

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ANÁLISE DA QUALIDADE DAS TENSÕES OBTIDAS NA SIMULAÇÃO DE
ESCOAMENTOS DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS USANDO A FORMULAÇÃO
LOG-CONFORMAÇÃO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ADAM MACEDO MARTINS

PORTO ALEGRE, RS

2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ANÁLISE DA QUALIDADE DAS TENSÕES OBTIDAS NA SIMULAÇÃO DE
ESCOAMENTOS DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS USANDO A FORMULAÇÃO LOG-
CONFORMAÇÃO

ADAM MACEDO MARTINS

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia.

Área de Concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

Orientador:
Prof. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo, D.Sc.

Co-orientador:
Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Porto Alegre, RS

2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Análise da Qualidade das Tensões Obtidas na Simulação de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos Usando a Formulação Log-Conformação*, elaborada por Adam Macedo Martins, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Álvaro Luiz de Bortoli, D.Sc.

Prof. Cleiton Bittencourt da Porciúncula, D.Sc.

Prof. Evandro Steffani, D.Sc.

*Dedico este trabalho às minhas avós
Maria Aída e Maria do Carmo.*

Agradecimentos

A Deus pela oportunidade de concluir mais uma etapa em minha vida e por me dar força e confiança nos momentos difíceis.

Ao Prof. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo pela sua grande orientação, compreensão, paciência e por todo apoio a mim dado durante a realização deste trabalho.

Ao Prof. Argimiro Resende Secchi pela orientação, disposição e suporte dado neste trabalho.

À Andréia Rodrigues Machado e ao João Antônio Pinto de Oliveira pela ajuda nos primeiros contatos com o mundo *OpenFOAM*.

Aos meus amigos do mestrado Camila Ribeiro, Felipe Linhares, José Eduardo Weber, Juliano Sebben, Luis Fernando Baladão, Maria Andressa Ferro, Melissa de la Rocha, Natasha Sievers e Renata Teles pelos diversos momentos de alegria que compartilhamos e por tornar a caminhada acadêmica mais fácil.

Às amigas Fabrícia Farias de Menezes e Janaína Chaves Pereira e suas mães Helenise e Ruth pela grande força que me deram no início desta caminhada.

Aos amigos Cássio Piovesan e Roberto Júnior pela amizade e ajuda nas demais situações fora da vida acadêmica.

Aos amigos do grupo de pesquisa Carolina Festugatto, Vinícius Ávila e Vitor Dal Bó Abella pela ajuda oferecida em diversos momentos.

Aos meus pais, pelo amor incondicional, motivação e principalmente pelo apoio dado.

À FAPEAM e à CAPES pelo apoio financeiro.

É impossível viver sem falhar em algo, ao menos que você viva tão cautelosamente que pode muito bem não ter vivido. E neste caso, você falha por omissão.

J. K. Rowling

Resumo

Uma das mais recentes abordagens propostas na literatura para tratar o problema do alto número de *Weissenberg* (We) é a Formulação Log-Conformação (FLC). Nesta formulação, a equação constitutiva viscoelástica utilizada é reescrita em termos de uma variável Ψ , que é o logaritmo do tensor conformação. Apesar do potencial de aplicação da FLC, pouca atenção tem sido dirigida para análise da acurácia da solução obtida para o campo de tensões quando se utiliza esta formulação. Assim, o objetivo do presente trabalho foi estudar a acurácia da solução obtida pela FLC na análise de escoamentos de fluidos viscoelásticos usando duas geometrias padrão de estudo: placas paralelas e cavidade quadrada com tampa móvel. Primeiramente, a FLC foi implementada no pacote de CFD *OpenFOAM*. Em seguida foram verificados os limites do número de *Weissenberg* na formulação numérica padrão ($We_{lim,P}$), onde para a geometria de placas paralelas foi encontrado $We_{lim,P} = 0,3$ e para a geometria da cavidade quadrada com tampa móvel foi encontrado $We_{lim,P} = 0,8$. Depois o código implementado foi aplicado em ambas as geometrias, comparando-se a solução obtida pela FLC com aquela da formulação padrão na faixa de $We < We_{lim,P}$. Os resultados obtidos na geometria de placas paralelas apresentaram boa concordância com a solução padrão e solução analítica. Para a geometria da cavidade quadrada com tampa móvel, que não possui solução analítica, boa concordância dos resultados também foi observada em comparação com a solução padrão. Posteriormente foram comparados os resultados obtidos pela FLC na faixa de $We > We_{lim,P}$. Na geometria de placas paralelas, além da boa concordância com a solução analítica, obteve-se convergência em todos os casos estudados neste trabalho, com o maior número de *Weissenberg* utilizado sendo igual a 8. Os resultados da geometria da cavidade quadrada com tampa móvel também apresentaram boa concordância em comparação com dados da literatura, porém a convergência foi obtida até para $We = 2$. Com respeito à comparação das formulações numéricas com a solução analítica, feita apenas na geometria de placas paralelas, foi observado um erro máximo de 7,57% na solução padrão e de 12,33% na FLC. Em relação à análise da qualidade das tensões usando os resíduos da equação constitutiva viscoelástica como critério de acurácia, foi verificado nas duas geometrias que os valores de tensão obtidos usando a FLC são menos acurados que aqueles obtidos pela formulação explícita no tensor das tensões nos casos em que esta última converge. Também foi observado que a acurácia diminui com o aumento do We . Esse efeito pôde ser melhor notado na geometria de placas paralelas. Uma razão para a perda de acurácia da tensão provavelmente ocorre devido à natureza matemática da transformação algébrica inversa de Ψ_{xx} para τ_{xx} . O novo *solver* implementado neste trabalho apresentou convergência e soluções corretas para as duas geometrias, logo foi implementado corretamente. Ele também potencializa o *solver* de partida *viscoelastiFluidFoam* ao estender simulações para uma faixa maior do número de *Weissenberg*.

Palavras-chave: Log-conformação, fluido viscoelástico, número de *Weissenberg*, CFD, *OpenFOAM*.

Abstract

A recent approach proposed in the literature to deal with the High Weissenberg Number Problem is the Log-Conformation formulation (LCF). In this formulation the viscoelastic constitutive equation is rewritten in terms of the logarithm of the conformation tensor Ψ . Despite the great potential application of the LCF, little attention has been given in the literature to the accuracy of the obtained stress fields. The purpose of this work was to study the solution obtained by LCF in the analysis of viscoelastic flows using two benchmark geometries: parallel plates and lid driven cavity. Firstly, the LCF was implemented in the *OpenFOAM* CFD package. Then, the limits of *Weissenberg* number for the standard numerical formulation ($We_{lim,P}$) were verified, obtaining $We_{lim,P} = 0.3$ for the parallel plates and $We_{lim,P} = 0.8$ for the lid driven cavity. When comparing the solution obtained by the LCF with that of the standard formulation in a range of $We < We_{lim,P}$, the results obtained for the parallel plates geometry showed good agreement with the standard solution and the analytical solution. For the lid driven cavity geometry, for which there is not analytical solution, good agreement with the standard solution was also observed. For $We > We_{lim,P}$ in the parallel plates geometry, in addition to the good agreement with the analytical solution, it was possible to obtain convergence in all the cases studied in this work, with the largest number of *Weissenberg* used being equal to 8. The results of the lid driven cavity geometry also presented good agreement in comparison with literature data, but convergence was obtained up to $We = 2$. With respect to the comparison of the numerical formulations with the analytical solution for the parallel plates geometry, a maximum error of 7.57% was observed in the standard solution and of 12.33% in the LCF. When using the residues of the viscoelastic constitutive equation as a criterion of accuracy, it was verified that for the two geometries the stress values obtained using the LCF were less accurate than those obtained by the explicit formulation in the stress tensor. It has also been observed that accuracy decreases with increasing of We . One reason for the loss of stress accuracy probably occurs because of the mathematical nature of the inverse algebraic transformation from Ψ_{xx} to τ_{xx} . The new solver implemented in this work presented convergence and correct solutions for the two geometries, so it was implemented correctly. It also potentiates the *viscoelastiFluidFoam* starting solver by extending simulations to a larger range of *Weissenberg* number.

Keywords: Log-conformation, viscoelastic fluid, Weissenberg number, CFD, *OpenFOAM*.

Sumário

Lista de Figuras	xix
Lista de Símbolos	xxi
Lista de Tabelas	xxv
1 Introdução	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivos	3
1.3 Estrutura da Dissertação.....	3
2 Conceitos fundamentais e revisão bibliográfica	5
2.1 Simulação Numérica de escoamentos de Fluidos Viscoelásticos e Pacote <i>OpenFOAM</i>	5
2.2 Números Adimensionais em escoamentos de Fluidos Viscoelásticos.....	8
2.3 O Problema do Alto Número de <i>Weissenberg</i>	10
2.3.1 Aspectos relacionados à natureza do Modelo Constitutivo.....	11
2.3.2 Aspectos relacionados aos Métodos Numéricos	11
2.4 A Formulação Log-Conformação	12
2.5 Estudos relativos à aplicação da formulação Log-Conformação.....	14
3 Metodologia	19
3.1 Equações Governantes.....	19
3.2 A Formulação Log-Conformação	21
3.3 Implementação do <i>solver</i> com a formulação FLC e algoritmo numérico utilizado.....	23
3.4 Estudos de Validação do Código Implementado.....	28
3.4.1 Escoamento de Poiseuille.....	28
3.4.2 Escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel	31
3.5 Utilização dos resíduos das equações governantes como parâmetro de análise da acurácia da solução obtida com a FLC	34
4 Resultados e Discussão	35
4.1 Testes iniciais com o código implementado.....	35
4.1.1 Análise do número de <i>Weissenberg</i> crítico para a formulação padrão.....	35
4.1.2 Testes de convergência de malha com a FLC.....	36
4.1.3 Comparação da formulação Log-Conformação com a formulação padrão para $We < We_{lim,P}$	38

4.1.4 Avaliação geral dos testes iniciais	42
4.2 Análise da acurácia da solução obtida com a FLC	42
4.2.1 Geometria de Placas Paralelas	42
4.2.2 Escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel	49
5 Conclusões	55
6 Referências Bibliográficas	59
Anexos	65
Dados dos perfis de velocidade da Figura 4.3.	65
Dados dos perfis de tensão cisalhante da Figura 4.3.	66
Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.4.....	67
Dados do perfil de velocidade U_x da Figura 4.5.	70
Dados do perfil de tensão normal da Figura 4.5.	71
Dados dos perfil de velocidade U_y da Figura 4.5.	72
Dados do perfil de tensão cisalhante da Figura 4.5.	73
Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.....	74

Lista de Figuras

2.1	Fenômenos em escoamentos viscoelásticos: (a) Efeito de <i>Weissenberg</i> , (b) inchamento do extrudado em um fluido newtoniano e (c) em um fluido polimérico	6
2.2	Esquema geral da aplicação da transformação Log-Conformação	14
3.1	Diagrama esquemático da solução do algoritmo	27
3.2	Geometria de Placas Paralelas: condições de contorno e iniciais	29
3.3	Malhas da Geometria de Placas Paralelas	30
3.4	Representação do local da geometria de placas paralelas onde se traçaram os perfis de velocidades e tensões	30
3.5	Geometria da cavidade quadrada com tampa móvel: condições de contorno e iniciais	31
3.6	Malhas da geometria da cavidade quadrada com tampa móvel	32
3.7	Representação dos locais da geometria da cavidade quadrada onde se traçaram os perfis de velocidades e tensões	33
4.1	Teste de convergência de malha para a geometria de placas paralelas ($We = 0,2$): Perfis de (a) U_x , (b) τ_{xy} e (c) τ_{xx} ao longo da linha $(L/2,y)$	37
4.2	Teste de convergência de malha para a geometria da cavidade quadrada com tampa móvel ($We = 0,5$): Perfis de (a) U_x , (b) Ψ_{xx} e (c) τ_{xx} ao longo da linha $(L/2,y)$	38
4.3	Perfis de (a) velocidade e (b) tensão cisalhante, ao longo da linha $(L/2,y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.4, $We = 0,05$ e a malha M5	39
4.4	Perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2,y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.5, a malha M5 e $0,05 < We < 0,2$	40

4.5	Perfis de velocidade e tensão a $We = 0,5$ para o escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel, usando a Malha M8: (a) U_x e (b) τ_{xx} ao longo da linha vertical $(L/2,y)$ e (c) U_y e (d) τ_{xy} ao longo da linha horizontal $(x,0.75H)$	41
4.6	Perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2,y)$, obtidos pela formulação padrão com $We > We_{crit}$ na geometria de placas paralelas. Malha M5 e $t = 100$ s. (a) $We = 0,3$ e $0,5$, (b) $We = 1$ e 2	43
4.7	Perfil de tensão normal, ao longo da linha $(L/2,y)$, obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5. (a) $0,3 \leq We \leq 1$, (b) $2 \leq We \leq 8$	45
4.8	Erro percentual de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$ em relação à sua solução analítica neste caso de estudo, na geometria de placas paralelas e malha M5. (a) $We = 0,05$, (b) $We = 0,1$ e (c) $We = 0,2$	46
4.9	Comparação dos resíduos de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$, obtidos com a geometria de placas paralelas e malha M5. (a) $We = 0,05$, (b) $We = 0,1$ e (c) $We = 0,2$..	47
4.10	Resíduos de $\tau_{xx,FLC}$, do escoamento entre placas paralelas com $We = 0,05$, $0,1$ e $0,2$ na malha M5	48
4.11	Comparação dos resíduos de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$ na geometria da cavidade quadrada e malha M8 para $0,5 < We < 0,7$	49
4.12	Resíduos de $\tau_{xx,FLC}$, do escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel para $0,8 \leq We \leq 2$ na malha M8	50
4.13	Perfis de velocidade e do logaritmo do tensor conformação na geometria da cavidade quadrada e malha M8 para $We = 1$ e $We = 2$. (a) U_x e (b) Ψ_{xx} ao longo da linha vertical $(L/2,y)$ e (c) U_y e (d) Ψ_{xy} ao longo da linha horizontal $(x,0.75H)$	51
4.14	Resíduos de (a) $\tau_{xx,FLC}$ e (b) Ψ_{xx} do escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel para $4 \leq We \leq 16$ na malha M8	52
4.15	Linhas de correntes na geometria da cavidade quadrada com tampa móvel para $We = 16$ na malha M8	53

Lista de Símbolos

c	Tensor conformação	-
Co	Número de <i>Courant</i>	-
D	Tensor taxa de deformação	s^{-1}
De	Número de <i>Deborah</i>	-
I	Tensor Identidade	-
L	Comprimento característico	m
L^2	Parâmetro do modelo FENE	-
$N1$	Primeira diferença de tensões normais	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
p	Pressão	$Kg.m^{-1}.s^{-2}$
R	Matriz de vetores característicos	
Re	Número de <i>Reynolds</i>	-
t	Tempo	s
T	Tempo característico	s
U	Vetor velocidade	$m.s^{-1}$
We	Número de <i>Weissenberg</i>	-
$We_{lim,P}$	Limite do número de Weissenberg obtido pela formulação numérica padrão	-
$We_{lim,FLC}$	Limite do número de Weissenberg obtido pela Formulação Log-Conformação	-

Letras Gregas

$\overset{\nabla}{\tau}_p$	Derivada convectiva superior no tempo do tensor das tensões	-
A	Tensor dos valores característicos de c	-

Λ_Ψ	Tensor dos valores característicos de Ψ	-
α	Parâmetro do modelo de Giesekus	-
β	Razão de viscosidades	-
ε	Parâmetro não-linear do modelo PTT	-
η_o	Viscosidade total	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
η_p	Viscosidade da contribuição polimérica	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
η_s	Viscosidade da contribuição do solvente	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
λ	Tempo de relaxação do fluido	s
ρ	Massa específica	$kg.m^{-3}$
τ	Tensor das tensões viscosas	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{FLC}	Tensor tensão obtido pela Formulação Log-Conformação	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_p	Tensor tensão da contribuição polimérica	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_s	Tensor tensão da contribuição do solvente	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{xx}	Tensões normais xx	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
$\tau_{xx,FLC}$	Tensões normais xx obtidas pela Formulação Log-Conformação	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{xy}	Tensão de cisalhamento	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
ϕ	Variável arbitrária analisada na face da célula	-
Ψ	Logaritmo do tensor conformação	-

Siglas

AVSS	Adaptative Viscosity Stress Splitting Scheme
BSD	Both Side Difusion
CFD	Computational Fluids Dynamics
CUBISTA	Convergent and Universally Boudend Interpolation for the Treatment of Advection

<i>DEVSS</i>	Discret Elastic Viscous Split-Stress
<i>DF</i>	Diferenças Finitas
<i>DIC</i>	Diagonal Incomplete-Cholesky
<i>EEME</i>	Explicit Elipitic Momentum Equation
<i>EF</i>	Elementos Finitos
<i>EVSS</i>	Elastic Viscous Split-Stress
<i>FENE-CR</i>	Finitely Extensible Nonlinear Elastic - Chilcott and Rallison
<i>FLC</i>	Formulação Log-Conformação
<i>HWNP</i>	High Weissenberg Number Problem
<i>ILU</i>	Incomplete LU Factorization
<i>OpenFOAM</i>	Open Source Field Operation and Manipulation
<i>PBiCG</i>	Preconditioned Biconjugate Gradient
<i>PCG</i>	Preconditioned Conjugate Gradient
<i>PDPS</i>	Positive Definiteness Preserving Scheme
<i>PISO</i>	Pressure Implicit Splitting of Operators
<i>PTT</i>	Phan-Thien-Tanner
<i>SPSS</i>	Solvent-Polymer Stress Splitting
<i>SRCR</i>	Square Root Conformation Representation
<i>UCM</i>	Upper Convected Maxwell
<i>VF</i>	Volumes Finitos
<i>WENO</i>	Weighted Essentially Non-Oscillatory

Lista de Tabelas

2.1	Limites do número de <i>Weissenberg</i> obtidos pelas metodologias numéricas convencionais do estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos	10
2.2	Limites do número de <i>Weissenberg</i> obtidos pela FLC no estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos	17
3.1	Descrição esquematizada da implementação da FLC aplicada ao modelo de Oldroyd-B	25
3.2	Esquemas de discretização para os termos das equações governantes e constitutivas	26
3.3	<i>Solvers</i> utilizados na resolução das equações discretizadas	26
3.4	Características das Malhas da Geometria de Placas Paralelas	29
3.5	Parâmetros viscoelásticos e números adimensionais envolvidos no escoamento entre placas paralelas	30
3.6	Características das malhas da geometria da cavidade quadrada com tampa móvel	32
3.7	Parâmetros viscoelásticos e números adimensionais envolvidos no escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel	33

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo é apresentada uma breve introdução do trabalho. Primeiramente, é exposta a importância e as dificuldades do estudo da simulação de fluidos viscoelásticos, que se constitui na motivação da realização deste estudo. Em seguida, são apresentados os objetivos e a estrutura da dissertação.

1.1 Motivação

Escoamentos de fluidos viscoelásticos são importantes para uma variedade de aplicações em muitos campos da engenharia como, por exemplo, na moldagem por injeção e na extrusão de resinas poliméricas. Assim, cada vez mais se recorre à Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) como ferramenta para modelagem e simulação deste tipo de escoamento, buscando-se prever os fenômenos complexos que podem resultar do comportamento viscoelástico.

Independentemente da aplicação específica considerada, as simulações de escoamentos de fluidos viscoelásticos são propensas a dificuldades numéricas,

associadas à rígida natureza hiperbólica das equações diferenciais constitutivas utilizadas para estes fluidos. Estas dificuldades numéricas são conhecidas na literatura como o problema do alto número de *Weissenberg* (*High Weissenberg Number Problem* - HWNP) (KEUNINGS, 1986). O número de *Weissenberg* é um número adimensional que quantifica o nível de elasticidade em uma determinada condição de escoamento. O HWNP consiste no fato de que o valor máximo do número de *Weissenberg* para o qual a maioria dos esquemas numéricos utilizados para simulações de escoamentos viscoelásticos são convergentes é bastante baixo se comparado aos valores de interesse prático, como por exemplo, aqueles que podem ser atingidos em escoamentos tipicamente encontrados no processamento de materiais poliméricos ($We \in [0, 150]$) (AZADEH, 2011). O valor de *Weissenberg* máximo depende de vários fatores como, por exemplo, o tipo de escoamento, a geometria do problema, esquema de discretização espacial e o algoritmo numérico (COMMINAL *et al.*, 2015).

Uma das mais recentes abordagens propostas na literatura para tratar o HWNP é a formulação Log-Conformação (FLC), proposta por Fattal e Kupferman (2004). Nesta formulação, a equação constitutiva viscoelástica utilizada é reescrita em termos de Ψ , o logaritmo do tensor conformação c (ver Equação 3.9). Então, esta equação é resolvida em termos da variável Ψ , em lugar de ser feita diretamente em termos das componentes do tensor das tensões τ , como ocorre na formulação original.

Apesar do potencial de aplicação da FLC na extensão de faixa *Weissenberg* analisável e do fato que seu uso na literatura referente à análise numérica de escoamentos vem se estendendo (AFONSO *et al.*, 2009; DAMANIK *et al.*, 2014; KNECHTGES, 2015; SAMARITO, 2014; TOMÉ *et al.*, 2012), pouca atenção tem sido dirigida para análise da acurácia da solução obtida para o campo de tensões. Diversos pesquisadores da área CFD voltada para fluidos viscoelásticos apontam para a existência de questões relacionadas à acurácia das soluções obtidas (FATTAL & KUPFERMAN, 2004; AFONSO *et al.*, 2009; HABLA *et al.*, 2014;), mas não fazem uma análise diretamente relacionada a este aspecto, apresentando somente resultados que mostram a eficácia da formulação no aumento do número de *Weissenberg* crítico.

Neste trabalho, a análise da acurácia das tensões obtidas via FLC é estudada. O modelo viscoelástico utilizado é o de Oldroyd-B (OLDROYD, 1950), que é um dos modelos constitutivos mais simples capazes de descrever o comportamento viscoelástico de soluções poliméricas e polímeros fundidos sob condições gerais de escoamento (BIRD *et al.*, 1987). Algumas geometrias padrão no estudo de escoamentos viscoelásticos foram utilizadas para esta análise. O critério de qualidade de acurácia da solução foi o decaimento do resíduo do campo de tensões, ao realizar a substituição do tensor das tensões, obtido pela FLC (τ_{FLC}), na equação constitutiva original. Esta forma de análise não foi encontrada na literatura,

tampouco foi encontrada uma relação entre as duas formulações diante a um critério de convergência da solução.

1.2 Objetivos

No contexto do que foi abordado na Seção 1.1, os objetivos deste trabalho são:

- aplicar a Formulação Log-Conformação no modelo constitutivo de Oldroyd-B e implementar a transformação logarítmica deste modelo no pacote de CFD *OpenFOAM*;
- aplicar a Formulação Log-Conformação associada ao modelo constitutivo de Oldroyd-B em geometrias padrão do estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos;
- verificar os limites de número de *Weissenberg* alcançados na formulação convencional e na Formulação Log-Conformação;
- analisar a acurácia das tensões obtidas via Formulação Log-Conformação em comparação com a formulação convencional.

1.3 Estrutura da Dissertação

Este trabalho está estruturado da seguinte forma:

No Capítulo 2, primeiramente é apresentada uma breve revisão sobre conceito de fluidos viscoelásticos. Em seguida é relatado sobre a simulação numérica de fluidos viscoelásticos e as principais dificuldades encontradas neste tipo de simulação, assim como as razões para que ocorra o HWNP. Ainda neste capítulo é apresentada a Formulação Log-Conformação, encerrando com uma revisão dos trabalhos publicados de maior importância sobre a FLC.

No Capítulo 3 são apresentadas as equações que descrevem o movimento de um fluido viscoelástico. Primeiro é introduzida a descrição convencional do

escoamento deste tipo de fluido utilizando um modelo constitutivo, depois são apresentadas as equações derivadas da formulação original que fazem parte da FLC. Em seguida é apresentada a implementação numérica utilizada neste trabalho, assim como os casos de estudo padrão utilizados na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. O capítulo termina com a descrição da metodologia utilizada para a realização das simulações.

No Capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos neste trabalho. Primeiramente são apresentados estudos de validação do código implementado para escoamentos com valores baixos do número de *Weissenberg*, comparando-se com a solução numérica e com a solução analítica (quando houver). Posteriormente, é feita a análise da qualidade das tensões, utilizando a comparação dos resíduos das duas formulações, assim como a verificação dos limites de número de *Weissenberg* alcançados neste trabalho.

Finalmente, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões do trabalho, assim como sugestões, para o prosseguimento desta pesquisa em trabalhos futuros.

Capítulo 2

Conceitos fundamentais e revisão bibliográfica

Neste capítulo são apresentados os conceitos fundamentais que estão relacionados com a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, e também uma revisão bibliográfica de estudos já realizados sobre a formulação Log-Conformação.

2.1 Simulação Numérica de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos e Pacote *OpenFOAM*

Fluidos viscoelásticos são fluidos não-newtonianos que combinam respostas viscosa e elástica quando submetidos à deformação (BIRD *et al.*, 1987). Diversos fluidos encontrados em diferentes processos industriais possuem comportamento viscoelástico. Como exemplo, pode-se citar os polímeros fundidos, soluções poliméricas, tintas, graxas e alimentos. Conseqüentemente, estes fluidos se tornam foco de pesquisas e estudos principalmente por indústrias de polímeros, petrolíferas e alimentícias.

Fluidos viscoelásticos estão presentes não somente nas indústrias, mas também na natureza, tal como no sangue e outros fluidos corporais. Em muitos escoamentos estes fluidos apresentam respostas que podem ser consideradas anômalas em comparação com aquelas apresentadas por fluidos Newtonianos (BIRD *et al.*, 1987), gerando fenômenos visuais característicos de fluidos viscoelásticos, tais como o efeito de *Weissenberg* e o inchamento do extrudado. O efeito de *Weissenberg* (*Weissenberg effect/ rod climbing*) consiste na subida pela haste do agitador exibida por fluidos viscoelásticos sob agitação (Figura 2.1a), em um comportamento contrário ao da formação de vórtice observada em fluidos newtonianos. O inchamento do extrudado (*die-swell*) é a variação de diâmetro que ocorre entre o filete líquido que abandona um determinado tubo com relação ao diâmetro deste. Se o fluido for newtoniano a mudança depende do número de *Reynolds*. Em números baixos de *Reynolds*, há um ligeiro aumento do diâmetro, porém se os efeitos inerciais se tornam mais fortes, o diâmetro diminui (Figura 2.1b). Se o fluido é viscoelástico, o fluido tende a mostrar um forte aumento no diâmetro que pode ser algumas vezes maior que o diâmetro do tubo. Isso ocorre porque a tensão ao longo das linhas de corrente é gerada pelo movimento de cisalhamento dentro do tubo. Logo que o fluido sai do tubo esta tensão é aliviada, assim o filete líquido encolhe longitudinalmente e se expande na direção transversal (Figura 2.1c).

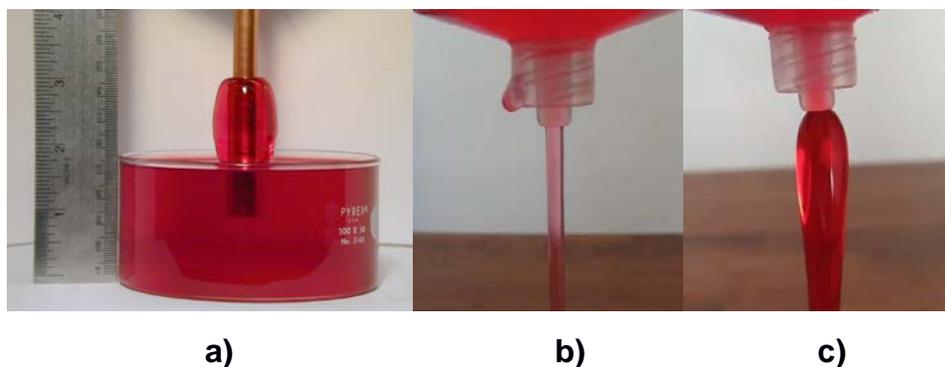


Figura 2.1: Fenômenos em escoamentos viscoelásticos: (a) Efeito de *Weissenberg*, (b) inchamento do extrudado em um fluido newtoniano e (c) em um fluido polimérico (CLAUS, 2013).

Nos últimos anos, tem crescido o interesse pela modelagem mais detalhada da dinâmica de fluidos poliméricos. O desenvolvimento dos métodos de simulação e *softwares* computacionais tem criado oportunidades para investigar materiais poliméricos, descrevê-los a nível molecular e, ainda, prever suas propriedades.

Para aumentar a capacidade preditiva das simulações do escoamento polimérico, é importante selecionar modelos que consigam representar realisticamente os fenômenos físicos encontrados em tal processo. A seleção apropriada de um modelo viscoelástico é certamente uma das etapas mais

importantes do processo de simulação de um escoamento viscoelástico, já que polímeros com comportamentos similares em cisalhamento podem ser bastante distintos em características alongacionais. Deste modo, a seleção baseada em distintas propriedades do material de interesse pode resultar na escolha de modelos diferentes e, conseqüentemente, obter respostas comportamentais diferentes (OLIVEIRA, 1996).

A simulação numérica em mecânica dos fluidos, bastante conhecida como CFD – *Computational Fluid Dynamics*, é atualmente uma ferramenta poderosa para a solução de importantes problemas aplicados da engenharia (MALISKA, 2010). Existem diversos *softwares* que auxiliam na simulação e modelagem computacional de escoamento de fluidos, como o CFX, o FLUENT e o *OpenFOAM*. Os dois primeiros são softwares comerciais largamente utilizados, ao contrário do mais acessível software livre *OpenFOAM*, que surge como uma opção alternativa em relação aos *softwares* comerciais de simulação e modelagem computacional.

O *OpenFOAM* é um *software* gratuito de fluidodinâmica computacional que possui uma extensa gama de recursos para resolver diversos problemas de escoamentos de fluidos complexos, que envolvem desde reações químicas, turbulência e transferência de calor, à dinâmica de sólidos e eletromagnetismo. Ele possui código aberto que permite ao usuário criar novas aplicações ou modificar as existentes (OLIVEIRA, 2012). São inúmeras as vantagens em se utilizar um pacote CFD com código livre como o *OpenFOAM*, dentre elas podem-se citar:

- seu código é aberto;
- escrito em linguagem C++ ;
- gerador de malhas e visualizador de resultados incorporado ao software;
- possibilita o uso de processamento paralelo;
- aplicação em uma ampla faixa de problemas de engenharia;
- possui boa resolução de sistemas lineares de equações e dispõe de uma

grande variedade de esquemas de interpolação (FAVERO, 2009).

O *OpenFOAM* inclui vários *solvers* que simulam problemas específicos na engenharia. Entre eles pode-se citar o *solver viscoelasticFluidFoam*, que foi desenvolvido em nosso grupo de pesquisa (FAVERO, 2009) e atualmente é distribuído com o *OpenFOAM* na sua versão para desenvolvedores. O *solver viscoelasticFluidFoam* é capaz de resolver uma grande variedade de escoamentos de fluidos viscoelásticos para variadas geometrias, seja o escoamento por cisalhamento simples, alongacional, ou uma combinação de ambos (OpenFOAM, 2016).

Embora exista uma extensa literatura sobre modelagem de comportamento viscoelástico e simulação de escoamentos viscoelásticos, os pacotes comerciais destinados a serem aplicados para a análise de fluidos poliméricos, são, na verdade, limitados à descrição dos fenômenos não-newtonianos puramente viscosos. O desenvolvimento e utilização de um *software* com capacidade de análise de

escoamentos viscoelásticos ainda é realizado quase exclusivamente em ambientes acadêmicos (FAVERO, 2010).

2.2 Números Adimensionais em Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos

Números adimensionais são geralmente usados na engenharia para facilitar a correlação e a interpretação de dados experimentais. Eles são particularmente úteis para escalar argumentos e também para catalogar regimes de escoamentos.

Em problemas de mecânica dos fluidos envolvendo fluidos newtonianos, o número de *Reynolds* (Re) aparece como um grupo adimensional que pode ser interpretado como a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas. Em alguma dada situação de escoamento outros números adimensionais podem aparecer, mas o número de *Reynolds* é geralmente o mais importante grupo adimensional (BIRD *et al.*, 1987). O número de *Reynolds* é dado por:

$$\text{Re} = \frac{\rho UL}{\eta} \quad (2.1)$$

em que ρ é massa específica do fluido, U e L são a velocidade de escoamento e o comprimento característicos, respectivamente, e η é a viscosidade dinâmica do fluido.

No escoamento de fluidos viscoelásticos existem dois números adimensionais: o número de *Deborah* (De) e o número de *Weissenberg* (We). Embora eles tenham diferentes origens e diferentes efeitos de quantificação, eles são frequentemente usados como sinônimos. Detalhes sobre a diferença entre esses dois números e suas aplicações podem ser consultados nos trabalhos de Dealy (2010) e Poole (2012). Uma breve descrição destes dois números é apresentada a seguir.

O número de *Deborah* foi originalmente definido como a razão entre o tempo de relaxação do fluido e o tempo de observação. Como o termo “tempo de observação” não é muito preciso, a definição do número de *Deborah* foi sutilmente alterada para:

$$\text{De} = \frac{\lambda}{t_c} \quad (2.2)$$

em que t_c é um tempo característico para o processo de deformação e λ o tempo de relaxação do fluido. De acordo com a definição, o número de *Deborah* é uma medida adimensional da taxa de mudança das condições de escoamento. Assim, em um escoamento de mudança lenta ou em escoamento estacionário o tempo característico para deformação do processo é infinito e, conseqüentemente, o número de *Deborah* é zero.

O número de *Weissenberg* é definido por:

$$We = \lambda \frac{U}{L} \quad (2.3)$$

em que U/L representa a taxa de deformação característica. Deste modo o número de *Weissenberg* pode ser interpretado como a razão entre as forças elásticas e as forças viscosas como, por exemplo, em um escoamento de cisalhamento simples estacionário.

Em geometrias em que uma escala de comprimento determina a dinâmica do problema, o número de *Deborah* e o de *Weissenberg* podem coincidir. Caso não seja, estes números podem ser relacionados entre si por um fator geométrico.

No restante do presente trabalho, o número de *Weissenberg* foi usado para caracterizar o regime do escoamento viscoelástico.

Existe também um outro número adimensional em escoamentos de fluidos viscoelásticos que é denominado como razão de retardo. Este número surge do fato que muitos modelos viscoelásticos utilizam o artifício de escrever a contribuição viscosa total do fluido, η_o , como a soma de duas parcelas: uma newtoniana de menor valor que é geralmente denominada de viscosidade do solvente, η_s , e outra de maior valor, denominada de viscosidade do polímero, η_p . O número de retardo, representado pela letra grega β , é dado por:

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_o} = \frac{\eta_s}{\eta_s + \eta_p} \quad (2.4)$$

Além destes quatros números adimensionais já citados, existe também o número de *Courant* (Co), que é uma condição necessária, em CFD, para garantir estabilidade e atingir a convergência ao resolver numericamente por métodos de integração explícitos as equações diferenciais parciais transientes envolvidas no fenômeno a ser simulado. O número de *Courant* é definido como:

$$Co = \frac{U\Delta t}{\Delta x} \quad (2.5)$$

em que U é a velocidade média do fluido, Δt é o passo de tempo e Δx é o tamanho da célula de discretização de referência. Para que o método numérico seja estável e

a simulação convirja, o número de *Courant* dever ser menor ou igual a um valor máximo, $Co \leq Co_{max}$. Desta forma, é possível escolher um passo de tempo e um tamanho de célula adequado para a simulação.

2.3 O Problema do Alto Número de *Weissenberg*

O problema do alto número de *Weissenberg* (*High Weissenberg Number Problem* - HWNP) consiste na dificuldade de convergência dos algoritmos iterativos na simulação numérica quando o número de *Weissenberg* está acima de determinados valores-limite. A falha para estas simulações ocorre a números de *Weissenberg* muito baixos ($We \sim 1$) (CHEN, 2014), e é acompanhada pela falta de acurácia e de convergência de malha. O problema é ainda mais proeminente quando cantos vivos (por exemplo, em um escoamento através de uma contração) e pontos de estagnação (por exemplo, em um escoamento através de um cilindro) aparecem.

Na Tabela 2.1 são apresentados alguns valores de *Weissenberg* crítico ou faixas de *Weissenberg* de convergência reportados na literatura. Por conveniência, para distinção de outros valores limites de *We* que serão apresentados mais tarde, os valores críticos de *We* na Tabela 2.1 são referenciados como $We_{lim,P}$, com o subíndice *P* indicando “padrão”, conforme será discutido posteriormente. Nota-se que a faixa do número de *Weissenberg* alcançada ainda é, em geral, muito baixa.

Tabela 2.1. Limites do número de *Weissenberg* obtidos pelas metodologias numéricas convencionais do estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

Geometria	Equação Constitutiva	Método Numérico	$We_{lim,P}$	Referência
Cavity	FENE-CR, $L^2 = 25$, 100, 400	Elementos Finitos (EF)	0,24	Grillet <i>et al.</i> , 1999
	Maxwell	EF	0,15	Mendelson <i>et al.</i> , 1981
	Criminale-Erickson-Filbey Model	Diferenças Finitas (DF)	0,1	Demir & Erturk, 2000
	Oldroyd-B, $\beta = 0,5$	Volumes Finitos (VF), CUBISTA	0,75	Chen, 2014
	Oldroyd-B, $\beta = 0,5$	DF	< 0,5	Fattal & Kupferman, 2005
Contração	Oldroyd-B, $\beta = 0,75$	VF de alta ordem	0,7	Muniz, 2003
	Maxwell	EF/Galerkin	0,108	Keunings, 1986
Placas Paralelas	Maxwell	EF	0,27	Mendelson <i>et al.</i> , 1981
	Oldroyd-B	EF/Galerkin	$\leq 0,2$	Chang <i>et al.</i> , 1979
	Oldroyd-B	Spectral Elements/DEVSS	2	Fietier & Deville, 2003

O HWNP continua a ser um grande desafio na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos desde a década de 1970. Até agora, a razão do problema ainda não foi claramente identificada e nenhuma solução completa foi encontrada. Mesmo assim, várias explicações plausíveis foram feitas e soluções eficazes têm sido desenvolvidas nas últimas décadas. Chen (2014) descreveu estas explicações e soluções em torno de dois aspectos: modelos constitutivos e métodos numéricos.

2.3.1 Aspectos relacionados à natureza do Modelo Constitutivo

O modelo constitutivo escolhido para a simulação deve descrever corretamente as propriedades reológicas do fluido. Em muitos trabalhos foi apresentado que os modelos de Maxwell (UCM) (MAXWELL, 1867) e Oldroyd-B sofrem mais gravemente o HWNP nas simulações. As razões para que estes modelos tenham números de $We_{lim,P}$ mais baixos são apontadas por Renardy (2000), e residem na incapacidade de resolver os grandes gradientes de tensão perto de fronteiras sólidas e singularidades de cantos, causando limitação da simulação numérica. A causa para os elevados gradientes de tensão é a existência de camadas limite e o motivo para o aparecimento de camadas limite é devido à propriedade de memória (elástica) de um fluido viscoelástico. Desta forma, o comportamento da tensão em uma camada fina perto das fronteiras sólidas difere do comportamento no domínio longe desses limites.

A espessura da camada limite diminui com o aumento do número de *Weissenberg*, e esta espessura é diferente para modelos diferentes. Para os modelos de UCM, Phan-Thien-Tanner (PTT) (THIEN & TANNER, 1977) e Giesekus (GIESEKUS, 1982), estas espessuras são da ordem de We^{-1} , $We^{-1/3}$ e $We^{-1/2}$, respectivamente (RENARDY, 2000).

Outros modelos mais complexos que os de UCM e Oldroyd-B ajudam em simulações com números de *Weissenberg* maiores, como demonstrado em muitos trabalhos numéricos. No entanto, os modelos mais simples UCM e Oldroyd-B podem aproximar satisfatoriamente o comportamento reológico de muitos fluidos viscoelásticos, como por exemplo, fluidos de Boger (CHEN, 2014).

2.3.2 Aspectos relacionados aos Métodos Numéricos

Do ponto de vista numérico existem duas razões principais para o HWNP. Uma delas é que a ausência de um termo difusivo explícito na equação da quantidade de movimento dificulta a convergência de algoritmos iterativos na simulação numérica (AMOREIRA & OLIVEIRA, 2009). Desta forma, uma prática comum para estabilizar o cálculo computacional é a inclusão de termos difusivos

adicionais nesta equação. Isso também pode ser feito ao separar os componentes puramente viscosos do tensor das tensões totais ou decompô-lo em contribuição do solvente e do polímero. O primeiro método é conhecido como *elastic-viscous stress splitting* (EVSS) introduzido por Pereira e Walters (1977), enquanto o segundo é conhecido como *solvent-polymer stress splitting* (SPSS) apresentado por Bird e Hassager (1987). Além desses, existem vários outros métodos que foram surgindo como seus derivados. São eles: *adaptive viscoelastic stress splitting* (AVSS), *discret elastic-viscous stress splitting* (DEVSS), *discret adaptive viscoelastic stress splitting* (DAVSS) e *explicit elliptic momentum equation* (EEME). Uma descrição mais detalhada destas técnicas é encontrada no trabalho de Favero (2009).

Também conhecido na literatura como *both-side diffusion* (BSD), o método DEVSS se diferencia dos outros ao se introduzir um termo difusivo adicional em ambos os lados da equação da quantidade de movimento. Assim os termos do lado direito da equação são discretizados explicitamente enquanto que os do lado esquerdo são discretizados implicitamente. Esta metodologia é a que se encontra introduzida no *solver viscoelasticFluidFoam* (FAVERO, 2009) do pacote de CFD *OpenFOAM*.

Outra causa do HWNP do ponto de vista numérico é a perda da positividade do tensor conformação. A causa para que ocorra a violação desta propriedade é que a tensão sofre uma combinação de deformação e advecção que produz íngremes perfis exponenciais. Isto gera instabilidades que podem ocasionar perda de convergência ou fazer com que a convergência da solução discretizada seja degradada à medida que a malha é refinada (OWENS & PHILLIPS, 2002).

2.4 A Formulação Log-Conformação

Como foi comentado na seção anterior, um dos problemas para a causa do HWNP é a perda da positividade do tensor conformação em alguns pontos do escoamento. Quando isto acontece, esquemas numéricos baseados em interpolações polinomiais falharão frente a esse crescimento exponencial. Assim, Fattal e Kupferman (2004) propuseram reformular a equação constitutiva em termos do logaritmo do tensor conformação. Esta ideia pode ser bem explicada com a ajuda de um problema unidimensional descrito por Fattal e Kupferman (2005). Considerando que a velocidade é constante e que o tensor conformação seja usado como um escalar $c(x,t)$ e adotando uma equação constitutiva unidimensional, encontrar $c(x, t)$ com x em um intervalo $(0, L)$ e tempo $t > 0$ tal que:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} = bc \quad (2.6)$$

em que U e b são constantes e $U, b > 0$. Em adição assume-se $c(x, 0) = 1$ como condição inicial e $c(0, t) = 1$ como condição de contorno. A equação tem a seguinte solução analítica:

$$c(x, t) = \begin{cases} \exp\left(\frac{b}{U}x\right) & \text{para } x \leq Ut \\ \exp(bt) & \text{para } Ut < x \leq L \end{cases} \quad (2.7)$$

Como enfatizado por Fattal e Kupferman (2005) e Hulsen *et al.* (2005), a dificuldade numérica de resolver a Equação 2.6 é que a discretização padrão baseada em interpolação polinomial falha ao tentar equilibrar o crescimento exponencial. Usar outros esquemas de interpolação de ordem mais alta pode até aliviar o problema, mas não resolvê-lo.

No entanto, se transformarmos a Equação 2.6 para equações em termo de $\Psi = \log c$, a equação se torna:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + U \frac{\partial \Psi}{\partial x} = b \quad (2.8)$$

que tem solução igual a:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{b}{U} & \text{para } x \leq Ut \\ bt & \text{para } Ut < x \leq L \end{cases} \quad (2.9)$$

Nota-se, que a Equação 2.8 transforma o crescimento exponencial de c em um crescimento linear em Ψ . Consequentemente, o erro da discretização numérica pode ser substancialmente reduzido.

Com base nesse princípio, Fattal e Kupferman (2004) propuseram a Formulação Log-Conformação (FLC). Essa formulação consiste em uma mudança de variável que escala logaritmicamente o tensor conformação (e consequentemente o tensor das tensões), ou seja, a equação constitutiva viscoelástica é reescrita em termos do logaritmo do tensor conformação, $\Psi = \log c$. Especificamente falando, as equações constitutivas viscoelásticas são reformuladas para a matriz logarítmica do tensor conformação, explorando o fato de que este último tensor é simétrico positivo definido. Um breve esquema de como se aplica a FLC em um modelo constitutivo viscoelástico é apresentado na Figura 2.2.

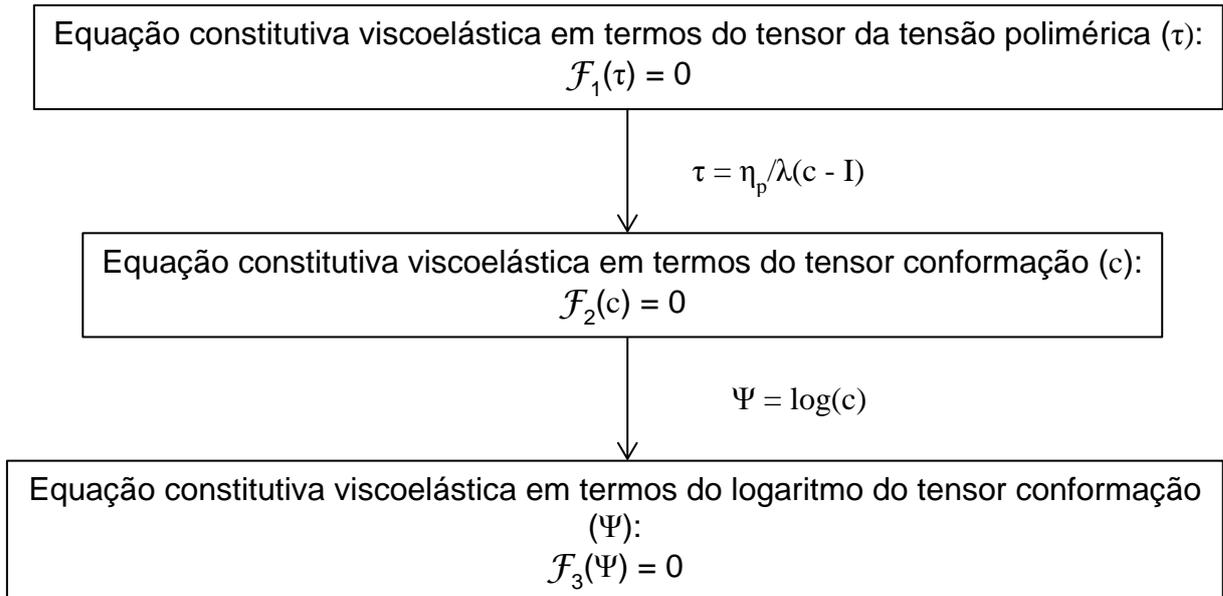


Figura 2.2. Esquema geral da aplicação da transformação Log-Conformação.

Desta forma, a equação em escala logarítmica do tensor conformação é resolvida ao invés de resolver a equação constitutiva original, fazendo com que seja removida a variação exponencial da tensão em pontos de estagnação da geometria envolvida. Maiores detalhes da transformação da formulação original para a FLC são apresentados nas Seções 3.1 e 3.2.

Cabe ainda citar que a equação constitutiva em termos do tensor conformação também é ponto de partida para outras reformulações que utilizam diversos artifícios matemáticos a fim de reduzir as instabilidades numéricas causadas pelo HWNP, como a formulação da raiz quadrada (*Square Root Conformation Representation - SRCR*) (BALCI *et al.*, 2011; DALAL *et al.* 2016) e a formulação núcleo-conformação (AFONSO *et al.*, 2012).

2.5 Estudos relativos à aplicação da formulação Log-Conformação

No trabalho onde apresentaram a formulação Log-Conformação (FATTAL & KUPFERMAN, 2004; FATTAL & KUPFERMAN, 2005; HULSEN *et al.*, 2005), Fattal e Kupferman aplicaram a FLC ao modelo viscoelástico FENE-CR (Finitely Extensible Non-linear Equation – Chilcott and Rallison) (CHILCOTT & RALLISON, 1988) utilizando o método de diferenças finitas. Analisando o escoamento em uma cavidade quadrada, foi possível alcançar um número de $We = 5$ em termos de estabilidade da simulação, que até então não chegavam a $We = 0,5$. Embora os

resultados deste trabalho tenham sido muito satisfatórios do ponto de vista de estabilidade numérica, os autores não apresentaram informações sobre a acurácia da solução obtida com a FLC. Posteriormente, eles estenderam a FLC para o modelo de Oldroyd-B em um trabalho mais detalhado e deixaram claro que apenas a instabilidade causada pelo HWNP tinha sido resolvida e que simulações a números aleatórios de *Weissenberg* não garantiam acurácia da solução (FATTAL & KUPFERMAN, 2004; FATTAL & KUPFERMAN 2005; HULSEN *et al.*, 2005).

Hulsen *et al.* (2005) aplicaram a FLC com o método dos elementos finitos e os modelos viscoelásticos utilizados foram o de Oldroyd-B e o de Giesekus com um modo de relaxação. Utilizando o escoamento através de um cilindro como caso de estudo, os autores afirmaram que para o modelo de Giesekus, com o parâmetro $\alpha = 0,01$, houve uma melhora significativa na estabilidade numérica e que não parece haver um limite de We alcançável. Entretanto, a $We = 100$, problemas de convergência para a tensão surgiram na parede do cilindro. Ainda neste trabalho os autores concluem que a FLC tem a capacidade de gerar soluções para malhas relativamente grossas, que são acuradas em grande parte do escoamento e que é possível desconsiderar inacurácias locais já que estas não são importantes do ponto de vista de interesse prático.

Coronado *et al.* (2007), usando a formulação DEVSS-TG/SUPG, simplesmente substituíram o tensor conformação c por $\exp(\Psi)$. Primeiramente os autores aplicaram esta formulação ao modelo de Oldroyd-B onde obtiveram um número máximo alcançado de $We = 1,05$. Embora este valor de We não seja muito satisfatório, eles observaram um aumento de 40% do $We_{lim,P}$ em comparação com a formulação DEVSS-TG/SUP tradicional. Ainda nesse trabalho, os autores afirmaram ser possível aplicar essa simples transformação em qualquer modelo viscoelástico. Assim utilizaram então os modelos de Larson (LARSON, 1988) e obtiveram um $We = 12,3$ para o modelo de Larson-1, onde na formulação original só foi possível obter um $We_{lim,P} = 4,49$.

Já sendo utilizada no método das diferenças finitas e dos elementos finitos, a FLC foi então implementada para o método dos volumes finitos por Afonso *et al.*, (2009). Neste estudo foram utilizados os modelos viscoelásticos de Oldroyd-B e de Phan-Thien–Tanner (PTT) em um escoamento ao redor de um cilindro. Primeiramente, utilizando o modelo de Oldroyd-B, foram feitas simulações com baixos números de De a fim de comparar as duas formulações e foi obtido um valor máximo de $De = 0,9$ para a formulação padrão. Já para a FLC foi obtido um número de $De = 1,8$. Em seguida para o modelo de PTT, com o parâmetro $\varepsilon = 0,25$ (maior valor do parâmetro testado) nenhum sinal de convergência foi observado em nenhuma das malhas por eles empregadas, mesmo exibindo resultados com valores de $De \sim 100$. Já para $\varepsilon = 0,02$ (menor valor do parâmetro testado) o valor máximo de De foi aumentado de 1,2, com a formulação padrão, para 10, com a Formulação Log-Conformação.

Posteriormente, diversos outros trabalhos utilizando a FLC foram publicados. Kane *et al.* (2009) comparou quatro diferentes versões da FLC em seu trabalho. A primeira consiste na versão original da FLC proposta por Fattal e Kupfermann (2004). A segunda consiste na versão proposta por Coronado *et al.* (2007). Foram introduzidas duas variantes nesta segunda versão. Uma delas consiste em um tratamento especial do termo advectivo $U \cdot \nabla e^\Psi$ que é mais acurado do que o descrito por Coronado *et al.* (2007), enquanto que na outra variante foi mostrado como os termos e^Ψ e ∇e^Ψ podem ser computados analiticamente a fim de permitir uma formulação linear completa da equação constitutiva e seu cálculo pelo método de Newton. As soluções obtidas nestas 4 versões mostraram-se muito similares e nenhum limite superior de We foi obtido em relação aos trabalhos de Fattal e Kupfermann (2004) e Coronado *et al.* (2007).

Tomé *et al.* (2012), que aplicaram a FLC para escoamentos envolvendo superfícies livres, conseguiram um número máximo de $We = 50$ para um fluido de Maxwell, analisando somente a estabilidade do método. Chen (2014) comparou a FLC com outros tipos de formulações tais como a PDPS (*Positive Definiteness Preserving Scheme*) e a SRCR (*Square-Root Conformation Representation*), mostrando que a FLC é uma das melhores senão a melhor formulação para lidar com o HWNP. Para o caso do escoamento entre placas paralelas, para o qual encontraram um valor máximo de $We = 5$, estes autores fizeram uma análise de acurácia baseada na comparação dos resultados numéricos de tensão com a solução analítica. Para as demais geometrias, a análise da acurácia da solução não foi realizada.

Habla *et al.* (2014) implementaram pela primeira vez a FLC no pacote de CFD *OpenFOAM*. Neste trabalho os autores utilizaram como ponto de partida o solver *viscoelasticFluidFoam*, de Favero (2009), para realizar simulações 3D de um fluido de Oldroyd-B em uma cavidade quadrada, que até então não tinha sido analisada com a FLC. Inicialmente eles usaram o escoamento entre placas paralelas para validar seu código. A solução para a velocidade em um ponto no centro da geometria, a $We \sim 100$, foi comparada com a solução analítica transiente $U(y,t)$ e apresentou boa concordância. Entretanto, os autores não apresentaram soluções para a tensão τ a este mesmo We . Posteriormente apresentaram em linhas de correntes resultados para $We = 160$, na cavidade quadrada, e afirmaram que não encontraram nenhum limite de We em termos de estabilidade. Porém os autores afirmaram que a análise do desempenho do seu código em termos de acurácia e convergência permanecem em aberto.

Comminal *et al.* (2015) apresentaram uma nova técnica numérica em elementos finitos para escoamentos de fluidos viscoelásticos. Esta técnica combina a FLC e a formulação *stream-function* das equações de Navier-Stokes. O método numérico resultante é livre de erros do desacoplamento pressão-velocidade podendo conseguir soluções estáveis para grandes números de *Courant*, melhorando assim a robustez e eficiência do *solver*. A comparação com dados da

literatura para $We \leq 3$ apresentou boa concordância. Resultados a $We = 5$ e 10 atingiram um estado oscilatório quase-periódico para as variáveis relacionadas à tensão, o qual foi atribuído às instabilidades elásticas cíclicas que surgem no canto superior esquerdo da cavidade, já que nesta região o fluido acumula uma grande quantidade de energia elástica em uma fina camada de tensão.

Na Tabela 2.2 é apresentado um resumo de alguns trabalhos que utilizaram a FLC e os limites do número de *Weissenberg* alcançados com esta formulação, que a partir deste ponto será referenciado como $We_{lim,FLC}$.

Assim, de modo geral se observa que em trabalhos que reportam convergência para números de *Weissenberg* muito elevados, os resultados reportados permitem inferir somente sobre a estabilidade do código numérico com o uso da FLC. Ainda assim, não existem dados suficientes da variável relacionada à tensão na literatura a altos números de *Weissenberg* para que se chegue a resultados mais conclusivos sobre acurácia. Tampouco existe uma metodologia proposta para determinar se a solução numérica obtida de todas as variáveis são de boa acurácia em casos em que não há solução analítica.

Tabela 2.2. Limites do número de *Weissenberg* obtidos pela FLC no estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

Geometria	Equação Constitutiva	Método Numérico	$We_{lim,FLC}$	Referência
Cavidade quadrada com tampa móvel	Oldroyd-B, FENE-CR L2 = 10, $\beta=0,5$	Diferenças Finitas (DF), FLC	1,0, 2,0, 3,0 e 5,0	Fattal & Kupferman, 2004; 2005
	Oldroyd-B, $\beta=0,5$	EF, FLC	0,5, 1,0	Hao & Pan, 2007
	Oldroyd-B, $\beta=0,5$	VF, 3D, FLC, CUBISTA	$0 \leq We \leq 2$	Habla <i>et al.</i> , 2014
	Oldroyd-B, $\beta=0,5$	DF/VF, FLC, stream-function	$0,25 \leq 10$	Comminal <i>et al.</i> , 2015
	Oldroyd-B, $\beta=0,5$	DF, Técnica Núcleo Conformação	0,5, 1,0, 2,0	Martins <i>et al.</i> , 2015
	Oldroyd-B, $\beta=0,5$	DF, Formulação da Raiz Quadrada	1,0	Dalal <i>et al.</i> , 2016
Placas Paralelas	Oldroyd-B, $\beta=0,01$	VF, 3D, FLC, CUBISTA	100*	Habla <i>et al.</i> , 2014
	Oldroyd-B, $\beta=0,1$	Weighted essentially non-oscillatory (WENO) de quinta ordem, front-tracking method	100*	Izbassarov & Muradoglu, 2015
	Oldroyd-B, $\beta=0,1$	VF, FLC, CUBISTA	5	Chen, 2014

Tabela 2.2 (Continuação). Limites do número de *Weissenberg* obtidos pela FLC no estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

Geometria	Equação Constitutiva	Método Numérico	We_{lim,FLC}	Referência
Contração 4:1	Oldroyd-B, $\beta=0,1$	VF, FLC, CUBISTA	> 4,0	Chen, 2013
	FENE-CR, $\beta=0,01$	WENO de quinta ordem, front- tracking method	2,35	Izbassarov & Muradoglu, 2015
Escoamento ao redor de um cilindro	Oldroyd-B, $\beta=0,59$	DF, FLC	5	Fattal & Kupferman, 2005
	Oldroyd- B,Larson1-2 $\beta=0,59$	DF, FLC	1,05	Coronado, 2007
	Oldroyd-B	FLC	0,7	Kane, 2009
	Oldroyd-B, PTT	VF, FLC	0,9/7	Afonso, 2009
	Oldroyd-B, $\beta=0,59$	VF, FLC, CUBISTA	> 1,0	Chen, 2013

* Apresenta dados somente para a solução transiente da velocidade $U(y,t)$ em um ponto no centro da geometria.

Capítulo 3

Metodologia

Nesta seção é apresentada a modelagem matemática do escoamento de um fluido viscoelástico. Também é apresentada nesta seção a abordagem da Formulação Log-Conformação incluindo o método utilizado para o cálculo de valores e vetores característicos.

3.1 Equações Governantes

Considerando o escoamento de um fluido incompressível e isotérmico, as equações governantes para este fenômeno são a equação da conservação da massa e a equação da conservação da quantidade de movimento. A equação da conservação da massa para escoamentos incompressíveis é dada por:

$$\nabla \cdot \underline{U} = 0 \quad (3.1)$$

em que \underline{U} é o vetor velocidade.

A equação da conservação da quantidade de movimento pode ser escrita como:

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{U}}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\underline{U}\underline{U}) \right) = -\underline{\nabla} p + \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (3.2)$$

na qual ρ é massa específica do fluido, t é o tempo, p é a pressão e $\underline{\underline{\tau}}$ é tensor das tensões viscosas.

Uma equação constitutiva para o tensor das tensões viscosas é necessária para completar o sistema de equações. No caso de escoamentos de fluidos viscoelásticos, esse tensor, na maioria dos modelos viscoelásticos, é escrito como a soma das contribuições do solvente e do polímero:

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_s + \underline{\underline{\tau}}_p \quad (3.3)$$

em que a lei de Newton pode ser aplicada para a contribuição do solvente:

$$\underline{\underline{\tau}}_s = \eta_s \left[\underline{\underline{\nabla}} \underline{U} + (\underline{\underline{\nabla}} \underline{U})^T \right] \quad (3.4)$$

em que η_s é a viscosidade do solvente. Para a contribuição polimérica $\underline{\underline{\tau}}_p$ pode ser dada por uma equação constitutiva viscoelástica. Existem diversos modelos na literatura que representam $\underline{\underline{\tau}}_p$, sendo que uma descrição bastante completa deste assunto pode ser encontrada em Bird *et al.* (1987) e Larson (1988).

No presente trabalho foi utilizado o modelo de Oldroyd-B. Este modelo é um dos mais simples existentes para a descrição da viscoelasticidade, apresentando limitações inerentes (por exemplo, a predição de uma viscosidade independente da taxa de deformação) que impossibilitam a representação adequada do comportamento reológico de materiais poliméricos reais. No entanto, apesar destas limitações este é um dos modelos mais usados na literatura para testes de esquemas numéricos para análise de escoamentos viscoelásticos. Isto se deve principalmente aos seguintes fatores:

(i) possibilita a obtenção de soluções analíticas para algumas geometrias específicas (DUARTE *et al.*, 2008), proporcionando uma base de comparação importante para a análise de desempenho do esquema numérico utilizado;

(ii) do ponto de vista numérico é muitas vezes mais crítico que outros modelos não lineares mais complexos com relação à estabilidade e, conseqüentemente, limite máximo de número de *Weissenberg* para o qual se pode obter solução; isto se deve ao fato de predizer viscosidade e coeficientes de forças normais independentes da taxa de deformação, o que gera dificuldade de atenuação de erros em regiões de singularidade.

O modelo de Oldroyd-B, considerando um único modo de relaxação, tem a seguinte forma:

$$\underline{\underline{\tau}}_{=P} + \lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_{=P} = \eta_p \left[\underline{\underline{\nabla U}} + (\underline{\underline{\nabla U}})^T \right] \quad (3.5)$$

em que λ é o tempo de relaxação do fluido, η_p é a viscosidade do polímero, e o termo $\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_{=P}$ representa a derivada convectiva superior no tempo:

$$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_{=P} = \frac{\partial \underline{\underline{\tau}}_{=P}}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}} \cdot (\underline{\underline{U}} \underline{\underline{\tau}}_{=P}) - (\underline{\underline{\nabla U}})^T \cdot \underline{\underline{\tau}}_{=P} - \underline{\underline{\tau}}_{=P} \cdot \underline{\underline{\nabla U}} \quad (3.6)$$

Como é comum na descrição de escoamentos viscoelásticos, a equação constitutiva mecânica também pode ser utilizada na forma multimodo, na qual a contribuição polimérica para a tensão é dada por:

$$\underline{\underline{\tau}}_{=P} = \sum_1^n \underline{\underline{\tau}}_{=P_i} \quad (3.7)$$

em que cada modo de tensão é descrito por uma equação equivalente à Equação (3.6).

Assim, para um escoamento tridimensional com apenas um modo de relaxação e levando em consideração que o tensor é simétrico, tem-se um sistema de dez equações diferenciais e dez incógnitas, que são a pressão, as três componentes do vetor velocidade e seis das componentes do tensor das tensões. Para cada modo de relaxação adicional utilizado, o número de equações e de incógnitas aumenta em seis unidades.

3.2 A Formulação Log-Conformação

Como mencionado na Seção 2.4, o primeiro passo para a aplicação da FLC é reescrever a equação constitutiva viscoelástica, em termos do tensor conformação $\underline{\underline{c}}$. O tensor das tensões se relaciona com o tensor conformação de acordo com a seguinte equação:

$$\underline{\underline{\tau}}_{=P} = \frac{\eta_p}{\lambda} (\underline{\underline{c}} - \underline{\underline{I}}) \quad (3.8)$$

em que $\underline{\underline{I}}$ é o tensor identidade. Substituindo a Equação (3.8) na equação constitutiva (3.6) tem-se:

$$\frac{\partial \underline{\underline{c}}}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}} \cdot (\underline{\underline{U}} \underline{\underline{c}}) - (\underline{\underline{\nabla U}})^T \cdot \underline{\underline{c}} - \underline{\underline{c}} \cdot \underline{\underline{\nabla U}} = \frac{1}{\lambda} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{c}}) \quad (3.9)$$

Sendo o tensor conformação uma matriz simétrica positiva definida, ele pode ser fatorado na seguinte forma:

$$\underline{\underline{c}} = \underline{\underline{R}} \cdot \underline{\underline{\Lambda}} \cdot \underline{\underline{R}}^T \quad (3.10)$$

em que $\underline{\underline{\Lambda}}$ é uma matriz diagonal contendo os três valores característicos de $\underline{\underline{c}}$ na diagonal principal e $\underline{\underline{R}}$ uma matriz ortogonal, que é formada pelos respectivos vetores característicos. Pela aplicação do teorema de Cayley-Hamilton, a transformação logarítmica do tensor conformação preserva os vetores característicos e transforma os valores característicos nos seus logaritmos. Deste modo, o logaritmo do tensor conformação pode ser fatorado da seguinte forma:

$$\underline{\underline{\Psi}} = \log(\underline{\underline{c}}) = \underline{\underline{R}} \cdot \log(\underline{\underline{\Lambda}}) \cdot \underline{\underline{R}}^T = \underline{\underline{R}} \cdot \underline{\underline{\Lambda}}_\Psi \cdot \underline{\underline{R}}^T \quad (3.11)$$

em que $\underline{\underline{\Psi}}$ passa a ser a nova variável considerada.

Fattal e Kupferman (2004) propuseram a decomposição do gradiente de velocidade como ponto de partida para a FLC:

$$\underline{\underline{\nabla U}} = \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{B}} + \underline{\underline{N}} \cdot \underline{\underline{c}}^{-1} \quad (3.12)$$

em que $\underline{\underline{\Omega}}$ e $\underline{\underline{N}}$ são ambas matrizes antissimétricas e $\underline{\underline{B}}$ é uma matriz simétrica e de traço nulo que comuta com $\underline{\underline{c}}$. A matriz $\underline{\underline{\Omega}}$ representa rotação pura, $\underline{\underline{B}}$ extensão pura e $\underline{\underline{N}}$ age como um termo auxiliar, que desaparece na transformação. A FLC é então aplicada ao modelo constitutivo de Oldroyd-B na sua forma em termos do tensor conformação. Aplicando a Equação (3.12) na Equação (3.9) obtém-se:

$$\frac{\partial \underline{\underline{c}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{\underline{Uc}}) - (\underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{c}} - \underline{\underline{c}} \cdot \underline{\underline{\Omega}}) - 2\underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{c}} = \frac{1}{\lambda} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{c}}) \quad (3.13)$$

A fim de obter as matrizes $\underline{\underline{\Omega}}$ e $\underline{\underline{B}}$, o gradiente de velocidade é rotacionado sobre os eixos principais do tensor conformação:

$$\underline{\underline{R}}^T \cdot \underline{\underline{\nabla U}} \cdot \underline{\underline{R}} = \underline{\underline{R}}^T \cdot \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{R}} + \underline{\underline{R}}^T \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{R}} + \underline{\underline{R}}^T \cdot \underline{\underline{N}} \cdot \underline{\underline{c}}^{-1} \cdot \underline{\underline{R}} \quad (3.14)$$

Para um escoamento tridimensional o termo do lado esquerdo da Equação (3.14) pode, então, ser descrito em termos de uma matriz definida como:

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} m_{xx} & m_{xy} & m_{xz} \\ m_{yx} & m_{yy} & m_{yz} \\ m_{zx} & m_{zy} & m_{zz} \end{pmatrix} = \underline{\underline{R}}^T \cdot \underline{\underline{\nabla U}} \cdot \underline{\underline{R}} \quad (3.15)$$

As matrizes $\underline{\underline{\Omega}}$, $\underline{\underline{B}}$ e $\underline{\underline{N}}$ podem agora ser obtidas para fechamento da Equação (3.16):

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{R}} \cdot \begin{pmatrix} m_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz} \end{pmatrix} \cdot \underline{\underline{R}}^T \quad \underline{\underline{\Omega}} = \underline{\underline{R}} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \omega_{xy} & \omega_{xz} \\ \omega_{yx} & 0 & \omega_{yz} \\ \omega_{zx} & \omega_{zy} & 0 \end{pmatrix} \cdot \underline{\underline{R}}^T \quad (3.16)$$

em que $\omega_{ij} = (\Lambda_{jj}m_{ij} + \Lambda_{ii}m_{ji}) / \Lambda_{jj} - \Lambda_{ii}$. Assim substituindo a Equação (3.11) na Equação (3.13) e com algumas manipulações matemáticas chega-se à equação em termos da nova variável $\underline{\underline{\Psi}}$:

$$\frac{\partial \underline{\underline{\Psi}}}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}} \cdot (\underline{\underline{U}} \underline{\underline{\Psi}}) - (\underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\Psi}} - \underline{\underline{\Psi}} \cdot \underline{\underline{\Omega}}) - 2\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{R}} \cdot \left[\frac{1}{\lambda} (\underline{\underline{\Lambda}}^{-1} - \underline{\underline{I}}) \right] \cdot \underline{\underline{R}}^T \quad (3.17)$$

Assim, a Equação (3.17) pode ser resolvida em termos de $\underline{\underline{\Psi}}$ e, posteriormente, a solução em termos do tensor das tensões pode ser obtida através da transformação inversa de acordo com os seguintes passos:

i) determinação de $\underline{\underline{R}}$ e $\underline{\underline{\Lambda}}_{\underline{\underline{\Psi}}}$ a partir da Equação (3.11), por meio do cálculo dos valores e vetores característicos de $\underline{\underline{\Psi}}$;

ii) cálculo do tensor conformação a partir da Equação (3.18):

$$\underline{\underline{c}} = \exp(\underline{\underline{\Psi}}) = \underline{\underline{R}} \cdot \underline{\underline{\Lambda}} \cdot \underline{\underline{R}}^T = \underline{\underline{R}} \cdot \exp(\underline{\underline{\Lambda}}_{\underline{\underline{\Psi}}}) \cdot \underline{\underline{R}}^T \quad (3.18)$$

iii) cálculo do tensor das tensões poliméricas utilizando a Equação (3.8).

Assim, aplicada a FLC, a condição da positividade é restabelecida e a instabilidade caracterizada pelo HWNP é eliminada ou, pelo menos, amenizada.

3.3 Implementação do *solver* com a formulação FLC e algoritmo numérico utilizado

A modelagem descrita na Seção 3.2 foi implementada no pacote de CFD *OpenFOAM*, tomando como ponto de partida o *solver viscoelasticFluidFoam* (FAVERO, 2009). Este *solver* é utilizado na simulação numérica transiente de escoamentos de fluidos viscoelásticos, e a metodologia nele empregada é a DEVSS,

que pode ser aplicada em todos os modelos viscoelásticos diferenciais (GUÉNETTE & FORTIN, 1995).

O *viscoelasticFluidFoam* possui um código principal chamado de *viscoelasticFluidFoam.C* onde é realizado o cálculo dos campos de velocidade e pressão pelo acoplamento pressão-velocidade PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*). Ainda dentro do *loop* PISO é feito o cálculo das tensões. Esta tensão é calculada separadamente pelo código do modelo viscoelástico definido pelo usuário, sendo que no código principal existe uma linha de comando generalizada que acessa o código do modelo. Desta forma, manteve-se inalterado o código *viscoelasticFluidFoam.C* e implementou-se a FLC (aplicada ao modelo de Oldroyd-B) como um novo modelo viscoelástico.

O novo código implementado no pacote *OpenFOAM* foi chamado de *FLC.C* e segue a mesma estrutura de implementação dos outros modelos viscoelásticos disponíveis no *solver*. A principal equação em *FLC.C* para obtenção da tensão polimérica é a Equação (3.17). Assim, primeiramente é necessário obter todos os termos desta equação, em seguida discretizá-la, resolvê-la e posteriormente fazer o cálculo inverso da transformação logarítmica para obter a tensão polimérica τ .

Uma rotina alternativa para cálculo de valores e vetores característicos também foi implementada. Optou-se por implementar o método de Jacobi que é apropriado para a obtenção de valores e vetores característicos de matrizes simétricas, como o tensor da tensão polimérica.

O método de Jacobi determina os valores e vetores característicos de uma matriz simétrica A através de sucessivas rotações, convergindo para uma matriz diagonal D , conforme:

$$A_1 = A \longrightarrow A_2 = U_1^T A_1 U_1 \longrightarrow A_3 = U_2^T A_2 U_2 \longrightarrow \dots \longrightarrow A_k = U_{k-1}^T A_{k-1} U_{k-1} \approx D$$

em que U_i ($i = 1, 2, \dots, k$) representa as matrizes de rotação.

Os elementos da diagonal de D , são aproximações para os valores característicos de A e as colunas de $V = U_1 U_2 \dots U_k$ são aproximações para os vetores característicos de A .

Devido ao seu alto custo computacional e a fim de obter um algoritmo numérico eficiente, optou-se por efetuar o cálculo de valores e vetores característicos somente uma vez por passo de tempo (ou mais de uma vez quando se usa mais de uma iteração PISO), ao invés de duas vezes como é feito em Tomé *et al.* (2009).

Também foi implementada uma rotina para calcular os resíduos de τ_{FLC} já que os resíduos obtidos pela Equação (3.17) são da variável Ψ .

A Tabela 3.1 mostra uma breve descrição dos passos do algoritmo do código `viscoelasticFluidFoam.C` que não foram alterados, assim como os passos que foram implementados para gerar o novo código `FLC.C`. Ainda nesta tabela expõe-se as variáveis envolvidas nesses códigos e suas respectivas classes no pacote `OpenFOAM`.

Tabela 3.1. Descrição esquematizada da implementação da FLC aplicada ao modelo de Oldroyd-B.

Passos do <i>solver</i> original mantidos sem alteração	- Declaração dos campos iniciais de velocidade e pressão;		
	Variável	Classe	
	U	<code>volVectorField</code>	
	p	<code>volScalarField</code>	
	- Discretização da equação da quantidade de movimento (Equação 3.2) e sua resolução (<i>momentum predictor</i> de U);		
	- Correção da pressão e cálculo dos novos campos de velocidade para satisfazer a equação da continuidade;		
	- Discretização dos modelos constitutivos em termos do tensor das tensões (formulação padrão)		
Passos Implementados	Resolução da Equação de Ψ	- Obtenção da equação constitutiva viscoelástica em termos do logaritmo do tensor conformação Ψ ;	
		- Declaração das variáveis envolvidas no modelo viscoelástico;	
		Variável	Classe
		ρ	<code>dimensionedScalar</code>
		η_s	<code>dimensionedScalar</code>
		η_p	<code>dimensionedScalar</code>
		λ	<code>dimensionedScalar</code>
		τ	<code>volTensorField</code>
	Ψ	<code>volTensorField</code>	
	Λ	<code>volTensorField</code>	
R	<code>volTensorField</code>		
	- Obtenção dos termos auxiliares B e Ω resultantes da decomposição do gradiente de velocidade da Equação (3.12);		
	- Discretização da equação constitutiva viscoelástica em Ψ , Equação (3.17) e sua resolução;		
Transformação inversa $\Psi \rightarrow \tau$	- Rotina alternativa para cálculo de valores e vetores característicos;		
	- Cálculo dos novos valores e vetores característicos e seu armazenamento para serem usados no próximo passo de tempo;		
	- Cálculo algébrico da transformação de Ψ para τ .		
	- Cálculo do resíduo de τ obtido pela FLC.		

Os esquemas de discretização para os diversos termos das equações citadas na Tabela 3.1 são apresentados na Tabela 3.2. Detalhes sobre as características desses esquemas podem ser encontrados em Jasak (1996). As equações discretizadas foram resolvidas utilizando os *solvers* e pré-condicionadores apresentados na Tabela 3.3.

Tabela 3.2. Esquemas de discretização para os termos das equações governantes e constitutivas.

Termos das Equações	Esquema de Discretização
$\text{grad}(U)$	Interpolação Linear (Diferenças Centrais)
$\text{grad}(p)$	Interpolação Linear (Diferenças Centrais)
$\text{div}(\phi, U)$	<i>Upwind</i>
$\text{div}(\phi, \tau)$	<i>Upwind</i>
$\text{div}(\phi, \Psi)$	<i>Upwind</i>
$\text{div}(\tau)$	Interpolação Linear (Diferenças Centrais)
Laplacianos	Linear Corrigida
Interpolação de valores entre pontos	Linear Corrigida
Componente do gradiente normal à face de uma célula	Corrigida
Derivadas em relação ao tempo	Euler Implícito

Tabela 3.3. *Solvers* utilizados na resolução das equações discretizadas.

Variável Calculada	Solver	Pré-Condicionador
p	PCG (gradiente conjugado pré-condicionado)	DIC (fatoração diagonal incompleta de Cholesky)
U	PBiCG (gradiente bi-conjugado pré-condicionado)	ILU (fatoração LU incompleta)
Ψ	PBiCG	ILU
τ	PBiCG	ILU

O algoritmo de solução utilizado é apresentado na Figura 3.2, considerando que sejam conhecidos U^n , p^n , τ^n , Λ^n e R^n , em que n é o passo de tempo anterior ao instante considerado. Cabe salientar que no passo de tempo inicial ($t = 0$) ocorre que \underline{c} é igual ao tensor identidade, ou seja, $\Lambda_{ii} = \Lambda_{jj}$, ocasionando uma divisão por zero no cálculo do termo ω da Equação (3.16). Como este problema só acontece no primeiro passo de tempo, ele é contornado impondo-se as condições $\underline{\underline{B}} = 1/2[\underline{\nabla U} + (\underline{\nabla U})^T]$ e $\underline{\underline{\Omega}} = 0$.

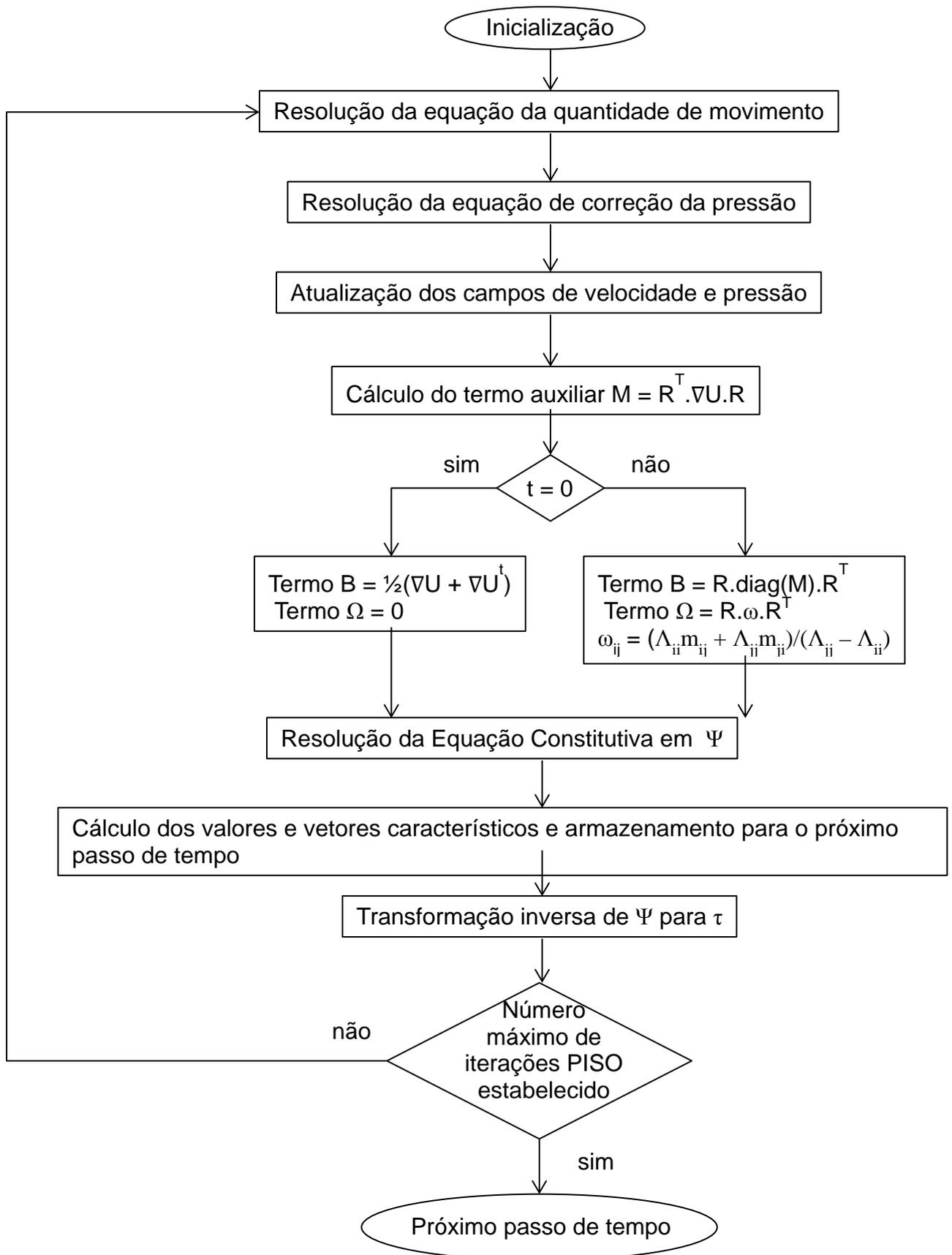


Figura 3.1. Diagrama esquemático do algoritmo.

3.4 Estudos de Validação do Código Implementado

3.4.1 Escoamento de Poiseuille

Um dos critérios utilizados para validar a Formulação Log-Conformação implementada no pacote de CFD *OpenFOAM* foi a comparação com a solução analítica para o escoamento bidimensional de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas no estado estacionário, cuja solução analítica é conhecida. A solução para as componentes da velocidade são dadas pelas Equações (3.19) e (3.20) enquanto que para as componentes da tensão são dadas pelas Equações (3.21), (3.22) e (3.23).

$$U_x = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{y^2 - h^2}{2(\eta_s + \eta_p)} \quad (3.19)$$

$$U_y = 0 \quad (3.20)$$

$$\tau_{p,xx} = \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 \frac{2\lambda\eta_p}{(\eta_s + \eta_p)^2} y^2 \quad (3.21)$$

$$\tau_{p,xy} = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\eta_p}{(\eta_s + \eta_p)^2} y \quad (3.22)$$

$$\tau_{p,yy} = 0 \quad (3.23)$$

Na geometria de placas paralelas utilizou-se como condições de contorno na entrada um perfil de velocidades uniforme ($U_x = 3,875$ cm/s), tensões com valor fixo igual a zero e pressão com gradiente nulo. Nas paredes adotou-se a condição de não deslizamento para a velocidade ($U = 0$), tensões e pressão com gradiente nulo. Na saída utilizou-se valor fixo igual a zero para a pressão, tensões e velocidade com gradiente nulo. Além destas condições utilizou-se também simetria na geometria.

Como condição inicial adotou-se a condição de fluido estagnado no interior da geometria, sendo os campos de velocidade, tensões e pressão nulos. No primeiro passo de tempo fixou-se $\Lambda = 1$ e $R = 1$. Tais condições de contorno e iniciais são representadas esquematicamente na Figura 3.2.

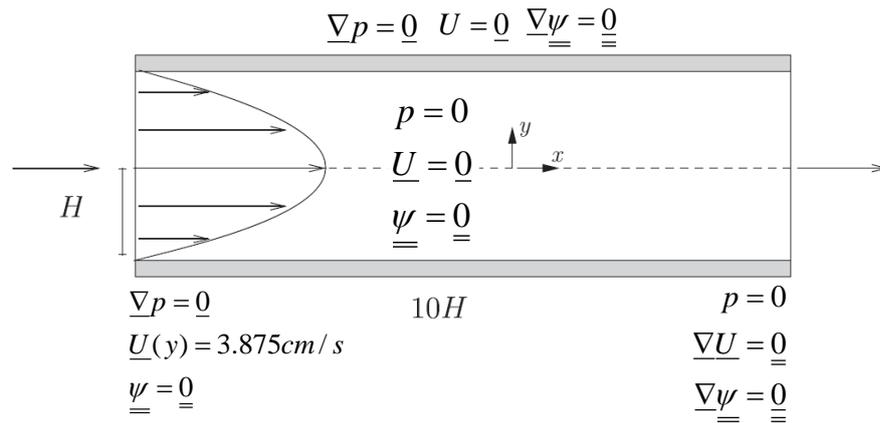


Figura 3.2. Geometria de Placas Paralelas: condições de contorno e iniciais.

O conjunto de malhas utilizados na geometria de placas paralelas é apresentado na Figura 3.3, enquanto que dados sobre as dimensões das células em cada malha são fornecidos na Tabela 3.4. Estas diferentes malhas foram utilizadas dependendo do tipo de análise que se estava realizando. Em todas as malhas as células são hexaédricas e possuem razão de aspecto unitário a fim de eliminar desvios decorrentes de células com razões de aspecto grandes.

Os parâmetros viscoelásticos usados para o fluido de Oldroyd-B foram os mesmos utilizados por Azaiez *et al.* (1996), exceto o tempo de relaxação que foi adaptado para obter-se o número de *Weissenberg* desejado em cada simulação. A Tabela 3.5 apresenta os valores utilizados de massa específica e dos parâmetros viscoelásticos, assim como os respectivos valores dos números adimensionais de interesse obtidos para a velocidade média utilizada (3,875 cm/s).

Tabela 3.4. Características das Malhas da Geometria de Placas Paralelas.

Malha	Células	$\Delta x_{\min}/H$	$\Delta y_{\min}/H$
M1	198	0,333	0,333
M2	320	0,25	0,25
M3	500	0,2	0,2
M4	2000	0,1	0,1
M5	4500	0,067	0,067

Depois de realizadas as simulações, traçaram-se perfis de velocidade e de tensões do meio (pois o caso é simétrico) até a extremidade da placa em $x = L/2$, conforme a Figura 3.4. Posteriormente, compararam-se os resultados obtidos com a solução analítica do problema.

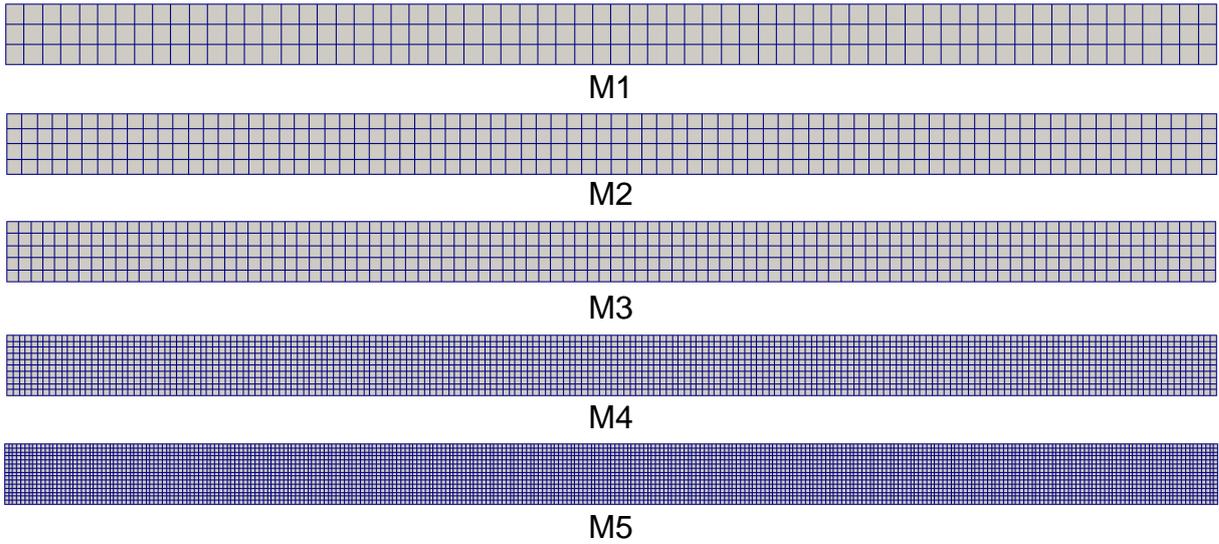


Figura 3.3. Malhas da Geometria de Placas Paralelas

Tabela 3.5. Parâmetros viscoelásticos e números adimensionais envolvidos no escoamento entre placas paralelas.

Parâmetros materiais				Números adimensionais		
ρ [kg/m ³]	η_s [Pa,s]	η_p [Pa,s]	λ [s]	β	Re	We
803,87097	0,002	1,424	0,0645	0,0014	1,092	0,05
			0,129			0,10
			0,258			0,20
			0,387			0,30
			0,516			0,40
			0,645			0,50
			1,29			1,00
			2,58			2,00
			5,16			4,00
			10,32			8,00

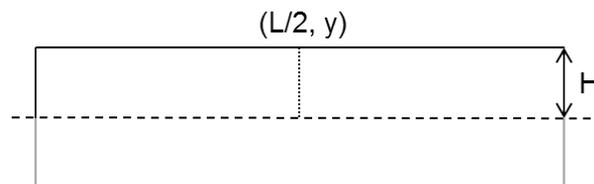


Figura 3.4. Representação do local da geometria de placas paralelas onde se traçaram os perfis de velocidades e tensões.

3.4.2 Escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel

O escoamento de fluidos viscoelásticos em uma cavidade quadrada com tampa móvel tem sido objeto de interesse nos últimos anos, em particular para avaliar o desempenho da FLC nas simulações.

A geometria da cavidade utilizada tem altura e comprimento iguais com $H = L = 0,1\text{m}$ (Figura 3.5). A parede superior (tampa) se move da esquerda para a direita com um perfil de velocidade dependente do espaço dado por:

$$U_x = 16U_{x_{\max}} x^2 (1-x)^2 \quad (3.24)$$

em que x está adimensionado pelo comprimento L . Este perfil de velocidade regularizador é utilizado para eliminar a singularidade nos cantos (FATTAL & KUPFERMAN, 2004).

As condições de contorno e iniciais utilizadas para esta geometria são representadas esquematicamente na Figura 3.5. Como condições de contorno têm-se nas paredes fixas a condição de não-deslizamento para a velocidade ($U = 0$) e gradientes nulos para a pressão e tensão. Na parede móvel têm-se um perfil de velocidades regularizado pela Equação (3.24) e gradientes nulos para pressão e tensão. Além destas condições o escoamento foi considerado bidimensional, sendo resolvido apenas em duas direções de um sistema de três coordenadas cartesianas. Como condições iniciais adotou-se a condição de fluido estagnado no interior da geometria, sendo os campos de velocidade, tensões e pressão iguais a zero. No primeiro passo de tempo fixou-se $\Lambda = I$ e $R = I$.

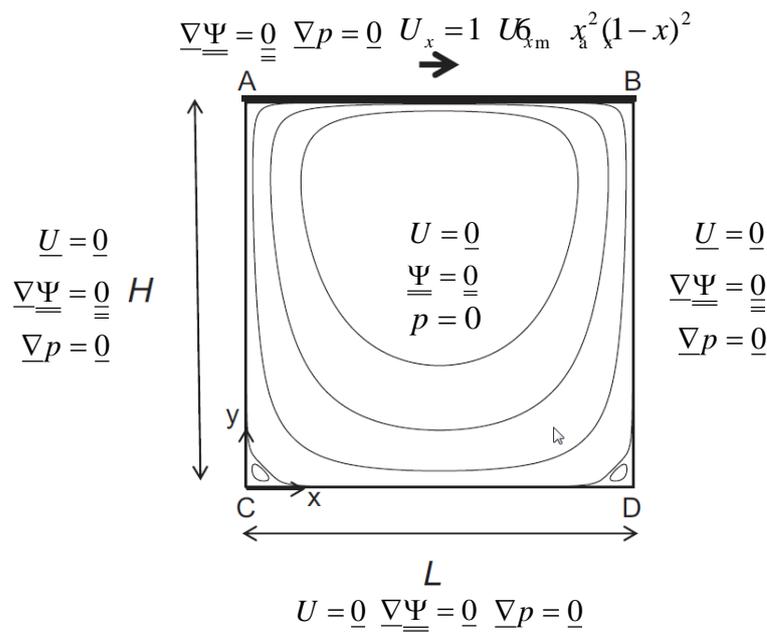


Figura 3.5. Geometria da cavidade quadrada com tampa móvel: condições de contorno e iniciais.

As simulações foram realizadas sob escoamento arrastado (creep flow), que é definido como um escoamento a $Re \rightarrow 0$. Esta condição é aplicada zerando o termo advectivo da equação da quantidade de movimento. A razão de retardamento foi fixada para $\beta = 0,5$ e o tempo de relaxação λ é variado para obter o respectivo número de *Weissenberg*. As malhas utilizadas nestas geometrias estão de acordo com as de Fattal e Kupferman (2004), que utilizou malhas de 64×64 , 128×128 e 256×256 células hexaédricas sem refinamento local e com razão de aspecto unitária. Entretanto, neste trabalho optou-se por usar a malha de 128×128 como a mais refinada visto que no trabalho de Habla *et al.* (2014) esta malha foi suficiente para apresentar resultados em boa concordância com a literatura. Dados sobre as dimensões das células são apresentados na Tabela 3.6 e as malhas na Figura 3.6.

Tabela 3.6. Características das malhas da geometria da cavidade quadrada com tampa móvel.

Malha	Número de Células	$\Delta x_{\min}/H$	$\Delta y_{\min}/H$
M6	32x32	1024	0,0312500
M7	64x64	4096	0,0156250
M8	128x128	16384	0,0078125

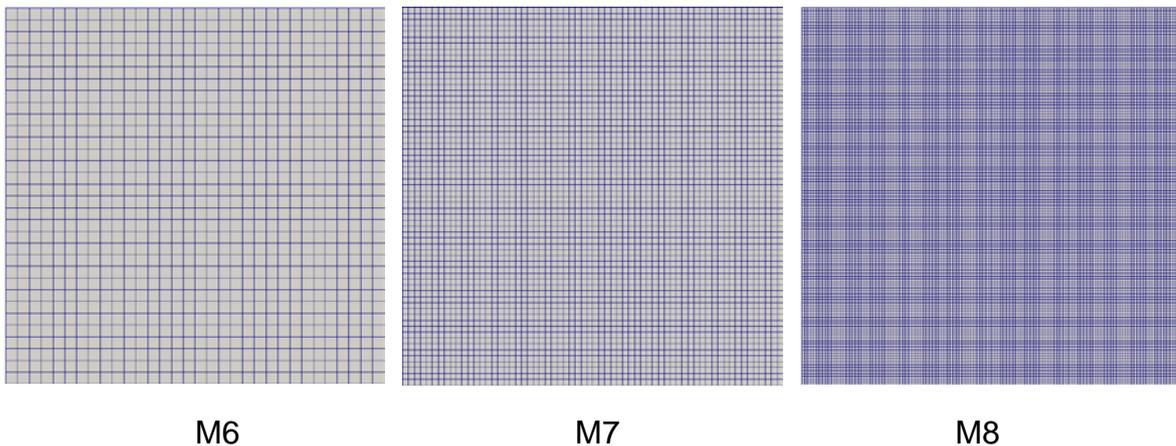


Figura 3.6. Malhas da geometria da cavidade quadrada com tampa móvel.

Os valores dos parâmetros viscoelásticos usados nesta geometria foram baseados naqueles usados na geometria de placas paralelas. Entretanto, para se igualar às condições de simulação utilizadas por Fattal e Kupferman (2005) e, posteriormente, fazer uma comparação adequada, alguns valores foram mudados, conforme a Tabela 3.7.

Depois de realizadas as simulações traçaram-se perfis de U_x , Ψ_{xx} e τ_{xx} ao longo da linha vertical $x = L/2$ e os perfis de U_y , Ψ_{xy} e τ_{xy} ao longo da linha horizontal $y = 0,75H$, conforme a Figura 3.7, que foram usados como base para comparação com os resultados obtidos com dados da literatura. A linha horizontal $y = 0,75H$ foi escolhida de maneira a possibilitar a comparação com dados da literatura (FATTAL & KUPERMAN, 2004; HABLA *et al.*, 2014; CHEN, 2014; COMMINAL *et al.*, 2015).

Tabela 3.7. Parâmetros viscoelásticos e números adimensionais envolvidos no escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel.

Parâmetros materiais			Números adimensionais			
ρ [kg/m ³]	η_s [Pa,s]	η_p [Pa,s]	λ [s]	β	Re	We
			0,01			0,1
			0,02			0,2
			0,03			0,3
			0,04			0,4
			0,05			0,5
			0,06			0,6
803,87097	1,424	1,424	0,07	0,5	0	0,7
			0,08			0,8
			0,09			0,9
			0,1			1
			0,2			2
			0,4			4
			0,8			8
			1,6			16

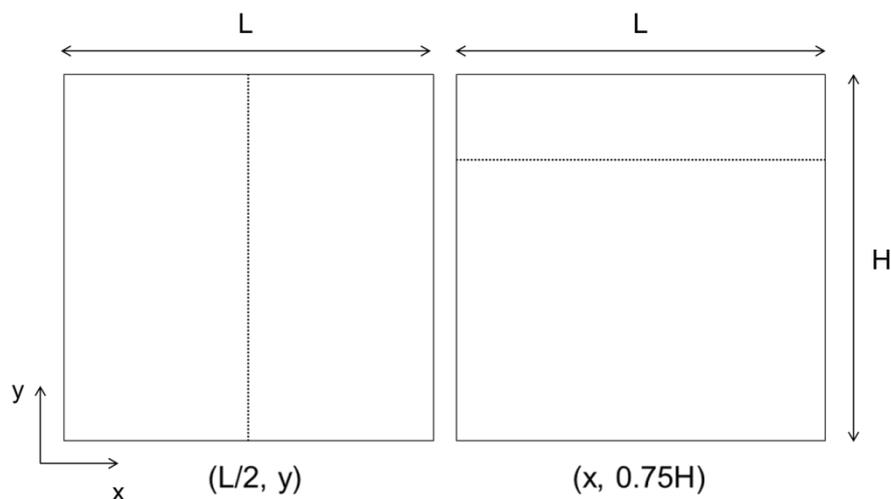


Figura 3.7. Representação dos locais da geometria da cavidade quadrada onde se traçaram os perfis de velocidades e tensões.

3.5 Utilização dos resíduos das equações governantes como parâmetro de análise da acurácia da solução obtida com a FLC

Enquanto para a geometria de placas paralelas, a análise da acurácia da solução numérica pode ser feita com base na comparação direta com a solução analítica, para a geometria da cavidade com tampa móvel esta estratégia não pode ser aplicada.

Neste caso, a estratégia proposta foi comparar a solução obtida com a FLC, designado de τ_{FLC} , com aquela obtida pela formulação original em termos de tensão, obtida com o *solver viscoelasticFluidFoam* e designada como τ . Esta comparação foi feita substituindo-se os valores de tensão obtidos pelas duas formulações nas equações governantes e, desta forma, obtendo-se os resíduos relativos a cada formulação.

Os resíduos relativos a τ foram obtidos automaticamente por rotinas próprias do *OpenFOAM*. No caso dos resíduos relativos a τ_{FLC} , foi necessário implementar uma rotina específica, como indicado na Tabela 3.1, pois na FLC a equação a ser resolvida é em termos de Ψ Equação (3.17) e, desta forma, os resíduos fornecidos pelo *OpenFOAM* são relativos a esta equação. Assim, para o cálculo do resíduo obtido na equação constitutiva original, Equação (3.5), pela substituição dos valores de τ_{FLC} , foram especificados os seguintes passos:

1. Resolve-se a equação constitutiva em Ψ ;
2. Faz-se a transformação $c = \exp(\Psi)$;
3. Faz-se a transformação $\tau_{FLC} = \eta_p/\lambda(c - I)$;
4. Insere-se τ_{FLC} na equação constitutiva original;
5. Obtém-se os resíduos de τ_{FLC} .

Deste modo, considerou-se que a solução de maior acurácia é aquela que apresenta os menores resíduos em sua solução convergida. Desta forma, esta metodologia foi primeiramente aplicada na geometria de placas paralelas a fim de verificar se produz os resultados esperados e posteriormente esta análise foi estendida para a geometria da cavidade quadrada com tampa móvel.

Capítulo 4

Resultados e Discussão

4.1 Testes iniciais com o código implementado

4.1.1 Análise do número de *Weissenberg* crítico para a formulação padrão

Primeiramente foram realizados testes com o *solver* original *viscoelasticFluidFoam* (Formulação Padrão), a fim de avaliar os limites do número de *Weissenberg* para as geometrias estudadas nesse trabalho com a formulação padrão e verificar se estão de acordo com as reportadas na literatura (Tabela 2.1).

Para a geometria de placas paralelas, as simulações foram realizadas usando os parâmetros viscoelásticos da Tabela 3.4 e o critério utilizado para determinar o valor crítico do número de *Weissenberg* foi a divergência dos valores da tensão em relação à solução analítica. Desta forma o $We_{lim,P}$ encontrado foi igual à 0,3, sendo que este valor está de acordo com alguns trabalhos apresentados na Tabela 2.1.

Para a geometria da cavidade com tampa móvel, as simulações foram realizadas usando os parâmetros viscoelásticos da Tabela 2.2 e o critério para determinação do $We_{lim,P}$ foi o encerramento da simulação por motivos de instabilidades numéricas características do HWNP. O $We_{lim,P}$ encontrado foi 0,8 que está próximo dos valores reportados por Fattal & Kupferman (2005) e Chen (2014).

4.1.2 Testes de convergência de malha com a FLC

Para a geometria de placas paralelas foram usadas as malhas da Tabela 3.4. A Figura 4.1 mostra resultados desse teste para as principais variáveis envolvidas nesse escoamento completamente desenvolvido. Na Figura 4.1a nota-se que as malhas M1 e M2 apresentam perfis de velocidades mais distintos dos que as malhas restantes, enquanto que para as malhas M3, M4 e M5 observa-se a tendência para um valor fixo do perfil de velocidades, e a diferença entre a malha M4 e M5 é quase imperceptível.

Para a tensão cisalhante e tensão normal, Figura 4.1b e Figura 4.1c, respectivamente, também se verifica a convergência com as malhas M4 e M5, apresentando soluções muito próximas para τ_{xy} e τ_{xx} . No entanto, observa-se também que a convergência nas tensões requer maior refinamento de malha que o necessário para a velocidade, onde, ao contrário do que aconteceu para a velocidade, a diferença das soluções para as malhas M3 e M4 ainda é grande, principalmente na região próxima à parede.

Na geometria da cavidade quadrada com tampa móvel foram usadas as malhas da Tabela 3.6 para os testes de convergência de malha. Pela comparação da Figura 4.2a com as Figuras 4.2b e 4.2c, para $x = L/2$, observa-se que também para esta geometria a convergência na velocidade requer menor refinamento de malha. Na Figura 4.2b observa-se que somente em algumas regiões da geometria as soluções das diferentes malhas apresentam diferenças significativas, como por exemplo, na tampa móvel e na região equivalente a $0,04 < h < 0,06$ m. Entretanto mesmo com essas diferenças pode-se considerar a malha M8 adequada para os testes futuros, pois as diferenças visualizadas na Figura 4.2c entre os valores de Ψ calculados com as malhas M7 e M8 foram em média de 1%. O mesmo aconteceu para a tensão τ .

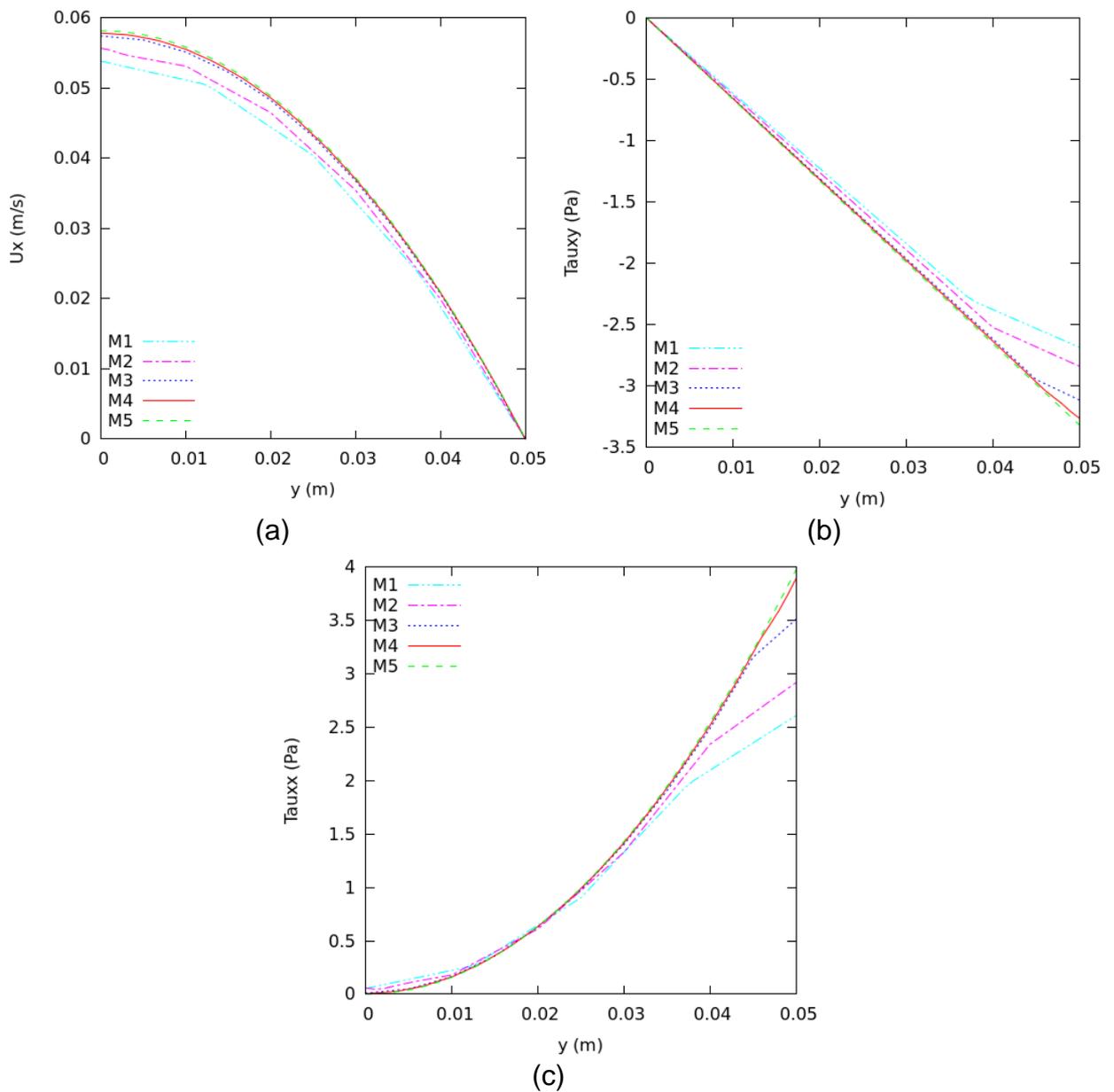


Figura 4.1. Teste de convergência de malha para a geometria de placas paralelas ($We = 0,2$): Perfis de (a) U_x , (b) τ_{xy} e (c) τ_{xx} ao longo da linha $(L/2, y)$.

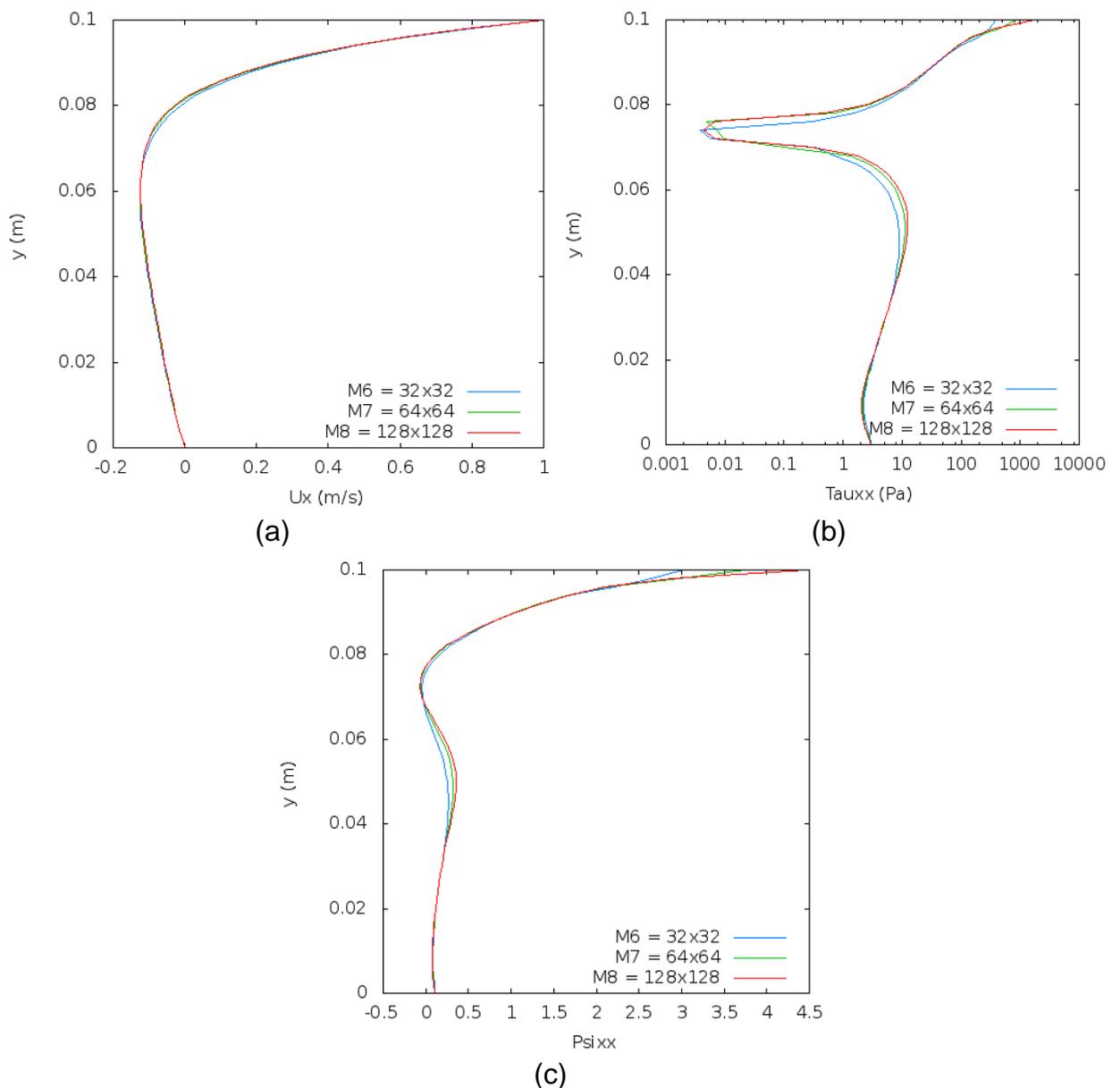


Figura 4.2. Teste de convergência de malha para a geometria da cavidade quadrada com tampa móvel ($We = 0,5$): Perfis de (a) U_x , (b) Ψ_{xx} e (c) τ_{xx} ao longo da linha $(L/2, y)$.

4.1.3 Comparação da formulação Log-Conformação com a formulação padrão para $We < We_{lim,P}$

Foram realizados testes iniciais com o novo código implementado e os resultados foram comparados com dados obtidos pela formulação padrão com $We < We_{lim,P}$. Estes testes tiveram o objetivo de verificar a adequação da implementação realizada, previamente à sua utilização para a análise de acurácia da FLC.

Os testes realizados consistiram na avaliação dos escoamentos bidimensionais entre placas paralelas e em uma cavidade quadrada em uma faixa de We no intervalo para o qual a formulação padrão em termos de tensão ainda apresenta convergência (ver Tabela 2.1). Assim avaliou-se as respostas obtidas com o código da FLC implementado com as soluções analítica e numérica (formulação padrão) para placas paralelas e para o escoamento na cavidade quadrada apenas com a solução numérica (formulação padrão).

Na Figura 4.3 são apresentados os perfis de velocidade U_x e tensão τ_{xy} obtidos pela FLC ao longo de uma linha perpendicular ao escoamento na região de escoamento completamente desenvolvido, juntamente com os resultados correspondentes obtidos com a solução analítica e com a formulação padrão. Como para o escoamento de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas os valores de U_x e τ_{xy} são independentes do tempo de relaxação do fluido, apresenta-se somente um dos resultados obtidos ($We = 0,05$). Verifica-se que os resultados obtidos com a FLC estão em concordância com aqueles obtidos analiticamente e pela formulação numérica padrão.

Diferentemente das variáveis U_x e τ_{xy} , a solução para a componente normal de tensão τ_{xx} depende de λ , ou seja, varia com o número de *Weissenberg*. Desta forma, na Figura 4.4 traçaram-se os perfis de τ_{xx} para diferentes valores de We . Também neste caso se verifica que os resultados com a FLC estão de acordo com os obtidos analiticamente e com a formulação numérica padrão.

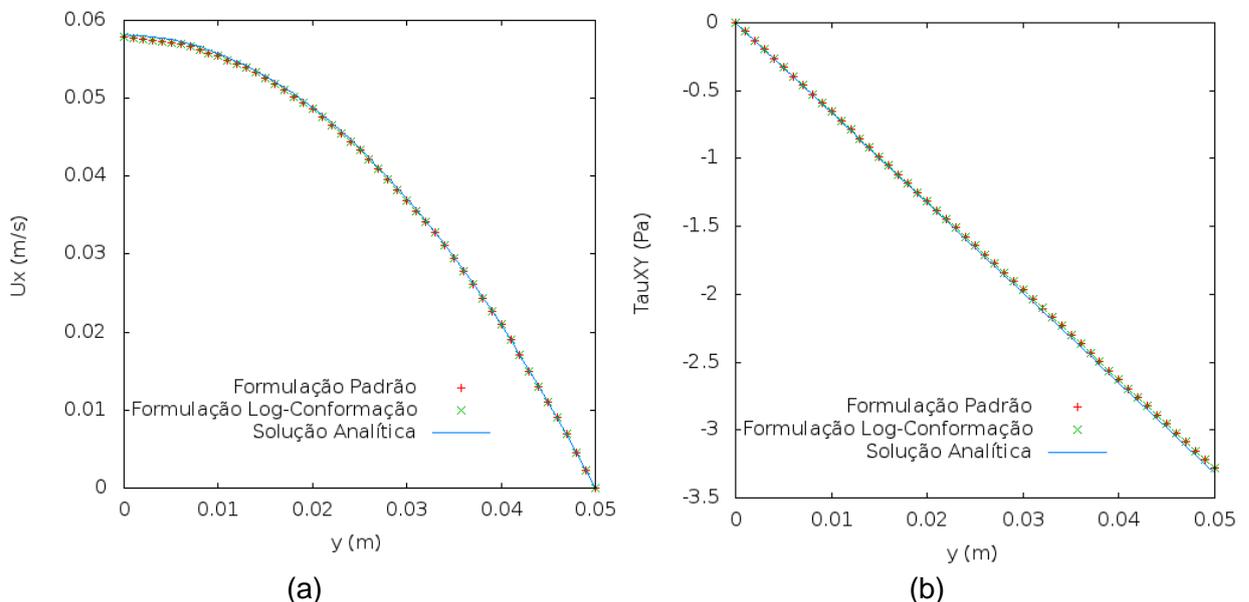


Figura 4.3. Perfis de (a) velocidade e (b) tensão cisalhante, ao longo da linha $(L/2, y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.4, $We = 0,05$ e a malha M5.

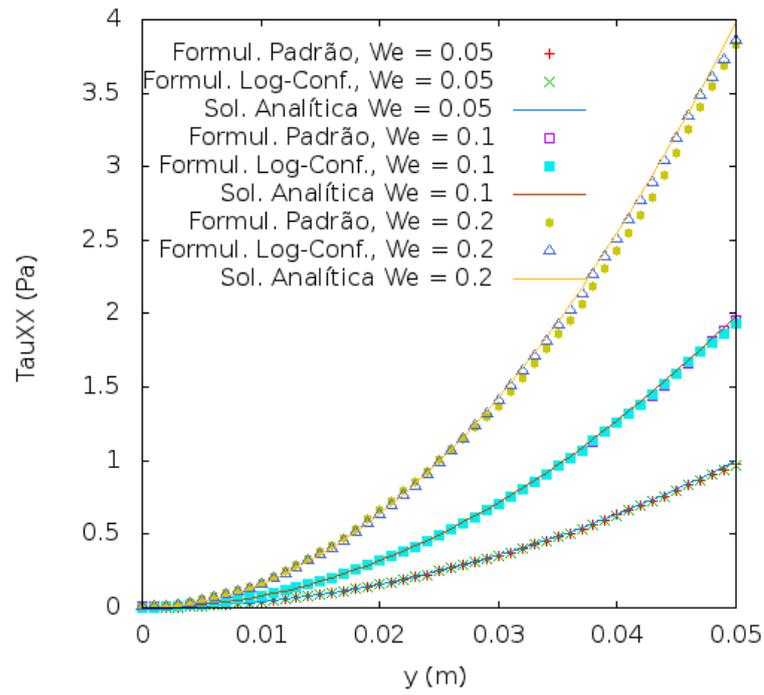
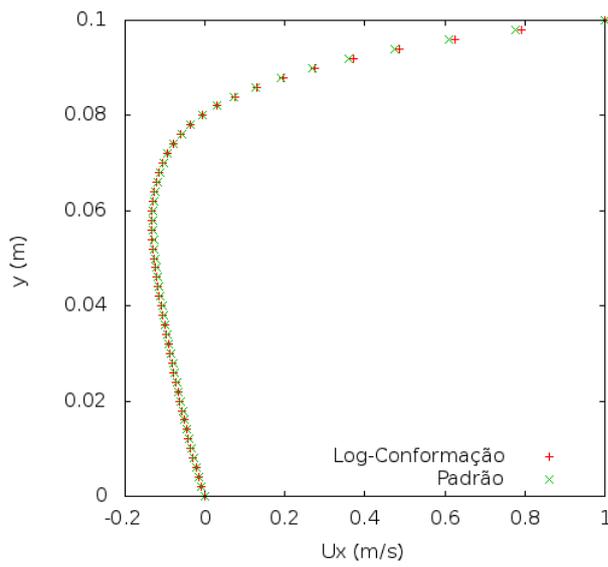
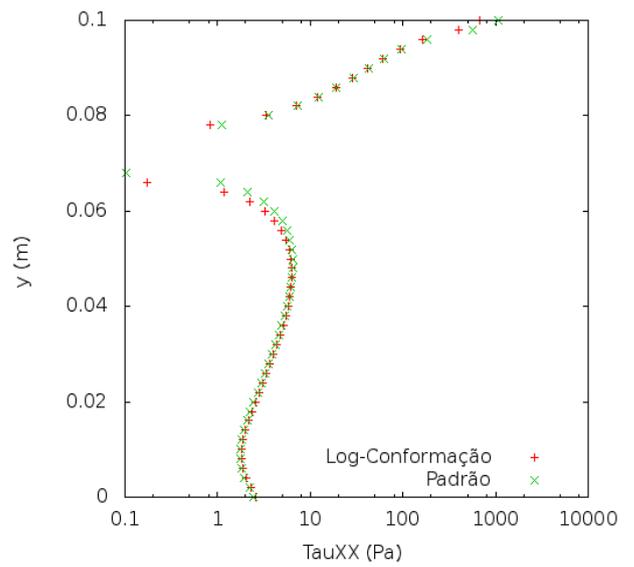


Figura 4.4. Perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.5, a malha M5 e $0,05 \leq We \leq 0,2$.

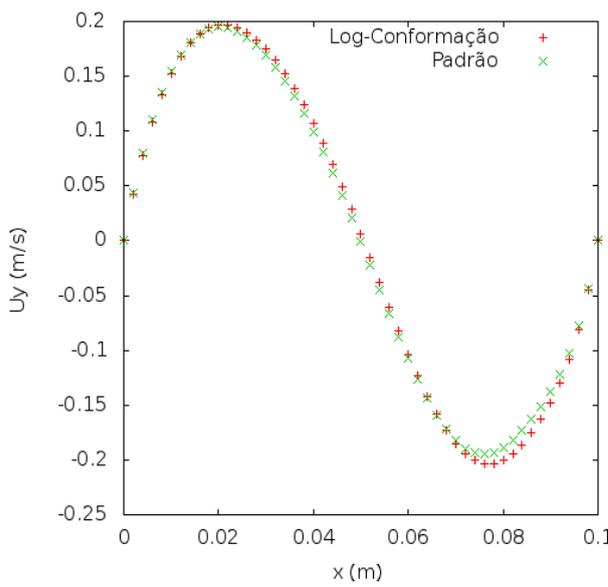
Para o caso de estudo da cavidade quadrada com tampa móvel não existe solução analítica. Desta forma, a comparação dos resultados obtidos para fins de validação do código é feita com a solução numérica convencional com We abaixo do $We_{lim,P}$ encontrado neste trabalho. Na Figura 4.5 são apresentados os perfis de velocidades e de tensões em $x = L/2$ das duas soluções numéricas apenas para um valor de We , onde se observa que os perfis de velocidades e de tensões obtidos pela FLC apresentam boa concordância em comparação aos perfis obtidos pela formulação convencional. Entretanto, nota-se que a variável τ_{xx} apresenta valores muito diferentes na tampa móvel ($1/2L, H$), porém não se pode dizer que este seja um efeito negativo já que a FLC amenizou este crescimento exponencial que causaria a instabilidade numérica resultando na não-convergência da solução.



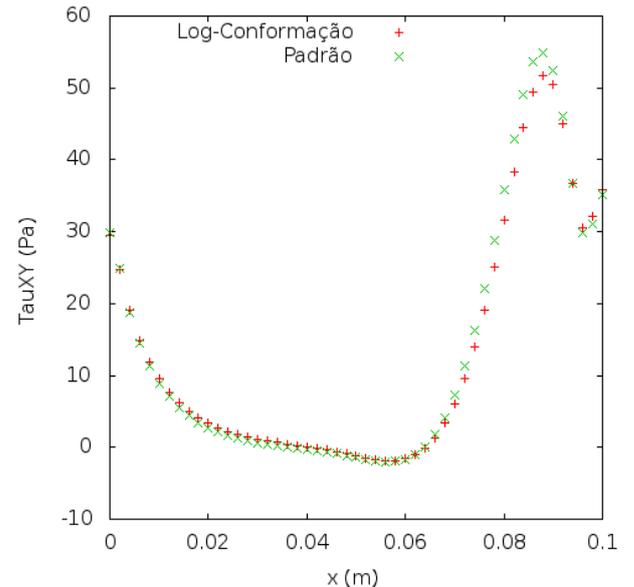
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.5. Perfis de velocidade e tensão a $We = 0,5$ para o escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel, usando a Malha M8: (a) U_x e (b) τ_{xx} ao longo da linha vertical $(L/2,y)$ e (c) U_y e (d) τ_{xy} ao longo da linha horizontal $(x,0.75H)$.

4.1.4 Avaliação geral dos testes iniciais

Nos testes iniciais com o *solver* implementado para a aplicação da FLC obteve-se convergência de malha e soluções corretas para as duas geometrias estudadas para valores de We inferiores aos valores de $We_{lim,P}$ relativos a cada uma das geometrias. Com base nesses testes, pode-se afirmar que a FLC foi implementada de forma correta.

Assim, pôde-se avançar para a etapa seguinte do trabalho, que foi focada na análise da acurácia das soluções obtidas com a FLC.

4.2 Análise da acurácia da solução obtida com a FLC

4.2.1 Geometria de Placas Paralelas

Primeiramente, faz-se necessário avaliar o comportamento da formulação padrão em função do aumento do valor do número de *Weissenberg* no problema em estudo. Tomando como base de análise os valores preditos da componente normal de tensão τ_{xx} nas soluções obtidas com a Malha M5, observou-se que as soluções obtidas com a formulação padrão apresentaram boa concordância com a solução analítica para valores de We até 0,2, como mostraram os resultados obtidos na Figura 4.4.

Para valores de We superiores a 0,2, observou-se perda de convergência na solução à medida que se aumenta o número de *Weissenberg*. Por exemplo, na Figura 4.6 são apresentados os perfis de τ_{xx} para $We = 0,3, 0,5, 1,0$ e $2,0$ para tempo de simulação real de 100 s, mostrando que as soluções obtidas começam a se afastar mais rapidamente da solução exata à medida que o We aumenta.

Para casos com We acima daqueles mostrados na Figura 4.4, a perda de convergência foi muito mais rápida, sendo que já nos primeiros passos de tempo as simulações apresentaram campos de U , p e τ que mudavam drasticamente e irregularmente de um passo de tempo para outro, ocasionando falhas numéricas drásticas e travamento da simulação.

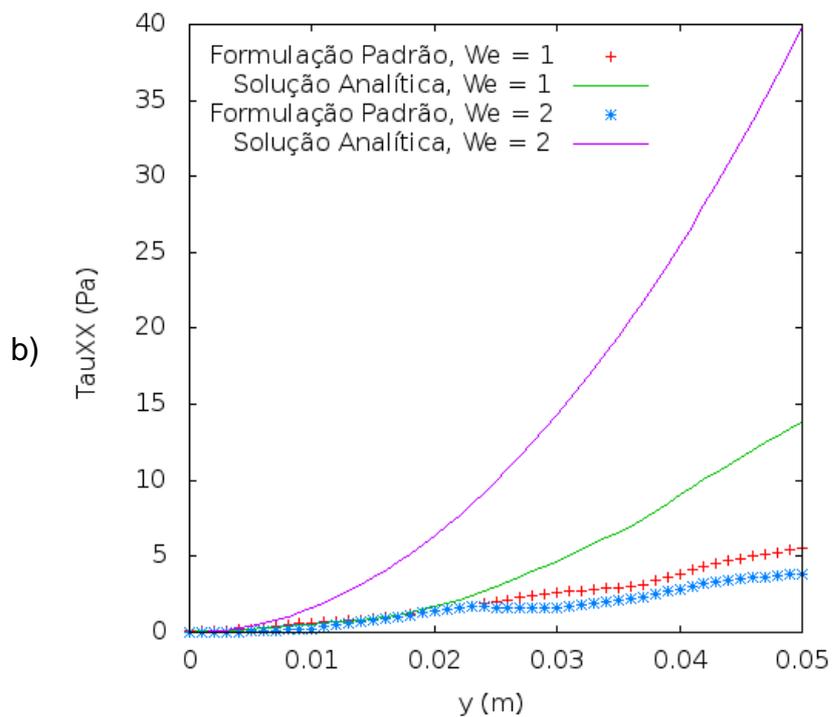
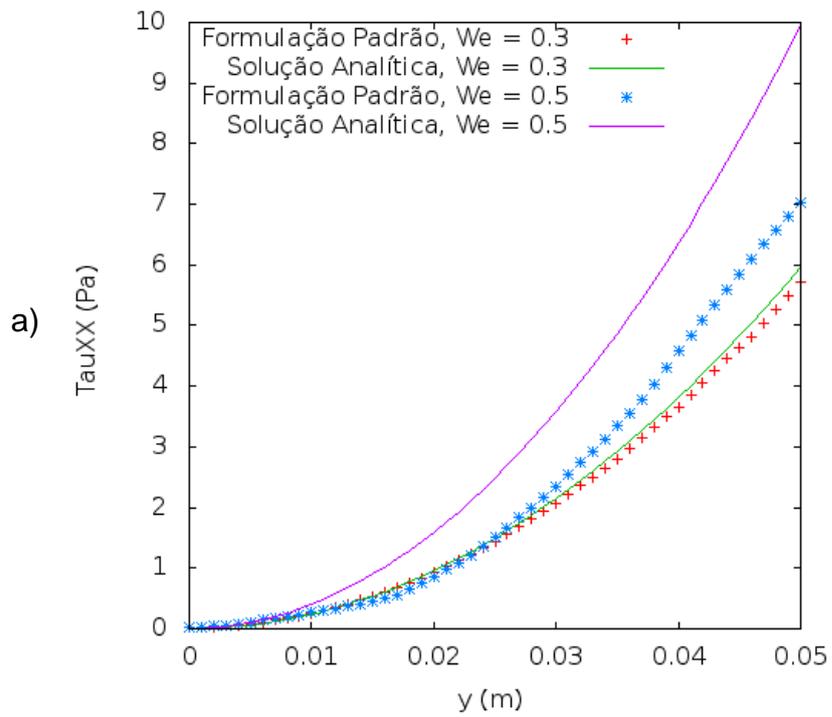


Figura 4.6. Perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, obtidos pela formulação padrão com $We > We_{crit}$ na geometria de placas paralelas. Malha M5 e $t = 100$ s. (a) $We = 0,3$ e $0,5$, (b) $We = 1$ e 2 .

Cabe ainda mencionar, que o valor de $We_{lim,P}$ poderia ainda ser um pouco aumentado com o refinamento da malha (OWENS & PHILLIPS, 2002), o qual implicaria no uso de passos de tempo menores, para manter a estabilidade do código, e conseqüentemente no aumento significativo do tempo computacional. Como o foco principal do presente trabalho é a avaliação da qualidade da solução obtida com a FLC, o valor limite encontrado para a solução padrão já representa um bom parâmetro para as comparações a serem efetuadas nas etapas seguintes.

Por outro lado, nos escoamentos resolvidos utilizando a FLC, observou-se boa concordância de τ_{xx} , em comparação com a solução analítica, para qualquer dos valores de *Weissenberg* da Tabela 3.5, conforme mostra a Figura 4.7. No entanto, observou-se que quanto maior o *We* maior o tempo para atingir a convergência e maior a distância na placa para atingir o estado completamente desenvolvido.

Considerando os resultados apresentados até este ponto, a primeira etapa de análise da acurácia da FLC para o escoamento entre placas paralelas consistiu na comparação das diferenças percentuais encontradas com relação à solução analítica (Equações (3.19) a (3.23)) para as soluções pela formulação padrão e pela FLC. Esta análise foi realizada para casos com número de *Weissenberg* abaixo do seu valor crítico na formulação padrão. Não se estendeu esta análise para escoamentos com *We* acima do $We_{lim,P}$ nas duas formulações juntas, já que as simulações usando a formulação padrão recaem no HWNP.

O erro percentual em relação à solução analítica de τ_{xx} foi calculado pela Equação (4.1), aplicada a 50 pontos ao longo da linha vertical ($1/2L,y$), mostrada na Figura 3.3.

$$\frac{|\tau_{xx}^{exato} - \tau_{xx}^{numérico}|}{|\tau_{xx}^{exato}|} \times 100\% \quad (4.1)$$

Conforme mencionado no Capítulo 3, para facilidade de identificação e entendimento, a partir deste ponto os símbolos τ_{FLC} e τ (ou $\tau_{xx,FLC}$ e τ_{xx}) são usados para descrever o tensor das tensões obtido com a FLC e o tensor das tensões obtido pela formulação padrão, respectivamente.

A variação dos valores de erro percentual das duas formulações ao longo da linha ($1/2L,y$) é apresentada na Figura 4.8. Para os três valores de *We* considerados, observa-se que, exceto na região próxima à parede, os erros percentuais de τ_{xx} obtidos pelas duas formulações são aproximadamente da mesma ordem. Entretanto, é notável que próximo às paredes sólidas, onde ocorrem os maiores gradientes de tensão, o erro de τ_{FLC} é significativamente maior, sendo que este erro aumenta conforme aumenta o número de *Weissenberg*. Acredita-se que essa perda de acurácia de $\tau_{xx,FLC}$ ocorre devido à natureza matemática da transformação algébrica inversa de Ψ_{xx} para τ_{xx} .

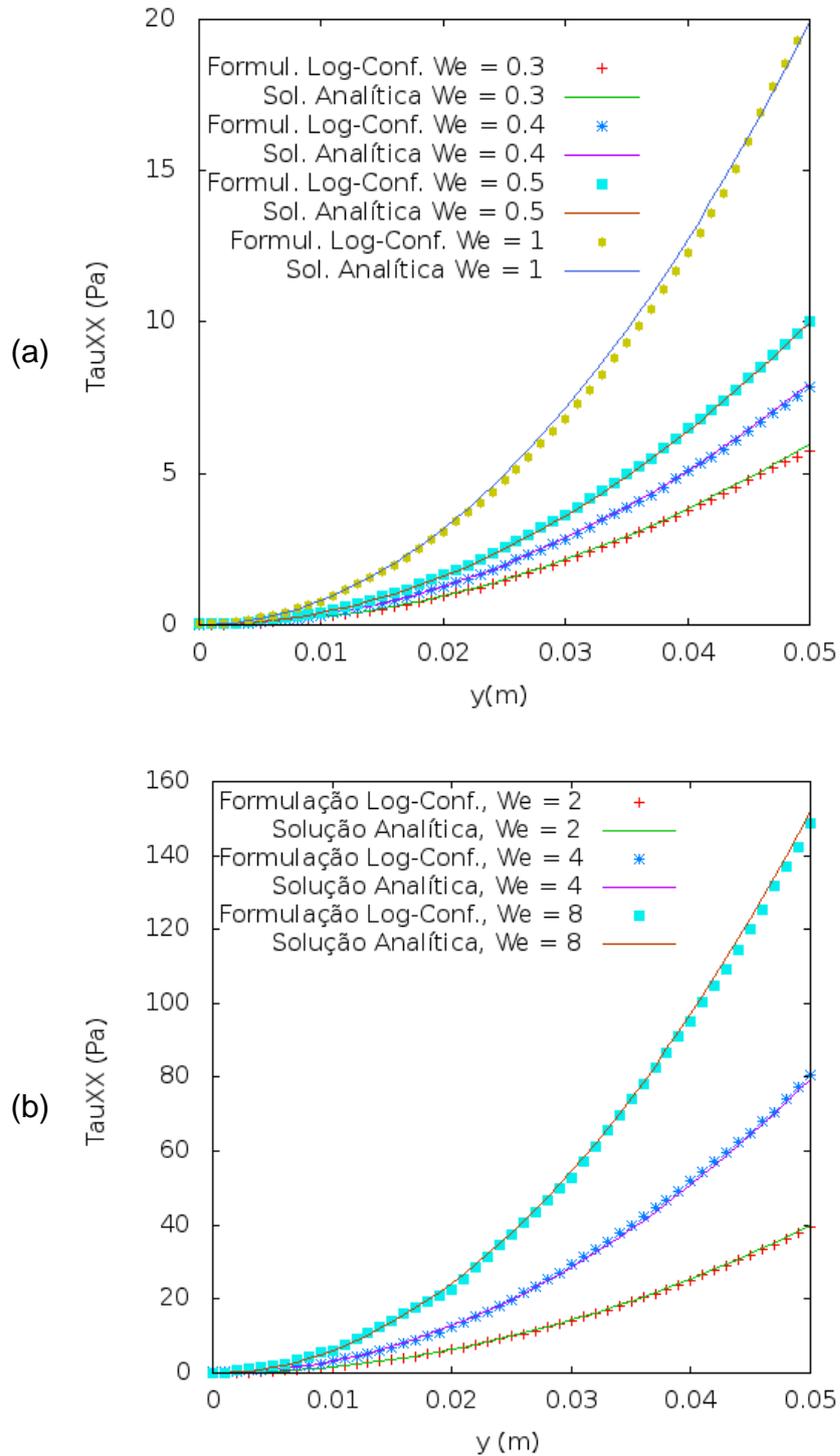


Figura 4.7. Perfil de tensão normal, ao longo da linha $(L/2,y)$, obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5. **(a)** $0,3 \leq We \leq 1$, **(b)** $2 \leq We \leq 8$.

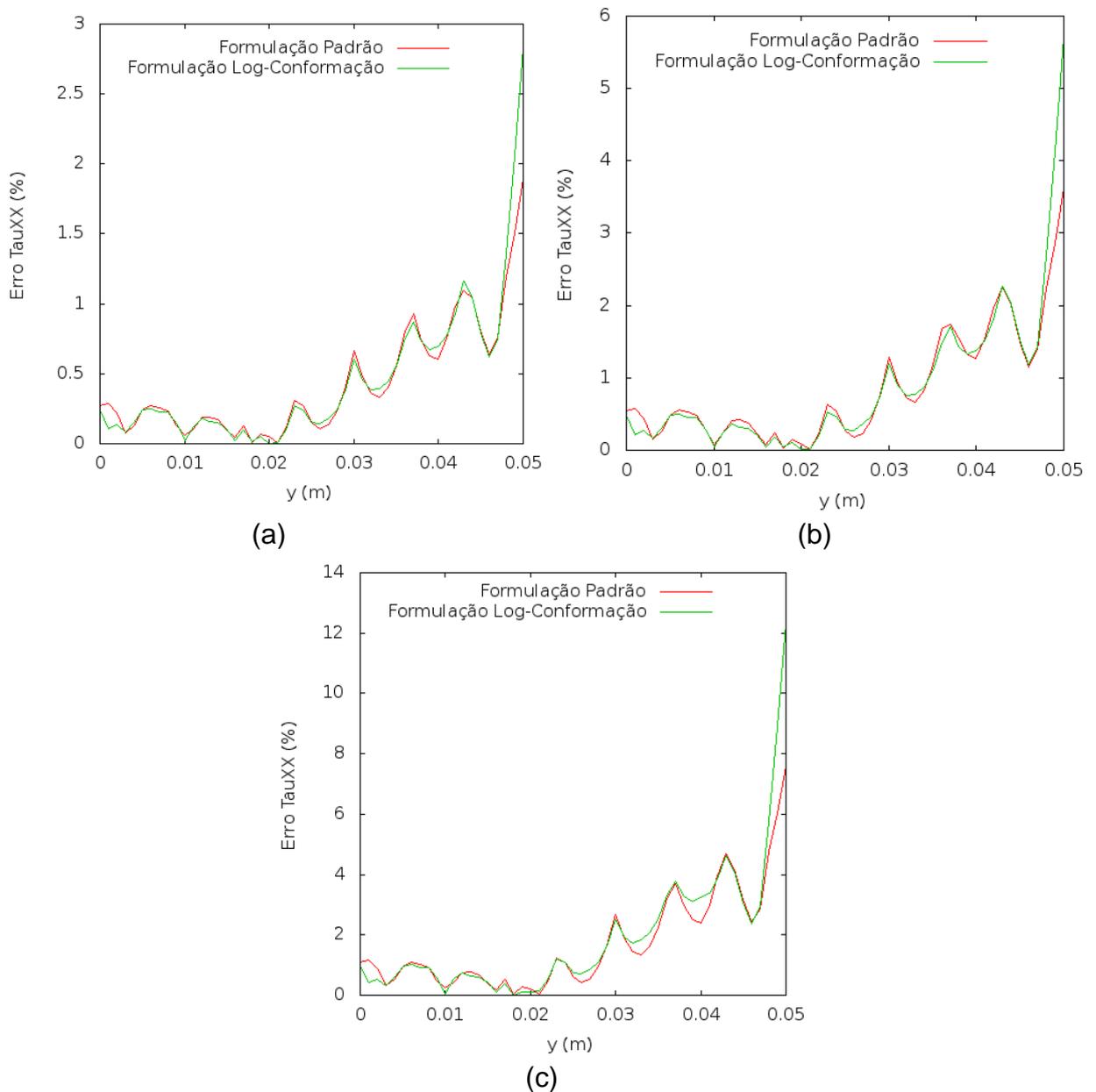


Figura 4.8. Erro percentual de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$ em relação à sua solução analítica neste caso de estudo, na geometria de placas paralelas e malha M5. (a) $We = 0,05$, (b) $We = 0,1$ e (c) $We = 0,2$.

A segunda etapa de análise da acurácia da FLC para o escoamento entre placas paralelas foi baseada na utilização dos resíduos da equação constitutiva viscoelástica em termos da tensão como parâmetro de acurácia. Desta forma, os resíduos de τ e τ_{FLC} foram obtidos pela substituição direta na equação constitutiva viscoelástica e posteriormente comparados, conforme descrito na Seção 3.5. Cabe salientar que a aplicação desta metodologia para o escoamento entre placas paralelas teve como objetivo principal testar a sua adequação para poder aplica-la à análise dos resultados para o escoamento na cavidade quadrada e, em trabalhos

futuros, para outros tipos de escoamento e de modelos constitutivos para os quais não se dispõe de solução analítica para uso como base de comparação.

Na Figura 4.9 são apresentados os resíduos da equação constitutiva para as soluções em termos de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$ para três valores de We inferiores ao $We_{lim,P}$ para o caso de estudo do escoamento entre placas paralelas.

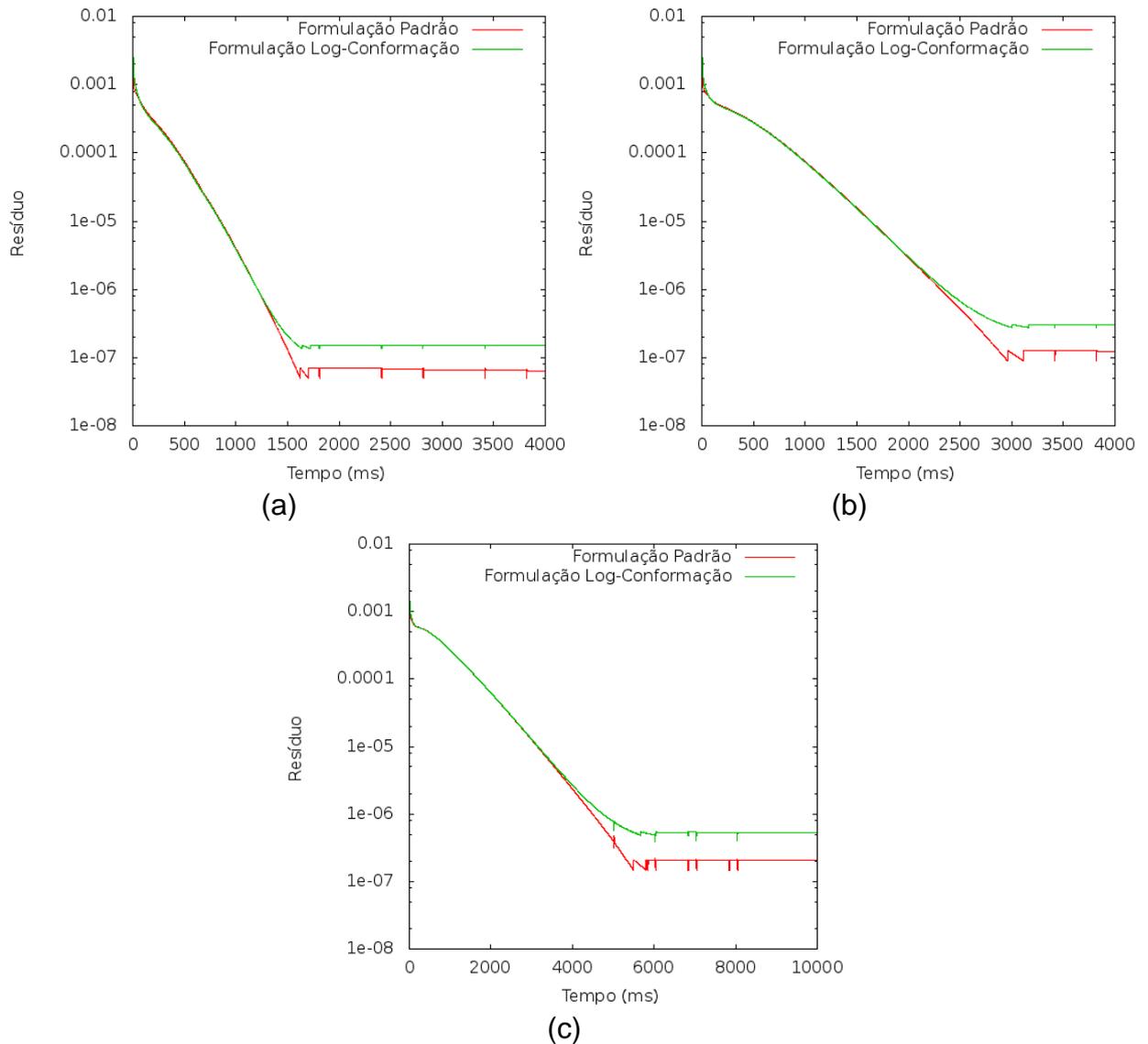


Figura 4.9. Comparação dos resíduos de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$, obtidos com a geometria de placas paralelas e malha M5. (a) $We = 0,05$, (b) $We = 0,1$ e (c) $We = 0,2$.

Observa-se claramente que os resíduos obtidos usando a FLC são maiores do que os resíduos obtidos usando a formulação padrão, indicando que a solução obtida via FLC apresenta qualidade um pouco inferior à solução obtida via formulação convencional, já que estes resíduos são resultados da substituição direta de τ e τ_{FLC} na mesma equação constitutiva viscoelástica em termos da tensão e em

uma mesma malha. Também nota-se que à medida que o número de *Weissenberg* aumenta, a qualidade da solução se torna pior, pois de acordo com a Figura 4.9, a diferença entre os resíduos obtidos com τ e com τ_{FLC} aumenta com o aumento do We , o que está de acordo com os resultados obtidos na comparação com a solução analítica (Figura 4.8). Para melhor visualização, o aumento do resíduo com a solução da FLC com o número de *Weissenberg* é mostrado na Figura 4.10.

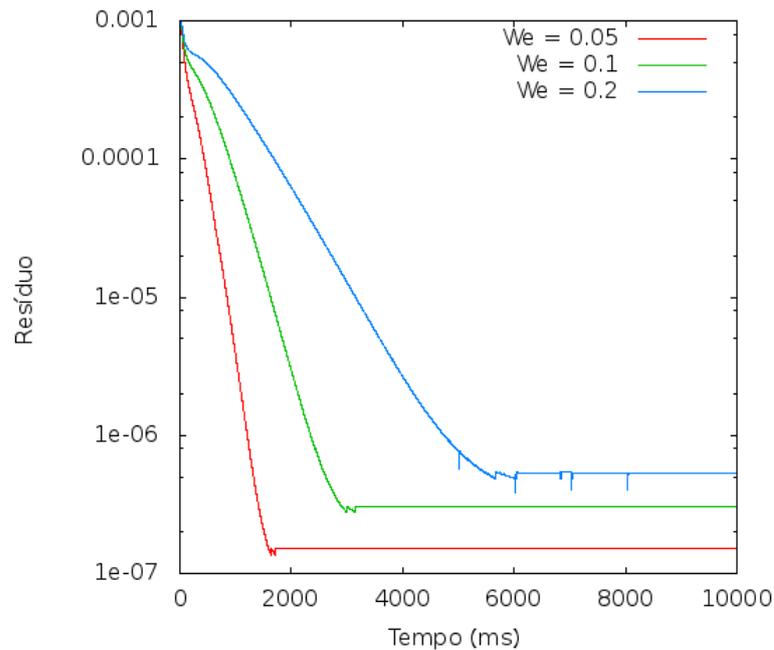


Figura 4.10 Resíduos de $\tau_{xx,FLC}$, do escoamento entre placas paralelas com $We = 0,05, 0,1$ e $0,2$ na malha M5.

Os resultados apresentados indicam que a solução do escoamento obtida pela FLC tem acurácia inferior se comparada com a solução obtida pela formulação padrão. Acredita-se que esta afirmação seja válida para qualquer We , além do fato de que a solução usando a FLC piore à medida que se aumenta o We . Além disso, acredita-se também que a maior contribuição para o aumento dos resíduos de τ_{FLC} seja referente aos erros das predições das tensões localizadas em regiões de ocorrência de altos gradientes, nas quais os valores mais elevados de tensão levam ao aumento da perda de acurácia da recuperação dos valores de tensão a partir dos valores de Ψ obtidos na solução pela FLC.

Também, com base nos resultados apresentados nas Figuras 4.9 e 4.10, pode-se dizer que a metodologia descrita na Seção 3.5 é adequada para analisar qualidades de soluções quando se comparam formulações distintas e que esta análise pode ser utilizada em outras geometrias como, por exemplo, a cavidade quadrada com tampa móvel.

4.2.2 Escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel

Como a geometria da cavidade quadrada não possui solução analítica, iniciou-se a análise da qualidade da solução usando os resíduos da equação constituinte como critério de acurácia, para casos com $We < We_{lim,P}$.

Na Figura 4.11 observa-se que, para os três valores de We considerados, os resíduos de $\tau_{xx,FLC}$, após atingir a convergência da solução, são maiores do que os resíduos de τ , indicando que a solução obtida pela FLC tem qualidade inferior à solução obtida pela formulação convencional. Também se observa que a solução de $\tau_{xx,FLC}$ converge mais rápido que a solução de τ_{xx} , pois os resíduos de $\tau_{xx,FLC}$ se tornam estáveis em aproximadamente $t = 1s$, enquanto que os de τ_{xx} ficam estáveis em tempos maiores para estes mesmos valores de We .

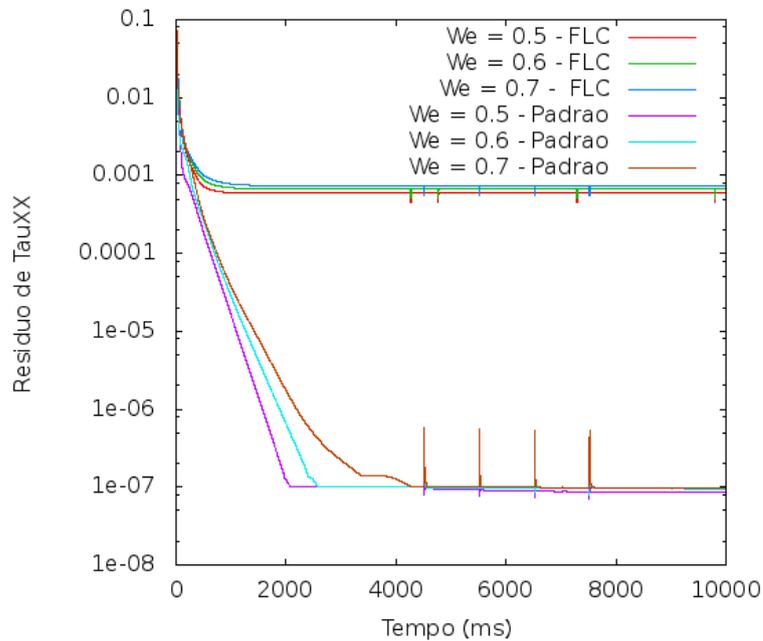


Figura 4.11. Comparação dos resíduos de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$ na geometria da cavidade quadrada e malha M8 para $0,5 \leq We \leq 0,7$

Assim como na geometria de placas paralelas, na geometria da cavidade também foi observado que a qualidade da solução perde acurácia à medida que aumenta o número de *Weissenberg*, como mostra o aumento gradativo do resíduo com aumento de We .

Posteriormente, estendeu-se a análise para $We > We_{lim,P}$, e observou-se que as soluções apresentaram convergência para até $We = 2$ no conjunto de testes da Tabela 3.7. Desta forma, foram apresentados os resíduos de $\tau_{xx,FLC}$ até $We = 2$ conforme mostra a Figura 4.12. Observa-se que para $We \leq 1$, os resíduos de τ_{FLC} seguiram o mesmo padrão de aumento da Figura 4.11, à medida que se aumentou o

We , ou seja, a acurácia de τ_{FLC} seguiu diminuindo. No entanto, para $We = 2$ o resíduo de $\tau_{xx,FLC}$ apresentou um padrão diferente de evolução com o tempo comparado com aquele apresentado para valores mais baixos de We . Para valores de We superiores a 2 já não foi possível atingir convergência, de modo que tomou-se este valor como o limite de convergência da FLC para esta geometria, isto é, $We_{lim,FLC} = 2$.

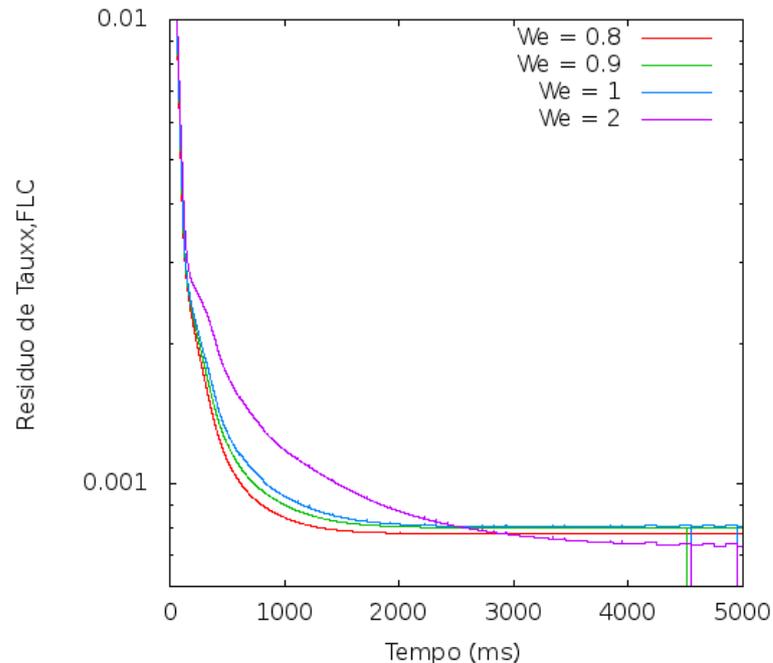


Figura 4.12 Resíduos de $\tau_{xx,FLC}$, do escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel para $0,8 \leq We \leq 2$ na malha M8.

Na Figura 4.13 são apresentados perfis de velocidade e Ψ na faixa de $We_{lim,P} < We \leq We_{lim,FLC}$, nos quais se nota boa concordância com os dados da literatura, mostrando mais uma vez a adequação do código implementado. Nota-se, também, que os perfis das diferentes variáveis obtidas neste caso de estudo diferem um do outro com o aumento do número de *Weissenberg*, principalmente nas variáveis relacionadas à tensão, que apresentam crescimento acentuado em lugares específicos da geometria.

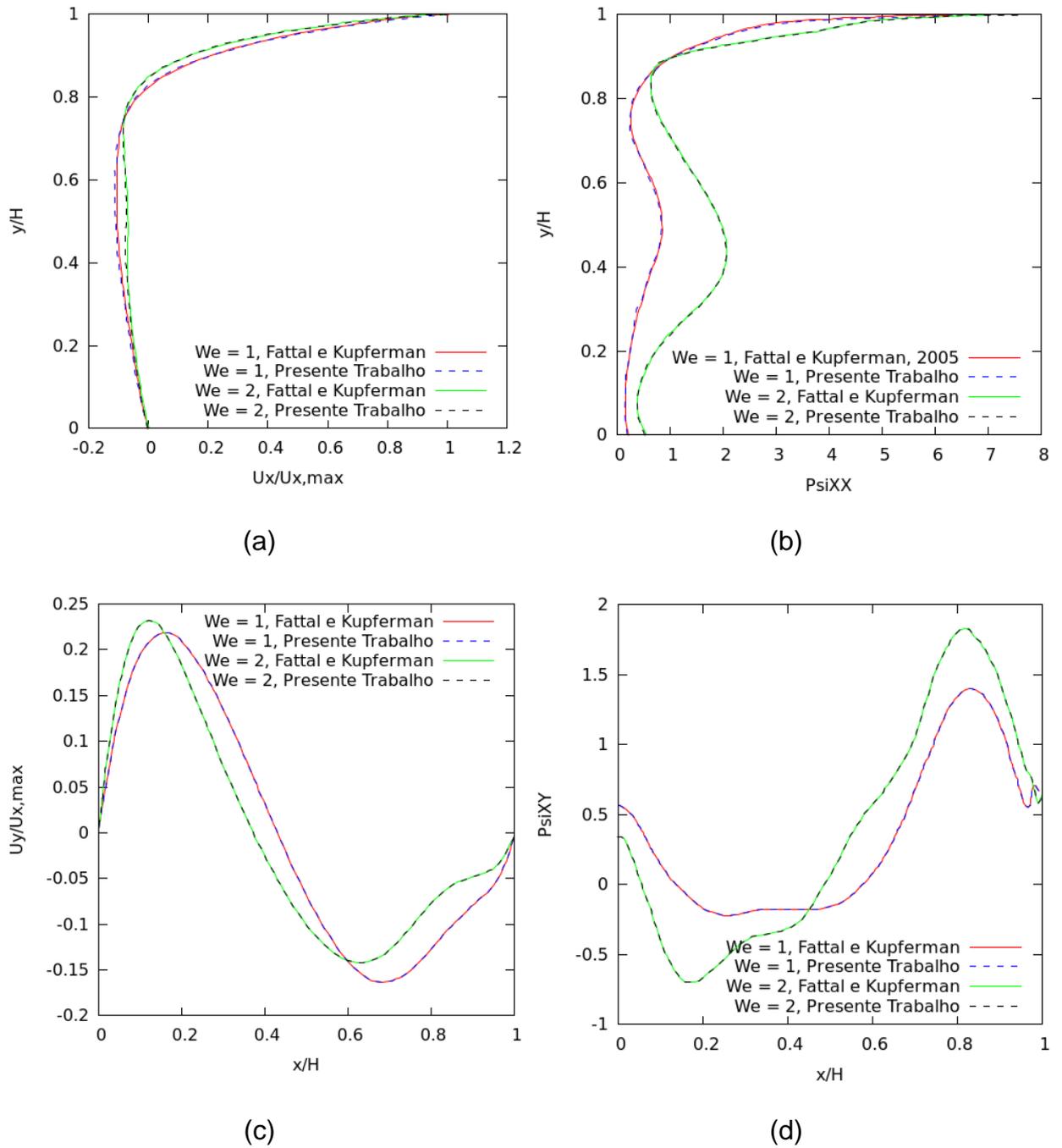


Figura 4.13. Perfis de velocidade e do logaritmo do tensor conformação na geometria da cavidade quadrada e malha M8 para $We = 1$ e $We = 2$. (a) U_x e (b) Ψ_{xx} ao longo da linha vertical ($L/2, y$) e (c) U_y e (d) Ψ_{xy} ao longo da linha horizontal ($x, 0.75H$).

Vale a pena também analisar o comportamento do *solver* para $We > We_{lim,FLC}$, situação na qual não se atingiu convergência. Neste caso, os resíduos não atingiram um valor constante e sim um comportamento irregular após determinado tempo de simulação, conforme mostra a Figura 4.14a. Foi observado também um

comportamento periódico do resíduo de Ψ . Por exemplo, para $We = 4$ o período aproximado foi de $t = 5$ s como pode ser visto na Figura 4.14b.

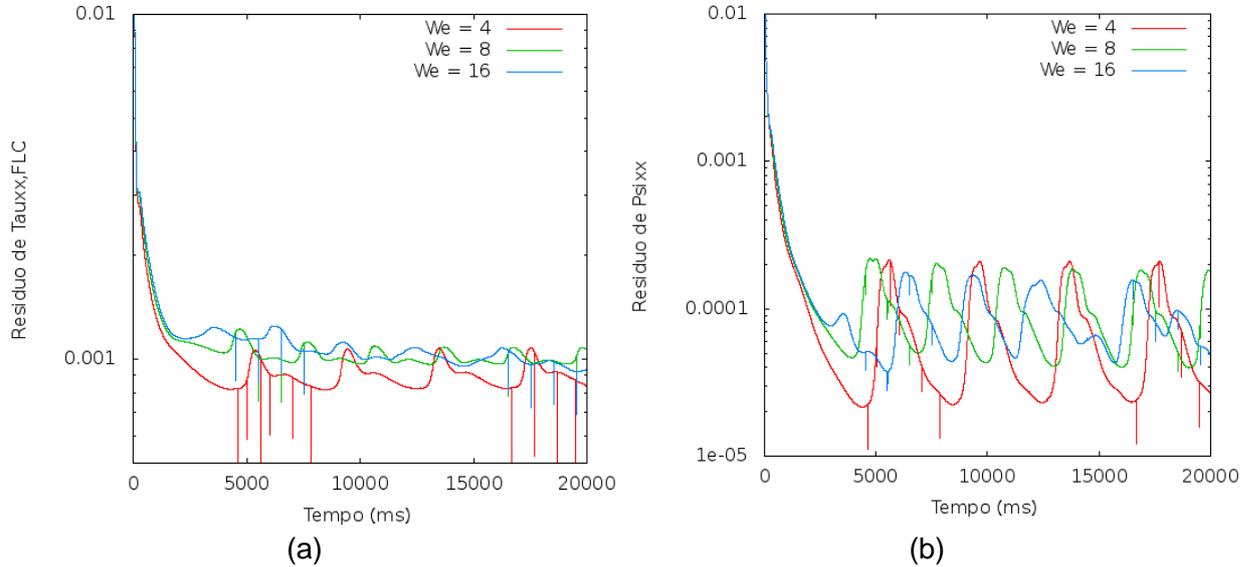


Figura 4.14 Resíduos de (a) $\tau_{xx,FLC}$ e (b) Ψ_{xx} do escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel para $4 \leq We \leq 16$ na malha M8.

Para visualizar a não convergência dos casos com $We > We_{lim,FLC}$, assim como para verificar se o comportamento periódico dos resíduos de Ψ tem alguma relação com o comportamento do fluido, foram traçadas linhas de correntes para o caso onde $We = 16$. Nesta simulação notou-se que o fluido apresentou movimento oscilatório e que este comportamento repetia-se aproximadamente a cada dez segundos como mostra a Figura 4.15. Observa-se que as linhas de corrente em $t = 20$ s apresentam um pouco de semelhança com as de $t = 30$ s, caracterizando um ciclo de oscilações periódicas. Outro fator que também aponta para a falta de convergência é a variação brusca dos vórtices secundários localizados nos cantos inferiores da cavidade quadrada, cuja resolução das linhas de corrente neste local foi melhorada para melhor visualização.

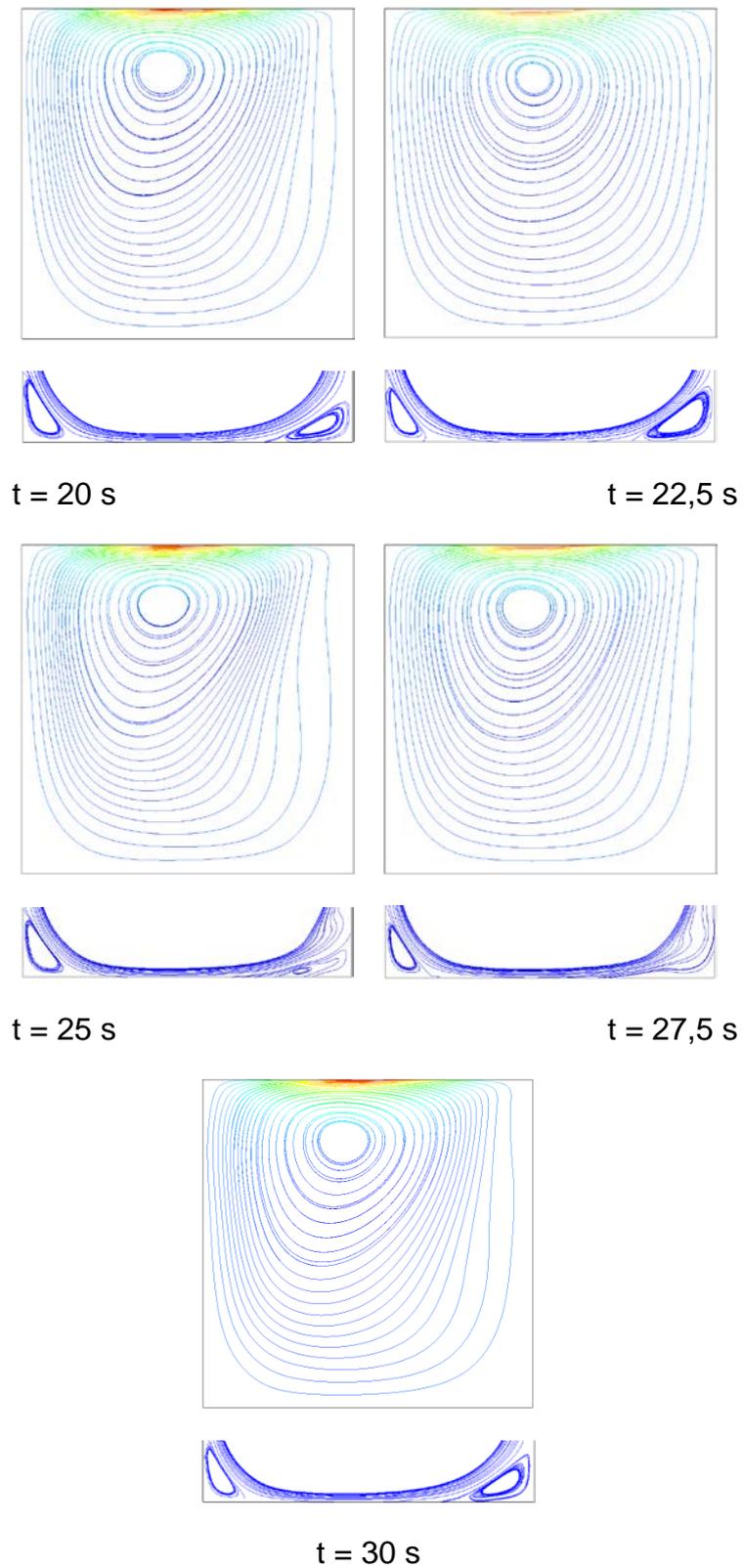


Figura 4.15 Linhas de corrente em função do tempo na geometria da cavidade quadrada com tampa móvel para $We = 16$ e malha M8.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho foi proposta a implementação de um *solver* para escoamento de fluidos viscoelásticos que consistiu na aplicação da Formulação Log-Conformação proposta por Fattal & Kupferman (2004) ao modelo constitutivo viscoelástico de Oldroyd-B. O algoritmo resultante inclui uma rotina numérica para cálculo dos valores e vetores característicos dos campos tensoriais das variáveis envolvidas e foi implementado a partir do *solver viscoelasticFluidoFoam* (FAVERO, 2009) como um *solver* viscoelástico alternativo.

Dois casos padrão do estudo de escoamento de fluidos viscoelásticos foram utilizados para validar o código implementado. O primeiro caso consistiu no escoamento de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas, cuja solução analítica é conhecida. O segundo caso consistiu no escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel. A validação foi então realizada comparando-se as soluções obtidas pelo código proposto no presente trabalho com a solução analítica (placas paralelas) e com dados da literatura (cavidade quadrada com tampa móvel).

Foi verificado que o limite do número de *Weissenberg* de um escoamento entre placas paralelas usando a malha mais refinada foi igual a 0,3 com a formulação padrão. Já para o caso do escoamento na cavidade quadrada o limite do número de *Weissenberg* usando a formulação padrão foi igual a 0,8.

As soluções dos campos de velocidade e tensão cisalhante usando a FLC apresentaram ótima concordância com a solução numérica obtida pela formulação

padrão e com a solução analítica do escoamento de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas, indicando o bom desempenho do código implementado. Na geometria da cavidade quadrada com tampa móvel a solução obtida com FLC foi comparada com a solução numérica padrão e também apresentou boa concordância.

Os perfis de tensão normal obtidos pela formulação padrão apresentaram divergência nos casos em que $We > We_{lim,P}$, já para solução usando a FLC os perfis apresentaram boa concordância com a solução analítica para qualquer valor de We da Tabela 3.5 na geometria de placas paralelas.

No caso da geometria da cavidade com tampa móvel os resultados dos casos com $We > We_{lim,P}$ foram comparados aos dados de Fattal & Kupfermann (2005) e mostraram boa concordância, reforçando o bom desempenho do código em outras geometrias e o limite do número de *Weissenberg* usando a FLC foi igual a 2 com a malha mais refinada.

Foram analisados os erros relativos da tensão polimérica do escoamento entre placas paralelas obtidos pela diferença entre a solução analítica e as soluções numéricas deste caso de estudo, observando maior erro próximo às paredes das placas, onde há ocorrência de gradientes de tensão elevados. Para o caso limite ($We = 0,2$) foram obtidos erros máximos de 7,57% e 12,33% usando a formulação padrão e a FLC respectivamente.

Foi realizada também a análise da qualidade da tensão polimérica utilizando os resíduos da equação constitutiva viscoelástica como critério de acurácia. Nos dois casos de estudos e em todos os números de *Weissenberg* analisados, as soluções de $\tau_{xx,FLC}$ foram de qualidade inferior, pois apresentaram resíduos maiores dos que os de τ_{xx} . A diferença entre os resíduos de τ_{xx} e $\tau_{xx,FLC}$ cresceu com o aumento do número de *Weissenberg* em ambas as geometrias.

De forma geral pode-se dizer que os valores de tensão obtidos usando a Formulação Log-Conformação são menos acurados que aqueles obtidos pela formulação explícita no tensor das tensões, mesmo apresentando boa concordância com soluções analíticas e dados da literatura. Acredita-se que essa perda de acurácia de $\tau_{xx,FLC}$ ocorre devido à natureza matemática da transformação algébrica inversa de Ψ_{xx} para τ_{xx} .

Em relação ao algoritmo implementado pode-se dizer que ele potencializa o *solver* de partida *viscoelasticFluidFoam* ao estender simulações para valores maiores do número de *Weissenberg* que anteriormente não eram possíveis de serem realizadas já que recaiam no HWNP. Assim como a versão original do *viscoelasticFluidFoam*, este código pode ser usado nas mais diversas geometrias, principalmente nas que possuem entrada e saída de fluido como o caso da contração 4:1, escoamento ao redor de um cilindro e outras geometrias padrão do estudo do escoamento de fluidos viscoelásticos, que serão testadas em trabalhos futuros. Alguns deles já foram realizados e igualmente mostraram bom desempenho

do código. Também se pretende expandir a aplicação da FLC a outros modelos viscoelásticos, assim como adaptar a FLC para o *viscoelasticInterFoam* que é a versão do *viscoelasticFluidFoam* para superfícies livres.

Referências Bibliográficas

- AFONSO, A. M.; OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T.; ALVES, M. A. The log-conformation tensor approach in the finite-volume method framework. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 157, p. 55-65, 2009.
- AFONSO, A.M., F.T. PINHO and M.A. ALVES: The kernel-conformation constitutive laws. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 167, p. 30-37, 2012.
- AMOREIRA, L. J.; P. J. OLIVEIRA: Comparison of Different Formulations for the Numerical Calculation of Unsteady Incompressible Viscoelastic Fluid Flow. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, v.2, n. 4, p. 483–502, 2010.
- AZADEH, J. *Simulation of Time-Dependent Viscoelastic Fluids Flows by Spectral Elements*. Lausanne, 209 p., Tese de Doutorado – Programme Doctoral en Mecanique, École Polytechnique Fédéral de Lausanne, 2011.
- AZAIÉZ, J.; GUÉNETTE, R.; AIT-KADI, A. Numerical Simulation of Viscoelastic Flows through a planar contraction. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 62, n. 2–3, p. 253-277, 1996.
- BALCI, N.; THOMASES, B.; RENARDY, M.; DOERING, C. R. Symmetric factorization conformation tensor in viscoelastic fluid models. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 166, n. 11, p. 546-553, 2011.
- BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O. *Dynamics of Polymeric liquids*, 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1987.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. Wiley, 2006. ISBN 9780470115398.
- CHANG, P. W.; PATTEN, T. W.; FINLAYSON, B. A. Collocation and Galerkin infinite elements method for viscoelastic fluid flow. *Computer and fluids*, v. 8, p.267-283, 1979.
- CHEN, X. *Numerical Modeling of Fluid-Structure Interaction with Rheologically Complex Fluids*. Tese (Doutorado) - Technischen Universität Darmstadt, Darmstadt, 2014.
- CHEN, X.; MARSCHALL, H; SCHÄFER, M; BOTHE, D. A comparison of stabilization approaches for finite-volume simulation of viscoelastic fluid flow. *International Journal of Computational Fluids Dynamics*, v. 27, n. 6-7, p. 229-250, 2013.
- CHILCOTT, M. D.; RALLISON, J. M. Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 29, p. 381-432, 1988.
- CLAUS, S. *Numerical simulation of complex viscoelastic flows using discontinuous galerkin spectral/hp element methods*. Tese (Doutorado) – School of Mathematics, Cardiff University, 1996.

COMMINAL, R.; SPANGENBERG, J; HATTEL, J. H. Robust simulations of viscoelastic flows at high Weissenberg numbers with the streamfunction/log-conformation formulation. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 223, p. 37-61, 2015.

CORONADO, O. M.; ARORA, D.; BEHR, M.; PASQUALI, M. A simple method for simulating general viscoelastic fluid flows with an alternate log-conformation formulation. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 147, p. 189-199, 2007.

DAMANIK, H.; HRON, J.; OUAZZI, A.; TUREK, S. A monolithic FEM approach for the log-conformation reformulation (LCR) of viscoelastic flow problems. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 165, p. 1105-1113, 2010.

DALAL, S.; TOMAR, G.; DUTTA, P. Numerical study of driven flows of shear thinning viscoelastic fluids in rectangular cavities. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 229, p. 59-78, 2016.

DEALY, J. M. *Weissenberg and Deborah Numbers – Their Definition and Use. Rheology Bulletin*, v. 79(2), p. 14–18, 2010.

DEMIR, H; ERTURK, V. S. A numerical study of wall-driven flow of a viscoelastic fluid in rectangular cavities. *J. pure appl. Math*, v. 32, n. 10, p. 1581-1590, 2001

DUARTE, A. S. R.; MIRANDA, A. I. P.; OLIVEIRA, P. J. Numerical and analytical modeling of unsteady viscoelastic flows: The start-up and pulsating test case problems. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, v. 154, n. 2-3 p. 153-169, 2008.

FATTAL, R.; KUPFERMAN, R. Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, v. 123, p. 281-285, 2004.

FATTTAL, R.; KUPFERMAN, R. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 126, p. 23-37, 2005.

FAVERO, J. L. *Simulação de escoamentos viscoelásticos: desenvolvimento de uma metodologia de análise utilizando o software OpenFOAM e equações constitutivas diferenciais*. Porto Alegre, 127 p. Dissertação de Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – PPGEQ, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, 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 & Chemical Engineering*, v. 34, n. 12, p. 1984-1993, 2010b.

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-Newton Fluid Mech*, v. 165, n. 23–24, p. 1625-1636, 2010a.

FIÉTIER, N; DEVILLE, M. O; Time-dependent algorithms for the simulation of viscoelastic flows with spectral element methods: applications and stability. *Journal of Computational Physics*, v. 186, p. 93-121, 2003.

- GIESEKUS, H. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 11, n. 1-2, p. 69-109, 1982.
- GRILLET, A. M.; YANG, B. KHOMAMI, E. S. G. Modelling of viscoelastic lid-driven cavity flows using finite element simulations. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 88, p. 99-131, 1999.
- GUÉNETTE, R.; MICHEL F.; A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 60, n. 1, p. 27-52, 1995.
- HABLA, F; TAN, M. W.; HAßLBERGER, J.; HINRICHSSEN, O. Numerical simulation of the viscoelastic flow in a three-dimensional lid-driven cavity using the log-conformation reformulation in *OpenFOAM*. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, v. 212, p. 47-62, 2014.
- HAO, J.; PAN, T. W. Simulation for high Weissenberg number. Viscoelastic flow by a finite element method. *J. Applied Mathematics Letters* v. 20, p. 988-993, 2007.
- HOUSIADAS, K. D.; WANG, L.; BERIS, A. N. A new method preserving the positive definiteness of a second order tensor variable in flow simulations with application to viscoelastic turbulence. *Computers & Fluids*, v. 39, p. 225-241, 2010.
- HULSEN, M. A.; FATTAL, R.; KUPFERMAN, R. Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high Weissenberg number: *Stabilized simulations using matrix logarithms*. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 127, p. 27-39, 2005.
- IZBASSAROV, D.; MURADOGLU, M. A front-tracking method for computational modeling of viscoelastic two-phase flow systems. *J. Non-Newton Fluid, Mech* v. 223, p. 122-140, 2015.
- JASAK, H. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluids Flows*. Tese (Doutorado) – Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London, 1996.
- KANE, A.; GUÉNETTE, R.; FORTIN, A. A comparison of four implementations of the log-conformation formulation for viscoelastic fluid flows. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 164, p. 45-50, 2009.
- KEUNINGS, R. On the high Weissenberg number problem. *J. Non-Newton Fluid Mech.*, v. 20, p. 209-226, 1986.
- KNECHTGES, P. The fully-implicit log-conformation formulation and its application to three-dimensional flows. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 223, p. 209-220, 2015.
- KNECHTGES, P.; BEHR, M.; ELGETI, S. Fully-implicit log-conformation formulation of constitutive laws. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 214, p. 78-87, 2014.
- LARSON, R. G. *Constitutive equations for polymer melts and solutions*. Department of Polymer Engineering, The University of Akron, Akron, OH 44325: Butterworths, 1988. 364 p. Boston.

MACOSKO, C. W. *Rheology: principles, measurements, and applications*. New York: VCH, 1994. ISBN 1560815795 9781560815792 0471185752 9780471185758.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC, 2010. ISBN 8521613962 9788521613961.

MARTINS, F. P.; OISHI, C. M.; AFONSO, A. M.; ALVES, M. A. A numerical study of the Kernel-conformation transformation for transient viscoelastic fluid flows. *J. Comput. Phys.* v. 302, p. 653–673, 2015

MAXWELL, J. C. On the Dynamical Theory of Gases. *Phil. Trans. R. Soc.*, v. 157, p. 49-88, 1867.

MENDELSON, M. A.; YEH, P. W.; BROWN, R. A.; ARMSTRONG, R. C. Approximation error in finite element calculation of viscoelastic fluid flows. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 10, p. 31-54, 1982.

MUNIZ, A. R.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M. High-order finite volume method for solving viscoelastic fluid flows. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 25, p. 153- 166, 2008. ISSN 0104-6632.

MUNIZ, A. R. *Desenvolvimento de um método de volumes finitos de alta ordem para a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos*, 139 p. Dissertação de Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – PPGEQ, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, 2003.

OLDROYD, J. G. On the Formulation of Rheological Equations of State. *Proceedings of the Royal Society*, A 200, p. 523-541, 1950.

OLIVEIRA, R. A. de. *Simulação de Escoamentos Multicamadas de Polímeros Viscoelásticos a base de Poli(Etileno Tereftalato)*. Tese de Doutorado. UNICAMP, Campinas, SP, Brasil, 1996.

OLIVEIRA, J. A. P. *Análise numérica de tensões induzidas pelo escoamento não isotérmico de um polímero no preenchimento de cavidades de paredes finas*. Porto Alegre, 108 p. Tese de Doutorado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – PPGEQ, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, 2012.

OPENFOAM. OpenFOAM® - The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox. 2012. Disponível em: <<http://www.openfoam.com/>>. [Acessado em 22 de Fevereiro de 2016].

OWENS, R.G.; T.N. PHILLIPS: *Computational Rheology*. Imperial College Press, 2002.

PAULO, G. S.; OISHI, C. M.; TOMÈ, M. F.; ALVES, M. A.; PINHO, F. T. Numerical solution of the FENE-CR model in complex flows. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 204, p. 50-61, 2014.

PERERA, M. G. N.; K. WALTERS, K. Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry: Part I: flows associated with I-shaped and T-shaped geometries. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 2(1), p. 49-81, 1977.

POOLE, R. J. The Deborah and Weissenberg numbers. *The British Society of Rheology, Rheology Bulletin*, v. 53(20), p. 32–39, 2012.

RENARDY, M.: *Mathematical Analysis of Viscoelastic Flows*. CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

SAMARITO, P. On a modified non-singular log-conformation formulation for Johnson–Segalman viscoelastic fluids. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 211, p. 16-30, 2014.

SOUSA, R. G.; POOLE, R. J.; AFONSO, A. M.; PINHO, F. T.; OLIVEIRA, P. J.; MOROZOV, A.; ALVES, M. A. Lid-driven cavity flow of viscoelastic liquids. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 234, p. 129-138, 2016.

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

THIEN, N. P.; TANNER, R. I. A new constitutive equation derived from network theory. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 2, n. 4, p. 353-365, 1977.

TOMÉ, M. F.; CASTELO, A.; AFONSO, A. M.; ALVES, M. A.; PINHO, F. T. Application of the log-conformation tensor to three-dimensional time-dependent free surface flows. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 175-176, p. 44-54, 2012.

XUE, S.; BARTON, G. W. An unstructured finite volume method for viscoelastic flow simulations with highly truncated domains. *J. Non-Newton Fluid Mech*, v. 233, p. 48-60, 2016.

Anexos

Dados dos perfis de velocidade da Figura 4.3.

Tabela A.1. Dados dos perfis de velocidade, ao longo da linha ($L/2, y$), do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.4, $We = 0,05$ e a malha M5.

H(m)	U_x (m/s)			H(m)	U_x (m/s)		
	Formulação o Padrão	FLC	Solução Analítica		Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica
0	0.0578703	0.0578694	0.058125	0.026	0.0422147	0.0422145	0.042408
0.001	0.057748	0.057747	0.05810175	0.027	0.041027	0.0410268	0.04117575
0.002	0.0576257	0.0576247	0.058032	0.028	0.0396651	0.0396647	0.039897
0.003	0.0575034	0.0575024	0.05791575	0.029	0.0383032	0.0383026	0.03857175
0.004	0.0573393	0.0573383	0.057753	0.03	0.0369413	0.0369405	0.0372
0.005	0.0571542	0.0571533	0.05754375	0.031	0.0355377	0.0355372	0.03578175
0.006	0.0569692	0.0569684	0.057288	0.032	0.034134	0.0341338	0.034317
0.007	0.0567023	0.0567015	0.05698575	0.033	0.0327304	0.0327304	0.03280575
0.008	0.0562717	0.0562709	0.056637	0.034	0.031146	0.031146	0.031248
0.009	0.0558411	0.0558402	0.05624175	0.035	0.0294714	0.029471	0.02964375
0.01	0.0554104	0.0554095	0.0558	0.036	0.0277968	0.0277961	0.027993
0.011	0.0549191	0.0549183	0.05531175	0.037	0.0261119	0.0261111	0.02629575
0.012	0.0544278	0.0544271	0.054777	0.038	0.0244065	0.0244062	0.024552
0.013	0.0539365	0.0539359	0.05419575	0.039	0.0227012	0.0227013	0.02276175
0.014	0.0532794	0.0532788	0.053568	0.04	0.0209958	0.0209964	0.020925
0.015	0.0525395	0.0525388	0.05289375	0.041	0.019007	0.0190071	0.01904175
0.016	0.0517995	0.0517988	0.052173	0.042	0.0170183	0.0170179	0.017112
0.017	0.0510407	0.05104	0.05140575	0.043	0.0150295	0.0150286	0.01513575
0.018	0.0502442	0.0502435	0.050592	0.044	0.0130295	0.0130289	0.013113
0.019	0.0494476	0.0494471	0.04973175	0.045	0.0110238	0.011024	0.01104375
0.02	0.048651	0.0486507	0.048825	0.046	0.00901821	0.00901914	0.008928
0.021	0.0476007	0.0476002	0.04787175	0.047	0.006913	0.0069143	0.00676575
0.022	0.0465504	0.0465498	0.046872	0.048	0.00460867	0.00460953	0.004557
0.023	0.0455	0.0454993	0.04582575	0.049	0.00230433	0.00230476	0.00230175
0.024	0.0444161	0.0444155	0.044733	0.05	0	0	0
0.025	0.0433154	0.043315	0.04359375	-	-	-	-

Dados dos perfis de tensão cisalhante da Figura 4.3.

Tabela A.2. Dados dos perfis de tensão cisalhante, ao longo da linha (L/2,y), do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.4, $We = 0,05$ e a malha M5

H (m)		τ_{xy} (Pa)		H (m)		τ_{xy} (Pa)	
	Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica		Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica
0	0	0	0	0.026	-1.70898	-1.70895	-1.724034
0.001	-0.0656412	-0.0656386	-0.066309	0.027	-1.77491	-1.77488	-1.790343
0.002	-0.131282	-0.131277	-0.132618	0.028	-1.83963	-1.8396	-1.856652
0.003	-0.196924	-0.196916	-0.198927	0.029	-1.90434	-1.90431	-1.922961
0.004	-0.262708	-0.262697	-0.265236	0.03	-1.96906	-1.96903	-1.98927
0.005	-0.328563	-0.32855	-0.331545	0.031	-2.03586	-2.03583	-2.055579
0.006	-0.394419	-0.394402	-0.397854	0.032	-2.10267	-2.10263	-2.121888
0.007	-0.460129	-0.460112	-0.464163	0.033	-2.16947	-2.16943	-2.188197
0.008	-0.52555	-0.525535	-0.530472	0.034	-2.2347	-2.23466	-2.254506
0.009	-0.590971	-0.590958	-0.596781	0.035	-2.29915	-2.29911	-2.320815
0.01	-0.656392	-0.656382	-0.66309	0.036	-2.3636	-2.36355	-2.387124
0.011	-0.722464	-0.722452	-0.729399	0.037	-2.42892	-2.42888	-2.453433
0.012	-0.788536	-0.788523	-0.795708	0.038	-2.49602	-2.49597	-2.519742
0.013	-0.854608	-0.854593	-0.862017	0.039	-2.56311	-2.56305	-2.586051
0.014	-0.920099	-0.920084	-0.928326	0.04	-2.6302	-2.63014	-2.65236
0.015	-0.9853	-0.985286	-0.994635	0.041	-2.69434	-2.69428	-2.718669
0.016	-1.0505	-1.05049	-1.060944	0.042	-2.75849	-2.75842	-2.784978
0.017	-1.11607	-1.11605	-1.127253	0.043	-2.82263	-2.82256	-2.851287
0.018	-1.18237	-1.18235	-1.193562	0.044	-2.88896	-2.88888	-2.917596
0.019	-1.24867	-1.24865	-1.259871	0.045	-2.95637	-2.9563	-2.983905
0.02	-1.31497	-1.31495	-1.32618	0.046	-3.02378	-3.02371	-3.050214
0.021	-1.37994	-1.37992	-1.392489	0.047	-3.09	-3.08991	-3.116523
0.022	-1.44491	-1.44488	-1.458798	0.048	-3.1538	-3.15371	-3.182832
0.023	-1.50987	-1.50985	-1.525107	0.049	-3.21761	-3.21751	-3.249141
0.024	-1.57589	-1.57587	-1.591416	0.05	-3.28141	-3.28131	-3.31545
0.025	-1.64243	-1.64241	-1.657725	-	-	-	-

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.4.

Tabela A.3. Dados dos perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.5, a malha M5 e $We = 0,05$.

H(m)	τ_{xx} (Pa)			H(m)	τ_{xx} (Pa)		
	Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica		Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica
0	0.00275033	0.00241255	0	0.026	0.26782	0.267461	0.268882067
0.001	0.00328021	0.00145978	0.000397755	0.027	0.288594	0.288138	0.289963057
0.002	0.00381008	0.00291955	0.001591018	0.028	0.309501	0.309401	0.311839557
0.003	0.00433996	0.00437933	0.003579791	0.029	0.330408	0.330664	0.334511565
0.004	0.00764863	0.00785558	0.006364073	0.03	0.351316	0.351927	0.357979083
0.005	0.0123467	0.0123401	0.009943863	0.031	0.377484	0.377697	0.38224211
0.006	0.0170447	0.0168246	0.014319163	0.032	0.403652	0.403466	0.407300645
0.007	0.0220789	0.02179	0.019489972	0.033	0.42982	0.429235	0.43315469
0.008	0.0277853	0.0277174	0.02545629	0.034	0.455774	0.455347	0.459804244
0.009	0.0334918	0.0336448	0.032218118	0.035	0.481621	0.48163	0.487249307
0.01	0.0391982	0.0395722	0.039775454	0.036	0.507468	0.507913	0.515489879
0.011	0.0491761	0.0493182	0.048128299	0.037	0.535267	0.535834	0.544525961
0.012	0.0591539	0.0590641	0.057276653	0.038	0.566973	0.567033	0.574357551
0.013	0.0691318	0.0688101	0.067220517	0.039	0.598679	0.598231	0.60498465
0.014	0.0796783	0.0794442	0.077959889	0.04	0.630385	0.62943	0.636407258
0.015	0.0905091	0.0905223	0.089494771	0.041	0.661093	0.660891	0.668625376
0.016	0.10134	0.1016	0.101825161	0.042	0.6918	0.692352	0.701639002
0.017	0.113665	0.114001	0.114951061	0.043	0.722507	0.723814	0.735448138
0.018	0.128978	0.129045	0.12887247	0.044	0.757632	0.759581	0.770052783
0.019	0.14429	0.144089	0.143589388	0.045	0.794966	0.797502	0.805452936
0.02	0.159603	0.159133	0.159101815	0.046	0.832299	0.835423	0.841648599
0.021	0.175503	0.175324	0.175409751	0.047	0.869013	0.871239	0.878639771
0.022	0.191402	0.191516	0.192513196	0.048	0.904489	0.902845	0.916426452
0.023	0.207301	0.207707	0.21041215	0.049	0.939965	0.934451	0.955008642
0.024	0.226406	0.226694	0.229106613	0.05	0.975441	0.966057	0.994386341
0.025	0.247113	0.247077	0.248596585				

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.4.

Tabela A.4. Dados dos perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.5, a malha M5 e $We = 0,1$.

H(m)	τ_{xx} (Pa)		H(m)	τ_{xx} (Pa)			
	Formulação Padrão	FLC		Solução Analítica	Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica
0	0.00548999	0.00480879	0	0.026	0.535779	0.534811	0.537561333
0.001	0.00656242	0.00291966	0.000795209	0.027	0.577419	0.576154	0.579707414
0.002	0.00763484	0.00583932	0.003180836	0.028	0.619214	0.618703	0.623443913
0.003	0.00870727	0.00875898	0.007156882	0.029	0.661008	0.661253	0.66877083
0.004	0.0153426	0.0157068	0.012723345	0.03	0.702803	0.703802	0.715688166
0.005	0.0247594	0.0246686	0.019880227	0.031	0.754955	0.755297	0.764195919
0.006	0.0341762	0.0336305	0.028627527	0.032	0.807106	0.806793	0.814294091
0.007	0.0442786	0.0435582	0.038965245	0.033	0.859258	0.858288	0.865982681
0.008	0.0557521	0.0554179	0.050893381	0.034	0.91095	0.910523	0.919261688
0.009	0.0672255	0.0672776	0.064411935	0.035	0.962413	0.963126	0.974131114
0.01	0.078699	0.0791372	0.079520907	0.036	1.01388	1.01573	1.030590959
0.011	0.0986492	0.0986176	0.096220298	0.037	1.06933	1.07158	1.088641221
0.012	0.118599	0.118098	0.114510107	0.038	1.13277	1.13391	1.148281901
0.013	0.138549	0.137578	0.134390333	0.039	1.19621	1.19624	1.209513
0.014	0.159609	0.158848	0.155860978	0.04	1.25965	1.25858	1.272334517
0.015	0.181224	0.181012	0.178922041	0.041	1.32139	1.3216	1.336746452
0.016	0.202839	0.203175	0.203573523	0.042	1.38314	1.38462	1.402748805
0.017	0.22743	0.227975	0.229815422	0.043	1.44489	1.44764	1.470341576
0.018	0.257972	0.258045	0.25764774	0.044	1.51539	1.5192	1.539524765
0.019	0.288514	0.288115	0.287070475	0.045	1.59026	1.59503	1.610298373
0.02	0.319056	0.318185	0.318083629	0.046	1.66513	1.67085	1.682662399
0.021	0.350822	0.350582	0.350687201	0.047	1.73872	1.74236	1.756616842
0.022	0.382589	0.382978	0.384881191	0.048	1.80972	1.8052	1.832161704
0.023	0.414355	0.415374	0.4206656	0.049	1.88072	1.86804	1.909296984
0.024	0.452653	0.453332	0.458040426	0.05	1.95173	1.93088	1.988022683
0.025	0.494216	0.494072	0.497005671	-	-	-	-

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.4.

Tabela A.5. Dados dos perfis de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, do escoamento estacionário de um fluido de Oldroyd-B entre placas paralelas considerando os parâmetros apresentados na Tabela 3.5, a malha M5 e $We = 0,2$.

H(m)		τ_{xx} (Pa)		H(m)		τ_{xx} (Pa)	
	Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica		Formulação Padrão	FLC	Solução Analítica
0	0.0127948	0.00953878	0	0.026	1.07779	1.06859	1.075528
0.001	0.0155116	0.00586751	0.001591018	0.027	1.15171	1.15133	1.159852
0.002	0.0182283	0.011735	0.006364073	0.028	1.22504	1.23657	1.247358
0.003	0.0209451	0.0176025	0.014319163	0.029	1.29836	1.32181	1.338046
0.004	0.0354577	0.0315124	0.02545629	0.03	1.37169	1.40705	1.431916
0.005	0.0558684	0.0494434	0.039775454	0.031	1.46866	1.50947	1.528968
0.006	0.076279	0.0673745	0.057276653	0.032	1.56563	1.61189	1.629203
0.007	0.0978116	0.0872759	0.077959889	0.033	1.66259	1.71431	1.732619
0.008	0.121588	0.111118	0.101825161	0.034	1.76057	1.81857	1.839217
0.009	0.145365	0.13496	0.12887247	0.035	1.85905	1.92375	1.948997
0.01	0.169142	0.158802	0.159101815	0.036	1.95754	2.02893	2.06196
0.011	0.209767	0.197665	0.192513196	0.037	2.06354	2.14048	2.178104
0.012	0.250393	0.236529	0.229106613	0.038	2.18459	2.26475	2.29743
0.013	0.291018	0.275392	0.268882067	0.039	2.30564	2.38902	2.419939
0.014	0.334429	0.317853	0.311839557	0.04	2.42669	2.5133	2.545629
0.015	0.379232	0.362114	0.357979083	0.041	2.54898	2.64068	2.674502
0.016	0.424034	0.406375	0.407300645	0.042	2.67127	2.76806	2.806556
0.017	0.475039	0.455819	0.459804244	0.043	2.79356	2.89544	2.941793
0.018	0.538447	0.515629	0.515489879	0.044	2.9385	3.03918	3.080211
0.019	0.601855	0.575439	0.574357551	0.045	3.09476	3.1911	3.221812
0.02	0.665263	0.635249	0.636407258	0.046	3.25103	3.34302	3.366594
0.021	0.729647	0.700064	0.701639002	0.047	3.40293	3.48529	3.514559
0.022	0.794031	0.76488	0.770052783	0.048	3.54608	3.60827	3.665706
0.023	0.858415	0.829695	0.841648599	0.049	3.68924	3.73125	3.820035
0.024	0.929354	0.905624	0.916426452	0.05	3.8324	3.85423	3.977545
0.025	1.00357	0.987109	0.994386341	-	-	-	-

Dados do perfil de velocidade U_x da Figura 4.5.

Tabela A.6. Dados dos perfis de velocidade a $We = 0,05$ para o escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel, usando a Malha M8: U_x ao longo da linha vertical ($L/2, y$).

H (m)	U_x (m/s)		H (m)	U_x (m/s)	
	FLC	Formulação Padrão		FLC	Formulação Padrão
0	0	0	0.052	-0.130938	-0.127238
0.002	-0.00835269	-0.0081594	0.054	-0.132705	-0.128956
0.004	-0.0159606	-0.0155898	0.056	-0.133782	-0.130013
0.006	-0.0230161	-0.0224791	0.058	-0.133984	-0.130235
0.008	-0.0295715	-0.0288781	0.06	-0.133131	-0.12945
0.01	-0.0357119	-0.0348694	0.062	-0.131155	-0.127594
0.012	-0.0415485	-0.0405619	0.064	-0.127874	-0.124496
0.014	-0.0471381	-0.0460107	0.066	-0.1228	-0.119688
0.016	-0.0525054	-0.0512396	0.068	-0.115821	-0.113056
0.018	-0.057722	-0.0563184	0.07	-0.106646	-0.104315
0.02	-0.0628251	-0.0612836	0.072	-0.0947208	-0.0929172
0.022	-0.0678383	-0.0661578	0.074	-0.0792245	-0.0780481
0.024	-0.0727801	-0.0709589	0.076	-0.0599061	-0.0594417
0.026	-0.0776741	-0.0757101	0.078	-0.0360621	-0.0363919
0.028	-0.0825281	-0.080419	0.08	-0.00606563	-0.00727758
0.03	-0.0873391	-0.0850825	0.082	0.0308143	0.0286378
0.032	-0.092105	-0.0896988	0.084	0.0754313	0.0721937
0.034	-0.0968168	-0.0942597	0.086	0.129383	0.124945
0.036	-0.101456	-0.0987471	0.088	0.195921	0.190036
0.038	-0.105982	-0.103123	0.09	0.275532	0.267879
0.04	-0.110377	-0.107369	0.092	0.370525	0.360661
0.042	-0.114603	-0.111452	0.094	0.485904	0.473242
0.044	-0.118589	-0.115302	0.096	0.62551	0.60987
0.046	-0.12228	-0.118866	0.098	0.792566	0.776446
0.048	-0.125631	-0.122104	0.1	0.999512	0.999512
0.05	-0.128576	-0.12495	-	-	-

Dados do perfil de tensão normal da Figura 4.5.

Tabela A.7. Dados do perfil de tensão normal a $We = 0,05$ para o escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel, usando a Malha M8: τ_{xx} ao longo da linha vertical ($L/2, y$).

H (m)	τ_{xx} (Pa)		H (m)	τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Formulação Padrão		FLC	Formulação Padrão
0	2.57175	2.45536	0.052	5.91755	6.33753
0.002	2.31707	2.21359	0.054	5.49105	6.04731
0.004	2.03021	1.94197	0.056	4.90469	5.59137
0.006	1.8765	1.79735	0.058	4.15072	4.94995
0.008	1.81574	1.74137	0.06	3.24684	4.12858
0.01	1.8289	1.75595	0.062	2.24369	3.17252
0.012	1.89478	1.82096	0.064	1.19155	2.12784
0.014	2.00434	1.92779	0.066	0.171468	1.06947
0.016	2.15633	2.07532	0.068	-0.722535	0.101718
0.018	2.34145	2.25468	0.07	-1.39406	-0.669604
0.02	2.55636	2.46267	0.072	-1.71359	-1.10453
0.022	2.80072	2.69899	0.074	-1.50986	-1.01883
0.024	3.07478	2.96394	0.076	-0.707167	-0.326673
0.026	3.37314	3.25246	0.078	0.834739	1.10653
0.028	3.6932	3.56236	0.08	3.38561	3.56973
0.03	4.03297	3.89246	0.082	7.08258	7.257
0.032	4.38483	4.23646	0.084	12.1203	12.3539
0.034	4.74095	4.58819	0.086	18.9223	19.2748
0.036	5.0925	4.94127	0.088	28.544	29.1099
0.038	5.42554	5.28612	0.09	41.8841	42.8227
0.04	5.72903	5.61389	0.092	61.1412	62.8389
0.042	5.98931	5.91399	0.094	93.5225	97.7083
0.044	6.18321	6.16802	0.096	162.046	181.02
0.046	6.29141	6.35794	0.098	394.679	567.505
0.048	6.30008	6.46815	0.1	673.206	1075.61
0.05	6.19039	6.47746	-	-	-

Dados dos perfil de velocidade U_y da Figura 4.5.

Tabela A.8. Dados dos perfis de velocidade a $We = 0,05$ para o escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel, usando a Malha M8: U_y ao longo da linha horizontal $(x,0,75H)$.

H (m)	U_y (m/s)		H (m)	U_y (m/s)	
	FLC	Formulação Padrão		FLC	Formulação Padrão
0	0	0	0.052	-0.01573	-0.02259
0.002	0.042513	0.043587	0.054	-0.03814	-0.0445
0.004	0.07797	0.079638	0.056	-0.06045	-0.06623
0.006	0.108152	0.110123	0.058	-0.08233	-0.08739
0.008	0.132948	0.134911	0.06	-0.10339	-0.1076
0.01	0.152764	0.154443	0.062	-0.12338	-0.12658
0.012	0.168522	0.169716	0.064	-0.14197	-0.14398
0.014	0.180611	0.181162	0.066	-0.15852	-0.15913
0.016	0.188921	0.188704	0.068	-0.1729	-0.17193
0.018	0.194224	0.193171	0.07	-0.18488	-0.18215
0.02	0.196859	0.194938	0.072	-0.19407	-0.18945
0.022	0.196928	0.194134	0.074	-0.20004	-0.19347
0.024	0.194473	0.190829	0.076	-0.20307	-0.19459
0.026	0.189945	0.185491	0.078	-0.20316	-0.1929
0.028	0.183468	0.178258	0.08	-0.20007	-0.18835
0.03	0.174921	0.169032	0.082	-0.19422	-0.18151
0.032	0.164553	0.158069	0.084	-0.18599	-0.17286
0.034	0.152539	0.145548	0.086	-0.17555	-0.16269
0.036	0.138921	0.131519	0.088	-0.16275	-0.15097
0.038	0.123605	0.115909	0.09	-0.14775	-0.13768
0.04	0.106918	0.09903	0.092	-0.13008	-0.12219
0.042	0.088958	0.080984	0.094	-0.10833	-0.10282
0.044	0.069735	0.061786	0.096	-0.08064	-0.07741
0.046	0.049438	0.041622	0.098	-0.04486	-0.04364
0.048	0.028312	0.020723	0.1	0	0
0.05	0.006537	-0.00074	-	-	-

Dados do perfil de tensão cisalhante da Figura 4.5.

Tabela A.9. Dados do perfil de tensões cisalhantes a $We = 0,05$ para o escoamento em uma cavidade quadrada com tampa móvel, usando a Malha M8: τ_{xy} ao longo da linha horizontal $(x,0,75H)$.

H (m)	τ_{xy} (Pa)		H (m)	τ_{xy} (Pa)	
	FLC	Formulação Padrão		FLC	Formulação Padrão
0	29.4465	29.9272	0	-1.45367	-1.68591
0.002	24.8024	24.9371	0.002	-1.69031	-1.89918
0.004	19.031	18.8139	0.004	-1.83849	-2.01425
0.006	14.9432	14.5462	0.006	-1.83091	-1.95596
0.008	11.8637	11.359	0.008	-1.58745	-1.63274
0.01	9.52194	8.95001	0.01	-1.05213	-0.97892
0.012	7.671	7.05486	0.012	-0.145532	0.0980701
0.014	6.19746	5.55349	0.014	1.30289	1.79492
0.016	5.05228	4.39445	0.016	3.33865	4.1632
0.018	4.12803	3.46584	0.018	6.03833	7.28612
0.02	3.3722	2.71305	0.02	9.52234	11.2897
0.022	2.75478	2.10484	0.022	13.9146	16.2901
0.024	2.25231	1.61679	0.024	19.1176	22.1477
0.026	1.82964	1.21215	0.026	25.0613	28.7429
0.028	1.47161	0.875228	0.028	31.6054	35.8427
0.03	1.17116	0.599061	0.03	38.2938	42.8804
0.032	0.911972	0.367135	0.032	44.5333	49.1389
0.034	0.681952	0.167295	0.034	49.4879	53.6746
0.036	0.47206	-0.009354	0.036	51.7067	54.9723
0.038	0.272854	-0.172114	0.038	50.4159	52.4999
0.04	0.073079	-0.333414	0.04	45.0714	46.0225
0.042	-0.134987	-0.502264	0.042	36.6388	36.734
0.044	-0.359778	-0.689393	0.044	30.5679	29.8997
0.046	-0.606295	-0.902807	0.046	32.0929	31.1647
0.048	-0.875745	-1.14591	0.048	35.7885	35.1404
0.05	-1.16798	-1.41849	-	-	-

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.10. Perfil de tensão normal, ao longo da linha (L/2,y), obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 0,3$.

H(m)	τ_{xx} (Pa)		H(m)	τ_{xy} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica
0	0.0139264	0	0.026	1.58942	1.6132924
0.001	0.00861158	0.002386527	0.027	1.71326	1.739778343
0.002	0.0172232	0.009546109	0.028	1.84157	1.87103734
0.003	0.0258347	0.021478745	0.029	1.96988	2.007069391
0.004	0.0460637	0.038184436	0.03	2.0982	2.147874497
0.005	0.0721014	0.059663181	0.031	2.25503	2.293452658
0.006	0.098139	0.08591498	0.032	2.41185	2.443803872
0.007	0.127018	0.116939834	0.033	2.56868	2.598928142
0.008	0.16158	0.152737742	0.034	2.72894	2.758825465
0.009	0.196141	0.193308705	0.035	2.89091	2.923495843
0.01	0.230703	0.238652722	0.036	3.05289	3.092939276
0.011	0.286879	0.288769794	0.037	3.2222	3.267155763
0.012	0.343055	0.34365992	0.038	3.40616	3.446145304
0.013	0.399232	0.4033231	0.039	3.59013	3.6299079
0.014	0.462124	0.467759335	0.04	3.7741	3.81844355
0.015	0.528373	0.536968624	0.041	3.96271	4.011752255
0.016	0.594623	0.610950968	0.042	4.15131	4.209834014
0.017	0.668808	0.689706366	0.043	4.33992	4.412688828
0.018	0.758865	0.773234819	0.044	4.55166	4.620316696
0.019	0.848922	0.861536326	0.045	4.77497	4.832717619
0.02	0.938979	0.954610888	0.046	4.99828	5.049891595
0.021	1.03683	1.052458504	0.047	5.20581	5.271838627
0.022	1.13469	1.155079174	0.048	5.38179	5.498558713
0.023	1.23254	1.262472899	0.049	5.55777	5.730051853
0.024	1.34623	1.374639678	0.05	5.73374	5.966318048
0.025	1.46782	1.491579512	-	-	-

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.11. Perfil de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 0,4$.

H(m)		τ_{xx} (Pa)		H(m)		τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica		
0	0.0222956	0	0.026	2.1498	2.151056533		
0.001	0.0264245	0.003182036	0.027	2.31705	2.319704457		
0.002	0.0305534	0.012728145	0.028	2.48538	2.494716453		
0.003	0.0346823	0.028638327	0.029	2.65371	2.676092522		
0.004	0.061178	0.050912581	0.03	2.82204	2.863832663		
0.005	0.0988571	0.079550907	0.031	3.03293	3.057936877		
0.006	0.136536	0.114553307	0.032	3.24381	3.258405163		
0.007	0.176841	0.155919778	0.033	3.45469	3.465237522		
0.008	0.222397	0.203650323	0.034	3.66373	3.678433954		
0.009	0.267954	0.25774494	0.035	3.87185	3.897994458		
0.01	0.31351	0.318203629	0.036	4.07997	4.123919034		
0.011	0.393483	0.385026391	0.037	4.30375	4.356207684		
0.012	0.473455	0.458213226	0.038	4.55888	4.594860406		
0.013	0.553428	0.537764133	0.039	4.81401	4.8398772		
0.014	0.637928	0.623679113	0.04	5.06914	5.091258067		
0.015	0.724691	0.715958166	0.041	5.31625	5.349003007		
0.016	0.811454	0.814601291	0.042	5.56335	5.613112019		
0.017	0.910288	0.919608488	0.043	5.81046	5.883585104		
0.018	1.03327	1.030979759	0.044	6.09302	6.160422261		
0.019	1.15624	1.148715101	0.045	6.3933	6.443623491		
0.02	1.27922	1.272814517	0.046	6.69357	6.733188794		
0.021	1.40702	1.403278005	0.047	6.98903	7.029118169		
0.022	1.53483	1.540105565	0.048	7.27485	7.331411617		
0.023	1.66264	1.683297199	0.049	7.56067	7.640069137		
0.024	1.81638	1.832852904	0.05	7.84649	7.95509073		
0.025	1.98309	1.988772683	-	-	-		

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.12. Perfil de tensão normal, ao longo da linha (L/2,y), obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 0,5$.

H(m)		τ_{xx} (Pa)		H(m)		τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica		
0	0.0304254	0	0.026	2.77156	2.702340667		
0.001	0.0354539	0.003997545	0.027	2.98549	2.914210571		
0.002	0.0404825	0.015990182	0.028	3.2006	3.134075566		
0.003	0.045511	0.035977908	0.029	3.41572	3.361935652		
0.004	0.0803821	0.063960726	0.03	3.63084	3.597790829		
0.005	0.130174	0.099938634	0.031	3.89882	3.841641096		
0.006	0.179967	0.143911633	0.032	4.16679	4.093486454		
0.007	0.232831	0.195879723	0.033	4.43477	4.353326903		
0.008	0.291839	0.255842903	0.034	4.70036	4.621162442		
0.009	0.350847	0.323801175	0.035	4.96476	4.896993072		
0.01	0.409855	0.399754537	0.036	5.22916	5.180818793		
0.011	0.51385	0.483702989	0.037	5.51306	5.472639605		
0.012	0.617844	0.575646533	0.038	5.83594	5.772455507		
0.013	0.721839	0.675585167	0.039	6.15882	6.0802665		
0.014	0.831053	0.783518892	0.04	6.4817	6.396072584		
0.015	0.942876	0.899447707	0.041	6.79411	6.719873759		
0.016	1.0547	1.023371613	0.042	7.10651	7.051670024		
0.017	1.18201	1.155290611	0.043	7.41892	7.39146138		
0.018	1.34029	1.295204698	0.044	7.7759	7.739247827		
0.019	1.49858	1.443113877	0.045	8.15518	8.095029364		
0.02	1.65687	1.599018146	0.046	8.53446	8.458805992		
0.021	1.82061	1.762917506	0.047	8.90865	8.830577711		
0.022	1.98435	1.934811957	0.048	9.27266	9.210344521		
0.023	2.14809	2.114701498	0.049	9.63668	9.598106421		
0.024	2.34489	2.30258613	0.05	10.0007	9.993863413		
0.025	2.55823	2.498465853	-	-	-		

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.13. Perfil de tensão normal, ao longo da linha $(L/2,y)$, obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 1$.

H(m)		τ_{xx} (Pa)		H(m)		τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica		
0	0.0552433	0	0.026	5.16014	5.377641334		
0.001	0.0641822	0.007955091	0.027	5.55565	5.799261142		
0.002	0.0731211	0.031820363	0.028	5.9706	6.236791132		
0.003	0.0820599	0.071595817	0.029	6.38556	6.690231304		
0.004	0.144581	0.127281452	0.03	6.80051	7.159581657		
0.005	0.233894	0.198877268	0.031	7.29128	7.644842192		
0.006	0.323206	0.286383266	0.032	7.78204	8.146012908		
0.007	0.419371	0.389799446	0.033	8.27281	8.663093805		
0.008	0.52924	0.509125807	0.034	8.79786	9.196084884		
0.009	0.639108	0.644362349	0.035	9.34004	9.744986144		
0.01	0.748977	0.795509073	0.036	9.88223	10.30979759		
0.011	0.944393	0.962565978	0.037	10.4502	10.89051921		
0.012	1.13981	1.145533065	0.038	11.0697	11.48715101		
0.013	1.33523	1.344410333	0.039	11.6893	12.099693		
0.014	1.54279	1.559197783	0.04	12.3088	12.72814517		
0.015	1.75644	1.789895414	0.041	12.9525	13.37250752		
0.016	1.97009	2.036503227	0.042	13.5963	14.03278005		
0.017	2.21091	2.299021221	0.043	14.24	14.70896276		
0.018	2.50607	2.577449397	0.044	15.0705	15.40105565		
0.019	2.80124	2.871787754	0.045	15.9944	16.10905873		
0.02	3.09641	3.182036292	0.046	16.9183	16.83297198		
0.021	3.4069	3.508195012	0.047	17.7863	17.57279542		
0.022	3.7174	3.850263913	0.048	18.5424	18.32852904		
0.023	4.02789	4.208242996	0.049	19.2985	19.10017284		
0.024	4.38858	4.582132261	0.05	20.0547	19.88772683		
0.025	4.77436	4.971931706	-	-	-		

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.14. Perfil de tensão normal, ao longo da linha (L/2,y), obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 2$.

H(m)	τ_{xx} (Pa)		H(m)	τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica
0	0.043467	0	0.026	10.657	10.75528267
0.001	0.095098	0.015910182	0.027	11.474	11.59852228
0.002	0.14673	0.063640726	0.028	12.361	12.47358226
0.003	0.19836	0.143191633	0.029	13.248	13.38046261
0.004	0.31907	0.254562903	0.03	14.135	14.31916331
0.005	0.47432	0.397754537	0.031	15.126	15.28968438
0.006	0.62956	0.572766533	0.032	16.118	16.29202582
0.007	0.81974	0.779598892	0.033	17.109	17.32618761
0.008	1.0798	1.018251613	0.034	18.171	18.39216977
0.009	1.3398	1.288724698	0.035	19.266	19.48997229
0.01	1.5998	1.591018146	0.036	20.362	20.61959517
0.011	1.9658	1.925131957	0.037	21.493	21.78103842
0.012	2.3318	2.29106613	0.038	22.694	22.97430203
0.013	2.6978	2.688820667	0.039	23.894	24.199386
0.014	3.1341	3.118395566	0.04	25.094	25.45629034
0.015	3.6056	3.579790829	0.041	26.408	26.74501503
0.016	4.0771	4.073006454	0.042	27.721	28.0655601
0.017	4.5832	4.598042442	0.043	29.034	29.41792552
0.018	5.1584	5.154898793	0.044	30.435	30.80211131
0.019	5.7337	5.743575507	0.045	31.879	32.21811746
0.02	6.3089	6.364072584	0.046	33.323	33.66594397
0.021	6.9873	7.016390024	0.047	34.838	35.14559085
0.022	7.6658	7.700527827	0.048	36.296	36.65705808
0.023	8.3442	8.416485992	0.049	37.9053	38.20034569
0.024	9.092	9.164264521	0.05	39.41	39.77545365
0.025	9.8744	9.943863413	-	-	-

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.15. Perfil de tensão normal, ao longo da linha $(L/2, y)$, obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 4$.

H(m)	τ_{xx} (Pa)		H(m)	τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica
0	0.27509	0	0.026	21.651	21.51056533
0.001	0.3928	0.031820363	0.027	23.491	23.19704457
0.002	0.5105	0.127281452	0.028	25.332	24.94716453
0.003	0.62821	0.286383266	0.029	27.172	26.76092522
0.004	0.74592	0.509125807	0.03	29.277	28.63832663
0.005	1.1126	0.795509073	0.031	31.382	30.57936877
0.006	1.4794	1.145533065	0.032	33.487	32.58405163
0.007	1.8461	1.559197783	0.033	35.591	34.65237522
0.008	2.2128	2.036503227	0.034	37.696	36.78433954
0.009	2.5796	2.577449397	0.035	40.009	38.97994458
0.01	3.2363	3.182036292	0.036	42.323	41.23919034
0.011	3.893	3.850263913	0.037	44.636	43.56207684
0.012	4.5497	4.582132261	0.038	46.949	45.94860406
0.013	5.2064	5.377641334	0.039	49.263	48.398772
0.014	5.8631	6.236791132	0.04	51.905	50.91258067
0.015	6.8698	7.159581657	0.041	54.547	53.49003007
0.016	7.8765	8.146012908	0.042	57.189	56.13112019
0.017	8.8832	9.196084884	0.043	59.83	58.83585104
0.018	9.8899	10.30979759	0.044	62.472	61.60422261
0.019	10.897	11.48715101	0.045	64.881	64.43623491
0.02	12.311	12.72814517	0.046	68.289	67.33188794
0.021	13.726	14.03278005	0.047	70.698	70.29118169
0.022	15.141	15.40105565	0.048	74.106	73.31411617
0.023	16.555	16.83297198	0.049	77.515	76.40069137
0.024	17.97	18.32852904	0.05	80.6	79.5509073
0.025	19.81	19.88772683	-	-	-

Dados dos perfis de tensão normal da Figura 4.7.

Tabela A.16. Perfil de tensão normal, ao longo da linha $(L/2,y)$, obtidos pela FLC para a geometria de placas paralelas usando a malha M5 e $We = 8$.

H(m)	τ_{xx} (Pa)		H(m)	τ_{xx} (Pa)	
	FLC	Solução Analítica		FLC	Solução Analítica
0	0.1544	0	0.026	40.684	41.045937
0.001	0.06475	0.060718842	0.027	43.715	44.26403561
0.002	0.71406	0.242875367	0.028	46.745	47.6035719
0.003	1.06337	0.546469575	0.029	49.775	51.06454588
0.004	1.41267	0.971501467	0.03	52.806	54.64695754
0.005	2.06198	1.517971043	0.031	57.041	58.35080688
0.006	2.61129	2.185878302	0.032	61.276	62.17609391
0.007	3.4606	2.975223244	0.033	65.511	66.12281862
0.008	4.5991	3.886005869	0.034	69.746	70.19098102
0.009	5.5922	4.918226179	0.035	73.981	74.38058109
0.01	6.0852	6.071884171	0.036	78.216	78.69161886
0.011	7.7269	7.346979847	0.037	82.451	83.1240943
0.012	9.3686	8.743513206	0.038	86.686	87.67800743
0.013	11.01	10.26148425	0.039	90.921	92.35335824
0.014	12.652	11.90089298	0.04	95.156	97.15014674
0.015	14.294	13.66173938	0.041	100.509	102.0683729
0.016	15.935	15.54402348	0.042	104.862	107.1080368
0.017	17.577	17.54774525	0.043	109.22	112.2691383
0.018	19.219	19.67290471	0.044	114.57	117.5516776
0.019	20.86	21.91950186	0.045	119.92	122.9556545
0.02	22.502	24.28753668	0.046	125.27	128.4810691
0.021	25.532	26.77700919	0.047	131.63	134.1279213
0.022	28.563	29.38791939	0.048	136.98	139.8962113
0.023	31.593	32.12026726	0.049	142.33	145.7859389
0.024	34.623	34.97405283	0.05	148.69	151.7971043
0.025	37.654	37.94927607	-	-	-