



X Oktoberfórum – PPGEQ

04 a 07 de outubro de 2011

ANÁLISE DAS LIMITAÇÕES DO *SOLVER* VISCOELASTICFLUIDFOAM NA SOLUÇÃO DE ALGUNS ESCOAMENTOS

Gustavo Nicknich¹, Nilo S. M. Cardozo¹, Álvaro L. de Bortoli²

¹LASIM – Departamento de Engenharia Química, UFRGS

²Instituto de Matemática – UFRGS

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: {gustavo, nilo}@enq.ufrgs.br, dbortoli@mat.ufrgs.br

Resumo: Realiza-se neste trabalho uma série de testes a fim de verificar a origem de instabilidades numéricas observadas durante a resolução de alguns escoamentos de fluidos viscoelásticos através do solver *viscoelasticFluidFoam*. São utilizadas 13 variações de uma geometria delgada e os modelos viscoelásticos de Giesekus e White-Metzner (número de Weissenberg $We = 30$ e $0,1$ respectivamente) na solução destes escoamentos. Para casos em que houve divergência, foi utilizada a formulação multigrid padrão do pacote *OpenFOAM*, assim como a variação do número de células na direção perpendicular ao escoamento (eixo z) a fim de alcançar convergência. O uso da formulação multigrid se mostrou ineficaz na estabilização de casos que previamente divergiram. Por outro lado, a modificação do número de células na direção perpendicular ao escoamento para um número par superior ou inferior a um número ímpar de células se mostrou eficiente, o que levanta a hipótese de erro na implementação do *viscoelasticFluidFoam*, que levaria a uma dificuldade na resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos com um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento. Por fim, pretende-se realizar mais testes com escoamentos onde We seja mais pronunciado e proceder com a análise do código do *viscoelasticFluidFoam*, a fim de determinar os fatores que levam ao surgimento das dificuldades numéricas observadas.

Palavras-chave: fluidos viscoelásticos, simulação numérica, número de Weissenberg, *OpenFOAM*, *viscoelasticFluidFoam*.

1. Introdução

A solução numérica de problemas de escoamento desempenha um papel cada vez mais importante na etapa de planejamento de produtos de origem polimérica. O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas de engenharia tornou-se possível graças ao desenvolvimento de computadores de alta velocidade e grande capacidade de armazenamento. Por isso, o desenvolvimento de algoritmos para a solução de diversos problemas de engenharia vem recebendo grande atenção.

O uso de técnicas numéricas em conjunto com recursos computacionais para a resolução de problemas de engenharia é denominado Dinâmica de Fluidos Computacional (CDF – *Computational Fluid Dynamics*). Os grandes atrativos do uso de técnicas de CFD residem na economia de recursos em comparação aos experimentos de bancada e na oportunidade de obter informações detalhadas sobre o escoamento, algumas de mensuração difícil ou impraticável nos experimentos físicos.

Contudo, os resultados de CFD estão condicionados aos modelos físicos incorporados nos mesmos (ou seja, as equações governantes e suas condições de contorno) e à estratégia numérica usada para discretização do sistema de equações obtido e para a

solução da versão discretizada do sistema de equações. Sendo assim, tais resultados estão sujeitos a erros, sejam eles associados a algum algoritmo particular usado na obtenção da solução numérica, assim como erros de arredondamento ou truncamento (WENDT *et. al.*, 2009).

A resolução de escoamentos de fluidos incompressíveis está sujeita às equações para a conservação da massa (Eq. 1) e quantidade de movimento (Eq. 2), e às respectivas condições iniciais e de contorno do problema (BIRD *et. al.*, 1987).

$$\nabla \cdot \underline{U} = 0 \quad (1)$$

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

onde \underline{U} é o vetor velocidade, ρ é a massa específica, p é a pressão e $\underline{\underline{\tau}}$ é o tensor das tensões totais.

Para completar o sistema de equações, é necessária a adoção de uma equação constitutiva mecânica. No caso de fluidos Newtonianos incompressíveis, tem-se a conhecida equação constitutiva em que o tensor das tensões totais é função do tensor taxa de deformação \underline{D} e da constante μ , a viscosidade Newtoniana.

$$\underline{\underline{\tau}} = 2\mu \underline{\underline{D}} \quad (3)$$

Assim, a resolução de escoamentos de fluidos Newtonianos incompressíveis se resume ao cálculo da pressão p e dos componentes da velocidade no sistema composto pelas equações de conservação de massa e quantidade de movimento. Escoamentos para este tipo de fluido em geometrias simples e baixo número de Reynolds possuem soluções analíticas bastante conhecidas e sua resolução por meio de técnicas de CFD dificilmente apresenta dificuldades numéricas, devido principalmente à ausência de componentes do tensor das tensões em direções que não sejam a de escoamento e de termos não-lineares nas equações que compõem o sistema.

Uma segunda categoria de fluidos que apresenta interesse prático consiste nos fluidos Newtonianos generalizados. Consistem em fluidos em que houve uma pequena modificação na equação constitutiva de Newton, incorporando a ideia de viscosidade dependente da taxa de cisalhamento. Geralmente consistem em modelos baseados em medidas empíricas, sendo os mais conhecidos a Lei da Potência e o modelo de Carreau-Yasuda (BIRD *et. al.*, 1987). A resolução numérica de escoamentos deste tipo de fluido também não apresenta grandes complicações, devido às características semelhantes ao modelo de fluido Newtoniano. Há, contudo um pequeno aumento de custo computacional devido à dependência da viscosidade com a taxa de cisalhamento, sendo necessário atualizar o valor da mesma através do valor do campo de velocidades no instante de tempo imediatamente anterior (CROCHET *et. al.*, 1983).

Outra categoria de interesse consiste na de fluidos viscoelásticos lineares, em que são considerados tanto os efeitos viscosos como elásticos do material, sendo assim os modelos mais simples a representarem qualitativamente as características dos fluidos poliméricos. Em termos numéricos, a resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos lineares apresenta maior custo computacional do que os modelos citados previamente, principalmente ao se utilizar a formulação multimodo (espectro de vários tempos de relaxação) (FAVERO, 2009). Não se encontra dados na literatura sobre as dificuldades numéricas encontradas em comparação aos fluidos Newtoniano e Newtoniano generalizado.

Por fim, encontram-se os fluidos viscoelásticos não-lineares, categoria de interesse deste trabalho. Os modelos que descrevem estes fluidos originam-se de modificações dos modelos de fluidos viscoelásticos lineares, a partir da substituição das derivadas temporais pela derivada convectiva temporal e pela inclusão de termos não-lineares nas equações. Tal fato decorre da necessidade de fazer com que as equações constitutivas sejam independentes do movimento dos eixos do sistema de coordenadas utilizado (BIRD *et. al.*, 1987).

Os modelos mais conhecidos para fluido viscoelástico não-linear constituem-se nos modelos de Oldroyd-B, Upper Convected Maxwell (UCM), White-Metzner, Giesekus, Leonov, modelos do tipo FENE e do tipo POM-POM (FAVERO, 2009). Tais modelos possuem a vantagem de preverem propriedades de fluidos poliméricos sob escoamentos específicos com muito mais qualidade do que os modelos de viscoelasticidade linear. Contudo, a aplicação destes modelos apresenta custo computacional muito mais elevado, devido ao fato de preverem seis componentes para o tensor das tensões totais

(contrastando com apenas um para fluidos Newtonianos), e pela alta não-linearidade das equações constitutivas.

Além do custo computacional elevado, a utilização destes modelos também está sujeita a dificuldades numéricas ausentes nas categorias de fluidos previamente citados. Uma das principais está associada a escoamentos sujeitos a um alto número de Weissenberg.

O número de Weissenberg (We) surge naturalmente ao se fazer o adimensionamento das equações constitutivas para fluidos poliméricos. Este representa as tensões do escoamento que são independentes do tempo. Define-se We como o produto entre um escalar λ que representa a magnitude da não-linearidade do fluido e a taxa de deformação do experimento, sendo que para um escoamento a cisalhamento simples, tem-se (DEALY *et. al.*, 2006):

$$We = 2\lambda D \quad (4)$$

onde $D = \frac{1}{2}(\nabla U + \nabla U^T)$ é o tensor taxa de deformação.

O parâmetro λ também pode ser visto como a medida de como o fluido desvia-se do comportamento Newtoniano. Para fluidos de baixa massa molar, λ é extremamente baixo, fazendo com que We seja extremamente pequeno para escoamentos deste tipo. Contudo, para polímeros fundidos de alta massa molar, λ pode ser bastante grande. Para estes fluidos, We também indica o grau de anisotropia gerado pela deformação. No caso de escoamentos a cisalhamento simples em estado estacionário, as diferenças de tensões normais são manifestações de anisotropia e por consequência, de viscoelasticidade não-linear. Assim, We também governa o grau em que as diferenças de tensões normais diferem de zero.

As dificuldades numéricas conhecidas como Problemas de Alto Número de Weissenberg (*High Weissenberg Number Problem – HWNP*) são intrínsecas à estrutura de alguns modelos viscoelásticos. Para tais modelos, quando certas regiões são submetidas a uma taxa de cisalhamento significativa, componentes do tensor das tensões crescem exponencialmente, o que torna a aplicação de métodos numéricos para alto We bastante difíceis (CULLEN, 2009).

Existe um limite superior para We , acima do qual os métodos numéricos tendem a falhar (TANNER *et. al.*, 1998). Uma revisão considerando os trabalhos já escritos leva às seguintes observações (CROCHET *et. al.*, 1984):

- Um limite superior para We é encontrado em todos os trabalhos publicados;
- Pequenas modificações na equação constitutiva e/ou algoritmos aplicados podem levar a limites maiores de We . Contudo, estas melhorias não fazem mais do que atrasar a falha no método;
- Quando We aproxima-se de seu valor crítico, frequentemente (mas não sempre) observam-se oscilações artificiais nos campos das variáveis;
- O refinamento da malha pode afetar o valor crítico de We , apesar de ser difícil observar uma concordância geral nos trabalhos publicados.

Com relação ao refinamento da malha, sabe-se que o comportamento da convergência de problemas resolvidos numericamente usando malhas finas é pior do que para malhas grossas. Tal comportamento está associado com as propriedades de amortecimento das

frequências do erro no processo iterativo (BORTOLI, 2000).

Uma forma de contornar estas dificuldades está no uso da formulação *multigrid*. Nas técnicas de *multigrid* são utilizadas variações de uma malha com diferentes densidades de refinamento a fim de minimizar os erros provenientes da resolução do sistema linear por meio de *solvers* iterativos. Os erros gerados durante a resolução do sistema linear possuem componentes de baixa e alta frequência. A alternância entre malhas finas e grossas na resolução do problema permite que as componentes de alta frequência do erro sejam rapidamente reduzidas devido à relaxação. Parte das componentes de baixa frequência do erro é transformada em componentes de alta frequência nas malhas mais grossas, onde podem ser amortecidas. Desta forma, uma sequência apropriada de malhas ajuda a amortecer os erros de baixa frequência e acelera a taxa de convergência (BORTOLI, 2000).

Entre as alternativas disponíveis atualmente para a análise de escoamentos viscoelásticos não-lineares merece destaque o *solver* viscoelasticFluidFoam, desenvolvido em nosso grupo de pesquisa (FAVERO, 2010a e 2010b) e atualmente distribuído juntamente com o pacote de CFD de código aberto OpenFOAM, na sua versão para desenvolvedores (OPENFOAM, 2008). O *solver* viscoelasticFluidFoam é capaz de resolver uma grande variedade de escoamentos de fluidos viscoelásticos, para variadas geometrias, sendo o escoamento por cisalhamento simples, elongacional ou uma combinação de ambos. O *solver* viscoelasticFluidFoam é capaz de resolver escoamentos para *We* relativamente elevado utilizando-se da formulação DEVSS (*Discrete Elastic Viscous Split-Stress*), proposta por GUÉNETTE *et. al.* (1995).

O trabalho que deu origem (FAVERO, 2009) ao viscoelasticFluidFoam foi em sua maioria focado no desenvolvimento e implementação do *solver*, sendo que algumas das dificuldades numéricas encontradas na etapa de desenvolvimento, em alguns casos de estudo específicos, foram deixadas para uma etapa posterior. Assim, ainda existem situações em que resoluções numéricas de escoamentos de fluidos viscoelásticos pelo viscoelasticFluidFoam falham, mesmo a *Re* relativamente baixos. Condições da malha utilizada afetam a solução numérica do problema de forma completamente inesperada, sendo que em análises de escoamentos de fluidos puramente viscosos com o OpenFOAM foram encontrados problemas numéricos relacionados com configurações específicas da malha (WANDER, 2011).

2. Objetivos

Os objetivos gerais do estudo são:

- Analisar as condições de malha, de escoamento e de parâmetros de modelos viscoelásticos que levam às dificuldades numéricas observadas em alguns escoamentos resolvidos pelo *solver* viscoelasticFluidFoam
- Os objetivos desta etapa do trabalho são:
 - Analisar as condições de malha que levam a estas dificuldades numéricas e;
 - Determinar se as dificuldades surgem a partir do pacote OpenFOAM ou do *solver*.

3. Metodologia

Utiliza-se neste trabalho condições de geometria, de malha e de modelo de fluido semelhantes a outro trabalho que apresentou dificuldades numéricas relacionadas à malha para o escoamento de fluidos viscoplásticos utilizando o pacote OpenFOAM (WANDER, 2011).

A geometria escolhida consiste no espaço de dimensões 10×10 cm entre duas placas afastadas de uma distância pequena, que apresentará espessura de 1 mm na geometria mais fina e de 5 mm na mais espessa. A escolha desta geometria justifica-se pela sua simplicidade e pela mesma representar uma situação bastante comum na modelagem de materiais plásticos por injeção na indústria de processamento de polímeros.

As condições de contorno que a geometria está sujeita é a de entrada de fluido na extremidade superior, saída de fluido na extremidade inferior e de parede nas demais faces. Nas paredes foi adotada a condição de não-deslizamento ($U = 0$). No interior da placa, foi adotada a condição inicial de fluido estagnado ($U = 0$). A geometria pode ser visualizada na Figura 1:

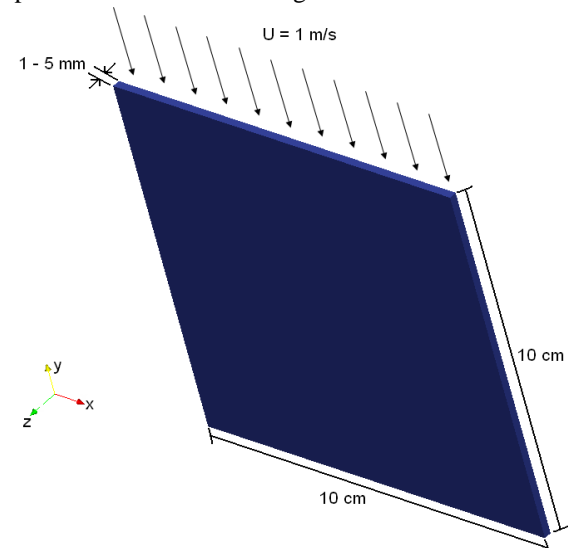


Figura 1: Visão geral da geometria utilizada neste estudo.

As dimensões da geometria e resoluções da malha computacional estão representadas na Tabela 1:

Tabela 1: Dimensão e resolução de malha computacional (adaptado de WANDER, 2011)

| Caso | Dimensões (mm) | | | Divisões | | | Total de células | $\Delta x/\Delta z$ |
|------|----------------|-----|---|----------|-----|----|------------------|---------------------|
| | x | y | z | x | y | z | | |
| 01 | 100 | 100 | 5 | 40 | 40 | 10 | 16000 | 5 |
| 02 | 100 | 100 | 1 | 500 | 500 | 5 | 1250000 | 1 |
| 03 | 100 | 100 | 2 | 50 | 50 | 11 | 27500 | 11 |
| 04 | 100 | 100 | 1 | 171 | 171 | 12 | 350892 | 7 |
| 05 | 100 | 100 | 2 | 80 | 80 | 11 | 70400 | 6,9 |
| 06 | 100 | 25 | 2 | 400 | 100 | 10 | 400000 | 1,25 |
| 07 | 100 | 25 | 1 | 400 | 100 | 10 | 400000 | 2,5 |
| 08 | 100 | 100 | 1 | 200 | 200 | 10 | 400000 | 5 |
| 09 | 100 | 100 | 1 | 240 | 240 | 12 | 691200 | 5 |
| 10 | 100 | 100 | 1 | 167 | 167 | 10 | 278890 | 6 |
| 11 | 100 | 100 | 1 | 200 | 200 | 12 | 278890 | 6 |
| 12 | 100 | 100 | 1 | 142 | 142 | 10 | 201640 | 7 |
| 13 | 100 | 100 | 1 | 171 | 171 | 12 | 350892 | 7 |

O solver viscoelasticFluidFoam possui implementado por padrão diversos modelos de fluidos viscoelásticos. Em um primeiro momento, foi utilizado o modelo viscoelástico de Giesekus como equação constitutiva:

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} + \alpha \frac{\lambda}{\eta_p} (\underline{\underline{\tau}}) = 2\eta_p \underline{\underline{D}} \quad (4)$$

utilizando os seguintes parâmetros:

$$\begin{aligned} \rho &= 803,87097 \text{ kg/m}^3 \\ \eta_s &= 0,002 \text{ kg/m.s} \\ \eta_p &= 1,422 \text{ kg/m.s} \\ \lambda &= 0,03 \text{ s} \\ \alpha &= 0,15 \end{aligned}$$

Nestas simulações, o passo de tempo foi estipulado em 10^{-5} s, e a velocidade do fluido adentrando a cavidade foi estipulada em 1 m/s com um perfil uniforme, valor comumente encontrado na moldagem por injeção. O cálculo do número de Weissenberg revela $We = 30$.

Em seguida, as mesmas geometrias foram testadas com o modelo viscoelástico de White-Metzner:

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda (\overset{\nabla}{\underline{\underline{II}}_D}) \underline{\underline{\tau}} = 2\eta_p (\underline{\underline{II}}_D) \underline{\underline{D}} \quad (5)$$

onde $\underline{\underline{II}}_D$ é o segundo invariante do tensor taxa de deformação $\underline{\underline{II}}_D = \dot{\gamma} = \sqrt{2\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{D}}}$. Neste modelo, a viscosidade polimérica η_p e o tempo de relaxação λ podem ser representados por diferentes relações. Neste caso, η_p e λ são dados pelo modelo de Carreau-Yasuda:

$$\eta_p(\underline{\underline{II}}_D) = \eta_0 \left[1 + (k\underline{\underline{II}}_D)^a \right]^{\frac{m-1}{a}} \quad (6)$$

$$\lambda(\underline{\underline{II}}_D) = \lambda_0 \left[1 + (\underline{\underline{III}}_D)^b \right]^{\frac{n-1}{b}} \quad (7)$$

No modelo de Carreau-Yasuda, os parâmetros k , m , a , l , n e b são ajustados por meio de dados experimentais. No presente trabalho, procedeu-se com o ajuste dos parâmetros que determinam η_p a fim de que, para fins de comparação de resultados, os valores de viscosidade assemelhem-se aos utilizados por WANDER (2011) para a parte viscosa do modelo viscoplástico de Herschel-Bulkley:

$$\underline{\underline{\tau}} = \tau_y \underline{\underline{\delta}} + K_H \dot{\gamma}^{n-1} \dot{\gamma} \quad (8)$$

onde τ_y é a tensão de fluência, $\underline{\underline{\delta}}$ é o tensor matriz unidade e K_H é a constante de Herschel-Bulkley. O segundo termo da soma da parte direita da equação representa o comportamento viscoso do modelo. Os parâmetros deste termo são extraídos do trabalho de WANDER (2011).

Tabela 2: Parâmetros da parte viscosa do modelo de Herschel-Bulkley (adaptado de WANDER, 2011)

| Teste | K_H | n |
|-------|-------|------|
| HB01 | 6,75 | 0,80 |
| HB02 | 9,30 | 0,76 |
| HB03 | 13,06 | 0,80 |
| HB04 | 23,89 | 0,80 |

Para os valores de viscosidade do modelo de Carreau-Yasuda se assemelharem aos da parte viscosa do modelo de Herschel-Bulkley, procedeu-se a um ajuste dos parâmetros do primeiro modelo. Para suprimir o efeito da soma do número 1 na definição da viscosidade do modelo

de Carreau-Yasuda, optou-se por utilizar um valor adequado da constante k que multiplica o tensor taxa de deformação.

Neste trabalho optou-se em dar uma contribuição nula à viscosidade do solvente, opção bastante utilizada em testes de metodologias numéricas, uma vez que a ausência da parte correspondente a viscosidade do solvente torna mais crítica a estabilidade numérica do problema (FAVERO, 2009).

Adotando-se um valor de 1000 para λ e ajustando os parâmetros restantes conforme o seguinte critério:

$$\eta_0 = \frac{K_H}{k^{(n-1)}} \quad (9)$$

chega-se a uma aproximação razoável aos valores de viscosidade utilizados por WANDER (2011) para uma ampla faixa de valores de taxas de cisalhamento:

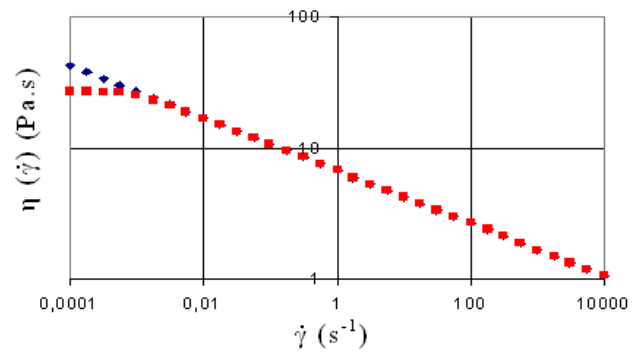


Figura 1: Viscosidade dependente da taxa de cisalhamento para a parte viscosa de Herschel-Bulkley (azul) e Carreau-Yasuda (vermelho).

Como o modelo de Herschel-Bulkley destina-se a fluidos puramente viscosos, é necessário minimizar o efeito elástico proveniente das definições de η_p e λ do modelo de Carreau-Yasuda.

Não é possível anular o efeito elástico na equação constitutiva de White-Metzner, pois o tempo de relaxação em função da taxa de cisalhamento surge na equação constitutiva como denominador ao menos uma vez. Dessa forma, tenta-se minimizar o valor de λ , a fim de que o efeito elástico seja o menos pronunciado possível.

Manipulando-se as constantes do modelo de Carreau-Yasuda, é possível fazer com que λ seja constante e igual a 10^{-5} .

Tabela 3: parâmetros para a equação constitutiva de White-Metzner

| Teste | η_{pk} | λ | k | m | a | l |
|-------|------------------------|------------------------|--------|------|-----|-----|
| WM01 | 26,87223401 | 10^{-5} | 10^3 | 0,8 | 2 | 0 |
| WM02 | 48,8070938 | 10^{-5} | 10^3 | 0,76 | 2 | 0 |
| Teste | n | b | | | | |
| WM01 | $6,4239 \cdot 10^{-2}$ | $2,3229 \cdot 10^{-1}$ | | | | |
| WM02 | $6,4239 \cdot 10^{-2}$ | $2,3229 \cdot 10^{-1}$ | | | | |

A pequena influência da contribuição elástica em comparação à contribuição viscosa pode ser visualizada no gráfico a seguir, onde a tensão de cisalhamento τ_{xy} (em azul) é muito maior em magnitude do que a tensão τ_{yy} na direção normal do escoamento (em vermelho). A tensão τ_{yy} só é pronunciada nos escoamentos onde predomina a contribuição elástica do fluido.

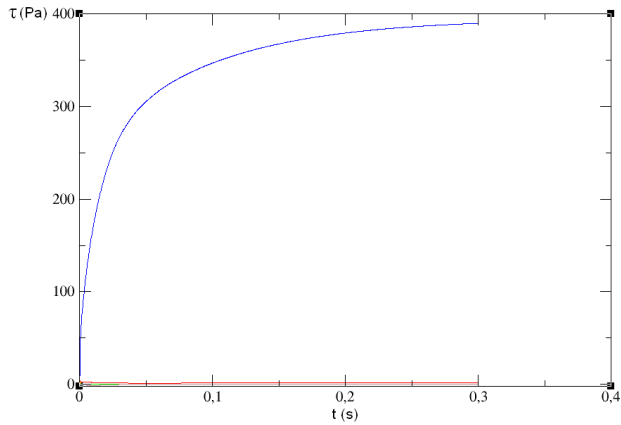


Figura 2: Componentes do tensor das tensões τ_{xy} (em azul) e τ_{yy} (em vermelho) em função do tempo simulado.

Estimados os parâmetros, os conjuntos de valores WM01 e WM02 foram utilizados para resolver o escoamento para as 13 variações da geometria (Caso 1 a 13). Em alguns casos, os resultados de um conjunto de parâmetros de uma malha menos refinada foram utilizados como condição inicial em malhas mais refinadas, a fim de determinar se a condição inicial de fluido estagnado ($U = 0$) para malhas mais refinadas constitui-se como causa de instabilidades na solução numérica.

Nos casos em que não houve convergência, foram realizados novos testes utilizando a metodologia multigrid e variando o número de células na direção perpendicular ao escoamento (eixo z).

4. Resultados e Discussões

As simulações apresentaram resultados bastante distintos, variando dentro de um mesmo conjunto de valores e de malha para malha. Para a equação constitutiva de Giesekus e os respectivos parâmetros adotados, não foram observados problemas de convergência, sendo que o tempo de convergência variou entre $3 \cdot 10^{-4}$ s para a malha mais fina (Caso 02) e 0,3 s, para as malhas mais grossas (Casos 01 e 03). O critério de convergência adotado foi a medição do módulo da velocidade no centro da geometria, na extremidade mais afastada da entrada do fluido.

Para os testes com a equação constitutiva de White-Metzner, com η_p e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM01 foram encontrados problemas de convergência em três das variações de geometria utilizadas. A relação de casos em que houve convergência e o tempo de convergência dos mesmos encontra-se na tabela a seguir.

Tabela 4: Convergência para os casos simulados com o modelo de White-Metzner, com η_p e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de valores WM01.

| Caso | Divisões | | | Total de células | Conv. | t conv. (s) |
|------|----------|-----|----|------------------|-------|-------------|
| | x | y | z | | | |
| 01 | 40 | 40 | 10 | 16000 | Sim | 0,1 |
| 02 | 500 | 500 | 5 | 1250000 | Não | - |
| 03 | 50 | 50 | 11 | 27500 | Não | - |
| 04 | 171 | 171 | 12 | 350892 | Sim | 0,015 |
| 05 | 80 | 80 | 11 | 70400 | Não | - |
| 06 | 400 | 100 | 10 | 400000 | Sim | 0,008 |
| 07 | 400 | 100 | 10 | 400000 | Sim | 0,006 |
| 08 | 200 | 200 | 10 | 400000 | Sim | 0,015 |

| | | | | | | |
|----|-----|-----|----|--------|-----|-------|
| 09 | 240 | 240 | 12 | 691200 | Sim | 0,1 |
| 10 | 167 | 167 | 10 | 278890 | Sim | 0,01 |
| 11 | 200 | 200 | 12 | 278890 | Sim | 0,01 |
| 12 | 142 | 142 | 10 | 201640 | Sim | 0,015 |
| 13 | 171 | 171 | 12 | 350892 | Sim | 0,015 |

Nos casos em que não houve convergência da solução (Casos 02, 03 e 05) o módulo da velocidade medida tendeu a crescer ou diminuir indefinidamente, comportamento que não é inerente do modelo viscoelástico adotado (Figura 3). Apesar da contribuição elástica ter sido bastante diminuída pelo pequeno valor de λ adotado, fazendo com que We possua um valor pouco significativo ($We = 0,1$), ainda assim não houve convergência, o que leva a crer que há influência de parâmetros da. De fato, não houve convergência somente nos casos em que há um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento (eixo z).

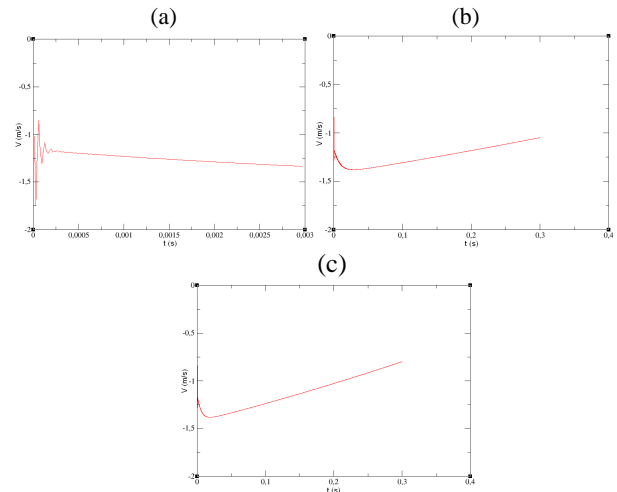


Figura 3: Perfis de velocidade em função do tempo simulado (parâmetros WM01) para casos em que não houve convergência. (a) Caso 02, (b) Caso 03 e (c) Caso 05.

Para os testes com a equação constitutiva de White-Metzner, com η_p e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de parâmetros WM02, foram encontrados problemas de convergência em duas das geometrias utilizadas.

Tabela 5: Convergência para os casos simulados com o modelo de White-Metzner, com η_p e λ dados pelas equações de Carreau-Yasuda e conjunto de valores WM02.

| Caso | Divisões | | | Total de células | Conv. | t conv. (s) |
|------|----------|-----|----|------------------|-------|-------------|
| | x | y | z | | | |
| 01 | 40 | 40 | 10 | 16000 | Sim | 0,1 |
| 02 | 500 | 500 | 5 | 1250000 | Sim | 0,0003 |
| 03 | 50 | 50 | 11 | 27500 | Não | - |
| 04 | 171 | 171 | 12 | 350892 | Sim | 0,02 |
| 05 | 80 | 80 | 11 | 70400 | Não | - |
| 06 | 400 | 100 | 10 | 400000 | Sim | 0,02 |
| 07 | 400 | 100 | 10 | 400000 | Sim | 0,02 |
| 08 | 200 | 200 | 10 | 400000 | Sim | 0,015 |
| 09 | 240 | 240 | 12 | 691200 | Sim | 0,02 |
| 10 | 167 | 167 | 10 | 278890 | Sim | 0,03 |
| 11 | 200 | 200 | 12 | 278890 | Sim | 0,02 |
| 12 | 142 | 142 | 10 | 201640 | Sim | 0,03 |
| 13 | 171 | 171 | 12 | 350892 | Sim | 0,03 |

Nos casos em que não houve convergência (02 e 05) observou-se comportamento semelhante aos Casos 03 e 05 do conjunto de parâmetros WM01: o módulo da velocidade tende a diminuir indefinidamente. Novamente os casos em que não houve convergência foram aqueles com um número de células ímpar na direção do eixo z , apesar de a geometria do Caso 02, que não havia convergido com os parâmetros WM01, convergir para os parâmetros WM02.

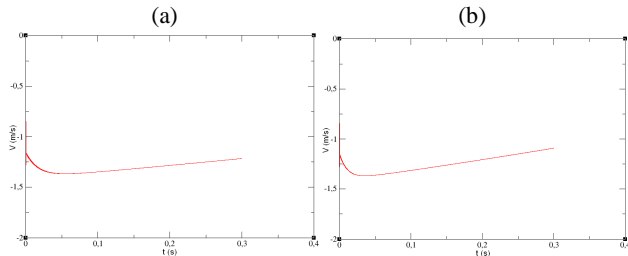


Figura 4: Perfis de velocidade em função do tempo simulado (parâmetros WM02) para casos em que não houve convergência. (a) Caso 03 e (b) Caso 05.

A fim de investigar se a não convergência em alguns casos estava sendo causada pela condição de fluido estagnado no interior da geometria, utilizou-se o resultado do Caso 04 (malha pouco refinada, onde houve convergência) como condição inicial para o Caso 02 (malha bastante refinada, onde não houve convergência). Observou-se que neste caso também não houve convergência, ocorrendo de forma semelhante à observada sem o uso de mapeamento de resultados de uma malha para outra.

Nos casos em que foram usados os parâmetros WM01 e não houve convergência (Casos 02, 03 e 05), optou-se por um novo teste utilizando a formulação *multigrid*. O pacote OpenFOAM utiliza como padrão o *multigrid* algébrico. No *multigrid* algébrico, a aglomeração dos volumes de controle é feita considerando a anisotropia dos coeficientes da matriz do sistema linear (MALISKA, 2010). Ou seja, o OpenFOAM não realiza operações de aglomeração diretamente na malha computacional. O *multigrid* algébrico é executado pelo *solver* GAMG (*Generalised Geometric-Algebraic Multi-Grid*). Testes efetuados com o *solver* GAMG não conseguiram levar à convergência os casos que previamente não convergiram (Casos 02, 03 e 05).

As geometrias dos Casos 03 e 05 foram modificadas para conterem um número par de células na direção do eixo z . A geometria do Caso 03 foi modificada de uma resolução de $50 \times 50 \times 11$ células para $50 \times 50 \times 10$ e $50 \times 50 \times 12$ células e a geometria do Caso 05 foi modificada de $80 \times 80 \times 11$ células para $80 \times 80 \times 10$ e $80 \times 80 \times 12$ células. Nos testes com estas quatro geometrias modificadas, em todas houve convergência, levantando a hipótese de haver algum erro de implementação no *solver* viscoelasticFluidFoam ou até mesmo no pacote OpenFOAM, levando em conta que nos resultados apresentados por WANDER (2011), problemas semelhantes são encontrados, mesmo sem a utilização de uma formulação viscoelástica

A fim de determinar se a dificuldade numérica encontrada com relação ao número ímpar de células no eixo z se deve ao *solver* viscoelasticInterFoam ou ao

pacote OpenFOAM, geometrias com número de células ímpares em que não houve convergência com o uso do *solver* viscoelástico foram testadas com um *solver* Newtoniano do pacote OpenFOAM, o icoFoam. Testes realizados com os Casos 02 ($500 \times 500 \times 5$), 03 ($50 \times 50 \times 11$) e 05 ($80 \times 80 \times 11$ células) com uma velocidade de entrada do fluido de 1 m/s não apresentaram problemas de convergência, o que leva a crer que a dificuldade de convergência em geometrias com um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento é inerente ao *solver* viscoelasticFluidFoam.

5. Conclusão

Neste trabalho foi feita uma análise preliminar das dificuldades numéricas que surgem na resolução de alguns escoamentos de fluidos viscoelásticos através do *solver* viscoelasticFluidFoam (FAVERO, 2009). Em um primeiro momento, os testes realizados envolveram o uso de diferentes modelos viscoelásticos e de geometrias utilizadas em outro trabalho onde também foram encontradas dificuldades numéricas (WANDER, 2011). Para obter uma função de viscosidade semelhante à utilizada no trabalho supracitado, foi realizado um ajuste de parâmetros das equações que determinam a viscosidade polimérica η_{PK} e o tempo de relaxação λ_K em função do tensor taxa de deformação D . Testes realizados com as 13 geometrias (Caso 01 a 13) mostraram que o *solver* viscoelasticFluidFoam tende a apresentar instabilidades numéricas ao lidar com um número ímpar de células na direção perpendicular ao escoamento (eixo z).

A utilização da formulação *multigrid* algébrico do OpenFOAM através do *solver* de sistema linear GAMG não se mostrou eficaz na estabilização de casos em que previamente foi observada divergência.

Em trabalhos futuros, pretende-se avaliar a implementação das condições de contorno no pacote OpenFOAM, realizar uma varredura de parâmetros de modelos viscoelásticos e condições de escoamento, e identificar regiões de valores que geram dificuldades numéricas, assim como analisar o código do viscoelasticFluidFoam a fim de determinar as causas das limitações do *solver*.

6. Referências

- BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O. *Dynamics of Polymeric Liquids – Volume 1: Fluid Mechanics*. 2ª ed. John Wiley & Sons, 1987.
- BORTOLI, A. L. de. *Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional*. Ed. Universidade/UFRGS, 2000.
- CROCHET, M. J.; WALTERS, K. *Numerical Methods in Non-Newtonian Fluid Mechanics*. *Annu. Rev. Fluid Mech*, v. 15, p. 241-260, 1983.
- CROCHET, M. J.; DAVIES, A. R.; WALTERS, K. *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*. Elsevier, 1984.

CULLEN, P. J.; Food Mixing: Principles And Applications. John Wiley & Sons, 2009.

DEALY, J. M.; LARSON, R. G. *Structure and Rheology of Molten Polymers: From Structure to Flow Behavior and Back Again*. Hansel Verlag, 2006.

FAVERO, J. L. *Simulação de Escoamentos Viscoelásticos: Desenvolvimento de uma Metodologia de Análise Utilizando o Software OpenFOAM e Equações Constitutivas Diferenciais*. Dissertação de Mestrado. UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2009.

FAVERO, J. L.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M.; JASAK, H.; Viscoelastic fluid analysis in internal and in free surface flows using the software OpenFOAM. *Computers and Chemical Engineering*, v. 34, p. 1984-1993, 2010a.

FAVERO, J. L.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M.; JASAK, H.; Viscoelastic flow analysis using the software OpenFOAM and differential constitutive equations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, v. 165, p. 1625-1636, 2010b.

GUENETTE, R.; FORTIM, M. A New Mixed Finite Element Method for Computing Viscoelastic Flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, v. 60, p. 27-52, 1995.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2ª ed. LTC, 2010.

OPENFOAM. OpenFOAM. 9 Albert Road, Caversham, reading, Beckshire RG4 7 AN UK, 2008. Disponível em: <<http://www.openfoam.com>>.

TANNER, R. G.; WALTERS, K. *Rheology: An Historical Perspective*. Elsevier, 1998.

WANDER, A. P. *Validação das Aproximações do Tipo Hele-Shaw Aplicadas ao Escoamento de Fluidos Viscoplásticos em uma Cavidade Simétrica*. Trabalho de Conclusão de Curso. UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2011.

WENDT, J. F.; ANDERSON Jr, J. D.; DEGROOTE, J.; DEGREGZ, G.; DICK. E.; GRUNDMANN, R.; VIERENDEELS, J. *Computational Fluid Dynamics – An Introduction*. 3ª ed. Springer, 2009.