto, afim de explorar esses parâmetros adicionais foram simulados problemas axissimétricos de interesse tecnológicos e industriais, como por exemplo, o impacto de uma gota esférica de fluido viscoelástico numa superfície rígida (*impacting drop*), o *splashing drop* e o inchamento do extrudado (*dieswell*), estudando os efeitos de ε e ξ nestes escoamentos.

A dissertação foi dividida da seguinte forma:

- Capítulo 1: pesquisa bibliográfica sobre escoamentos de fluidos viscoelásticos com superfície livre e os principais trabalhos pioneiros e recentes sobre os problemas abordados nessa dissertação.
- Capítulo 2: alguns conceitos elementares de Reologia, tais como, reometria de corte e elongacional, equações governantes e modelos matemáticos para fluidos não newtonianos. A tese de Doutorado [2] embasou os Capítulos 1 e 2.
- Capítulo 3: formulação matemática, onde são descritas as equações governantes, as condições de contorno em fronteiras fixas, de simetria e superfícies livre, a metodologia GENSMAC e o algoritmo computacional.
- Capítulo 4: aproximações por diferenças finitas das equações governantes.
- Capítulo 5: a verificação do método numérico e o estudo dos efeitos dos parâmetros ε e ξ nos escoamentos envolvendo superfícies livres simulados neste trabalho.

Para o desfecho desta Dissertação, são apresentadas as conclusões, as contribuições deste trabalho e algumas possibilidades de trabalhos futuros na linha deste trabalho.

Pesquisa Bibliográfica

Neste trabalho aborda-se problemas com geometrias tridimensionais que sejam axissimétricos, ou seja, que possuam uma simetria radial, sendo que estes modelos tridimensionais podem ser simulados em duas dimensões, reduzindo assim o tempo de simulação para obtenção de resultados.

1.1 Introdução

Na literatura pode-se encontrar diversos livros sobre o estudo do comportamento dos fluidos viscoelásticos. Um dos primeiros livros dedicados a dinâmica de fluidos de materiais poliméricos e a análise de diversas equações constitutivas que modelam o comportamento desses materiais é o livro *Dynamics of Polymeric Liquids* de Bird et al. [6].

A obra *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow* de Crochet e Walters [15] descreve o período de desenvolvimento da Reologia Computacional e o livro *Computational Rheology* de Owens e Phillips [27] apresenta a grande evolução da Reologia Computacional por conta do avanço que os métodos numéricos e os computadores sofreram até o ano de 2002.

Estes livros acima citados revelam-se uma excelente fonte bibliográfica, pois eles possuem grande parte dos trabalhos mais relevantes publicados até 2001 na área de Reologia Computacional.

1.2 Simulação Numérica de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos

As primeiras publicações sobre Reologia Computacional ocorreram entre o final da década de 1960 e início da década de 1970. Neste período, segundo Alves [2], as contribuições mais significativas foram as de Walters e Waters [47], Griffiths et al., [18], Griffiths e Walters [19] e Davies e Walters [16].

Em 1977 foram feitas as primeiras simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos em geometrias bidimensionais por Perera e Walters [30], Perera e Walters [31] e por Kawahara e Takeuchi [23] de forma independente, sendo que Kawahara e Takeuchi optaram pela utilização do método dos elementos finitos na simulação de escoamentos de

fluidos viscoelásticos descritos pelo modelo de Maxwell, já os primeiros autores utilizaram um método de diferenças finitas para a simulação de vários escoamentos complexos descrito pelo modelo de Oldroyd de 4 constantes.

Após a publicação desses trabalhos houve um aumento de referências na área da Reologia Computacional relativo a simulação de escoamentos de fluidos não newtonianos, em particular de fluidos viscoelásticos, como pode-se ver em Crochet e Walters [14]. No ano seguinte, em 1984, surge o primeiro livro sobre simulação numérica de escoamentos de fluidos não newtonianos.

Durante esse período de desenvolvimento da Reologia Computacional, algumas simulações de problemas padrões tiveram uma maior atenção, tais como, escoamento em torno de obstáculos submersos, previsão da pressão no orifício, escoamento numa contração, entre outros [14]. Atualmente, diversos pesquisadores, têm demonstrado um grande interesse por problemas com superfície livre, tais como, o inchamento do extrudado [41], *splashing drop* [45] e o impacto de uma gota numa superfície sólida [26].

Neste trabalho serão apresentados os seguintes escoamentos:

- (i) Impacto de uma gota esférica de fluido viscoelástico numa superfície sólida (*Impacting Drop*);
- (ii) *Splashing Drop*;
- (iii) Inchamento do extrudado (*Dieswell*).

1.3 Escoamentos com Superfície Livre

Aplicações industriais de escoamentos de fluidos com superfícies livres estão sempre presentes: aplicações incluindo fundição, enchimento de contêineres, extrusão, e dispositivos jorrando fluido. A determinação exata da superfície livre é importante especialmente se o escoamento é mesmo determinado pela posição e curvatura da superfície livre.

Ao longo dos anos uma série de técnicas computacionais têm sido desenvolvidas para resolver escoamentos com superfícies livres. Estas podem ser amplamente divididas em duas categorias: métodos de controle de interface e métodos de captura frontal.

Nos métodos de controle de interface são usadas malhas montadas na fronteira que avançam a cada vez que a superfície livre é movida. E os métodos de captura frontal são usadas malhas fixas, as quais se estendem para além da superfície livre.

Os métodos de captura frontal podem ainda ser subdivididos em método marcador de célula (Marker-And-Cell, MAC) e o método volume de fluido (Volume-Of-Fluid, VOF). Neste trabalho utilizou-se o método MAC.

Com o método MAC, partículas marcadoras virtuais são movimentadas de acordo com o cálculo Euleriano do fluido (com apropriadas interpolações bilineares das componentes da velocidade) e é isto que define a região do fluido e, portanto, a interface. O método marcador de célula simplificado (SMAC) foi introduzido por Amsden e Harlow [3]. Este método simplifica a aplicação das condições de fronteira introduzindo uma função auxiliar para a formulação da equação de Poisson.

Tomé e McKee [44], motivados por processos industriais de enchimento, retornaram a metodologia SMAC e desenvolveram o método GENSMAC. Este código simula escoamentos de fluidos incompressíveis de tempo dependente em coordenadas cartesianas e em arbitrários domínios bidimensionais especificados pelo usuário. Em adicional, ele pode lidar com condições de contorno *free-slip* (escorregamento livre) e *no-slip* (sem escorregamento), podem ter várias entradas *inflows* e várias saídas *outflows*, e um número

arbitrário de obstáculos contidos dentro do domínio geral do escoamento. Outro avanço com o GENSMAC é que deixou-se de utilizar partículas marcadoras em todo o fluido e agora as partículas marcadoras são utilizadas apenas para marcar a superfície livre do fluido.

Para lidar com escoamentos axissimétricos, que são o foco deste trabalho, o GENSMAC foi adaptado, de forma a tratar esse tipo de escoamento, ver Tomé et al. [42].

1.4 Trabalhos Pioneiros e Recentes

Esta seção será dedicada a descrição dos problemas que serão abordados neste trabalho.

1.4.1 Impacto da Gota em Superfícies Sólidas

Fenômenos de impacto de gotas sobre uma superfície são importantes em uma variedade de campos diferentes, estes fenômenos ocorrem em campos práticos da Engenharia, que incluem spray de refrigeração [21], aerografia [50], impressão a jato de tinta [22], injeção de combustível em um motor de combustão interna [28], entre outros.

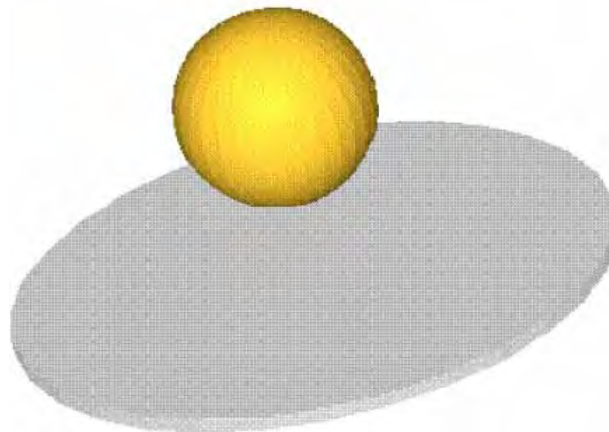


Figura 1.1: Representação do impacto de uma gota numa superfície sólida *impacting drop*.

O escoamento de fluidos associados com o impacto de gotas é bastante complicado e não compreendido totalmente. O comportamento da gota é diferente com o impacto sobre uma superfície seca ou molhada.

Muitos casos diferentes do impacto da gota podem ser distinguidos de acordo com as circunstância em que o impacto acontece. O resultado da colisão depende das propriedades da gota, tais como, densidade, viscosidade, pressão; dependem também da superfície sólida e do fluido que a gota atravessa antes do impacto. Além disso, a velocidade do impacto e aspectos geométricos são importantes.

Na literatura é possível encontrar muitos estudos desse assunto. Chen et al. [10], de forma experimental, relatou o comportamento da gota, tais como, respingos e ressaltos pelo impacto da gota sobre uma superfície seca; Rein [35], de forma experimental, investigou o comportamento do impacto da gota em superfícies sólidas; Tomé et.al. [43], de forma numérica, investigou o comportamento do impacto da gota numa placa rígida.

Neste trabalho serão apresentados os resultados numéricos do impacto da gota esférica em uma superfície sólida. Pode-se citar o trabalho de Silva [37], como referência do impacto da gota axissimétrica de fluido Oldroyd-B numa superfície sólida.

1.4.2 *Splashing Drop*

Worthington foi um dos primeiros pesquisadores a investigar os fenômenos causados quando uma esfera líquida cai de uma determinada altura numa piscina contendo o mesmo fluido. Uma série de fenômenos podem ocorrer: uma cratera e um cume podem se formar seguidos de um *splash*. Seu livro *A Study of Splashes* [49] contém fotografias fascinantes dos fenômenos que acompanham o impacto da gota. Estes fenômenos ainda estão longe de serem completamente compreendidos. Apesar de seu caráter comum e de mais de 100 anos de pesquisa, continuam atraindo físicos, engenheiros e matemáticos.

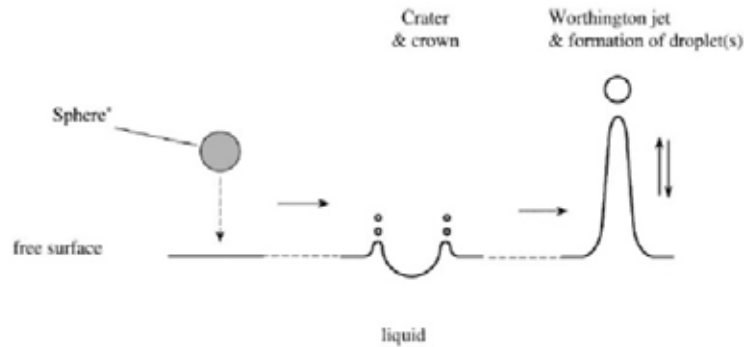


Figura 1.2: Esquema de representação para *splashing drop*. (Fonte: Tomé et al. [45])

Atualmente, os pesquisadores têm mostrado um maior interesse na formação do jato de Worthington (*Worthington jet*) que flui para fora a partir do seu centro como mostram as Figuras 1.2 e 1.3. Um grupo de pesquisadores têm estudado esse fenômeno de forma experimental numa sequência de artigos, Cheny e Walters [11], Cheny e Walters [12], Nigen e Walters [25]. Estes autores estavam interessados nos efeitos reológicos do fluido quando uma esfera sólida, sob a ação da gravidade, é solta de uma certa distância acima da superfície do líquido. De forma numérica pode-se citar os artigos Tomé et al. ([42], [46], [45]) e Silva [37] investigaram algumas influências reológicas do impacto de uma gota líquida sobre uma superfície líquida.

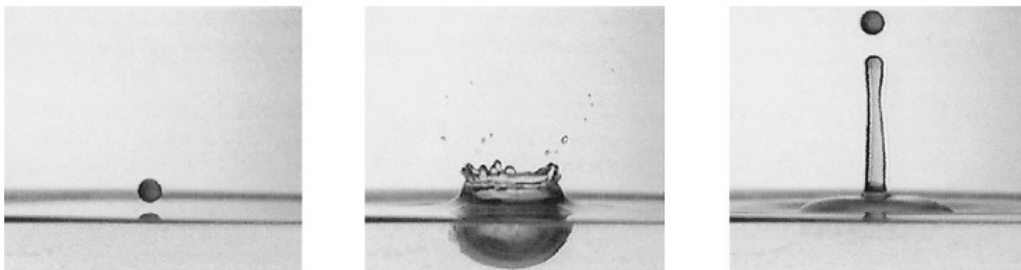


Figura 1.3: Observações experimentais do fenômeno *splashing drop*. (Fonte: Tomé et al. [45])

A descoberta mais interessante é que o *splash* pode ser reduzido mais que uma ordem de magnitude adicionando-se ao fluido Newtoniano pouco menos de 10 ppm/g de polímero. O interesse de alguns desses pesquisadores e de Worthington era com esferas de vidro ou metal caindo num líquido parado. Este trabalho se restringirá apenas ao caso de uma esfera líquida caindo em um tanque circular com uma determinada profundidade e contendo o mesmo fluido que a esfera.

1.4.3 Inchamento do Extrudado (*Dieswell*)

Quando um fluido viscoelástico é extrudado de um tubo, o diâmetro do jato extrudado geralmente aumenta, em alguns casos chega a 2 ou 3 vezes o diâmetro do tubo. A Figura 1.4 ilustra algumas características deste problema. Este fenômeno vem sendo estudado ao longo dos anos por vários pesquisadores como Tanner ([38] e [39]), Ryan e Dutta [36] e Tomé et al. [43]. Diversas teorias têm sido propostas para compreender o fenômeno de *Dieswell*, mas uma explicação completamente satisfatória ainda não foi proposta. No entanto, uma simples proposição para explicar o inchamento do extrudado foi introduzida por Weissenberg. Ele propôs que escoamentos de fluidos viscoelásticos tem uma tensão extra ao longo das linhas de corrente. Uma vez que o fluido tenha passado pela extremidade do tubo a tensão extra não pode ser suportada, e o fluido contrai axialmente e incha radialmente (ver Bird et al. [6], Owens e Phillips [27]). Na literatura vários trabalhos têm sido desenvolvidos para investigação experimental e numérica do inchamento do extrudado, para este problema pode-se citar [37] e [46].

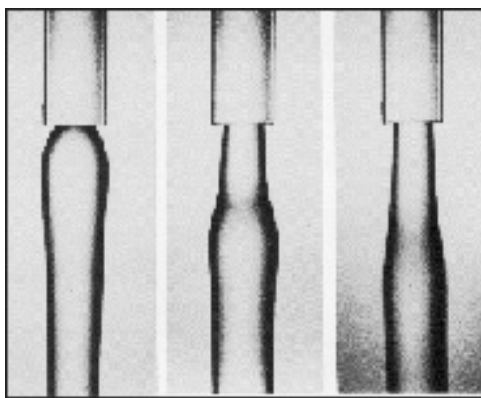


Figura 1.4: Representação do inchamento do extrudado *Dieswell*. (Fonte: Bird et al., [6])

Conceitos Elementares de Reologia

Reologia é a ciência que estuda a deformação e escoamento dos materiais. Os principais conceitos teóricos são: cinemática, lidar com aspectos de deformação e escoamento; leis de conservação, lidar com forças, tensão, e troca de energia; relações constitutivas especiais para as classes de corpos (por exemplo, corpos elásticos). As relações constitutivas servem para ligar movimento e força para completar a descrição dos processos de escoamento, que podem ser aplicados para resolver problemas da engenharia decorrentes em processamento polimérico, lubrificação, tecnologia de alimentos, impressão e muitos outros.

Um dos campos da Reologia é a Reometria, esta por sua vez atem-se em fazer medições experimentais das características reológicas dos materiais, tais como, as diferenças de tensões normais e viscosidade de corte.

Normalmente adotam-se dois tipos de escoamento padrão para a caracterização de um fluido não newtoniano: escoamentos cisalhante e elongacional simples.

2.1 Reometria de Corte

A reometria de corte permite medir determinadas funções materiais, nomeadamente: a viscosidade de corte, a primeira e segunda diferença de tensões normais, entre outras [2].

Considere um fluido em repouso entre duas placas planas. Suponha que a placa superior em um dado instante de tempo comece a se movimentar horizontalmente a uma velocidade constante U (sob ação de uma força tangencial), este tipo de escoamento é denominado escoamento de Couette entre duas placas paralelas (ver Figura 2.1).

Tem-se que o perfil linear da velocidade é apenas em função da coordenada z ,

$$u = \frac{z}{H}U, \quad (2.1)$$

assim, a taxa de deformação será constante em todo domínio

$$\dot{\gamma} \equiv \frac{du}{dz} = \frac{U}{H}. \quad (2.2)$$



Figura 2.1: Representação esquemática do escoamento de Couette entre duas placas paralelas.

2.1.1 Funções Materiais em Escoamento de Corte Simples Estacionário

A Figura 2.1 ilustra um escoamento cisalhante simples em estado estacionário. Neste tipo de escoamento o comportamento do material é caracterizado por três funções materiais: viscosidade de cisalhamento ou de corte $\eta(\dot{\gamma})$, o coeficiente da primeira diferença de tensões normais Ψ_1 e o coeficiente da segunda diferença de tensões normais Ψ_2 .

2.1.1.1 Viscosidade de Cisalhamento ou de Corte

Pela lei de Newton para a viscosidade, tem-se que a viscosidade de cisalhamento ou de corte define-se como sendo a razão entre a tensão de cisalhamento e a respectiva taxa de deformação,

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_{rz}}{\frac{du}{dz}} = \frac{\tau_{rz}}{\dot{\gamma}}. \quad (2.3)$$

A viscosidade de cisalhamento diminui com o aumento da taxa de deformação, e para fluidos newtonianos, a viscosidade de corte ou viscosidade de cisalhamento é constante.

2.1.1.2 Tensões Normais

De forma experimental observa-se que para fluidos viscoelásticos, num escoamento cisalhante simples, surge uma força normal que tende a afastar as placas paralelas. Essa força normal resulta de uma deformação da estrutura interna do fluido que dá origem a um coeficiente da primeira diferença de tensões normais, Ψ_1 , não nulo. Esta propriedade material define-se pela razão entre a primeira diferença de tensões normais, N_1 , e o quadrado da taxa de deformação, dada por

$$\Psi_1(\dot{\gamma}) = \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{rr} - \tau_{zz}}{\dot{\gamma}^2}. \quad (2.4)$$

A última propriedade material de um escoamento de corte é chamada de segunda diferença de tensões normais, Ψ_2 , definida por

$$\Psi_2(\dot{\gamma}) = \frac{N_2}{\dot{\gamma}^2} = \frac{\tau_{zz} - \tau_{\theta\theta}}{\dot{\gamma}^2}, \quad (2.5)$$

onde N_2 é a segunda diferença de tensões normais. Experimentalmente observa-se que para fluidos viscoelásticos a função material Ψ_2 é quase sempre negativa, e o seu valor absoluto é bem inferior ao valor de Ψ_1 , (geralmente $|\Psi_2| \leq 0.2|\Psi_1|$).

Para fluidos newtonianos, tanto as tensões normais quanto as diferenças de tensões normais em um escoamento cisalhante simples são nulas.

2.2 Reometria Extensional ou Elongacional

Uma característica muito importante de um tipo de escoamento padrão de fluidos viscoelásticos é a viscosidade extensional (ou elongacional), definida como a resistência que o fluido oferece ao seu estiramento. Tais escoamentos são chamados de escoamento extensional (ou elongacional).

Para provocar uma deformação extensional uniaxial, por exemplo, basta prender uma amostra pelas extremidades e puxá-la numa determinada direção ver Figura 2.2.

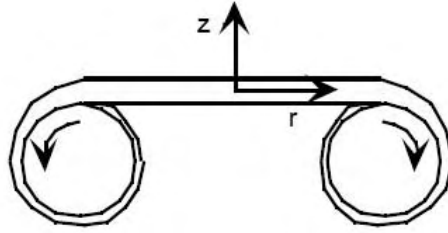


Figura 2.2: Representação de um fluxo elongacional uniaxial. (Fonte: Pinho, [34])

Desta forma define-se a viscosidade extensional uniaxial por

$$\eta_E = \frac{\tau_{rr} - \tau_{zz}}{\dot{\epsilon}}, \quad (2.6)$$

sendo que a razão entre a viscosidade extensional uniaxial e a viscosidade de corte à taxa de deformação nula é denominada razão de Trouton, Tr . Esta variável adimensional é dada por

$$Tr = \frac{\eta_E}{\eta(\dot{\gamma})}. \quad (2.7)$$

Para os fluidos viscoelásticos, verifica-se que a viscosidade extensional varia com a taxa de extensão, podendo exceder largamente o valor $Tr = 3$, que caracteriza os fluidos newtonianos.

2.3 Equações Governantes

Os escoamentos de fluidos são governados pela equação de conservação da massa, dada por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.8)$$

onde \mathbf{u} representa o vetor velocidade, e pela equação da conservação da quantidade de movimento, em sua forma vetorial,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.9)$$

onde ρ , p e t são, respectivamente, a densidade do fluido, a pressão e o tempo.

Considerando-se escoamentos incompressíveis de fluidos newtonianos, o tensor das tensões será uma função explícita do tensor taxa de deformação, \mathbf{D} ,

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{D}, \quad (2.10)$$

onde,

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]. \quad (2.11)$$

Neste caso, a equação de conservação da quantidade de movimento é conhecida como a equação de Navier-Stokes,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) \right) = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.12)$$

onde η_s representa a viscosidade do fluido. Analisando o escoamento de um fluido newtoniano incompressível em regime laminar, um sistema de 3 equações deverá ser resolvido, onde as variáveis dependentes são: pressão (p), e as duas componentes do vetor velocidade \mathbf{u} (u_r e u_z).

Já para escoamentos incompressíveis de fluidos não newtonianos, deve-se descrever o tensor das tensões, $\boldsymbol{\tau}$, por uma equação constitutiva reológica adequada. Tais equações constitutivas serão apresentadas nas seções que seguem, mas desde já pode-se dizer que $\boldsymbol{\tau}$ é um tensor simétrico e como trata-se de escoamentos axissimétricos tem-se que a matriz do tensor das tensões é dada por

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{rr} & 0 & \tau_{rz} \\ 0 & \tau_{\theta\theta} & 0 \\ \tau_{rz} & 0 & \tau_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.13)$$

Desta maneira para simular um escoamento axissimétrico de um fluido não newtoniano, um sistema com 7 equações deverá ser resolvido, onde as variáveis dependentes deste sistema são: pressão (p), as componentes do vetor velocidade \mathbf{u} (u_r e u_z), e as componentes do tensor $\boldsymbol{\tau}$ (τ_{rr} , τ_{zz} , $\tau_{\theta\theta}$, τ_{rz}).

2.4 Modelo Newtoniano Generalizado

Ao apresentar a equação de conservação da quantidade de movimento (2.9) houve a necessidade de uma equação constitutiva para o tensor das tensões, que descreva de forma correta o comportamento reológico do fluido.

Uma das formas mais simples da equação constitutiva não newtoniana é a forma correspondente ao modelo newtoniano generalizado, o qual é aplicável aos fluidos não newtonianos puramente viscosos (inelásticos).

A viscosidade de cisalhamento ou de corte desses modelos reológicos do tipo newtoniano generalizado dependem da taxa de deformação. Desta forma, a generalização da equação (2.10) será

$$\boldsymbol{\tau} = \eta(\dot{\gamma})\dot{\gamma} = \eta(\dot{\gamma}) [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T], \quad (2.14)$$

onde $\dot{\gamma} = \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T$ é chamado taxa de deformação.

O modelo de lei de potência é um dos modelos newtonianos generalizados mais utilizados e é dado na forma,

$$\eta(\dot{\gamma}) = k\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.15)$$

em que k representa o índice de consistência que determina o nível de viscosidade a uma determinada taxa de deformação e n representa o índice de lei de potência que regula o grau de fluidificação. Por exemplo, para $n = 1$ tem-se fluido newtoniano, para $n > 1$ tem-se fluido com comportamento espessante (dilatante) e para $n < 1$ o comportamento é reofluidificante (pseudoplástico).

2.5 Modelos Constitutivos para Fluidos Viscoelásticos

A modelagem do comportamento de fluidos viscoelásticos sempre foi um assunto controverso, mas as equações constitutivas mesmo quando apresentam deficiências contribuem para a compreensão de vários mecanismos de deformação e escoamento. Alguns escoamentos de fluidos viscoelásticos podem ser modelados com sucesso por determinada equação constitutiva, mas em outros escoamentos pode ser necessária uma outra equação constitutiva, ou seja, não existe uma equação constitutiva exata que seja aplicável a todos os fluidos e a todos os escoamentos.

Nesta seção serão apresentados alguns modelos constitutivos para fluidos viscoelásticos.

2.5.1 Modelo Convectivo Superior de Maxwell

O modelo de Maxwell é obtido da combinação de dois modelos, um para sólido elástico com outro para fluido newtoniano. Este modelo tem o comportamento de um fluido newtoniano para deformações lentas e o comportamento de um sólido elástico para deformações rápidas.

O modelo de Maxwell é o mais simples capaz de descrever o comportamento de um fluido que é viscoso e elástico ao mesmo tempo. Muito útil para ilustrar o conceito de viscoelasticidade. Neste modelo é utilizada a derivada convectiva superior de Maxwell, $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ definida em Bird et al. [7] por

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\tau}) - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (2.16)$$

Assim o modelo convectivo superior de Maxwell (Upper Convected Maxwell, UCM), possui a seguinte forma

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (2.17)$$

onde \mathbf{D} é dado pela equação 2.11.

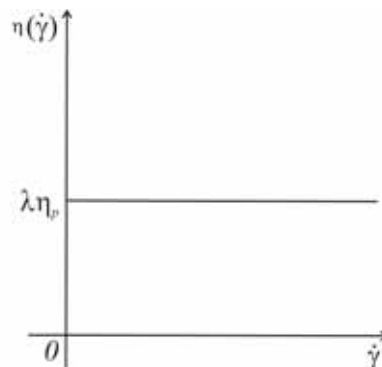


Figura 2.3: Viscosidade de Corte

Este modelo quase-linear prevê valores constantes para a viscosidade de corte (Figura 2.3) e para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais (ver Figura 2.4), e também um valor nulo para o coeficiente de segunda diferença de tensões normais. Este modelo é usado com frequência em simulações de referência de fluidos viscoelásticos.

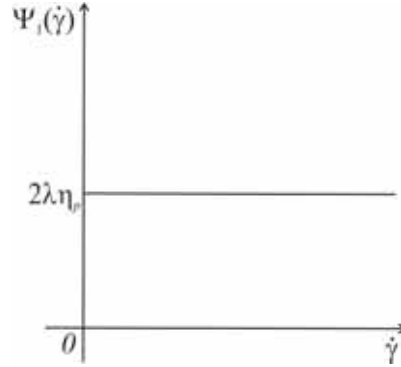


Figura 2.4: Coeficiente da Primeira Diferença de Tensões Normais

Uma das limitações deste modelo é que a viscosidade elongacional tende para infinito quando a taxa de extensão ($\dot{\epsilon}$) tende para $\frac{1}{2\lambda}$ (ver Figura 2.7).

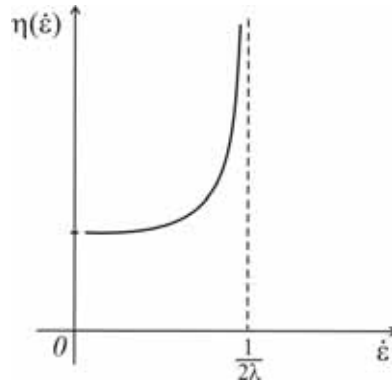


Figura 2.5: Viscosidade Elongacional

2.5.2 Modelo de Oldroyd-B

O modelo de Oldroyd-B pode ser considerado como uma extensão do modelo UCM (Upper Convected Maxwell), e é dado pela seguinte equação

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \eta_0 \left(\mathbf{D} + \lambda_r \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (2.18)$$

sendo $\eta_0 = \eta_p + \eta_s$, ou seja, a viscosidade a taxa de deformação nula é uma contribuição da viscosidade do solvente Newtoniano, η_s , e da contribuição da viscosidade polimérica do fluido, η_p . $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ e $\overset{\nabla}{\mathbf{D}}$ são respectivamente as derivadas convectivas superiores da tensão e da taxa de deformação e $\lambda_r = \frac{\lambda\eta_s}{\eta_0}$ é denominado tempo de retardamento.

A tensão total, $\boldsymbol{\tau}$, é obtida pela soma da contribuição do solvente Newtoniano, $\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$, e da contribuição viscoelástica do tensor, \mathbf{S} , assim, $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \mathbf{S}$.

Substituindo $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \mathbf{S}$, $\eta_0 = \eta_p + \eta_s$ e $\lambda_r = \frac{\lambda\eta_s}{\eta_0}$ na equação (2.18), obtêm-se

$$\mathbf{S} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \eta_p \overset{\nabla}{\mathbf{D}},$$

onde,

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{S}) - (\mathbf{S} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{S}).$$

O modelo de Oldroyd-B também prevê valores constantes para viscosidade de corte e para o coeficiente da primeira diferença de tensões normais, e um valor nulo para o coeficiente da segunda diferença de tensões normais, tais como no modelo UCM, e ainda continua a existir uma singularidade na viscosidade elongacional quando $\dot{\varepsilon} \rightarrow \frac{1}{2\lambda}$.

2.5.3 Modelo de Phan - Thien - Tanner (PTT).

Em 1977, Phan Thien e Tanner [33] propuzeram um modelo que inclui o traço do tensor das tensões.

Considera-se

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_s + \mathbf{S}, \quad (2.19)$$

onde

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\eta_s \mathbf{D}, \quad (2.20)$$

e

$$f(tr(\mathbf{S})) \mathbf{S} + \lambda \overset{\square}{\mathbf{S}} = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (2.21)$$

onde $f(tr(\mathbf{S}))$ denomina-se uma função do traço de \mathbf{S} , ($tr(\mathbf{S}) = S_{rr} + S_{\theta\theta} + S_{zz}$) e $\overset{\square}{\mathbf{S}}$ a derivada convectiva do modelo que será definida no capítulo a seguir.

Originalmente o modelo PTT (Phan-Thien-Tanner, 1977), assume-se uma função linear,

$$f(tr(\mathbf{S})) = 1 + \frac{\lambda\varepsilon}{\eta_p} tr(\mathbf{S}). \quad (2.22)$$

Um ano depois, Phan-Thien [32] propôs a utilização de uma função exponencial para a equação (2.22) dada por

$$f(tr(\mathbf{S})) = \exp\left(\frac{\lambda\varepsilon}{\eta_p} tr(\mathbf{S})\right). \quad (2.23)$$

O modelo PTT é caracterizado por 5 parâmetros que são a viscosidade do solvente, η_s , a viscosidade polimérica à taxa de deformação nula, η_p , o tempo de relaxação, λ , e os parâmetros adimensionais ε e ξ , que definem o caráter não linear do modelo. Sendo que o parâmetro ε elimina a singularidade na viscosidade elongacional (presente nos modelos UCM e Oldroyd-B), limitando assim o seu máximo, (ver gráfico superior da Figura 2.7). O parâmetro ξ afeta o comportamento cisalhante do fluido, (ver gráfico inferior da Figura 2.7). Caso o parâmetro ξ seja nulo, ou seja, $\xi = 0$ o modelo é conhecido como modelo PTT simplificado (SPTT), neste caso, tem-se que o coeficiente da segunda diferença de tensões normais é nulo. A gama admissível para este parâmetro é $0 \leq \xi \leq 2$.

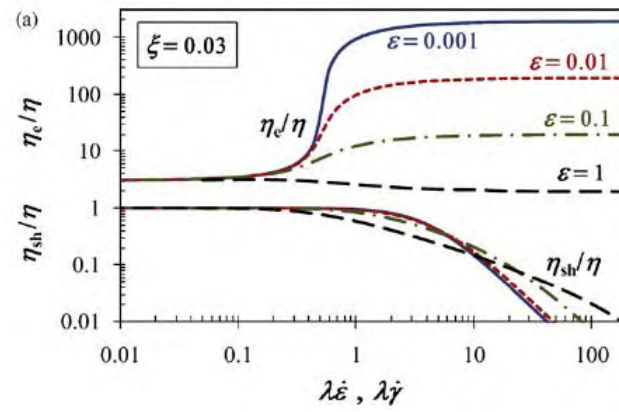


Figura 2.6: Viscosidade de Corte e Viscosidade Elongacional variando ϵ . (Fonte:Tomé et al. [41])

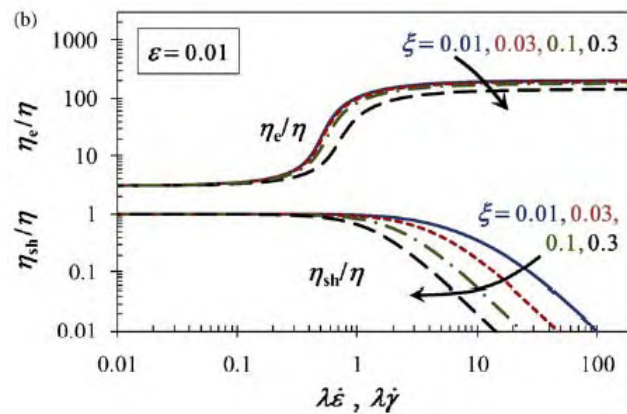


Figura 2.7: Viscosidade de Corte e Viscosidade Elongacional variando ξ . (Fonte:Tomé et al. [41])

O modelo PTT é o modelo utilizado neste trabalho e será melhor descrito nos próximos capítulos. Este modelo reduz-se ao modelo de Oldroyd-B quando $\epsilon = \xi = 0$ e ao modelo UCM se $\eta_s = \epsilon = \xi = 0$.

Formulação Matemática

Neste capítulo serão apresentadas as equações governantes, as condições de contorno para o campo de velocidade bem como a condição de contorno para a pressão na superfície livre e o tratamento do tensor das tensões em fronteiras fixas, de simetria e na superfície livre.

3.1 Equações Governantes

As equações básicas governantes, na forma conservativa, para escoamentos incompressíveis isotérmicos de fluidos viscoelásticos utilizando o modelo PTT, são as Equações de Conservação de Quantidade de Movimento,

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \quad (3.1)$$

e a Equação da Continuidade,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.2)$$

onde t é o tempo, \mathbf{u} é o vetor velocidade, p é a pressão, \mathbf{g} é o campo gravitacional, ρ é a densidade, λ é o tempo de relaxação do fluido e $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor das tensões. Como visto no capítulo anterior, o tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ é dado por

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{D} + \mathbf{S}, \quad (3.3)$$

sendo que $2\eta_s \mathbf{D}$ e \mathbf{S} representam a contribuição Newtoniana e a contribuição polimérica do tensor, respectivamente. Tem-se que $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ é o tensor taxa de deformação e η_s representa a viscosidade do solvente Newtoniano.

A equação constitutiva do modelo PTT é dada por

$$f(\text{tr}(\mathbf{S})) \mathbf{S} + \lambda \overset{\square}{\mathbf{S}} = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (3.4)$$

onde η_p representa a viscosidade polimérica. A função f , depende do traço de \mathbf{S} , é dada

por

$$f(\text{tr}(\mathbf{S})) = \begin{cases} 1 + \frac{\lambda\varepsilon}{\eta_p} \text{tr}(\mathbf{S}), & \text{PTT na forma linear,} \\ \exp\left(\frac{\lambda\varepsilon}{\eta_p} \text{tr}(\mathbf{S})\right), & \text{PTT na forma exponencial.} \end{cases} \quad (3.5)$$

O símbolo $\overset{\square}{\cdot}$ representa a seguinte derivada convectiva:

$$\overset{\square}{\mathbf{S}} = \frac{D\mathbf{S}}{Dt} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{L}^T \cdot \mathbf{S}, \quad (3.6)$$

onde o operador $\mathbf{L} = \nabla \mathbf{u} - \xi \mathbf{D}$ é chamado “gradiente efetivo de velocidade”, ε e ξ são parâmetros positivos que descrevem o modelo PTT. A decomposição (3.3) insere um termo difusivo $\nabla^2 \mathbf{u}$ na equação (3.1) dando maior estabilidade ao sistema.

Substituindo o tensor taxa de deformação \mathbf{D} e a equação (3.3) na equação (3.1), obtemos

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}^T) \right) = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \rho \mathbf{g}, \quad (3.7)$$

Neste trabalho, considera-se escoamentos axissimétricos, onde não há variação em relação à direção θ $\left(\frac{\partial}{\partial \theta} = 0\right)$. Foi utilizada a seguinte relação entre coordenadas cartesianas e cilíndricas:

$$\begin{cases} x = r \cos(\theta); \\ y = r \sin(\theta); \\ z = z. \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2}; \\ \theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right); \\ z = z. \end{cases} \quad (3.8)$$

Desta forma, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{-\sin(\theta)}{r}\right) \frac{\partial}{\partial \theta} + 0 \frac{\partial}{\partial z}; \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{\cos(\theta)}{r}\right) \frac{\partial}{\partial \theta} + 0 \frac{\partial}{\partial z}; \\ \frac{\partial}{\partial z} &= 0 \frac{\partial}{\partial r} + 0 \frac{\partial}{\partial \theta} + 1 \frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Com estas relações, as derivadas de quaisquer funções escalares (por exemplo, as componentes do vetor velocidade e do tensor das tensões) em relação a x , y e z podem ser escritas em termos das derivadas com respeito a r , θ e z .

Tendo visto a inter-relação das coordenadas e das derivadas dos dois sistemas de coordenadas, vamos agora ver a relação entre os vetores unitários. Considere e_1 , e_2 e e_3 os vetores unitários em coordenadas cartesianas e e_r , e_θ e e_z os vetores unitários em coordenadas cilíndricas. Então, escreve-se,

$$\begin{aligned} e_r &= \cos(\theta)e_1 + \text{sen}(\theta)e_2 + 0e_3; \\ e_\theta &= -\text{sen}(\theta)e_1 + \cos(\theta)e_2 + 0e_3; \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$e_z = 0e_1 + 0e_2 + 1e_3.$$

e

$$\begin{aligned} e_1 &= \cos(\theta)e_r + (-\text{sen}(\theta)e_\theta) + 0e_z; \\ e_2 &= \text{sen}(\theta)e_r + \cos(\theta)e_\theta + 0e_z; \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$e_3 = 0e_r + 0e_\theta + 1e_z.$$

O operador ∇ em coordenadas cartesianas é dado por

$$\nabla = e_1 \frac{\partial}{\partial x} + e_2 \frac{\partial}{\partial y} + e_3 \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.12)$$

Substituindo os valores das expressões (3.11) e das expressões (3.9) na equação (3.12), obtém-se o operador ∇ em coordenadas cilíndricas, dado por

$$\nabla = e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.13)$$

Desta forma, desenvolvendo os termos $\nabla \cdot \mathbf{u}$, $\nabla^2 \mathbf{u}$, $\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T)$ e $\nabla \cdot \mathbf{S}$ em coordenadas cilíndricas (ver em [8]), tendo em vista que $\mathbf{u} = e_r u + e_\theta v_\theta + e_z v$ e lembrando que não existe variação da velocidade na direção θ , ou seja, $v_\theta = 0$, obtém-se

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= \left(e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (e_r u + e_\theta v_\theta + e_z v) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial r u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2} \right) \mathbf{e}_r + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \mathbf{e}_z. \quad (3.15)$$

Como

$$\mathbf{u}\mathbf{u}^T = \begin{bmatrix} u^2 & 0 & uv \\ 0 & 0 & 0 \\ uv & 0 & v^2 \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

tem-se

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r u^2}{\partial r} + \frac{\partial uv}{\partial z} \right) \mathbf{e}_r + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r u v}{\partial r} + \frac{\partial v^2}{\partial z} \right) \mathbf{e}_z. \quad (3.17)$$

Por fim, tem-se que o operador $\nabla \cdot \mathbf{S}$ é dado por

$$\nabla \cdot \mathbf{S} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rr}) + \frac{\partial S^{rz}}{\partial z} - \frac{S^{\theta\theta}}{r} \right) \mathbf{e}_r + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rz}) + \frac{\partial S^{zz}}{\partial z} \right) \mathbf{e}_z. \quad (3.18)$$

Assim,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ru^2}{\partial r} + \frac{\partial uv}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ruv}{\partial r} + \frac{\partial v^2}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

Substituindo as equações (3.15), (3.18) e (3.19) na equação (3.7) obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ru^2}{\partial r} + \frac{\partial uv}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\eta_s}{\rho} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2} \right) \\ &+ \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rr}) + \frac{\partial S^{rz}}{\partial z} - \frac{S^{\theta\theta}}{r} \right) + g_r \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ruv}{\partial r} + \frac{\partial v^2}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\eta_s}{\rho} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{1}{\rho} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rz}) + \frac{\partial S^{zz}}{\partial z} \right) + g_z \end{aligned} \quad (3.21)$$

com $\mathbf{g} = g_r e_r + g_z e_z$, ou seja, g_r e g_z são as componentes gravitacionais na direção r e z , respectivamente.

A equação da continuidade (3.2) em coordenadas cilíndricas é escrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0. \quad (3.22)$$

A partir da equação (3.4), obtém-se as componentes do tensor das tensões em coordenadas cilíndricas dadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{rr}}{\partial t} &= \frac{2\eta_p}{\lambda} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{1}{\lambda} f(\text{tr}(\mathbf{S})) S^{rr} - \frac{1}{r} \frac{\partial (ru S^{rr})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{rr}}{\partial z} \\ &+ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial r} S^{rr} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz} \right) - \xi \left(2 \frac{\partial u}{\partial r} S^{rr} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz} + \frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} \right), \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{zz}}{\partial t} &= \frac{2\eta_p}{\lambda} \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{1}{\lambda} f(\text{tr}(\mathbf{S})) S^{zz} - \frac{1}{r} \frac{\partial (ru S^{zz})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{zz}}{\partial z} \\ &+ 2 \left(\frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} + \frac{\partial v}{\partial z} S^{zz} \right) - \xi \left(\frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} + 2 \frac{\partial v}{\partial z} S^{zz} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz} \right), \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{rz}}{\partial t} &= \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{1}{\lambda} f(\text{tr}(\mathbf{S})) S^{rz} - \frac{1}{r} \frac{\partial (ru S^{rz})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{rz}}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} S^{rr} \\ &+ \frac{\partial u}{\partial z} S^{zz} + (1 - \xi) \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) S^{rz} - \frac{\xi}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) (S^{rr} + S^{zz}), \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial S^{\theta\theta}}{\partial t} = \frac{2\eta_p}{\lambda} \frac{u}{r} - \frac{1}{\lambda} f(\text{tr}(\mathbf{S})) S^{\theta\theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial (ru S^{\theta\theta})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{\theta\theta}}{\partial z} + 2 \frac{u}{r} S^{\theta\theta} - 2 \xi \frac{u}{r} S^{\theta\theta}. \quad (3.26)$$

3.2 Adimensionalização

Em Dinâmica dos Fluidos Computacional, os números adimensionais têm a significativa importância de mostrar os efeitos físicos contidos nas equações, formular o modelo independente do sistema de coordenadas e principalmente fornecer condições para se obter situações geometricamente similares. Para tanto, considera-se algumas mudanças de variáveis, surgindo assim algumas classes adimensionais como o número de Reynolds, de Froude e de Weissenberg. Define-se,

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

$$Re = \frac{\rho UL}{\eta_0},$$

onde $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$, L e U são as unidades escalares de viscosidade a taxa deformação nula, comprimento e velocidade, respectivamente.

- **Número de Froude (Fr):** Razão entre as forças inerciais e as forças gravitacionais, ou seja,

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}}.$$

- **Número de Weissenberg (Wi):** Relaciona o tempo de relaxação λ e o tempo $\frac{L}{U}$ que é característico para o problema e é dado por,

$$Wi = \frac{\lambda U}{L}.$$

Para adimensionalizar as equações definimos as seguintes variáveis adimensionais como segue

$$u = U\bar{u}, \quad v = U\bar{v}, \quad r = L\bar{r}, \quad z = L\bar{z}, \quad t = \frac{L}{U}\bar{t}, \quad p = \rho U^2 \bar{p}, \quad \mathbf{S} = \rho U^2 \bar{\mathbf{S}}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}\bar{g},$$

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

Substituindo as variáveis adimensionais nas equações (3.20) - (3.26), obtemos as equações na forma adimensional (por simplicidade foram omitidas as barras).

$$\frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0, \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ru^2}{\partial r} + \frac{\partial uv}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\beta}{Re} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rr}) + \frac{\partial S^{rz}}{\partial z} - \frac{S^{\theta\theta}}{r} + \frac{1}{Fr^2} g_r, \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial ruv}{\partial r} + \frac{\partial v^2}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\beta}{Re} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rz}) + \frac{\partial S^{zz}}{\partial z} + \frac{1}{Fr^2} g_z, \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{rr}}{\partial t} &= \frac{2(1-\beta)}{ReWi} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{rr} - \frac{1}{r} \frac{\partial(ruS^{rr})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{rr}}{\partial z} \\ &+ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial r} S^{rr} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz} \right) - \xi \left(2 \frac{\partial u}{\partial r} S^{rr} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz} + \frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} \right), \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{zz}}{\partial t} &= \frac{2(1-\beta)}{ReWi} \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{zz} - \frac{1}{r} \frac{\partial(ruS^{zz})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{zz}}{\partial z} \\ &+ 2 \left(\frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} + \frac{\partial v}{\partial z} S^{zz} \right) - \xi \left(\frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} + 2 \frac{\partial v}{\partial z} S^{zz} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz} \right), \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{rz}}{\partial t} &= \frac{(1-\beta)}{ReWi} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{rz} - \frac{1}{r} \frac{\partial(ruS^{rz})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{rz}}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} S^{rr} \\ &+ \frac{\partial u}{\partial z} S^{zz} + (1-\xi) \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) S^{rz} - \frac{\xi}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) (S^{rr} + S^{zz}), \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial S^{\theta\theta}}{\partial t} = \frac{2(1-\beta)u}{ReWi r} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{\theta\theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial(ruS^{\theta\theta})}{\partial r} - \frac{\partial v S^{\theta\theta}}{\partial z} + 2 \frac{u}{r} S^{\theta\theta} - 2\xi \frac{u}{r} S^{\theta\theta}, \quad (3.33)$$

onde Re , Wi e Fr são os números de Reynolds, Weissenberg e Froude, respectivamente, e β , $0 < \beta < 1$, controla a quantidade de solvente Newtoniano presente no fluido viscoelástico. Quando $\beta \rightarrow 1$, $\eta_p \rightarrow 0$ e quando $\beta \rightarrow 0$ significa que $\eta_s \rightarrow 0$.

3.3 Condições de Contorno

Para resolver as equações (3.27)-(3.33) são impostas condições iniciais e de contorno fisicamente adequadas. Como condições iniciais do escoamento são especificadas a distribuição espacial das variáveis dependentes no tempo $t = 0$, e para as componentes de \mathbf{u} e \mathbf{S} serão adotadas como sendo nulas, ou seja,

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ e } \mathbf{S} = \mathbf{0}.$$

As condições de contorno em entrada de fluido *inflows* e saída de fluido *outflows* para a velocidade são dadas por,

- *inflows*: $u_n = U$ e $u_m = 0$,
- *outflows*: $\frac{\partial u_n}{\partial n} = 0$ e $\frac{\partial u_m}{\partial n} = 0$,

onde n e m denotam as direções normal e tangencial aos *inflows* e *outflows*, respectivamente.

Será adotada a condição *no-slip* (não-escorregamento) em contornos rígidos,

$$u = u_c,$$

onde u_c é a velocidade do contorno rígido. Neste trabalho, o contorno rígido está estacionário.

No eixo de simetria será adotada a condição *free-slip* (escorregamento livre), esta condição garante que não ocorre perda friccional na região adjacente à fronteira, ou seja, a velocidade atinge seu valor máximo, e que o fluido não transpõe a fronteira de simetria.

3.4 Cálculo do Tensor das Tensões em Contornos Rígidos

As componentes S^{rr} , S^{zz} , S^{rz} e $S^{\theta\theta}$ serão calculadas no contorno rígido por meio das equações (3.30) - (3.33).

3.4.1 Contornos Rígidos Paralelos ao Eixo r

Aplicando as condições de não escorregamento nestes contornos para as componentes da velocidade, temos que

$$u = 0 \text{ e } v = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial r} = 0 \text{ e } \frac{\partial v}{\partial r} = 0.$$

Assim, pela equação da continuidade obtemos,

$$\frac{\partial v}{\partial z} = 0.$$

Fazendo tais simplificações, as equações (3.30) - (3.33) reduzem-se às seguintes equações:

$$\frac{\partial S^{rr}}{\partial t} = -\frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{rr} + (2 - \xi) \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz}, \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial S^{zz}}{\partial t} = -\frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{zz} - \xi \frac{\partial u}{\partial z} S^{rz}, \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial S^{rz}}{\partial t} = \frac{(1 - \beta)}{ReWi} \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{rz} + \frac{\partial u}{\partial z} S^{zz} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial u}{\partial z} (S^{rr} + S^{zz}), \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial S^{\theta\theta}}{\partial t} = -\frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{\theta\theta}. \quad (3.37)$$

3.4.2 Contornos Rígidos Paralelos ao Eixo z

Da mesma forma que na condição de contorno paralelo ao eixo r , aplicando as condições de não escorregamento sobre o contorno vertical, temos que

$$u = 0 \text{ e } v = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial z} = 0 \text{ e } \frac{\partial v}{\partial z} = 0.$$

Assim, pela equação da continuidade, obtemos

$$\frac{\partial u}{\partial r} = 0.$$

Simplificando as equações (3.30) - (3.33), obtemos

$$\frac{\partial S^{rr}}{\partial t} = -\frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{rr} - \xi \frac{\partial v}{\partial r} S^{rz} \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial S^{zz}}{\partial t} = -\frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{zz} + (2 - \xi) \frac{\partial v}{\partial r} S^{rz}, \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial S^{rz}}{\partial t} = \frac{(1 - \beta)}{ReWi} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{rz} + \frac{\partial v}{\partial r} S^{rr} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial v}{\partial r} (S^{rr} + S^{zz}), \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial S^{\theta\theta}}{\partial t} = -\frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S^{\theta\theta}. \quad (3.41)$$

3.4.3 Cálculo do Tensor das Tensões em *Inflows*, *Outflows* e no Eixo de Simetria

No injetor, ou seja, na entrada do fluido, será usada uma estratégia empregada por Crochet e Walters [15], Mompean e Deville [24] em que as componentes do tensor são todas nulas, ou seja,

$$S^{rr} = 0, S^{zz} = 0, S^{\theta\theta} = 0 \text{ e } S^{rz} = 0.$$

No ejetor, ou seja, na saída do fluido, e no eixo de simetria consideram-se que também não há variações das componentes do tensor das tensões na direção normal do contorno. Desta forma impõem-se condição homogênea de Neumann, dadas por

$$\frac{\partial S^{rr}}{\partial n} = \frac{\partial S^{zz}}{\partial n} = \frac{\partial S^{\theta\theta}}{\partial n} = \frac{\partial S^{rz}}{\partial n} = 0,$$

onde n representa a direção normal ao ejetor e ao eixo de simetria.

3.5 Condições de Contorno na Superfície Livre

Na superfície livre, considera-se o escoamento de um fluido em uma atmosfera passiva e, se despreza-se as tensões superficiais. Assim as condições de contorno na superfície livre são [5]

$$\mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^T) = 0; \quad (3.42)$$

$$\mathbf{m} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^T) = 0, \quad (3.43)$$

onde \mathbf{n} é o vetor unitário normal exterior a superfície livre, \mathbf{m} o vetor tangencial a superfície livre e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensão total dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (3.44)$$

onde

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\beta}{Re} \mathbf{D} + \mathbf{S}. \quad (3.45)$$

Tomando $\mathbf{n} = (n_r, n_z)$, $\mathbf{m} = (n_z, -n_r)$ e substituindo as equações (3.44) e (3.45), as equações (3.42) e (3.43) se reduzem respectivamente a

$$-p + \frac{2\beta}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial r} n_r^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) n_r n_z + \frac{\partial v}{\partial z} n_z^2 \right) + S^{rr} n_r^2 + 2S^{zr} n_r n_z + S^{zz} n_z^2 = 0, \quad (3.46)$$

$$\frac{\beta}{Re} \left(2 \left(\frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial r} \right) n_r n_z + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) (n_r^2 - n_z^2) \right) + (S^{zz} - S^{rr}) n_r n_z + S^{rz} (n_r^2 - n_z^2) = 0. \quad (3.47)$$

As equações (3.46) e (3.47) constituem as condições de contorno para velocidade e pressão impostas na superfície livre do fluido.

3.6 A metodologia GENSMAC-AXI

Nesta seção será apresentado o GENSMAC como um método de projeção e em seguida serão descritas as principais etapas do algoritmo computacional.

O método GENSMAC, desenvolvido por Tomé e Mckee [44], é uma extensão da metodologia SMAC [3] para domínios arbitrários. No GENSMAC é utilizada uma malha fixa deslocada. Em adicional, no GENSMAC as partículas marcadoras são utilizadas apenas para representar a superfície do fluido.

Para resolver as equações de Navier-Stokes (3.1)-(3.2) utiliza-se a estratégia do desacoplamento das componentes da velocidade e pressão das equações (3.1) e (3.2). Os métodos que utilizam tal estratégia são conhecidos como “métodos de projeção”. A ideia dos métodos de projeção é baseada no teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge descrito abaixo.

Teorema 3.1 (Decomposição de Helmholtz-Hodge). *Seja Ω uma região com fronteira suave $\partial\Omega$ e $\tilde{\mathbf{u}}$ um campo vetorial definido em Ω . Nestes termos, $\tilde{\mathbf{u}}$ pode ser decomposto na forma*

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \nabla\psi \quad (3.48)$$

de forma única, sendo ψ um campo escalar também definido em Ω . O campo vetorial \mathbf{u} é solenoidal, isto é,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.49)$$

e paralelo a $\partial\Omega$, ou seja,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (3.50)$$

sendo que \mathbf{n} é o vetor normal exterior a $\partial\Omega$.

No GENSMAC, utiliza-se a equação (3.1) para calcular um campo de velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}$.

Primeiramente, considera-se a discretização por Euler Explícito no tempo da equação da quantidade de movimento (3.1) para \mathbf{u} ,

$$\frac{\mathbf{u}^{(n+1)}}{dt} = \frac{\mathbf{u}^{(n)}}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T)^{(n)} - \nabla p^{(n+1)} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{(n)} + \frac{1}{Fr^2} g, \quad (3.51)$$

Reescrevendo a equação (3.51) para o campo de velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}$, obtém-se

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}}{dt} = \frac{\mathbf{u}^{(n)}}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T)^{(n)} - \nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{(n)} + \frac{1}{Fr^2} g, \quad (3.52)$$

onde $\tilde{\mathbf{u}}$ é não solenoidal, ou seja, não satisfaz a equação da continuidade (3.2), pois $p \neq \tilde{p}$. Assim, pelo Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge, pode-se decompor o campo de velocidade como

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \tilde{\mathbf{u}} - \nabla\psi. \quad (3.53)$$

em seguida aplica-se o operador divergente na equação (3.53) e impondo a conservação de massa para $\mathbf{u}^{(n+1)}$, obtém-se uma equação de Poisson para o campo de pressão intermediário

$$\nabla^2\psi = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}, \quad (3.54)$$

de forma que a sua solução determina a atualização dos campos de velocidade e pressão.

3.6.1 Algoritmo Computacional

Para calcularmos o vetor velocidade, o campo de pressão e o tensor das tensões no tempo atual $t^{n+1} = t^n + dt$, suponha que em um dado tempo t^n , o vetor velocidade e o tensor das tensões, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t^n)$ e $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t^n)$, sejam conhecidos, onde $\mathbf{r} = (r, z)$. São conhecidos os valores do vetor velocidade \mathbf{u} e do tensor das tensões \mathbf{S} em fronteiras fixas, de simetria e na superfície livre. Assim, para calcular \mathbf{u} , \mathbf{S} e p no tempo t^{n+1} , procede-se da seguinte forma:

1. Considera-se $\tilde{p}(r, z, t^n)$ um campo de pressão arbitrário que satisfaça as condições de contorno para a pressão na superfície livre. Neste trabalho, \tilde{p} será considerado nulo. Este campo de pressão é calculado através da equação

$$-\tilde{p} + \frac{2\beta}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial r} n_r^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) n_r n_z + \frac{\partial v}{\partial z} n_z^2 \right) + S^{rr} n_r^2 + 2S^{zr} n_r n_z + S^{zz} n_z^2 = 0 \quad (3.55)$$

2. Calcula-se $\tilde{\mathbf{u}}(r, z, t^{n+1})$, vetor velocidade intermediário por

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) - \nabla\tilde{p} + \frac{\beta}{Re} \nabla^2\mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{1}{Fr^2}\mathbf{g}, \quad (3.56)$$

3. Resolve-se a equação de Poisson

$$\nabla^2\psi(r, z, t^{n+1}) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(r, z, t^{n+1}). \quad (3.57)$$

Considerando as condições de fronteira em contornos rígidos, *inflows* e eixo de simetria como sendo

$$\frac{\partial\psi(r, z, t^{n+1})}{\partial n} = 0,$$

onde n é a direção normal aos contornos, e na superfície livre e *outflows* como sendo

$$\psi = 0.$$

4. Calcula-se o vetor velocidade final dado por

$$\mathbf{u}(r, z, t^{n+1}) = \tilde{\mathbf{u}}(r, z, t^{n+1}) - \nabla\psi(r, z, t^{n+1}). \quad (3.58)$$

5. Calcula-se a pressão. Substitui-se a equação (3.53) na equação (3.52), assim obtêm-se

$$\frac{\mathbf{u}^{(n+1)} + \nabla\psi}{dt} = \frac{\mathbf{u}^{(n)}}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T)^{(n)} - \nabla\tilde{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{(n)} + \frac{1}{Fr^2}g, \quad (3.59)$$

e comparando-se as equações (3.59) e (3.51) obtêm-se

$$p(r, z, t^{n+1}) = \tilde{p}(r, z, t^n) + \frac{\psi(r, z, t^n)}{dt}. \quad (3.60)$$

6. Atualiza-se as componentes do tensor das tensões \mathbf{S} nos contornos rígidos por meio das equações derivadas na seção 3.4, no eixo de simetria, no *Inflow* e no *Outflow* por meio das equações derivadas na seção 3.4.3.
7. Calcula-se as componentes do tensor das tensões $S^{rr}(r, z, t^{n+1})$, $S^{zz}(r, z, t^{n+1})$, $S^{\theta\theta}(r, z, t^{n+1})$ e $S^{rz}(r, z, t^{n+1})$ por meio das equações (3.30)-(3.33).
8. Atualiza-se as posições das partículas marcadoras que representam o fluido. Estas partículas são utilizadas para representar a superfície livre do fluido cujas coordenadas são armazenadas e atualizadas no fim de cada ciclo de cálculo integrando as equações, pelo método de Euler Explícito,

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{u},$$

obtendo assim a nova posição para cada partícula marcadora.

Aproximação por Diferenças Finitas

As equações governantes serão discretizadas usando o método de diferenças finitas sobre uma malha deslocada *staggered grid*, com espaçamento dr e dz nas direções r e z , respectivamente. Assim, de acordo com a Figura 4.1, as componentes da velocidade u e v são aproximadas nos pontos $\left(i + \frac{1}{2}, j\right)$ e $\left(i, j + \frac{1}{2}\right)$, respectivamente. Enquanto no centro da célula (i, j) são avaliadas as componentes S^{rr} , S^{zz} , $S^{\theta\theta}$, S^{rz} do tensor das tensões \mathbf{S} , a pressão p e a função potencial ψ .

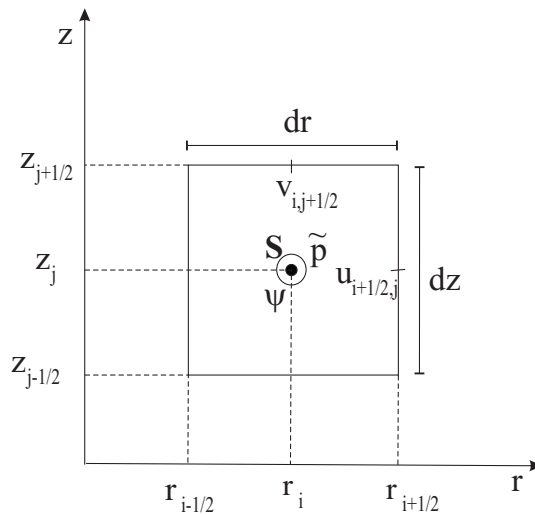


Figura 4.1: Representação da malha deslocada

4.1 Classificação das Células

Como o fluido está em constante movimento, é necessário fazer um posicionamento da superfície livre no domínio, bem como dos demais tipos de fronteira, ou seja, fazer uma classificação das células para saber quais contêm ou não fluido, se estão no contorno rígido ou são células da superfície livre. Para isso, adota-se a seguinte classificação:

- Células Vazias (**E**: *Empty*): São aquelas que não possuem fluido;
- Células Cheias (**F**: *Full*): São aquelas cheias de fluido e que não possuem nenhuma face em contato com células vazias;
- Células de Superfícies (**S**: *Surface*): São aquelas que contêm fluido e que possuem pelo menos uma face em contato com célula vazia;
- Células de Contorno (**B**: *Boundary*): São aquelas que definem um contorno rígido de maneira que as condições de contorno possam ser impostas;
- Células do Injetor (**I**: *Inflow*): São aquelas que definem a entrada do fluido;
- Células do Ejetor (**O**: *Outflow*): São aquelas que definem a saída de fluido.

A Figura 4.2 representa os tipos de células do domínio computacional.

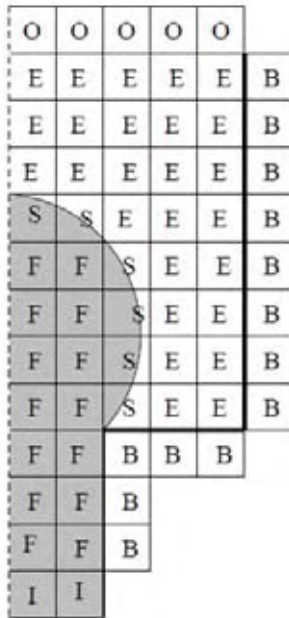


Figura 4.2: Tipos de células do domínio computacional

4.2 Discretizações

4.2.1 Equações de Conservação da Quantidade de Movimento

Para calcular as componentes do vetor velocidade, \tilde{u} e \tilde{v} das equações apresentadas no Passo 2 na seção 3.6.1, é necessário, inicialmente, determinar as aproximações que serão utilizadas em cada uma das derivadas. As derivadas temporais serão aproximadas pelo método de Euler Explícito, o gradiente de pressão será aproximado por diferenças centrais, para os termos convectivos utiliza-se o método *upwind* de alta ordem CUBISTA e os termos envolvendo o divergente do tensor das tensões da equação (3.56) são aproximados por diferenças centrais. Aqui serão apresentadas apenas as discretizações das derivadas de uma das componentes do vetor velocidade \mathbf{u} , tendo em vista que para as derivadas da outra componente são análogas. Assim,

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^n}{dt}, \quad (4.1)$$

$$\left. \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\tilde{p}_{i+1,j} - \tilde{p}_{i,j}}{dr}, \quad (4.2)$$

$$\left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \frac{r_{i+1} u_{i+\frac{3}{2},j} - 2r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} + r_i u_{i-\frac{1}{2},j}}{dr^2}, \quad (4.3)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{dz^2}, \quad (4.4)$$

$$\left. \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S^{rr}) \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \frac{r_{i+1} S_{i+1,j}^{rr} - r_i S_{i,j}^{rr}}{dr}, \quad (4.5)$$

$$\left. \frac{\partial S^{rz}}{\partial z} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz} - S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{rz}}{dz}, \quad (4.6)$$

$$\left. \frac{S^{\theta\theta}}{r} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{S_{i,j}^{\theta\theta} + S_{i,j+1}^{\theta\theta}}{2r_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (4.7)$$

onde os termos $S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz}$ e $S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{rz}$ são aproximados por uma média aritmética dos quatro valores mais próximos, isto é,

$$S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz} = \frac{S_{i,j}^{rz} + S_{i+1,j}^{rz} + S_{i,j+1}^{rz} + S_{i+1,j+1}^{rz}}{4}, \quad (4.8)$$

$$S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{rz} = \frac{S_{i,j}^{rz} + S_{i+1,j}^{rz} + S_{i,j-1}^{rz} + S_{i+1,j-1}^{rz}}{4}. \quad (4.9)$$

Caso 1: Quando, por exemplo, a célula (i, j) tem uma célula de contorno na vizinhança pela face superior ou pela face inferior, a derivada $\left. \frac{\partial S^{rz}}{\partial z} \right|_{i+\frac{1}{2},j}$ será aproximada por diferenças regressivas ou progressivas. (ver Figura 4.3)

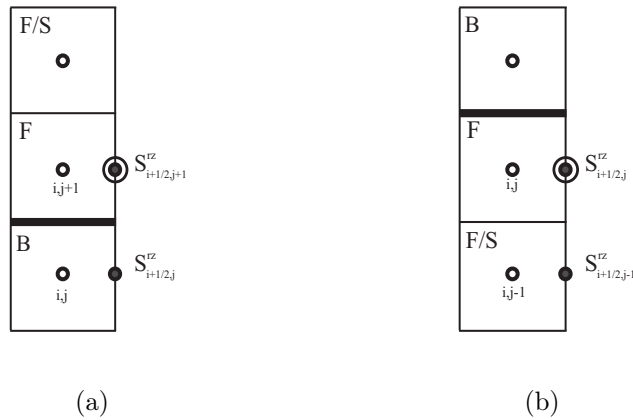


Figura 4.3: Aproximação de $\frac{\partial S^{rz}}{\partial z}$ em pontos adjacentes ao contorno rígido.

A célula (i, j) tem a face superior em contato com uma célula de contorno (B), como na Figura 4.3 (b).

$$\frac{\partial S^{rz}}{\partial z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} - S_{i+\frac{1}{2},j-1}^{rz}}{dz}. \quad (4.10)$$

Caso 2: Quando tem-se as configurações da célula como nas Figuras 4.4, utiliza-se uma expansão em série de Taylor para S^{rz} no centro da célula (i, j) para obter uma aproximação de 2ª ordem para esta derivada. (ver Figura 4.4)

A célula (i, j) tem a face superior em contato com uma célula de contorno (B), como na Figura 4.4. Utilizando série de Taylor, obtém-se a seguinte aproximação de segunda ordem para $\frac{\partial S^{rz}}{\partial z}$,

$$\frac{\partial S^{rz}}{\partial z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{3S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} - 4S_{i+\frac{1}{2},j-1}^{rz} + S_{i+\frac{1}{2},j-2}^{rz}}{2dz}, \quad (4.11)$$

onde os termos da equação (4.11) são aproximados por médias aritméticas, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} S_{i+\frac{1}{2},j-2}^{rz} &= \frac{S_{i,j-2}^{rz} + S_{i+1,j-2}^{rz}}{2} \\ S_{i+\frac{1}{2},j-1}^{rz} &= \frac{S_{i,j-1}^{rz} + S_{i+1,j-1}^{rz}}{2} \\ S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} &= \frac{S_{i,j}^{rz} + S_{i+1,j}^{rz}}{2}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

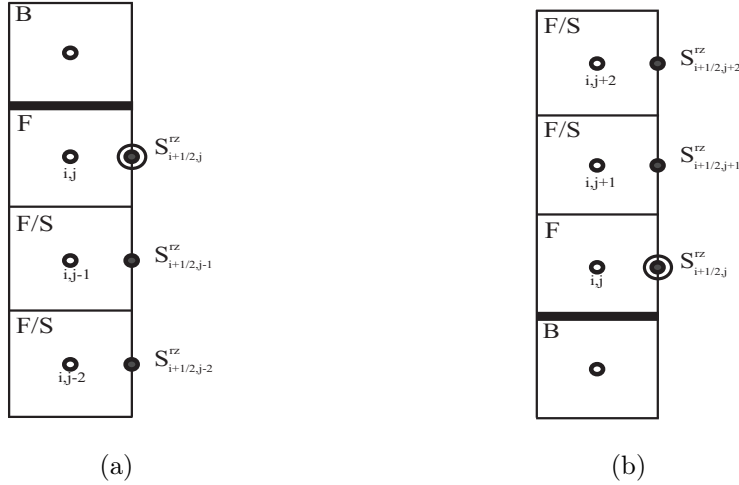


Figura 4.4: Aproximação de $\frac{\partial S^{rz}}{\partial z}$ em pontos adjacentes ao contorno rígido.

Desta forma, a equação (3.56) na forma discreta, é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^n + dtF(u, v); \\ \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^n + dtG(u, v); \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde as funções $F(u, v)$ e $G(u, v)$ são dadas por

$$\begin{aligned}
F(u, v) &= -\frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \text{conv}(ru^2) - \text{conv}(vu) - \frac{\tilde{p}_{i+1,j} - \tilde{p}_{i,j}}{dr} \\
&+ \frac{\beta}{Re} \left[\frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \frac{r_i u_{i-\frac{1}{2},j} - (r_i + r_{i+1}) u_{i+\frac{1}{2},j} + r_{i+1} u_{i+\frac{3}{2},j}}{dr^2} \right. \\
&+ \left. \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1}}{dz^2} - \frac{u_{i+\frac{1}{2},j}}{r_{i+\frac{1}{2}}^2} \right] \\
&+ \left(\frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \frac{r_{i+1} S_{i+1,j}^{rr} - r_i S_{i,j}^{rr}}{dr} + \frac{S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz} - S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{rz}}{dz} + \frac{S_{i+1,j}^{\theta\theta} + S_{i,j}^{\theta\theta}}{2r_{i+\frac{1}{2}}} \right) \\
&+ \frac{1}{Fr^2} gr,
\end{aligned} \tag{4.14}$$

$$\begin{aligned}
G(u, v) &= -\frac{1}{r_i} \text{conv}(ruv) - \text{conv}(v^2) - \frac{\tilde{p}_{i,j+1} - \tilde{p}_{i,j}}{dz} \\
&+ \frac{\beta}{Re} \left[\frac{1}{r_i} \frac{r_{i-\frac{1}{2}} v_{i-1,j+\frac{1}{2}} - (r_{i+\frac{1}{2}} + r_{i-\frac{1}{2}}) v_{i,j+\frac{1}{2}} + r_{i+\frac{1}{2}} v_{i+1,j+\frac{1}{2}}}{dr^2} \right. \\
&+ \left. \frac{v_{i,j-\frac{1}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{3}{2}}}{dz^2} \right] \\
&+ \left(\frac{1}{r_i} \frac{r_{i+\frac{1}{2}} S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz} - r_{i-\frac{1}{2}} S_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz}}{dr} + \frac{S_{i,j+1}^{zz} - S_{i,j}^{zz}}{dz} \right) + \frac{1}{Fr^2} gz,
\end{aligned} \tag{4.15}$$

onde $\text{conv}(ru^2)$, $\text{conv}(vu)$, $\text{conv}(ruv)$ e $\text{conv}(v^2)$ são os termos convectivos, cuja discretização utiliza-se o método *upwind* de alta ordem CUBISTA [1].

4.2.2 Equações do Tensor das Tensões

De forma análoga a discretização feita para as componentes do vetor velocidade, as componentes S^{rr} , S^{zz} , $S^{\theta\theta}$ e S^{rz} do tensor das tensões também serão discretizadas utilizando o esquema CUBISTA para os termos convectivos, diferenças centrais para as derivadas espaciais e o método de Euler Explícito para aproximar as derivadas temporais. Desta forma as equações dos tensores (3.30)-(3.33) podem ser escritas como

$$S_{i,j}^{rr(n+1)} = S_{i,j}^{rr} + dt H_1(S^{rr}, S^{rz}, S^{\theta\theta}, S^{zz}); \tag{4.16}$$

$$S_{i,j}^{rz(n+1)} = S_{i,j}^{rz} + dt H_2(S^{rr}, S^{rz}, S^{\theta\theta}, S^{zz}); \tag{4.17}$$

$$S_{i,j}^{\theta\theta(n+1)} = S_{i,j}^{\theta\theta} + dt H_3(S^{rr}, S^{rz}, S^{\theta\theta}, S^{zz}); \tag{4.18}$$

$$S_{i,j}^{zz(n+1)} = S_{i,j}^{zz} + dt H_4(S^{rr}, S^{rz}, S^{\theta\theta}, S^{zz}); \tag{4.19}$$

onde as funções H_1 , H_2 , H_3 e H_4 são escritas como,

$$\begin{aligned}
H_1 &= \frac{2(1-\beta)}{ReWi} \frac{(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S_{i,j}^{rr} - \frac{1}{r_i} conv(ruS^{rr})_{i,j} \\
&- conv(vS^{rr})_{i,j} + 2 \frac{(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} S_{i,j}^{rr} + 2 \frac{(v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} S_{i,j}^{rz} \\
&- \xi \left[2 \frac{(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} S_{i,j}^{rr} + \frac{(u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} S_{i,j}^{rz} + \frac{(v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} S_{i,j}^{rz} \right]; \tag{4.20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_2 &= \frac{(1-\beta)}{ReWi} \left(\frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz} + \frac{v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} \right) - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S_{i,j}^{rz} - \frac{1}{r_i} conv(ruS^{rz})_{i,j} \\
&- conv(vS^{rz})_{i,j} + \frac{(v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} S_{i,j}^{zz} + \frac{(u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} S_{i,j}^{rr} \\
&- (1-\xi) \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz} \right) S_{i,j}^{rz} \\
&- \frac{\xi}{2} \left(\frac{v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} + \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz} \right) (S_{i,j}^{rr} + S_{i,j}^{zz}); \tag{4.21}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_3 &= \frac{2(1-\beta)}{ReWi} \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{r_i} - \frac{1}{Wi} f(tr((S))) S_{i,j}^{\theta\theta} - \frac{1}{r_i} conv(ruS^{\theta\theta})_{i,j} \\
&- conv(vS^{\theta\theta})_{i,j} + 2 \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{r_i} S_{i,j}^{\theta\theta} - 2\xi \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{r_i} S_{i,j}^{\theta\theta}; \tag{4.22}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_4 &= \frac{2(1-\beta)}{ReWi} \frac{(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{S})) S_{i,j}^{zz} - \frac{1}{r_i} conv(ruS^{zz})_{i,j} \\
&- conv(vS^{zz})_{i,j} + 2 \frac{(u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} S_{i,j}^{rz} + 2 \frac{(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} S_{i,j}^{zz} \\
&- \xi \left[\frac{(v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j})}{dr} S_{i,j}^{rz} + 2 \frac{(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} S_{i,j}^{zz} + \frac{(u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}})}{dz} S_{i,j}^{rz} \right], \tag{4.23}
\end{aligned}$$

onde as velocidades $v_{i+\frac{1}{2},j}$, $v_{i-\frac{1}{2},j}$, $u_{i,j-\frac{1}{2}}$ e $u_{i,j+\frac{1}{2}}$ são calculadas pela média aritmética dos quatro valores adjacentes, por exemplo,

$$u_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{4}. \tag{4.24}$$

4.2.3 Aproximação da Equação de Poisson para ψ

Temos que a equação de Poisson em coordenadas cilíndricas é dada por

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + r\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = r\tilde{D}, \quad (4.25)$$

onde $\tilde{D} = \frac{1}{r}\frac{\partial r\tilde{u}}{\partial r} + \frac{\partial\tilde{v}}{\partial z}$.

Assumindo $dr = dz$ e fazendo uma aproximação por diferenças finitas de segunda ordem, obtemos

$$-r_i\psi_{i,j-1} - r_{i-\frac{1}{2}}\psi_{i-1,j} + 4r_i\psi_{i,j} - r_{i+\frac{1}{2}}\psi_{i+1,j} - r_i\psi_{i,j+1} = -r_i dr^2 \tilde{D}_{i,j}, \quad (4.26)$$

onde

$$\tilde{D}_{i,j} = \frac{1}{r_i} \frac{r_{i+\frac{1}{2}}\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}}\tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz}.$$

Ao aplicar a equação (4.26) em todos os pontos do interior do domínio, obtém-se um sistema linear para a função $\psi_{i,j}$ de forma que a matriz é simétrica e definida positiva. Tal sistema linear é resolvido pelo método dos gradientes conjugados.

4.2.4 Aproximação da Equação da Velocidade Final

Discretizando a equação (3.58) nas faces $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i, j + \frac{1}{2})$ obtém-se as velocidades finais $u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}$, por

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \frac{\psi_{i+1,j}^{n+1} - \psi_{i,j}^{n+1}}{dr}, \quad (4.27)$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \frac{\psi_{i,j+1}^{n+1} - \psi_{i,j}^{n+1}}{dz}. \quad (4.28)$$

4.2.5 Aproximação da Equação da Pressão

Discretizando a equação (3.60) no centro da célula (i, j) obtém-se a pressão no interior do domínio

$$p_{i,j}^{n+1} = \tilde{p}_{i,j} + \frac{\psi_{i,j}^{n+1}}{dt}. \quad (4.29)$$

4.2.6 Cálculo das Componentes do Tensor das Tensões em Contornos Rígidos.

Os valores das componentes do tensor das tensões S^{rr} , S^{zz} , S^{rz} e $S^{\theta\theta}$ são exigidos nas células de contorno (B) quando as equações (4.16)-(4.19) são discretizadas e aplicadas em nós, que são adjacentes ao contorno rígido.

Tais valores são obtidos por meio das equações derivadas na seção 3.4. Para isto, são percorridas as células de contorno (B) e é verificado qual face está em contato com células (F) ou células (S), como nos casos a seguir:

1. Células de contorno (B) com apenas a face superior ou a face inferior em contato com uma célula (F) ou uma célula (S). A Figura 4.5 ilustra o caso em que a célula de contorno (B) está com a face inferior em contato com uma célula (F) ou (S).

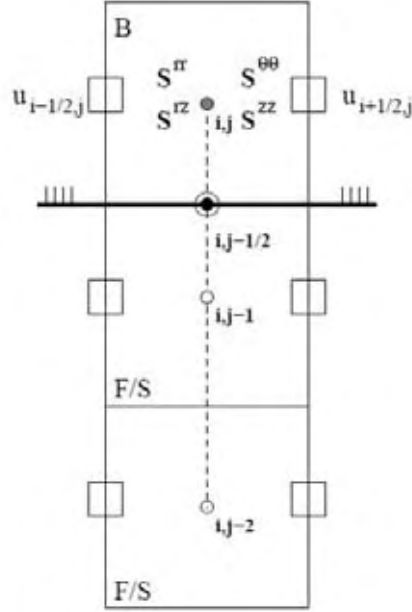


Figura 4.5: Célula B com a face inferior em contato com uma célula F/S

Assim, temos que o contorno rígido é horizontal e discretizando as equações (3.34)-(3.37), obtêm-se os valores das componentes do tensor das tensões no ponto $(i, j - \frac{1}{2})$, que são dados por

$$S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz(n+1)} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz} + dt \left(-\frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz} - \xi \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz} \right), \quad (4.30)$$

$$S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rr(n+1)} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rr} + dt \left(\frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rr} + (2 - \xi) \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz} \right), \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz(n+1)} &= S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz} + dt \left(\frac{1 - \beta}{ReWi} \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} (S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rr} + S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz}) \right), \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$S_{i,j-\frac{1}{2}}^{\theta\theta(n+1)} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{\theta\theta} - dt \left(\frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i,j-\frac{1}{2}}^{\theta\theta} \right). \quad (4.33)$$

Utilizamos duas possibilidades para a aproximação das derivadas:

- Duas células são cheias (F) ou de superfície (S), ou seja, a célula $(i,j-2)$ é (F/S), sendo assim, pode-se fazer uma aproximação da derivada, de segunda ordem, considerando $u_{i,j-\frac{1}{2}} = 0$ da seguinte forma:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{-3u_{i,j-1} + \frac{1}{3}u_{i,j-2}}{dz}.$$

onde,

$$u_{i,j-1} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{2} \quad \text{e} \quad u_{i,j-2} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-2} + u_{i-\frac{1}{2},j-2}}{2}.$$

- Uma célula é cheia (F) ou de superfície (S), ou seja, a célula $(i, j - 1)$ é (F/S), desta forma, é feita uma diferença avançada para a derivada. Logo,

$$\left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{i,j-\frac{1}{2}} = -\frac{2u_{i,j-1}}{dz},$$

onde,

$$u_{i,j-1} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{2}.$$

Por meio de uma interpolação linear utilizando os pontos $(i, j - \frac{1}{2})$ e $(i, j - 1)$, obtém-se as componentes do tensor das tensões $S_{i,j}^{rz}$, $S_{i,j}^{rr}$, $S_{i,j}^{zz}$ e $S_{i,j}^{\theta\theta}$ no tempo $t^{(n+1)}$. Então,

$$S_{i,j}^{\theta\theta} = -S_{i,j-1}^{\theta\theta} + 2S_{i,j-\frac{1}{2}}^{\theta\theta}, \quad (4.34)$$

$$S_{i,j}^{zz} = -S_{i,j-1}^{zz} + 2S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz}, \quad (4.35)$$

$$S_{i,j}^{rz} = -S_{i,j-1}^{rz} + 2S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz}, \quad (4.36)$$

$$S_{i,j}^{rr} = -S_{i,j-1}^{rr} + 2S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rr}. \quad (4.37)$$

O caso em que a célula de contorno (B) está com a face superior em contato com uma célula (F) ou (S) é tratado de maneira análoga;

2. Células de contorno (B) com apenas a face direita ou a face esquerda em contato com uma célula (F) ou (S). A Figura 4.6 ilustra o caso em que a face direita da célula de contorno (B) está em contato com uma célula (F/S).

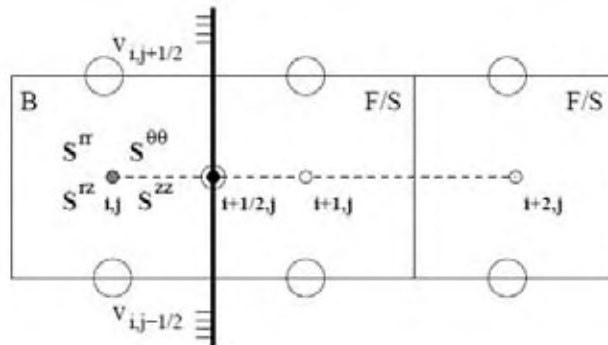


Figura 4.6: Célula B com a face direita em contato com uma célula F/S

Neste caso, o contorno rígido é paralelo ao eixo z , logo o cálculo das componentes do tensor das tensões são efetuados pelas equações (3.38)-(3.41) e são dadas por

$$S_{i+\frac{1}{2},j}^{zz(n+1)} = S_{i+\frac{1}{2},j}^{zz} + dt \left(-\frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}^{zz} + (2 - \xi) \frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} \right), \quad (4.38)$$

$$S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr(n+1)} = S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr} + dt \left(-\frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr} + \frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} \right), \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz(n+1)} &= S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} + dt \left(\frac{1 - \beta}{ReWi} \frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr} - \frac{\xi}{2} \frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} (S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr} + S_{i+\frac{1}{2},j}^{zz}) \right), \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$S_{i+\frac{1}{2},j}^{\theta\theta(n+1)} = S_{i+\frac{1}{2},j}^{\theta\theta} - dt \left(\frac{1}{Wi} f(\text{tr}(\mathbf{S})) \Big|_{i+\frac{1}{2},j} S_{i+\frac{1}{2},j}^{\theta\theta} \right). \quad (4.41)$$

Da mesma forma que foi feito para o contorno rígido paralelo ao eixo r , para aproximação das derivadas consideramos dois casos:

- Duas células são cheias (F) ou de superfície (S), assim pode-se fazer uma aproximação de segunda ordem da derivada usando os pontos $(i+1, j)$ e $(i+2, j)$ e considerando $v_{i+\frac{1}{2},j} = 0$,

$$\frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{-3v_{i+1,j} + \frac{1}{3}v_{i+2,j}}{dr},$$

onde,

$$v_{i+1,j} = \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}}}{2} \quad \text{e} \quad v_{i+2,j} = \frac{v_{i+2,j+\frac{1}{2}} + v_{i+2,j-\frac{1}{2}}}{2}.$$

- Uma célula é cheia (F) ou de superfície (S), desta forma a derivada é aproximada por diferenças avançadas, ou seja,

$$\frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2v_{i+1,j}}{dr},$$

onde,

$$v_{i+1,j} = \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}}}{2}.$$

Novamente é feita uma interpolação linear utilizando os pontos $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i+1, j)$, para obter as componentes do tensor das tensões $S_{i,j}^{rz}$, $S_{i,j}^{rr}$, $S_{i,j}^{zz}$ e $S_{i,j}^{\theta\theta}$ no tempo $t^{(n+1)}$. Assim,

$$S_{i,j}^{\theta\theta} = -S_{i+1,j}^{\theta\theta} + 2S_{i+\frac{1}{2},j}^{\theta\theta}, \quad (4.42)$$

$$S_{i,j}^{zz} = -S_{i+1,j}^{zz} + 2S_{i+\frac{1}{2},j}^{zz}, \quad (4.43)$$

$$S_{i,j}^{rz} = -S_{i+1,j}^{rz} + 2S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz}, \quad (4.44)$$

$$S_{i,j}^{rr} = -S_{i+1,j}^{rr} + 2S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr}. \quad (4.45)$$

O caso em que a célula de contorno (B) está com a face esquerda em contato com uma célula (F/S) é tratado de maneira análoga;

3. Células de contorno (B) com duas faces em contato com uma célula cheia (F) ou uma célula de superfície (S). A Figura 4.7 ilustra a configuração desse tipo de célula de contorno (B).

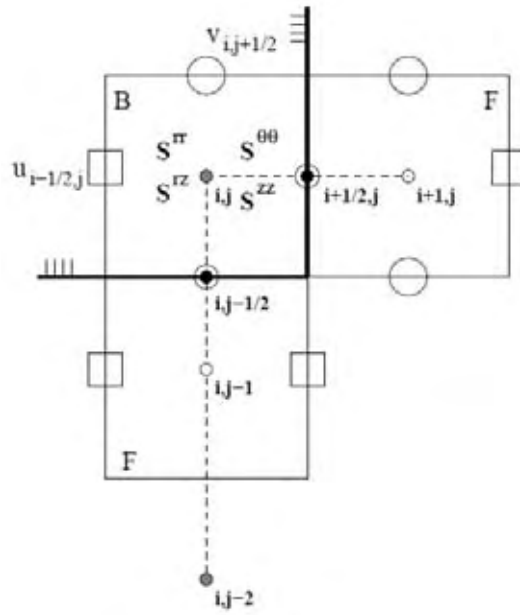


Figura 4.7: Célula B com a face direita e a face inferior em contato com uma célula F/S

As equações para o cálculo das componentes do tensor das tensões nas células de contorno (B) nos pontos $(i, j - \frac{1}{2})$ são dadas por (4.30)-(4.33) e pelas equações (4.38)-(4.41) para as componentes avaliadas no ponto $(i + \frac{1}{2}, j)$.

Assim, através de uma média aritmética dos valores das componentes do tensor das tensões calculados nas direções r e z , obtém-se

$$S_{i,j}^{rr} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rr} + S_{i+\frac{1}{2},j}^{rr} - \frac{1}{2}(S_{i,j-1}^{rr} + S_{i+1,j}^{rr}), \quad (4.46)$$

$$S_{i,j}^{zz} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{zz} + S_{i+\frac{1}{2},j}^{zz} - \frac{1}{2}(S_{i,j-1}^{zz} + S_{i+1,j}^{zz}), \quad (4.47)$$

$$S_{i,j}^{rz} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{rz} + S_{i+\frac{1}{2},j}^{rz} - \frac{1}{2}(S_{i,j-1}^{rz} + S_{i+1,j}^{rz}), \quad (4.48)$$

$$S_{i,j}^{\theta\theta} = S_{i,j-\frac{1}{2}}^{\theta\theta} + S_{i+\frac{1}{2},j}^{\theta\theta} - \frac{1}{2}(S_{i,j-1}^{\theta\theta} + S_{i+1,j}^{\theta\theta}). \quad (4.49)$$

As demais configurações das células de contorno (B) com duas faces em contato com células cheias (F) ou células de superfície (S) são obtidas de maneira análoga.

4.2.7 Cálculo do Tensor das Tensões em *Inflows* e *Outflows*

Seguindo as condições da seção 4.3.3 temos que $\mathbf{S} = 0$ nos *Inflows*. Nos *Outflows* impõe-se a condição homogênea de Newmann. Assim, obtêm-se as seguintes equações para as componentes do tensor das tensões:

- Células *Inflows* (I) com face inferior em contato com célula F/S.

Considerando a configuração da célula com o *inflow* situado como na Figura 4.8, temos

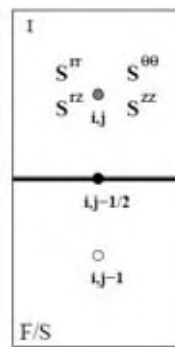


Figura 4.8: Célula *inflow* (I) com face inferior em contato com célula F/S.

$$\begin{aligned} S_{i,j}^{rr} &= -S_{i,j-1}^{rr}, & S_{i,j}^{zz} &= -S_{i,j-1}^{zz}, \\ S_{i,j}^{\theta\theta} &= -S_{i,j-1}^{\theta\theta}, & S_{i,j}^{rz} &= -S_{i,j-1}^{rz}. \end{aligned}$$

De maneira análoga, calcula-se as componentes do tensor das tensões para as demais configurações de células *inflow* (I);

- Células *Outflow* (O) com face superior em contato com célula F/S.

Considerando a configuração da célula como da Figura 4.9.

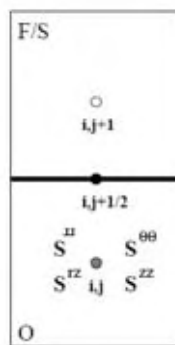


Figura 4.9: Célula *outflow* (O) com face superior em contato com célula F/S.

As componentes do tensor das tensões são dadas por

$$\begin{aligned} S_{i,j}^{rr} &= S_{i,j+1}^{rr}, & S_{i,j}^{zz} &= S_{i,j+1}^{zz}, \\ S_{i,j}^{\theta\theta} &= S_{i,j+1}^{\theta\theta}, & S_{i,j}^{rz} &= S_{i,j+1}^{rz}. \end{aligned}$$

Analogamente, calcula-se as componentes do tensor das tensões para as demais configurações de células *outflows*.

4.2.8 Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre

As equações (3.46) e (3.47) constituem as condições de contorno impostas na superfície livre. Através da equação (3.46) calcula-se a pressão na superfície livre e por meio da equação (3.47), juntamente com a equação da continuidade, calcula-se a velocidade na interface. Para aplicação destas condições, consideram-se os seguintes casos abaixo como em Tomé et al. [43]:

1. Células de superfície (S) com somente uma face em contato com uma célula vazia (E).

Nesta configuração da célula, assume-se que a superfície livre é vertical ou horizontal dependendo de qual face está em contato com a célula vazia (E), ou seja, temos que o vetor normal $\mathbf{n} = (1, 0)$ ou $\mathbf{n} = (-1, 0)$, se a célula de superfície (S) é horizontal a direita ou a esquerda, respectivamente, ou então o vetor normal $\mathbf{n} = (0, 1)$ ou $\mathbf{n} = (0, -1)$, se a célula de superfície (S) é vertical, superior ou inferior, respectivamente.

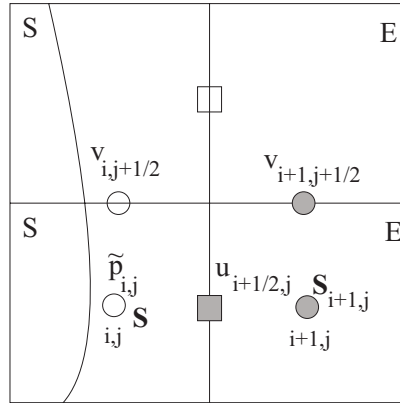


Figura 4.10: Célula S com a face da direita em contato com uma célula E

Na Figura 4.10 é ilustrado o caso de uma célula de superfície com somente a face direita em contato com uma face de uma célula vazia (E). Neste caso, o vetor normal é dado por $\mathbf{n} = (1, 0)$ e as equações (3.46) e (3.47) reduzem-se a

$$\tilde{p} = \frac{2\beta}{Re} \frac{\partial u}{\partial r} + S^{rr}, \quad (4.50)$$

$$\frac{\beta}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) + S^{rz} = 0. \quad (4.51)$$

Para calcular as velocidades intermediárias $\tilde{\mathbf{u}}$ usando as equações de quantidade de movimento, é necessário conhecer os valores de $\tilde{p}_{i,j}$, $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$. Por meio das equações (4.50), (4.51) e (3.22) encontram-se estes valores.

Primeiro, discretizando a equação da continuidade (3.22) no centro da célula, obtém-se

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \left(r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j} - r_i \frac{dr}{dz} \left(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \right).$$

Agora, discretizando a equação (4.51) no ponto $(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})$, e isolando $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$, vem que

$$v_{i+1,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{dr}{dz} \left(u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j} \right) - \frac{Re}{\beta} dr S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz},$$

onde,

$$S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{rz} = \frac{S_{i,j}^{rz} + S_{i+1,j}^{rz} + S_{i,j+1}^{rz} + S_{i+1,j+1}^{rz}}{4}.$$

A pressão $\tilde{p}_{i,j}$ é obtida discretizando a equação (4.50) no centro da célula (i, j)

$$\tilde{p}_{i,j} = \frac{2\beta}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} \right) + S_{i,j}^{rr}.$$

De forma análoga são tratadas as demais configurações de células de superfície (S) com apenas uma face em contato com uma célula vazia (E);

2. Células de superfície (S) com duas faces adjacentes em contato com células vazias (E).

Nesta configuração de célula, o vetor normal faz um ângulo de 45° com as duas faces em contato com células vazias (E), ou seja, o vetor normal pode assumir os seguintes valores, $n = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$, $n = \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$, $n = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right)$ e $n = \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right)$.

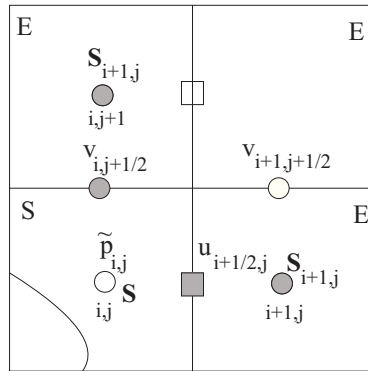


Figura 4.11: Célula S com duas faces em contato com células E

A Figura 4.11, ilustra o caso em que o vetor normal assume a forma $\mathbf{n} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$. Assim, as equações (3.46) e (3.47) reduzem-se a

$$\tilde{p} = \frac{\beta}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{1}{2} (S^{rr} + 2S^{rz} + S^{zz}) \quad (4.52)$$

$$\frac{\beta}{Re} \left(\frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{2} (S^{zz} - S^{rr}) = 0. \quad (4.53)$$

Como no caso 1, o cálculo do vetor velocidade $\tilde{\mathbf{u}}$ requer os valores de $\tilde{p}_{i,j}$, $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}$.

Primeiramente calcula-se $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}$ pela equação da continuidade (3.22) e pela condição tangencial (4.53), tais equações discretizadas no centro da célula (S) produzem

$$\frac{1}{r_i} \frac{r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz} = 0, \quad (4.54)$$

$$\frac{\beta}{Re} \left(\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz} - \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} \right) + \frac{1}{2} (S_{i,j}^{zz} - S_{i,j}^{rr}) = 0. \quad (4.55)$$

Resolvendo o sistema gerado pelas equações (4.54) e (4.55), obtém-se

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \left(\frac{r_i + r_{i-\frac{1}{2}}}{r_i + r_{i+\frac{1}{2}}} \right) u_{i-\frac{1}{2},j} + \frac{Re}{2\beta} \left(\frac{r_i}{r_i + r_{i+\frac{1}{2}}} \right) dr (S_{i,j}^{zz} - S_{i,j}^{rr}),$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{r_i} \frac{dz}{dr} (r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j}).$$

Para obter o valor de $\tilde{p}_{i,j}$, aproxima-se a equação (4.52) no centro da célula (S), assim

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{i,j} = & \frac{\beta}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{dr} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{dz} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{dz} \right. \\ & \left. + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} - v_{i-1,j+\frac{1}{2}} - v_{i-1,j-\frac{1}{2}}}{dr} \right) + \frac{1}{2} (S_{i,j}^{rr} + 2S_{i,j}^{rz} + S_{i,j}^{zz}). \end{aligned}$$

De maneira análoga são obtidos os valores das componentes da velocidade e a pressão para as demais configurações de células (S) com duas faces adjacentes em contato com células (E);

3. Células de superfície (S) com duas faces opostas em contato com células vazias (E) ou células de superfície (S) com três faces em contato com células vazias (E). Neste caso não é possível expressar o vetor normal \mathbf{n} . Sendo assim, o valor da velocidade numa das faces é calculado de forma a satisfazer a equação da continuidade. Os valores das componentes do tensor das tensões e da pressão são considerados nulos. Para minimizar o aparecimento de tais configurações de células durante a execução de um dado problema, um refinamento de malha deverá ser feito.

4.2.9 Cálculo do Passo no Tempo

Para calcular o tamanho do passo no tempo é necessário satisfazer as seguintes restrições:

1. Em um dado intervalo de tempo, nenhuma partícula pode cruzar mais do que uma célula, isto é,

$$dt < \frac{dr}{|u|}, \quad (4.56)$$

$$dt < \frac{dz}{|v|}.$$

Numericamente, considera-se

$$dt1 = FACT1 \left(\min \left(\frac{dr}{|umax|}, \frac{dz}{|vmax|} \right) \right),$$

onde $0 < FACT1 < 1$ e $umax$ e $vmax$ são os valores máximos de u e v , respectivamente.

2. Por conta da discretização explícita da equação de quantidade de movimento, será adotada a seguinte restrição de estabilidade envolvendo o número de Reynolds (Re) e o parâmetro adimensional β ,

$$dt2 < \frac{1}{2} \frac{Re}{\beta} dr^2. \quad (4.57)$$

Numericamente, considera-se

$$dt2 = FACT2 \left(\frac{1}{2} \frac{Re}{\beta} dr^2 \right),$$

com $0 < FACT2 < 1$.

Numericamente, considera-se dt como sendo o passo usado no tempo da seguinte forma

$$dt = FACT (\min (dt1, dt2)),$$

com $0 < FACT < 1$.

Resultados Numéricos

Neste capítulo serão apresentados os resultados numéricos obtidos por meio da plataforma de alto desempenho denominada FREEFLOW-AXI, onde foram implementadas as equações de diferenças finitas referentes ao modelo PTT apresentadas no capítulo anterior. Primeiramente, serão apresentados os resultados numéricos do escoamento totalmente desenvolvido de um fluido PTT em um tubo. Tais resultados serão comparados com a solução analítica do problema. Como resultados numéricos serão apresentados os seguintes problemas: o impacto de uma gota numa superfície rígida (*impacting drop*), o *splashing drop* e o inchamento do extrudado.

5.1 Escoamento Totalmente Desenvolvido em um Tubo: Verificação do Método Numérico

Para a verificação do método numérico será apresentado o escoamento totalmente desenvolvido em um tubo de um fluido PTT. Os resultados numéricos serão comparados com a solução analítica deste problema. Serão feitos refinamentos da malha para fazer as comparações e calcular a ordem de convergência do método numérico.

Considera-se um tubo de raio R e comprimento $10R$ como mostra a Figura 5.1. Na entrada e na saída do tubo são impostas as condições apresentadas na seção 4.2.7 para os tensores, para as velocidades normal e tangencial são impostas as condições apresentadas na seção 3.3.

Na parede impomos a condição de não escorregamento (no-sleep) para a velocidade e para os tensores as condições apresentadas na seção 4.2.6. No eixo de simetria são impostas as condições da seção 3.4.3 para as componentes do tensor das tensões \mathbf{S} e condições de escorregamento livre (free-sleep) para a velocidade. E, na superfície livre foram impostas as condições apresentadas na seção 4.2.8.

Na simulação deste problema foram utilizados os seguintes dados de entrada:

- Domínio Computacional: $1.0m \times 10.0m$;
- Parâmetros de Escala U e L: $1.0m/s$ e $1.0m$, respectivamente;
- Viscosidade Cinemática: $\nu = 1.0m^2/s$;

- Número de Reynolds e Weissenberg: $Re = 1.0$ e $Wi = 0.5$;
- Parâmetro Adimensional $\beta = 0.5$.

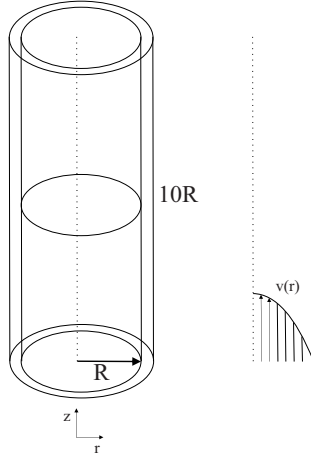


Figura 5.1: Domínio computacional para simulação do escoamento num tubo.

Inicialmente o tubo está vazio e o fluido vai sendo injetado até que o tubo esteja completamente cheio e o escoamento atinja o estado estacionário ($t = 50s$). Após ser atingido o estado estacionário, os valores da velocidade e das componentes do tensor das tensões devem ser os mesmos em qualquer seção transversal do tubo. Uma ilustração deste problema pode ser vista na simulação mostrada na Figura 5.2, onde foram utilizados os parâmetros $\varepsilon = 0.0$ e $\xi = 0.0$.

Para as comparações entre os resultados numéricos e a solução exata do problema foram impostas na entrada do tubo as soluções analíticas do escoamento totalmente desenvolvido de um fluido PTT, considerando $\varepsilon = \xi = 0$. Tais perfis desenvolvidos são dados por,

$$v(r) = 2(1 - r^2), \quad u = 0,$$

$$S^{rz} = \frac{(1 - \beta)}{Re} \frac{\partial v}{\partial r}, \quad S^{zz} = 2WiS^{rz} \frac{\partial v}{\partial r}, \quad S^{rr} = 0, \quad S^{\theta\theta} = 0.$$

Para esse problema foram utilizadas três malhas descritas a seguir:

- M1 (grossa): 5×100 células; $dr = dz = 0.2m$.
- M2 (intermediária): 10×200 células; $dr = dz = 0.1m$.
- M3 (fina): 20×400 células; $dr = dz = 0.05m$.

As Figuras 5.3 (a)-(c) descrevem respectivamente o perfil de velocidade, o perfil do tensor S^{rz} e do tensor S^{zz} utilizando diferentes malhas, juntamente com a solução exata do problema. Eles mostram uma excelente concordância entre a solução numérica e a solução exata do problema.

A convergência do método numérico é verificada através do cálculo do erro relativo obtido entre a solução analítica e a solução numérica, na norma l_2 em diferentes malhas, dado por



Figura 5.2: Visualização frontal da simulação do escoamento num tubo. $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.5$, $\varepsilon = 0.0$ e $\xi = 0.0$.

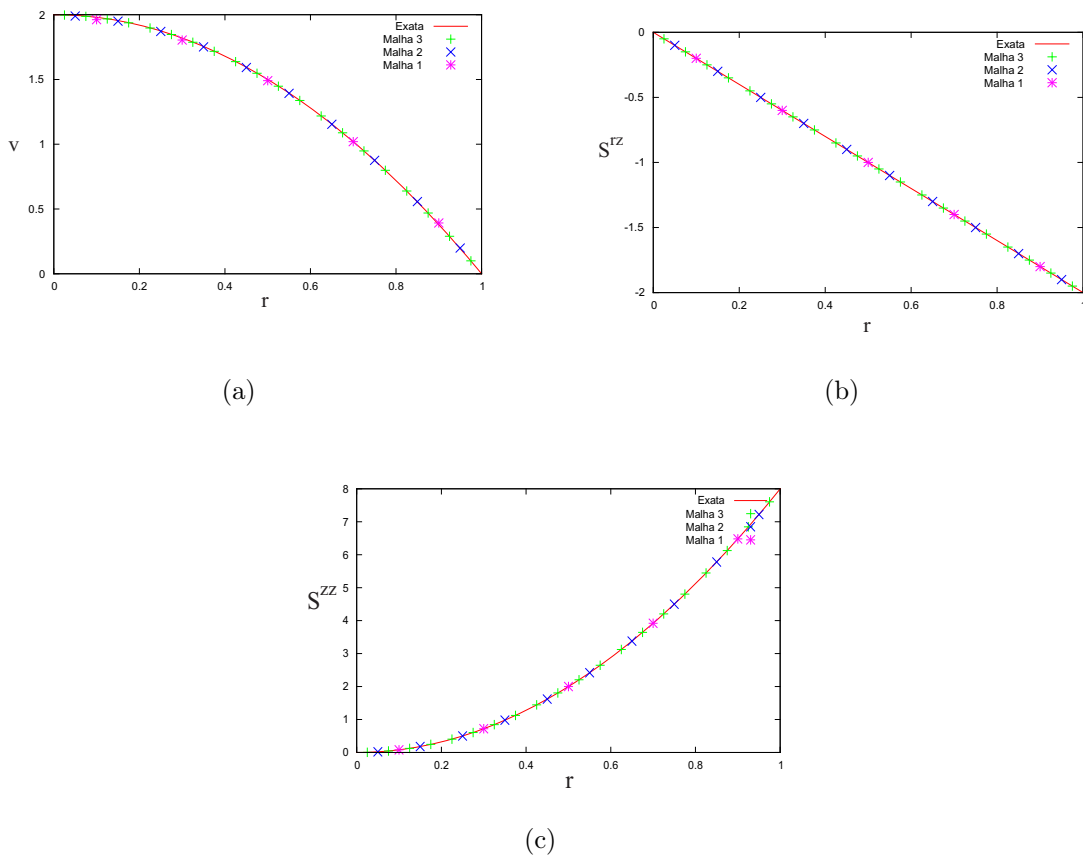


Figura 5.3: Comparação entre solução numérica e solução exata: $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.5$, $\varepsilon = 0.0$ e $\xi = 0.0$. (a) Perfil da velocidade $v(r)$; (b) Perfil da componente S_{rz} do tensor das tensões; (c) Perfil da componente S_{zz} do tensor das tensões.

$$E(SolNum) = \frac{\sum (SolEx - SolNum)^2}{\sum SolEx^2}.$$

A Tabela 5.1 mostra o cálculo do erro obtido entre a solução analítica e as soluções numéricas de um fluido PTT reduzido a Oldroyd-B, ou seja, $\varepsilon = \xi = 0$, nas Malhas 1, 2 e 3. Observe que à medida que é refinada a malha o erro tende a diminuir, mostrando assim a convergência do método numérico.

Tabela 5.1: Erros entre solução analítica e solução numérica

ERRO	Malha 1	Malha 2	Malha 3
$E(v(r))$	8.7724 e-03	2.3045 e-03	7.2299 e-04
$E(S^{rz})$	1.9183 e-02	4.9351 e-03	1.3782 e-03
$E(S^{zz})$	3.8022 e-02	9.8532 e-03	2.8016 e-03

Para calcular a ordem de convergência do método numérico descrito neste trabalho utilizou-se a seguinte expressão:

$$n = \frac{\log \left[\frac{Erro(M3)}{Erro(M2)} \right]}{\log \alpha},$$

onde $\alpha = 0.5$. A tabela 5.2 apresenta a ordem de convergência alcançada pelo método numérico.

Tabela 5.2: Ordem de convergência do método numérico

Variáveis	n
$v(r)$	1.6724
S^{rz}	1.8402
S^{zz}	1.8243

Esses resultados demonstram que o método numérico apresentado neste trabalho é eficaz.

5.2 Impacto de uma Gota numa Superfície Rígida

Nesta seção serão apresentados resultados numéricos do impacto de uma gota esférica de fluido PTT contra uma placa rígida.

As condições impostas para simular este problema foram a condição de não-escorregamento na parede e a condições de escorregamento livre no eixo de simetria para a velocidade. Para as componentes do tensor das tensões foram impostas as condições na parede, no eixo de simetria e na superfície livre, como apresentadas nas seções 4.2.6, 3.4.3 e 4.2.8, respectivamente.

A Figura 5.4 ilustra o domínio computacional usado para a simulação do impacto de uma gota numa superfície rígida. Segue abaixo os dados utilizados para modelar o impacto da gota.

- Domínio Computacional: $0.078m \times 0.078m$ (156×156 células);
- Raio da Gota: $0.01m$;
- Velocidade Inicial da Gota: $-1.0m/s$;
- Gravidade: $-9.81m/s^2$;
- Parâmetros de Escala U e L: $1.0m/s$ e $0.02m$, respectivamente;
- Viscosidade Cinemática: $\nu = 0.004m^2/s$;
- Números de Reynolds, Weissenberg e Froude: $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$ e $Fr = 2.26$.

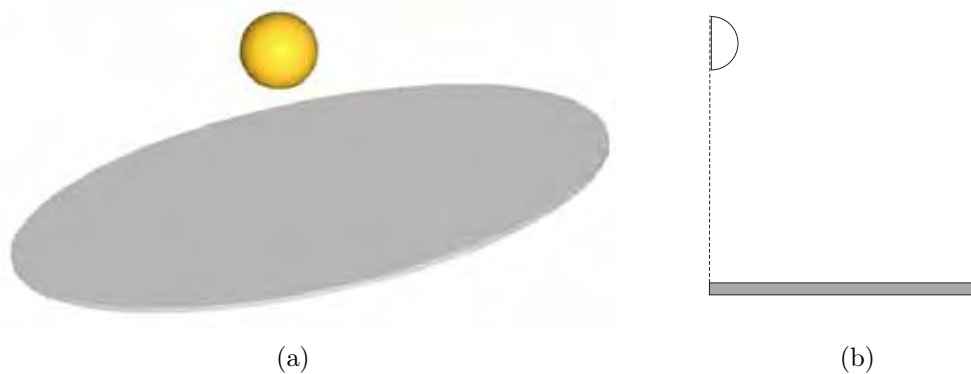
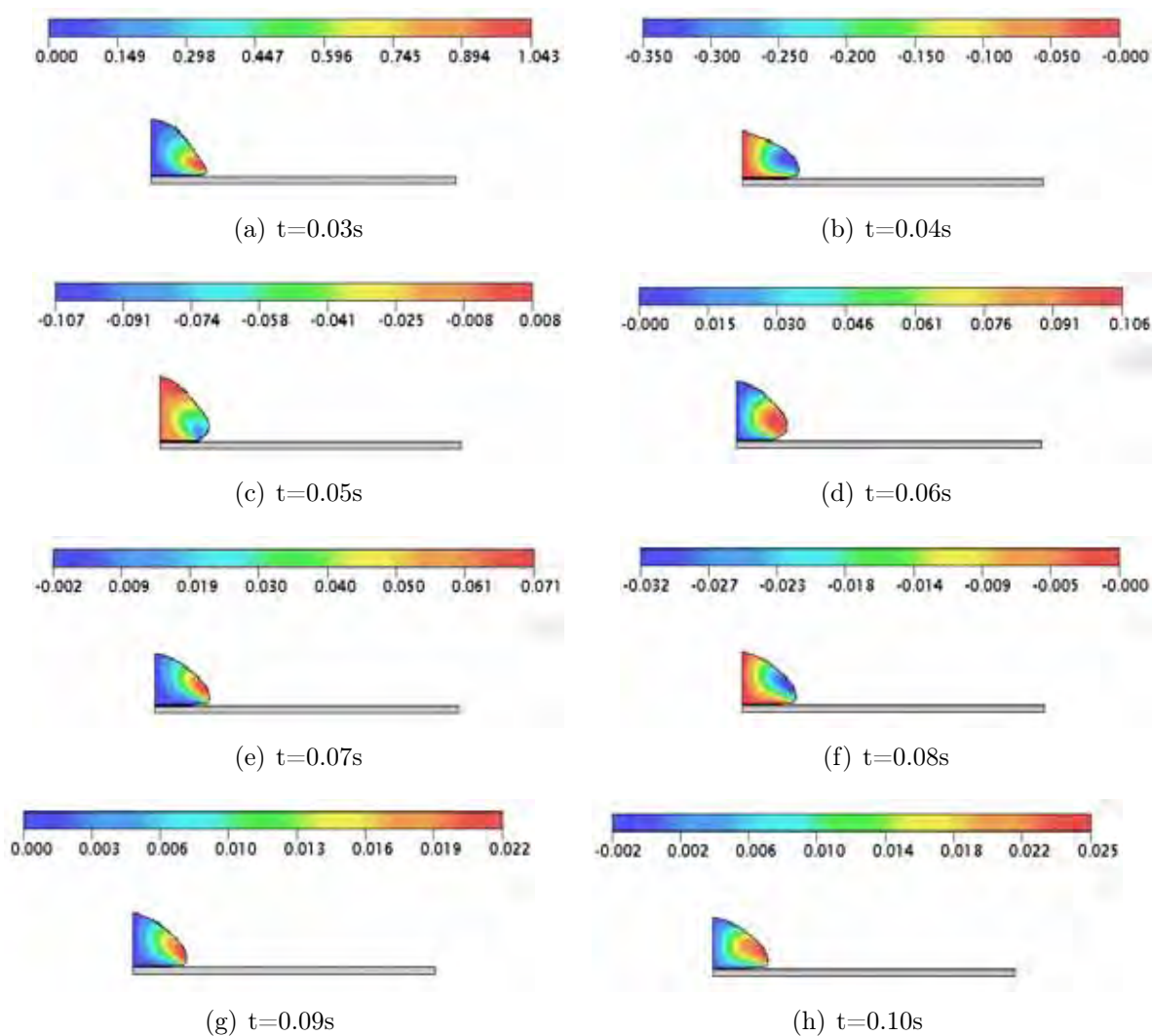


Figura 5.4: (a) Visualização tridimensional do domínio; (b) Domínio computacional para simulação do impacto de uma gota numa superfície rígida.

A Figura 5.5 ilustra o comportamento da velocidade na direção radial, ou seja, a componente u da velocidade quando a gota incide a superfície rígida. Nesta simulação foram utilizados os seguintes parâmetros adimensionais: $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$.



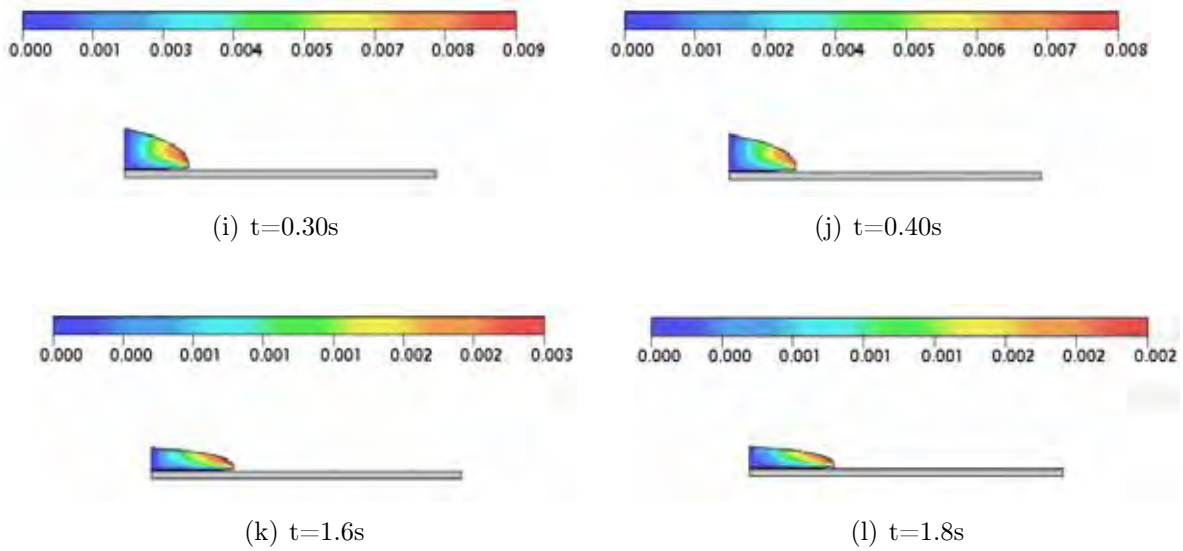


Figura 5.5: Visualização do perfil da velocidade na direção radial em diferentes tempos. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$.

A Figura 5.6 ilustra o comportamento dos tensores S^{rr} , S^{zz} , $S^{\theta\theta}$ e S^{rz} no momento em que a gota impacta a superfície rígida.

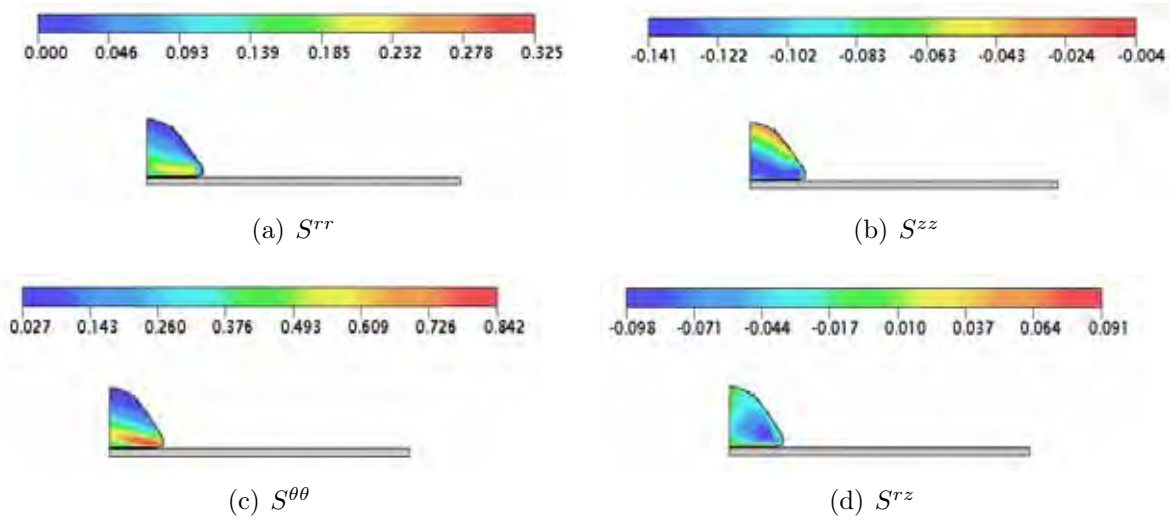


Figura 5.6: Visualização do perfil dos tensores S^{rr} , S^{zz} , $S^{\theta\theta}$ e S^{rz} no tempo $t = 0.03s$. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$.

As figuras 5.7 ilustra o comportamento do impacto de uma gota numa superfície rígida.



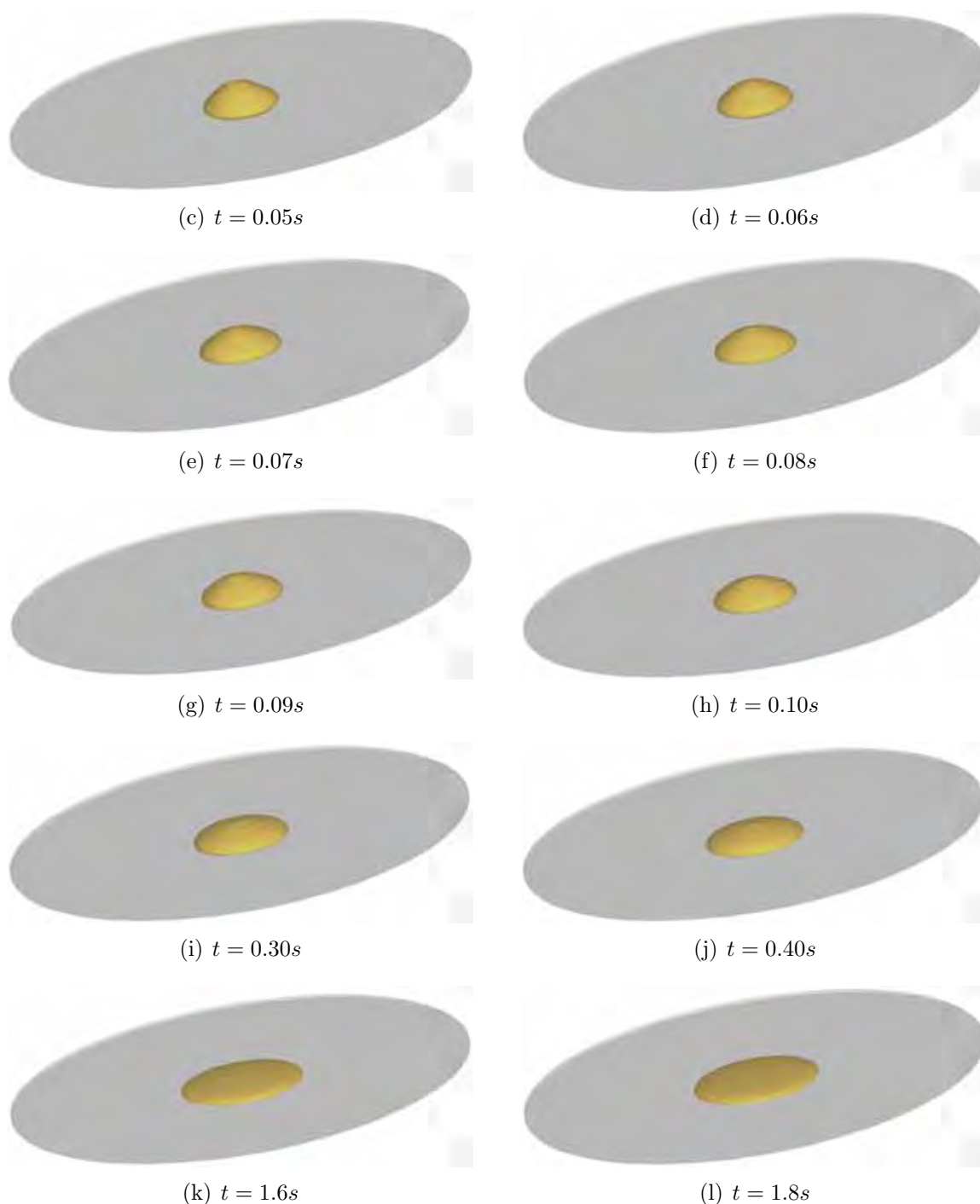


Figura 5.7: Visualização tridimensional do impacto da gota numa superfície rígida em diferentes tempos. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.1$ e $\xi = 0.2$.

A seguir, serão apresentados alguns gráficos que mostram a variação do comprimento da gota em função do tempo, e a influência que cada um dos parâmetros adimensionais, ε e ξ , exercem neste escoamento.

A Figura 5.8 mostra a comparação de uma gota newtoniana com uma gota de fluido PTT com $\beta = 0.5$ e $\beta = 0.9$, e a influência dos parâmetros ε e ξ . Observa-se que os parâmetros adimensionais ξ e ε exercem pouca influência na variação do comprimento da gota quando $\beta \rightarrow 1$. Em adição, pode-se notar que o comportamento da variação do comprimento da gota de fluido PTT, com $\beta = 0.9$, é análogo da gota Newtoniana, ou seja, o comprimento da gota em relação ao tempo representa uma função crescente.

Numericamente, constatou-se que quando β se aproxima de 1.0 os resultados numéricos do modelo PTT se aproximam do Newtoniano. A maior diferença entre essas simulações está logo quando a gota incide na placa rígida, mas com o passar do tempo diminui consideravelmente (ver Figura 5.8 (a)). Caberia aqui uma explicação mais reológica, mas não a faremos pois foge o escopo deste trabalho.

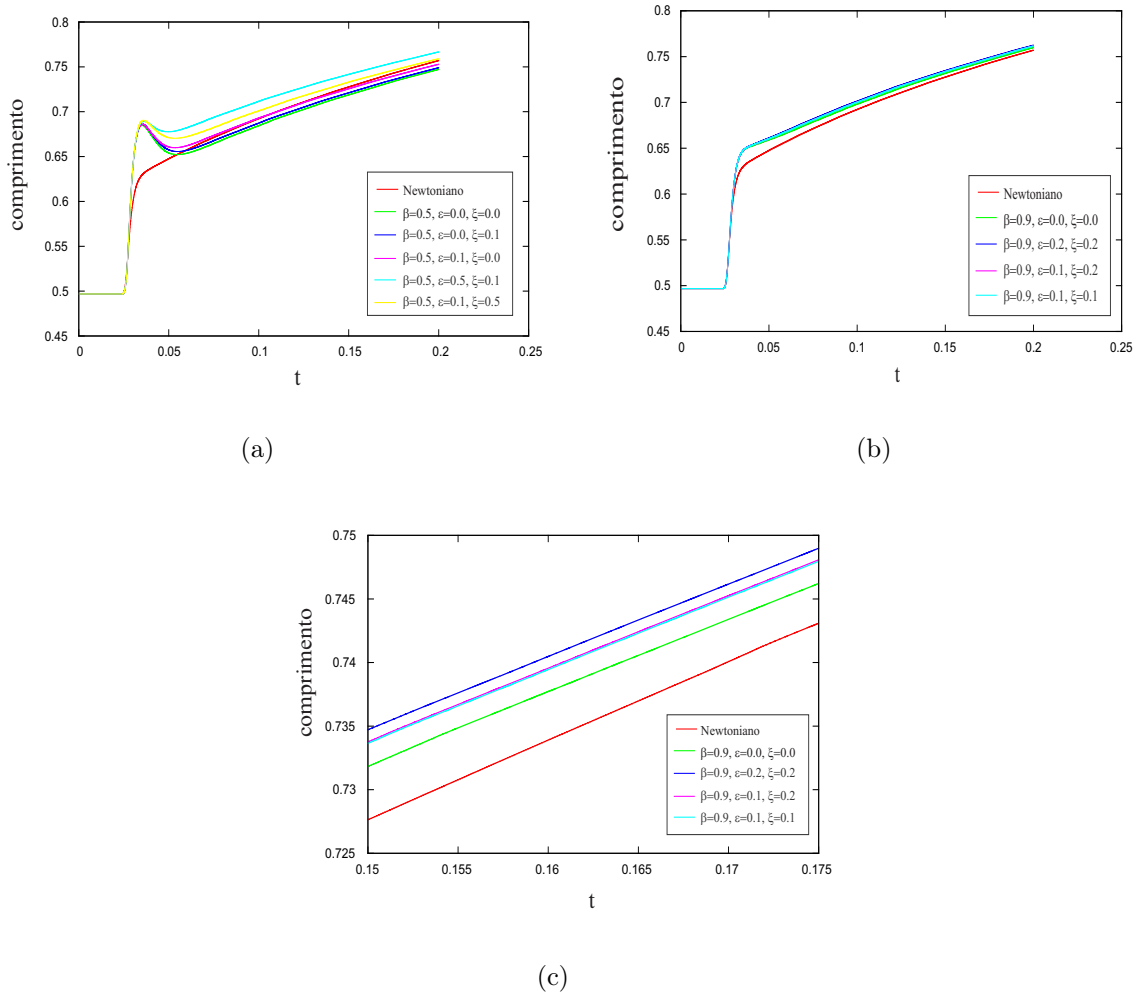


Figura 5.8: (a) Comparação entre o comprimento da gota com 50% de polímero e 50% de solvente com uma gota Newtoniana; (b) Comparação entre o comprimento da gota Newtoniana e da gota 10% polímero 90% solvente; (c) Zoom da Figura (b).

A Figura 5.9 mostra uma análise do comprimento da gota variando-se o parâmetro ξ entre 0 e 1. Comparando-se com uma gota modelada por um fluido PTT reduzido a Oldroyd-B, ou seja, $\varepsilon = \xi = 0$. Observe que as curvas da variação do comprimento da gota vão se afastando da medida do comprimento da gota do modelo PTT reduzido a Oldroyd-B a medida que o parâmetro ξ vai se aproximando de 1.0.

Na Figura 5.10 é possível observar que o parâmetro ε não exerce grande influência no escoamento até a primeira contração das gotas, pois as primeiras contrações ocorrem quase ao mesmo tempo. Entretanto, após a primeira contração nota-se que o parâmetro ε exerce uma influência significativa no escoamento, pois nota-se que a gota contrai menos quando o parâmetro ε é maior.

Ao analisar a influência do parâmetro β nos gráficos 5.8, 5.9 e 5.10, observa-se que na Figura 5.8 (b), em que $\beta = 0.9$, a gota começa a escoar instantaneamente ao incidir sobre a superfície rígida. Na Figura 5.8 (a), em que $\beta = 0.5$, ao impactar sobre a superfície rígida,

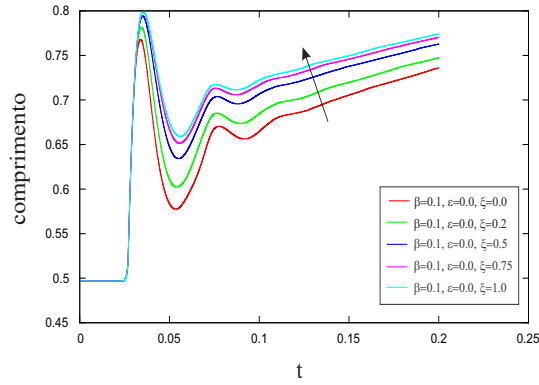


Figura 5.9: Comparação entre o comprimento da gota em função do tempo analisando a influência do parâmetro ξ neste escoamento. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\varepsilon = 0.0$

a gota aumenta seu comprimento, contraindo-se logo em seguida, para depois começar a escoar. Já a gota ilustrada na Figura 5.9, em que $\beta = 0.1$, ao entrar em contato com a placa, sofre várias vezes um aumento em seu comprimento, sempre seguido de uma contração, até começar a escoar.

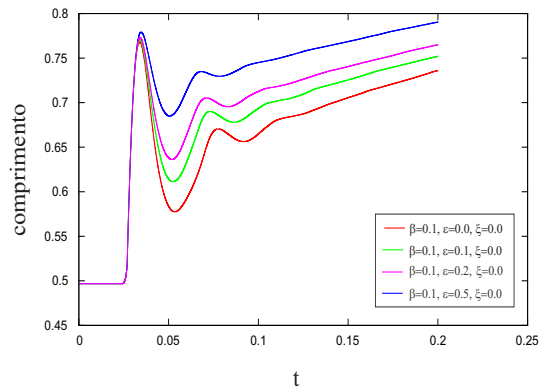


Figura 5.10: Comparação entre o comprimento da gota em função do tempo analisando a influência do parâmetro ε neste escoamento. $Re = 5.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.1$, $\xi = 0.0$.

5.3 *Splashing Drop*

Nesta seção serão apresentados os resultados numéricos das simulações do problema conhecido como *splashing drop*, no qual uma gota esférica de fluido PTT é lançada contra um tanque contendo o mesmo tipo de fluido. O objetivo central é estudar a influência que os parâmetros ε e ξ exercem neste escoamento.

Como estamos trabalhando com escoamentos axissimétricos, utilizamos um domínio computacional como mostrado na Figura 5.11.

Os dados de entrada para essas simulações são,

- Domínio Computacional: $0.1m \times 0.2m$ (100×200 células);
- Raio da Gota: $0.005m$;

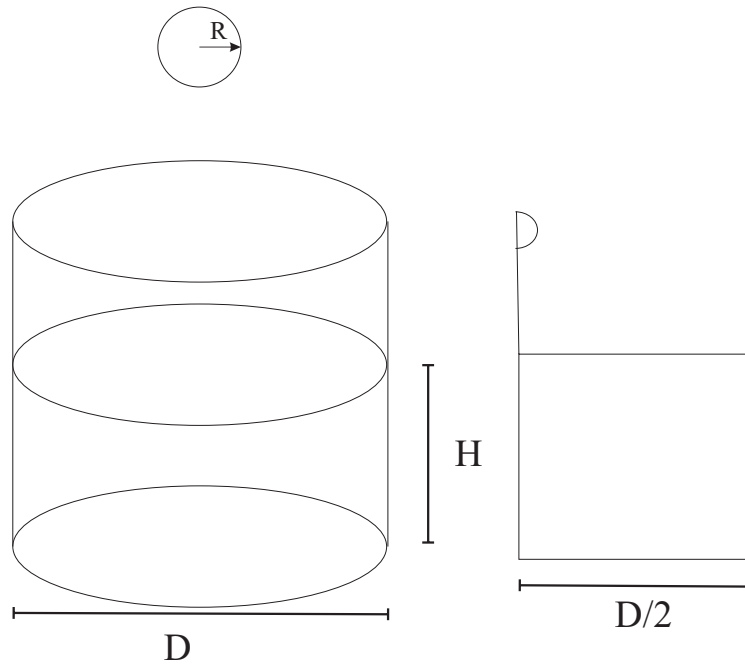


Figura 5.11: Visualização 3D e domínio computacional para simulação do *splashing drop*.

- Diâmetro do Tanque: $0.4m$;
- Velocidade Inicial da Gota: $-2.0m/s$;
- Gravidade: $-9.81m/s^2$;
- Parâmetros de Escala U e L: $2.0m/s$ e $0.005m$, respectivamente;
- Viscosidade Cinemática: $\nu = 0.00001$;
- Números de Reynolds, Weissenberg e Froude: 1500.0 , $Wi = 1.0$ e $Fr = 9.03$;
- Parâmetro Adimensional $\beta = 0.9$.

A partir da Figura 5.12, a qual mostra a simulação numérica do *splashing drop*, pode-se observar os efeitos desse fenômeno descritos na seção 1.4.2, tais como, formação da cratera e a formação do jato de Worthington [49]. Para ilustrar esse problema, é mostrado na Figura 5.12, a visualização tridimensional dos resultados obtidos para $\varepsilon = 0.2$ e $\xi = 0.1$.

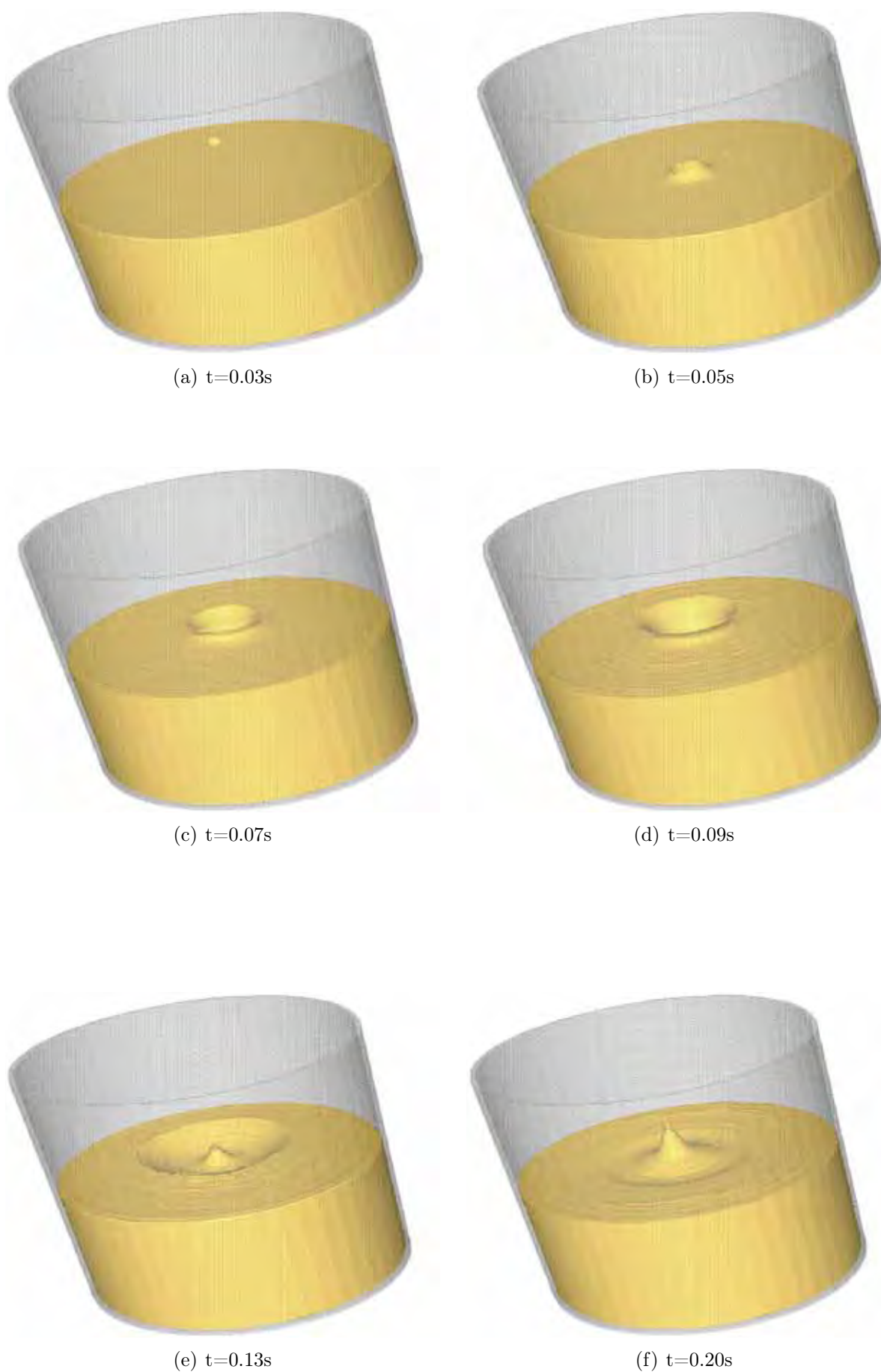


Figura 5.12: Visualização 3D da simulação do *splashing drop* para $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$, $\varepsilon = 0.2$ e $\xi = 0.1$.

As Figuras 5.13 (a) e (b) mostram a medida da altura do jato de Worthington com a variação do tempo. Pode-se observar na Figura 5.13 (a) que o parâmetro ε , responsável pelo comportamento elongacional do modelo, exerce uma influência considerável na altura do jato. Quanto maior o parâmetro ε menor a altura que o jato de Worthington atinge. Agora, analisando a Figura 5.13 (b), observa-se que o parâmetro ξ tem uma influência insignificante na variação da altura do jato.

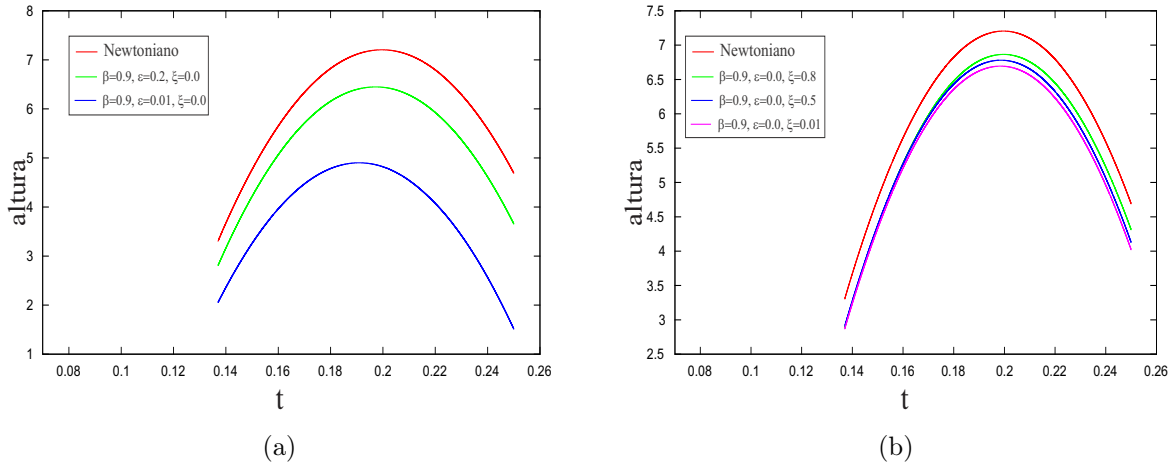


Figura 5.13: Medida da altura do jato de Worthington na simulação do *splashing drop* em diferentes tempos. $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$. (a) variando ε , $\xi = 0.0$; (b) variando ξ , $\varepsilon = 0.0$.

As Figuras 5.14 e 5.15 mostram a visualização tridimensional da altura máxima do jato de Worthington para as diferentes simulações das Figuras 5.13 (a) e 5.13 (b), respectivamente, utilizando como referência a simulação do modelo Newtoniano.

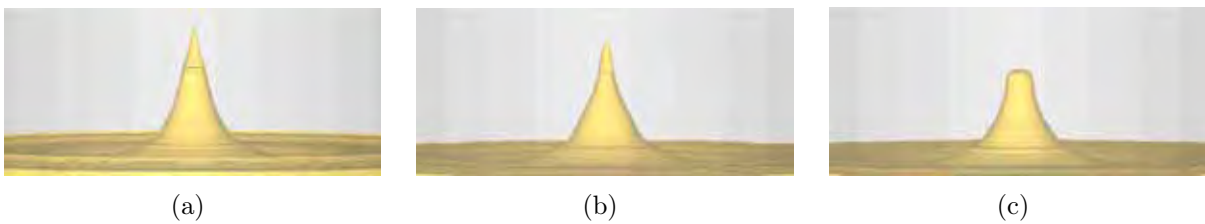


Figura 5.14: Visualização tridimensional do jato de Worthington na simulação do *splashing drop*. $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$ e $\xi = 0.0$. (a)Newtoniano; (b) $\varepsilon = 0.2$; (c) $\varepsilon = 0.05$

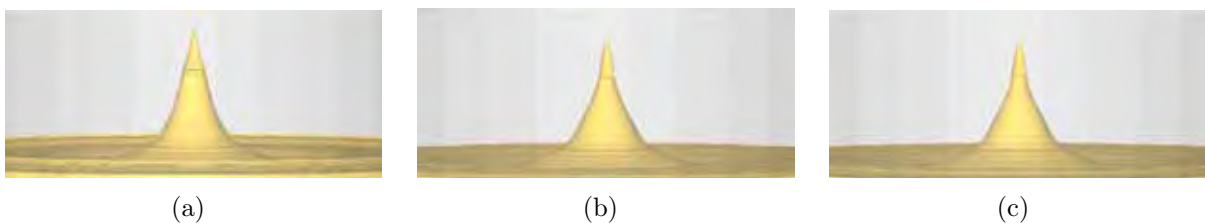


Figura 5.15: Visualização tridimensional do jato de Worthington na simulação do *splashing drop*. $Re = 1500.0$, $Wi = 1.0$, $\beta = 0.9$ e $\varepsilon = 0.0$ (a) Newtoniano; (b) $\xi = 0.5$; (c) $\xi = 0.01$

5.4 Inchamento do Extrudado (*Dieswell*)

Nesta seção serão apresentados os resultados numéricos da simulação do fenômeno do inchamento do extrudado. A Figura 5.16 ilustra o domínio computacional utilizado. Em seguida serão descritos os dados de entrada utilizados para simular este problema.

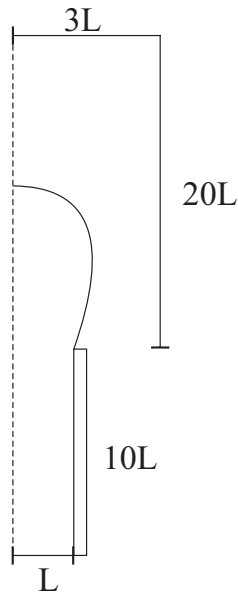


Figura 5.16: Domínio computacional para simulação do inchamento do extrudado.

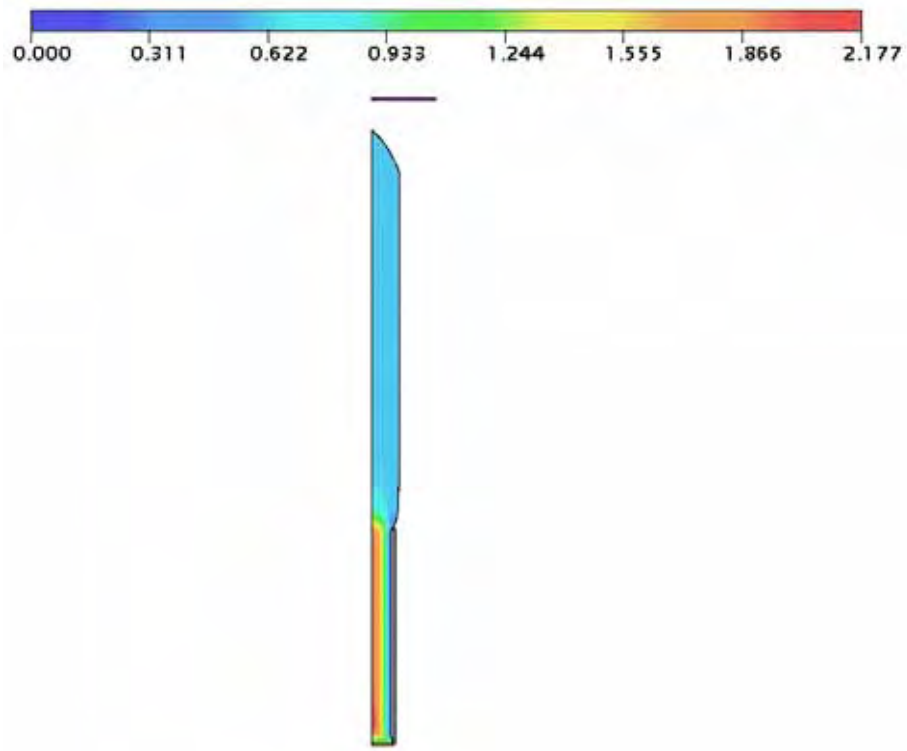
- Domínio Computacional: $3.0m \times 30.0m$ (30×3.000 células);
- Raio do Tubo: $1.0m$;
- Velocidade Inicial: $1.0m/s$;
- Parâmetros de Escala U e L: $1.0m/s$ e $1.0m$, respectivamente;
- Viscosidade Cinemática: $\nu = 1.0m^2/s$;
- Números de Reynolds e Weissenberg: $Re = 1.0$ e $Wi = 0.5$.

O fenômeno do inchamento do extrudado é caracterizado pelo aumento do diâmetro do fluido em relação ao diâmetro interno do tubo quando expelido na atmosfera. Desta forma, define-se a razão do inchamento dada por

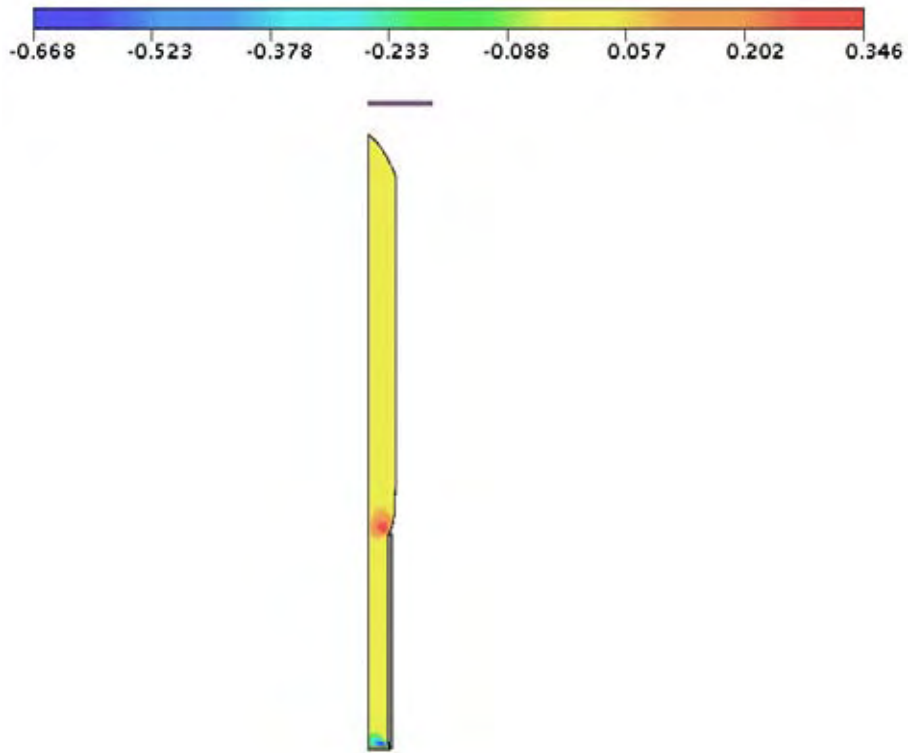
$$S_r = \frac{D_{max}}{D},$$

onde D_{max} é o diâmetro máximo que o fluido atinge (ao ser expelido na atmosfera) e D é o diâmetro interno do tubo.

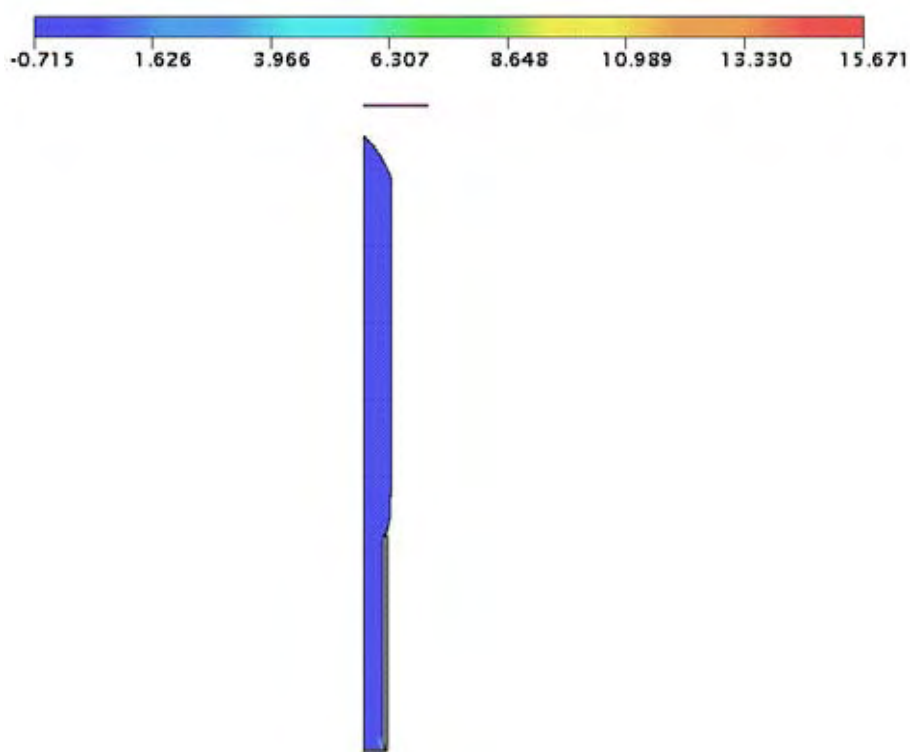
A Figura 5.17 apresenta os perfis das velocidades e das componentes do tensor das tensões. Para a simulação deste problema foram utilizados os seguintes parâmetros: $\varepsilon = 0.01$, $\xi = 0.1$ e $\beta = 0.3$.



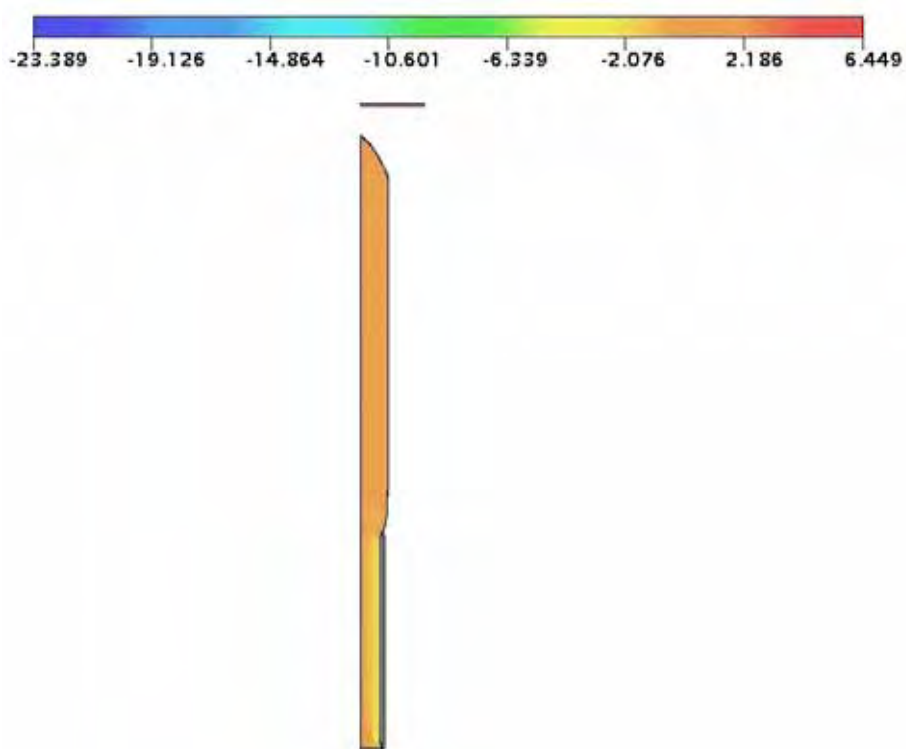
(a)



(b)



(c)



(d)

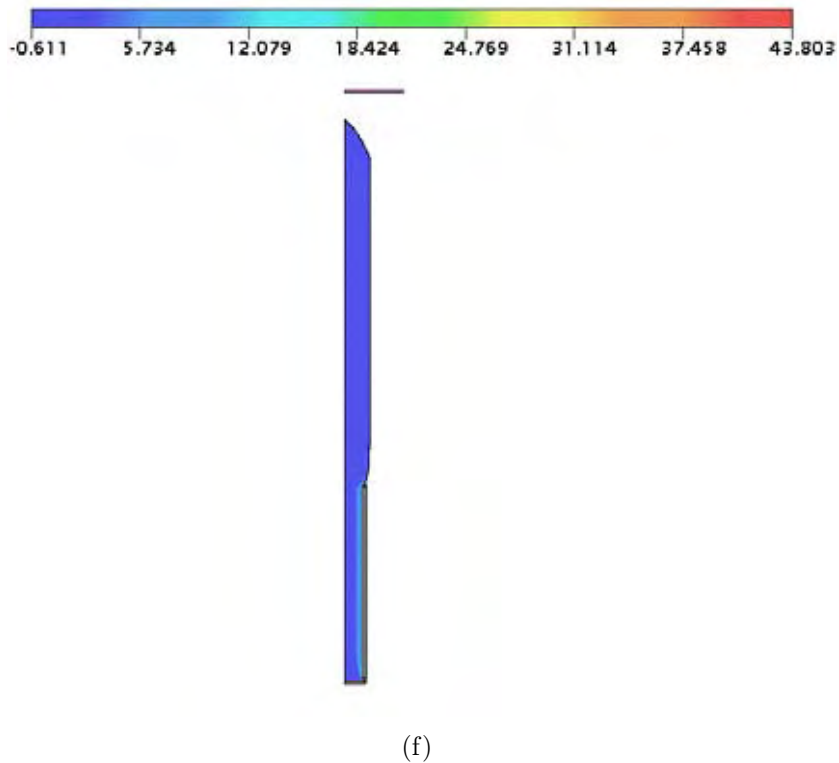
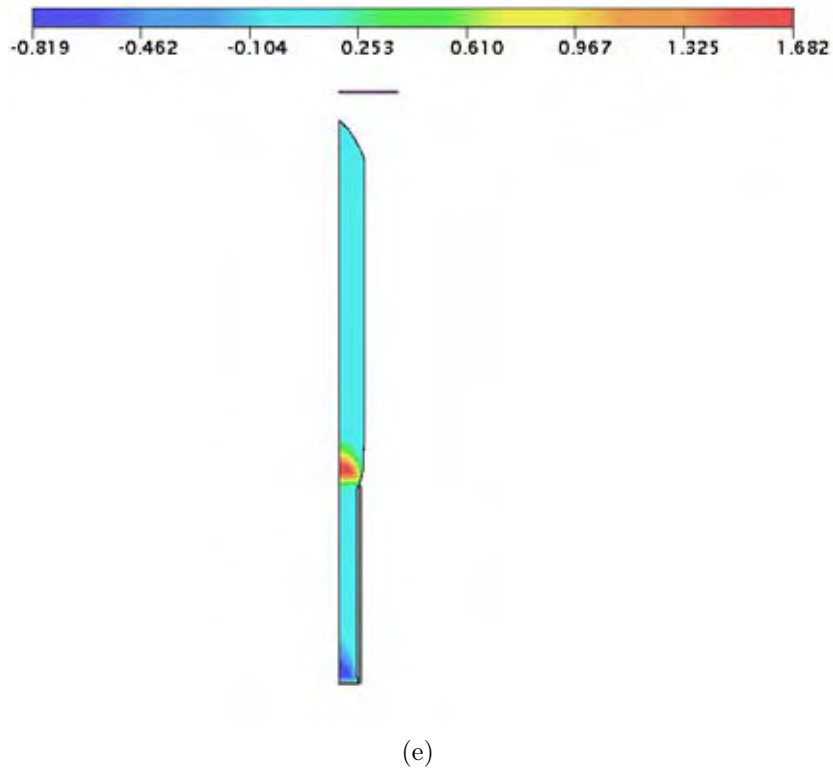
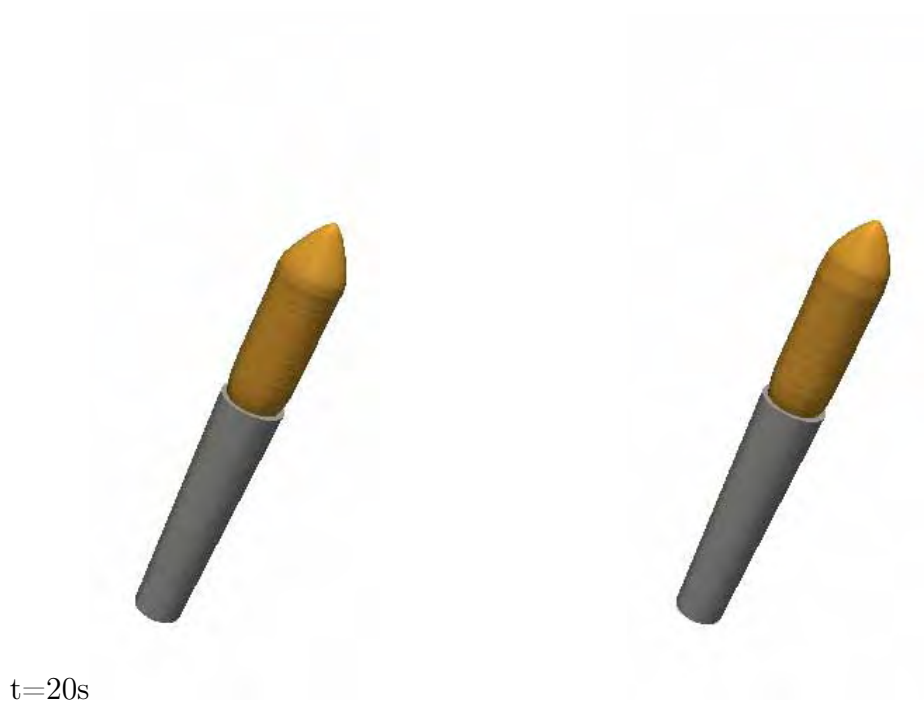
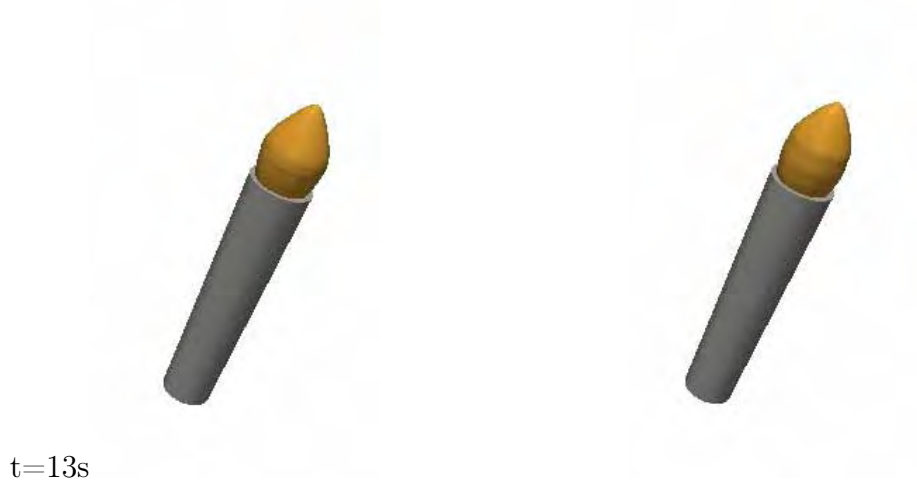
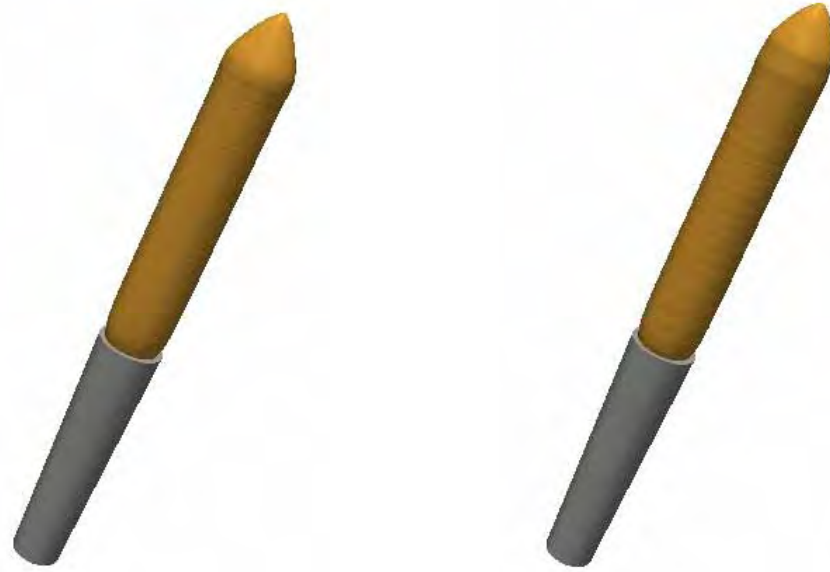


Figura 5.17: Resultados numéricos do inchamento do extrudado. $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\varepsilon = 0.01$ e $\xi = 0.1$. (a) Perfil da componente v da velocidade; (b) Perfil da componente u da velocidade; (c) Perfil da componente S^{rr} do tensor das tensões; (d) Perfil da componente S^{rz} do tensor das tensões; (e) Perfil da componente $S^{\theta\theta}$ do tensor das tensões; (f) Perfil da componente S^{zz} do tensor das tensões.

No trabalho [41] os autores estudaram a influência dos parâmetros ε e ξ no inchamento do extrudado, no caso da simulação numérica de escoamentos tridimensionais. Neste trabalho os autores concluíram que quanto menores os parâmetros ε e ξ , maior será a taxa de inchamento. Como verificação, apenas qualitativa, mediremos a taxa de inchamento variando ε e depois variando ξ .

A Figura 5.18 ilustra o inchamento do extrudado utilizando $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\xi = 0.01$. Na Figura 5.18 (a), tem-se $\varepsilon = 0.01$ e na Figura 5.18 (b), $\varepsilon = 0.5$. A razão do inchamento S_r nas Figuras 5.18 (a), em que o parâmetro $\varepsilon = 0.01$, chega a ser aproximadamente 3.5% maior do que na Figura 5.18 (b) onde o parâmetro $\varepsilon = 0.5$.





t=39s (a) $\varepsilon = 0.01$

(b) $\varepsilon = 0.5$

Figura 5.18: Simulação do inchamento do extrudado $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\xi = 0.01$. Variando ε ; (a) $\varepsilon = 0.01$; (b) $\varepsilon = 0.5$.

	$\varepsilon = 0.01$	$\varepsilon = 0.1$	$\varepsilon = 0.5$
S_r	1.3266	1.2952	1.2924

A Figura 5.19 ilustra o inchamento do extrudado utilizando $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\varepsilon = 0.01$. Na Figura 5.19 (a) tem-se $\xi = 0.01$ e na Figura 5.19 (b), $\xi = 0.5$. Nestas Figuras o parâmetro ξ , responsável pelo comportamento cisalhante do fluido, faz com que a razão do inchamento, S_r , seja bem menor no caso em que $\xi = 0.5$, chegando a aproximadamente 8.0% essa diferença.



t=13s

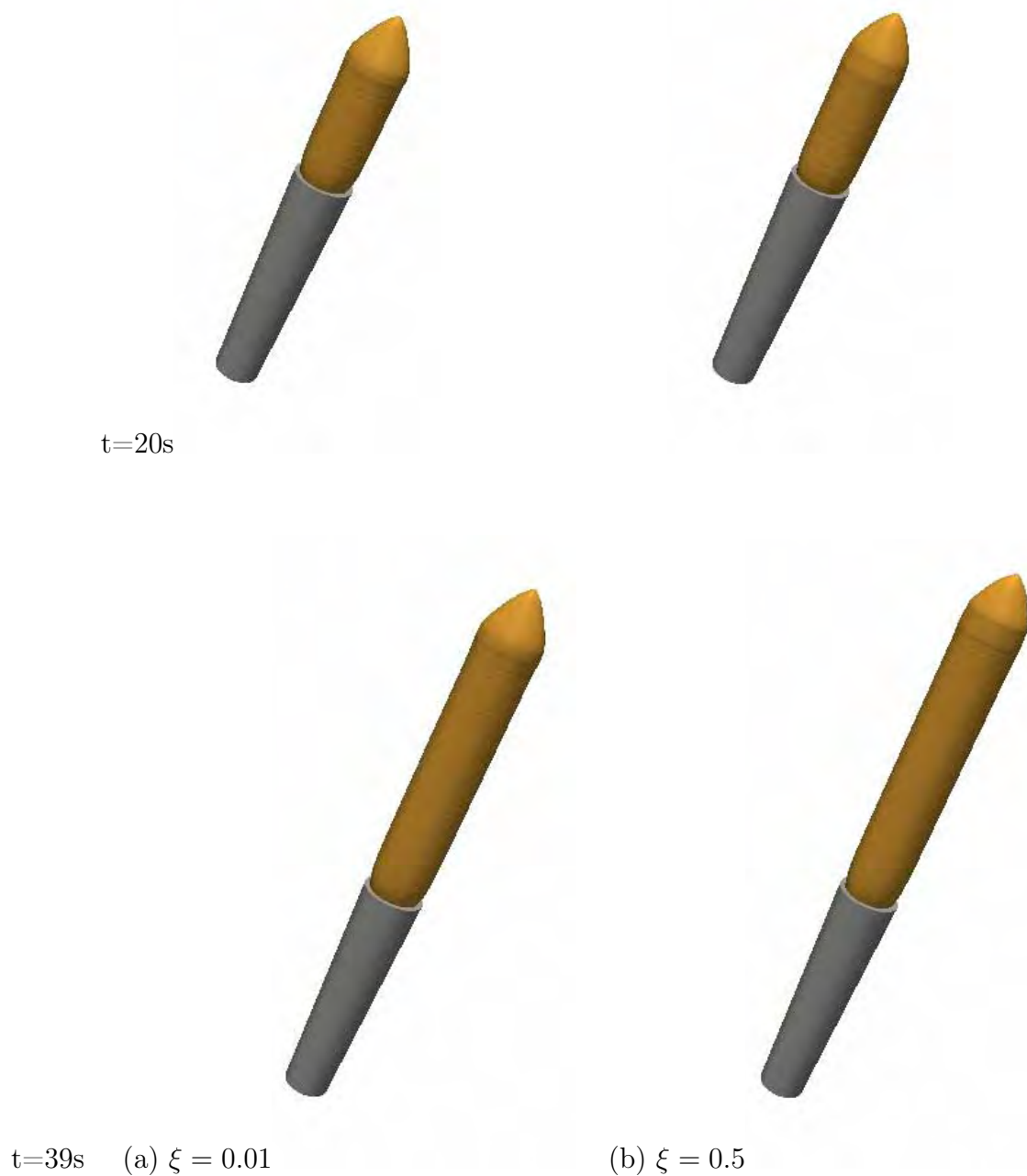


Figura 5.19: Simulação do inchamento do extrudado $Re = 1.0$, $Wi = 0.5$, $\beta = 0.3$, $\varepsilon = 0.01$. Variando ξ ; (a) $\xi = 0.01$; (b) $\xi = 0.5$.

Tabela 5.4: Taxa de Inchamento			
	$\xi = 0.01$	$\xi = 0.1$	$\xi = 0.5$
S_r	1.3266	1.3006	1.2834

Como previsto no trabalho [41], constatou-se nestas simulações que quando menores os parâmetros ε e ξ , menor a taxa de inchamento.

Conclusão

Neste trabalho apresentou-se o desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos axissimétricos de fluidos viscoelásticos com superfícies livres modelados pela equação constitutiva PTT. Implementou-se o método numérico na plataforma de alto desempenho denominada FREEFLOW-AXI.

Na verificação do método numérico utilizou-se o problema do escoamento totalmente desenvolvido em um tubo, considerando um fluido modelado pela equação constitutiva PTT reduzida a Oldroyd-B, ou seja, $\varepsilon = \xi = 0$. Os resultados numéricos obtidos foram comparados com a solução analítica do problema mostrando uma excelente concordância. Para mostrar a boa convergência do método numérico, fez-se testes de refinamento de malha.

Para verificar o desempenho do método numérico em simular escoamentos axissimétricos com superfícies livres de fluidos viscoelásticos modelados pela equação constitutiva PTT, os seguintes problemas foram simulados: Impacto de uma gota de fluido viscoelástico numa superfície rígida (*Impacting Drop*), *Splashing Drop* e o Inchamento do extrudado (*Dieswell*).

Na simulação do problema do *Impacting Drop*, obteve-se bons resultados entre a comparação de uma gota de fluido Newtoniano com uma gota de fluido PTT utilizando $\beta = 0.5$ e 0.9 , pois quando β tende a 1 o comportamento da gota PTT foi muito semelhante o comportamento da gota Newtoniana. Para complementar esta análise, variou-se os parâmetros ε e ξ e constatou-se que de fato esses parâmetros não exercem influência significativa no escoamento quando β se aproxima de 1. Portanto, para um estudo mais detalhado da influência desses parâmetros neste escoamento, utilizou-se $\beta = 0.1$. O parâmetro ξ exerce uma influência significativa e interessante, pois para $0 \leq \xi \leq 1$ a primeira contração da gota demora um pouco mais para ocorrer quando ξ aumenta, e esta contração é menor. O comportamento da gota vai se distanciando monotonicamente do comportamento da gota Oldroyd-B ($\varepsilon = \xi = 0$).

Variando o parâmetro ε percebeu-se que, ao incidir na placa rígida as gotas escoam por um tempo muito próximo, ou seja, a primeira contração dessas gotas ocorrem praticamente ao mesmo tempo. Entretanto, há uma grande diferença no tempo de contração: quanto maior for o valor de ε , menor é a contração da gota.

No *splashing drop* pode-se observar que o parâmetro ε tem influência significativa na altura do jato de Worthington: quanto maior for o valor desse parâmetro, menor será a altura do jato. Já o parâmetro ξ apresentou uma influência insignificante para este escoamento, visto que ao aumentarmos este parâmetro a altura do jato continua praticamente a mesma.

Várias simulações foram feitas para o inchamento do extrudado calculando-se as taxas de inchamento S_r , e verificou-se que ambos os parâmetros ε e ξ têm papéis importantes neste problema, sendo que, em alguns casos, para determinados valores de ε e ξ , o

inchamento do extrudado chega a ser 8.0% menor. Em concordância qualitativa com o trabalho [41], verificou-se que quanto menor o parâmetro ε maior é a taxa de inchamento. Analogamente, quanto menor o parâmetro ξ maior a taxa S_r .

Trabalhos Futuros

Este trabalho de Mestrado visou o estudo e o desenvolvimento de um método numérico baseado na metodologia GENSMAC para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres utilizando o modelo PTT. Como aplicação de tal metodologia buscou-se estudar a influência que os parâmetros ε e ξ do modelo PTT exercem sobre os escoamentos viscoelásticos com superfícies livres, em especial nos problemas do *Splashing Drop* e *Impacting Drop* que não tinham sido investigados até o momento nos trabalhos [29] e [41], os quais utilizaram metodologias baseadas nesta mesma teoria. Desta forma, seguindo na mesma linha deste trabalho, outros modelos viscoelásticos podem ser utilizados para expandir a aplicabilidade da plataforma de alto desempenho FREEFLOW-AXI e, principalmente para estudar a influência dos parâmetros particulares a cada modelo em escoamentos como *Splashing Drop*, *Impacting Drop* e *Dieswell*.

Os modelos viscoelásticos que podem ser utilizados para os trabalhos futuros e que a comunidade científica tem utilizado bastante são, por exemplo,

- **FENE-P:** Esse modelo constitutivo é baseado em descrições de molas não-lineares que possuem deformação máxima finita. As equações constitutivas básicas seguindo a formulação pelo tensor configuração [9], são:

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) + \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{A} - \frac{1}{Wi} f(tr(\mathbf{A})) (\mathbf{A} - \mathbf{I}), \quad (5.1)$$

$$\mathbf{S} = \frac{(1 - \beta)}{ReWi} f(tr(\mathbf{A})) (\mathbf{A} - \mathbf{I}), \quad (5.2)$$

onde \mathbf{S} e \mathbf{A} são os tensores não-Newtoniano e Conformação, respectivamente.

A função f , que depende do traço de \mathbf{A} , é dada por

$$f(tr(\mathbf{A})) = \frac{L^2}{L^2 - tr(\mathbf{A})}, \quad (5.3)$$

sendo L o parâmetro de extensibilidade.

- **Giesekus:** Este modelo é baseado em conceitos moleculares e ele representa bem muitas características de fluidos viscoelásticos. As equações constitutivas básicas deste modelo [17], são:

$$\mathbf{S} + \frac{\alpha\lambda}{\eta_P} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}) + \lambda \left\{ \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{S}) - \mathbf{S} \cdot \nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{S} \right\} = 2\eta_P \mathbf{D}, \quad (5.4)$$

sendo α o parâmetro de mobilidade.

Referências Bibliográficas

- [1] M. A. Alves, P. J. Oliveira, and F. T. Pinho. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *International journal for numerical methods in fluids*, 41:47–75, 2003.
- [2] M. A. M. Alves. Escoamentos de fluidos viscoelásticos em regime laminar: análise numérica, teórica e experimental. Tese de doutorado, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 2004.
- [3] A. Amsden and F. Harlow. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-4370, Los Alamos, NM, 1970.
- [4] M. L. O. Bambozzi. Freeflow-axi: Um ambiente de simulacao de escoamentos axissimetricos com superficies livres. Dissertacao de mestrado, ICMC/USP, 2002.
- [5] G. K. Batchelor. *An introduction of fluid dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1967.
- [6] R. B. Bird, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids*, volume 1. Wiley, New York, 1977. Fluid Mechanics.
- [7] R. B. Bird, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids. Vol 1 - Fluid Mechanics*. 2nd. Ed. Jonh Wiley e Sons, New York, 1987.
- [8] R. B. Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids*, volume 2. Wiley, New York, 1987. second ed.
- [9] R. B. Bird, P. J. Dotson, and N. L. Johnson. Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead-spring chain model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 7:213–235, 1980.
- [10] R. H. Chen, M. J. Kuo, S. L. Chiu, J. Y. Pu, and T. H. Lin. Impact of a compound drop on a dry surface. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 21:1886–1891, 2007.
- [11] J. M. Cheny and K. Walters. Extravagant viscoelastic effects in the worthington jet experiment. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 67:125–135, 1996.
- [12] J. M. Cheny and K. Walters. Rheological influences on the splashing experiment. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 86:185–210, 1999.
- [13] A. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes. *Mathematics of Computation*, 2:745–762, 1968.

- [14] M. J. Crochet and K. Walters. Numerical methods in non-newtonian fluid mechanics. *Annu. Rev, Fluid Mech.*, 15:241–260, 1983.
- [15] M. J. Crochet and K. Walters. *Numerical simulation of non-Newtonian flow*. Elsevier, 1984.
- [16] J. Davies and K. Walters. The behaviour of lubricants in journal bearings - a theoretical study. rheology of lubricants. *Ed. Davenport, T.C. Appl. Sci. Pub., Barking, England*, pages 13–51, 1972.
- [17] H. Giesekus. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 11:69–109, 1982.
- [18] D. F. Griffiths, D. T. Jones, and K. Walters. A flow reversal due to edge effects. *J. Fluid Mech.*, 36:161–175, 1969.
- [19] D. F. Griffiths and K. Walters. On edge effects in rheometry. *J. Fluid Mech.*, 42:379–399, 1970.
- [20] F. H. Harlow and J. E. Welch. The mac method. *Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [21] B. Horacek, K. T. Kiger, and J. Kim. Single nozzle spray cooling heat transfer mechanisms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48:1425–1438, 2005.
- [22] M. Ikegawa and H. Azuma. Droplet behaviors on substrates in thin-film formation using ink-jet printing. *JSME International Journal Series B*, 47:490–496, 2004.
- [23] M. Kawahara and N. Takeuchi. Mixed finite element method for analysis of viscoelastic fluid flow. *Comput. Fluids*, 5:33–45, 1977.
- [24] G. Mompean and M. Deville. Unsteady finite volume of oldroyd-b fluid through a three-dimensional planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 72:253–279, 1997.
- [25] S. Nigen and K. Walters. On the two-dimensional splashing experiment for newtonian and slightly elastic liquids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 97:233–250, 2001.
- [26] C. Oishi, F. Martins, M. Tomé, and M. Alves. Numerical simulation of drop impact and jet buckling problems using the extended pom - pom model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 169-170:91–103, 2012.
- [27] R. Owens and T. Phillips. *Computational Rheology*. Imperial College Press, London, 2002.
- [28] M. R. O. Pano and A. L. N. Moreira. Flow characteristics of spray impingement in pfi injection systems. *Experiments in Fluids*, 39:364–374, 2005.
- [29] G. S. Paulo, M. F. Tomé, and S. McKee. A marker-and-cell approach to viscoelastic free surface flows using the ptt model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 147:149–174, 2007.
- [30] M. G. N. Perera and K. Walters. Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. 1-flows associated with l-shaped and t-shaped geometries. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 2:49–81, 1977.

- [31] M. G. N. Perera and K. Walters. Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. 2-expansion-contraction-expansion problem. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 2:191–204, 1977.
- [32] N. Phan-Thien. A nonlinear network viscoelastic model. *Journal of Rheology*, 22(3):259–283, 1978.
- [33] N. Phan-Thien and R. I. Tanner. A new constitutive equation derived from network theory. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2:353–365, 1977.
- [34] F. T. Pinho. *Cálculo de Escoamentos de Fluidos não Newtonianos em Regime Laminar. Desenvolvimentos e Aplicações Recentes da Metodologia dos Volumes Finitos*. Provas de Agregação, Portugal, 2003.
- [35] M. Rein. Phenomena of liquid drop impact on solid and liquid surfaces. *Fluid Dyn. Res.*, 12:61–93, 1993.
- [36] M. E. Ryan and A. Dutta. A finite difference simulation of extrudate swell. In *Proceedings of Second World Congress of Chemical Engineering*, pages 277–281, 1981.
- [37] M. A. Silva. Desenvolvimento de um metodo numerico para simular escoamentos viscoelasticos axissimetricos com superficies livres. Dissertacao de mestrado, ICMC/USP, 2005.
- [38] R. I. Tanner. A theory of die-swell. *Journal of Polymer Science*, 8:2067–2078, 1970.
- [39] R. I. Tanner. A theory of die-swell revisited. *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.*, 129:85–87, 2005.
- [40] R. Temam. Sur l’approximation de la solution des equations de navier-stokes par la methode de pas fractionnaires (ii). *Archives of Rational Mechanics and Analysis*, 33:377–385, 1969.
- [41] M. Tomé, G. Paulo, F. Pinho, and M. Alves. Numerical solution of the ptt constitutive equation for unsteady three-dimensional free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 165:247–262, 2010.
- [42] M. F. Tomé, A. Castelo, J. Murakami, J. A. Cuminato, R. Minghim, M. C. F. Oliveira, N. Mangiavacchi, and S. McKee. Numerical simulation of axisymmetric free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 157:441–472, 2000.
- [43] M. F. Tomé, N. Mangiavacchi, A. Castelo, J. A. Cuminato, and S. McKee. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 106:61–106, 2002.
- [44] M. F. Tomé and S. McKee. Gensmac: a computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains. *Journal of Computational Physics*, 110:171–186, 1994.
- [45] M. F. Tomé, S. McKee, and K. Walters. A computational study of some rheological influences on the “splashing experiment”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 165:1258–1264, 2010.
- [46] M. Tome, L. Grossi, A. Castelo, J. A. Cuminato, S. McKee, and K. Walters. Die-swell, splashing drop and a numerical technique for solving the oldroyd b model for axisymmetric free surface flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 141:148–166, 2007.

- [47] K. Walters and N. D. Waters. On the use of a rheogoniometer. part i. steady shear. polymer systems: Deformation and flow. *Ed. Wetton, R.E. e R.W. Whorlow, Macmillan, London*, pages 212–235, 1968.
- [48] J. E. Welch, F. H. Harlow, J. P. Shannon, and B. J. Daly. The mac method. Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3425, Los Alamos, 1966.
- [49] A. M. Worthington. *A study of splashes*. London:Longmans, Green, 1967.
- [50] W. Wu, X. L. X. Wang, and F. Zjou. Spray-coating fluorine-free superhydrophobic coating with easy reparability and applicability. *Applied Materials and Interfaces*, 1:1656–1661, 2009.