



VII–Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS VISCOELÁSTICOS: DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA DE ANÁLISE UTILIZANDO O SOFTWARE *OPENFOAM* E EQUAÇÕES CONSTITUTIVAS DIFERENCIAIS

Jovani L. Fávero¹, Argimiro R. Secchi¹, Nilo S. M. Cardozo¹, Hrvoje Jasak²

¹ GIMSCOP (Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos Químicos e Biotecnológicos)

² Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, Croatia and Wikki Ltd, United Kingdom.

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,

E-MAIL: {[@enq.ufrgs.br](mailto:favero, nilo), arge@peq.coppe.ufrj.br, h.jasak@wikki.co.uk}

Palavras Chaves: Fluidos viscoelásticos, modelo de Giesekus, contração plana, simulação numérica, OpenFOAM.

Resumo: Neste trabalho é apresentada uma nova ferramenta de CFD para simulações de fluidos viscoelásticos. A implementação do solver foi feita no pacote de CFD OpenFOAM com intuito de se ter uma maior flexibilidade para trabalhar com geometrias complexas, malhas não estruturadas, correções para malhas não ortogonais, uso de malhas móveis, grande variedade de esquemas de interpolação e solvers para o sistema linear discretizado e paralelização do processamento de dados. Foi feita a reprodução das simulações feitas por Azaiez et al.[21] usando o modelo não linear de Giesekus para uma contração plana 4:1 e também uma comparação com dados experimentais de velocidade e tensões obtidos por Quinzani et al.[22] a partir de uma solução de 5% em peso de poli-isobutileno (PIB) em tetradecano (C_{14}). Com os resultados obtidos é possível validar o solver implementado e pretende-se, numa próxima etapa, fazer simulações usando modelos com mais de um modo de relaxação para se obter resultados mais precisos aos experimentais para a tensão em locais onde altas taxas de deformação são observadas.

1. Introdução

A utilização de produtos de origem polimérica é uma necessidade da sociedade moderna e basta olharmos a nossa volta para vermos o quanto eles estão presentes em nossas vidas. Como exemplos, podem-se citar desde a velha caneta até o teclado do computador, a quase totalidade das embalagens para produtos alimentares, peças para automóveis e eletrodomésticos, órgãos artificiais, artefatos para a indústria aeroespacial, entre uma enormidade de outros casos em que se pode citar.

Todos esses produtos passaram antes por algum processo de transformação, ou seja, operações que transformaram a matéria-prima (resina virgem) em um produto final para o consumo. Essas operações são feitas sobre o polímero fundido ou em solução. Neste momento percebe-se um comportamento que distingue os fluidos poliméricos dos fluidos Newtonianos. Nos fluidos poliméricos, além da viscosidade não depender linearmente da taxa de deformação (comportamento não-Newtoniano), propriedades viscosas e elásticas são presenciadas ao mesmo tempo e, devido a isso, eles são conhecidos como

fluidos viscoelásticos. Esta propriedade é responsável por conferir algumas características especiais a esses fluidos, como o efeito de inchamento de extrudado (“die swell”) e a presença de diferenças de tensões normais em escoamentos por cisalhamento. Uma análise mais detalhada desses efeitos podem ser encontrados em Bird et al. [1] e Macosko [2].

Existem muitos estudos teóricos sobre fluidos viscoelásticos, contudo o assunto ainda é desafiador e recebe muita atenção. Juntamente com as dificuldades básicas associadas às equações de Navier-Stokes é acrescido ainda a resolução de uma equação constitutiva que descreve a reologia do polímero e representa o efeito de “memória” que é ocasionado pelas grandes e complexas cadeias poliméricas. Como é de se esperar, a complexidade do problema aumenta consideravelmente, uma vez que essas equações constitutivas apresentam termos não-lineares e possuem natureza hiperbólica. Além disso, tem-se ainda um considerável acréscimo do número de variáveis do problema a ser resolvido. Considerando um fluido Newtoniano num escoamento tridimensional



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

deve-se resolver para 4 variáveis (a pressão e o vetor velocidade), para um fluido viscoelástico deve-se resolver para 10 variáveis (a pressão, o vetor velocidade e o tensor simétrico das tensões poliméricas). Como essas variáveis são resolvidas para cada ponto da malha computacional em cada instante de tempo, tem-se que o problema torna-se ainda mais crítico quando se deseja soluções muito precisas, pois o uso de malhas muito refinadas se faz necessário [3].

Muitos modelos para fluidos viscoelásticos podem ser encontrados na literatura, contudo ainda não se tem um modelo que sirva adequadamente para todos os fluidos, por exemplo, um modelo pode se adaptar bem para um caso, porém, apresentar limitações para descrever outro.

A primeira equação desenvolvida para descrever o comportamento de um fluido viscoelástico linear (FVL), foi o modelo de Maxwell [4]. Os modelos para fluido viscoelástico linear não oferecem muita dificuldade para se obter sua solução numérica, porém apresentam a limitação de serem válidos apenas para pequenas deformações.

Para se ter uma melhor representação sob taxas de deformação mais elevadas deve-se usar modelos mais sofisticados conhecidos como modelos para fluido viscoelástico não-linear. Esses modelos são mais complexos que os FVL por apresentarem termos não lineares que podem dificultar a obtenção de soluções numéricas estáveis. Nesta categoria de modelos são muito conhecidos os modelos de Oldroyd-B [5], Giesekus [6], FENE-P (“*Finitely Extensible Nonlinear Elastic-Peterlin*”) [7] que derivam da teoria cinética e o modelo de Phan-Thien-Tanner (PTT) que deriva da teoria de rede de soluções concentradas e polímeros fundidos (“*Network theory of concentrated solutions and melts*”) [9]. Resultados mais coerentes com os dados experimentais podem ser obtidos com a versão multimodo destes modelos, onde ao invés de se usar somente um tempo de relaxação é usado um espectro de relaxação. É natural que, com isso, a dimensão do problema a ser resolvido e o custo computacional aumentem, como mencionado em Azaiez et al. [9].

Inúmeros trabalhos usando um ou mais dos modelos diferenciais não lineares apresentados acima podem ser encontrados na literatura. Uma dificuldade presente em todos estes trabalhos, independente do método de discretização (elementos finitos ou volumes finitos), do método iterativo de solução das equações e equações constitutivas utilizadas, é o conhecido HWNP (“*High Weissenberg Number Problem*”). Este consiste na dificuldade de obtenção de soluções em número de *Weissenberg* (*We*) ou *Deborah* (*De*) elevados. Estes números adimensionais são dados pela razão entre o tempo característico de relaxação do polímero e um tempo característico do escoamento, sendo que quanto maior este número, mais pronunciado é o efeito elástico. Uma listagem mais completa de modelos para fluidos viscoelásticos, com uma maior abordagem, e até mesmo, comparações entre eles, podem ser encontrados em Bird et al. [1], Macosko [2] e Larson [10].

Devido ao esse problema a elevados valores de *We* muitas estratégias como alguns esquemas de interpolações especiais, como por exemplo, o de Alves et al. [11] e Muniz et al. [12] e metodologias numéricas como a EVSS (“*elastic viscous split-stress*”) desenvolvida primeiramente por Perera e Walters [13] para o método das diferenças finitas e posteriormente para o método de elementos finitos por Rajagopalan et al. [14], o DEVSS (“*discrete elastic viscous split-stress*”) de Guénette e Fortin [15] e o AVSS (“*adaptive viscosity stress splitting scheme*”) de Sun et al. [16] entre muitas outras derivações destes métodos que têm surgido para tentar contornar o problema. Com a utilização dos métodos de EVSS e DEVSS conseguiu-se chegar a soluções estáveis para valores bem mais elevados de *De*. Ambos esses métodos são muito utilizados, porém o segundo, que é uma modificação do primeiro, é aplicável facilmente a modelos mais complexos uma vez que, ao contrário deste primeiro, não precisa ser feita uma alteração de variáveis nas equações constitutivas. Um estudo comparativo entre o método BSD (“*both sides diffusion*”), que é um caso particular do DEVSS, e a formulação viscosa (“*viscous formulation*”) para escoamentos transientes foi feito por Xue et al. [17], onde ele chegou a conclusão que a formulação viscosa apesar de ser menos estável que a BSD conduz a resultados transientes mais precisos, uma vez que não introduz difusão artificial na equação de conservação de quantidade de movimento. Para o estado estacionário os dois métodos chegaram a soluções idênticas.

A existência de softwares para resolução de problemas envolvendo fluidos viscoelásticos é ainda muito limitada, sendo que a maioria deles são desenvolvidos e utilizados somente no meio acadêmico.

Muito interessante seria ter disponível um solver para fluidos viscoelásticos em um pacote de CFD (“*Computational Fluid Dynamics*”) conhecido e confiável, para poder ser usado tanto no meio acadêmico como em indústrias. Com base nisso, obteve-se motivação para o presente trabalho, ou seja, a fim de se poderem usar recursos avançados de CFD e aplica-los a fluidos viscoelásticos, como por exemplo, simular geometrias complexas, utilizar malhas móveis e não-estruturadas, correções para malhas não-ortogonais, ter em mãos diferentes esquemas de interpolação, bons *solvers* para o sistema linear de equações discretizado, possibilidade de paralelização de processamento de dados entre outras vantagens que um bom pacote de CFD fornece, foi feito a implementação de modelos constitutivos para fluidos viscoelásticos em um pacote escolhido. Este pacote deve conduzir a soluções precisas, consumindo tempo e recursos computacionais não proibitivos. Além disso, tem que ser robusto e versátil. Resumindo, o software deve ter o melhor balanço possível entre estas propriedades, e estar de acordo com os objetivos a serem alcançados pelo seu uso. A resposta para qual seria o pacote de CFD a ser usado veio imediatamente quando se conheceu o OpenFOAM (“*Open Source Field Operation and Manipulation*”) [18, 19]. O OpenFOAM é um pacote de



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

CFD gratuito e muito flexível que, além dos muitos *solvers* padrões que o pacote já possui implementado para o caso dos problemas mais gerais de fluidos Newtonianos (escoamento (in)compressível, escoamento laminar e turbulento, escoamentos multifásicos, etc.), permite também ao usuário construir *solvers* específicos ao seu problema. Para tal, basta algum conhecimento em linguagem de programação C++, a qual o software foi implementado, e o entendimento da estrutura do algoritmo do problema a ser resolvido. Toda a metodologia de CFD contida no OpenFOAM pode ser encontrada no trabalho de Jasak [20], um dos principais desenvolvedores e mantenedor do software.

Para validar as soluções encontradas com o solver desenvolvido no OpenFOAM foi feita uma comparação com os resultados obtidos por Azaiez et al. [21] que simularam o escoamento de um fluido através de uma contração plana 4:1 e compararam com as medidas experimentais de LDV (“*laser-Doppler velocimetry*”) e FIB (“*flow-induced birefringence*”) feitos por Quinzani et al. [22] com uma solução polimérica de 5% em peso de poli-isobutileno (PIB) em tetradecano (C₁₄). O escoamento de fluidos viscoelásticos por uma contração plana abrupta (“*abrupt planar contraction*”) é de fundamental importância não só para se fazer medidas de propriedades reológicas, mas também em aplicações industriais envolvendo moldagem e extrusão de polímeros fundidos e soluções.

2. Metodologia / Materiais e Métodos

Nos itens a seguir será feita uma descrição sobre a formulação matemática usada no presente trabalho e a forma como é resolvido o problema envolvendo escoamento de fluido viscoelástico.

2.1. Modelo Matemático

As equações que governam o fluxo laminar, incompressível e isotérmico de fluidos viscoelásticos são as equações de conservação de massa (continuidade):

$$\nabla \cdot (U) = 0 \quad (1)$$

e movimento:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \quad (2)$$

juntamente com uma equação constitutiva mecânica que descreve a relação entre tensão e deformação. Nestas equações ρ é a massa específica, U é o vetor velocidade, p é a pressão e τ é o tensor das tensões. O tensor das tensões pode ser dividido em uma contribuição viscosa, conhecida como contribuição Newtoniana ou do solvente τ_s e uma contribuição elástica que se deve a contribuição polimérica τ_p . Sendo assim tem-se:

$$\tau = \tau_s + \tau_p \quad (3)$$

A primeira parcela do lado direito da Eq. 3 correspondente a contribuição do solvente e é dada por:

$$\tau_s = 2\eta_s D \quad (4)$$

onde η_s é o coeficiente de viscosidade do solvente e D é o tensor taxa de deformação dado por:

$$D = \frac{1}{2} (\nabla U + [\nabla U]^T) \quad (5)$$

A contribuição elástica, correspondente a contribuição polimérica, é obtida a partir da solução de uma equação diferencial. Existe uma grande variedade de equações constitutivas, como já comentado anteriormente. Um modelo muito usado é o modelo de Giesekus [6] que para o caso multimodo é dado por:

$$\tau_{P_K} + \lambda_K \tau_{P_{K(1)}} + \alpha_K \frac{\lambda_K}{\eta_K} (\tau_{P_K} \cdot \tau_{P_K}) = 2\eta_{P_K} D \quad (6)$$

onde λ e η_P são o tempo de relaxação e a viscosidade polimérica à taxa de deformação nula para cada modo de relaxação K , respectivamente e α é uma constante chamada de fator de mobilidade, e está associada com o movimento browniano e arraste hidrodinâmico das moléculas de polímero no meio e de acordo com Bird et al. [1] predições fisicamente coerentes são observadas com $0 \leq \alpha_K \leq 1/2$. O modelo de Giesekus conduz a uma segunda diferença de tensões normais ($N_2 = \tau_{yy} - \tau_{zz}$) diferente de zero. Contudo, este modelo pode não trazer bons resultados em escoamentos livres de cisalhamento. Na Eq. 6 temos também que:

$$\tau_{P_{K(1)}} = \frac{D}{Dt} \tau_{P_K} - [(\nabla U)^T \cdot \tau_{P_K}] - [\tau_{P_K} \cdot \nabla U] \quad (7)$$

é a derivada convectiva superior no tempo do tensor das tensões elástico. A definição desta derivada parte do princípio que tensões são produzidas somente quando há deformação do material, e não por simples rotação [1, 2]. Na Eq. 7 tem-se a derivada material como sendo:

$$\frac{D}{Dt} \tau_{P_K} = \frac{\partial}{\partial t} \tau_{P_K} + U \cdot \nabla \tau_{P_K} \quad (8)$$

Na equação de quantidade de movimento é necessária a variável τ_p que é calculada pelo somatório da contribuição de todos os K modos, sendo assim expresso por:

$$\tau_p = \sum_{K=1}^n \tau_{P_K} \quad (9)$$

2.2. Metodologia usada para obtenção de soluções a elevados valores de Deborah

Como já descrito anteriormente, existem uma grande variedade de métodos que possibilitam a obtenção de valores de De ou We mais elevados. Nesse trabalho optou-se pelo método DEVSS de Guénette e Fortin [15] por ser este um método que pode facilmente ser estendido



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

a outros modelos mais complexos. Nesse método é introduzido um termo difusivo adicional em cada lado da equação de movimento. A equação final assume a forma:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) - (\eta_s + \phi) \nabla \cdot (\nabla U) \quad (10)$$

$$= -\nabla p + \nabla \cdot \tau_p - \phi \nabla \cdot (\nabla U)$$

onde ϕ é um número positivo, usualmente, mas não necessariamente, η_p . Percebe-se que a equação acima é idêntica a equação de movimento original, a não ser na forma discreta, pois, como é praticada em CFD, os termos que estão do lado esquerdo da equação são resolvidos implicitamente e os do lado direito da equação são resolvidos explicitamente.

2.3. Apresentação do OpenFOAM

O OpenFOAM utiliza o método dos volumes finitos (FVM) [23] para resolução de equações diferenciais parciais. As variáveis seguem o arranjo co-localizado e a pressão e a velocidade são resolvidas de forma segregada. É utilizado um procedimento de correção de pressão a fim de tratar o acoplamento entre pressão velocidade. Para problemas em que se deseja somente o estado estacionário pode-se utilizar o SIMPLE (“Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations”) [22], já para o caso de escoamentos transientes deve-se usar um método mais preciso e assim é utilizado o PISO (“Pressure Implicit Splitting of Operators”) [23]. Maiores detalhes sobre esses métodos e sua implementação no OpenFOAM podem ser obtidos em Jasak [20]. O OpenFOAM, utilizando-se das vantagens da linguagem C++ orientada a objetos, facilita a implementação de complicados modelos matemáticos e físicos. A linguagem C++ fornece enormes vantagens para construção de softwares de engenharia, como exemplo pode-se citar baixo custo de manutenção, reusabilidade, poucos “bugs” e facilidade de extensão. Pode-se fazer uso de abstração de dados, sobrecarga de operadores, uso de templates, etc. Com o uso destes recursos o OpenFOAM, permite trabalhar as equações diretamente na forma vetorial ou tensorial, sem ter que decompor as equações em todas as suas componentes. Assim, é possível o desenvolvimento de uma linguagem simbólica semelhante à linguagem matemática que descreve os problemas. Isso facilita a implementação de um novo solver, como se pode verificar abaixo:

Linguagem matemática:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi U) - \nabla \cdot \mu \nabla U = -\nabla p$$

Linguagem usada para implementação no OpenFOAM:

```
Solve(
fvm::ddt(rho, U) + fvm::div(phi, U) - fvm::laplacian(mu, U)
==
- fvc::grad(p)
);
```

onde a classe fvm (“finite volume method”) é usada para operações implícitas e os resultados são armazenados em uma matriz e a classe fvc (“finite volume calculus”) é usada para operações explícitas e retorna um campo geométrico.

O OpenFOAM permite o uso de diferentes esquemas de interpolações para cada termo da equação, por exemplo, pode-se usar um esquema *upwind* para o termo convectivo e um esquema de diferenças centrais (CD) para o termo difusivo. Para o termo da derivada temporal pode-se usar o método de *Euler*, *Crank Nicholson* ou *backward*. O primeiro é de primeira ordem e os dois últimos de segunda ordem. Para o termo convectivo, que é o mais crítico, existem uma grande variedade de esquemas de interpolação que podem ser usados, como *upwind*, QUICK (“Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics”), esquemas TVD (“Total Variation Diminishing”), NVD (“Normalised Variable Diagram”) e CD (“Central Differencing”) para citar alguns. Existem limitadores como *van Leer*, SUPERBEE, MINMOD, etc. Para o operador gradiente, além do método de integração de Gauss, pode-se optar também pelo método dos mínimos quadrados.

O OpenFOAM apresenta uma grande variedade de solvers para o sistema de equações algébricas discretizado. Para citar alguns; PCG (“Preconditioned conjugate gradient”) para matrizes simétricas, PBiCG (“Preconditioned biconjugate gradient”) para matrizes assimétricas, Gauss Seidel e GAMG (“Generalised geometric-algebraic multi-grid”), BiCGSTAB (“Bi Conjugate gradient stabilized”), entre outros. Pode-se optar por uma vasta opção de condicionadores também, como por exemplo: DIC (“Diagonal incomplete-Cholesky”) simétrico e DILU (“Diagonal incomplete-LU”) assimétrico, FDIC (“Faster diagonal incomplete-Cholesky”) que é um DIC com caching, AMG (“Algebraic multi-grid”). Uma abordagem mais detalhada dos solvers e condicionadores pode ser encontrada em Jasak [20].

Outro ponto importante em um problema de CFD é a aplicação das condições de contorno. O OpenFOAM apresenta implementadas as principais condições de contorno, como entrada de massa (“inlet”), saída de massa (“outlet”), parede fixa ou móvel (“wall”), condição atmosférica (“atmospheric”), simetria (“simetry”), entre outras. Porém nada impede ao usuário criar sua própria condição de contorno, caso lhe for necessário. As condições podem ser impostas como uniformes ou não uniformes.

Para condições iniciais o OpenFOAM também permite a entrada de um campo uniforme (“uniform field”) ou não uniforme.

Referente a malhas, o OpenFOAM possui seu próprio gerador que funciona com blocos, porém não possui ainda um CAD para criação de geometrias. A montagem da geometria é feita toda em arquivo de dados. Depois de criada a geometria tem-se um bom controle sobre a malha a ser gerada, como refinamento em locais específicos do domínio. O OpenFOAM importa malhas de



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

diversos softwares também, como o GMESH, SALOME, FLUENT, ANSYS, GAMBIT, TETGEN, NETGEN, pois trabalha com malhas não estruturadas em 3D do tipo hexaédrica, prismática, piramidal, tetraédrica, etc. Ferramentas para utilização de malhas móveis também podem ser usadas. Isso é uma solução muito atraente em problemas onde há necessidade de refinamentos em locais específicos com o andamento da simulação ou em casos onde existe uma ou mais condições de contorno móveis.

Ao leitor que queira saber maiores informações sobre todos estes tópicos abordados e outros como, a correção de Rhie-Chow no OpenFOAM, para se citar um exemplo, deve procurar em Jasak [20].

2.4. Implementação do solver e procedimento de solução

O solver para simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos segue a formulação descrita anteriormente. Tanto a formulação viscosa quanto a DEVSS foram implementadas. Com a formulação viscosa pretende-se obter soluções mais precisas para escoamentos transientes, já para o estado estacionário a DEVSS é muito mais estável para valores de De mais elevados. Vários modelos constitutivos para descrever a reologia de polímeros foram implementados, como o Maxwell [4], Oldroyd-B [5], Giesekus [6], FENE-P [7], FENE-CR [25], Phan-Thien-Tanner linear (LPTT) e Phan-Thien-Tanner exponencial (EPTT) [9]. Todos esses modelos foram implementados na forma multimodo.

O procedimento usado para resolver o problema de escoamentos de fluidos viscoelásticos pode ser resumido em 4 passos:

1. Considerando-se o campo de velocidade U^* , pressão p^* e tensão τ^* conhecido a equação de quantidade do movimento é resolvida implícitamente para cada componente do vector velocidade, obtendo-se U^{**} . A pressão e o tensor das tensões entram como um termo fonte desta equação, ou seja, o gradiente da pressão e o divergente da tensão, entram de forma explícita e são utilizados valores calculados do passo anterior.
2. Com os novos valores de velocidade U^{**} calcula-se o novo campo de pressão p^{**} usando uma equação para a pressão e faz a correção da pressão e velocidade para satisfazer a equação de conservação de massa. Aqui se pode optar por usar o algoritmo SIMPLE ou o mais preciso PISO para escoamentos transientes.
3. Com o campo de velocidades corrigido para satisfazer a equação de conservação de massa faz-se o cálculo de cada componente do tensor das tensões τ^{**} usando a equação constitutiva pretendida.
4. Para soluções mais precisas em escoamentos transientes pode-se iterar algumas vezes os passos 1, 2 e 3 num mesmo instante de tempo.

2.5. Definição do problema

No trabalho de Azaiez et al. [21] foi feita uma comparação entre resultados de simulações numéricas usando o método de elementos finitos (FEM) e o modelo de Giesekus [6] com dados experimentais obtidos por Quinzani et al. [22] a partir de medidas com LDV (“laser-Doppler velocimetry”) e FIB (“flow-induced birefringence”) sobre uma solução polimérica de 5% em peso de poli-isobutileno (PIB) em tetradecano (C_{14}). No presente trabalho deseja-se usar os resultado de Azaiez et al. e de Quinzani et al. para validar o solver para fluido viscoelástico criado no OpenFOAM.

A Fig. 1 mostra um esboço da geometria utilizada. Quinzani et al. [22] utilizaram em seus experimentos uma contração plana, sendo que a seção anterior a contração possui largura de $2H = 0.0254$ m e a posterior possui largura de $2h = 0.0064$ m. Consequentemente a razão da contração é de 3.97:1. É usado o sistema de coordenadas cartesiano com origem no plano da contração.

Um estudo detalhado para o campo de velocidade e tensão é feito para uma única condição de fluxo, correspondente a corrida (5) do artigo de Quinzani et al. [22]. O fluxo é caracterizado por dois números adimensionais, o número de Reynolds (Re) e o número de Deborah (De).

$$Re_o = \frac{2\rho\langle U \rangle h}{\eta_o}, De_o = \frac{\lambda\langle U \rangle}{h} = \lambda\langle \dot{\gamma} \rangle \quad (11)$$

Onde, $\langle U \rangle$ é a velocidade média no canal menor, $\eta_o = \eta_p + \eta_s$ e $\langle \dot{\gamma} \rangle$ é a taxa de deformação característica.

$$\langle \dot{\gamma} \rangle = \frac{\langle U \rangle}{h}, \langle U \rangle = \frac{Q}{2Wh} \quad (12)$$

com $W = 0.254$ m sendo a profundidade do canal e Q a vazão volumétrica. A tabela 1 contém os dados referente a corrida (5) encontrada em [22].

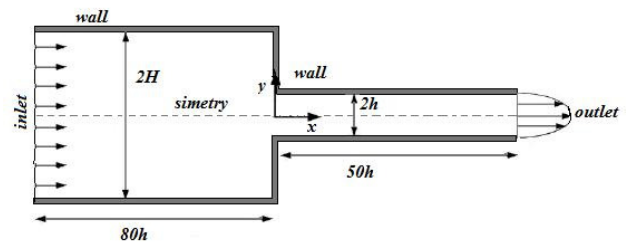


Fig 1. Esboço da geometria utilizada.

Tabela 1: Condições do escoamento.

Q [$cm^3 s^{-1}$]	$\langle U \rangle$ [$cm s^{-1}$]	$\langle \dot{\gamma} \rangle$ [s^{-1}]	Re_o	De_o
252	15.5	48.4	0.56	1.45

* Quinzani et al. [22] usaram o modelo UCM (“upper convected Maxwell”) para encontrar as propriedades viscoelásticas e encontraram um tempo de relaxação $\lambda = 0.06$ s obtendo então um $De_o = 2.90$.

O comprimento do canal anterior a contração é de $80h$ e $50h$ para a parte posterior a contração. Na Fig. 1 as condições de contorno são de não escorregamento nas paredes (“wall”), ou seja, velocidade zero e de simetria



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

(“*simetry*”) na linha central. Na entrada (“*inlet*”) será dada uma condição uniforme de entrada de massa que corresponde a velocidade média no canal menor dividida por quatro. Na saída (“*outlet*”) é usada a condição de *Newmann*, onde o gradiente da velocidade é igual a zero.

A partir dos dados experimentais de Quinzani et al., Azaiez et al. encontraram os seguintes parâmetros para o modelo de Giesekus. A massa específica usada foi de $\rho = 803.87 \text{ [kg/m}^3\text{]}$.

Tabela 2: Parâmetros do modelo disponíveis em [21].

Modelo	α [–]	λ [s]	η_p [Pa.s]	η_s [Pa.s]
Giesekus	0.15	0.03	1.422	0.002

Como condição inicial foi dado um valor igual a zero para todas as variáveis. Foi utilizado *Crank Nicholson* para o termo temporal, *upwind* para os termos convectivos e *diferenças centrais* para os demais termos das equações. Como solvers para o sistema linear discretizado usou-se CG (“*Conjugate gradient*”) com condicionamento AMG (“*Algebraic multi-grid*”) para a pressão. Para a velocidade e a tensão usou-se BiCGSTAB (“*Bi conjugate gradient stabilized*”) com um condicionamento *Cholesky*. A tolerância absoluta para a pressão foi de $1.0e^{-7}$ e para a velocidade e tensão $1.0e^{-6}$.

3. Resultados

Serão apresentados agora os resultados obtidos com os parâmetros descritos na seção anterior e o modelo de Giesekus [6]. Os resultados mostrados correspondem ao tempo em que se chegou ao estado estacionário e a solução convergiu.

Comparações com os dados simulados por Azaiez et al. e os dados experimentais obtidos por Quinzani et al. serão ilustradas.

A Fig. 2 trás uma ilustração da malha usada para estas simulações e a tabela 3 trás mais informações relativas a mesma. Usou-se nesse trabalho uma malha mais refinada que a do trabalho de Azaiez et al. O refinamento foi feito junto as paredes e próximo a contração, por ser ali o local onde ocorre os maiores gradientes das variáveis. A malha usada foi toda hexaédrica.

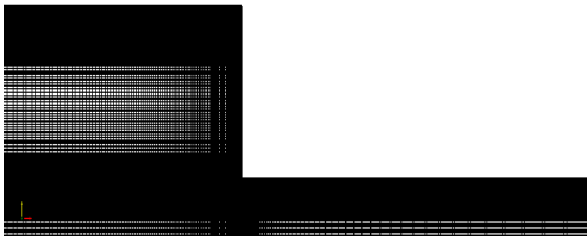


Fig. 2: Malha computacional.

Tabela 3: Características da malha.

Número de CVs	$\Delta x_{ref} / h$	$\Delta y_{ref} / h$
20700	0.0065	0.017

A seguir é ilustrado as componentes do campo de tensões τ_{xx} , τ_{xy} , τ_{yy} e as linhas de corrente, respectivamente para esta malha.

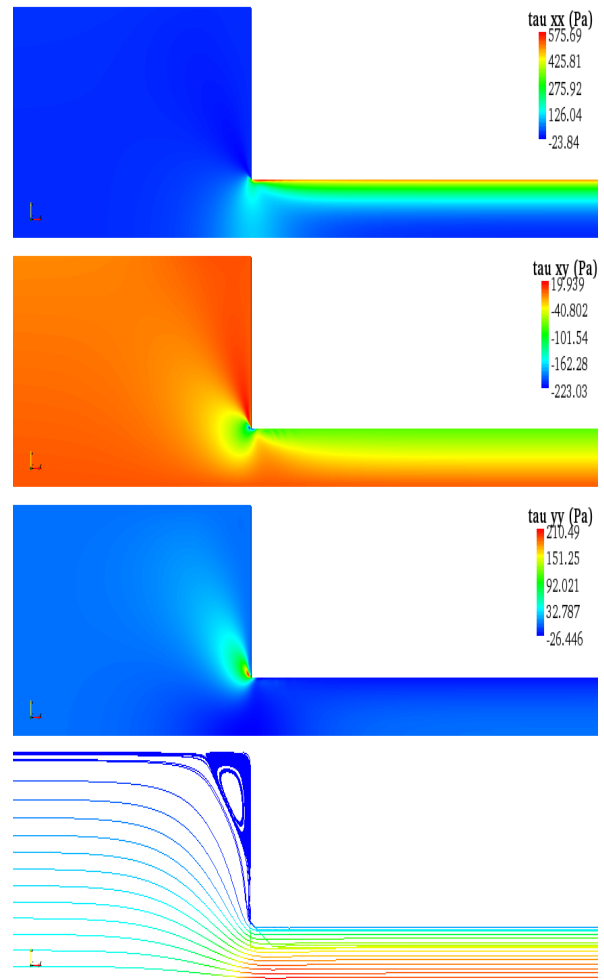


Fig. 3: Campo de pressão, velocidade, tensão e linhas de corrente.

Percebe-se que os resultados obtidos com uma malha bem refinada conseguem captar bem os efeitos próximos ao canto reentrante, uma vez que os volumes de controle nessa região são extremamente pequenos. Percebe-se também que esta é a região mais crítica desse problema, onde surgem os maiores gradientes.

3.1. Dinâmica na seção anterior a contração

Na Fig. 4 é feita uma comparação com os resultados obtidos por Azaiez et al. e Quinzani et al. para o perfil de velocidade U_x num corte lateral ao escoamento na seção anterior a contração. Na Fig. 5 essa comparação é feita para o perfil axial da velocidade U_x . As Fig. 6 e 7 fazem esta mesma comparação para a componente τ_{xy} das tensões e as Fig 8 e 9 para a primeira diferença de tensões normais ($N_I = \tau_{xx} - \tau_{yy}$).



21, 22 e 23 de outubro de 2008

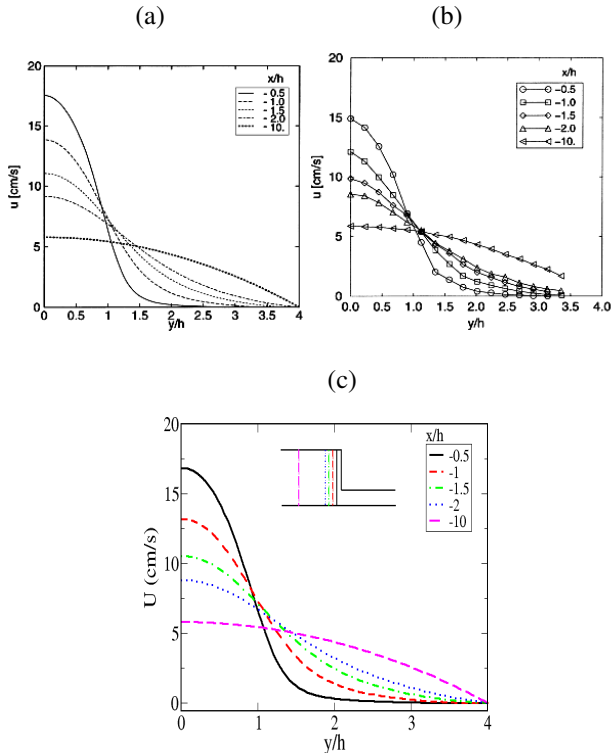


Fig. 4: Perfis de velocidade U_x num corte lateral ao escoamento na seção anterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

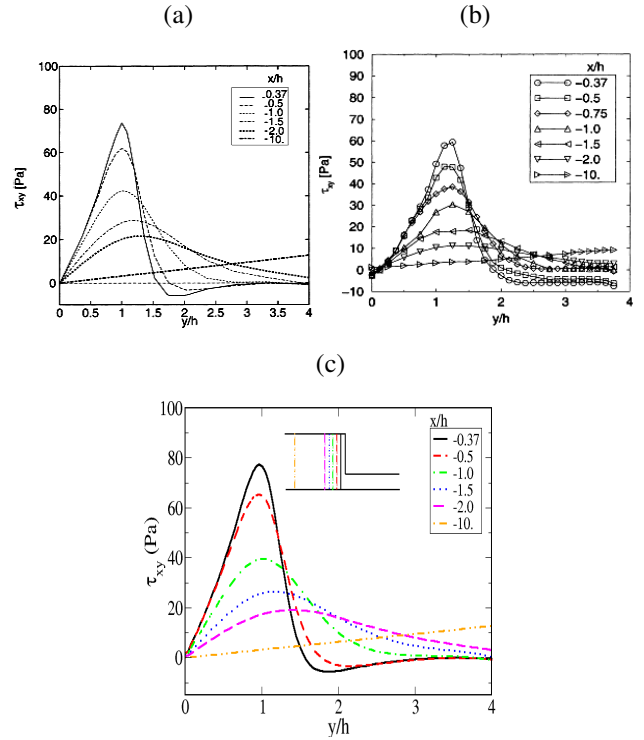


Fig. 6: Perfis para a componente da tensão τ_{xy} num corte lateral ao escoamento na seção anterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

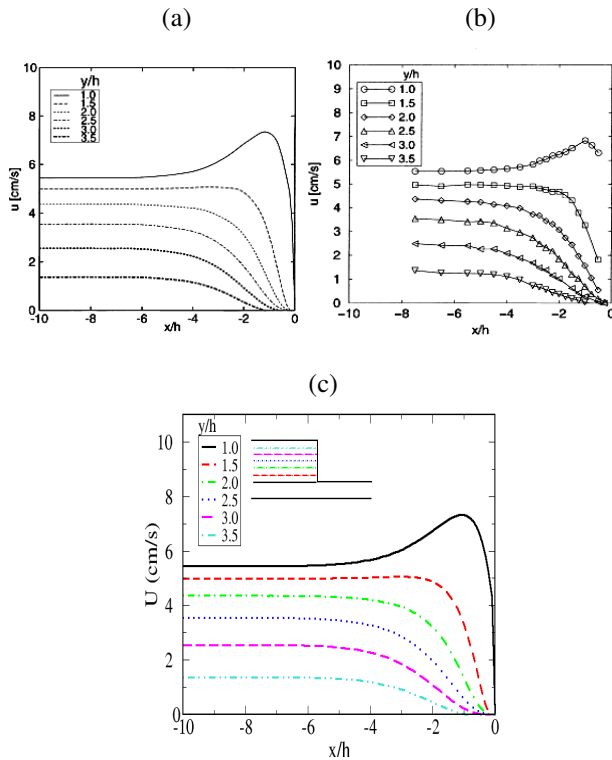


Fig. 5: Perfis de velocidade U_x num corte axial ao escoamento na seção anterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

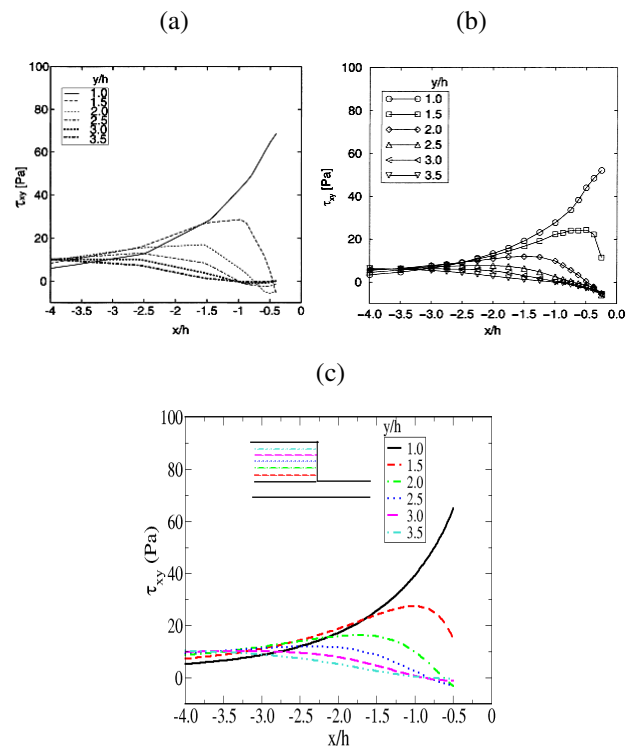


Fig. 7: Perfis para a componente da tensão τ_{xy} num corte axial ao escoamento na seção anterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

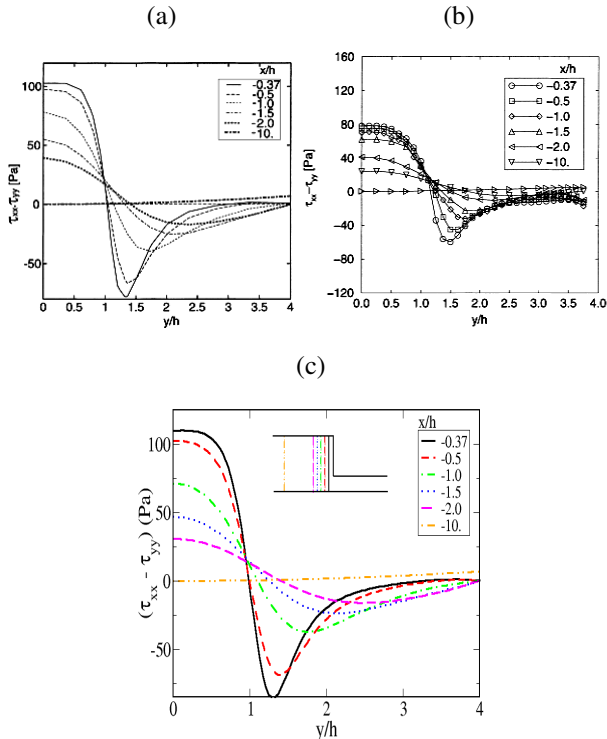


Fig. 8: Perfis para a primeira diferença de tensões normais (N_1) num corte lateral ao escoamento na seção anterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

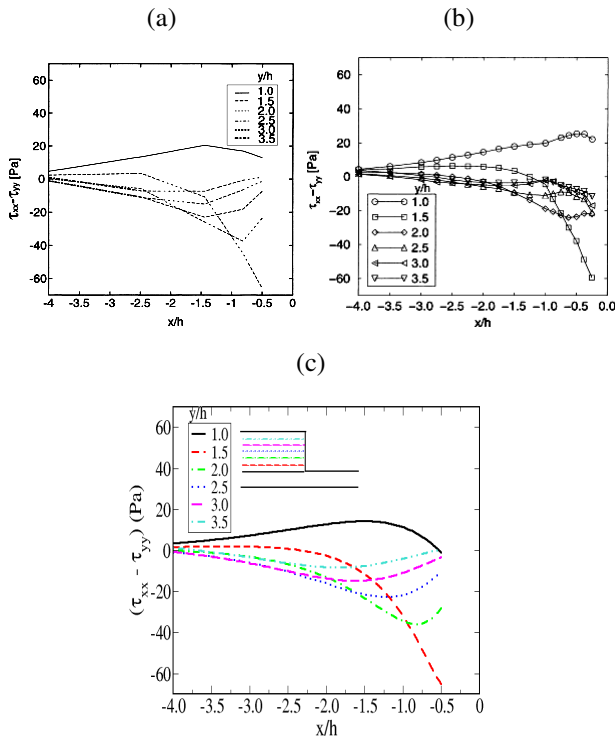


Fig. 9: Perfis para a primeira diferença de tensões normais (N_1) num corte axial ao escoamento na seção anterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

Percebe-se que os resultados obtidos para o perfil de velocidades são praticamente idênticos aos obtidos por Azaiez et al. e que ambos possuem boa concordância com os dados experimentais. Para as tensões obtiveram-se valores mais elevados do que os obtidos experimentalmente. Isso pode ser causa de se restringir a único modo de relaxação, sendo desse modo, insuficiente para caracterizar bem a tensão em regiões onde existe uma elevada taxa de deformação. Percebe-se também que os resultados deste trabalho conseguiram captar melhor os valores dos picos de tensões, isso se deve principalmente ao uso de uma malha mais refinada que o trabalho de Azaiez et al. Concluindo, para melhorar os resultados para as tensões com relação aos dados experimentais é indispensável o uso de mais modos (modelos na forma multimodo), uma vez que a malha utilizada neste trabalho já é suficientemente refinada junto a contração.

3.2. Dinâmica na seção posterior a contração

Os gráficos a seguir trazem uma comparação com os dados na seção posterior a contração. Na Fig. 10 compara-se o perfil de velocidades, nas Fig. 11 e 12 a componente da tensão τ_{xy} e nas Fig. 13 e 14 a primeira diferença de tensões normais (N_1).

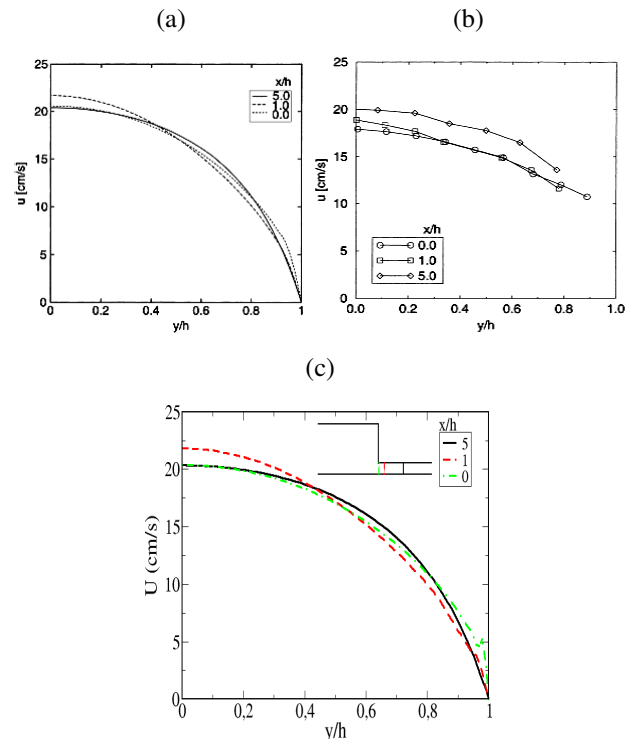


Fig. 10: Perfis de velocidade U_x num corte lateral ao escoamento na seção posterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

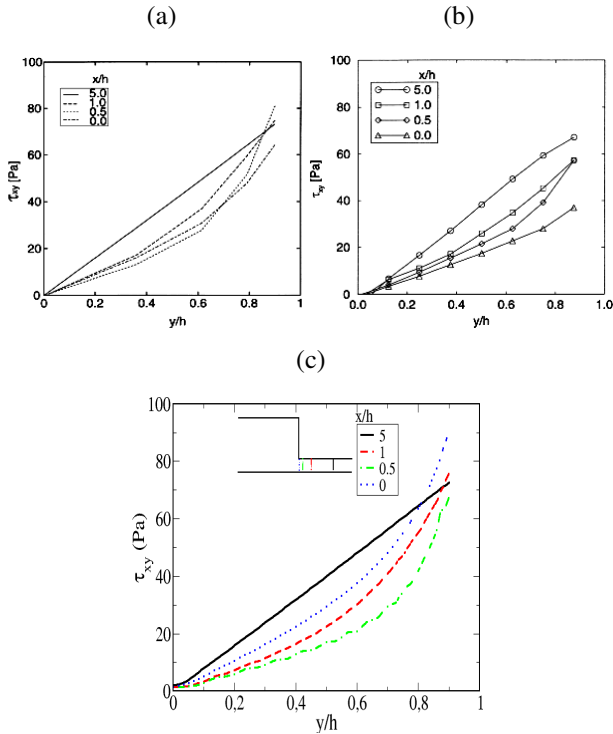


Fig. 11: Perfis para a componente da tensão τ_{xy} num corte lateral ao escoamento na seção posterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

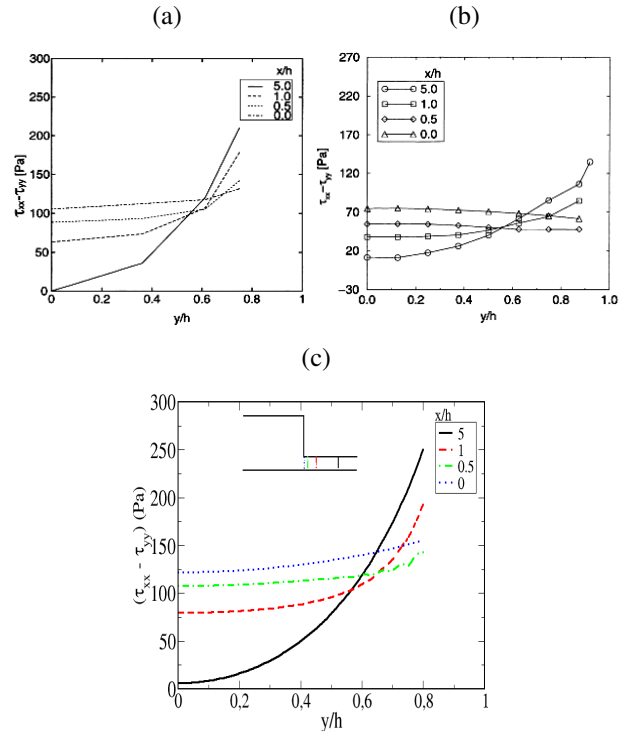


Fig. 13: Perfis para a primeira diferença de tensões normais (N_I) num corte lateral ao escoamento na seção posterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

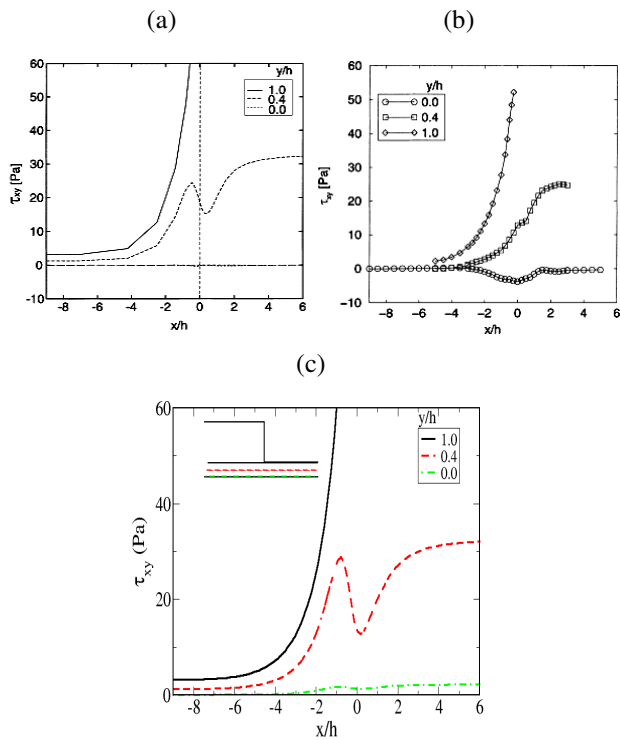


Fig. 12: Perfis para a componente da tensão τ_{xy} num corte axial ao escoamento na seção posterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.

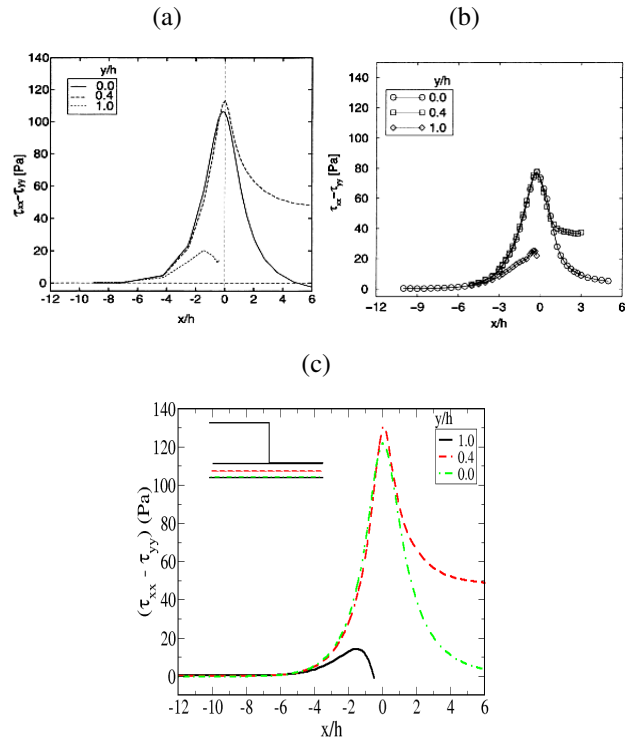


Fig. 14: Perfis para a primeira diferença de tensões normais (N_I) num corte axial ao escoamento na seção posterior a contração. (a) Giesekus [21], (b) Experimental [22] e (c) este trabalho.



VII-Oktober Fórum – PPGEQ

21, 22 e 23 de outubro de 2008

A análise destas figuras para as variáveis na seção posterior a contração mostram que os valores obtidos para a velocidade concordam bem com os valores experimentais. Para as tensões foi encontrado o mesmo problema que na seção anterior a contração, onde se obteve, para altas de deformação, valores super estimados para a mesma. Porém, como já comentado anteriormente, acredita-se que este problema possa ser solucionado usando os modelos na versão multimodais.

4. Conclusão

Nesse trabalho foi feita a apresentação de uma nova ferramenta de CFD para a simulação de fluidos viscoelásticos. Apresentou-se os principais motivos que levaram a implementação de um solver para fluidos viscoelásticos no software OpenFOAM, assim como algumas das ferramentas que estão disponíveis no software e que podem ser utilizados no solver desenvolvido. Para validar o solver foi feito uma comparação com as simulações feitas por Azaiez et al. [21] e com os dados experimentais obtidos por Quinzani et al. [22]. Os resultados nos levam a concluir que o solver conduz a resultados coerentes com os encontrados pelos autores citados. A utilização de uma malha mais refinada conduziu a captar melhor os picos de tensão em regiões onde ocorre uma elevada taxa de deformação. Outra conclusão é que para se poder representar melhor os valores de tensão obtidos experimentalmente seria necessário o uso de modelos multimodais. Para um trabalho futuro pretende-se utilizar os modelos na forma multimodais, para tentar representar melhor as tensões obtidas experimentalmente, assim como usar os diferentes modelos que já se encontram implementados.

5. Bibliografia

- [1] R.B. Bird, R.C. Armstrong, O. Hassager, Dynamics of Polymeric Liquids Vol. 1, Fluid Mechanics, John Wiley, New York, 1987.
- [2] C. Macosko, Rheology: Principles, Measurements and Applications, VCH Publishers, 1994.
- [3] M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 110 (2003) 45–75.
- [4] J.C. Maxwell, *Phil. Trans. Roy. Soc.* A157 (1867) 49–88.
- [5] J.G. Oldroyd, *Proc. Roy. Soc.* A200 (1950) 523–54.
- [6] H. Giesekus, A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 11 (1982) 69–109.
- [7] R.B. Bird, P.J. Dotson, N.L. Johnson, Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead-spring chain model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 7 (1980) 213–235.
- [8] N. Phan-Thien, R.I. Tanner, A new constitutive equation derived from network theory, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2 (1977) 353–365.
- [9] J. Azaiez, R. Guénette, A. Ait-Kadi, Entry flow calculations using multi-mode models, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 66 (1996) 271–281.
- [10] R.G. Larson, Constitutive equations for polymer melts and solutions, Butterworths, Boston, 1988.
- [11] M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 41 (2003) 47–75.
- [12] A.R. Muniz, A.R. Secchi, N.S.M. Cardozo, Uma Nova Metodologia para a Simulação de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos, *Polímeros: Ciência e Tecnologia* 15 (2005) 53–58.
- [13] M.G.N. Perera, K. Walters, Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2 (1977) 49–81.
- [14] D. Rajagopalan, R.C. Armstrong, R.A. Brown, Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with Newtonian viscosity, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 36 (1990) 159–192.
- [15] R. Guénette, M. Fortin, A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 60 (1995) 27–52.
- [16] J. Sun, N. Phan-Thien, R.I. Tanner, An adaptive viscoelastic stress splitting scheme and its applications: AVSS/SI and AVSS/SUPG, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 65 (1996) 75–91.
- [17] S.-C. Xue, R.I. Tanner, N. Phan-Thien, Numerical modelling of transient viscoelastic flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 123 (2004) 33–58.
- [18] OpenFOAM, The Open Source CFD Toolkit, User Guide, 2004.
- [19] OpenFOAM, The Open Source CFD Toolkit, Programmer's Guide, 2004.
- [20] H. Jasak, Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London, 1996.
- [21] J. Azaiez, R. Guénette, A. Ait-Kadi, Numerical simulation of viscoelastic flows through a planar contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 62 (1996) 253–277.
- [22] L.M. Quinzani, R.C. Armstrong and R.A. Brown, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 52 (1994) 1–36.
- [23] S.V. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- [24] R.I. Issa, Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting, *J. Comp. Physics*, 62 (1986) 40–65.
- [25] M.D. Chilcott, J.M. Rallison, Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 29 (1988) 381–432.