

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Simulação de Escoamentos Incompressíveis Não Newtonianos em Dutos com Expansão Brusca

por

Rogério Manica

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli,
Orientador

Porto Alegre, Junho de 2003.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Manica, Rogério

Simulação de Escoamentos Incompressíveis Não Newtonianos em Dutos com Expansão Brusca / Rogério Manica.—
Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2003.

72 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2003.

Orientador: de Bortoli, Álvaro Luiz

Dissertação: Matemática Aplicada

Simulação de Escoamentos Incompressíveis Não Newtonianos em Dutos com Expansão Brusca

por

Rogério Manica

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Métodos Analíticos e Numéricos em Dinâmica dos Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli,

Banca examinadora:

Prof. Dr. Igor Mozolevski
DMAT/UFSC

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi
PPGEQ/UFRGS

Prof. Dr. Leonardo Prange Bonorino
PPGMAT/UFRGS

Prof. Dr. Leandro Farina
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
Junho de 2003.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Coordenador

AGRADECIMENTO

À minha mãe Tereza, ao meu pai Eleodoro e aos meus irmãos Denise, Vanderlei e Samuel pelo apoio, incentivo e carinho que sempre me foi dado.

À minha namorada Rafaela, por tudo que faz por mim e pelo grande incentivo e força que me passou durante a realização deste trabalho.

Aos meus amigos e colegas, em especial ao pessoal do LICC e ao colega Luciano.

Aos professores do Instituto de Matemática, principalmente o Professor Dr. Álvaro Luiz de Bortoli que me orientou durante a graduação e no mestrado.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro na graduação e no mestrado.

Conteúdo

LISTA DE FIGURAS	VII
LISTA DE TABELAS	IX
LISTA DE SÍMBOLOS	X
RESUMO	XII
ABSTRACT	XIII
1 INTRODUÇÃO	1
2 FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS	8
2.1 Introdução	8
2.2 Materiais Viscoelásticos	11
2.3 Fluidos não newtonianos dependentes do tempo	12
2.4 Fluidos não newtonianos independentes do tempo	13
2.4.1 Pseudoplásticos (<i>shear-thinning</i>)	14
2.4.2 Dilatantes (<i>shear-thickening</i>)	15
2.4.3 Plásticos de Bingham	16
2.4.4 Viscoplasticos	17
3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DOS MODELOS ADOTADOS	19
3.1 Equações da quantidade de movimento e da pressão	19
3.2 Relação tensão-deformação para Fluido Newtoniano Generalizado	20
3.2.1 Modelo power-law	21
3.2.2 Modelo de Bingham	22
3.2.3 Modelo de Herschel-Bulkley	23
3.3 Adimensionalização das equações	24
4 PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO	27

4.1	Malha computacional	27
4.2	Aproximação das equações governantes baseado no método de Runge-Kutta	29
4.3	Condições de contorno	32
4.4	Estabilidade aproximada do método	34
4.5	Implementação do código computacional	36
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	39
5.1	Resultados do modelo power-law	39
5.2	Resultados do modelo de Bingham	49
5.3	Resultados do Modelo de Herschel-Bulkley	55
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	58
	BIBLIOGRAFIA	61
	APÊNDICE A MODELOS PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	67

Lista de Figuras

Figura 1.1	Reynolds críticos para expansão	5
Figura 2.1	Fluidos não newtonianos independentes do tempo	14
Figura 2.2	Variação da viscosidade com a taxa de deformação	16
Figura 3.1	Curva viscosidade-taxa de deformação para o modelo power-law	22
Figura 4.1	Domínio de estudo	27
Figura 4.2	Refino da malha próximo à expansão	28
Figura 4.3	Razão $\Delta x/\Delta y$ na saída do duto	29
Figura 4.4	Arranjo co-localizado das variáveis na malha.	30
Figura 4.5	Condições de contorno para velocidade e pressão	32
Figura 4.6	Fluxograma do código computacional	37
Figura 5.1	Comparação entre soluções numéricas e analíticas para fluidos de power-law num duto, $Re=40$	40
Figura 5.2	Linhas de corrente para solução simétrica para $n=1$ e $Re=130$.	41
Figura 5.3	Comparação das linhas de corrente para a) $n=0,5$, b) $n=1$ e c) $n=1,5$ para $Re = 40, 50, 80$ e 130	42
Figura 5.4	Comparação das linhas de corrente para $Re = 40$: a) $n = 0, 5$, b) $n = 1$ e c) $n = 1, 5$	44
Figura 5.5	Esquema da posição dos vórtices, $r_e = 3$	44
Figura 5.6	Bifurcações para diferentes valores de n , $r_e = 3$	45
Figura 5.7	Perfis de velocidade para $n = 1$, $Re = 80$	46
Figura 5.8	Perfis de velocidade em $x=2$ e $x=5$, $Re=80$	46
Figura 5.9	Tensões e viscosidade para $n=0,5$ e $1,5$ e pressão para $n=1$; $Re=40$	47
Figura 5.10	Tensões e viscosidade para $n=0,5$ e $Re=80$	48
Figura 5.11	Solução transiente para $Re=150$, $n=0,5$ e $t = 30$	49
Figura 5.12	Perfis de velocidade na saída do duto: $Re=130$, $n=1$, $Bi=0; 0,2;$ 1 e 5	50
Figura 5.13	Perfis de velocidade na posição $x=1$ para $n=1$, $Bi=0; 1; 5$ e $Re=130$	50

VIII

Figura 5.14	Linhas de corrente para $Re=130$ e diferentes números de Bingham: a) $Bi=0$, b) $Bi=0,2$, c) $Bi=1$ e d) $Bi=5$	51
Figura 5.15	Linhas de corrente para $n=1$ e $Bi=1$; a) $Re=100$, b) $Re=130$, c) $Re=180$ e d) $Re=300$	52
Figura 5.16	Bifurcações para $n=1$ variando Bi	53
Figura 5.17	Perfis de velocidade para $n=1$, $Bi=1$, $Re=180$ e x entre 0 e 20	54
Figura 5.18	Viscosidade efetiva para $Re=130$ e $n=1$	54
Figura 5.19	Linhas de corrente para $Bi=1$ e $Re=180$: $n=0,5$, 1. e 1,5	55
Figura 5.20	Perfis de velocidade para $Re=180$: $Bi=1$ e $x=2, 7$ e 30 para $n=0,5$ e 1,5	56

Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Propriedades viscoelásticas de alguns materiais [52]	12
Tabela 2.2	Propriedades reológicas de alguns produtos alimentícios [51]	18
Tabela 5.1	Comparação entre os Reynolds críticos	43
Tabela 5.2	Comparação para os Re críticos para $n = 1$ variando Bi	53

LISTA DE SÍMBOLOS

a	parâmetro ponderativo do modelo corotacional
a_1, a_2	constantes do modelo de Oldroyd
Bi	número de Bingham
De	número de Débora
D_{II}	segundo invariante do tensor de deformação
D_+, D_-	operadores diferença para frente e para trás
D_0	operador diferença central de primeira ordem
$D_+ D_-$	operador diferença central de segunda ordem
$D_{0x} D_{0y}$	operador diferença cruzada
E	fator de amplificação
f	força
F	operador
G	módulo de elasticidade
h	altura do duto antes da expansão (comprimento característico)
H	altura do duto após a expansão
I	matriz identidade
K	índice de consistência
m	expoente de crescimento da tensão
n	expoente de power-law
p	pressão
p_0	pressão característica
R	resíduo
Re	número de Reynolds
Re_c	número de Reynolds crítico
Re_d	Reynolds onde a solução passa a ser dependente do tempo
t	tempo
\mathbf{u}	vetor velocidade
u	componente longitudinal da velocidade
v	componente transversal da velocidade
V	velocidade máxima na entrada
W	vetor das variáveis convectivas
We	número de Weissenberg
x, y	direções horizontal e vertical, respectivamente, no plano cartesiano
Y	função do tensor tensão

Símbolos especiais

α	coeficiente temporal do método de Runge-Kutta
β	constante ponderativa da extrapolação
γ	deformação
$\dot{\gamma}$	taxa de deformação
ε	governa a resposta extensional
λ	tempo de relaxação
λ_2	tempo de retardo
λ_3	constante do modelo de Carreau-Yasuda
σ	tensor tensão
ρ	massa específica
τ	tensor tensão extra
τ_0	tensão de cisalhamento
τ_{xx}, τ_{yy}	tensões normais
τ_{xy}	tensão de cisalhamento
μ	viscosidade
μ_e	viscosidade efetiva
μ_0	viscosidade a baixas deformações
μ_∞	viscosidade a altas deformações
μ_1, μ_2, μ_3	constantes do modelo de Oldroyd
ϕ	função qualquer
ω	parâmetro de relaxação para a equação da pressão
Δt	passo de tempo
$\Delta x, \Delta y$	espaçamentos na direções x e y , respectivamente
∇	gradiente
$\nabla \cdot$	divergente
∇^2	laplaciano
$\frac{\partial}{\partial}$	derivada parcial
$\frac{D}{Dt}$	derivada material
$\frac{\delta}{\delta t}$	derivada convectiva

Sobrescritos

k	indica nível iterativo atual
$k + 1$	indica iteração posterior
0	indica condição inicial ou passo anterior

Subscritos

i, j	indicadores de referência dum ponto da malha
x, y	direções horizontal e vertical do plano cartesiano

RESUMO

O objetivo deste trabalho é a simulação numérica de escoamentos incompressíveis bidimensionais em dutos com expansão brusca, considerando o raio de expansão de 3 : 1. As equações governantes implementadas são as de Navier, que junto com relações constitutivas para a tensão visam representar comportamentos não newtonianos. A integração temporal é feita usando o esquema explícito de Runge-Kutta com três estágios e de segunda ordem; as derivadas espaciais são aproximadas pelo método de diferenças finitas centrais.

Escoamentos em expansões bruscas para fluidos newtonianos apresentam um número de Reynolds crítico, dependente do raio de expansão, na qual três soluções passam a ser encontradas: uma solução simétrica instável e duas soluções assimétricas rebatidas estáveis. Aumentando o número de Reynolds, a solução passa a ser tridimensional e dependente do tempo. Dessa forma, o objetivo é encontrar as diferenças que ocorrem no comportamento do fluxo quando o fluido utilizado possui características não newtonianas.

As relações constitutivas empregadas pertencem à classe de fluidos newtonianos generalizados: power-law, Bingham e Herschel-Bulkley. Esses modelos prevêm comportamentos pseudoplásticos e dilatantes, plásticos e viscoplásticos, respectivamente. Os resultados numéricos mostram diferenças entre as soluções newtonianas e não newtonianas para Reynolds variando de 30 a 300. Os valores de Reynolds críticos para o modelo power-law não apresentaram grandes diferenças em comparação com os da solução newtoniana. Algumas variações foram percebidas nos perfis de velocidade. Entretanto, os resultados obtidos com os modelos de Bingham e Herschel-Bulkley apresentaram diferenças significativas quando comparados com os newtonianos com o aumento do parâmetro adimensional Bingham; à medida que Bingham é aumentado, o tamanho dos vórtices diminui. Além disso, os perfis de velocidade apresentam diferenças relevantes, uma vez que o fluxo possui regiões onde o fluido se comporta como sólido.

ABSTRACT

The goal of this work is the numerical solution of two-dimensional incompressible flows inside channels with a 3 : 1 sudden expansion ratio. The implemented governing equations are those of Navier, jointly with constitutive relations for tension intending to predict non-Newtonian behavior. Temporal integration is done using the three-stages explicit Runge-Kutta scheme of second order; spatial derivatives are approximated using the central finite differences method.

Flows through sudden expansions present a critical Reynolds, depending on the expansion ratio, in which the problem has three solutions: the symmetric, which is unstable, and two asymmetric stable. Increasing the Reynolds number, the solution becomes three-dimensional and time dependent. Therefore, our goal is to obtain the differences that appear in the flow when the fluid has non-Newtonian characteristics.

The constitutive relations applied correspond to the Generalized Newtonian Liquid: power-law, Bingham and Herschel-Bulkley. These models predict pseudoplastic and dilatant, plastic and viscoplastic behavior, respectively. Numerical results show differences between Newtonian and non-Newtonian solutions, for Reynolds ranging from 30 to 300. The critical Reynolds values for the power-law model presented no big differences when compared to the Newtonian solution. Some differences were seen in velocity profiles. On the other hand, results obtained with Bingham and Herschel-Bulkley models presented significant differences when compared to the Newtonian case with the increasing of the non-dimensional Bingham parameter; when the Bingham is increased, the vortex length decrease. Moreover, the velocity profiles present relevant differences, since the fluid in certain regions behaves as a solid.

1 INTRODUÇÃO

Buscando o conforto, a velocidade e o poder, o homem tem sido incentivado, ao longo dos séculos, a buscar soluções rápidas e eficazes para os problemas que surgem. Importantes avanços ocorreram com o passar dos anos graças a pesquisadores que se dedicaram ao desenvolvimento tecnológico, formulando teorias que se mostraram úteis em diversos setores.

O constante avanço dos recursos computacionais possibilita resolver problemas complexos, que envolvem significativa quantidade de cálculos e grande armazenamento de dados. Um exemplo disso é a simulação de fenômenos da natureza ou artificiais através de modelos baseados em equações matemáticas. O entendimento desses fornece informações relevantes para o desenvolvimento de equipamentos que minimizam os custos operacionais.

Com isso, o uso de métodos numéricos na solução de problemas de escoamento ganhou grande importância, sendo utilizado em diversas situações. A dinâmica de fluidos computacional apresenta algumas vantagens em relação à dinâmica de fluidos experimental [29]: o tempo de desenvolvimento do projeto é reduzido, podem ser simuladas condições de escoamento não reproduzíveis em testes experimentais, as informações geradas podem ser mais detalhadas e compreensíveis, o custo de desenvolvimento do projeto é, na maioria das vezes, menor do que em testes experimentais e a energia consumida é menor. Dessa forma, a dinâmica de fluidos computacional tornou-se uma ferramenta importante no aperfeiçoamento e no desenvolvimento de produtos e equipamentos que envolvam escoamentos de materiais, que possuem microestruturas moleculares.

Em mecânica, no entanto, o interesse em analisar molecularmente o comportamento dos materiais é menor, uma vez que os fenômenos de interesse são em larga escala e envolvem o comportamento médio de um grande número de microestruturas. Assim, é conveniente trabalhar com um modelo contínuo e idealizado desses materiais.

A mecânica do contínuo é o estudo matemático da resposta dos materi-

ais ideais às tensões aplicadas e às deformações. O advento da teoria da elasticidade elevou as expectativas sobre os métodos da mecânica do contínuo. A teoria da elasticidade é baseada na lei de Hooke e na observação de que a maioria dos metais apresentam uma pequena deformação após tensionados e quando removida a tensão, retornam ao estado original [52].

Em mecânica dos fluidos o sucesso também é considerável. No caso isotérmico, a lei newtoniana da viscosidade e a condição entre massa específica e pressão são necessárias para as equações de Navier-Stokes, que governam escoamentos de fluidos newtonianos (tais como ar e água em condições adequadas). A teoria clássica da elasticidade é linear e quase um século se passou antes que problemas não lineares fossem tratados com sucesso. Em mecânica dos fluidos, as equações de Navier-Stokes são não lineares e pouco foi avançado nas aplicações até a descoberta da teoria da parede por Prandtl, em 1908 [52].

A mecânica do contínuo está baseada nos seguintes princípios [52]:

1. Conservação da massa;
2. Conceito de tensão;
3. Simetria do tensor tensão (pelo balanço do momento angular);
4. Equação da tensão para o movimento (pelo balanço de momento linear);
5. Análise da deformação;
6. Conservação da energia.

Percebe-se, então, que um problema isotérmico e monocomponente em mecânica do contínuo possui 6 tensões, 3 velocidades e pressão como incógnitas. Assim, tem-se 10 variáveis desconhecidas e 4 equações conectando tensões, pressão e velocidades. Necessita-se, então, de 6 equações constitutivas conectando a tensão e o movimento e também as condições iniciais e de contorno.

A teoria da elasticidade e a lei newtoniana da viscosidade são atípicas [52], se percebermos que a maioria das descrições em mecânica do contínuo não tem a simplicidade e elegância desses modelos lineares. Assim, a aproximação por um modelo contínuo puro se torna menos precisa à medida que a complexidade da resposta aumenta. A resposta de soluções poliméricas e polímeros fundidos é com-

plexa e alguns métodos recentes têm tendência a combinar a mecânica do contínuo com idéias obtidas a partir da microestrutura dos corpos em estudo [52]. A esse estudo chama-se Reologia. O termo Reologia foi criado por Bingham em 1929 [12] como sendo "o estudo da deformação e fluxo de matéria".

Reologia é uma ciência interdisciplinar que diz respeito ao estudo da resposta interna de materiais reais à tensão. Literalmente, Reologia significa o estudo do fluxo. Contudo, o campo de estudo da Reologia é muito mais amplo e diz respeito a quase todos os aspectos de deformação de corpos reais sob influência de forças externas [12].

Pode-se distinguir as seguintes direções principais da pesquisa reológica:

- a) descrição do fenômeno macroscópico ocorrendo durante a deformação do material;
- b) explanação desses fenômenos num nível molecular;
- c) determinação experimental das constantes e funções que caracterizam o fenômeno;
- d) aplicações práticas dos fenômenos observados e dependências obtidas;
- e) estudo das características reológicas dos materiais em função dos seus processos de obtenção.

As origens da Reologia foram traçadas pelos egípcios no século 16, por Deborah e por Newton e Hooke no século 17. Contudo, ela emergiu como um campo separado na década de (1920-29) [52], quando o comportamento mecânico de importantes materiais industriais como borracha, plásticos, argila, tintas e muitos fluidos biológicos começaram a atrair a atenção nos campos da Física, Mecânica e Matemática, adicionando-se ao tradicional interesse da Química.

Os fluidos não newtonianos diferem dos newtonianos pela relação tensão-deformação não ser linear, ou seja, a "viscosidade" num fluido não newtoniano não é constante a pressão e temperatura dadas; depende da taxa de cisalhamento e da história cinemática prévia do fluido [52]. A deformação em fluidos não newtonianos está relacionada à tensão aplicada e à influência de características moleculares. Desta forma, não há uma relação constitutiva capaz de prever todos os comportamentos não newtonianos que podem ocorrer. O entendimento desses fluidos é importante em muitas aplicações industriais tais como a extração de óleo e gás, processamen-

to de plástico, extrusão, produtos alimentícios, produtos farmacêuticos e soluções poliméricas. Alguns fluxos não newtonianos são bem comuns na natureza, tais como o de sangue, gelo e lava.

Para representar os diferentes comportamentos não newtonianos são necessárias equações constitutivas adicionais, relacionando tensão e deformação, às equações de Navier. Uma grande quantidade de equações constitutivas foi desenvolvida ao longo do tempo.

Neste trabalho, faz-se um levantamento dos modelos mais utilizados na literatura, ressaltando a utilidade e aspectos relevantes dos mesmos. Os modelos implementados são da classe de fluidos newtonianos generalizados [23]: power-law, Bingham e Herschel-Bulkley. O modelo power-law é utilizado para prever a variação da viscosidade com a taxa de deformação, sendo que os fluidos são chamados de pseudoplásticos e de dilatantes. Os modelos de Bingham e Herschel-Bulkley são usados para prever comportamentos plásticos e viscoplásticos [56], respectivamente, na qual uma tensão precisa ser excedida para o fluxo iniciar. Os modelos e as equações são resolvidos na forma adimensional.

A forma adimensional é importante quando se quer analisar problemas de interesse técnico em dinâmica de fluidos computacional. Além de mais geral, é mais conveniente investigar e representar escoamentos na forma adimensional como função de parâmetros adimensionais [24]. O parâmetro adimensional mais utilizado é número de Reynolds (Re), que relaciona forças de inércia e forças viscosas. Outros adimensionais são usados na literatura [23], tais como os números de Prandtl (Pr), que relaciona momento molecular com difusão térmica, Grashof (Gr), que relaciona flutuação com forças viscosas e Peclet (Pe) que expressa convecção versus difusão térmica. Para fluidos não newtonianos, adiciona-se os números de Deborah (De), Weissenberg (We) e Bingham (Bi), que serão descritos posteriormente.

O objetivo deste trabalho é analisar o clássico problema de escoamento em duto com expansão brusca usando os modelos power-law, de Bingham e de Herschel-Bulkley. O problema da expansão tem aplicações importantes, tais como: extrusão, refrigeração [36] e jatos livres. Além disso, o domínio é fácil de ser imple-

mentado computacionalmente. Assim, muitos pesquisadores têm se dedicado a esse problema e resultados experimentais e numéricos confiáveis podem ser encontrados na literatura [11] [41] [1], principalmente para o caso de fluxos newtonianos, onde diversos aspectos do escoamento são apresentados. Os resultados mostram que existe um número de Reynolds crítico (Re_c), que depende do raio de expansão ($r_e = H/h$), onde o problema passa a ter três soluções: uma simétrica e duas assimétricas.

Para o caso newtoniano em expansões, um dos trabalhos mais citados é o de Fearn et al. [11] (experimental e numérico usando o método de volumes finitos) para fluxos laminares e $r_e = 3$. Vários fatores relevantes desse escoamento foram apresentados, confirmando os resultados experimentais de Durst et al. [9]. Eles observaram que o comprimento dos vórtices cresce à medida que o Re cresce; há um Reynolds crítico (Re_c) onde, a partir daí, o problema passa a ter três soluções permanentes: a solução simétrica, que é instável, e duas soluções assimétricas (idênticas rebatidas) estáveis. Além disso, existe outro Reynolds (Re_d) onde a solução passa a ser tridimensional e dependente do tempo, mas ainda previsível e com desprendimento de vórtices alternados. As simulações numéricas têm confirmado que as equações de Navier-Stokes fornecem como resposta ao problema essas soluções. Aumentando ainda mais o Re , a solução passa a ser turbulenta.

A mudança na solução com Re é resumida na figura 1.1, onde os valores críticos dependem de vários fatores, tais como r_e e tipo de fluido. A abordagem principal desse trabalho é para valores de Re entre Re_c e Re_d .

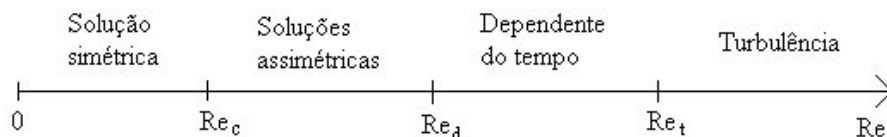


Figura 1.1: *Reynolds críticos para expansão*

Battaglia et al. [5] encontraram Re_c para diferentes r_e usando os métodos de diferenças finitas e elementos finitos. Comparações realizadas para r_e entre 1,5 e 7 mostraram uma relação inversa entre r_e e Re_c , ou seja, à medida que

o r_e aumenta, o Re_c diminui. Todavia, essas soluções apresentam características semelhantes. Para $Re < Re_c$, os vórtices a jusante à expansão são simétricos e aumentam com o aumento do Re . Para $Re_c < Re < Re_d$, a assimetria aumenta com o aumento de Re , podendo ocorrer formação de mais recirculações. Para $Re > Re_d$, a solução passa a ser dependente do tempo.

Uma série de outros autores estudaram o problema da expansão para fluidos newtonianos com vários raios de expansão, ou valores para Reynolds, ou métodos numéricos e outras características desse escoamento, sendo que há um bom número de artigos. Dentre eles podemos citar: Durst et al. [10] que estudaram expansões onde $r_e = 2$ em volumes finitos; Luo [28] que usou o método Lattice-Boltzmann para captar a bifurcação para $r_e = 3$; Tavares [53] analisou o problema permanente e transiente para diferentes raios de expansão usando o método de Newton; Sarma et al. [49] variaram o r_e entre 2 e 20 em volumes finitos; Schreck et al. [50] simularam um caso tridimensional para $r_e = 3$.

No entanto, o fluxo de fluidos não newtonianos em expansões bruscas é ainda pouco explorado. Alguns trabalhos experimentais encontrados na literatura foram para este estudo muito importantes. Halmos et al. [18] [19] analisaram numericamente e experimentalmente fluidos de power-law para $Re < 150$ para o expoente de power-law n entre 1 e 0,65. Eles concluíram que o tamanho da recirculação aumenta em torno de 20% para $n = 0,65$, em comparação com o caso newtoniano ($n = 1$).

Pak et al. [41] apresentaram resultados experimentais comparando um fluido newtoniano (água) com fluidos não newtonianos (puramente viscoso e viscoelástico) em expansões para uma grande faixa de Reynolds (10-35000), incluindo a turbulência. No caso laminar, para um fluido com comportamento de power-law, não foram percebidas diferenças significativas no tamanho da recirculação entre o não newtoniano e a água. Já para o fluido viscoelástico, o tamanho dos vórtices se mostrou bem menor que para a água considerando o mesmo número de Reynolds.

Alexandrou et al. [1] analisaram numericamente o escoamento de fluidos de Herschel-Bulkley (viscoplásticos) em expansões tridimensionais para baixos números de Reynolds, focando sua análise na formação de regiões onde o fluido se

comporta como sólido. Eles utilizaram o método de volumes finitos e a equação constitutiva de Herschel-Bulkley. Vradis e Hammad [56] analisaram o mesmo problema para expansões bidimensionais usando o método de diferenças finitas. Mishra e Jayaraman [34] simularam fluidos de power-law para r_e altos.

De forma semelhante, Missirlis et al. [35] usaram o método de volumes finitos para simular escoamentos de fluidos viscoelásticos em expansão brusca. O modelo empregado foi o *Upper Convected Maxwell* (UCM) para baixos números de Reynolds ($Re = 0, 1$). Os resultados mostraram que à medida que o adimensional Deborah (De) é aumentado, o tamanho dos vórtices diminui. Um dos objetivos na simulação de fluidos viscoelásticos é trabalhar com valores de De e We (Weissenberg) altos. No entanto, para fluxo em expansões, onde há presença de quinas (cantos), a tensão cresce, dificultando a obtenção de resultados, sendo que a maioria dos encontrados na literatura são para Re inferiores a 1.

O problema da contração brusca para fluidos viscoelásticos ganhou grande atenção dos pesquisadores devido ao alargamento dos vórtices na região da contração em resultados experimentais. Para o caso newtoniano, pode aparecer um pequeno vórtice junto ao canto. Assim, uma série de trabalhos trataram desse problema, tais como os dos autores Grossi et al. [15], Thompson et al. [54], Hammad e Vradis [20] e Nigen e Walters [38]. Este último apresenta uma comparação experimental entre contração planar e axissimétrica, concluindo que para contração axissimétrica os vórtices a montante da expansão são bem maiores.

É importante ressaltar o problema da contração num estudo de expansão, pois numericamente basta mudar a condição de contorno invertendo o sentido dos vetores para obter o problema da contração brusca. Assim, busca-se uma técnica capaz de resolver fluxos em expansões e contrações eficientemente, visando aplicá-la em problemas mais complexos com malhas não necessariamente ortogonais.

A dissertação foi organizada da seguinte maneira: inicia com características e comportamentos não newtonianos, depois apresenta modelos, equações, técnicas de solução e, por fim, resultados e respectivas conclusões, seguidas pelas referências bibliográficas.

2 FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS

Neste capítulo, mostra-se algumas características de fluidos não newtonianos, destacando-se os principais comportamentos encontrados na literatura. Como incentivo para a realização deste estudo, são comentados alguns exemplos de materiais apresentando comportamentos específicos, bem como as suas propriedades reológicas. Discute-se principalmente sobre comportamentos pseudoplástico, dilatante, plástico e viscoplástico, que são simulados nesse trabalho e cujos modelos são descritos no Cap. 3.

2.1 Introdução

Vários materiais apresentam características que podem ser representadas pelos modelos utilizados nesse trabalho sendo, portanto, relevante a explanação que segue, pois isto serviu como motivação para o desenvolvimento desse trabalho.

Inicia-se pelo fluxo de gelo, na qual alguns trabalhos experimentais e teóricos foram conduzidos recentemente [21]. A deformação do gelo natural é influenciada fortemente pela estrutura cristalina com orientação preferida, pelo grau de sólido, por impurezas dissolvidas e pela presença de água líquida. Esses fatores são particularmente importantes na base de uma geleira, onde a anisotropia policristalina é forte e a temperatura podem influenciar o fluxo [21].

Um modelo realístico do fluxo de gelo requer o acoplamento das equações da conservação da massa, momento e energia. Para cada equação, mecanismos para o movimento de gelo, água e outras partículas precisam ser definidos. Segundo Hunke [21], o comportamento do fluxo de gelo se aproxima do viscoplástico. No entanto, ele usa um modelo elástico-viscoplástico para simular esse fluxo. Isso possibilita um esquema de discretização completamente explícito que aumenta a eficiência do modelo e se adapta facilmente à paralelização.

O fluxo de lava também é importante pois, através de um conhecimento

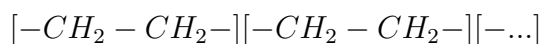
adequado desse fenômeno natural, é possível evitar acidentes, canalizar adequadamente a lava para que ela não destrua regiões habitadas e evitar grandes prejuízos.

A distância que um fluxo de lava pode percorrer depende de vários fatores, tais como: a temperatura do fluxo, o índice de sílica, o tipo de fluido e sua viscosidade, a taxa da extrusão e a inclinação do terreno. Um fluxo de lava pode mover-se a uma distância de vários quilômetros de sua fonte e ter uma espessura de 10 m, podendo viajar a velocidade de 10 km/h em terrenos íngrimes, mas tipicamente avança a menos de 1 Km/h em condições normais. Os fluxos de lava são muito quentes (entre 550 e 1400 °C), destruindo tudo o que encontram pela frente. Eles chegam a levar dias ou anos para que se refrigere completamente.

Segundo Balmforth et al. [3], tanto os experimentos reológicos como a morfologia de fluxos de lava sugerem que eles se comportam como viscoplásticos, pois apresentam uma tensão de cisalhamento devido ao conteúdo cristalino e também a variação de viscosidade com a temperatura. Desta forma, eles podem ser analisados pela lei constitutiva de Herschel-Bulkley que é apresentada no Cap. 3. Além disso, aparece outro fenômeno envolvido nesse escoamento, que é a solidificação.

Comenta-se agora a respeito dos materiais poliméricos, que estão cada vez mais presentes no nosso dia a dia. Eles têm sido empregados na fabricação utensílios domésticos, embalagens, artefatos de automóveis, entre outros. Eles têm substituído materiais convencionais como metais, madeira e vidro em muitas aplicações, pois apresentam algumas vantagens como: baixo peso, baixo custo e facilidade de processamento [37]. Por isso, o estudo desses materiais cresceu drasticamente nos últimos anos, principalmente pelo fato deles apresentarem fortes características não newtonianas.

Os polímeros são formados pela ligação entre unidades monoméricas, o que resulta em estruturas alongadas, como por exemplo polietileno que é formado pela união de unidades da forma:



Este é um polímero linear, sendo que outros com ramificações e grupos são possíveis; geralmente 10^5 unidades podem aparecer numa macromolécula [52]. Geralmente, é possível obter modelos moleculares simplificados para polímeros.

Os fluidos poliméricos apresentam características viscosas e elásticas, sendo chamados de fluidos viscoelásticos. Esse é o comportamento mais marcante dos fluidos poliméricos [52], podendo ser observado facilmente em testes experimentais. Uma outra característica reológica de fluidos poliméricos é possuir a viscosidade dependente da deformação, sendo chamados de pseudoplásticos, onde a viscosidade efetiva diminui com o aumento da taxa de deformação. Além disso, esses fluidos apresentam diferenças de tensões normais em fluxos cisalhantes, em decorrência da viscoelasticidade [37].

Semelhante aos fluidos poliméricos, suspensões, emulsões e pastas representam as áreas mais importantes da pesquisa reológica [12]. Essas três subdivisões correspondem a sistemas multifásicos com semelhanças entre si, embora em suspensões a fase dispersa é sólida, em emulsões é líquida e em pastas as partículas estão em contato físico. É também possível uma gama de estruturas existentes nesses fluidos. Por exemplo, elas podem ser:

- a) diluídas, sem interação partícula-partícula (com exceção de pastas);
- b) estáveis, como tintas estabilizadas;
- c) floculadas, com estruturas totalmente formadas;
- d) parcialmente estáveis, com algumas estruturas formadas;
- e) sedimentadas.

Essas situações existem devido à formação de estruturas dependentes da química das duas fases, tamanho e forma da partícula, efeitos de superfície, dentre outros.

Uma vez que alguns exemplos foram apresentados, parte-se para o estudo do comportamento de materiais. Todos os materiais, de gases a sólidos, podem ser divididos em três categorias de acordo com o comportamento reológico [12]:

- a) materiais viscosos, onde toda a energia adicionada é dissipada em calor;
- b) materiais elásticos, onde toda a energia adicionada é armazenada no material;

c) materiais viscoelásticos, que são sistemas que apresentam características viscosas e elásticas.

Os fluidos podem ser classificados em quatro grupos de acordo com o comportamento em fluxo [52]:

- a) newtonianos;
- b) não newtonianos independentes do tempo (fluidos na qual a taxa de deformação em algum ponto é função da tensão naquele ponto);
- c) não newtonianos dependentes do tempo, sendo mais complexos onde a relação entre tensão e deformação depende do tempo em que o fluido está sendo cisalhado;
- d) viscoelásticos.

Inicia-se pelos materiais viscoelásticos, que englobam características viscosas e elásticas.

2.2 Materiais Viscoelásticos

Em muitos materiais, sob circunstâncias apropriadas, efeitos de elasticidade e viscosidade são percebidos. Esses materiais são chamados viscoelásticos. Analisando do ponto de vista da teoria viscoelástica, torna-se evidente que uma deformação perfeitamente elástica ou um fluxo perfeitamente viscoso são idealizações que são realizadas em algumas situações particulares. A elasticidade da água ou a viscosidade do gelo podem passar despercebidos [52], por exemplo.

Quando se descreve matematicamente o comportamento de materiais, usa-se aproximações que dependem fortemente das circunstâncias sendo descritas, e não somente da natureza do material. Desta forma, as distinções entre sólido e fluido e entre elástico e viscoso não são distinções absolutas entre tipos de materiais. Exemplos típicos de materiais viscoelásticos são polímeros fundidos e géis naturais e artificiais. Na tabela 2.1 apresenta-se algumas propriedades viscoelásticas para alguns materiais [52].

O comportamento de materiais viscoelásticos pode ser representado pelos chamados modelos viscoelásticos lineares, que combinam elementos do compor-

Tabela 2.1: *Propriedades viscoelásticas de alguns materiais [52]*

Tipo de Fluido	Temp. T (K)	Tempo de Relaxação λ (s)	Viscosidade μ_0 (Pa.s)	Rigidez μ_0/λ (Pa)
Água	293	10^{-12}	0.001	10^9
Óleo mineral	303	7×10^{-10}	0.5	7×10^8
Polietileno de baixa densidade	388	10	2×10^5	2×10^4
	513	0.1	3000	3×10^4
Polietileno de alta densidade	453	0.07	2000	3×10^4
	493	0.05	1000	2×10^4
Poliestireno	443	7	2×10^5	3×10^4
	483	3	1×10^5	3×10^4
Vidro	300	$> 10^5$	$> 10^{18}$	5×10^{10}

tamento reológico ideal: uma deformação hookeana elástica e um escoamento newtoniano viscoso. Os modelos mais simples construídos dessa maneira são os de Kelvin e Maxwell. Estes e outros modelos para fluidos viscoelásticos são descritos brevemente no Apêndice A.

Após apresentados os fluidos viscoelásticos, introduz-se os fluidos não newtonianos dependentes e independentes do tempo.

2.3 Fluidos não newtonianos dependentes do tempo

Muitos fluidos reais não podem ser descritos como um fluido newtoniano generalizado, pois a viscosidade nesses fluidos depende não só da taxa de cisalhamento, mas também do tempo de cisalhamento. Esses fluidos podem ser divididos em dois tipos:

a. Tixotrópicos - *Quebra de estruturas por cisalhamento.* Tixotropia pode ser explanada como uma agregação de partículas suspensas [12]. Interações ocorrem entre as partículas como resultado da atração devido às forças de Van der Waals e, por outro lado, da repulsão devido a efeitos eletrostáticos. A estabilidade do sistema depende da existência de uma energia potencial que inibe as partículas de se aproximarem umas das outras. Desta forma, as ligações fracas entre as partículas

permitem a agregação.

Os materiais tixotrópicos são aqueles cuja consistência depende do tempo e da taxa de cisalhamento. Esse comportamento ocorre mais frequentemente em suspensões coloidais de alta concentração, que geralmente exibem uma tendência a formar gel; exemplo típico é iogurte.

b. Reopéticos - *Formação de estruturas por cisalhamento*. São materiais em que estruturas são formadas durante o cisalhamento e que gradualmente se desintegram quando o material está em repouso. Existe geralmente uma quantidade crítica de cisalhamento na qual a reformulação das estruturas não é induzida e quebras ocorrem [12]. Esse comportamento é observado, por exemplo, em soluções aquosas diluídas de pentóxido de vanádio.

2.4 Fluidos não newtonianos independentes do tempo

Fluidos desse tipo podem ser representados pelos modelos que são usados neste trabalho. Eles podem ser descritos num experimento onde a única componente de velocidade u está na direção x , por exemplo, e a variação da velocidade ocorre na direção y , por uma equação reológica da forma [52]

$$\frac{du}{dy} = \dot{\gamma} = f(\tau) \quad (2.1)$$

Essa equação implica que a taxa de deformação num ponto depende da tensão naquele ponto. Esses fluidos podem ser chamados de não newtonianos viscosos ou de newtonianos generalizados [13]. Esses comportamentos são mostrados na figura 2.1.

Os fluidos newtonianos generalizados podem ser convenientemente subdivididos dependendo da função f na equação (2.1) como: pseudoplásticos, dilatantes, plásticos de Bingham e viscoplásticos [12]. A tensão é escrita como

$$\tau = \tau_0 + K\dot{\gamma}^n = \tau_0 + K|\dot{\gamma}|^{n-1}\dot{\gamma} \quad (2.2)$$

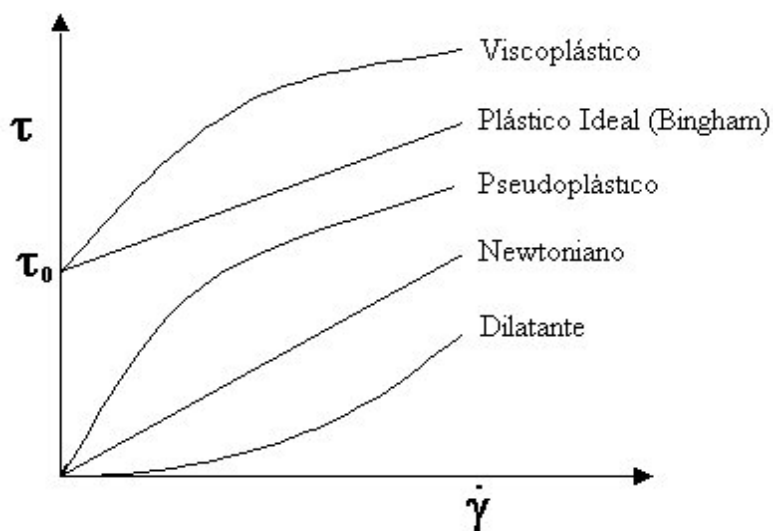


Figura 2.1: *Fluidos não newtonianos independentes do tempo*

onde τ_0 é a magnitude de tensão que precisa ser excedida para o fluxo iniciar, K é o índice de consistência do material e n é o expoente de power-law. No que segue serão explanados esses comportamentos, enquanto que as equações correspondentes são apresentadas no Cap. 3.

2.4.1 Pseudoplásticos (*shear-thinning*)

A curva típica de fluidos pseudoplásticos indica que a viscosidade decai com o aumento da taxa de cisalhamento, tornando-se linear somente a taxas de cisalhamento altas. Esse é o comportamento não newtoniano mais comum, sendo característico de sangue, soluções poliméricas e polímeros fundidos, suspensões de partículas axissimétricas (ex. suspensões de fibras) e suspensões coloidais [52].

Uma interpretação física para o decaimento da viscosidade é que com o aumento da taxa de cisalhamento as moléculas (ou estruturas) são progressivamente alinhadas. Por exemplo, numa solução de cadeias de polímeros lineares (de concentração suficientemente grande), um emaranhamento das macromoléculas pode ocorrer no repouso. Durante a deformação, um desenrolamento e desdobramento das cadeias de polímeros ocorrerá. Com o aumento da taxa de cisalhamento esse

feito se tornará mais pronunciado e causará um decréscimo progressivo da fricção interna do sistema devido ao pequeno tamanho efetivo e pequena interação entre as macromoléculas [12].

Experimentos com fluidos pseudoplásticos em expansões foram encontrados na literatura. Halmos et al. [18] observaram um pequeno aumento (em torno de 20%) no tamanho dos vórtices que aparecem após a expansão quando diminui-se o expoente de power-law n para 0,65 para valores de Re na faixa (10-150), que é parecida com a simulada nesse trabalho. Já Pak et al. [41] não perceberam diferenças de comportamento entre um fluido pseudoplástico e a água para essa situação.

2.4.2 Dilatantes (*shear-thickening*)

Em fluidos desse tipo, a viscosidade aumenta com o aumento da taxa de cisalhamento. Como exemplos podemos citar suspensões coloidais concentradas, cimento e areia movediça. Esse tipo de comportamento foi primeiro discutido por Osborne Reynolds (1885), que sugeriu que quando essas suspensões concentradas estão em repouso, os espaços vazios estão no seu mínimo e o líquido é somente suficiente para preencher esses espaços. Quando esses materiais são cisalhados a baixas taxas, o líquido lubrifica o movimento de uma partícula passando por outra e as tensões são conseqüentemente baixas. A altas taxas de cisalhamento o acondicionamento denso das partículas é quebrado e o material expande ou "dilata" levemente e os espaços vazios aumentam. Dessa forma, não há líquido suficiente na nova estrutura para lubrificar o fluxo de partículas e a tensão aplicada tem que ser muito maior. A formação dessas estruturas causa um aumento rápido da viscosidade com o aumento da taxa de cisalhamento [52].

Em processos industriais os fluidos dilatantes são menos comuns do que os pseudoplásticos mas, quando o modelo power-law (definido no Cap.3) é aplicável, o tratamento dado aos dois é o mesmo. Os fluidos pseudoplásticos e dilatantes em fluxos cisalhantes possuem três regiões [12]:

a) uma newtoniana a baixas taxas de deformação, caracterizada por uma viscosi-

dade μ_0 constante;

b) uma de taxas de deformação intermediárias, caracterizada por uma viscosidade μ dependente dessa deformação;

c) uma outra região newtoniana, caracterizada por uma viscosidade μ_∞ .

Na figura 2.2 mostra-se a curva da viscosidade para um fluido pseudo-plástico em função da taxa de deformação $\dot{\gamma}$, onde tem-se $\mu_0 > \mu_\infty$.

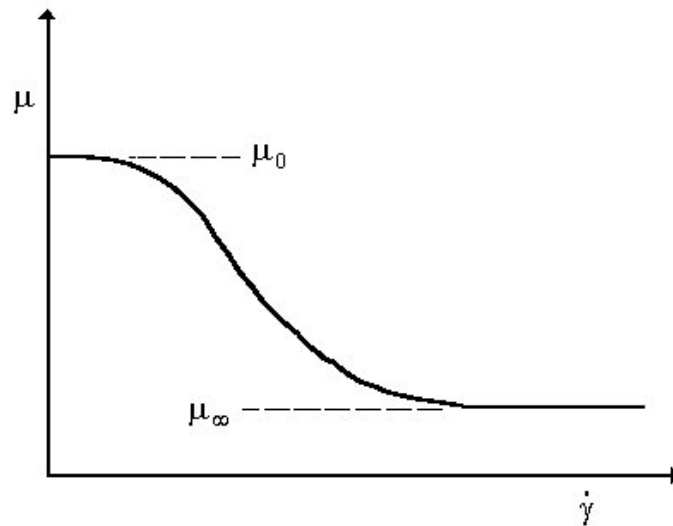


Figura 2.2: *Variação da viscosidade com a taxa de deformação*

Após apresentadas algumas características gerais de fluidos pseudo-plásticos e dilatantes, passa-se a comentar a respeito de plásticos de Bingham e viscoplásticos.

2.4.3 Plásticos de Bingham

Um plástico de Bingham é caracterizado por uma curva de fluxo que é uma reta tendo uma intersecção τ_0 no eixo da tensão, conforme figura 2.1. O conceito de plástico idealizado de Bingham é conveniente na prática porque alguns fluxos de fluidos se aproximam desse comportamento, como por exemplo os de pasta de dente e tinta [52]. Em repouso, o fluido contém estruturas tridimensionais de rigidez suficientes para resistir a uma tensão menor que τ_0 . Se essa tensão é exce-

didada, a estrutura se desintegra e o sistema se comporta como um fluido newtoniano com tensão de cisalhamento $\tau - \tau_0$; quando a tensão é menor que τ_0 a estrutura é retomada.

Simulações numéricas de plásticos de Bingham foram realizadas por alguns autores. Vradis e Otugen [57] observaram que o tamanho dos vórtices após uma expansão diminui significativamente quando o fluido tem características plásticas em comparação com um fluido newtoniano para o mesmo número de Reynolds. Já Hammad e Vradis [20] observaram o mesmo efeito para contrações bruscas.

2.4.4 Viscopoplásticos

Os fluidos viscoplásticos, também chamados de fluidos de Herschel-Bulkley [1], também necessitam uma tensão finita τ_0 para deformar. Eles se comportam como sólidos quando a tensão local é inferior a τ_0 . Quando essa tensão é excedida, o material flui com uma relação tensão-deformação não linear como um pseudoplástico ou dilatante. Alguns exemplos de fluidos se comportando dessa maneira incluem tintas, pastas, plásticos, graxas, emulsões, produtos alimentícios e farmacêuticos, materiais semi-sólidos e suspensões coloidais concentradas. Muitas vezes, esses fluidos podem ser aproximados como plásticos de Bingham, quando o expoente de power-law for próximo de 1.

O comportamento característico de fluidos viscoplásticos é devido a estruturas internas e deformação durante o processo de escoamento [1]. O fluxo e a forma (topologia) das regiões em que há fluxo e as regiões onde o fluxo está parado são importantes. Por exemplo, em misturas de sólido e líquido do mesmo metal, mudanças estruturais podem ser atribuídas à dissociação de partículas que estavam juntas devido ao cisalhamento. Nesses casos, os agrupamentos de partículas quebram e o material deforma de uma maneira não linear. O arranjo final das fases líquidas e sólidas afetam as propriedades mecânicas das partes sendo formadas.

Na tabela 2.2 apresenta-se as propriedades reológicas de alguns produtos alimentícios encontrados no site da *University of Teesside* [51]. A notação usada

para os parâmetros é baseada na equação (2.2). Nos casos onde $n = 1$ não ocorre variação da viscosidade com a taxa de deformação; nos demais casos, $n < 1$, os produtos são pseudoplásticos. Ketchup e chocolate derretido apresentam comportamento viscoplástico, pois $\tau_0 > 0$.

Tabela 2.2: *Propriedades reológicas de alguns produtos alimentícios [51]*

Produto	$T(C)$	n	$K(Pas^n)$	$\tau_0(Pa)$
Polpa de maçã	25	0.084	65.03	
Molho de maçã	20	0.302	16.68	
Suco de laranja concentrado (40%)	25	0.585	4.121	
Ketchup	25	0.27	18.7	32.0
Purê de tomate	25	0.236	7.78	
Maionese	25	0.54	6.6	
Leite homogeneizado	20	1.00	0.002	
Chocolate derretido	46	0.574	0.57	1.16
Óleo de oliva	10	1.0	0.1380	
	40	1.0	0.0363	
Óleo de Girassol	38	1.0	0.0311	

Após apresentados os principais comportamentos não newtonianos encontrados na literatura, são introduzidas as equações governantes e os modelos para fluido não newtoniano viscoso utilizados nesse trabalho.

3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DOS MODELOS ADOTADOS

Neste capítulo, mostra-se as equações governantes e as relações constitutivas utilizadas, bem como a adimensionalização dessas equações para os modelos power-law, de Bingham e de Herschel-Bulkley.

3.1 Equações da quantidade de movimento e da pressão

Inicia-se pela equação da continuidade, que é escrita na forma incompressível bidimensional conforme

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.1)$$

onde $\mathbf{u} = (u, v)$ é o vetor velocidade e ∇ é o vetor gradiente.

A equação da quantidade de movimento é uma afirmação das leis de Newton para o movimento

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \sigma + \rho f \quad (3.2)$$

onde f é a força de corpo (considerada nula neste trabalho), ρ é a massa específica e D/Dt é a derivada material dada por

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (3.3)$$

O tensor tensão σ é escrito conforme

$$\sigma = -pI + \tau \quad (3.4)$$

onde p é a pressão, I a identidade e τ o tensor tensão extra. A forma de τ depende do fluido particular a ser modelado. Pode-se escrever a tensão extra conforme

$$\tau = 2K\dot{\gamma} \quad (3.5)$$

sendo K o índice de consistência. Para o caso newtoniano K representa a viscosidade e, com a inclusão da hipótese de Stokes, as equações de Navier-Stokes são obtidas e

$\dot{\gamma}$, a taxa de deformação, é dada por

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (3.6)$$

Assim, as tensões normais e de cisalhamento podem ser assim definidas para o caso newtoniano

$$\tau_{xx} = 2K \frac{\partial u}{\partial x} \quad (3.7)$$

$$\tau_{yy} = 2K \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.8)$$

$$\tau_{xy} = K \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (3.9)$$

Essas definições variam de acordo com o modelo a ser implementado. Para a pressão uma equação de Poisson é utilizada, que é obtida a partir das equações da quantidade de movimento e da continuidade, sendo assim definida [45]

$$\nabla^2 p = \rho \left[\frac{\partial^2(uu)}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2(uv)}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2(vv)}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial^2 \tau_{xx}}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \tau_{xy}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \tau_{yy}}{\partial y^2} + \rho \frac{\partial d}{\partial t} \quad (3.10)$$

onde

$$d = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.11)$$

Na seqüência, apresenta-se os modelos utilizados nesse trabalho. O fluido newtoniano generalizado (ou não newtoniano viscoso) foi escolhido por não ser difícil de ser implementado e por prever comportamentos não newtonianos interessantes como os citados no capítulo anterior. Além disso, ele vem sendo empregado, no problema da expansão, para números de Reynolds superiores aos utilizados nos modelos para viscoelásticos [57]. Como o objetivo é estudar bifurcações na solução que ocorrem nesse problema para valores de Reynolds moderados, optou-se pelo fluido newtoniano generalizado.

3.2 Relação tensão-deformação para Fluido Newtoniano Generalizado

Nos casos onde a variação da viscosidade com a deformação é significativa e precisa ser modelada, o fluido newtoniano generalizado pode ser usado [12].

A tensão extra é escrita conforme

$$\tau = \tau_0 + K\dot{\gamma}^n = \tau_0 + K|\dot{\gamma}|^{n-1}\dot{\gamma} = \mu_e\dot{\gamma} \quad (3.12)$$

onde μ_e é a viscosidade efetiva. Ela é função do segundo invariante do tensor deformação D_{II} . $|\dot{\gamma}|$ é escrita como [56]

$$|\dot{\gamma}| = \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{D_{II}}{2} \right]^{1/2} \quad (3.13)$$

No que segue, alguns modelos serão apresentados e analisados: power-law, Bingham e Herschel-Bulkley.

3.2.1 Modelo power-law

O modelo power-law é devido a Ostwald (1925) e de Waele (1923), sendo o mais simples para descrever comportamentos não newtonianos [26]. A viscosidade efetiva é definida como

$$\mu_e = K|\dot{\gamma}|^{n-1} \quad (3.14)$$

Alguns comportamentos são representados para diferentes valores de n .

$n = 1$: newtoniano com viscosidade K (Pa.s);

$n > 1$: dilatante;

$n < 1$: pseudoplástico.

É importante observar que quando $n < 1$ esse modelo só é capaz de representar a região de power-law de uma curva de viscosidade real, que ocorre a taxas de deformação intermediárias, como mostrado na figura 3.1. Ele prevê viscosidade infinita quando $\dot{\gamma}$ tende a zero e viscosidade zero quando $\dot{\gamma}$ tende a infinito e isso não ocorre na prática.

Em situações simplificadas, soluções analíticas foram encontradas para perfis de velocidade para o modelo power-law. Pnueli e Gutfinger [47] apresentam uma solução analítica para o fluxo completamente desenvolvido num duto circular.

Vradis e Hammad [56] simularam fluidos de power-law, plásticos e viscoplásticos em expansões e contrações bruscas para $r_e = 2$. Resultados foram obtidos

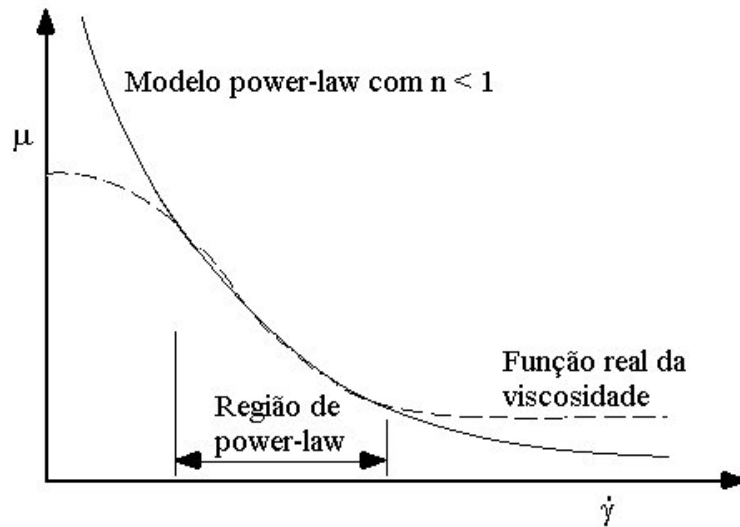


Figura 3.1: Curva viscosidade-taxa de deformação para o modelo power-law

para baixos números de Reynolds ($Re \leq 50$), onde as soluções são permanentes e simétricas, e mostraram alguns efeitos da variação dos parâmetros nos resultados. Mostradas algumas características do modelo power-law, parte-se para a apresentação do modelo de Bingham.

3.2.2 Modelo de Bingham

O modelo de Bingham é utilizado para prever comportamentos plásticos. Ele é caracterizado por uma curva de fluxo que é uma linha reta tendo uma intersecção τ_0 no eixo das tensões (figura 2.1). A viscosidade efetiva para um plástico de Bingham é escrita conforme [6]

$$\mu_e = K + \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} \quad \tau > \tau_0 \quad (3.15)$$

$$\mu_e = \infty \quad \tau \leq \tau_0 \quad (3.16)$$

onde τ_0 é a tensão que deve ser excedida para o fluxo iniciar. Para $\tau \leq \tau_0$, a taxa de deformação é zero. O modelo representado por (3.15) e (3.16) indica que o escoamento tem duas regiões distintas: onde $\tau \leq \tau_0$ o fluido se comporta como sólido e escoar como se fosse um bloco ou está parado e quando $\tau > \tau_0$ ele se comporta como

um fluido newtoniano.

O modelo de Bingham é bastante utilizado na literatura. Vradis e Otugen [57] usaram esse modelo para simular comportamento plástico em expansões usando o método de diferenças finitas. Hammad e Vradis [20] aplicaram esse modelo para simular fluidos com comportamento plástico em contrações bruscas axisimétricas também usando um esquema de diferenças finitas.

3.2.3 Modelo de Herschel-Bulkley

O modelo de Herschel-Bulkley é construído combinando o modelo de Bingham e o de power-law, para descrever comportamentos viscoplásticos. Define-se a viscosidade efetiva como [1]

$$\mu_e = \frac{\tau_0}{\dot{\gamma}} + K|\dot{\gamma}|^{n-1} \quad \tau > \tau_0 \quad (3.17)$$

$$\mu_e = \infty \quad \tau \leq \tau_0 \quad (3.18)$$

Os modelos de Bingham e Herschel-Bulkley apresentam uma descontinuidade na viscosidade efetiva e isso causa sérios problemas numéricos. Papanastasiou [43] propôs uma aproximação para o modelo de Bingham e Alexandrou et al. [1] adaptaram-na para o modelo de Herschel-Bulkley. A viscosidade efetiva é escrita conforme

$$\mu_e = K \left[\frac{D_{II}}{2} \right]^{(n-1)/2} + \frac{\tau_0 [1 - \exp(-m\sqrt{D_{II}/2})]}{\sqrt{D_{II}/2}} \quad (3.19)$$

onde m é o expoente de crescimento da tensão. Essa equação possui 3 parâmetros materiais: τ_0 , K e n cujos valores são determinados experimentalmente. A relação constitutiva é contínua e é válida para as regiões onde o material se comporta como líquido e onde se comporta como sólido.

O parâmetro m controla a taxa de crescimento da relação tensão-deformação; quanto maior o valor de m , mais essa relação se aproxima da relação original (equações 3.17 e 3.18). Na prática numérica, m não pode ser levado a valores muito altos devido a problemas de convergência. Além disso, mesmo a altos valores de m , não há garantia de que uma solução convergida seja a representação verdadeira das

superfícies entre a parte sólida e a líquida [1].

Alexandrou et al. [1] simularam fluxos tridimensionais em expansões bruscas com raios de expansão de 2 e 4. O valor do parâmetro m utilizado foi de 1000. Foram obtidas regiões onde o fluido se comporta como sólido e outras onde se comporta como líquido, sendo esse o principal objetivo do trabalho, uma vez que eles simularam fluxos para baixos números de Reynolds. Após apresentados os modelos utilizados, parte-se para a adimensionalização das equações.

3.3 Adimensionalização das equações

A adimensionalização é importante quando se quer estudar problemas de interesse técnico em dinâmica de fluidos computacional. Os parâmetros adimensionais podem ser obtidos da análise dimensional ou diretamente das equações diferenciais. Além de mais geral, é conveniente investigar e representar escoamentos e transferência de calor na forma adimensional como função de parâmetros adimensionais [24]. Isto pelo fato dos parâmetros assumirem valores da mesma ordem de grandeza, diminuindo erros numéricos.

O surgimento dos parâmetros adimensionais está relacionado a constatações experimentais feitas por pesquisadores da mecânica dos fluidos; o adimensional geralmente recebe o nome do seu autor. Saliencia-se que dois escoamentos são semelhantes se tais parâmetros forem iguais, ou seja, mantendo a semelhança geométrica e dinâmica, tem-se os mesmos adimensionais.

Introduz-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$t^* = \frac{tV}{h}, \quad \mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{h}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{V}, \quad p^* = \frac{p}{\rho V^2}, \quad \tau_{ij}^* = \frac{\tau_{ij}}{\mu V/h}$$

sendo V a velocidade média na entrada do duto, h a metade da entrada da expansão e $\mathbf{x} = (x, y)$. Substituindo essas variáveis nas equações governantes e fazendo algumas manipulações algébricas [45], define-se o número de Reynolds generalizado como [1]

$$Re = \frac{\rho V h}{\mu_e} = \frac{\rho V^{2-n} h^n}{K}$$

assumindo que $\mu_e = K(V/h)^{n-1}$ na equação de power-law. Existem ainda outras maneiras de se definir o número de Reynolds para escoamentos de fluidos desse tipo. Escolheu-se essa por ser geral e bastante utilizada na literatura [24].

Para o modelo Herschel-Bulkley, que apresenta uma tensão inicial τ_0 que precisa ser excedida para que ocorra fluxo, adimensionalizando define-se o número de Bingham generalizado [1] dado por

$$Bi = \frac{\tau_0 h}{\mu_e V} = \frac{\tau_0 h^n}{KV^n}$$

Os adimensionais Reynolds e Bingham generalizados são utilizados nesse trabalho. As equações escritas na forma adimensional ficam

$$\nabla \cdot u^* = 0, \quad (3.20)$$

$$Re \frac{Du^*}{Dt^*} = \nabla \cdot \sigma^* \quad (3.21)$$

sendo $\sigma^* = -p^* I + \tau^*$, sendo τ^* dado por, para o modelo Herschel-Bulkley,

$$\tau^* = \left\{ \left[\frac{D_{II}^*}{2} \right]^{(n-1)/2} + \frac{Bi[1 - \exp(-m\sqrt{D_{II}^*/2})]}{\sqrt{D_{II}^*/2}} \right\} \dot{\gamma}^*; \quad (3.22)$$

quando $n = 1$ tem-se o modelo de Bingham e quando $Bi = 0$ tem-se o power-law.

A equação da pressão adimensionalizada é assim definida

$$\nabla^2 p^* = \frac{\partial^2(u^*u^*)}{\partial x^{*2}} + 2 \frac{\partial^2(u^*v^*)}{\partial x^* \partial y^*} + \frac{\partial^2(v^*v^*)}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 \tau_{xx}^*}{\partial x^{*2}} + 2 \frac{\partial^2 \tau_{xy}^*}{\partial x^* \partial y^*} + \frac{\partial^2 \tau_{yy}^*}{\partial y^{*2}} \right] + \frac{\partial d^*}{\partial t^*} \quad (3.23)$$

Por questão de simplicidade, o sobrescrito $*$ é omitido no texto a partir de agora. Adiciona-se que modelos para fluidos viscoelásticos apresentam tempo de relaxação λ . Nesses casos, outros adimensionais são introduzidos, tais como o número de Deborah e de Weissenberg. O número de Deborah é dado por [55]

$$De = \frac{\lambda V}{h}$$

e o de Weissenberg por [52]

$$We = \lambda \dot{\gamma},$$

sendo que em muitas aplicações [35], essas definições se equivalem.

Após ser apresentada a adimensionalização das equações, comenta-se a

respeito do uso de modelos em problemas de interesse técnico. Exceto nas teorias do contínuo simples (elasticidade, fluidos newtonianos) é normal e necessário utilizar vários estágios de aproximação para o comportamento de materiais reais em análise. Tanner [52] acredita que isto deve ser feito para estudos de fluidos viscoelásticos e que é custoso e improdutivo insistir em usar o modelo constitutivo mais complexo em todas as situações; ele meramente necessita ser adequado ao problema proposto.

Há uma classe de problemas de fluxo que aparecem em aplicações tais como [52]: comportamento a pequenas deformações, fluxos fracos estacionários (na qual o cisalhamento simples pode ser tomado como exemplo), fluxos fortes estacionários (incluindo fluxo extensional simples), fluxos com história de velocidade descontínua e fluxos com múltiplos saltos, especialmente saltos com troca de sinal. Essas categorias formam uma hierarquia de dificuldade crescente na qual as equações constitutivas podem ser testadas. Os resultados dos cálculos podem apresentar:

- a) concordância exata entre modelo e experimento;
- b) boa concordância;
- c) concordância moderada com comportamento típico;
- d) um resultado possível, mas não em boa concordância com dados de experimentos típicos em fluidos poliméricos;
- e) não fornece resultado ou resultado fisicamente impossível.

Uma comparação entre alguns modelos utilizados para descrever comportamentos de fluidos não newtonianos foi encontrada em Tanner [52]. O modelo K-BKZ (conforme Apêndice) mostrou ser um dos mais completos, fornecendo bons resultados para a maioria dos testes realizados. Observa-se que modelos mais simples, que são fáceis de implementar, são geralmente pobres, enquanto modelos mais sofisticados são difíceis de implementar. Dessa forma, o modelo escolhido deve estar de acordo com os objetivos buscados. Sendo o objetivo determinar a variação da viscosidade para um fluido pseudoplástico a taxas de cisalhamento moderadas, por exemplo, o modelo power-law pode ser utilizado com sucesso.

Na seqüência, aborda-se os procedimentos de solução onde apresenta-se a malha, condições de contorno, discretização das equações, entre outros.

4 PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO

Mostra-se agora o domínio, a obtenção da malha computacional, as condições de contorno, a aproximação das equações governantes e os critérios de convergência adotados. Apresenta-se, inicialmente, a geometria de estudo na figura 4.1. Nela fica claro que o raio de expansão é 3 : 1, ou seja, $r_e = 3$. O comprimento a montante da expansão é de $4h$ e a jusante de $60h$, onde supõe-se que o contorno de saída não terá influência sobre o fluxo no duto. O sistema de coordenadas foi definido como mostrado na figura em que a origem está no centro da expansão.

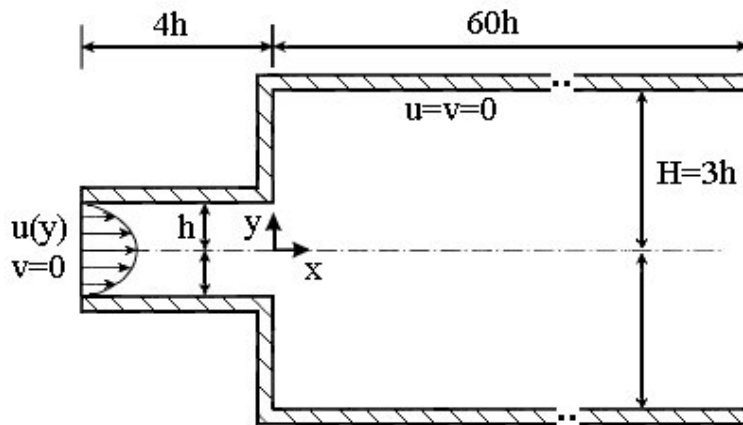


Figura 4.1: *Domínio de estudo*

4.1 Malha computacional

Dentre os fatores mais importantes em simulações tem-se a obtenção da malha computacional. Uma boa malha facilita a obtenção dos resultados e a convergência, ao passo que uma malha ruim pode dificultar ou impossibilitar a obtenção de resultados. Do ponto de vista numérico, numa malha "ideal" todas as células deveriam ser quadradas, ou seja, $\Delta x = \Delta y$. No entanto, na maioria das vezes, isso não é conveniente, observando que em certos fluxos as grandes variações ocorrem em regiões distintas e conhecidas. Por isso, refina-se a malha nessas regiões

de forma a captar tais variações. Em malhas estruturadas, sugere-se que o fator de refinamento não seja superior a 20% [2].

Testes mostram que um fator dessa ordem pode ser usado quando o fluxo tem uma direção preferencial; por exemplo, num duto simples, para problema de camada limite. Para o caso de uma expansão, onde ocorrem recirculações e grandes variações na direção do fluxo, recomenda-se que o fator de refinamento não seja superior a 6% [53]. Outro ponto importante a ser abordado é a razão $\Delta x/\Delta y$; recomenda-se que não seja superior a 2 em fluxo com recirculações. Já se o fluxo tem uma direção preferencial, esse fator pode ser maior sem influenciar a obtenção do resultado.

Para o problema estudado, duas malhas foram utilizadas. Iniciou-se com uma malha contendo 112x97 pontos, que foi usada durante os testes iniciais para o funcionamento do código. A malha foi refinada durante o processo de forma a captar variações importantes tal como tensões nas quinas (cantos) e minimizar certas imperfeições que ocorriam nas simulações; chegou-se ao final com uma malha de 193x97 pontos, que foi utilizada na obtenção dos resultados que serão apresentados a seguir. Em termos globais, os resultados fornecidos pelas duas malhas se equivalem, indicando que a malha é adequada. Adotou-se a malha mais refinada, pois desejava-se obter soluções locais, como por exemplo bifurcações e uma malha mais refinada se fez necessária.

Os fatores de refinamento foram definidos da seguinte maneira: 6% para $-2h < x < 0$, 1.5% para $0 < x < 15h$ e não se refinou entre $15h < x < 30h$. A

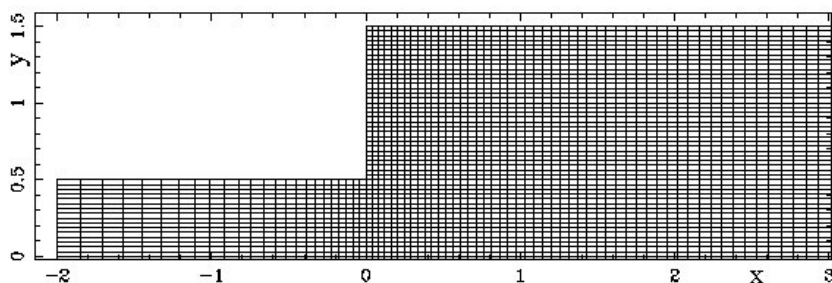


Figura 4.2: Refino da malha próximo à expansão

razão $\Delta x/\Delta y$ é da ordem de 1 na expansão, como mostrado na figura 4.2, chegando a mais de 10 na saída do duto, como mostrado na figura 4.3. Nessa região o fluxo está desenvolvido e essa razão não causa problemas. Para o caso da malha grossa, essa razão era superior a 20. Na seqüência, a aproximação das equações governantes é apresentada.

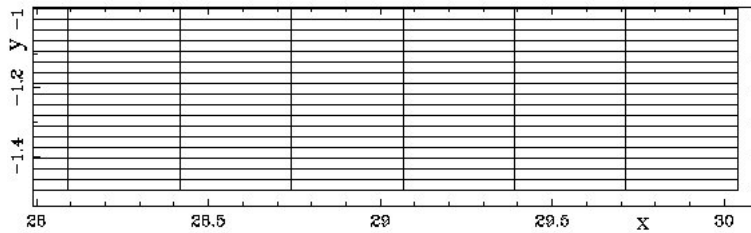


Figura 4.3: Razão $\Delta x/\Delta y$ na saída do duto

4.2 Aproximação das equações governantes baseado no método de Runge-Kutta

Como foi mostrado, a malha é cartesiana, facilitando a obtenção das equações aproximadas. Caso contrário, seria aconselhável o uso de coordenadas generalizadas, apresentando algumas complicações como o cálculo das métricas e o aumento do número de cálculos realizados em cada passo.

As variáveis na malha estão dispostas segundo o arranjo co-localizado mostrado na figura 4.4. Como vantagens desse arranjo podemos citar: as variáveis são armazenadas nos vértices, propiciando menor necessidade de memória e facilidade de aplicação das condições de contorno. Outra possibilidade seria o arranjo desencontrado dado por Patankar [42], que tem sido preterido devido ao aumento do custo computacional. Esse arranjo calcula as velocidades nas faces da célula e a pressão no centro da célula.

As equações são aproximadas pelo método de diferenças finitas [2]. Define-se os seguintes operadores que serão utilizados para mostrar as equações

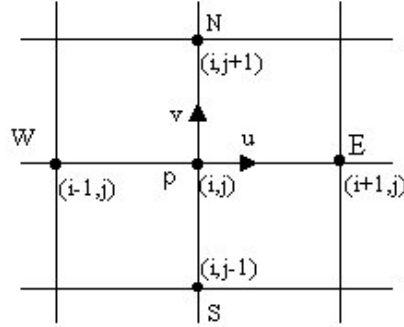


Figura 4.4: Arranjo co-localizado das variáveis na malha.

aproximadas, seguindo a notação de Gustafsson et al.[16]

$$D_{+x}\phi_{ij} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} \quad (4.1)$$

$$D_{-x}\phi_{ij} = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (4.2)$$

$$D_{0x}\phi_{ij} = \frac{1}{2}(D_{+x} + D_{-x})\phi_{ij} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (4.3)$$

$$D_{+x}D_{-x}\phi_{ij} = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad (4.4)$$

Os operadores (4.2) e (4.1) são $O(\Delta x)$ (da ordem de Δx) e são chamados de diferença para frente e diferença para trás, respectivamente. O operador (4.3) é $O(\Delta x^2)$, sendo chamado operador diferença central. Esses são utilizados para derivadas de primeira ordem. O operador (4.4) é usado para as derivadas de segunda ordem, sendo de $O(\Delta x^2)$. De forma semelhante, define-se os operadores D_{+y} , D_{-y} , D_{0y} e $D_{+y}D_{-y}$, onde as aproximações são feitas na componente j , mantendo i fixo. Para derivadas do tipo $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$, o operador é definido conforme

$$D_{0x}D_{0y}\phi_{ij} = \frac{\phi_{i+1,j+1} + \phi_{i-1,j-1} - \phi_{i-1,j+1} - \phi_{i+1,j-1}}{4\Delta x \Delta y} \quad (4.5)$$

O avanço temporal é calculado através do esquema explícito de Runge-Kutta simplificado [7], dado por Jameson. Esse esquema apresenta como vantagens o reduzido armazenamento de dados, o ganho de tempo (de cálculo) e a elevada

precisão. Ele é apresentado a seguir [32] para aproximar numericamente a eq. (3.2).

$$W_{ij}^0 = W_{ij}^k \quad (4.6)$$

$$W_{ij}^l = W_{ij}^0 - \alpha_l \Delta t R_{ij}^{l-1}, \quad l = 1, 2, 3 \quad (4.7)$$

$$W_{ij}^{k+1} = W_{ij}^l \quad (4.8)$$

onde $W_{ij} = (u_{ij}, v_{ij})^T$ é o vetor das variáveis convectivas, Δt o passo de tempo, α_l os coeficientes temporais, que para o caso de segunda ordem com três estágios são $\alpha_1 = 1/2$, $\alpha_2 = 1/2$ e $\alpha_3 = 1$, o sobrescrito k indica iteração atual e $R_{ij} = (R_{ij}^1, R_{ij}^2)^T$ é o resíduo dado por

$$\begin{pmatrix} R^1 \\ R^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} uD_{0x}u + vD_{0y}u + D_{0x}p - Re^{-1}(D_{0x}\tau_{xx} + D_{0y}\tau_{xy}) \\ uD_{0x}v + vD_{0y}v + D_{0y}p - Re^{-1}(D_{0x}\tau_{xy} + D_{0y}\tau_{yy}) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

onde os subscritos ij foram omitidos por simplicidade.

A equação aproximada para a pressão (eq. (3.10)) no tempo $k + 1$ é escrita a seguir

$$\begin{aligned} (D_{+x}D_{-x} + D_{+y}D_{-y})p &= D_{+x}D_{-x}uu + D_{0x}D_{0y}uv + D_{+y}D_{-y}vv \\ + Re^{-1}(D_{+x}D_{-x}\tau_{xx} + 2D_{0x}D_{0y}\tau_{xy} + D_{+y}D_{-y}\tau_{yy}) &+ (d^{k+1} - d^k)/\Delta t \end{aligned} \quad (4.10)$$

sendo que $d^{k+1} = 0$. Para a pressão se utilizou o método das relaxações sucessivas. Este método procura acelerar a convergência do procedimento iterativo de Gauss-Seidel com a introdução de um parâmetro de relaxação ω , que modifica o raio espectral da matriz Jacobiana da iteração,

$$p^{k+1} = \omega p^{k+1} + (1 - \omega)p^k \quad (4.11)$$

sendo ω um valor entre 0 e 2. O valor adotado no trabalho foi $\omega = 0,7$.

Na seqüência apresenta-se as condições de contorno, que são um dos fatores que mais dificultam a obtenção de resultados em simulações numéricas.

4.3 Condições de contorno

As condições de contorno empregadas para pressão, velocidades e tensões são indicadas na figura 4.5. A implementação adequada das condições de contorno é sempre importante na solução numérica de problemas de fluxo. As condições de contorno são assim definidas.

- na entrada: condição parabólica para a velocidade (que se ajusta de acordo com o tipo de fluido antes de chegar à expansão), extrapolação da pressão e das tensões;
- nas paredes: condição de não-deslizamento para a velocidade, extrapolação na pressão e supõe-se que as equações das tensões são válidas na fronteira rígida [15];
- na saída: *far field* nas velocidades, pressão fixa p_0 (que é o valor inicial) e tensões extrapoladas.

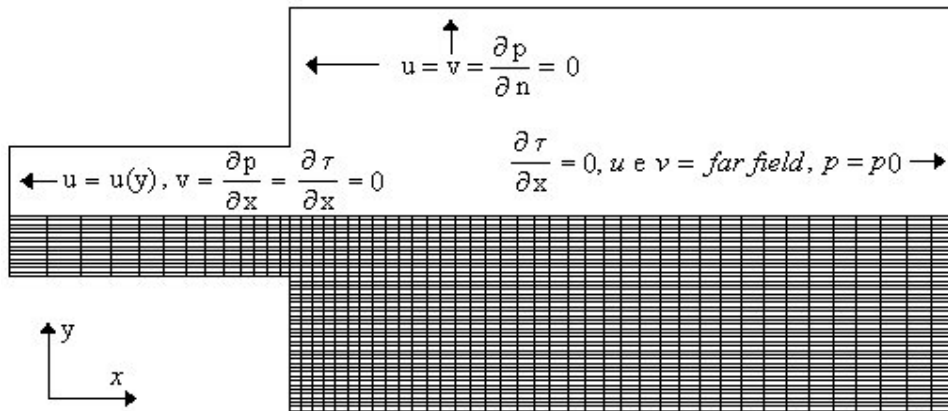


Figura 4.5: Condições de contorno para velocidade e pressão

Uma extrapolação é implementada, como por exemplo para a pressão na entrada, onde se admite que:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

de forma que

$$p_{1,j} = \beta p_{2,j} + (1 - \beta) p_{3,j}$$

onde o valor de β pode variar entre 0 e 2. O valor de β adotado no trabalho na maioria dos casos foi de 0,75, sendo que testes de calibração foram realizados para valores de β entre 0,5 e 2.

A condição *far field* [7] é definida para a variável \mathbf{u} na saída da seguinte forma

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = 0$$

e foi implementada para a componente u como segue e de forma semelhante para v

$$u_{ni,j} = u_{ni-1,j} + (p_{ni-1,j} - p_{ni,j})/\rho c$$

onde o subscrito ni representa a linha de contorno e c é uma constante, representando a velocidade característica. Essa condição de contorno é obtida empregando o conceito de variável característica e permite trabalhar com domínios menores que os necessários numa extrapolação simples [7].

Para as tensões, supõe-se que suas equações sejam válidas também para a fronteira rígida. As condições de contorno para tensões são calculadas da seguinte maneira, por exemplo para uma parede inferior (em (i,1)), paralela ao eixo x [15]

$$\begin{aligned} \tau_{xx(i,1)} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \\ \tau_{xy(i,1)} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \mu_{i,2}(u_{i,2} - u_{i,1})/\Delta y \\ \tau_{yy(i,1)} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} = 2\mu_{i,2}(v_{i,2} - v_{i,1})/\Delta y \end{aligned}$$

e de forma semelhante para as paredes superior e aquelas paralelas ao eixo y . Note que $\mu_{i,2}$ depende do modelo implementado.

É importante salientar que o canal tem quinças na expansão e algum cuidado necessita ser tomado quando da aplicação das condições de contorno. Além disso, a malha precisa ser fina nessas regiões para minimizar o erro provocado pelas aproximações.

As condições iniciais primeiramente utilizadas foram velocidades e tensões nulas e pressão de referência no domínio. Para a obtenção dos resultados finais, usou-se como condição inicial uma solução obtida anteriormente. Faz-se, no que segue, uma análise de estabilidade do método.

4.4 Estabilidade aproximada do método

O tempo t pode variar de 0 a ∞ ; por isso é importante o estudo da estabilidade do método. Seria interessante uma certa flexibilidade no passo de tempo Δt . No entanto, devido à estrutura fortemente não linear das equações, é difícil determinar uma condição precisa de estabilidade e uma análise das equações na forma linearizada é geralmente feita.

Para desenvolver uma condição de estabilidade em diferenças finitas considerou-se o caso newtoniano, recaindo nas equações de Navier-Stokes. Além disso, considera-se que o argumento p e todos os coeficientes das derivadas parciais são conhecidos nas equações, implicando que as equações para as velocidades (ep. (3.2) podem ser escritas na forma [14] [53]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) - u \frac{\partial \phi}{\partial x} - v \frac{\partial \phi}{\partial y} + f(t, x, y) \quad (4.12)$$

que é uma equação geral, onde ϕ representa as componentes u e v .

Agora, como para as equações governantes, a equação (4.12) é discretizada usando o esquema de diferenças finitas. A seguinte forma aproximada de (4.12) resulta

$$\frac{\phi_{ij}^{k+1} - \phi_{ij}^k}{\Delta t} = \frac{1}{Re} (D_{+x} D_{-x} + D_{+y} D_{-y}) \phi_{ij}^k - (u_{ij}^k D_{0x} + v_{ij}^k D_{0y}) \phi_{ij}^k + f(t_k, x_i, y_j) \quad (4.13)$$

ou, equivalentemente

$$\phi_{ij}^{k+1} = F \phi_{ij}^k + \Delta t f(t_k, x_i, y_j) \quad (4.14)$$

onde o operador F é dado por

$$F \phi_{ij}^k = \phi_{ij}^k - \Delta t (u_{ij}^k D_{0x} + v_{ij}^k D_{0y}) \phi_{ij}^k + \frac{\Delta t}{Re} (D_{+x} D_{-x} + D_{+y} D_{-y}) \phi_{ij}^k \quad (4.15)$$

A equação (4.15) pode ser escrita conforme

$$\begin{aligned} F \phi_{ij}^k &= \left(\frac{\Delta t}{Re \Delta y^2} + \frac{\Delta t v_{ij}^k}{2 \Delta y} \right) \phi_{i,j-1}^k + \left(\frac{\Delta t}{Re \Delta x^2} + \frac{\Delta t u_{ij}^k}{2 \Delta x} \right) \phi_{i-1,j}^k \\ &+ \left(\frac{\Delta t}{Re \Delta y^2} - \frac{\Delta t v_{ij}^k}{2 \Delta y} \right) \phi_{i,j+1}^k + \left(\frac{\Delta t}{Re \Delta x^2} - \frac{\Delta t u_{ij}^k}{2 \Delta x} \right) \phi_{i+1,j}^k \end{aligned}$$

$$+ \left[1 - \frac{2}{Re} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) \right] \phi_{ij}^k \quad (4.16)$$

Uma condição suficiente de estabilidade é que $\|F\| \leq 1$ [17]. Note agora que o somatório de todos os coeficientes de (4.16) é 1. Então se

$$\left| \frac{\Delta t v_{ij}^k}{2\Delta y} \right| \leq \frac{\Delta t}{Re\Delta y^2} \quad (4.17)$$

$$\left| \frac{\Delta t u_{ij}^k}{2\Delta x} \right| \leq \frac{\Delta t}{Re\Delta x^2} \quad (4.18)$$

$$\frac{2}{Re} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) \leq 1 \quad (4.19)$$

implica que

$$\min(\phi_{i,j-1}^k, \phi_{i-1,j}^k, \phi_{i+1,j}^k, \phi_{i,j+1}^k) \leq F\phi_{ij}^k \leq \max(\phi_{i,j-1}^k, \phi_{i-1,j}^k, \phi_{i+1,j}^k, \phi_{i,j+1}^k) \quad (4.20)$$

Logo, as inequações (4.17), (4.18) e (4.19) são suficientes para assegurar que, quando $f(t, x, y) = 0$, qualquer solução de (4.14) é limitada. Então, as condições suficientes de estabilidade para o método são dadas por essas desigualdades, ou equivalentemente por

$$|v_{ij}^k \Delta y| \leq \frac{2}{Re} \quad (4.21)$$

$$|u_{ij}^k \Delta x| \leq \frac{2}{Re} \quad (4.22)$$

$$\Delta t \leq \frac{Re\Delta x^2\Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \quad (4.23)$$

Essas condições nos informam que o número de Re tem influência relevante na determinação dos parâmetros passo de tempo e refino da malha. Tanto para baixos como para altos valores de Re tem-se problemas: para baixos valores de Re é preciso baixar o Δt e para altos valores necessita-se de malhas mais finas. Nesse estudo, trabalha-se com faixas intermediárias de Re .

É importante salientar que essa é uma análise simplificada do método, uma vez que se considera a pressão como conhecida, mas ela é função das velocidades. Além disso, a análise do esquema de Runge-Kutta simplificado não é feita, sendo considerado apenas um passo. As equações consideradas são as de Navier-Stokes,

quando na verdade utilizou-se várias equações constitutivas para a tensão. No entanto, essa análise é útil, pois fornece uma idéia razoavelmente boa dos parâmetros que devem ser usados nas simulações numéricas de fluxos não newtonianos que não se afastem muito do comportamento newtoniano.

A condição de convergência adotada é $\sup \frac{|u-u_0|}{|u_0|} < 10^{-4}$, sendo u a velocidade no tempo $t + \Delta t$ e u_0 a velocidade no tempo t . O valor do passo de tempo Δt utilizado ficou entre 10^{-3} e 10^{-4} , obtido com base na análise de convergência. Simulações para Δt nesta faixa fornecem os mesmos resultados, sendo que o tempo computacional aumenta à medida que o Δt diminui. Para Δt inferiores à 10^{-4} , o processo tornava-se extremamente custoso computacionalmente e para Δt maiores a 10^{-3} o método não convergia para a solução esperada, divergindo. Quando refinou-se a malha necessitou-se baixar o Δt para que o critério de estabilidade fosse satisfeito; procura-se trabalhar com o maior Δt possível na qual o código convirja à solução fisicamente consistente do problema.

Explica-se, na seqüência, como foi implementado o código computacional e mostra-se um fluxograma do mesmo.

4.5 Implementação do código computacional

A linguagem usada para a implementação do algoritmo foi o FORTRAN 90, por ser adequada para problemas numéricos com grande quantidade de cálculos. Os resultados são visualizados usando o software Visual 1.2, desenvolvido por Justo [22]. Na figura 4.6 apresenta-se um fluxograma do código computacional. Nele, mostra-se como o problema é resolvido, ressaltando que as rotinas foram implementadas pelo autor do trabalho.

Vários fatores devem ser observados para iniciar uma simulação numérica em dinâmica dos fluidos computacional: deve-se conhecer o problema físico (ou ter uma boa noção dele), gerar uma malha computacional adequada (refinada onde for preciso), usar um conjunto de equações adequado ao problema (analisar se é possível fazer simplificações ou se elas são pobres demais), conhecer um software

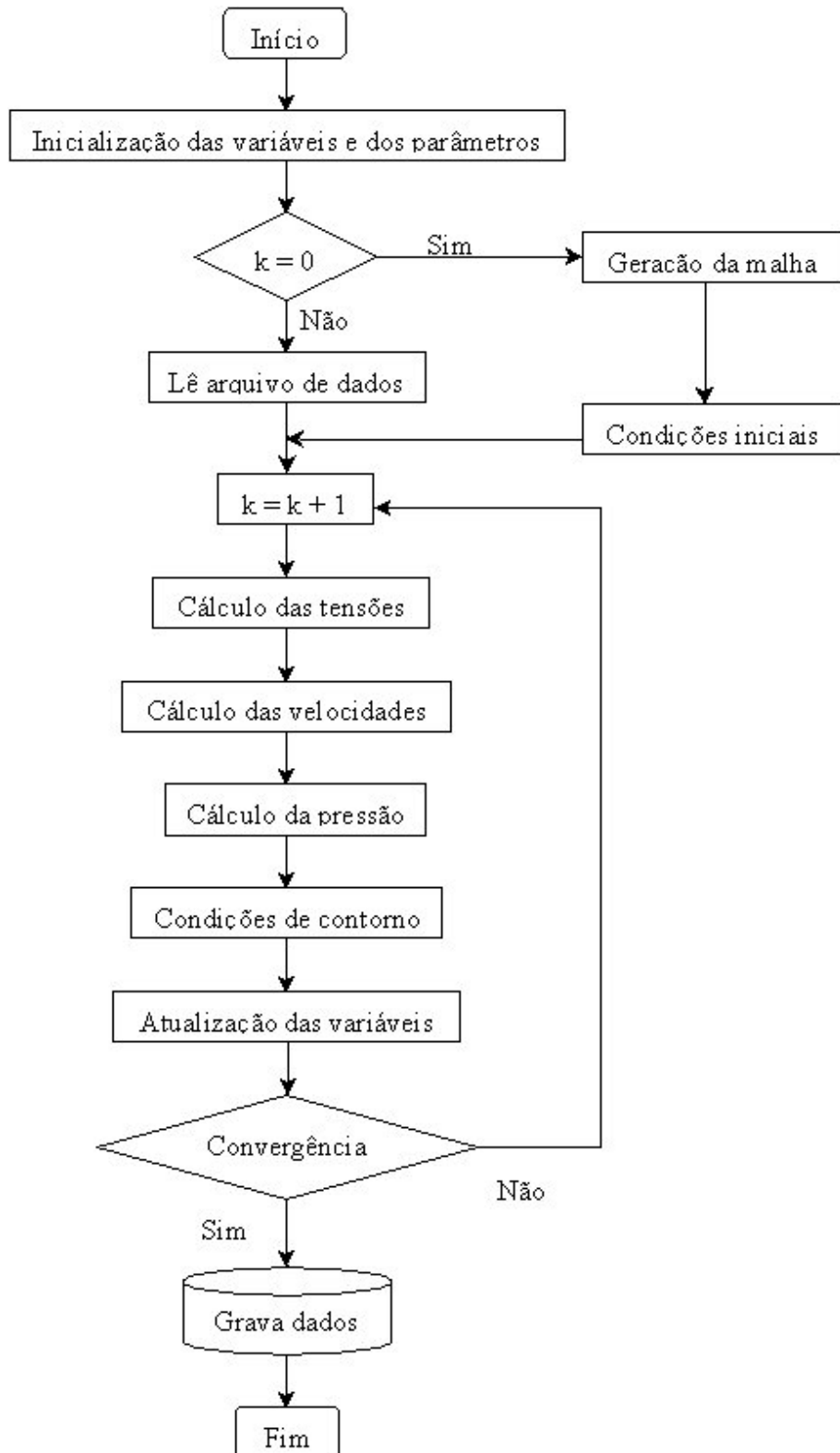


Figura 4.6: Fluxograma do código computacional

onde o programa será implementado e saber analisar os resultados obtidos (inferir em qual passo anterior ocorreu erro, caso os resultados não sejam satisfatórios).

Geralmente, quando se comete algum erro num dos processos acima (por exemplo a digitação de um índice), os resultados obtidos podem ser qualitativamente bons, representando de forma coerente os principais aspectos de um fluxo. No entanto, na comparação dos resultados, estes podem apresentar diferenças significativas quando comparados com soluções experimentais e/ou numéricas. Assim, é preciso ter muito cuidado na implementação de forma a minimizar erros.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, são mostrados os principais resultados obtidos nesse trabalho. No que segue, perfis de velocidade, linhas de corrente e bifurcações para fluidos newtonianos e não newtonianos são apresentadas mostrando comparações com resultados da literatura, quando possível, visando a validade dos resultados nos outros casos.

O problema da expansão brusca, como já foi ressaltado, é clássico em dinâmica de fluidos, sendo usado às vezes na calibração de códigos computacionais. Todavia, para fluidos não newtonianos, ele ainda não foi muito explorado. Escolheu-se raio de expansão 3 : 1 por haver uma série de trabalhos na literatura, para fluidos newtonianos, a serem comparados.

Os objetivos do trabalho são mostrar as diferenças em diversos aspectos entre o escoamento de um fluido newtoniano e fluidos não newtonianos para o problema. A maioria dos trabalhos em fluidos não newtonianos em expansões usa baixos números de Reynolds, onde a solução é única e simétrica. Tenta-se mostrar as diferenças que a mudança na característica do fluido com o escoamento propiciam no escoamento. Resultados para os modelos power-law, Bingham e Herschel-Bulkley são apresentados na seqüência.

5.1 Resultados do modelo power-law

Inicia-se pelo modelo power-law por ser o mais simples. Tanner [52], bem como Pnueli e Gutfinger [47], apresentam a dedução de uma solução analítica dos perfis de velocidade adimensionais para fluido de power-law num duto circular simples em função do parâmetro n e de y . A figura 5.1 mostra a comparação das soluções numéricas (símbolos) com as soluções analíticas (as linhas contínuas correspondentes) na saída do duto, onde o fluxo é plenamente desenvolvido para $Re = 40$, podendo-se considerar essa solução como a de um duto simples.

Embora o fluxo axissimétrico na expansão possa apresentar diferenças com relação ao bidimensional, os perfis do fluxo plenamente desenvolvido são praticamente os mesmos [30] e os resultados comparam adequadamente. A solução é dada por

$$u = \left(\frac{n}{n+1} \right) \left(\frac{p'}{2K} \right)^{1/n} H^{1+1/n} \left\{ 1 - \left(\frac{y}{H} \right)^{1+1/n} \right\} \quad (5.1)$$

Perfis de velocidade adimensionais $u(y)/\bar{u}$ para $n=0,5$, 1 e 1,5 são mostrados na figura 5.1, onde a velocidade média \bar{u} é dada por $\bar{u} = Q/\pi H^2$. A vazão é dada por

$$Q = \frac{\pi n}{3n+1} \left(\frac{p'}{2K} \right)^{1/n} H^{3+1/n} \quad (5.2)$$

sendo p' a magnitude da pressão por unidade de comprimento na direção axial e H metade da largura do duto.

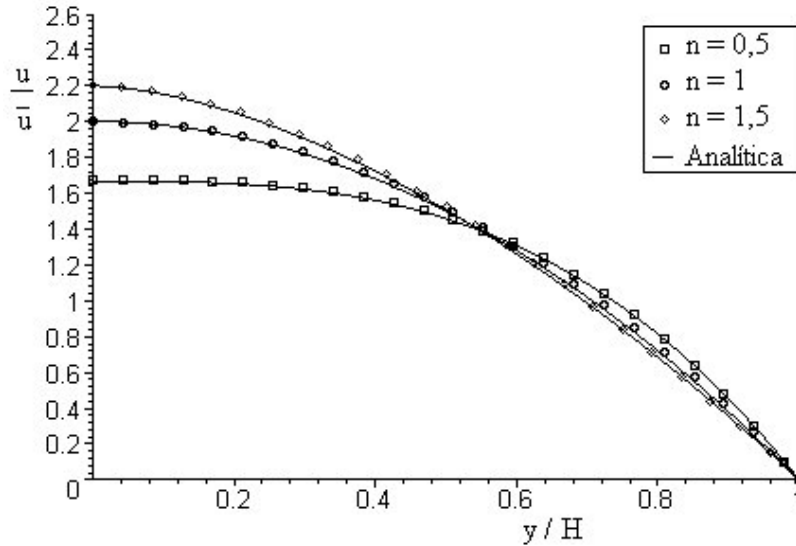


Figura 5.1: Comparação entre soluções numéricas e analíticas para fluidos de power-law num duto, $Re=40$

Devido à geometria ser simétrica, as condições de contorno serem simétricas, o problema em si ser simétrico, era de se esperar que a solução também fosse simétrica, como a mostrada na figura 5.2 para $Re = 130$. De fato, essa é uma solução do problema, mas instável, sendo que as duas soluções estáveis são assimétricas rebatidas; isso será explicado na seqüência.

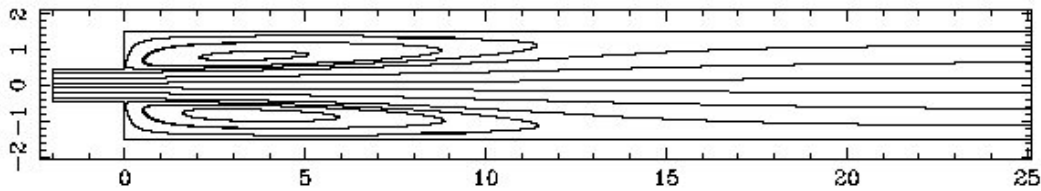


Figura 5.2: *Linhas de corrente para solução simétrica para $n=1$ e $Re=130$*

Na figura 5.3 apresenta-se as linhas de corrente para fluidos de power-law. As linhas de corrente, bem como os números de Reynolds críticos encontrados para $n=1$ (newtoniano), comparam adequadamente com resultados experimentais e numéricos apresentados por Fearn et al. [11], bem como os de outros autores [28]. Resultados mostram que o tamanho dos vórtices aumentam à medida que se aumenta o número de Reynolds. Para $Re = 40$, os vórtices a jusante à expansão são simétricos; já para $Re = 50$, uma assimetria é percebida.

Existe um Reynolds crítico, onde a solução passa a ser assimétrica. O número de Reynolds crítico (Re_c) obtido nesse trabalho ficou entre 44 e 45. Fearn et al. [11] encontraram $Re_c = 44$, enquanto Luo [28] achou $Re_c = 46,19$. Para $Re = 80$ percebe-se o aumento da assimetria; para $Re = 130$ nota-se a presença de uma terceira recirculação, que surge para Re entre 100 e 105. Para Re maiores que 140, Fearn et al. [11] constataram, experimentalmente, que a solução passa a ser tridimensional, tornando-se dependente do tempo para $Re \sim 151$. Nesse trabalho, percebeu-se essa dependência com o tempo ocorrendo para Re entre 145 e 150. Esses resultados indicam que o código computacional foi calibrado adequadamente.

As soluções apresentadas na figura 5.3 são estáveis, bem como as soluções rebatidas delas. No entanto, a solução original (simétrica) apresentada na figura 5.2 para $Re = 130$ é instável, uma vez que, quando se introduz uma perturbação, a estrutura se instabiliza convergindo posteriormente para a solução da figura 5.3 ou a sua forma refletida. Se um código estiver adequadamente implementado, as condições iniciais e de contorno forem simétricas e não ocorrerem erros de ordem numérica, a solução para $Re = 130$ convergirá à apresentada na figura 5.2.

Para obter soluções assimétricas, algum tipo de perturbação facilita a

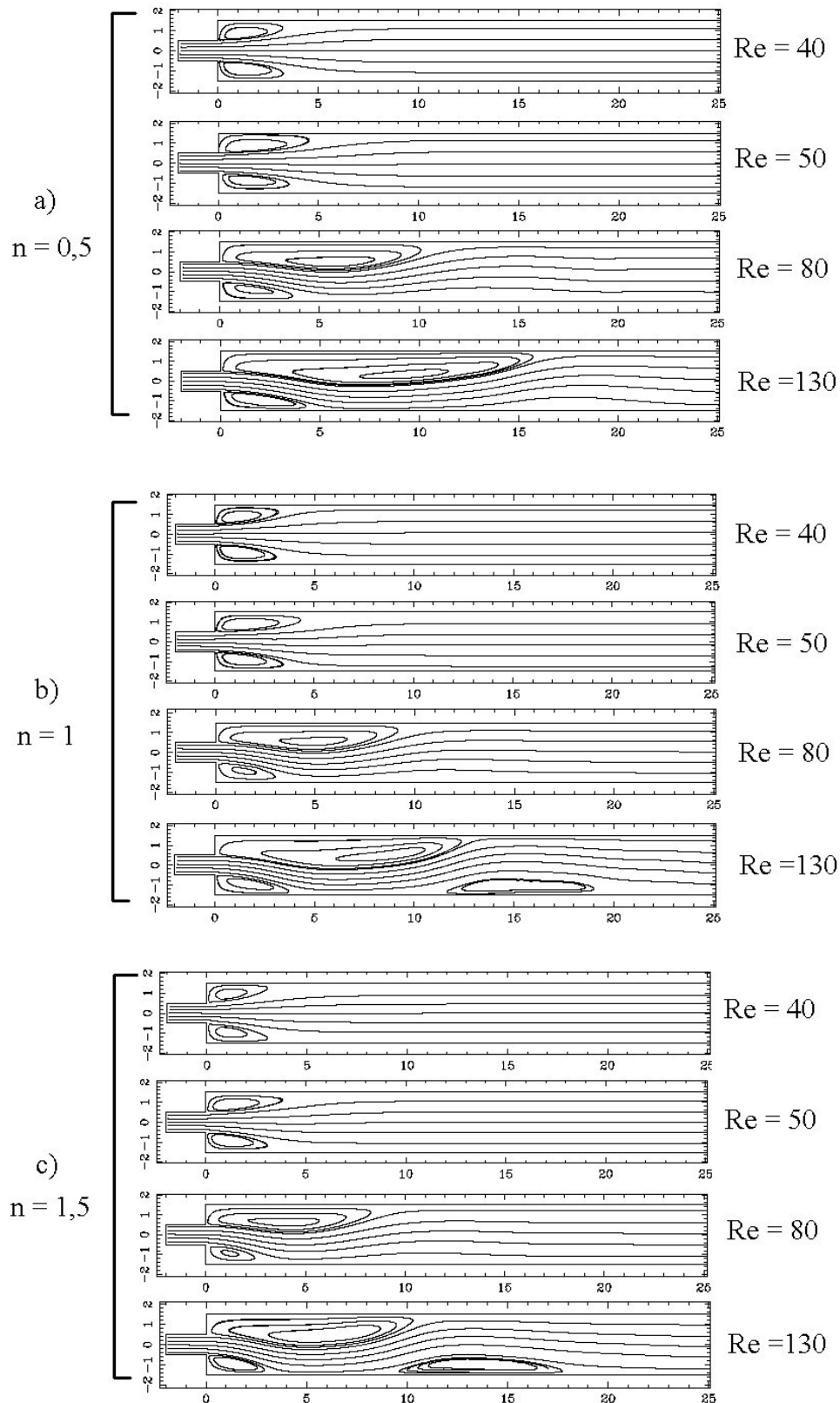


Figura 5.3: Comparação das linhas de corrente para a) $n=0,5$, b) $n=1$ e c) $n=1,5$ para $Re = 40, 50, 80$ e 130

obtenção da solução numérica. A literatura apresenta várias maneiras de chegar à solução assimétrica [34]: condição inicial não simétrica, malha inicialmente não simétrica e perturbação da solução simétrica. Esta última foi escolhida e implementada da seguinte forma: a partir da solução simétrica escolhe-se um ponto estrategicamente localizado (numa das recirculações) e perturba-se a solução nesse ponto por algumas iterações até que o fluxo comece a se instabilizar. Nesse momento, os vórtices simétricos se quebram, gerando instabilidades, necessitando baixar o Δt . Com a formação de vórtices menores, a escala temporal deve se adequar à espacial.

O processo de estabilização à solução assimétrica é lento, necessitando grande quantidade de iterações (em torno de 24 horas de simulação). Desta forma, para a obtenção dos resultados para os diferentes números de Reynolds e diferentes tipos de fluidos, usou-se uma solução assimétrica anterior como condição inicial, proporcionando a obtenção de resultados com em torno de 3 a 4 horas de simulação num processador *Origin 200 - Silicon Graphics*.

A figura 5.3 também apresenta a mesma seqüência de Reynolds para os expoentes de power-law $n = 0,5$ e $n = 1,5$. Pode-se observar semelhança na configuração dos resultados. A assimetria, para esses casos, ocorre praticamente para o mesmo Re_c do caso newtoniano, que é em torno de $Re_c = 45$. Entretanto, a formação da terceira recirculação é diferente. Para $n = 1,5$, ela ocorre antes, entre 85 e 90, vindo a solução a se tornar dependente do tempo para Reynolds entre 130 e 135. Já para $n = 0,5$, a terceira bifurcação não chegou a ocorrer, sendo que a solução tornou-se dependente do tempo para Re entre 130 e 135. Todavia, para um $n < 1$, mas próximo de 1, ocorreria essa terceira recirculação, mas para um Re maior que para o caso newtoniano. Na tabela 5.1 resume-se esses Reynolds críticos.

Tabela 5.1: *Comparação entre os Reynolds críticos*

n	Re_c	3ª recirculação	Re_d
0,5	44-45	-	130-135
1	44-45	100-105	145-150
1,5	44-45	85-90	130-135

A figura 5.4 mostra uma comparação, usando linhas de corrente, do

fluxo na expansão para $Re = 40$ e $n=0,5, 1$ e $1,5$. Como o fluxo é simétrico, somente a parte superior é apresentada. As recirculações apresentam diferenças no formato: para $n=0,5$ o vórtice é mais arredondado do que para $n=1$ e para $n=1,5$ ele é mais fino, como era esperado pela característica do modelo e dos fluxos não newtonianos que ele aproxima. Essa solução mostra uma característica que será apresentada em comparações que se seguirão: o comportamento newtoniano está entre o pseudo-plástico e o dilatante.

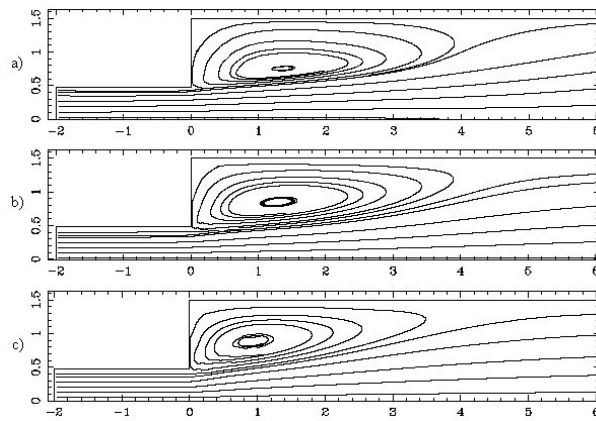


Figura 5.4: *Comparação das linhas de corrente para $Re = 40$: a) $n = 0,5$, b) $n = 1$ e c) $n = 1,5$*

Na figura 5.5 apresenta-se o esquema para a posição dos vórtices ao longo das paredes, considerando que o jato desloca-se inicialmente em direção à parede inferior.

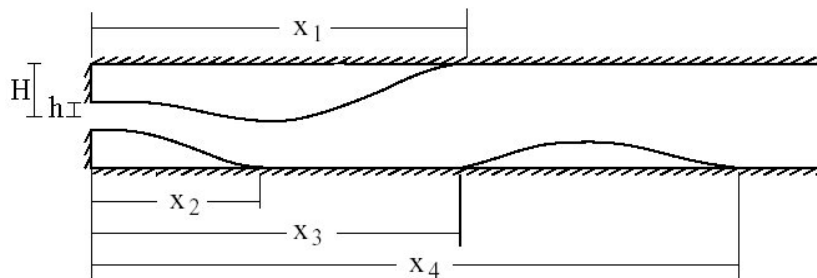


Figura 5.5: *Esquema da posição dos vórtices, $r_e = 3$*

A partir dessa configuração gerou-se a figura 5.6, onde apresenta-se as

bifurcações para fluidos de power-law para $n=0,5$, 1 e 1,5. O gráfico mostra o crescimento dos vórtices em função do parâmetro adimensional Re . Percebe-se, nesta figura, onde ocorrem os Reynolds críticos citados anteriormente. A bifurcação, para o caso newtoniano, compara adequadamente com a indicada por Battaglia et al. [5].

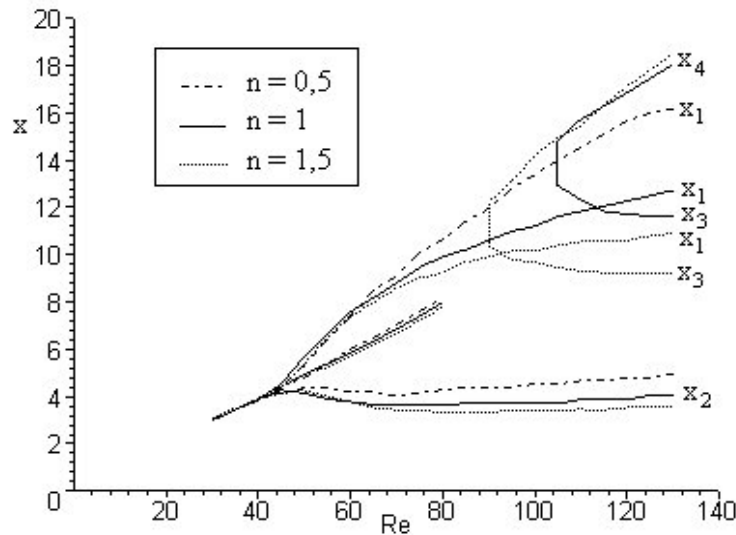


Figura 5.6: *Bifurcações para diferentes valores de n , $r_e = 3$*

Apresenta-se, na figura 5.7, os perfis de velocidade em diferentes posições do duto para o caso newtoniano e $Re = 80$. Perfis são mostrados para $x=0$, 2, 5 e 20. Para $x=0$, que é o ponto onde há a expansão, tem-se a maior velocidade, sendo que na parede ela é nula. Para $x=2$, percebe-se que há duas regiões de fluxo negativo, representando os dois vórtices. Já para $x=5$, há apenas uma região de fluxo negativo mostrando claramente a assimetria e, em $x=20$, o fluxo está plenamente desenvolvido, tendo um perfil parabólico [33].

Na figura 5.8 compara-se os perfis em $x=2$ e 5 para $n=0,5$, 1 e 1,5 usando $Re = 80$. Esses perfis mostram as diferenças que ocorrem para os três casos. Percebe-se que as características gerais dos perfis se mantêm para todos os casos. No entanto, deve-se ressaltar que os perfis para $n = 1$ estão entre os perfis encontrados para $n = 0,5$ e $n = 1,5$.

Na figura 5.9 apresenta-se as isolinhas para as tensões normais (τ_{xx} e τ_{yy}) e de cisalhamento (τ_{xy}) para $Re=40$. Além disso, mostra-se a viscosidade

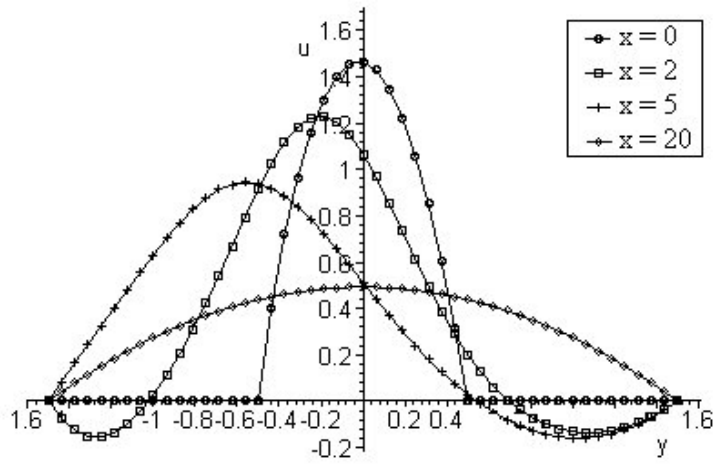


Figura 5.7: Perfis de velocidade para $n = 1$, $Re = 80$

efetiva μ para $n=0,5$ e $1,5$ e linhas de pressão para $n=1$. Neste caso, a viscosidade é constante igual a μ_0 . Esses resultados indicam que a maior magnitude da tensão ocorre nos cantos. Para $n=0,5$ a magnitude é menor; no entanto, as linhas estão mais espalhadas pelo domínio. Para $n=1,5$, ela é maior, mas as linhas estão mais concentradas; o caso $n=1$ está entre os outros dois. Percebe-se, a montante à expansão, pequenas oscilações que ocorrem nas tensões normais e aparecem prin-

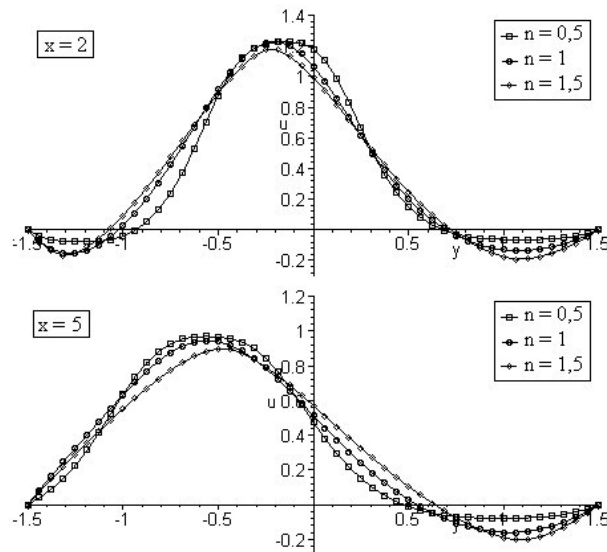


Figura 5.8: Perfis de velocidade em $x=2$ e $x=5$, $Re=80$

principalmente para $n=0,5$ e $n=1,5$, onde o perfil da condição de contorno é diferente do perfil do fluxo. Essas podem ser minimizadas usando o perfil de velocidades no contorno igual ao do fluxo. As soluções para a viscosidade efetiva indicam que as maiores variações ocorrem na região dos vórtices. A solução da pressão mostra que os maiores gradientes estão localizados nas quinas, embora a variação total dessa ao longo do duto seja pequena. Considerou-se a pressão de referência na saída nula.

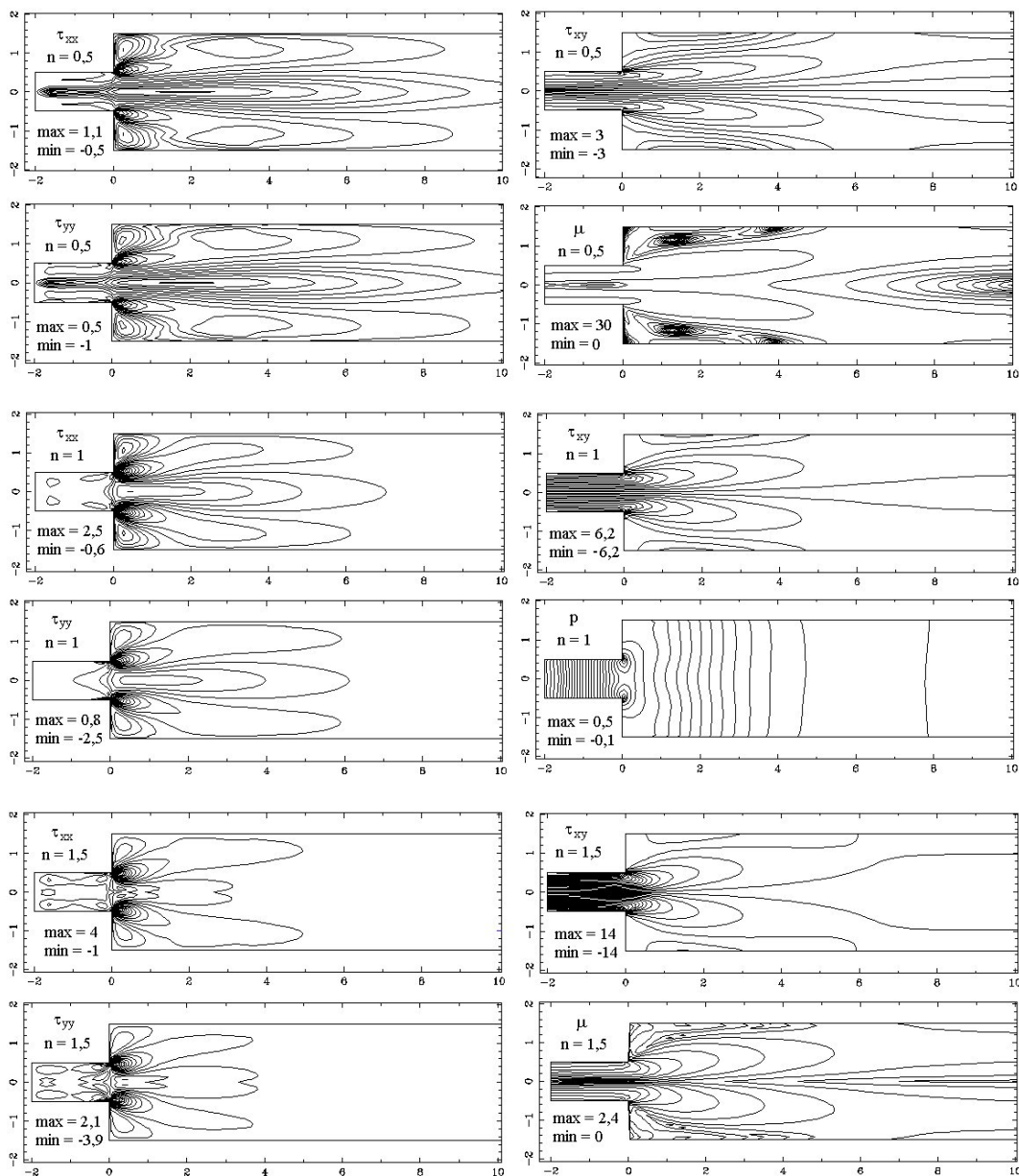


Figura 5.9: Tensões e viscosidade para $n=0,5$ e $1,5$ e pressão para $n=1$; $Re=40$

Na figura 5.10 são apresentadas as soluções para as tensões e viscosidade efetiva para $Re = 80$ e $n = 0,5$. Elas são assimétricas, estando distribuídas de acordo com o campo de velocidade. Um fator interessante é que os valores máximos e mínimos são bem parecidos com os obtidos para $Re = 40$. Esse fenômeno ocorre para toda a faixa de Re laminar até 140, ou seja, os valores máximos e mínimos das tensões, mantendo n fixo, são parecidos variando o Re nessa faixa. As linhas de viscosidade indicam que as maiores variações, bem como os valores máximos, ocorrem na região dos vórtices e ao longo do duto. Como havia sido comentado, para $n < 1$, a viscosidade decresce com o aumento da deformação, contudo é alta para baixas deformações.

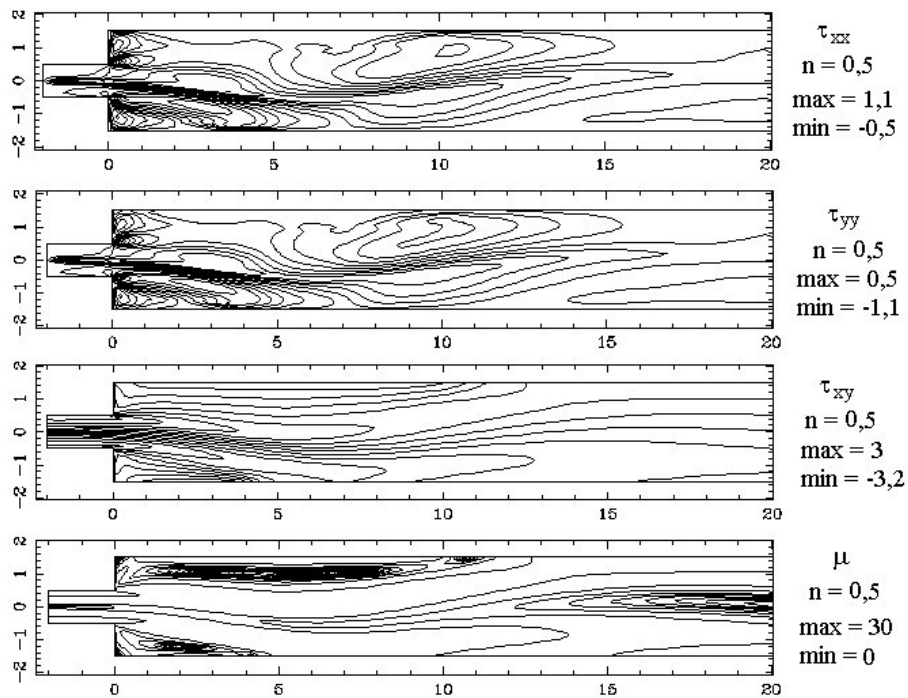


Figura 5.10: *Tensões e viscosidade para $n=0,5$ e $Re=80$*

Na figura 5.11 mostra-se uma solução transiente para $Re = 150$, $n = 0,5$ e $t = 30$. Para esses parâmetros a solução deixa de ser estável, como foi mencionado, ocorrendo desprendimento de vórtices alternados que se dissipam ao longo do canal. Como condição inicial, utilizou-se a solução permanente para $Re = 130$. Essa figura mostra outra característica desse interessante problema que

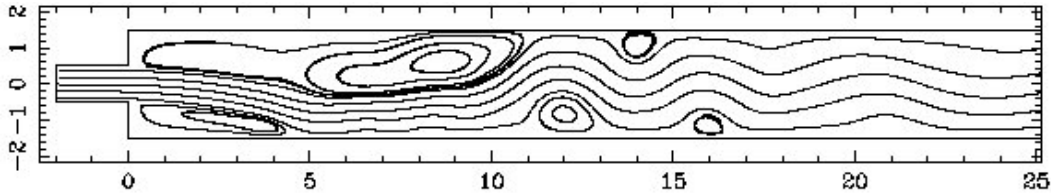


Figura 5.11: *Solução transiente para $Re=150$, $n=0,5$ e $t = 30$*

é a presença de solução que varia com o tempo, mas que ainda é previsível [31]. Aumentando mais o número de Reynolds, a solução passa a ser turbulenta, mas essa análise não é objetivo desse trabalho.

5.2 Resultados do modelo de Bingham

Os resultados obtidos para o modelo de Bingham são apresentados na seqüência. Esse modelo leva em consideração a característica de que alguns fluidos necessitam que uma tensão inicial seja superada para o escoamento iniciar. Abaixo desse valor o fluido se comporta como sólido. Os fluidos desse tipo são chamados plásticos de Bingham. Os perfis de velocidade na linha vertical da saída do duto para esses casos são comparados na figura 5.12 com a solução analítica da literatura [47] para o fluxo entre placas paralelas. Os símbolos representam as soluções numéricas, enquanto que as linhas contínuas representam as soluções analíticas correspondentes. Devido à simetria da solução, apenas um lado é mostrado. A solução analítica é indicada a seguir:

$$u(y) = \frac{Bi}{2y_1}(H - y_1)^2 \quad 0 < y \leq y_1 \quad (5.3)$$

$$u(y) = \frac{Bi}{2y_1}[(H - y_1)^2 - (y - y_1)^2] \quad y_1 < y \leq H \quad (5.4)$$

Percebe-se, nos perfis de velocidade analíticos, duas regiões distintas. No centro, a solução é constante, na qual o fluido se desloca como se fosse um bloco sólido. À medida que Bi é aumentado, essa região aumenta; para Bingham grandes, ela ocupa praticamente toda a região, como no caso de massas; próximo à parede a

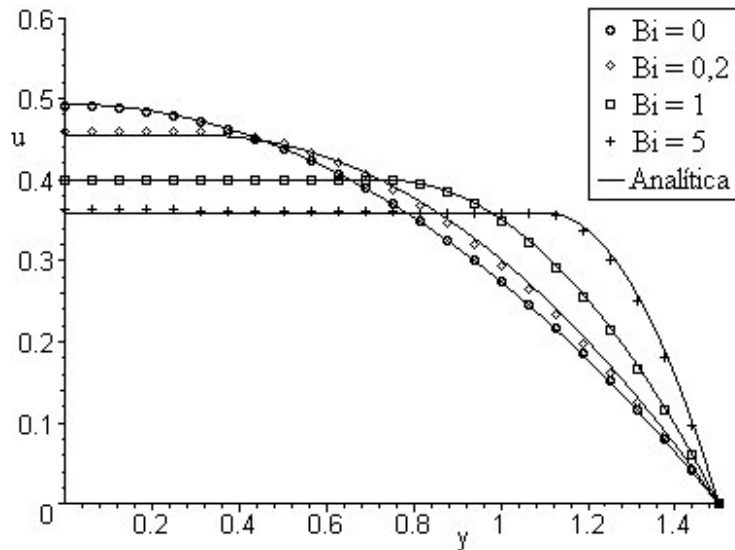


Figura 5.12: *Perfis de velocidade na saída do duto: $Re=130$, $n=1$, $Bi=0; 0,2; 1$ e 5*

solução é parabólica. Repare que quando $Bi = 0$ a solução para o caso newtoniano é obtida. Essas soluções indicam que o modelo de Bingham foi adequadamente implementado, podendo representar razoavelmente bem o comportamento plástico.

Todos os resultados para o modelo de Bingham foram obtidos usando o fator de crescimento da tensão $m = 1000$, mesmo valor usado por Alexandrou et al. [1]; testes com outros valores não foram realizados, embora fosse interessante

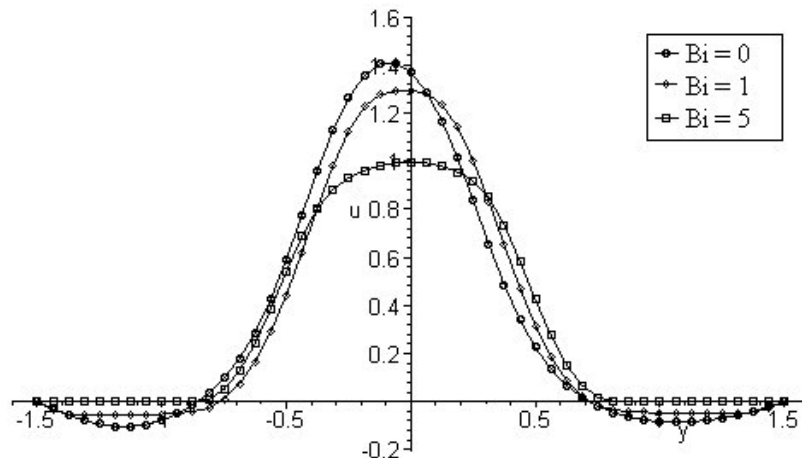


Figura 5.13: *Perfis de velocidade na posição $x=1$ para $n=1$, $Bi=0; 1; 5$ e $Re=130$*

observar a influência desse fator na solução. Na figura 5.13 apresenta-se a comparação, para diferentes Bi , dos perfis de velocidade na posição $x=1$. Percebe-se que, à medida que o Bi é aumentado, a velocidade na recirculação diminui; para $Bi = 5$ pode-se considerar que não há recirculação. Pode-se dizer que nessa região o fluido está parado, comportando-se como sólido. Além disso, para esse caso, o perfil é simétrico, enquanto que para os outros dois não era.

Na figura 5.14 mostra-se, através de linhas de corrente, o efeito do número de Bingham na formação dos vórtices. À medida que Bi é aumentado, o tamanho dos vórtices diminui, para um mesmo número de Re , que no caso é 130. Essa característica é similar ao efeito viscoelástico, como estabelecido experimentalmente por Pak et al. [41], na qual altos valores de viscoelasticidade resultam em regiões de fluxo separado menores para expansões bruscas em regime laminar. Esse efeito foi simulado numericamente por Vradis e Otugen [57] que, variando o Re en-

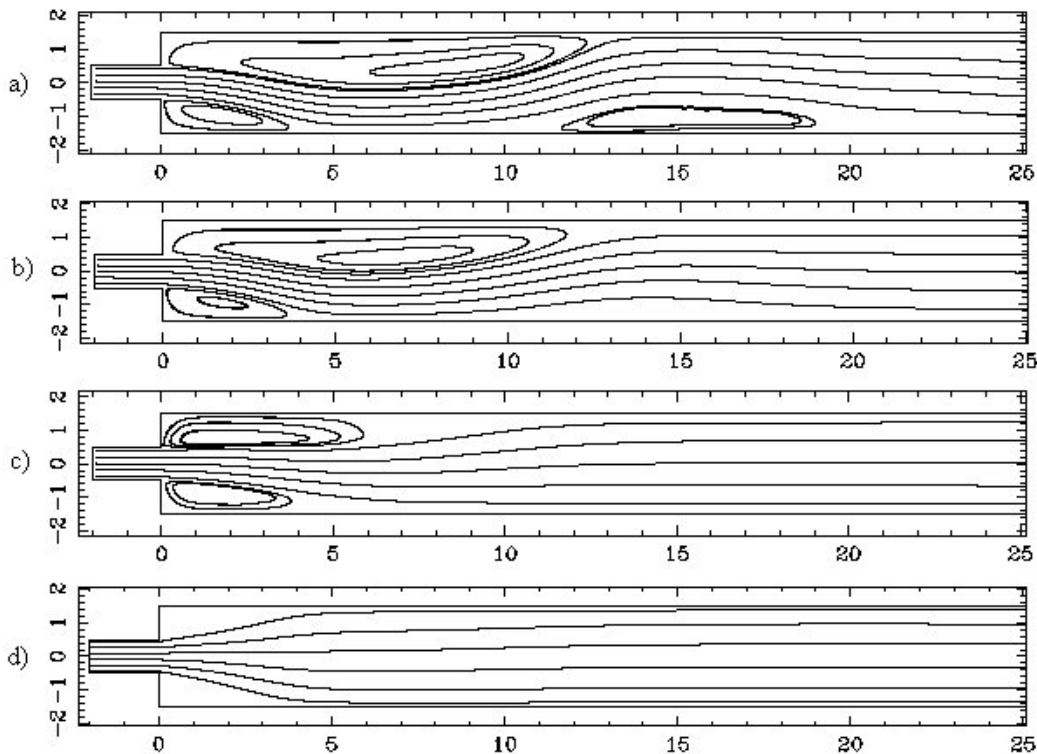


Figura 5.14: *Linhas de corrente para $Re=130$ e diferentes números de Bingham: a) $Bi=0$, b) $Bi=0,2$, c) $Bi=1$ e d) $Bi=5$*

tre 1 e 50 para $r_e = 2$ e usando o modelo de Bingham, observaram uma diminuição significativa no tamanho dos vórtices com o aumento de Bi .

A figura 5.15 apresenta uma comparação para diferentes números de Re , mantendo $n=1$ e $Bi=1$. O que se pode perceber é que a estrutura da solução é parecida com a do fluxo newtoniano, salientando que os perfis de velocidade são diferentes. No entanto, essas soluções ocorrem para uma faixa de Re maior. Enquanto que para $Re=100$ a solução é simétrica, para $Re=300$ a solução é permanente, tornando-se dependente do tempo para Re entre 300 e 305. Isto indica que o Re_c aumenta com o crescimento do número de Bingham; para esse caso o Re_c ficou entre 110 e 115. Para $Re=100$, o fluxo permanece praticamente parado na região da recirculação; isto ocorre também para Re inferiores. Esses resultados confirmam a forte influência do adimensional Bingham em fluxos em expansões bruscas, como havia sido destacado por Vradis e Otugen [57].

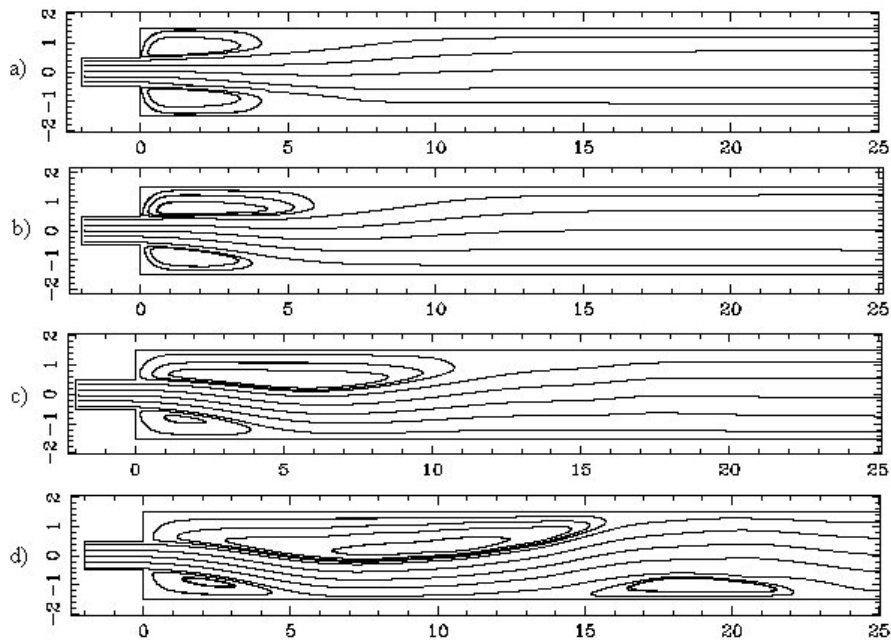


Figura 5.15: *Linhas de corrente para $n=1$ e $Bi=1$; a) $Re=100$, b) $Re=130$, c) $Re=180$ e d) $Re=300$*

A tabela 5.2 resume os valores de Reynolds críticos para $n=1$ e $Bi=0, 0,5$ e 1 . Essas soluções parecem indicar que existe uma dependência linear entre Bi

e Re , ou seja, à medida que se aumenta o Bi , os Re_c aumentam linearmente.

Tabela 5.2: *Comparação para os Re críticos para $n = 1$ variando Bi*

Bi	Re_c	3ª recirculação	Re_d
0	44-45	100-105	145-150
0,5	75-80	190-195	225-230
1	110-115	280-285	300-305

As bifurcações correspondentes, ao que foi resumido na tabela 5.2, são mostradas na figura 5.16 para Re variando de 5 em 5. Os resultados para os diferentes valores de Bi são semelhantes, sendo que ocorrem para uma faixa diferente de Re . Repare que na segunda bifurcação ocorre um pequeno salto nos três casos. Para que isso não ocorresse, seria necessário simular para Re mais próximos um do outro nessa região; além disso, construir uma malha mais fina próximo à parede.

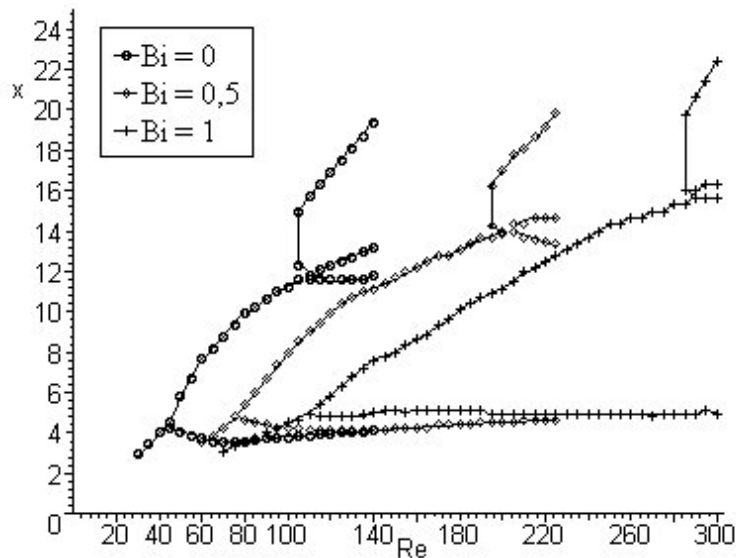


Figura 5.16: *Bifurcações para $n=1$ variando Bi*

Comparações dos perfis de velocidade ao longo do duto são apresentadas na figura 5.17 para $n=1$, $Bi=1$ e $Re=180$, com x variando entre 0 e 20. Percebe-se que os perfis são mais achatados em comparação aos obtidos no caso newtoniano, principalmente na região da recirculação, onde a velocidade é baixa.

Na figura 5.18 mostram-se as linhas de viscosidade para diferentes valores de Bi , para $Re = 130$ e $n = 1$. Como pode-se perceber, a viscosidade efetiva

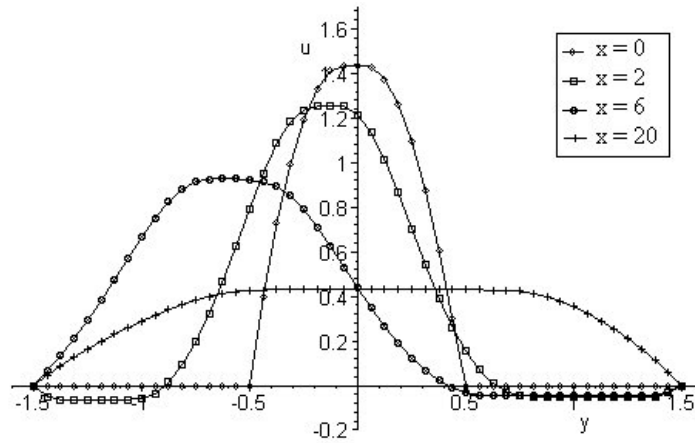


Figura 5.17: *Perfis de velocidade para $n=1$, $Bi=1$, $Re=180$ e x entre 0 e 20*

crece significativamente com o aumento de Bi , sendo que a região em que o fluido se comporta como sólido aumenta também. Esse fenômeno acontece onde as linhas estão mais próximas; note que para $Bi = 5$, essa região ocupa quase todo o duto. Esses resultados concordam qualitativamente com os apresentados por Alexandrou et al. [1], todavia os dele são para Re inferiores aos aqui utilizados, sendo que há falta de resultados para essa faixa na literatura pesquisada.

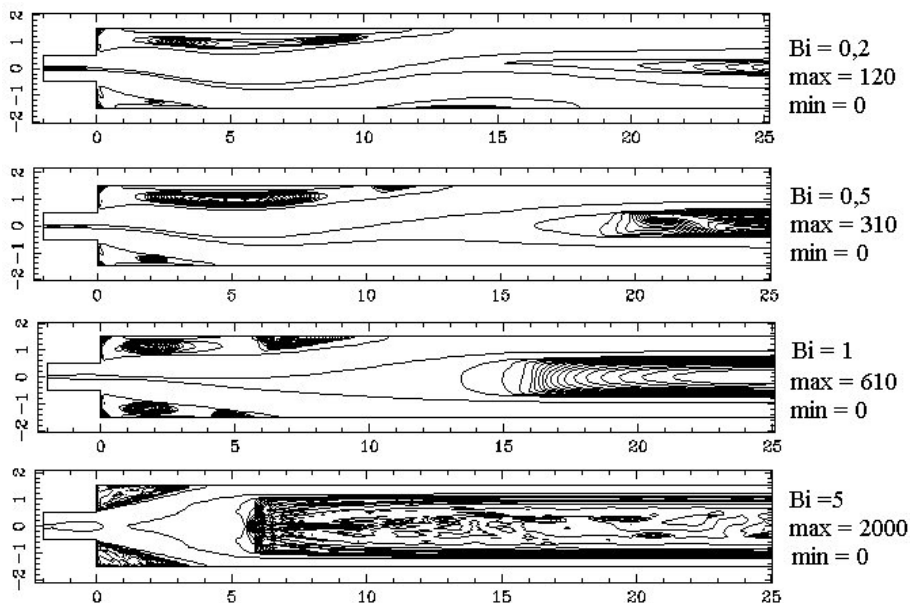


Figura 5.18: *Viscosidade efetiva para $Re=130$ e $n=1$*

5.3 Resultados do Modelo de Herschel-Bulkley

Alguns resultados para o modelo Herschel-Bulkley, que é uma generalização do modelo de Bingham considerando a influência do expoente de power-law n , são apresentados. Na figura 5.19 considera-se $Bi=1$, a) $Re=130$ e b) $Re=180$, para $n=0,5$, 1 e 1,5. Percebe-se pouca variação no tamanho e nas características dos vórtices formados. Para $Re=180$ nota-se que os vórtices são maiores para $n=0,5$ do que para $n=1,5$, como ocorria para o modelo power-law. Estes resultados indicam que o adimensional Bingham proporciona diferenças nas soluções mais significativas do que o adimensional n , sendo que os modelos de Bingham e Herschel-Bulkley forneceram resultados parecidos. Devido a isso, o modelo de Bingham é muitas vezes

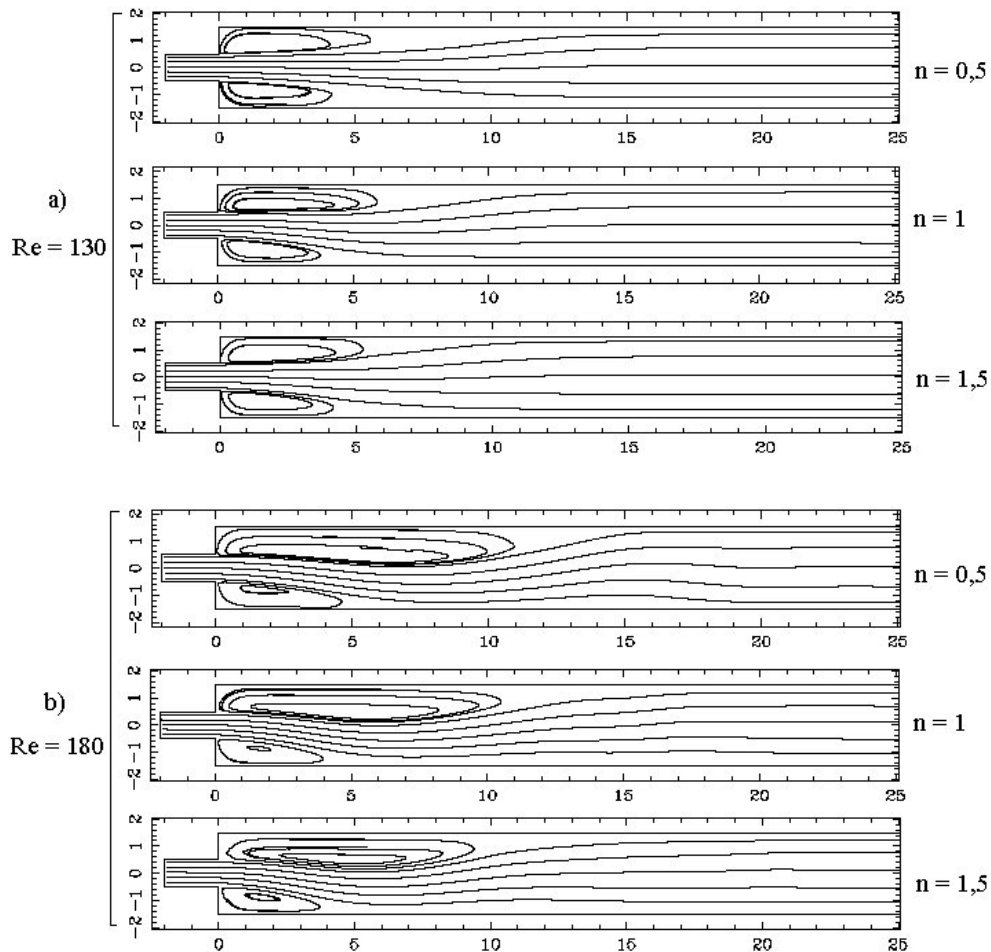


Figura 5.19: *Linhas de corrente para $Bi=1$ e $Re=180$: $n=0,5$, 1, e 1,5*

utilizado como uma aproximação da solução de problemas de fluxo na qual o fluido apresenta uma tensão que precisa ser excedida para o fluxo iniciar.

Os perfis de velocidade para $Re = 180$ e $Bi = 1$ nas posições $x = 2, 7$ e 30 são comparados para $n = 0,5$ e $n = 1,5$ na figura 5.20. O caso $n = 1$ foi omitido uma vez que em todas as situações, os resultados ficaram entre os outros dois, o que dificultaria a identificação das linhas nas figuras.

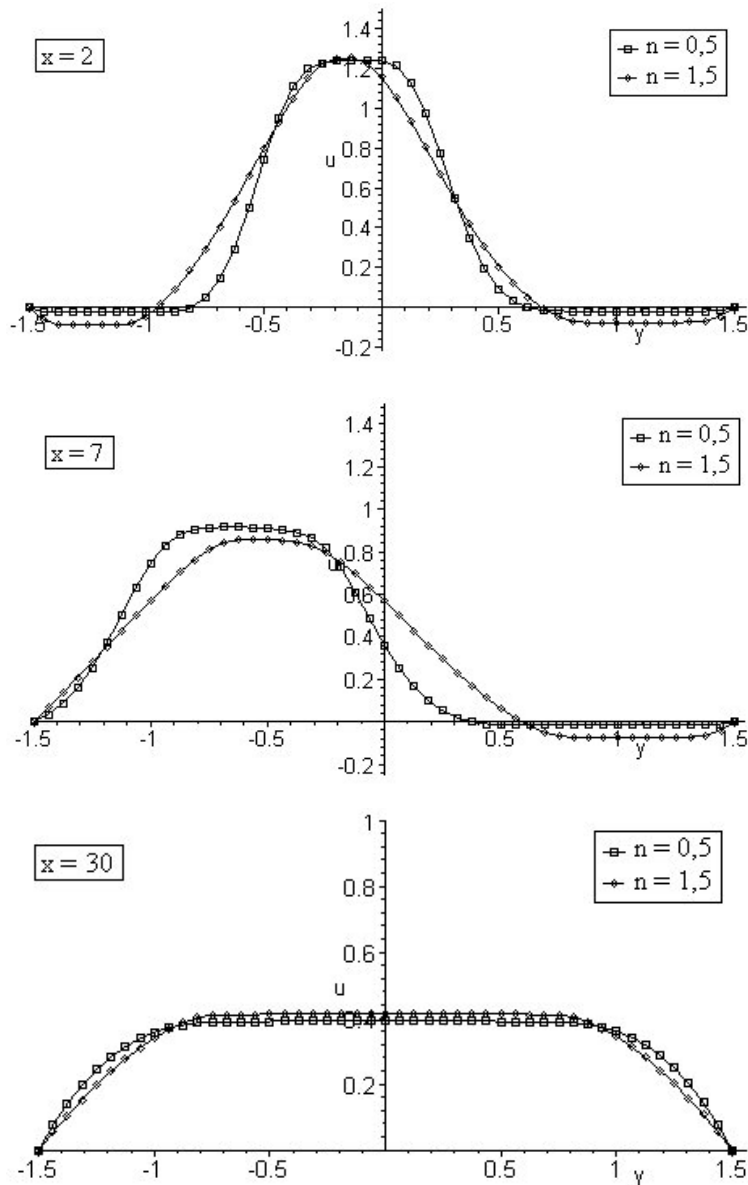


Figura 5.20: Perfis de velocidade para $Re=180$: $Bi=1$ e $x=2, 7$ e 30 para $n=0,5$ e $1,5$

Nota-se nesses perfis a assimetria da solução. Embora o tamanho dos vórtices seja muito parecido nos três casos, os perfis de velocidade apresentam diferenças significativas, principalmente na posição $x = 7$, onde a largura do vórtice é maior. Na saída, os perfis são muito parecidos, sendo que a influência de Bi é a característica dominante. Um fator a ser ressaltado é que para $n = 0,5$ a velocidade na recirculação é praticamente nula (da ordem de 10^{-3}).

Mostrados os resultados, chega-se finalmente às conclusões e perspectivas para a seqüência do trabalho.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O objetivo desse trabalho era analisar o comportamento e as características do fluxo incompressível não newtoniano através de um canal reto com expansão brusca. Implementou-se as equações levando em conta os modelos que seriam aplicados. A calibração do código computacional foi realizada para o caso particular em que o escoamento é newtoniano, pois havia uma série de resultados experimentais e numéricos na literatura. Além disso, comparou-se os perfis de velocidade na saída do duto com soluções analíticas para um duto simples no caso dos modelos power-law e Bingham. Em todas as comparações realizadas, o código representou de forma adequada as soluções.

Os modelos empregados para prever comportamentos não newtonianos foram: power-law, Bingham e Herschel-Bulkley da família dos fluidos newtonianos generalizados. Eles foram usados para prever comportamentos pseudoplásticos e dilatantes, plásticos e viscoplásticos, respectivamente, apresentando resultados coerentes com a característica do fluido estudado segundo a literatura. Todavia, nos casos mais complexos, não foram encontrados resultados para fazer uma comparação específica. Desta forma, alguns dos resultados apresentados são novos.

O trabalho desenvolvido forneceu resultados relevantes para o fluxo de fluidos não newtonianos em expansões. As simulações mostraram que para fluxo laminar, nos casos estudados, o tamanho dos vórtices cresce com o aumento do número de Reynolds, característica que já havia sido mostrada para o caso newtoniano. A existência de um valor de Reynolds crítico, na qual as soluções estáveis apresentam vórtices assimétricos rebatidos, comparou com a literatura para o caso newtoniano e mostrou variar pouco para o modelo power-law. No entanto, para os outros modelos implementados, o valor do Reynolds crítico é maior que no caso newtoniano, dependendo do adimensional Bingham. Quanto maior o valor de Bingham, maior o valor do Reynolds crítico. O aumento do número de Bingham diminui o tamanho dos vórtices.

O método empregado é de fácil implementação e mostrou-se eficiente

para os problemas estudados, no sentido que passou pelos testes de calibração e forneceu resultados coerentes com a literatura para os casos simulados. Uma das dificuldades na obtenção desses foi o custo computacional. Geralmente, algumas horas eram necessárias para obter uma solução convergida. Isso se deve ao método utilizado e ao fato da malha ser fina. Contudo, era necessário uma malha fina, pois, algumas vezes, estava-se interessado em soluções que requeriam precisão, tal como o ponto em que ocorriam as bifurcações. Outra dificuldade foi a aplicação das condições de contorno, principalmente para as tensões.

Os pontos onde ocorrem as bifurcações compararam adequadamente com os apresentados na literatura para o caso newtoniano. Para o caso do modelo power-law a primeira bifurcação ocorre basicamente no mesmo Reynolds crítico. No entanto, as simulações mostraram que a segunda bifurcação ocorre para um valor de Reynolds menor no caso dilatante e maior no caso pseudoplástico, dependendo do valor de n .

Um fator a ser ressaltado é que existe uma gama de trabalhos envolvendo expansões bruscas para fluidos newtonianos. No entanto, para o caso não newtoniano, pouco ainda foi feito e geralmente para baixos valores de Reynolds. Contudo, os trabalhos da literatura foram o alicerce para o desenvolvimento desse trabalho.

O projeto apresentado foi encorajador, sendo que muito ainda necessita ser feito para o completo entendimento desses complexos fenômenos. O aprendizado e a experiência obtidos nesse trabalho serão úteis na análise de diferentes situações envolvendo fluidos newtonianos e não newtonianos empregando essas ou outras técnicas na obtenção dos resultados.

Uma das perspectivas para a continuação desse trabalho é a aplicação da técnica multigrid, trabalhando-se com um mínimo de três malhas. Com essa técnica, acredita-se obter as mesmas soluções que as apresentadas com tempo computacional uma ordem de grandeza menor. Ela permite, inclusive, que a malha seja mais fina que a utilizada nesse trabalho, uma vez que apenas algumas iterações são necessárias na malha fina quando o processo já convergiu nas malhas mais grossas.

Além disso, essa técnica minimiza as oscilações causadas pelas aproximações de forma rápida. A aplicação de técnicas que melhorem a velocidade da convergência é essencial, uma vez que em problemas elípticos desse tipo o custo computacional é elevado.

A aplicação de outros modelos para fluidos não newtonianos buscando obter diferentes comportamentos em expansões bruscas constitui outro objetivo da pesquisa. Vários desses modelos foram citados nesse trabalho, principalmente para estudar a viscoelasticidade, característica que não foi simulada nesse trabalho. A comparação dos resultados entre os modelos e com soluções experimentais e numéricas da literatura é também relevante. Analisar a influência da variação do raio de expansão na formação dos vórtices, comparar as diferenças entre uma solução axissimétrica e uma bidimensional para dutos com mesmo raio de expansão e com diferentes tipos de fluido, também constituem projetos de pesquisa.

O estudo de expansões na forma tridimensional é outro problema interessante. Ele pode ser feito em no mínimo três maneiras:

- a) com uma geometria axissimétrica;
- b) com uma geometria quadrada ou retangular;
- c) supondo que o eixo z tem dimensão infinita, com a inclusão de mais malhas idênticas a utilizada no trabalho nessa direção. Este problema, para fluxo permanente, é como se fosse bidimensional, sendo que a solução em todas as malhas é igual. Todavia, para a solução transiente as malhas interagem entre si, sendo a solução tridimensional.

Esse estudo possibilitará avanços na simulação de problemas transientes em expansões e, quem sabe, de problemas turbulentos, uma vez que ainda pouco foi feito nessa direção.

Bibliografia

- [1] ALEXANDROU, A. N., MCGILVRVREAY, T. M., AND BURGOS, G. Steady Herschel-Bulkley fluid flow in three-dimensional expansions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 100* (2001), pp. 77–96.
- [2] ANDERSON, D. A., TANNEHIL, J. C., AND PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. McGraw-Hill, New York, 1984.
- [3] BALMFORTH, N. J., ET AL. Visco-plastic models of isothermal lava domes. *J. Fluid Mech. vol. 403* (2000), pp. 37–65.
- [4] BARAKOS, G., AND MITSOULIS, E. Non-isothermal viscoelastic simulations of extrusion through dies and prediction of the bending phenomenon. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 62* (1996), pp. 55–79.
- [5] BATTAGLIA, F., TAVENER, S. J., KULKARNI, A. K., AND MERKLE, C. L. Bifurcation of low Reynolds number flows in symmetric channels. *AIAA Journal vol. 35* (1997), pp. 99–105.
- [6] BIRD, R., ARMSTRONG, R., AND HASSAGER, O. *Dynamics of Polymeric Liquids, Fluid Mechanics, Vol. 1*. John Wiley and Sons, New York, 1977.
- [7] BORTOLI, A. L. *Introdução à Dinâmica de Fluidos Computacional*. Editora da UFRGS, Porto Alegre, 2000.
- [8] DHANASEKHARAN, M., WANG, C. F., AND KOKINI, J. L. Use of non-linear differential viscoelastic models to predict the rheological properties of gluten dough. *Journal of Food Process Engineering vol. 24* (2001), pp. 193–216.
- [9] DURST, F., MELLING, A., AND WHITELAW, J. H. Low Reynolds number flow over a plane symmetric sudden expansion. *J. Fluid Mech. vol. 64* (1974), pp. 111–128.

- [10] DURST, F., PEREIRA, J. C. F., AND TROPEA, C. The plane symmetric sudden-expansion flow at low Reynolds numbers. *J. Fluid Mech. vol. 248* (1993), pp. 567–581.
- [11] FEARN, R., MULLIN, T., AND CLIFFE, K. A. Nonlinear flow phenomena in a symmetric sudden expansion. *Journal of Fluid Mechanics vol. 211* (1990), pp. 595–608.
- [12] FERGUSON, J., AND KEMBLOWKI, Z. *Applied Fluid Rheology*. Elsevier, Cambridge, 1991.
- [13] FORTIN, M., AND ESSELAOUI, D. A finite procedure for viscoelastic flows. *Finite Elements in Fluids vol. 7* (1987), pp. 47–64.
- [14] GREENSPAN, D., AND CASULL, V. *Numerical Analysis for Applied Mathematics, Science and Engineering*. Addison-Welley Publishing Co. Inc., 1970.
- [15] GROSSI, L., TOMÉ, M. F., CASTELO, A. F., MANGIAVACCHI, N., AND CUMINATO, J. A. Técnicas numéricas para simulação de contração planar de fluidos Oldroyd B. *Revista Tema vol. 3* (2002), pp. 131–140.
- [16] GUSTAFSSON, B., KREISS, H., AND OLIGER, J. *Time Dependent Problems and Difference Methods*. John Wiley and Sons, Ney York, 1995.
- [17] HALL, C. A., AND PORSCHING, T. A. *Numerical Analysis of Partial Differential Equations*. Prentice Hall, 1990.
- [18] HALMOS, A. L., BOGER, D. V., AND CABELLI, A. The behavior of a power-law fluid flowing through a sudden expansion, part 1: numerical solution. *AIChE J. vol. 21* (1975), pp. 540–549.
- [19] HALMOS, A. L., BOGER, D. V., AND CABELLI, A. The behavior of a power-law fluid flowing through a sudden expansion, part 2: experimental verification. *AIChE J. vol. 21* (1975), pp. 550–553.

- [20] HAMMAD, K., AND VRADIS, C. Flow of a non-Newtonian Bingham plastic through an axisymmetric sudden expansion: effects of Reynolds and yield numbers. *Num. Meth. Non-Newtonian Fluid Dynamics, ASME vol. 179* (1994), pp. 63–69.
- [21] HUNKE, E. C., AND ZHANG, Y. A comparison of sea ice dynamics models at high resolution. *Monthly Weather Review vol. 127* (1999), pp. 396–408.
- [22] JUSTO, D. A. R. *Geração de Malhas, Condições de Contorno e Discretização de Operadores para Dinâmica de Fluidos Computacional*. Dissertação de mestrado, PPGMAP-UFRGS, Porto Alegre, 2001.
- [23] KLEINSTREUER, C. *Engineering Fluid Dynamics*. Cambridge Press, 1997.
- [24] KOSTIC, M. Different non-Newtonian Reynolds and Prandtl numbers: their usage and relationships. *Developments in Non-Newtonian Flows, ASME vol. 206* (1994), pp. 163–169.
- [25] LEE, J. S., JUNG, H. W., KIM, S. H., AND HYUN, J. C. Effect of fluid viscoelasticity on the draw resonance dynamics of melt spinning. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 99* (2001), pp. 159–166.
- [26] LEFTON, L., AND WEI, D. A penalty method for approximations of the stationary power-law Stokes problem. *Electronic Journal of Differential Equations vol. 7* (2001), pp. 1–12.
- [27] LIN, D., AND EVANS, R. A low Deborah number model for viscoelastic flow driven along a channel by suction at porous walls. *Developments in Non-Newtonian Flows, ASME vol. 175* (1993), pp. 57–64.
- [28] LUO, L. Symmetric breaking of flow in 2D symmetric channels: Simulation by Lattice-Boltzmann Method. *International Journal of Modern Physics vol. 8* (1997), pp. 859–867.
- [29] MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Ltc, Rio de Janeiro, 1995.

- [30] MANICA, R., AND DE BORTOLI, A. L. Numerical simulation of (non-) newtonian flows through an axisymmetric expansion. *Anais do Mercofrio 2002* (2002).
- [31] MANICA, R., AND DE BORTOLI, A. L. Simulação numérica de escoamentos de fluidos não newtonianos em duto axissimétrico com expansão brusca. *Anais do VII ERMAC, 1* (2002), 246–251.
- [32] MANICA, R., AND DE BORTOLI, A. L. Numerical simulation of non-newtonian flows through ducts with axisymmetric expansions using power-law model. *Aceito para publicação na Revista Vetor* (2003).
- [33] MANICA, R., AND DE BORTOLI, A. L. Simulation of sudden expansion flows for power-law fluids. *Submetido ao J. of Non-Newtonian Fluid Mechanics* (2003).
- [34] MISHRA, S., AND JAYARAMAN, K. Asymmetric flows in planar symmetric channels with large expansion ratio. *Int. J. Num. Meth. Fluids vol. 38* (2002), pp. 945–962.
- [35] MISSIRLIS, K. A., ASSIMACOPOULOS, D., AND MITSOULIS, E. A finite volume approach in the simulation of viscoelastic expansion flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 78* (1998), pp. 91–118.
- [36] MOTTA, S. Y. *Simulação Numérica de Componentes em Sistemas de Refrigeração de Pequeno Porte*. Dissertação de mestrado, PUC-Rio, Rio de Janeiro, 1995.
- [37] MUNIZ, A. R. *Desenvolvimento de um método de volumes finitos de alta ordem para a simulação de fluidos viscoelásticos*. Dissertação de mestrado, PPGEQ-UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [38] NIGEN, S., AND WALTERS, K. Viscoelastic contraction flows: comparison of axisymmetric and planar configurations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 102* (2002), pp. 343–359.

- [39] OLDROYD, J. G. Non-newtonian effects in steady motion of some idealized elastico-viscous liquids. *Proc. Roy. Soc. A245* (1958), pp. 278–297.
- [40] OLLEY, P., AND COATES, P. D. An approximation to the KBKZ constitutive equation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 69* (1997), pp. 239–254.
- [41] PAK, B., CHO, Y. I., AND CHOI, S. U. S. Separation and reattachment of non-newtonian fluid flows in a sudden expansion pipe. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 37* (1990), pp 175–199.
- [42] PANTAKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, New York, 1981.
- [43] PAPANASTASIOU, A. C. Flows of material with yield. *J. Rheol. vol. 31* (5) (1987), pp. 385–404.
- [44] PARK, S. J., AND LEE, S. J. On the use of the open boundary condition method in numerical simulation of nonisothermal viscoelastic flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 87* (1999), pp. 197–214.
- [45] PEDROSO, C. A. *Simulação de Fluxos Bidimensionais, Laminares e Incompressíveis entre Superfícies Móveis*. Dissertação de mestrado, PPGMAP-UFRGS, Porto Alegre, 2001.
- [46] PHILIPS, N. T. A pseudospectral domain decomposition method for viscoelastic flow past a sphere. *Num. M. for Non-Newtonian Fluid Dynamics, ASME vol. 179* (1994), pp. 21–30.
- [47] PNUELI, D., AND GUTFINGER, C. *Fluid Mechanics*. Cambridge University Press, 1997.
- [48] RENARDY, M. Similarity solutions for jet breakup for various models of viscoelastic fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 104* (2002), pp. 65–74.

- [49] SARMA, A. S. R., SUNDARARAJAN, T., AND RAMJEE, V. Numerical simulation of confined laminar jet flows. *Int. J. Num. Meth. Fluids vol. 33* (2000), pp. 609–626.
- [50] SCHRECK, E., AND SCHÄFER. Numerical study of bifurcation in three-dimensional sudden channel expansions. *Computers and Fluids vol. 29* (2000), pp. 583–593.
- [51] SITE:. <http://sst.tees.ac.uk/external/u0000504/notes/foodstruct/fsc06/fdrheo02.html>, 2003.
- [52] TANNER, R. I. *Engineering Rheology*. Oxford University Press, Oxford, 1992.
- [53] TAVARES, A. *Simulação Numérica de Escoamento Incompressível através de Canais Retos com Expansão Geometricamente Brusca*. Dissertação de mestrado, PPGMAp-UFRGS, Porto Alegre, 1999.
- [54] THOMPSON, R. L., SOUZA MENDES, P. R., AND NACCACHE, M. F. A new constitutive equation and its performance in contractions flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech. vol. 86* (1998), pp. 375–388.
- [55] TICHY, J. A. Non-newtonian lubrication with the Convected Maxwell Model. *Journal of Tribology vol. 118* (1996), pp. 344–348.
- [56] VRADIS, G. C., AND HAMMAD, J. K. Strongly coupled block-implicit solution technique for non-newtonian convective heat transfer problems. *Numerical Heat Transfer Part B* (1998), pp. 79–97.
- [57] VRADIS, G. C., AND OTUGEN, M. V. The flow of Bingham plastics over a sudden expansion in a pipe. *Recent Advances in Non-Newtonian Flows, ASME vol. 153* (1992), pp. 129–135.

Apêndice A MODELOS PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Neste apêndice, faz-se um levantamento bibliográfico dos principais modelos usados para fluidos viscoelásticos, salientando sua utilidade e situações onde foram aplicados.

a. **Modelo de Kelvin.** Consiste de um elemento hookeano ($\tau_e = G\gamma_e$) e um newtoniano ($\tau_v = \mu\dot{\gamma}_v$) combinados em paralelo, onde somam-se as tensões e igualam-se as deformações. A equação fica

$$\tau = G\gamma + \mu\dot{\gamma} \quad (\text{A.1})$$

onde G é o módulo de elasticidade e μ a viscosidade efetiva. Esse modelo ilustra o comportamento reológico de um sólido viscoelástico. Quando $\dot{\gamma} = 0$, essa equação se reduz a relação para um sólido hookeano.

b. **Modelo de Maxwell.** É obtido combinando os elementos hookeano e newtoniano em série, onde igualam-se as tensões e somam-se as deformações, e é escrito como

$$\tau = \mu\dot{\gamma} - \lambda \frac{\partial \tau}{\partial t} \quad (\text{A.2})$$

onde λ é o tempo de relaxação. Para lubrificantes aditivados, por exemplo, λ é da ordem de 10^{-4} a 10^{-6} . Se o tempo do processo de lubrificação é dessa ordem, espera-se fortes efeitos de dependência do tempo [55].

c. **Modelo de Oldroyd.** Oldroyd (1958) [39] generalizou a equação viscoelástica linear. Se $\sigma_{ij} + p\delta_{ij} = \tau_{ij}$, então τ_{ij} obedece a seguinte equação

$$\begin{aligned} \tau_{ij} + \lambda \left[\frac{D\tau_{ij}}{Dt} + \frac{\partial v_m}{\partial x_i} \tau_{mj} + \frac{\partial v_m}{\partial x_j} \tau_{mi} \right] + \mu_3 \tau_{kk} \dot{\gamma}_{ij} - \mu_1 (\tau_{im} \dot{\gamma}_{mj} + \tau_{jm} \dot{\gamma}_{mi}) \\ + a_1 (\tau_{km} \dot{\gamma}_{km}) \delta_{ij} = 2\mu [\dot{\gamma}_{ij} + \lambda_2 \ddot{\gamma}_{ij} - 2\mu_2 \dot{\gamma}_{ik} \dot{\gamma}_{kj} + a_2 (\dot{\gamma}_{km} \dot{\gamma}_{km}) \delta_{ij}] \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde λ_2 é o tempo de retardo; λ , λ_2 e μ podem ser encontrados em experimentos de baixa deformação. Existem 8 constantes nessa versão que precisam ser encontradas experimentalmente. Devido à complexidade dessa equação, ela é somente ilustrativa. Além disso, não representa uma descrição acurada do comportamento de materiais reais [52]. Muitos trabalhos na literatura consideram casos particulares desse modelo [13].

A forma mais popular dessa equação é o modelo convectivo de Maxwell, que é obtido quando $\mu_3 = \lambda_2 = \mu_2 = a_1 = a_2 = 0$, e também $\mu_1 = 2\lambda_1$. Ele é apresentado a seguir.

d. **Modelo convectivo de Maxwell.** Para o modelo convectivo de Maxwell substitui-se a derivada parcial pela convectiva no modelo de Maxwell. A taxa de variação local da tensão $\frac{\delta\tau}{\delta t}$ no material pode ser descrita num sistema de referência material que é deformado e convectado com o material. Os vetores base são, então, dependentes do tempo, e a taxa de variação $\frac{\delta\tau}{\delta t}$ tem contribuições devido a:

- a) taxa de variação local $\frac{\partial\tau}{\partial t}$;
- b) convecção do sistema de referência;
- c) deformação do sistema de referência.

Ele é descrito como [55]

$$\tau + \lambda \frac{\delta\tau}{\delta t} = 2\mu\dot{\gamma} \quad (\text{A.4})$$

Há várias escolhas de sistemas invariantes para definir o sistema material de referência. As escolhas mais comuns são dadas por [27]:

- a) Base contravariante: Os vetores base são normais aos planos materiais e são deformados convectivamente para permanecer normais aos planos materiais. O comprimento permanece proporcional à área dos planos materiais. Isso fornece a derivada *upper convected* escrita conforme

$$\frac{\delta\tau}{\delta t} = \bar{\tau} = \frac{\partial\tau}{\partial t} + (u \cdot \nabla)\tau - \nabla u \cdot \tau - \tau \cdot (\nabla u)^T \quad (\text{A.5})$$

b) Base covariante: Os vetores base são paralelos às linhas do fluxo e são deformadas convectivamente com as linhas do material. Isso fornece a derivada *lower convected*

$$\frac{\delta\tau}{\delta t} = \tilde{\tau} = \frac{\partial\tau}{\partial t} + (u \cdot \nabla)\tau + \nabla u \cdot \tau + \tau \cdot (\nabla u)^T \quad (\text{A.6})$$

c) Base corotacional: Os vetores base rotacionam com a velocidade angular dos elementos de fluido. Isso fornece a derivada corotacional devido a Jaumann [13]

$$\hat{\tau} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) \bar{\tau} + \left(\frac{a}{2}\right) \tilde{\tau} \quad (\text{A.7})$$

onde obtém-se para

$a = 0$ a relação *upper convected*;

$a = 2$ a relação *lower convected*;

$a = 1$ a relação corotacional.

Inserindo essas relações para a derivada convectiva no modelo de Maxwell obtemos os modelos *upper convected*, *lower convected* e corotacional escritos, respectivamente, conforme

$$\tau + \lambda \bar{\tau} = 2\mu \dot{\gamma} \quad (\text{A.8})$$

$$\tau + \lambda \tilde{\tau} = 2\mu \dot{\gamma} \quad (\text{A.9})$$

$$\tau + \lambda \hat{\tau} = 2\mu \dot{\gamma} \quad (\text{A.10})$$

Segundo Lin e Evans [27], comparações dessas relações com observações experimentais sugerem que o modelo *upper convected* é mais eficiente que os outros dois. No entanto, eles acreditam que exista um valor para a constante a ótimo. O modelo *upper convected* fornece resultados satisfatórios e é, freqüentemente, usado em simulações para prever comportamentos viscoelásticos [35]. Como exemplos, Park e Lee [44] simularam o fluxo através de um duto com contração brusca, ocorrendo recirculação próximo ao canto. Pedroso [45] analisou fluxos bidimensionais em superfícies móveis usando o método de diferenças finitas em coordenadas generalizadas para baixos números de Deborah. Um modelo parecido com o *upper convected* é o de Oldroyd B.

e. **Modelo de Oldroyd B.** O modelo de Oldroyd B é da forma

$$\tau + \lambda \bar{\tau} = 2\mu[\dot{\gamma} + \lambda_2 \ddot{\gamma}] \quad (\text{A.11})$$

onde $\ddot{\gamma}$ é a derivada convectiva da taxa de deformação e $\lambda_2 > 0$ o tempo de retardo. Quando $\lambda_2 = 0$, retorna-se ao modelo *upper convected Maxwell*.

O modelo Oldroyd B é bastante utilizado na literatura: Grossi et al. [15] simularam o escoamento de um fluido viscoelástico numa contração planar 4 : 1. Philips [46] analisou o fluxo de fluido passando por uma esfera usando um método de decomposição de domínio pseudo-espectral.

Modelos como o convectivo de Maxwell e o Oldroyd B são diferenciais quasi-lineares. Eles não são capazes de descrever bem propriedades reológicas típicas de materiais poliméricos como a variação da viscosidade com o cisalhamento.

f. **Modelo de White-Metzner.** O modelo de White-Metzner é escrito da seguinte maneira [25]

$$\tau + \lambda(\dot{\gamma})\bar{\tau} = 2\mu(\dot{\gamma})\dot{\gamma} \quad (\text{A.12})$$

ou seja, é um modelo de Maxwell onde as constantes de relaxação e da viscosidade variam com a taxa de cisalhamento. A variação da viscosidade pode ser calculada usando o modelo Carreau-Yasuda [8], que fornece resultados satisfatórios, modelando corretamente o comportamento a altas e baixas deformações. Nesse modelo a viscosidade efetiva é escrita conforme

$$\frac{\mu(\dot{\gamma}) - \mu_\infty}{\mu_0 - \mu_\infty} = (1 + \lambda_3 \dot{\gamma}^2)^{(n-1)/2} \quad (\text{A.13})$$

onde n é o expoente de power-law, μ_0 a viscosidade a baixas deformações, μ_∞ a viscosidade a altas deformações e λ_3 é uma constante que possui tempo como unidade (mas não um tempo de relaxação). Esse modelo possui 4 parâmetros: μ_∞ , μ_0 , λ_3 e n , dificultando a obtenção desses dados que são experimentais, mas fornecendo uma curva mais realística relacionando viscosidade e deformação.

g. **Modelo de Phan-Thien-Tanner.** O modelo de Phan-Thien-Tanner (1978)

é escrito conforme [52] [48]

$$Y(\tau, T)\tau + \lambda\bar{\tau} = 2\mu\dot{\gamma} \quad (\text{A.14})$$

onde T é a temperatura e Y foi escolhido de forma que [52]

$$Y = \exp\left[\frac{\varepsilon}{G}\text{Tr}(\tau)\right] \quad (\text{A.15})$$

onde ε governa a resposta extensional do fluxo. Essa forma para a equação constitutiva fornece como resultados [52] :

- a) comportamento viscoelástico linear a pequenas deformações;
- b) boa concordância para viscosidade e primeira diferença de tensão normal para polietileno de baixa densidade para cisalhamentos estacionários e transientes;
- c) boa solução para viscosidade em fluxos extensionais.

Dhanasekharan et al. [8] usaram os modelos Phan-Thien-Tanner e White-Metzner para prever propriedades reológicas de massa de pão, que foram comparadas com dados experimentais. O modelo White-Metzner, juntamente com o modelo Carreau-Yasuda para dependência da viscosidade, mostrou melhor resultado para as propriedades de cisalhamento estacionárias, enquanto o de Phan-Thien-Tanner se mostrou mais eficiente em prever a viscosidade de cisalhamento transiente e o primeiro coeficiente de tensão normal transiente. Uma predição consistente de todos os dados experimentais não conseguiu ser obtida com esses modelos. Lee et al. [25] analisaram o efeito da viscoelasticidade do fluido na formação de instabilidades hidrodinâmicas usando os modelos Phan-Thien-Tanner e White-Metzner.

h. **Modelo K-BKZ.** Kaye (1962) e Bernstein, Kearsley e Zapas (1963), independentemente, propuseram um modelo constitutivo que parece ter sido inspirado na teoria da elasticidade da borracha. Esse modelo é considerado um dos mais completos. No caso incompressível o modelo fica [52]

$$\sigma = -pI + \int_{-\infty}^t \left[\frac{\partial U}{\partial I_{C^{-1}}} C^{-1} - \frac{\partial U}{\partial I_C} C \right] dt' \quad (\text{A.16})$$

onde o potencial U é uma função de várias quantidades ($U = U(I_C, I_{C^{-1}}, t - t')$); C^{-1} é o inverso do tensor deformação C dado por

$$C = F^T F = \begin{bmatrix} 1 & \dot{\gamma}(t' - t) & 0 \\ \dot{\gamma}(t' - t) & 1 + \dot{\gamma}^2(t' - t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

sendo F a definição do gradiente de deformação

$$F = \begin{bmatrix} 1 & \dot{\gamma}(t' - t) & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e I_C e $I_{C^{-1}}$ são os traços (primeiros invariantes) dos tensores C e C^{-1} .

Olley e Coates [40] simularam o fluxo de materiais viscoelásticos em contração brusca 8:1. A formulação por eles utilizada permitiu a captação de grandes vórtices no canto, inclusive maiores do que os vórtices que aparecem fisicamente e com o modelo K-BKZ usual. Barakos e Mitsoulis [4] simularam fluxos de fluidos viscoelásticos não isotérmicos em extrusão usando esse modelo. Os resultados mostram a influência da viscoelasticidade e das condições de contorno térmicas na extrusão e estão em concordância qualitativa com estudos experimentais.