

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

**Estimação de parâmetros não lineares de
equações constitutivas viscoelásticas através
de dados de inchamento do extrusado**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Andréia Rodrigues Machado

Porto Alegre

2014

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

**Estimação de parâmetros não lineares de
equações constitutivas viscoelásticas através
de dados de inchamento do extrusado**

Andréia Rodrigues Machado

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

Área de concentração: Materiais da
Indústria Química: Polímeros

Orientador:
**Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros
Cardozo**

Porto Alegre

2014

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

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Estimação de parâmetros não lineares de equações constitutivas viscoelásticas através de dados de inchamento do extrusado*, elaborada por *Andréia Rodrigues Machado*, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

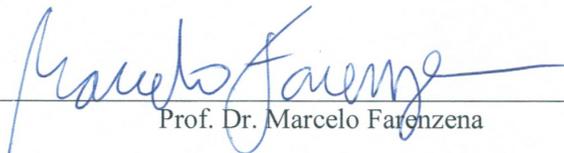
Comissão Examinadora:



Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli



Prof. Dr. Cleiton Bittencourt da Porciúncula



Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Agradecimentos

Ao professor Nilo Sérgio Medeiros Cardozo pelos ensinamentos e disponibilidade.

Ao DEQUI e PPGEQ pela oportunidade e pela estrutura necessária à implementação do trabalho.

À CAPES pelo apoio financeiro.

Aos colegas e ex-colegas do LASIM pela ajuda.

Aos meus pais e minha família, pelo apoio de sempre.

Ao Árlen pelo suporte em linguagem de programação e momentos de descontração.

Resumo

A estimação de parâmetros de equações constitutiva viscoelásticas, tipicamente efetuada através de diferentes tipos de reômetros, pode ser uma tarefa árdua, especialmente no que diz respeito à estimação de parâmetros não lineares. Nas últimas décadas houve grande progresso no desenvolvimento de novas metodologias para caracterização de fluidos viscoelásticos na região de comportamento viscoelástico não linear e na simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos nesta região. Este trabalho tem como objetivo apresentar uma metodologia de estimação de parâmetros reológicos de equações constitutivas viscoelásticas baseada na comparação recursiva entre valores originados em experimentos com a modelagem em fluidodinâmica computacional do escoamento de referência. Esta metodologia apresenta como vantagem a possibilidade de estimar parâmetros a partir de dados originados em escoamentos mais representativos dos processos industriais, resultando em parâmetros com maior potencial de representar adequadamente o comportamento viscoelástico de um dado material nas suas condições típicas de aplicação. Dois estudos de caso foram implementados de forma a testar a metodologia: o escoamento de um fluido newtoniano entre placas paralelas e o escoamento de um fluido viscoelástico na saída do capilar. A estimação da viscosidade newtoniana foi baseada na comparação entre valores analíticos e numéricos para o gradiente de pressão ao longo do escoamento. A estimação do parâmetro não linear da equação constitutiva viscoelástica de Phan-Thien-Tanner (PTT) foi baseada na diferença entre os perfis de diâmetro numéricos com relação aos valores experimentais para o fenômeno de inchamento do filete de fluido ao emergir da saída do capilar, conhecido como inchamento do extrusado. O erro final obtido para o valor estimado da viscosidade newtoniana foi de 9 % com relação ao valor de referência. Para o parâmetro não linear do modelo PTT o erro para o valor estimado foi de 0,75 % com relação ao valor de referência obtido pela técnica de reometria rotacional.

Palavras-chave: estimação de parâmetros, fluidos viscoelásticos, equações constitutivas, inchamento do extrusado.

Abstract

The estimation of viscoelastic constitutive equations parameters, typically performed through different types of rheometers, can be an arduous task, especially as regards the estimation of nonlinear parameters. In recent years, there has been great progress in developing new methods for the characterization of viscoelastic fluids beyond the linear region and in the simulation of viscoelastic fluid flows in general. This work aims to present a methodology for estimation of rheological parameters of viscoelastic constitutive equations. The methodology is based on recursive comparison between experimentally measured fields with numerically computed ones by a computational fluid dynamics (CFD) model. This methodology has the advantage of estimating parameters through data coming from more representative flows of industrial processes, resulting in parameters with higher potential to represent the viscoelastic behavior of a given material under its typical conditions of application. Two case studies have been used to test this methodology: a steady state shear flow between two parallel plates of a Newtonian fluid and a viscoelastic fluid flow in a capillary. The estimation of Newtonian viscosity was based on the comparison between analytical and numerical values for the pressure gradient along the flow. The estimation of the nonlinear parameter of the viscoelastic constitutive equation Phan-Thien-Tanner was based on the difference between the experimental and numerical diameter profiles of the swelling of the fluid emerging from the capillary opening, known as extrudate swell. The final error obtained for the estimated value of Newtonian viscosity was 9 % compared to the reference value. For nonlinear parameter of PTT model, the error of the estimated value was 0.75 % compared to the reference value obtained through rotational rheometer technique.

Keywords: parameter estimation, viscoelastic fluids, constitutive equations, extrudate swell.

Sumário

Capítulo 1 - Introdução	1
1.1. Estrutura da dissertação	3
Capítulo 2 - Conceitos Fundamentais e Revisão Bibliográfica	5
2.1. Comportamento reológico de polímeros	5
2.2. Estimação de parâmetros constitutivos viscoelásticos utilizando como base a simulação CFD	9
2.3. Inchamento do extrusado.....	13
Capítulo 3 - Metodologia.....	17
3.1. Descrição dos estudos de caso.....	18
3.1.1. Escoamento entre placas paralelas	18
3.1.2. Escoamento na saída de um capilar.....	18
3.2. Modelagem matemática.....	20
3.2.1. Equações governantes	20
3.2.2. Natureza multifásica do escoamento	23
3.3. Solução numérica dos modelos	25
3.3.1. Especificação das condições de contorno escolhidas para os problemas de escoamento estudados	26
3.3.2. <i>Solvers</i> utilizados.....	30
3.3.3. Algoritmo de solução das equações governantes	31
3.3.4. Esquemas e parâmetros numéricos utilizados	32
3.3.5. Paralelização e tempo de simulação	33
3.4. Estratégia para estimação de parâmetros materiais	34
3.4.1. Formulação do problema de otimização.....	34
3.4.2. Algoritmo geral de estimação.....	35
3.5. Ferramentas utilizadas na estimação dos parâmetros	37
3.5.1. Python.....	37
3.5.2. Numpy e Scipy	38
3.5.3. ParaView e VTK	38
3.5.4. PyFoam.....	40
3.5.5. Rotina para a execução recursiva das simulações, obtenção dos resultados e estimação dos parâmetros.....	40
Capítulo 4 - Resultados	43
4.1. Estudo de independência de malha.....	44
4.2. Convergência das soluções numéricas	49
4.3. Resultado da estimação de parâmetros.....	52
4.3.1. Estimação da viscosidade de fluido newtoniano	52

4.3.2 Estimação do parâmetro viscoelástico não linear λ do modelo PTT	57
Capítulo 5 - Conclusão	71
Referências Bibliográficas	73

Lista de Figuras

Figura 2.1: Representação do fenômeno de inchamento de extrusado de um fluido newtoniano (à esquerda) e viscoelástico (à direita) (Fonte: <i>Bird, Armstrong e Hassager, 1987</i>).....	14
Figura 3.1: Representação esquemática das condições de contorno para o escoamento entre placas paralelas.....	18
Figura 3.2: Representação esquemática do escoamento na saída de um capilar.....	19
Figura 3.3: Condições de contorno para o escoamento na saída do capilar.....	20
Figura 3.4: Diferentes campos iniciais de velocidade.....	27
Figura 3.5: Geometria para o caso de escoamento na saída do capilar.....	28
Figura 3.6: Condição inicial para a fração volumétrica de polímero.....	29
Figura 3.7: Condições de contorno modificadas para o escoamento na saída do capilar.....	30
Figura 3.8: Fluxograma do algoritmo de estimação de parâmetros materiais.....	36
Figura 4.1: Detalhe da vista lateral das malhas usadas na geometria de placas paralelas: a) MeshP1, b) MeshP2 e c) MeshP3.....	44
Figura 4.2: Detalhe da região da saída do capilar para as malhas: a) MeshP1, b) MeshP2 e c) MeshP3.....	45
Figura 4.3: Detalhe da região da saída do capilar para as malhas de geometria com plano de simetria: a) MeshS1, b) MeshS2 e c) MeshS3.....	46
Figura 4.4: Variação da componente x da velocidade ao longo do eixo y para as diferentes malhas estudadas no caso de estudo da geometria de placas paralelas.....	47
Figura 4.5: Variação da componente y da velocidade ao longo da espessura na saída do capilar para as três malhas estudadas no caso de estudo de escoamento na saída de um capilar.....	48
Figura 4.6: Variação da componente y da velocidade ao longo da espessura na saída do capilar para as três malhas estudadas no caso de estudo de geometria de capilar com plano de simetria.....	48
Figura 4.7: Resíduos das variáveis em função do passo de tempo da simulação da geometria de placas paralelas: a) resíduos da pressão e componentes da velocidade e b) continuidade..	50
Figura 4.8: Resíduos das variáveis em função do passo de tempo da simulação do escoamento na saída de um capilar a) pressão e componentes da tensão e b) continuidade. ..	51

Figura 4.9: Resíduos das variáveis em função do passo de tempo: a) pressão e componentes da tensão e b) continuidade.	52
Figura 4.10: Valor estimado da viscosidade em função do passo de otimização	53
Figura 4.11: Valor da função objetivo em função do passo de otimização.	53
Figura 4.12: Componente x da velocidade em função da distância da posição y	54
Figura 4.13: Perfil da componente x da velocidade em um ponto fixo no centro da geometria em função do passo de tempo.....	55
Figura 4.14: Perfis de velocidade e queda de pressão ao longo do escoamento para a), b) $U_0 = 0,1$ m/s e c), d) $U_0 = 0,2$ m/s.....	56
Figura 4.15: Magnitude de τ_i do primeiro até o sétimo modo do espectro de relaxação ao longo da coordenada y na região do capilar.	58
Figura 4.16: Perfil de taxa de cisalhamento ao longo do eixo y na região do capilar.....	50
Figura 4.17: Valor normalizado do parâmetro λ em função do passo de otimização.	61
Figura 4.18: Evolução da superfície livre desde $t = 0$ até $t = 2$ s.	63
Figura 4.19: Razão de inchamento D/D_I em função da distância da saída do capilar para diferentes tempos de simulação.....	64
Figura 4.20: Razão de inchamento em função do tempo para diferentes distâncias fixas da saída do capilar.	65
Figura 4.21: Comparação entre razão de inchamento experimental esimulada com a geometria G1.	66
Figura 4.22: Detalhe da predição do inchamento do extrusado próximo à saída do capilar...67	
Figura 4.23: Valor estimado para o parâmetro λ em função do passo de otimização.....	67
Figura 4.24: Evolução da superfície livre desde $t = 0$ até $t = 1,1$ s para geometria com plano de simetria.	69
Figura 4.25: Razão de inchamento em função de: a) distância da saída do capilar para diferentes tempos de simulação e b) tempo para diferentes distâncias a partir da saída do capilar.	69
Figura 4.26: Comparação entre razão de inchamento experimental, encontrada na literatura e obtida com a geometria G2.....	70

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Condições de contorno para o escoamento entre placas paralelas	26
Tabela 3.2: Significado das condições de contorno no OpenFOAM	26
Tabela 3.3: Condições de contorno para o escoamento na saída do capilar.....	28
Tabela 3.4: Funções do ParaView usadas na obtenção dos resultados numéricos.....	39
Tabela 3.5: Classes do PyFoam usadas no <i>script</i> de obtenção de parâmetros	40
Tabela 4.1: Malhas usadas no estudo de independência de malha no caso de escoamento entre placas paralelas.	45
Tabela 4.2: Malhas usadas no estudo de independência de malha para a geometria equivalente à saída de capilar.	45
Tabela 4.3: Malhas usadas no estudo de independência de malha para a geometria de saída de capilar com plano de simetria.	46
Tabela 4.4: Valores analíticos e numéricos obtidos para $\frac{\partial P}{\partial x}$ e $U_{x_{max}}$	56
Tabela 4.5: Espectro de relaxação para o PELBD a 160°C.....	57

Lista de Símbolos

Co	Número de <i>Courant</i>	-
\bar{g}	Vetor aceleração da gravidade	$m.s^{-2}$
h	Distância entre duas placas paralelas	m
P	Pressão	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
\dot{Q}_V	Vazão volumétrica	$m^{-3}.s$
$S(x)$	Função objetivo	
t	Tempo	s
\bar{U}	Vetor velocidade	$m.s^{-1}$
U_0	Velocidade inicial	$m.s^{-1}$
w	Profundidade da cavidade formada por duas placas paralelas	m
x^{opt}	Ponto ótimo	

Símbolos e letras gregas

α	Fração volumétrica	-
$\dot{\bar{\gamma}}$	Tensor taxa de deformação	s^{-1}
ε	Parâmetro do modelo PTT	-
ζ	Parâmetro do modelo PTT	-
η	Viscosidade não-newtoniana	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
θ	Propriedade qualquer	
λ	Tempo de relaxação	s
μ	Viscosidade newtoniana	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ρ	Massa específica	$kg.m^{-3}$
$\bar{\tau}$	Tensor das tensões totais	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
$\bar{\tau}_p$	Contribuição do polímero para o tensor das tesões totais	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
$\bar{\tau}_s$	Contribuição do solvente para o tensor das tesões totais	$kg.m^{-1}.s^{-2}$

Outros símbolos

\square	Derivada de Gordon-Schowalter
τ	

$\partial P/\partial x$	Gradiente de pressão	$kg.m^{-2}.s^{-2}$
Δx	Varição na coordenada x	
δt	Varição no tempo	s
δx	Varição na coordenada x	m

Siglas

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>DIC</i>	Diagonal Incomplete-Choleski
<i>DILU</i>	Diagonal Incomplete-LU
<i>FENE</i>	Finitely Extensible Linear Elastic
<i>LAOS</i>	Large Amplitude Oscillatory Shear
<i>OpenFOAM</i>	Open Source Field Operation and Manipulation
<i>PBiCG</i>	Preconditioned Bi-conjugate Gradient
<i>PCG</i>	Preconditioned Conjugate Gradient
<i>PELBD</i>	Poliétileno Linear de Baixa Densidade
<i>PISO</i>	Pressure Implicit Splitting of Operators
<i>PTT</i>	Phan-Thien-Tanner
<i>SAOS</i>	Small Amplitude Oscillatory Shear
<i>UCM</i>	Upper Convected Maxwell
<i>VOF</i>	Volume-of-Fluid
<i>VTK</i>	Visualization Tool Kit

Capítulo 1

Introdução

A fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) vem se tornando uma ferramenta de engenharia muito popular. É crescente o número de indústrias que otimizam seus processos através de simulações CFD, resultando na redução de custos e duração da fase de "tentativa e erro". O sucesso de uma simulação fluidodinâmica computacional, entretanto, depende da precisão dos dados de entrada, como geometria, condições de contorno e dados dos materiais, entre outros parâmetros. No caso de processamento polimérico é fundamental o conhecimento dos parâmetros viscoelásticos para que a simulação possua suficiente precisão.

Em muitos casos a caracterização do comportamento de fluidos viscoelásticos pode ser uma tarefa árdua, especialmente na obtenção de parâmetros constitutivos não lineares. Na última década houve grande progresso no desenvolvimento de novas metodologias de caracterização de fluidos não newtonianos além da região linear, incluindo polímeros fundidos e em solução, macromoléculas biológicas, emulsões, suspensões e surfactantes, entre outros.

Tipicamente a caracterização reológica de fluidos viscoelásticos é feita em diferentes tipos de reômetros e geometrias, como reômetros rotacionais (geometrias de placas paralelas e de cone e placa) operando em regime estacionário ou oscilatório, reômetros capilares e reômetros elongacionais. Os experimentos realizados em reômetros rotacionais e elongacionais geralmente fornecem medidas das propriedades reológicas a baixos valores de taxa de deformação, o que não representa adequadamente o comportamento do fluido nos processos industriais, nos quais o material sofre grandes deformações em curtos intervalos de tempo. Por outro lado, a partir de medidas em reômetros capilares geralmente obtêm-se dados relativos à parcela viscosa da resposta reológica do material, os quais não são úteis para a estimação de parâmetros viscoelásticos não lineares associados à parcela elástica da resposta reológica de um dado material.

Por outro lado, não existe ainda uma equação constitutiva “universal”, i.e., que possa descrever o comportamento de qualquer material e em qualquer tipo/condição de processo. Por tal motivo, o procedimento usual na seleção de equações constitutivas é buscar a aquela equação que é mais adequada para a descrição do processo de interesse, bem como o conjunto de parâmetros que maximiza adequação da equação escolhida ao tipo e condições de processo em estudo.

Assim sendo, é de interesse o desenvolvimento de metodologias de estimação de parâmetros constitutivos viscoelásticos que utilizem dados de processos específicos, de modo a obter valores de parâmetros que permitam a predição mais precisa dos diferentes tipos de resposta não-linear que ocorrem nas condições típicas utilizadas no processo considerado.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia conveniente e precisa de estimação de parâmetros viscoelásticos não lineares a partir de uma abordagem mista numérica/experimental, através da comparação entre medidas experimentais e

resultados computados numericamente a partir da modelagem do problema em fluidodinâmica computacional. Este procedimento apresenta a vantagem de possibilitar determinar os parâmetros materiais a partir de diversos tipos de dados experimentais, aumentando o potencial de adequação do conjunto equação/parâmetros estimados na descrição de processos específicos.

Para testar a metodologia proposta serão modelados dois escoamentos usando fluidodinâmica computacional: escoamento de um fluido newtoniano entre placas paralelas e escoamento de um fluido viscoelástico na saída de um capilar. No estudo de caso de escoamento entre placas paralelas será feita a estimativa da viscosidade newtoniana; no estudo de caso de escoamento na saída de um capilar será estimado o parâmetro não linear da equação constitutiva viscoelástica de Phan-Thien-Tanner.

1.1 Estrutura da dissertação

No Capítulo 2 são apresentados os fundamentos teóricos sobre equações constitutivas e comportamento reológico de polímeros, além de uma breve revisão bibliográfica sobre estimativa de parâmetros viscoelásticos.

No Capítulo 3 é apresentada a modelagem dos estudos de caso implementados para verificar a validade da metodologia proposta juntamente com a formulação do problema de otimização e da descrição das ferramentas utilizadas.

No Capítulo 4 são apresentados os resultados da estimativa dos parâmetros e validação dos resultados através da comparação com valores experimentais ou analíticos.

O Capítulo 5 apresenta as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Conceitos Fundamentais e Revisão

Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados fundamentos teóricos sobre o comportamento reológico de polímeros fundidos, equações constitutivas e estimação de parâmetros reológicos.

2.1 Comportamento reológico de polímeros

O processamento de polímeros consiste em submeter a matéria-prima polimérica a um conjunto de operações e processos que a transformará no produto final desejado, que, dependendo do polímero, pode assumir as mais variadas formas, incluindo filmes, perfis, peças moldadas, fibras, etc.. Na maioria dessas operações de processamento o polímero, originalmente no estado sólido, é aquecido até atingir o estado fundido ou plastificado, o que possibilita que adquira o formato final desejado. De forma a entender completamente o processamento de polímeros, é necessário conhecer todos os efeitos aos quais os polímeros são expostos durante seu processo de transformação. Atualmente, na indústria polimérica a modelagem computacional tem se tornado uma poderosa ferramenta para analisar, projetar e

controlar o processamento do polímero desde sua forma fundida, bem como o *design* e as propriedades mecânicas do produto final. Desta forma, faz-se necessário um modelo matemático que incorpore todas as forças e outras variáveis (temperatura, pressão) exercidas no material de forma a prever suas características finais. Conseqüentemente, o modelo deve levar em conta no mínimo princípios como a conservação de massa, energia e quantidade de movimento, além de uma equação constitutiva que relaciona a tensão e a deformação sofrida pelo fluido durante o escoamento. Essa relação assume diferentes formatos de acordo com tipo de material, intensidade e histórico de deformação.

As equações constitutivas mais simples possuem relação linear entre tensão e deformação ou taxa de deformação, como é o caso da equação constitutiva para fluidos newtonianos. Fluidos newtonianos são fluidos de baixa massa molar que possuem comportamento puramente viscoso, ou seja, deformam-se continuamente quando submetidos a uma tensão de cisalhamento (*Fox, McDonald e Pritchard, 2006*). Como exemplos de fluidos newtonianos podem ser citados: água, solventes orgânicos e óleo mineral sem aditivos. A constante de proporcionalidade da equação constitutiva para fluidos newtonianos é a viscosidade newtoniana, μ , que representa a resistência do fluido ao escoamento. Além dos fluidos newtonianos, outro tipo de material que possui relação linear entre tensão e, neste caso, deformação são os sólidos de Hooke. Esses materiais sofrem deformações finitas quando submetidos a uma tensão e retornam à sua forma original com a interrupção da mesma. A constante de proporcionalidade que relaciona tensão e deformação é chamada de módulo de Young ou módulo elástico e a equação constitutiva para este tipo de material é dada pela Lei de Hooke.

Polímeros fundidos ou em solução, entretanto, não obedecem à relação de proporcionalidade entre tensão e taxa de cisalhamento e por isso são denominados não newtonianos (*Bird, Armstrong e Hassager, 1987*). Como consequência disso, materiais poliméricos apresentam diferenças importantes de comportamento durante o processamento com relação aos fluidos newtonianos. Uma dessas diferenças de comportamento é o fato de polímeros possuírem viscosidade dependente da taxa de deformação, denominada viscosidade não newtoniana, η . Alguns polímeros também possuem a viscosidade variante com o tempo, como consequência de modificações reversíveis a nível estrutural causadas pelo cisalhamento. Além da variação da viscosidade com a taxa de cisalhamento e com o tempo, polímeros também podem apresentar fenômenos não usuais em determinadas situações durante o processamento, devido principalmente à diferença de tensões normais em escoamentos cisalhantes. Entre esses fenômenos podem ser citados: efeito de Weisemberg, o aparecimento de vórtices na entrada de um capilar, redução da perda de carga em um tubo e o inchamento do extrusado. Um estudo detalhado de cada um dos fenômenos mencionados pode ser encontrado em *Bird, Armstrong e Hassager, 1987*.

Uma variação do modelo constitutivo para fluido newtoniano é o modelo de Fluido Newtoniano Generalizado, utilizado em condições de escoamento em que as características viscosas são predominantes às características elásticas, podendo estas ser desprezadas e simplificando a modelagem do problema, como por exemplo, o fluxo de polímero em um parafuso de extrusora. Apesar da resposta desse tipo de fluido ser puramente viscosa, a relação entre tensão e taxa de cisalhamento não é linear, e em geral assume a forma logarítmica como nos modelos Lei da Potência e Carreau-Yasuda (*Macosko, 1994*).

Além do comportamento puramente viscoso não newtoniano, polímeros também podem apresentar caráter viscoelástico durante o escoamento, ou seja, apresentam comportamento viscoso e elástico ao mesmo tempo. A maioria dos materiais processados na indústria de polímeros são viscoelásticos. Num curto espaço de tempo o material responde elasticamente devido aos entrelaçamentos temporários formados entre as macromoléculas durante o escoamento, porém com o desaparecimento do efeito de memória a resposta se torna viscosa em espaços de tempo maiores.

Equações constitutivas viscoelásticas são derivadas de modelos constitutivos que implicam em idealizações a respeito do movimento das macromoléculas. Os modelos viscoelásticos podem ser classificados entre lineares ou não lineares. Os modelos viscoelásticos lineares podem ser expressos por uma equação diferencial linear, com aplicação limitada às situações onde o fluido sofre pequenas deformações, o que limita sua utilização na modelagem de processamento de polímeros onde as taxas de cisalhamento são geralmente altas. No entanto, o regime linear é necessário por tornar possível relacionar propriedades viscoelásticas lineares com a estrutura da cadeia polimérica. O modelo viscoelástico linear mais popular é o Modelo de Maxwell, derivado da combinação das equações de Hooke para sólido elástico. Os modelos viscoelásticos não lineares são complexos e possuem grande aplicação na modelagem de escoamentos poliméricos por serem capazes de descrever os fenômenos não lineares e por este motivo vem sendo alvo de intensa pesquisa nas últimas décadas. Esses modelos são baseados em teorias a respeito da movimentação das macromoléculas como a teoria da reptação, teoria cinética e teoria de redes de soluções concentradas e polímeros fundidos (*Larson, 1988*). Os modelos não lineares para fluidos viscoelásticos são usados em situações onde os modelos lineares não são capazes de

predizer o comportamento polimérico, ou seja, em situações onde a taxa de cisalhamento é elevada (*Bretas e d'Avila, 2005*).

Usualmente as operações de processamento de polímeros fundidos ocorrem a altas deformações, portanto a predição adequada do escoamento de polímeros durante o processamento requer o uso de modelos viscoelásticos não lineares. Entre os principais modelos viscoelásticos não lineares encontrados na literatura podem ser citados: Oldroyd-B (*Oldroyd, 1950*), White-Metzner (*White e Metzner, 1963*), Giesekus (*Giesekus, 1982*), Leonov (*Leonov, 1976*), modelos do tipo FENE (*Finitely Extensible non-linear Elastic*) (*Bird, Dotson e Johnson, 1980*), PTT (*Phan-Thien e Tanner, 1977*) e derivados, Pom-Pom (*Larson e McLeish, 1988*) e derivados. Uma descrição completa de cada um desses modelos pode ser encontrada em (*Bird, Armstrong e Hassager, 1987*), *Macosko (1994)* e *Larson (1998)*.

A utilização de uma equação constitutiva adequada na modelagem do escoamento de polímeros é importante para a compreensão da relação entre estrutura molecular e comportamento reológico durante o processamento. A equação constitutiva deve ser capaz de prever adequadamente os comportamentos não usuais de polímeros citados anteriormente. Entretanto, a escolha dessa equação passa pela necessidade de obtenção dos respectivos parâmetros reológicos, o que não é uma tarefa trivial. Na Seção 2.2 serão apresentados os conceitos fundamentais sobre a estimação de parâmetros viscoelásticos.

2.2 Estimação de parâmetros constitutivos viscoelásticos utilizando como base a simulação CFD

O objetivo da estimação de parâmetros é identificar um conjunto de parâmetros materiais de um modelo de forma que sob determinadas condições operacionais, a resposta do

modelo numérico seja a mais próxima possível da resposta do sistema sob as mesmas condições.

Diversos autores fizeram a estimação de parâmetros de modelos viscoelásticos lineares (Huang *et al.*, 2010) e não lineares (Ganvir *et al.*, 2011) juntamente com a investigação da capacidade preditiva destes modelos sob diferentes condições ou tipos de escoamento. Na maioria dos casos, estes trabalhos utilizam como base para a estimação dados obtidos em diferentes escoamentos reométricos, como: reometria rotacional em regime oscilatório ou estacionário, nas geometrias de cone e prato, de pratos paralelos e de cilindros concêntricos; reometria capilar e reometria elongacional. No caso de reômetros rotacionais em modo oscilatório, os experimentos podem ser realizados tanto na região linear da resposta tensão-deformação (SAOS - *Small Amplitude Oscillatory Shear*), como na região não linear (LAOS - *Large Amplitude Oscillatory Shear*) (Calin, Wilhelm e Balan, 2010). Por outro lado, em regime oscilatório, os reômetros rotacionais fornecem dados transientes e estacionários para faixas de taxa de deformação baixas, enquanto os reômetros capilares fornecem dados de regime estacionário a elevadas taxas de deformação.

Os diferentes tipos de dados obtidos nos experimentos descritos acima, entretanto, estão geralmente associados a parâmetros constitutivos específicos. Assim, por exemplo, dados de reometria capilar estão associados basicamente à viscosidade do fluido e sua dependência com a taxa de deformação e dados de reometria rotacional oscilatório de baixa amplitude com os parâmetros lineares de modelos viscoelásticos. Sendo assim, diversos experimentos e diversos conjuntos diferentes de dados são necessários para caracterizar completamente um fluido viscoelástico. Além disso, para o caso de estimação de parâmetros não lineares, os dados obtidos por medidas reométricas na região não linear dependem não

somente do tipo de material, mas também do histórico de deformação sofrida por este, o que varia de processo para processo. Desta forma, a estimação de parâmetros a partir de escoamentos reométricos não assegura que se terá o melhor conjunto de parâmetros em termos de adequação do modelo a uma operação de processamento específica.

Desta forma, seria vantajosa em algumas situações uma metodologia de estimação de parâmetros viscoelásticos que utilizasse como referência escoamentos envolvendo fenômenos viscoelásticos similares àqueles que ocorrem durante as operações de processamento. Neste contexto, a modelagem em fluidodinâmica computacional tem potencial para ser utilizada na obtenção de parâmetros viscoelásticos, pois permite a estimação de parâmetros de partir da modelagem de problemas de escoamento mais complexos que aqueles encontrados nas técnicas reométricas usuais.

Entretanto, existem ainda poucos trabalhos na literatura em que a estimação de parâmetros viscoelásticos foi baseada na modelagem em CFD de escoamentos. Em realidade, a maior parte dos estudos que utilizam mecânica computacional para estimação de parâmetros reológicos são relativos ao estudo de propriedades de sólidos. O primeiro trabalho a respeito deste assunto foi apresentado por *Kavanagh* (1971). Ele identificou as propriedades mecânicas de um material compósito comparando medidas de deformação obtidas em ensaios de tração com resultados numéricos da análise em elementos finitos do respectivo experimento. Tipicamente os parâmetros elásticos (como módulo de Young e coeficiente de Poisson) de um material sólido são determinados através de ensaios mecânicos em corpos de prova padronizados submetidos a determinadas cargas, plotando-se o diagrama da deformação em função da força aplicada. Desde então esta metodologia tem sido muito utilizada na estimação dos parâmetros elásticos de diversos tipos de materiais sólidos, como metais

(Ghouati e Gelin, 2001; Cooreman et al., 2007; Moussawi et al., 2013; Kajberg e Lindkvist, 2004; Liu et al., 2007; Shi, Sol e Hua, 2006; Pottier, Toussaint e Vacher, 2011), compósitos (Lecompte et al., 2007; Molimard et al., 2005; Sol et al., 1997), alimentos (Wang e Hirai, 2011), polímeros (Pagnacco, Moreau e Lemosse, 2007), materiais rochosos (Pinchler, Lackner e Mang, 2003) e materiais biológicos (Meuwissen et al., 1998).

No tocante à estimação de parâmetros viscoelásticos baseada em modelagem em CFD, o único trabalho encontrado na literatura foi o de Park, Hong e Lim (2007), que estimaram parâmetros de fluidos viscoelásticos usando medidas de velocidade em um canal de seção quadrada, no qual ocorrem escoamentos secundários quando o fluido que escoar é viscoelástico. As medidas experimentais de velocidade foram obtidas com técnicas de rastreamento de partículas e os resultados numéricos foram gerados através de simulação em elementos finitos. Estimou-se os parâmetros dos modelos UCM (*Upper Convected Maxwell*), Oldroyd-B e PTT.

Em geral os trabalhos mencionados nos parágrafos anteriores, tanto em mecânica de sólidos como de fluidos, relataram resultados satisfatórios para os parâmetros estimados, com erros próximos aos encontrados em trabalhos nos quais foi utilizada a respectiva metodologia clássica de estimação de parâmetros, o que permite concluir que a abordagem de estimação de parâmetros reológicos baseada em fluidodinâmica computacional pode ser uma boa alternativa aos métodos clássicos de obtenção de parâmetros viscoelásticos.

Neste trabalho o estudo será focado na proposição de uma metodologia de estimação de parâmetros viscoelásticos baseada no *solver* viscoelasticInterFoam (Favero et al., 2010), desenvolvido anteriormente em nosso grupo de pesquisa. Apesar de que a referida metodologia foi desenvolvida de maneira que possa ser aplicada a diferentes tipos de

escoamentos, o fenômeno do inchamento do extrusado será utilizado como problema base para desenvolvimento e validação da metodologia, sendo que sua aplicação a outros tipos de escoamentos deverá ser feita em estudos posteriores. Sendo assim, a descrição do inchamento do extrusado, dos fatores que o afetam e uma breve revisão bibliográfica da simulação numérica deste fenômeno serão apresentados na seção seguinte.

2.3 Inchamento do extrusado

O inchamento do extrusado é um fenômeno viscoelástico não linear tipicamente observado no processo de extrusão de polímeros fundidos. Neste processo, o material é forçado continuamente através de uma matriz, de modo a adquirir determinado formato e dar origem a um perfil de seção transversal constante. Exemplos de produtos formados via extrusão polimérica são tubos, perfis, chapas, filamentos e filmes.

O fenômeno de inchamento do extrusado, representado na Figura 2.1, consiste no aumento da seção transversal do filete de fluido ao emergir da abertura da matriz para a atmosfera, devido à relaxação de tensões que ocorre na transição de um escoamento confinado para um escoamento com superfície livre (*Bird, Armstrong e Hassager, 1987*). A predição do inchamento do extrusado é de grande importância para o controle da espessura de parede do produto final, a qual precisa ser grande o suficiente para evitar ruptura mecânica e pequena o suficiente para evitar desperdício de matéria-prima. Neste contexto o inchamento do extrusado é considerado um dos principais obstáculos na determinação das dimensões geométricas de matrizes para extrusão e, conseqüentemente, na qualidade final dos produtos.

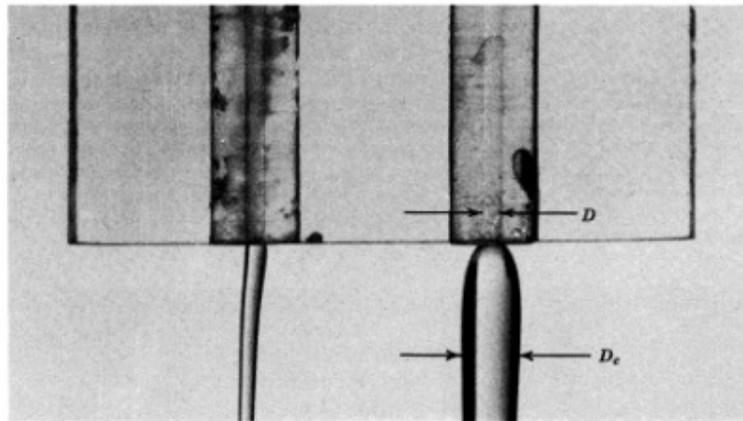


Figura 2.1: Representação do fenômeno de inchamento de extrusado de um fluido newtoniano (à esquerda) e viscoelástico (à direita) (Fonte: *Bird, Hassager e Armstrong, 1987*).

Entre as condições externas que afetam o inchamento do extrusado estão a temperatura, a tensão aplicada, relação entre comprimento e diâmetro do capilar (*Wong e Liang, 1997*) e força gravitacional (*Trang e Yeow, 1986*). Em geral sabe-se que o inchamento depende de propriedades viscoelásticas não lineares, como a primeira diferença de tensões normais e viscosidade elongacional.

O inchamento do extrusado é usualmente quantificado pela razão de inchamento, que é a relação entre o diâmetro da seção transversal do filete de fluido e o diâmetro do capilar. Dependendo da elasticidade do fluido a razão de inchamento pode chegar a 4 (*Huang e White, 1979*) para fluidos viscoelásticos, enquanto para fluidos newtonianos a razão de inchamento fica em torno de 1,13 (*Bird, Armstrong e Hassager, 1987*).

Muitos pesquisadores investigaram a simulação do inchamento do extrusado usando diversos modelos constitutivos, tanto diferenciais como integrais. Entre os modelos diferenciais utilizados pode-se citar Oldroyd-B (*Crochet e Keunings, 1982; Phan-Thien, 1988*), Phan-Thien-Tanner (*Phan-Thien, Tanner e Xue, 1999; Ganvir et al., 2009; Xu et al., 2011; Guillet et al., 1996*), e Extended-Pom-Pom (*Ganvir et al., 2011*). Em relação aos

integrais, o modelo KBK-Z tem sido o mais utilizado (*Huang et al.*, 2010; *Mitsoulis*, 2010; *Luo e Tanner*, 1986).

Além da seleção de uma equação constitutiva com capacidade preditiva adequada, uma dificuldade adicional na predição do inchamento do extrusado através de simulação numérica reside na captura da superfície livre envolvida no escoamento e também na adequação do modelo viscoelástico. A escolha de um esquema numérico apropriado também possui grande influência na predição do perfil de inchamento. Entre as abordagens relativas à captura da superfície livre encontra-se na literatura *Mark-and-Cell* (*Harlow e Welch*, 1965; *Tomé et al.*, 2010), abordagem mista Euleriana-Lagrangiana (*Ganvir et al.*, 2011) e VOF (*Volume-of-Fluid*) (*Hirt e Nichols*, 1981), sendo esta última vantajosa com relação às demais devido ao menor custo computacional necessário. É possível encontrar na literatura trabalhos onde foram testados também diferentes métodos de discretização do domínio, como método espectral (*Russo*, 2009), método dos elementos de contorno (*Phan-Thien*, 1988), diferenças finitas (*Ganvir et al.*, 2011), elementos finitos (*Huang et al.*, 2010; *Fulchiron et al.*, 1997), volumes finitos (*Favero et al.*, 2010; *Azaiez, Guenette e Ait-Kadi*, 1996), sendo este último o mais utilizado devido ao menor tempo computacional para a solução e maior estabilidade numérica (*Phan-Thien, Tanner e Xue*, 1999).

Neste trabalho será usado para modelar o fenômeno do inchamento do extrusado o modelo não linear de Phan-Thien-Tanner na forma exponencial, pois conforme verificado na literatura mencionada acima, este modelo possui boa capacidade preditiva. Como método de discretização será usado o método dos volumes finitos e como estratégia de captura da interface será usado o método VOF. A descrição destes métodos e da equação constitutiva será dada no Capítulo 3.

Capítulo 3

Metodologia

Conforme mencionado no capítulo de introdução, o objetivo deste trabalho é apresentar uma metodologia de estimação de parâmetros baseada na comparação recursiva entre resultados experimentais e a simulação via fluidodinâmica computacional do experimento em questão. Para verificar a implementação desta metodologia, dois estudos de caso foram escolhidos. O primeiro estudo de caso consiste na estimação da viscosidade de um fluido newtoniano, utilizando como referência valores de queda de pressão obtidos para diferentes vazões através da solução analítica do escoamento em um canal formado por duas placas paralelas. O segundo estudo de caso consiste na estimação do parâmetro não linear do modelo viscoelástico de Phan-Thien-Tanner através da comparação entre os perfis de diâmetro obtidos numericamente e experimentalmente para o inchamento do fluido ao emergir de um capilar.

A seguir serão apresentadas a descrição, modelagem matemática, ferramentas utilizadas e estratégia de otimização utilizados na implementação de ambos os casos de estudo.

3.1 Descrição dos estudos de caso

3.1.1 Escoamento entre placas paralelas

Para o caso de estudo do escoamento entre placas paralelas, as dimensões da geometria foram $0,5 \times 0,2 \times 0,08$ m. As dimensões das placas na direção do escoamento são muito maiores do que as outras dimensões, de forma a garantir que o escoamento seja completamente desenvolvido e a validade da solução analítica de Hagen-Poiseuille. As condições de contorno usadas foram: uma entrada com velocidade especificada, uma saída com pressão nula e paredes com condição de não deslizamento nas superfícies inferior e superior. A Figura 3.1 mostra a representação esquemática da geometria em questão juntamente com as condições de contorno utilizadas.

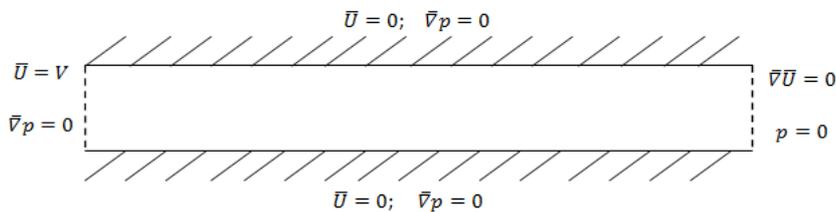


Figura 3.1: Representação esquemática das condições de contorno para o escoamento entre placas paralelas.

3.1.2 Escoamento na saída de um capilar

O problema de escoamento considerado neste caso será o inchamento do filete de fluido na saída de um canal de seção circular de diâmetro pequeno, como os que são utilizados em reômetros capilares. Por este motivo, este problema será denominado neste trabalho como escoamento na saída de um capilar. A representação esquemática da geometria utilizada, com capilar de dimensões $D_1 = 2$ mm, $L_1/D_1 = 5$, $L_2 = 15$ e $D_2 = 30$ mm, é

apresentada na Figura 3.2, juntamente com a representação do filete de fluido que emerge do capilar e do inchamento sofrido pelo fluido na saída deste.

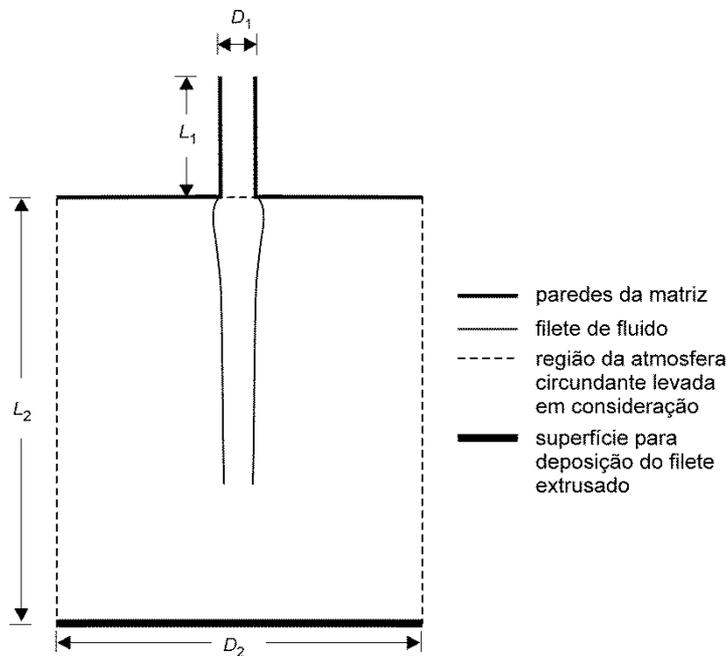


Figura 3.2: Representação esquemática do escoamento na saída de um capilar.

As condições de contorno para este escoamento são: *i)* uma entrada com velocidade especificada no topo do capilar; *ii)* três condições de parede, correspondentes à superfície lateral do capilar, à superfície inferior da matriz onde está localizado o capilar e à superfície sobre a qual o filete extrusado será depositado; e *iii)* abertura para a atmosfera nas superfícies laterais que limitam o domínio de interesse. A Figura 3.3 mostra a representação esquemática das condições de contorno para o caso.

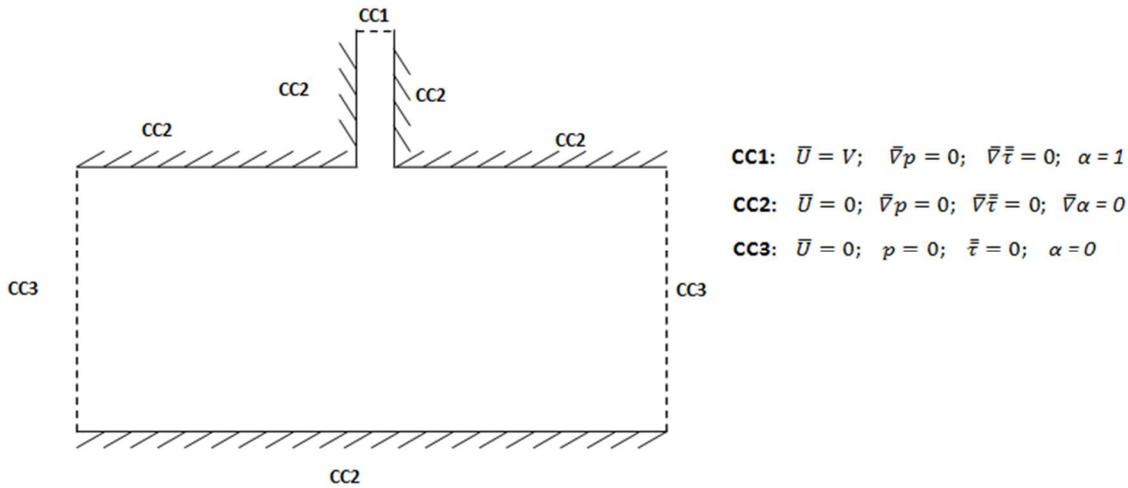


Figura 3.3: Condições de contorno para o caso do escoamento na saída de um capilar.

3.2 Modelagem matemática

3.2.1 Equações governantes

Considerando o escoamento laminar, isotérmico e incompressível, as equações governantes são dadas pelo balanço de massa total (equação da continuidade) e pelo balanço de quantidade de movimento:

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

$$\frac{\partial(\rho \bar{U})}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{U} \bar{U}) = -\bar{\nabla} P - \bar{\nabla} \cdot \bar{\tau} + \rho \bar{g} \quad (3.2)$$

onde \bar{U} é o vetor velocidade, ρ é a massa específica, P é a pressão, $\bar{\tau}$ é o tensor das tensões viscosas e \bar{g} é a aceleração da gravidade.

Para completar o sistema formado pelas Equações 3.1 e 3.2, é necessária a especificação da equação constitutiva mecânica a ser utilizada para a descrição do comportamento reológico do fluido. No presente trabalho foram utilizadas duas equações constitutivas: a de fluidos newtonianos incompressíveis e a forma exponencial do modelo

Phan-Thien-Tanner. Este último modelo foi escolhido porque, além de simples, é capaz de descrever muitos comportamentos não lineares (*Phan-Thien e Tanner, 1977*).

A equação constitutiva de fluidos newtonianos incompressíveis é dada por:

$$\bar{\tau} = \mu \dot{\bar{\gamma}} \quad (3.3)$$

onde μ é a viscosidade newtoniana e $\dot{\bar{\gamma}}$ é o tensor taxa de deformação dado por:

$$\dot{\bar{\gamma}} = (\bar{\nabla}\bar{U} + [\bar{\nabla}\bar{U}]^T) \quad (3.4)$$

É importante salientar que no caso de estudo de escoamento de fluido newtoniano entre placas paralelas os dados de referência usados para a estimação de parâmetros tem origem na solução analítica para o gradiente de pressão ao longo do escoamento dada por Hagen-Poiseuille. Essa solução analítica consiste em um caso particular das equações de Navier-Stokes fazendo-se as seguintes simplificações: *i)* o escoamento é estacionário; *ii)* as placas são infinitas, de forma que o escoamento pode ser considerado bidimensional e as componentes da velocidade na direção y e z são iguais a zero ($U_y = U_z = 0$) (considerando que a direção do escoamento do fluido é a direção x); *iii)* o escoamento é completamente desenvolvido; *iv)* o escoamento é laminar; *v)* o fluido é newtoniano e incompressível. Assumindo essas hipóteses, a pressão passa a ser função de x somente e o gradiente de pressão é dado por:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{12\dot{Q}_V\mu}{wh^3} \quad (3.5)$$

onde \dot{Q}_V é a vazão volumétrica, μ é a viscosidade do fluido, w é a profundidade das placas e h é a distância entre as placas.

No caso de fluidos viscoelásticos, o tensor das tensões $\bar{\tau}$ pode ser dividido em duas parcelas:

$$\bar{\tau} = \bar{\tau}_S + \bar{\tau}_P \quad (3.6)$$

onde $\bar{\tau}_S$ é a contribuição da tensão do solvente newtoniano e $\bar{\tau}_P$ é a contribuição polimérica para a tensão.

A contribuição do solvente newtoniano é dada por:

$$\bar{\tau}_S = \eta_S \dot{\gamma} \quad (3.7)$$

onde η_S é a viscosidade do solvente.

No caso de modelos multimodos com N modos, o tensor das tensões, $\bar{\tau}_P$, é dado pela soma das componentes de cada modo, conforme:

$$\bar{\tau}_P = \sum_{i=1}^N \bar{\tau}_{P_i} \quad (3.8)$$

Para o modelo Phan-Thien-Tanner Exponencial, cada tensor $\bar{\tau}_{P_i}$ satisfaz a equação constitutiva no formato:

$$\exp\left(\frac{\varepsilon_i \lambda_i}{\eta_{P_i}} \text{tr}(\bar{\tau}_{P_i})\right) \bar{\tau}_{P_i} + \lambda_i \square_{\tau_{P_i}} = 2\eta_{P_i} \dot{\gamma} \quad (3.9)$$

onde ε é o parâmetro relacionado à viscosidade elongacional, ζ relaciona a diferença de tensões normais, λ é o tempo de relaxação, η é a viscosidade do polímero, $\text{tr}(\bar{\tau}_{P_i})$ é o traço de $\bar{\tau}_{P_i}$, termo que leva em conta a energia elástica da rede e $\square_{\tau_{P_i}}$ é a derivada de Gordon-

Schowalter, que tem a forma:

$$\square_{\tau_{P_i}} = \frac{D}{Dt} \bar{\tau}_{P_i} - [\bar{\nabla} \bar{U}^T \cdot \bar{\tau}_{P_i}] - [\bar{\tau}_{P_i} \cdot \bar{\nabla} \bar{U}] + \zeta_i (\bar{\tau}_{P_i} \cdot \dot{\gamma} + \dot{\gamma} \cdot \bar{\tau}_{P_i}) \quad (3.10)$$

3.2.2 Natureza multifásica do escoamento

No caso específico do problema do inchamento na saída de um capilar, a natureza multifásica do escoamento deve ser considerada, já que a região de escoamento na parte exterior ao capilar é ocupada inicialmente por ar e, à medida que o fluido emerge do capilar, uma parcela deste ar é deslocada pelo filete de fluido que se forma. Assim sendo, há a necessidade de utilizar uma técnica de captura da posição da interface ar/(filete de polímero) ao longo do tempo. Essa interface é também conhecida como superfície livre e se caracteriza pela ocorrência de descontinuidade em uma ou mais variáveis (*Hirt e Nichols, 1981*).

Para incluir uma superfície livre na modelagem do escoamento é necessário, além das equações da conservação e constitutiva, um esquema para capturar/rastrear a interface. Neste trabalho foi usada a metodologia Volume de Fluido (*Volume of Fluid, VOF*) (*Hirt e Nichols, 1981*), válida para escoamentos incompressíveis com superfícies livres em movimento. Este método usa uma função indicadora de fase, α (também conhecida como a fração volumétrica), que é a fração de cada célula que está preenchida com a fase de referência. De acordo com seu significado físico, a função α será igual à unidade se o volume de controle considerado estiver preenchido pela fase 1 (fase de referência) e terá valor nulo se este estiver preenchido pela fase 2, de modo que $0 < \alpha < 1$ indica a presença de interface no volume considerado.

Uma vez conhecida a velocidade, o campo escalar α pode ser atualizado pela integração no tempo de:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\alpha \bar{U}) + \bar{\nabla} \cdot (\alpha(1 - \alpha) \bar{U}_r) = 0 \quad (3.11)$$

onde \bar{U}_r é o campo de velocidade submetido à compressão na interface (*Rusche, 2003*).

A metodologia VOF permite que o escoamento de dois fluidos distintos seja resolvido como se fosse o escoamento de um único fluido, ou seja, resolvem-se as mesmas equações

para ambos os fluidos. As propriedades físicas em um ponto qualquer do domínio são dadas pela média ponderada correspondente à fração volumétrica de fluido naquele volume. Assim, tem-se de forma generalizada para uma propriedade qualquer θ :

$$\theta = \alpha\theta_{fluido_1} + (1 - \alpha)\theta_{fluido_2} \quad (3.12)$$

3.3 Solução numérica dos modelos

Para a solução do sistema de equações descrito na Seção 3.2, foi utilizado o pacote OpenFOAM (*Open Source Field Operation and Manipulation*) (OpenFOAM, 2012), na sua versão 2.1.1. A discretização das equações no OpenFOAM é baseada no método dos volumes finitos (Versteeg e Malalasekera, 1995) formulado com arranjo de variáveis co-localizadas, com os campos de pressão e velocidade resolvidos por métodos segregados (Jasak, 1996).

O OpenFOAM é um software livre, de código aberto, sendo composto por módulos escritos em linguagem C++. Tais módulos são chamados de *solvers* e consistem em ferramentas de resolução de problemas envolvendo campos tensoriais relacionados principalmente à fluidodinâmica computacional, incluindo escoamentos turbulentos, multifásicos e reativos. O OpenFOAM, por ter seu código aberto, permite que o usuário adapte os *solvers* existentes no pacote ou até mesmo crie os seus próprios *solvers*, de acordo com a natureza do problema que deseja resolver.

O *software* inclui ferramentas de pré-processamento (geração de malha, dicionários de condições de contorno, controle das simulações e esquemas numéricos) e pós-processamento de dados (visualização de resultados). Além disso, no que se refere mais especificamente a opções para a solução numérica das equações discretizadas, o OpenFOAM oferece ainda grande variedade de esquemas de interpolação e pré-condicionadores para a resolução dos sistemas algébricos resultantes da discretização.

As simulações do OpenFOAM passam por 4 etapas principais:

i) Geração da estrutura de arquivos necessária para uma simulação: para a resolução de um caso é criado um diretório principal que deve conter os seguintes subdiretórios: o diretório “/0” (que deva conter as informações a respeito de condições iniciais), o “/constant” (para informações relativas a geometria, malha e propriedades dos fluidos) e o diretório “/system” (contendo os parâmetros de controle da convergência das simulações e especificação dos esquemas numéricos).

ii) Pré-processamento: é a etapa de modelagem do problema. Engloba a geração da geometria e da malha, especificação das condições iniciais e condições de contorno, especificação do passo de tempo da simulação, *solvers* numéricos e seus parâmetros, critérios de tolerância, propriedades materiais, entre outras informações necessárias à modelagem.

iii) Resolução numérica do problema: onde ocorre a resolução das equações que compõem o modelo. As equações são discretizadas e aplicadas em cada volume de controle.

iv) Pós-processamento dos dados: visualização dos resultados obtidos na etapa anterior.

Nas seções seguintes são descritas as opções e parâmetros utilizados no presente trabalho com relação aos diferentes aspectos relacionados à especificação do problema e do método de resolução no OpenFOAM.

3.3.1 Especificação das condições de contorno escolhidas para os problemas de escoamento estudados

A solução do problema de escoamento entre placas paralelas foi considerada bidimensional, condição obtida através da especificação da condição de contorno *empty* nas superfícies dianteiras e traseiras da geometria. Na entrada do canal foram especificados diferentes valores para a velocidade através da condição *fixedValue*, enquanto para a pressão a condição de contorno especificada foi *zeroGradient*. A Tabela 3.1 mostra as condições de contorno utilizadas para as variáveis em cada superfície da geometria e a Tabela 3.2 mostra o significado físico das condições de contorno no OpenFOAM.

Tabela 3.1: Condições de contorno para pressão e velocidade no escoamento entre placas paralelas.

Superfície	Velocidade	Pressão
Entrada	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>
Saída	<i>zeroGradient</i>	<i>fixedValue</i>
Paredes fixas	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>
Paredes com normal na direção sem solução	<i>empty</i>	<i>empty</i>

Tabela 3.2: Significado das condições de contorno no OpenFOAM.

Condição de contorno	Significado físico
<i>fixedValue</i>	Especifica um valor fixo para a variável na superfície.
<i>zeroGradient</i>	Especifica gradiente nulo para a variável na direção normal à superfície.
<i>empty</i>	Anula a solução das componentes das variáveis na direção normal ao plano da superfície.

As condições iniciais para a velocidade foram especificadas como 0,1 m/s e 0,2 m/s, conforme mostrado na Figura 3.4. Para a pressão, o valor inicial foi nulo.

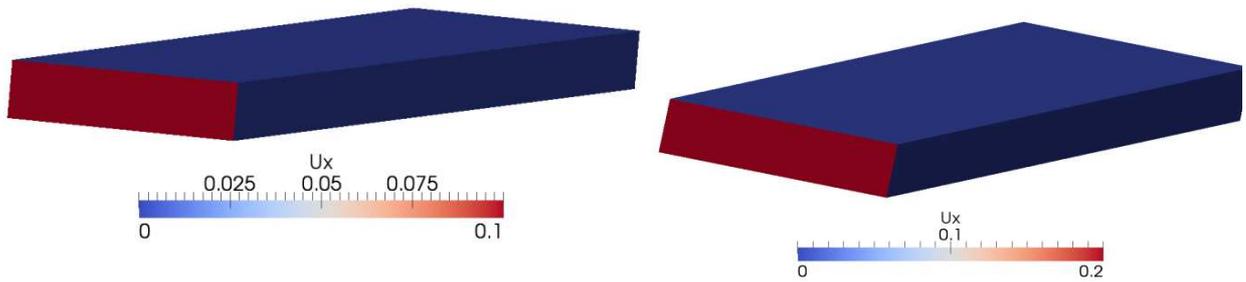


Figura 3.4: Diferentes campos iniciais de velocidade.

As condições de contorno especificadas no OpenFOAM para modelar o problema de escoamento na saída de um capilar são apresentadas na Tabela 3.3: uma entrada com perfil uniforme de velocidade especificado no topo do capilar através da condição *fixedValue*, paredes com condição de não deslizamento nas superfícies que compõem o capilar, superfície inferior da matriz onde se encontra o capilar e superfície inferior onde se depositará o filete de fluido extrusado. A solução é bidimensional, logo as superfícies anterior e posterior da geometria receberam a condição de contorno *empty*. Nas laterais da geometria a condição para a velocidade *pressureInletOutletVelocity* permite que as superfícies tenham entrada ou saída de fluido, dependendo da direção da velocidade calculada. Esse comportamento foi obtido da mesma forma para a fração volumétrica com a especificação da condição de contorno *inletOutlet*. A Figura 3.5 mostra a geometria e os nomes atribuídos às superfícies.

À velocidade do polímero na entrada do capilar foi atribuído o valor 0,015 m/s com um perfil uniforme, de forma a obter o valor da taxa de cisalhamento semelhante ao experimental, conforme testes preliminares que serão apresentados no Capítulo 4. A fração volumétrica de polímero, α , foi especificada com valor igual a 1 na região do capilar, ou seja, a simulação inicia com o capilar completamente preenchido pelo polímero em seu interior e o restante da cavidade preenchido apenas com ar, conforme mostra a Figura 3.6. As variáveis restantes tiveram inicialização com valor igual a zero.

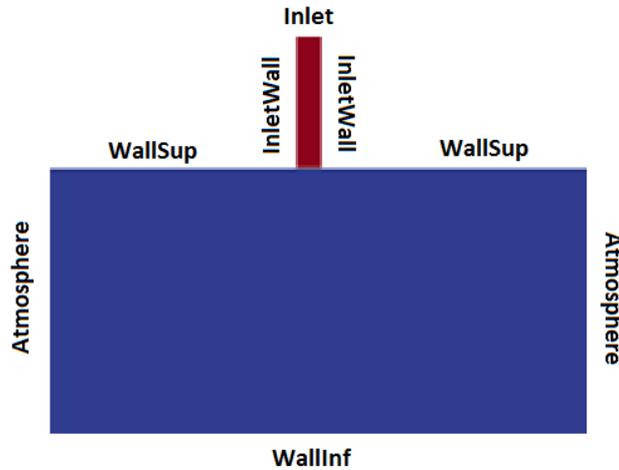


Figura 3.5: Geometria para o caso de escoamento na saída do capilar.

Tabela 3.3: Condições de contorno para o escoamento na saída do capilar

Superfície	Nome atribuído	Velocidade (m/s)	Pressão (Pa)	Tensão (Pa)	Fração Volumétrica
Entrada	Inlet	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>fixedValue</i>
Paredes do capilar	InletWall	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
Parede Superior	WallInf	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
Parede Inferior	WallSup	<i>fixedValue</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>fixedValue</i>
Superfícies laterais	Atmosphere	<i>pressureInlet</i> <i>OutletVelocit</i> <i>y</i>	<i>fixedValue</i>	<i>fixedValue</i>	<i>inletOutlet</i>
Superfícies com normal na direção sem solução	FrontAndBack	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>	<i>empty</i>

Para este estudo de caso, também foram realizados testes nos quais foi considerado o plano de simetria existente, de forma a reduzir o tempo computacional e diminuir o tempo necessário à solução chegar ao estado estacionário. Esta estratégia foi utilizada em condições de escoamento para as quais a solução obtida para filete de fluido podia também ser considerada simétrica com relação ao eixo central, o que algumas vezes não acontece (*Favero et al., 2010*). Em tal caso, o problema foi analisado utilizando uma condição de simetria na

linha central e com a substituição da parede inferior (i.e., a superfície para deposição do filete extrusado, Figura 3.3) por uma condição de abertura para a atmosfera, conforme apresentado na Figura 3.7. Também de forma a reduzir custo computacional, a dimensão L_2 , distância entre a saída do capilar e a superfície inferior da geometria, foi reduzida de 15 mm para 10 mm. As dimensões restantes da geometria não foram alteradas. A condição de contorno especificada no OpenFOAM para a linha de simetria foi a condição *symmetryPlane*. Para a superfície inferior da geometria, no lugar da condição de parede foi especificada uma abertura para a atmosfera usando a condição para a velocidade *pressureInletOutletVelocity* e para a fração volumétrica a condição *inletOutlet*. Para as demais superfícies foram mantidas as condições especificadas na Tabela 3.3.

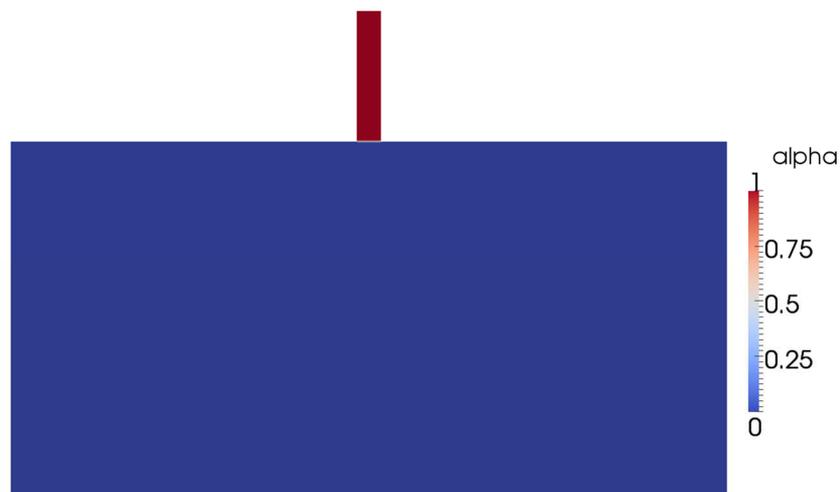


Figura 3.6: Condição inicial para a fração volumétrica de polímero.

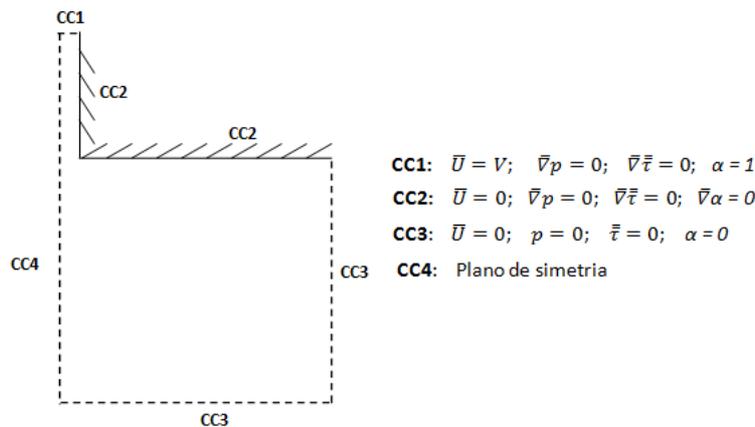


Figura 3.7: Condições de contorno modificadas para o escoamento na saída do capilar.

3.3.2 Solvers utilizados

Neste trabalho foram utilizados dois *solvers* implementados no OpenFOAM: o *icoFoam* e *viscoelasticInterFoam*.

O *solver* *icoFoam* foi desenvolvido para a resolução de problemas de escoamento interno, laminar, isotérmico e incompressível de fluidos newtonianos, de modo que o modelo matemático utilizado é composto somente pela equação de Navier-Stokes. Neste trabalho foi usado na solução do escoamento entre placas paralelas.

O *solver* *viscoelasticInterFoam* é utilizado para a análise de escoamentos multifásicos e isotérmicos de fluidos viscoelásticos (Favero, 2009; Favero et al., 2010). Este *solver* é uma extensão do *viscoelasticFluidFoam*, disponível no OpenFoam para resolução de problemas envolvendo escoamento interno de fluidos viscoelásticos (Favero, 2009; Favero et al., 2010). O *solver* permite a utilização de diversos modelos constitutivos, tais como Oldroyd-B, White-Metzner, Giesekus, Leonov, modelos do tipo FENE (*Finitely Extensible Nonlinear Elastic*), modelo de Phan-Tien-Tanner e derivados e modelos do tipo Pom-Pom. No presente trabalho este *solver* foi usado nas simulações do escoamento na saída de um capilar.

3.3.3 Algoritmo de solução das equações governantes

O algoritmo numérico de solução das variáveis envolvidas no estudo de caso envolvendo fluido viscoelástico utiliza o algoritmo PISO (*Pressure-Implicit Splitting Operator*) (Issa, 1986) para o tratamento do acoplamento entre pressão e velocidade e pode ser resumido conforme abaixo:

- i) Obtenção do campo de frações volumétricas através da solução da Equação 3.11;
- ii) Dado os campos iniciais de velocidade, pressão e tensão, resolução implícita da equação da quantidade de movimento (Equação 3.2) obtendo-se um campo intermediário de velocidades;
- iii) Através do algoritmo PISO, estimação de um novo campo de pressão (através da solução de uma equação do tipo Poisson) e conseqüentemente a correção do campo de velocidades para um valor que satisfaz a equação da continuidade (Equação 3.1);
- iv) Obtenção do campo de tensões através da resolução da equação constitutiva com o campo atualizado de velocidade obtido no passo anterior;
- v) Repetição dos passos anteriores iterativamente até que haja convergência da solução.

Para o caso de estudo do escoamento de um fluido newtoniano entre placas, onde as variáveis a serem resolvidas resumem-se a pressão e velocidade, o algoritmo de solução se limita aos passos *ii*, *iii* e *v*.

3.3.4 Esquemas e parâmetros numéricos utilizados

Para todas as simulações realizadas neste trabalho foi usado o esquema *Euler* implícito na discretização das derivadas temporais. Como esquema de interpolação utilizou-se *Gauss Upwind* para os termos advectivos da equação de conservação da quantidade de movimento, equação do método VOF (Eq. 3.11) e equação constitutiva viscoelástica. Uma descrição destes métodos pode ser encontrada em *Patankar* (1981).

Para a resolução dos sistemas lineares foi usado o método dos Gradientes Conjugados (*Hesteness e Stiefel*, 1952) para todas as variáveis envolvidas. Para a pressão foi usado o *solver* PCG (*Preconditioned Conjugate Gradient*) com uma tolerância de 1×10^{-10} e pré-condicionamento DIC (*Diagonal Incomplete-Cholesky*). Para a velocidade e tensão foi usado o *solver* PBiCG (*Preconditioned Bi-conjugate Gradient*) com tolerâncias de 1×10^{-7} e pré-condicionamento DILU (*Diagonal Incomplete-LU*).

Além dos parâmetros mencionados no parágrafo anterior, relacionados especificamente à solução dos sistemas linearizados, nas simulações foram especificados também o número de Courant e o passo de tempo máximo. O número de Courant para uma célula é definido como:

$$Co = \frac{U \delta t}{\delta x} \quad (3.13)$$

onde δt é o passo de tempo, U é a magnitude da velocidade na célula e δx é o tamanho da célula na direção da velocidade. Deve-se garantir $Co < 1$ para todo o domínio e o valor de δt deve ser escolhido para o pior caso, ou seja, o Co máximo correspondente a um valor alto de velocidade associado a uma célula pequena. Em todas as simulações realizadas neste trabalho, foi especificado o valor máximo para o número de Courant como sendo 0,1 e para o passo de tempo foi especificado o valor máximo de 1×10^{-5} s.

Para análise de convergência em cada passo de tempo foi feito o acompanhamento dos resíduos finais para a equação da continuidade, equação da conservação da quantidade de movimento e equação do método de captura da interface. Foi especificado valor máximo de 1×10^{-5} para todos os resíduos. Este valor foi especificado por ser tipicamente utilizado em trabalhos acadêmicos envolvendo simulações em CFD. No capítulo de resultados serão apresentados os gráficos dos resíduos em função do passo de tempo mostrando a convergência da solução dos problemas.

3.3.5 Paralelização e tempo de simulação

As simulações foram executadas em um computador com processador Intel® Core™ i5-2400 3.10 GHz de processamento e 4 núcleos de processamento. O pacote OpenFOAM permite a execução dos casos em paralelo. Neste processo, o domínio da solução é dividido em partes e alocado em diferentes processadores. As simulações do caso de geometria de placas paralelas foram executadas em série por se tratar de malhas com número relativamente baixo de células e o número de variáveis a ser envolvidas ser pequeno. O tempo de cada simulação isoladamente foi de 0,16 horas. Para o caso de escoamento na saída de um capilar foi usada a ferramenta de paralelização *decomposePar* e o método *simple*. A solução do problema foi dividida entre 4 processadores e o tempo de cada simulação isoladamente foi de 24 horas para a geometria onde não foi considerado o plano de simetria do escoamento e 8 horas para a geometria onde a simetria foi considerada. É importante mencionar que para simulações de fluidos viscoelásticos em geometrias bidimensionais, é necessário discretizar no mínimo duas componentes da velocidade, a pressão e três componentes do tensor das tensões para cada modo do modelo constitutivo. Esse procedimento leva a um aumento significativo do tempo computacional.

Ao final de cada simulação, a solução foi reconstruída através da ferramenta *reconstructPar*. É importante mencionar que somente as simulações foram paralelizadas a cada iteração do processo de otimização. O algoritmo de otimização, o qual será apresentado posteriormente, foi executado em série.

3.4 Estratégia para a estimação de parâmetros materiais

A definição da estratégia empregada na etapa de estimação dos parâmetros levou em consideração os seguintes aspectos: formulação matemática do problema de otimização, algoritmo geral para a obtenção dos parâmetros e ferramentas a serem utilizadas nas etapas de automatização das simulações e otimização.

3.4.1 Formulação do problema de otimização

A estimação de parâmetros foi formulada como a minimização de uma função objetivo $S(x)$:

$$x^{opt} = \min_{x \in R^n} S(x) \quad (3.14)$$

onde x é o vetor das variáveis ou parâmetros desconhecidos, x^{opt} é o ponto ótimo, e $S(x)$ foi definida em termos do método de mínimos quadrados, sendo, então, dada por:

$$S(x) = \sum_{i=1}^N [y_i(x) - y_i^{exp}(x)]^2 \quad (3.15)$$

No caso de estudo do escoamento de fluido newtoniano entre placas, $y_i(x)$ e $y_i^{exp}(x)$ representam respectivamente os valores numéricos e analíticos do gradiente de pressão ao longo da cavidade, $\partial P / \partial x$, para diferentes valores de velocidade. Para o caso de estudo do escoamento na saída de um capilar, $y_i(x)$ e $y_i^{exp}(x)$ representam respectivamente os valores

numéricos e experimentais dos diâmetros do filete de fluido para diferentes distâncias axiais a partir da saída do capilar.

3.4.2 Algoritmo geral de estimação

Conforme mencionado, o princípio básico da metodologia de estimação de parâmetros apresentada neste trabalho é comparar os dados experimentais ou solução analítica de um determinado escoamento com dados computados numericamente através da modelagem em CFD deste mesmo escoamento. Os parâmetros materiais no modelo numérico são atualizados recursivamente partindo de uma predição inicial, de modo que a diferença entre os resultados computados numericamente e os dados medidos experimentalmente esteja dentro de um critério de tolerância pré-estabelecido. A rotina é finalizada quando a mudança nos valores dos parâmetros durante duas avaliações subsequentes da função objetivo seja menor do que o valor de tolerância pré-determinado ou um número máximo de iterações seja alcançado, o que ocorrer primeiro. Em ambos os casos de estudo apresentados neste trabalho, o parâmetro de tolerância controlou a convergência da solução do problema, e o valor utilizado foi 1×10^{-3} . A Figura 3.8 mostra o fluxograma do algoritmo de estimação de parâmetros para os problemas apresentados.

A rotina de otimização selecionada baseia-se no método de Nelder-Mead (*Nelder e Mead, 1965*), que usa o algoritmo *simplex* na minimização de funções de n variáveis, onde ($n + 1$) vértices definem o *simplex*. Os valores da função nos vértices são avaliados e o vértice que possui o maior valor é substituído por um novo ponto, e assim sucessivamente até que um ponto ótimo seja encontrado. Este método foi escolhido pelo fato de não requerer a avaliação de gradientes da função objetivo ao longo da otimização. No caso de otimizações a partir de soluções numéricas representa uma vantagem, pois o cálculo das derivadas teria que ser feitos

por meio de perturbações nos parâmetros, aumentando consideravelmente o tempo de cômputo e apresentando limitações em termos de precisão.



Figura 3.8: Fluxograma do algoritmo de estimação de parâmetros materiais.

3.5 Ferramentas utilizadas na estimação de parâmetros

A fim de realizar a estimação recursiva dos parâmetros é de grande importância uma estreita conexão entre o pré-processamento, o pós-processamento e o algoritmo de otimização. Nesta seção serão descritas as ferramentas utilizadas para tornar recursivas as simulações, as ferramentas usadas para extrair os resultados numéricos e a ferramenta usada na etapa de estimação dos parâmetros.

3.5.1 Python

Python é uma linguagem de programação de alto nível orientada a objeto, de tipagem dinâmica, portátil, interpretada e interativa (Borges, 2010). Sua sintaxe é clara e concisa, o que favorece a legibilidade do código, tornando a linguagem mais produtiva. A linguagem inclui estruturas como listas, dicionários, operações com números complexos e uma vasta coleção de módulos prontos para uso, além de bibliotecas de terceiros que podem ser adicionadas. Também possui recursos encontrados em outras linguagens modernas, como geradores, introspecção, persistência e metaclasses, além de ser facilmente integrável a outras linguagens, como C++ e Fortran. A linguagem Python vem pré-instalada na maioria das distribuições Linux e os *scripts* podem ser executados através de um arquivo de extensão “.py” ou diretamente no terminal através de linhas de comando.

Python é considerada uma *glue language*, que é uma linguagem de programação que possui a capacidade de gerenciar códigos e conectar diferentes *softwares* que não são compatíveis entre si. Esta característica foi fundamental na escolha do Python como linguagem de programação usada para desenvolver a metodologia de estimação de parâmetros apresentada neste trabalho, pois dessa forma foi possível integrar as diferentes ferramentas

necessárias para alterar as condições iniciais do problema, rodar as simulações, manipular os resultados numéricos obtidos e executar a rotina de otimização a partir de um único *script*.

3.5.2 Numpy e Scipy

Numpy é o pacote principal necessário para a computação científica implementado em Python que possui suporte a vetores e matrizes multidimensionais. Possui uma vasta biblioteca de funções matemáticas, como funções de álgebra linear, álgebra vetorial, transformadas de Fourier. O suporte a vetores foi fundamental na implementação da etapa de estimação de parâmetros neste trabalho, dado que a função objetivo apresenta uma operação entre vetores.

SciPy é uma coleção de algoritmos matemáticos e funções com aplicações na matemática, ciência e engenharia, possui como biblioteca central o NumPy e permite manipular seus vetores. Oferece muitas rotinas de integração numérica e otimização. O Scipy possui implementado o subpacote *Optimize* que fornece rotinas de otimização e localização de raízes, como o algoritmo de otimização *fmin* que usa o método de Nelder-Mead utilizado no presente trabalho na minimização da função objetivo.

3.5.3 ParaView e VTK

ParaView é a interface gráfica para pós-processamento de dados distribuída juntamente com o pacote OpenFOAM. O ParaView permite a visualização de gradientes, linhas de fluxo e vetores, assim como a plotagem de gráficos de contorno, e a visualização de soluções transientes (*ParaView*, 2012). Possui sua arquitetura baseada em VTK (*Visualization Tool Kit*) (*VTK*, 2010), que consiste em uma plataforma para computação gráfica tridimensional, visualização e processamento de imagens voltado para a área científica.

Uma grande vantagem do ParaView é seu suporte à linguagem Python através do *Python scripting*, que consiste na manipulação das ferramentas do ParaView através de linhas de comando escritas em Python para fins de automatização. Essa característica fornece recursos de visualização de dados muito mais avançados dos encontrados na interface gráfica do ParaView, tais como a criação de filtros personalizados, a obtenção de valores de variáveis em pontos específicos e a plotagem destes valores em um sistema de coordenadas cartesiano ou polar ou utilização desses valores para fins de otimização. O suporte à linguagem Python se dá através do *paraview.simple*, módulo que contém diversas classes desenvolvidas com sintaxe facilitada com o propósito de facilitar a análise de dados e obtenção de resultados. A Tabela 3.4 apresenta algumas classes presentes nesse módulo que foram usadas na obtenção dos resultados das simulações numéricas para estimação dos parâmetros materiais.

Tabela 3.4. Funções do ParaView usadas na obtenção dos resultados numéricos

Função	Descrição
GetValue(<i>i</i>)	Retorna o valor da <i>i</i> -ésima componente de um vetor.
GetNumberOfPoints():	Retorna o número de pontos em um conjunto de dados
GetPointData():	Retorna um ponteiro para o objeto mantendo o atributo de dado do ponto. Inclui escalares, vetores, tensores e campo de dados.
GetNumberOfPoints()	Retorna o número de pontos em um vetor.
LegacyVTKReader	Carrega arquivos armazenados no formato VTK, o tipo de dados pode ser malhas estruturadas ou não-estruturadas, uniformes ou não-uniformes
PlotOverLine	Filtro que plota os valores de uma determinada variável ao longo de uma linha composta por pontos igualmente espaçados definida por duas coordenadas.

3.5.4 PyFoam

PyFoam é um conjunto de bibliotecas escritas em Python, de código aberto, que podem ser usadas para automatizar diversas rotinas do OpenFOAM, tais como analisar os arquivos *log* resultantes das simulações, executar *solvers* do OpenFOAM e analisar suas saídas simultaneamente, manipular arquivos de parâmetros da simulação e condições iniciais de forma não destrutiva e plotar os resíduos numéricos e outros parâmetros durante a simulação ou após seu término. A Tabela 3.5 apresenta alguns utilitários e classes utilizados no *script* de estimação de parâmetros materiais.

Tabela 3.5: Classes do PyFoam usadas no *script* de obtenção de parâmetros

Classe	Descrição
<i>pyFoamCloneCase</i>	Utilitário que clona um caso existente, copiando somente os arquivos necessários para o início de uma nova simulação, sem copiar os resultados do caso original.
<i>pyFoamRunner.py</i>	Utilitário que executa um <i>solver</i> ou chamadas para algumas ferramentas do OpenFOAM.
<i>ParsedParameterFile</i>	Classe que lê um arquivo do OpenFoam, modifica seus parâmetros e reescreve os arquivos, sem alterar a sintaxe do arquivo.

3.5.5 Rotina para a execução recursiva das simulações, obtenção dos resultados e estimação dos parâmetros

O primeiro passo para se executar recursivamente as simulações no OpenFOAM através de um *script* foi efetuar a duplicação de um caso base. Posteriormente foi feita a alteração das condições iniciais e propriedades materiais usando a classe *ParsedPrameterFile*. O Código 3.1 mostra a sintaxe com a qual o dicionário *U* do OpenFOAM, onde são especificadas as condições de contorno para a velocidade, foi modificado usando esta classe para os diferentes valores iniciais de velocidade no caso de estudo do escoamento entre placas paralelas. De forma semelhante, esta classe foi utilizada para alterar os parâmetros do

problema de otimização, i.e., a viscosidade newtoniana para este mesmo caso e o parâmetro viscoelástico para o caso do escoamento na saída do capilar.

Código 3.1: Sintaxe da classe *ParsedParameterFile*.

```
#importação da classe ParsedParameterFile:
From PyFoam.RunDictionary.ParsedParameterFile import ParsedParameterFile
#Especificação do arquivo a ser modificado:
f = ParsedParameterFile(path.join("0", "U"))

#Loop onde é buscada e alterada a condição de contorno "inlet":
for b in f["boundaryField"]:
if "inlet" in b:
f["boundaryField"][b]["value"]="uniform (%f 0 0)"%(v)
f["boundaryField"][b]["type"]="fixedValue"
#Gravação no disco das alterações feitas:
f.writeFile()
```

Em seguida foi feita a chamada do OpenFOAM para executar a simulação. Após concluída a simulação do caso, foi necessário converter os resultados obtidos para o formato VTK e especificar o caminho onde se encontra o arquivo com extensão “.vtk”. Após essa etapa, usando as ferramentas do ParaView descritas na Tabela 3.4, foram obtidos os valores para as variáveis nas regiões de interesse da geometria. No estudo de caso de escoamento entre placas paralelas a variável de interesse foi a pressão em diferentes pontos da cavidade. Para o escoamento de fluido viscoelástico foram obtidos os valores da fração volumétrica de polímero, α , ao longo de uma linha, de forma que uma mudança no valor da fração volumétrica de 0 para 1 indicou os pontos com a presença de interface. Assim, através da diferença das coordenadas destes pontos foi obtido o diâmetro do filete de fluido para diferentes distâncias da saída do capilar.

Esses resultados foram adicionados a um vetor e comparados com os valores experimentais/analíticos através da função objetivo e, através da chamada da função de otimização, um novo parâmetro foi estimado e o *script* se repetiu até que a diferença entre os

valores dos parâmetros de dois passos de otimização sucessivos fosse menor do que a tolerância pré determinada para o algoritmo de otimização.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo serão apresentados os resultados da estimação de parâmetros para os dois estudos de caso apresentados. Como as rotinas de estimação apresentadas neste trabalho utilizam, a cada passo de otimização, os resultados de simulações realizadas com os códigos CFD descritos no Capítulo 3, é fundamental assegurar que essas simulações sejam implementadas corretamente e os resultados obtidos sejam precisos. Desta forma, será abordada também, neste capítulo, a validação dos modelos usados na estimação dos parâmetros materiais para ambos os estudos de caso apresentados. Para fazer esta validação, as previsões numéricas obtidas usando os parâmetros estimados serão comparadas a soluções analíticas ou dados experimentais encontrados na literatura para os respectivos escoamentos de referência. Além disso, no estudo de caso de escoamento de fluido newtoniano entre placas paralelas será verificado se as condições para a utilização da solução analítica para a queda de pressão são satisfeitas e serão apresentados os estudos de independência de malha para todas as geometrias usadas.

4.1 Estudo de independência de malha

De forma a estudar o efeito do refinamento de malha no resultado das simulações numéricas, três esquemas de divisão de malha foram realizados. As malhas estruturadas foram geradas usando a ferramenta de geração de malhas do OpenFOAM *blockMesh*. Nas malhas usadas nas simulações do experimento de geometria de placas paralelas, o principal parâmetro a ser variado é o número de elementos na direção y , que é a direção perpendicular ao escoamento do fluido. Para a malha da geometria equivalente à saída de um capilar, um refinamento maior é necessário no centro da malha e na região próxima à saída do capilar, que é onde ocorre o inchamento do polímero, de forma a melhor captar o perfil de diâmetros. As Figuras 4.1, 4.2 e 4.3 apresentam detalhes das malhas, enquanto as Tabelas 4.1, 4.2 e 4.3 mostram os valores dos principais parâmetros relativos ao estudo de malha realizado para os casos estudados.

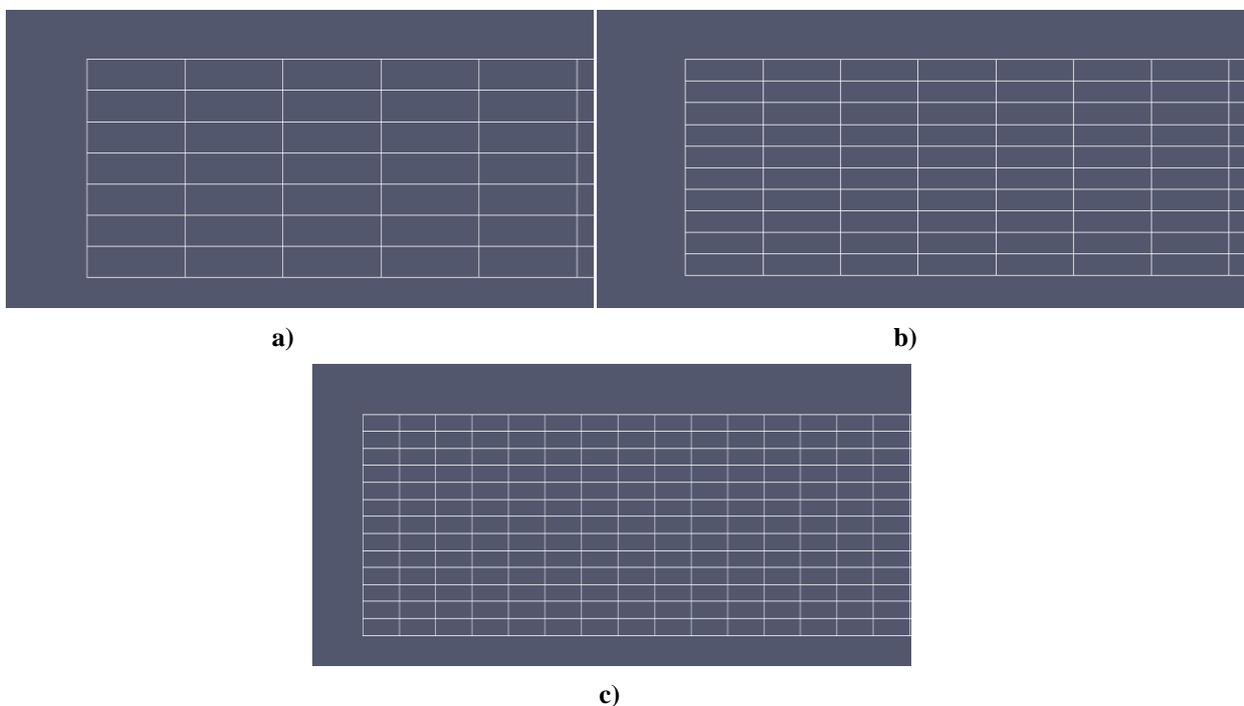


Figura 4.1: Detalhe da vista lateral das malhas usadas na geometria de placas paralelas: a) MeshP1, b) MeshP2 e c) MeshP3.

Tabela 4.1: Malhas usadas no estudo de independência de malha no caso de escoamento entre placas paralelas.

Malha	Número Total de Elementos	Volume máximo dos Elementos (m ³)
MeshP1	7.000	$1,14 \times 10^{-7}$
MeshP2	14.000	$5,71 \times 10^{-8}$
MeshP3	28.000	$2,79 \times 10^{-8}$

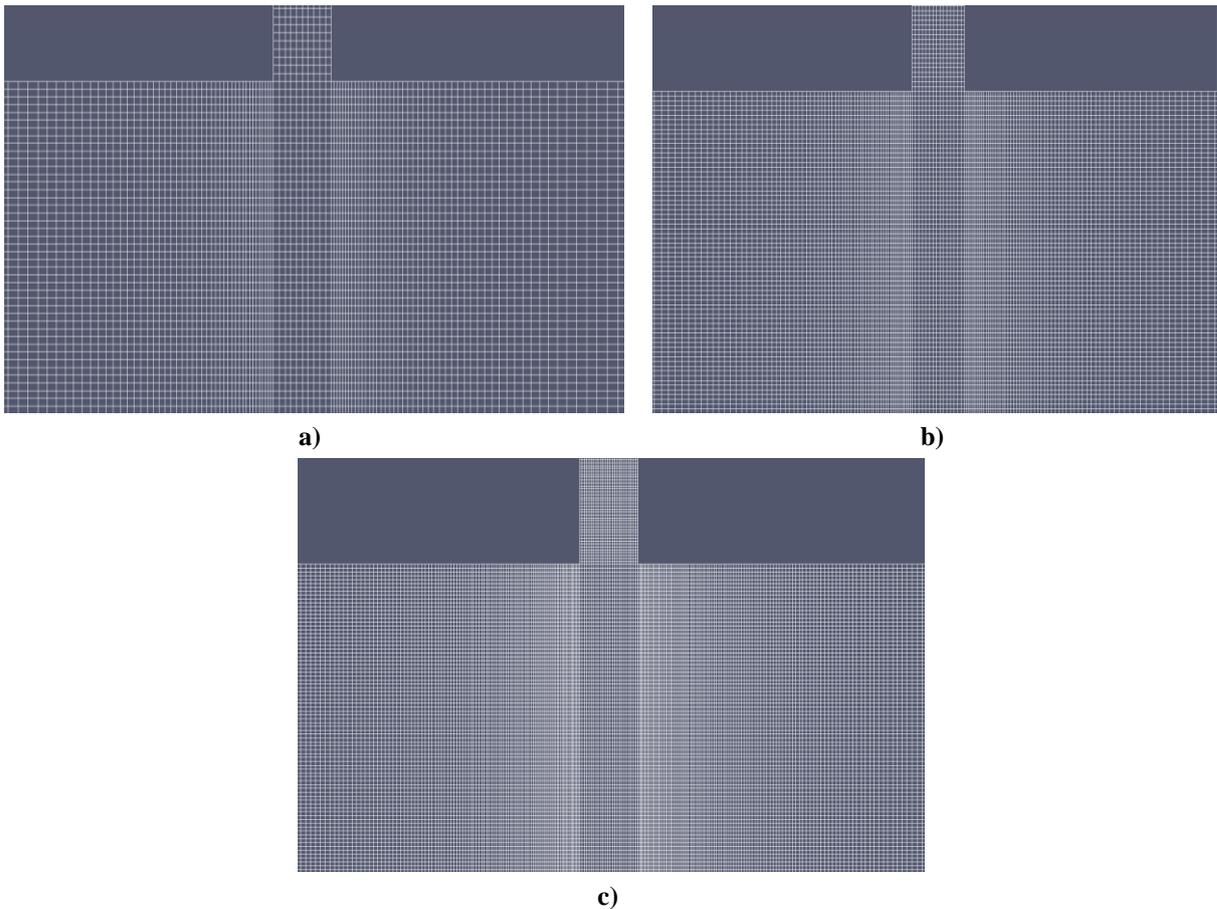


Figura 4.2: Detalhe da região da saída do capilar para as malhas: a) MeshP1, b) MeshP2 e c) MeshP3.

Tabela 4.2: Malhas usadas no estudo de independência de malha para a geometria equivalente à saída de capilar.

Malha	Número de Elementos	Volume Máximo dos Elementos (m ³)
MeshC1	24.280	$1,9 \times 10^{-11}$
MeshC2	48.050	$1,0 \times 10^{-11}$
MeshC3	94.250	$5,2 \times 10^{-12}$

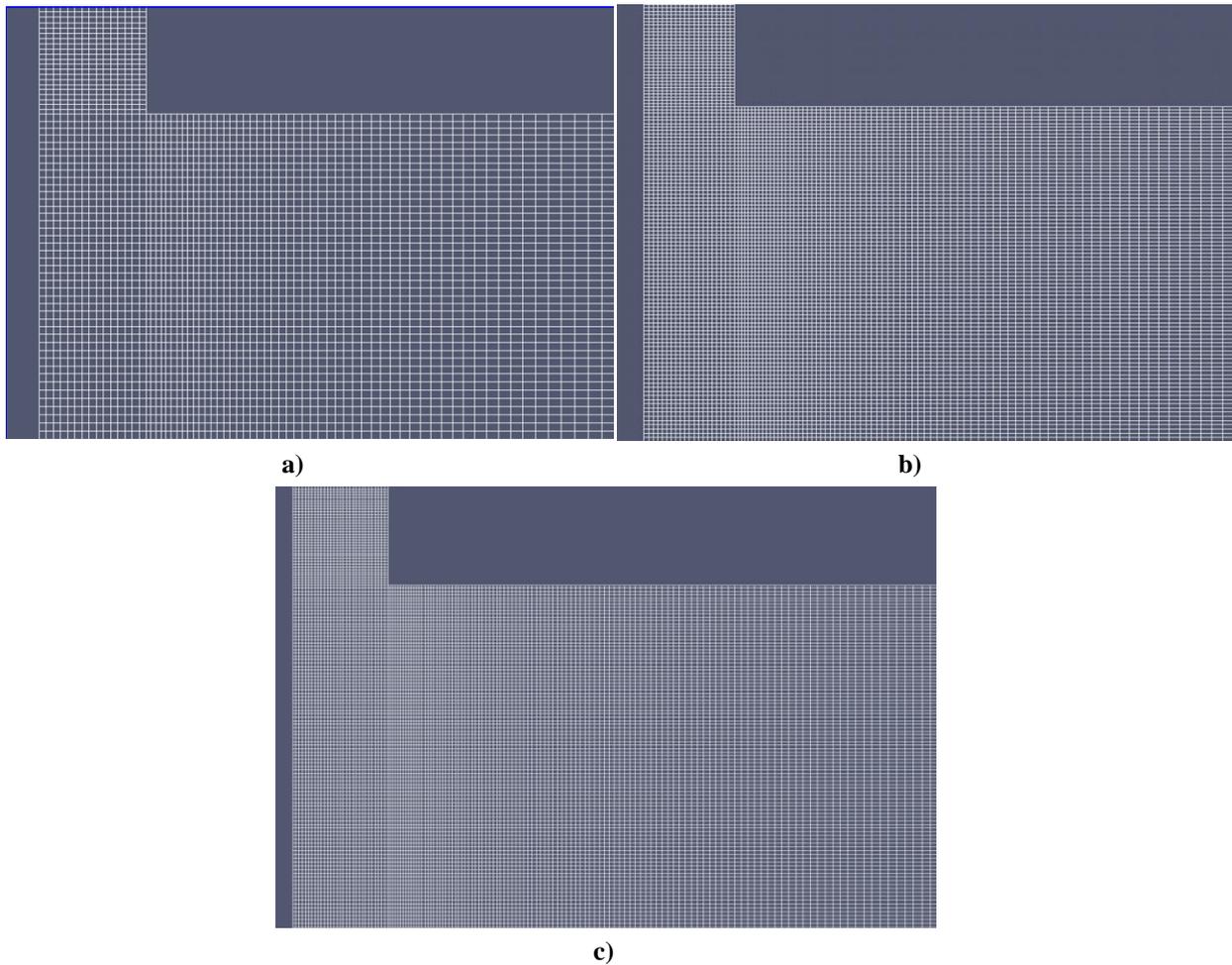


Figura 4.3: Detalhe da região da saída do capilar para as malhas de geometria com plano de simetria: **a)** MeshS1, **b)** MeshS2 e **c)** MeshS3.

Tabela 4.3: Malhas usadas no estudo de independência de malha para a geometria de saída de capilar com plano de simetria.

Malha	Número de Elementos	Volume Máximo dos Elementos (m ³)
MeshS1	17.450	$2,9 \times 10^{-12}$
MeshS2	37.000	$1,3 \times 10^{-12}$
MeshC3	60.200	$8,6 \times 10^{-13}$

De forma a testar a convergência das soluções com o refinamento das malhas, foram plotados (Figuras 4.4, 4.5 e 4.5) os perfis das componentes da velocidade na direção perpendicular ao escoamento. Para as malhas da geometria de placas paralelas foi utilizado o perfil de velocidades em uma seção transversal da geometria onde o escoamento é

completamente desenvolvido. Para as malhas da geometria equivalente à saída de um capilar foram plotados os perfis de velocidade na saída do capilar, pois esse é um ponto singular onde a tensão tende a infinito e são esperadas as mais difíceis condições de convergência, logo se deve garantir a convergência da solução neste ponto. A variação do resultado para o valor máximo da velocidade entre a malha mais refinada e a malha intermediária para o caso da geometria de placas paralelas foi de 0,1%. Para o caso do escoamento na saída de um capilar a diferença entre os resultados para o valor máximo de velocidade entre as malhas refinada e intermediária foi de 0,2% e 0,8%, respectivamente, para a geometria com plano de simetria e sem plano de simetria. Considerou-se que estes resultados justificam a utilização das malhas de refinamento intermediário para todos os casos, designadas como MeshP2 no caso da geometria de placas paralelas, MeshC2 para a geometria de capilar sem plano de simetria e MeshS2 para a geometria de capilar com plano de simetria.

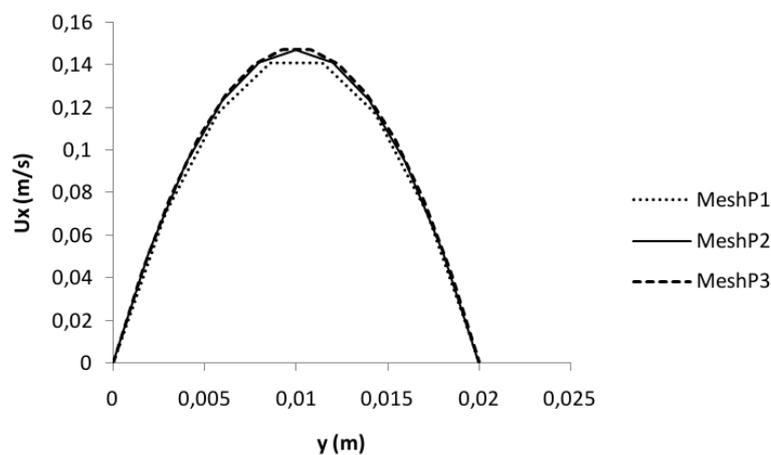


Figura 4.4: Variação da componente x da velocidade ao longo do eixo y para as diferentes malhas estudadas no estudo de caso da geometria de placas paralelas.

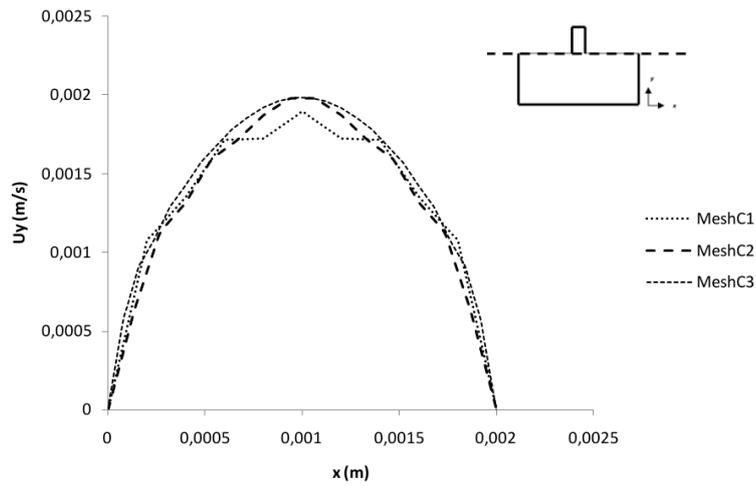


Figura 4.5: Variação da componente y da velocidade ao longo da espessura na saída do capilar para as três malhas estudadas no estudo de caso de escoamento na saída de um capilar.

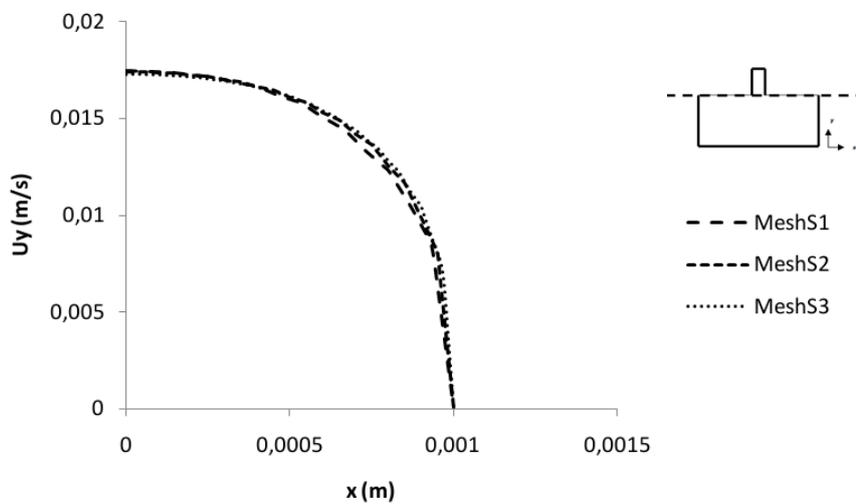
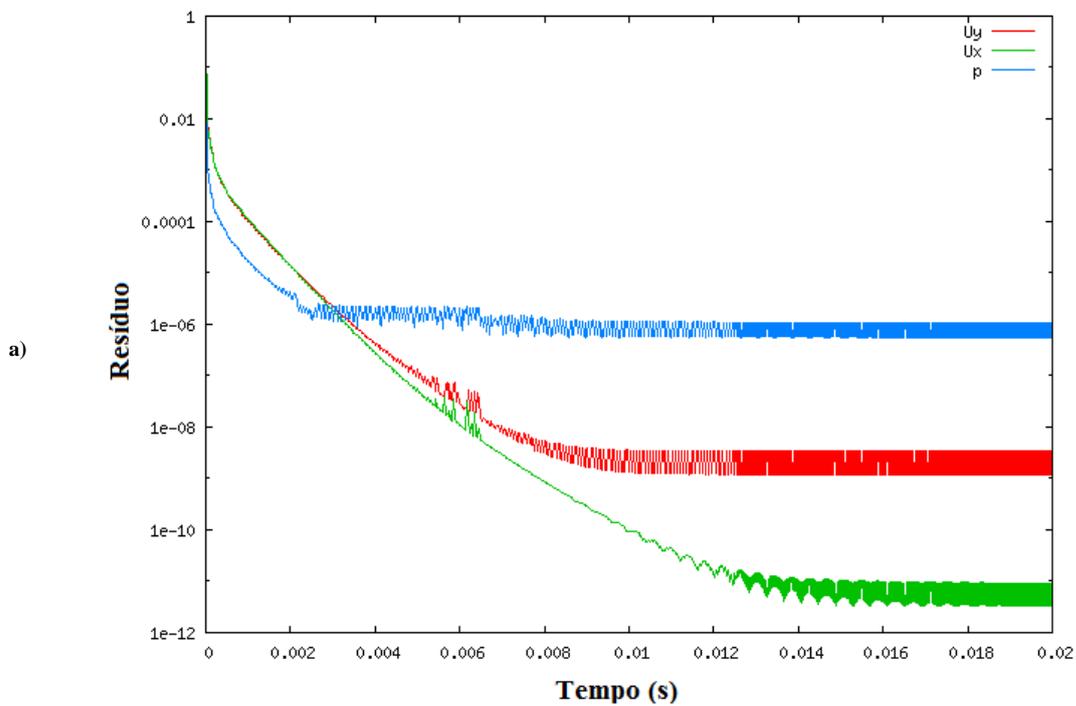


Figura 4.6: Variação da componente y da velocidade ao longo da espessura na saída do capilar para as três malhas estudadas no estudo de caso de geometria de capilar com plano de simetria.

4.2 Convergência das soluções numéricas

É importante verificar a convergência da solução numérica para todas as variáveis resolvidas, de forma a assegurar a estabilidade das simulações e garantir a precisão dos parâmetros preditos no processo de otimização. As Figuras 4.7, 4.8 e 4.9 apresentam os resíduos para as variáveis resolvidas em função do passo de tempo de simulação. Observe-se que a solução dos casos foi estável e o valor final do resíduo para todas as variáveis foi inferior ao valor da tolerância especificada, que foi de 1×10^{-5} em ambos os estudos de caso.



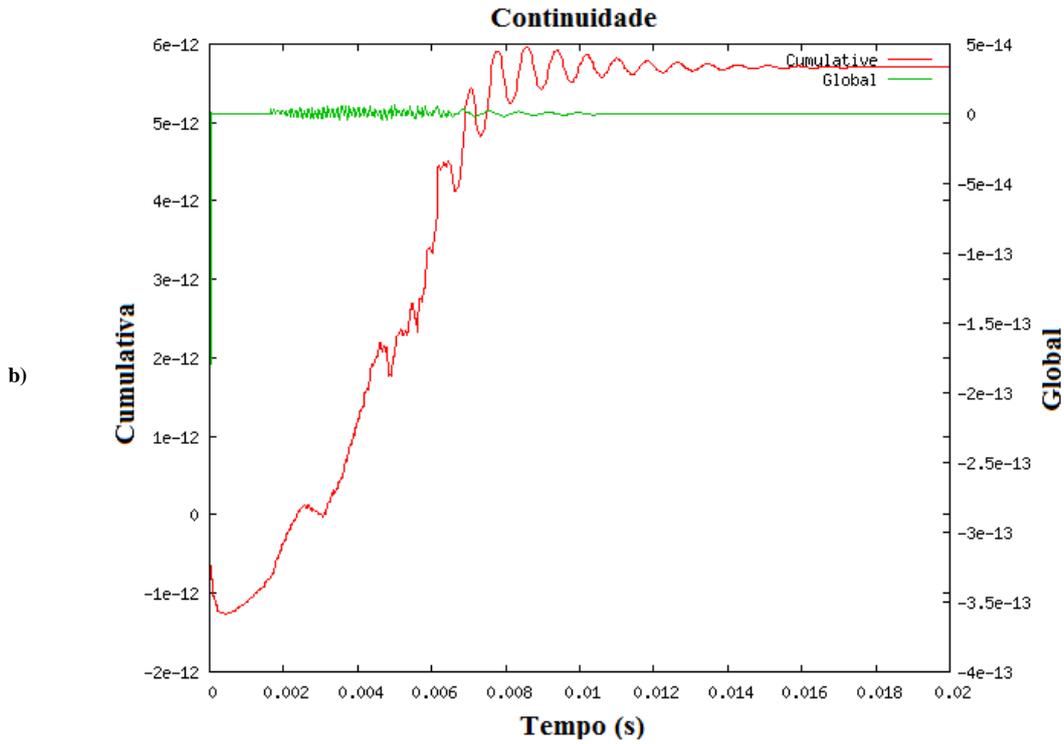
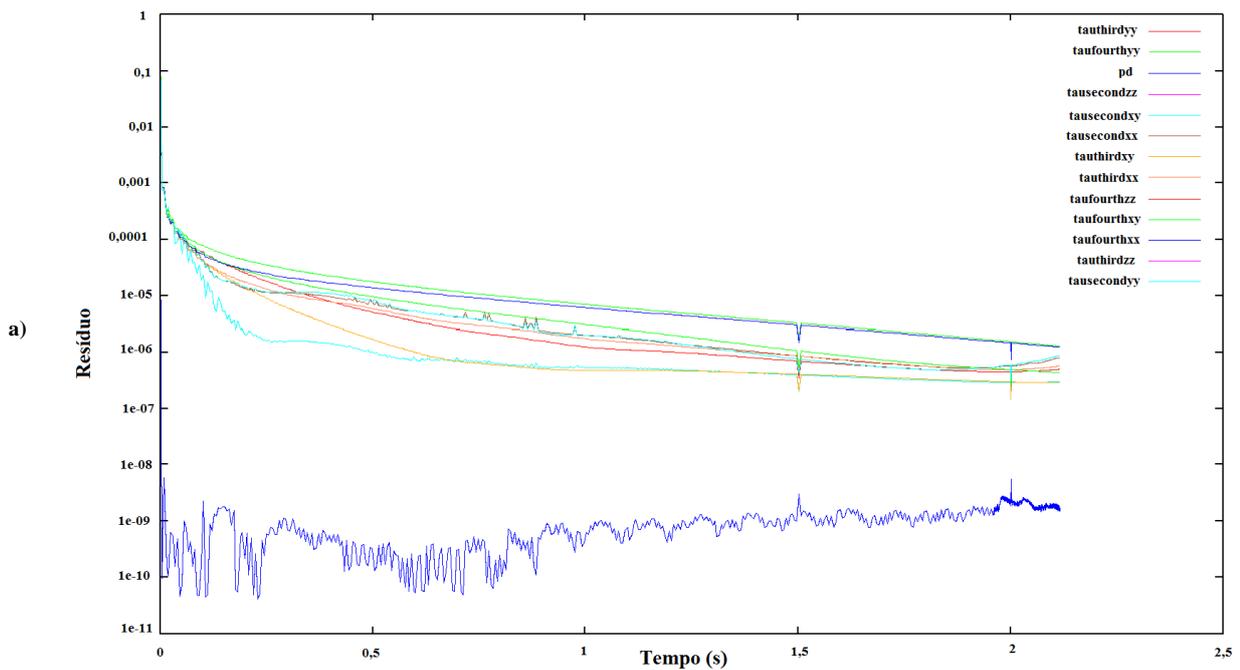


Figura 4.7: Resíduos das variáveis em função do passo de tempo da simulação da geometria de placas paralelas: a) resíduos da pressão e componentes da velocidade e b) erros de continuidade.



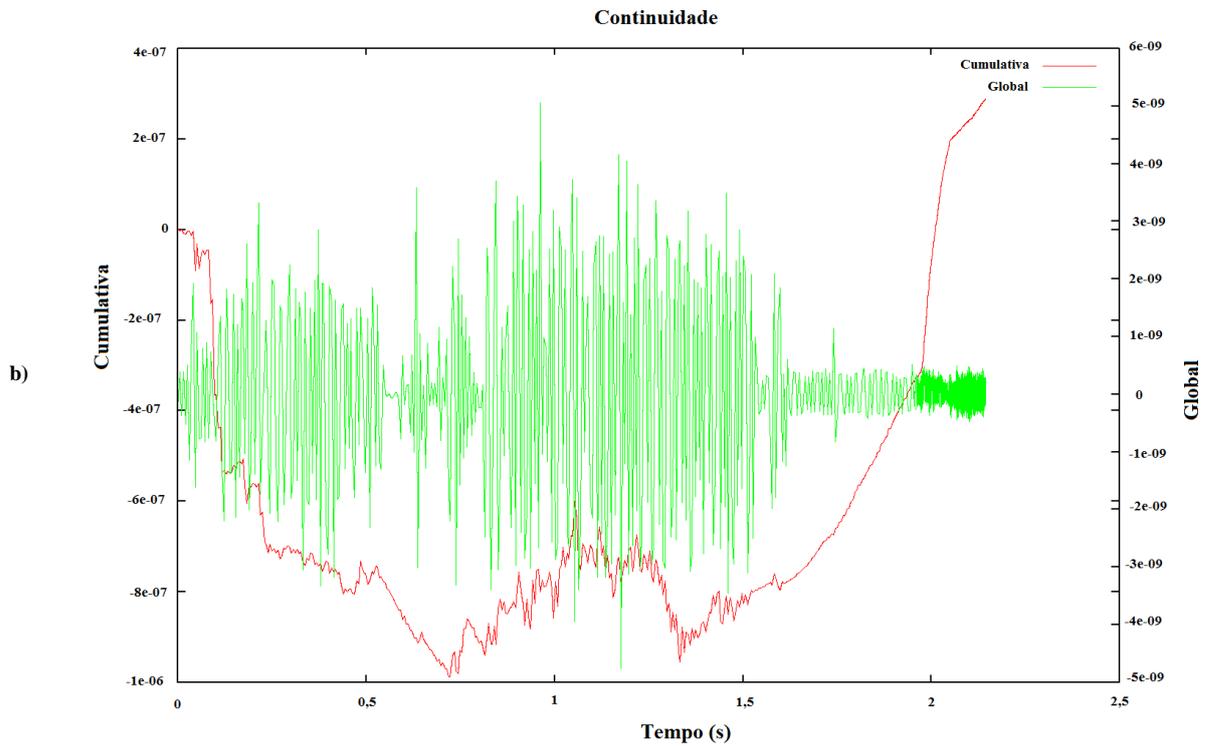
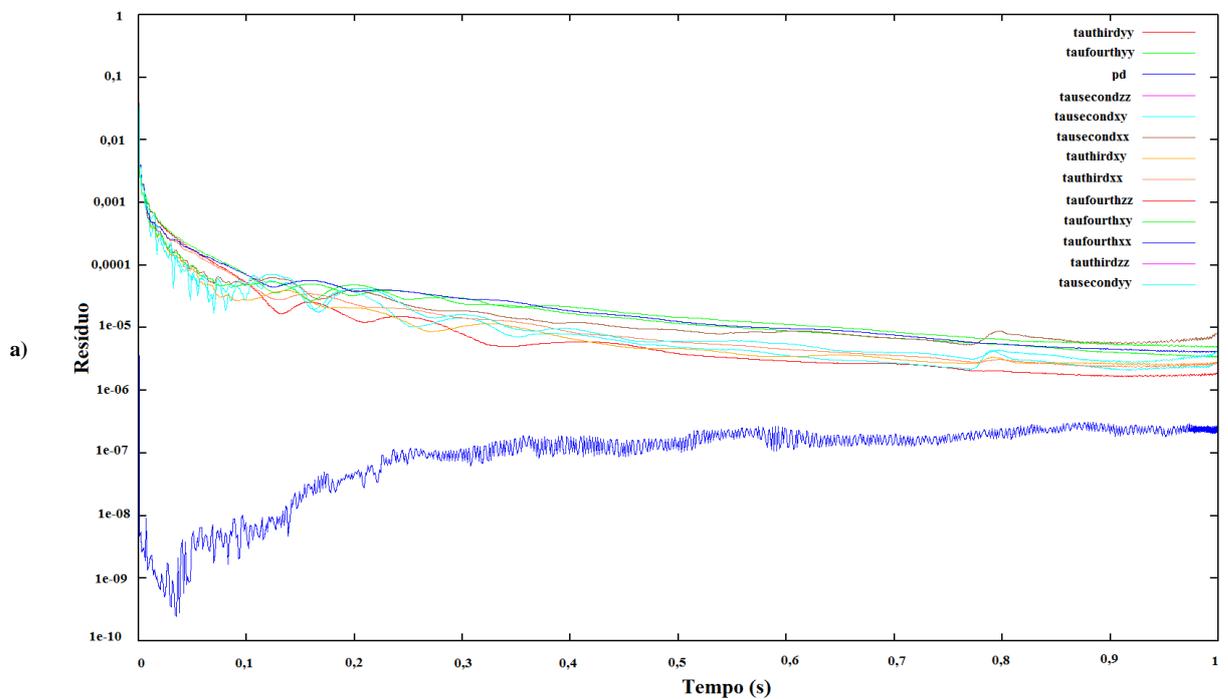


Figura 4.8: Resíduos das variáveis em função do passo de tempo da simulação do escoamento na saída de um capilar **a)** pressão e componentes da tensão e **b)** erros de continuidade.



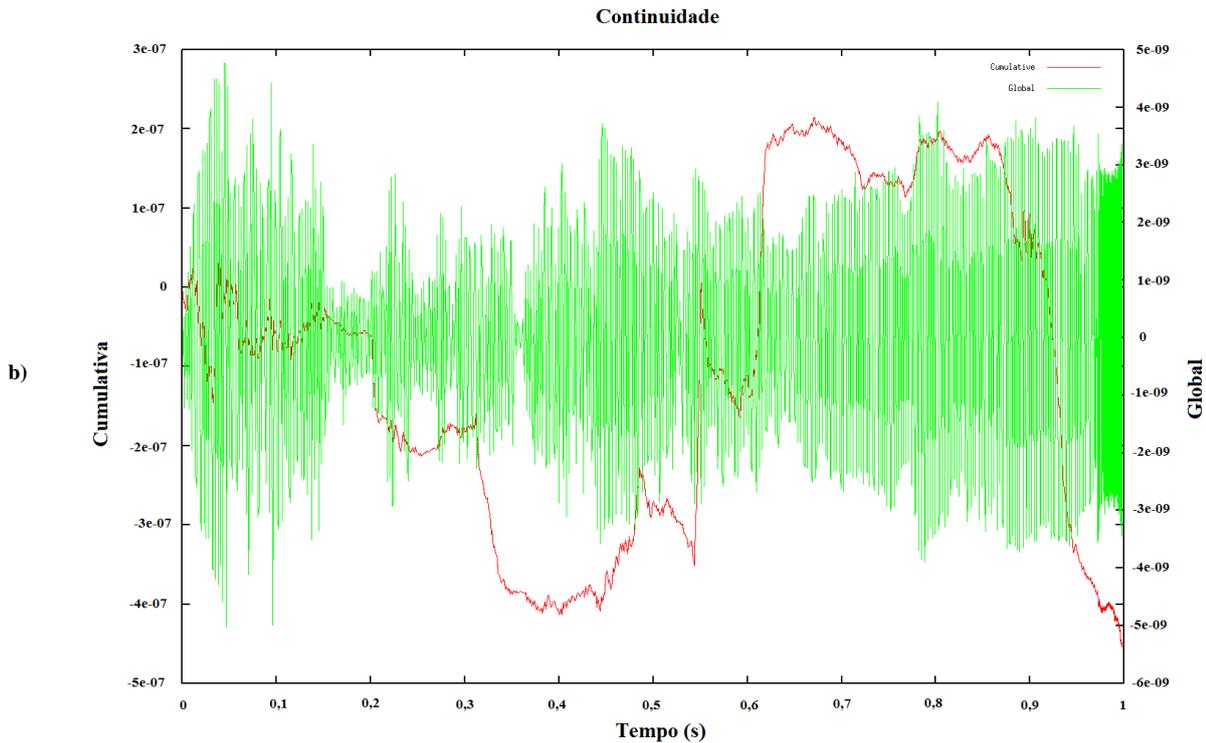


Figura 4.9: Resíduos das variáveis em função do passo de tempo: **a)** pressão e componentes da tensão e **b)** erros de continuidade.

4.3 Resultado da estimação de parâmetros

4.3.1 Estimação da viscosidade de um fluido newtoniano

Considerou-se o escoamento de um fluido newtoniano de viscosidade de $0,01 \text{ Pa}\cdot\text{s}^{-1}$. Foi utilizado uma aproximação inicial para o parâmetro de $0,04 \text{ Pa}\cdot\text{s}^{-1}$ e o valor final estimado foi de $0,0109 \text{ Pa}\cdot\text{s}^{-1}$, resultando em um erro de 9% com relação ao valor real. O critério de tolerância para o valor da função objetivo entre dois passos sucessivos de otimização foi especificado como 1×10^{-3} e a solução convergiu com 30 iterações do processo de otimização. A Figura 4.10 mostra a evolução do parâmetro ao longo do processo de otimização e a Figura 4.11 apresenta os valores da função objetivo em função do passo de otimização. O valor final da função objetivo foi de $7,8 \times 10^{-5}$. É importante mencionar que diferentes aproximações iniciais foram usadas, levando a resultados semelhantes.

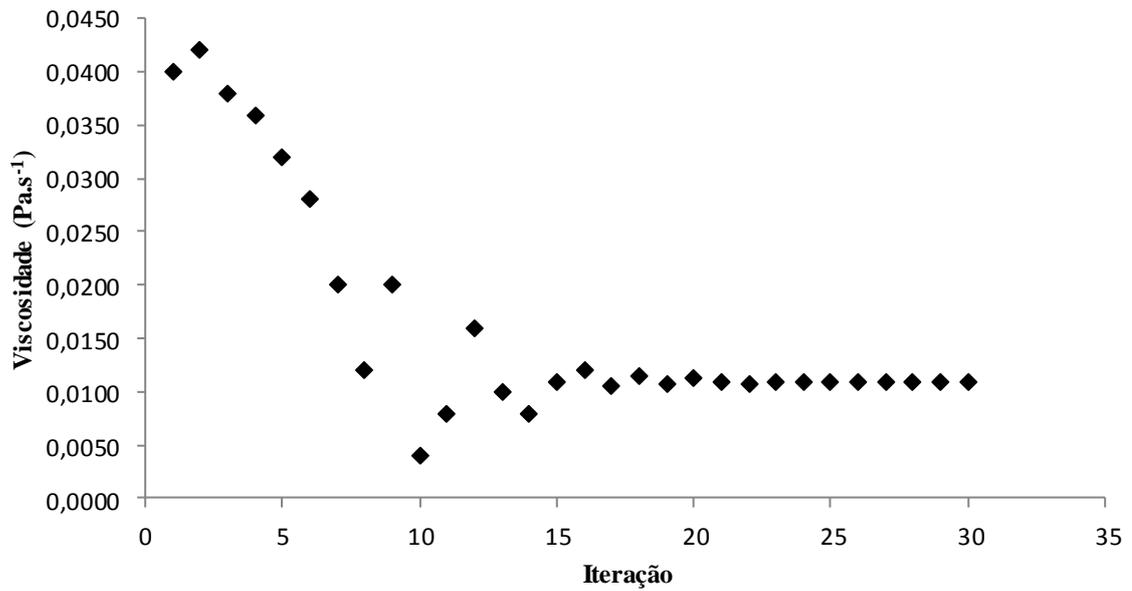


Figura 4.10: Valor estimado da viscosidade em função do passo de otimização.

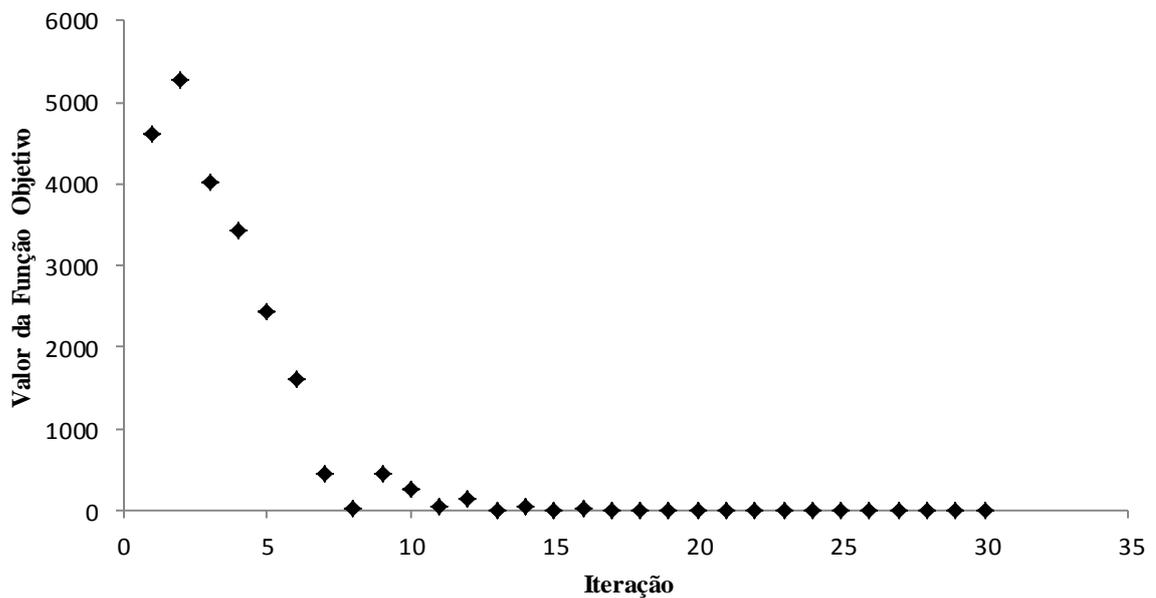


Figura 4.11: Valor da função objetivo em função do passo de otimização.

De forma a validar a estimativa da viscosidade newtoniana os resultados obtidos na simulação numérica usando o valor estimado devem ser comparados com valores de referência. Para este caso de estudo, os valores de queda de pressão ao longo do escoamento

foram comparados com valores obtidos através da solução analítica dada por Hagen-Poiseuille, (Equação 3.5). Conforme mostrado na Seção 3.2.1 esta solução analítica é válida para escoamento completamente desenvolvido em estado estacionário. Para garantir a validade da solução no presente estudo de caso, essas duas condições serão verificadas a seguir.

A Figura 4.12 mostra os perfis da componente x da velocidade em função da distância y , sendo que y é a direção do escoamento, para um ponto localizado no centro da espessura da geometria. O valor de velocidade especificado na entrada da geometria foi de 0,1 m/s, já que esse é o menor valor de velocidade usado como condição inicial e ao garantir que o escoamento seja completamente desenvolvido para esse valor de velocidade garante-se essa condição para valores maiores de velocidade, já que quanto maior a velocidade do fluido menor o comprimento de entrada para as mesmas condições de escoamento. Observa-se que o perfil de velocidades torna-se completamente desenvolvido antes da distância de 0,1 m da entrada da geometria, sendo assim o cálculo do gradiente de pressão usado como referência na estimação de parâmetros foi feito entre os pontos localizados em $y = 0,1$ m e $y = 0,5$ m.

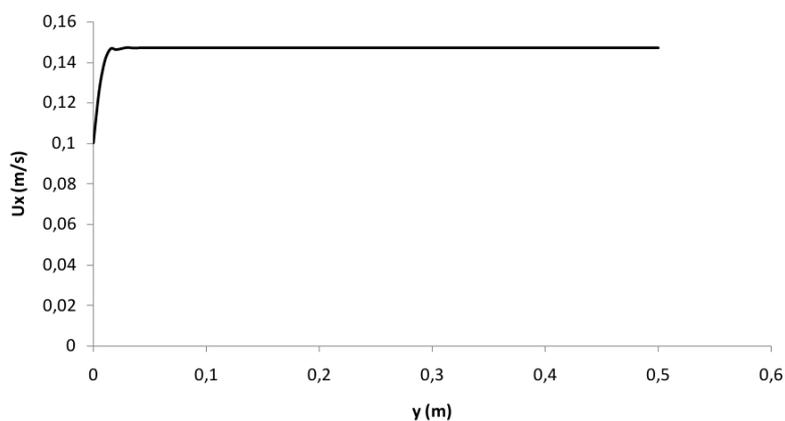


Figura 4.12: Componente x da velocidade em função da distância da posição y .

A Figura 4.13 mostra o perfil da componente x da velocidade para um ponto fixo localizado na coordenada central da geometria em função do tempo. Nota-se que a partir de

$t = 0,02$ s, aproximadamente, a solução deixa de ser transiente e atinge o estado estacionário. Desta forma, nas simulações usadas na etapa de estimação da viscosidade foram usados os valores da queda de pressão para o instante de tempo $t = 0,1$ s, e todos os resultados apresentados a seguir para este estudo de caso relacionam-se a este passo de tempo.

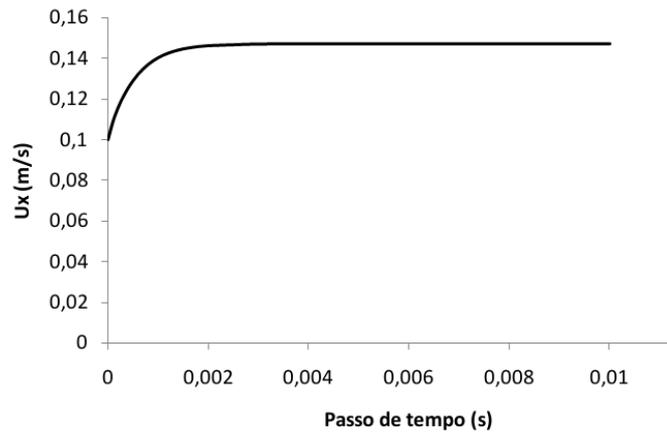


Figura 4.13: Perfil da componente x da velocidade em um ponto fixo no centro da geometria em função do passo de tempo.

A Figura 4.14 mostra as predições de velocidade e pressão para o escoamento entre placa paralelas de um fluido newtoniano com viscosidade $\eta = 0,0109 \text{ Pa}\cdot\text{s}^{-1}$ utilizando dois valores diferentes de velocidade de entrada, $U_0 = 0,1 \text{ m/s}$ e $U_0 = 0,2 \text{ m/s}$. A Tabela 4.4 apresentam o erro percentual encontrado para o gradiente de pressão, $\frac{\partial P}{\partial x}$, ao longo do escoamento e velocidade máxima, $U_{x_{max}}$, obtidas numericamente em relação ao respectivo valor analítico usando os diferentes valores iniciais de velocidade. O valor máximo da componente x da velocidade foi calculado para um ponto onde o escoamento é completamente desenvolvido usando a relação $U_{max} = 3/2 U_0$

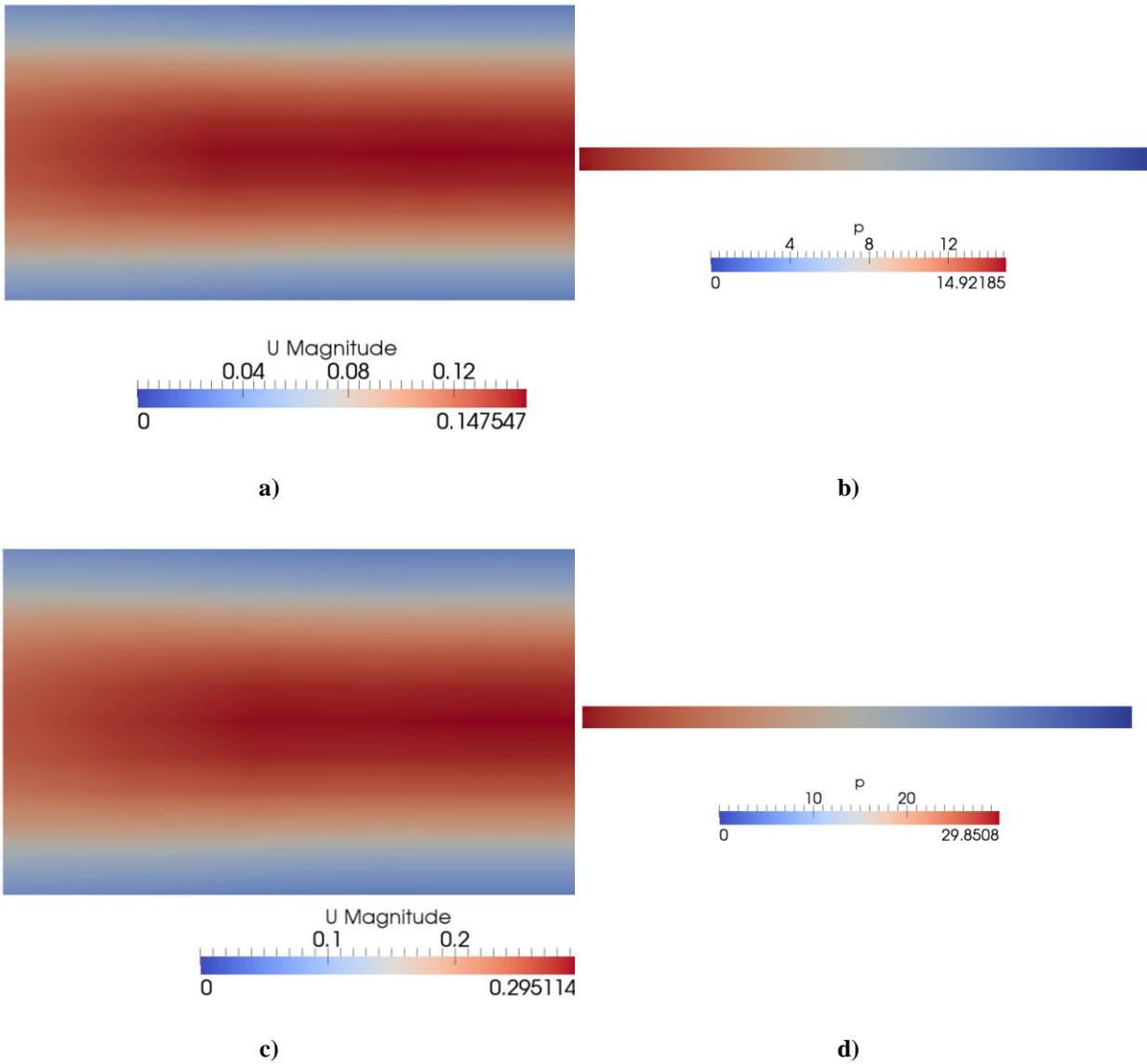


Figura 4.14: Perfis de velocidade e queda de pressão ao longo do escoamento para **a) e b)** $U_0 = 0,1$ m/s, **c) e d)** $U_0 = 0,2$ m/s.

Tabela 4.4: Valores analíticos e numéricos obtidos para $\frac{\partial P}{\partial x}$ e $U_{x_{max}}$:

Condição de entrada	$\frac{\partial P}{\partial x} (\text{Pa}\cdot\text{m}^{-1})$			$U_{x_{max}} (\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$		
	Analítico	Numérico*	Erro (%)	Analítico	Numérico*	Erro (%)
$U_0 = 0,1$ m/s	-11,404	-11,06	2,98	0,15	0,147	2,0
$U_0 = 0,2$ m/s	-22,808	-22,12	2,98	0,30	0,295	1,67

*Nota: Valores obtidos ao final do processo de otimização.

4.3.2 Estimação do parâmetro não linear λ do modelo PTT

O polímero escolhido para ser usado nos testes da implementação rotina de estimação de parâmetros foi o polietileno linear de baixa densidade (PELBD) contendo 4% de buteno e teve sua caracterização reológica realizada por *Carrot et al.* (1996) utilizando a metodologia implementada pelo mesmo autor. A Tabela 4.5 mostra o espectro de relaxação para o PELBD à temperatura constante de 160°C para o modelo Phan-Thien-Tanner exponencial (Equação 3.9). Os valores para os parâmetros ε e ζ foram mantidos constantes, iguais a 0,06 e 0,35 respectivamente.

Tabela 4.5: Espectro de relaxação para o PELBD a 160°C.

Modo (i)	λ_i (s)	η_i (Pa.s ⁻¹)
1	$1,28 \times 10^{-4}$	$2,367 \times 10^2$
2	$6,12 \times 10^{-3}$	$1,346 \times 10^3$
3	$4,10 \times 10^{-2}$	$3,363 \times 10^3$
4	$2,77 \times 10^{-1}$	$4,691 \times 10^3$
5	$2,01 \times 10^0$	$3,726 \times 10^3$
6	$1,57 \times 10^{-1}$	$2,007 \times 10^3$
7	$1,35 \times 10^2$	$9,563 \times 10^2$

De forma a obter um bom ajuste aos dados experimentais, é conveniente usar na modelagem numérica o máximo de modos do espectro de relaxação possível, de acordo com a disponibilidade de dados. Porém, o custo computacional requerido em simulações numéricas envolvendo modelos multimodo é proporcional ao número de modos do espectro de relaxação. Desta forma, apesar da disponibilidade da informação dos valores de parâmetros do primeiro ao sétimo modo do espectro de relaxação, neste estudo limitamos a modelagem do problema à utilização dos modos mais relevantes para a soma total da tensão τ , mostrada na Figura 4.15. Portanto, foram utilizados na modelagem numérica do experimento de inchamento do extrusado apenas o segundo, terceiro e quarto modos do espectro de relaxação,

pois com esses três modos é possível representar aproximadamente 90% da resposta de tensão do polímero.

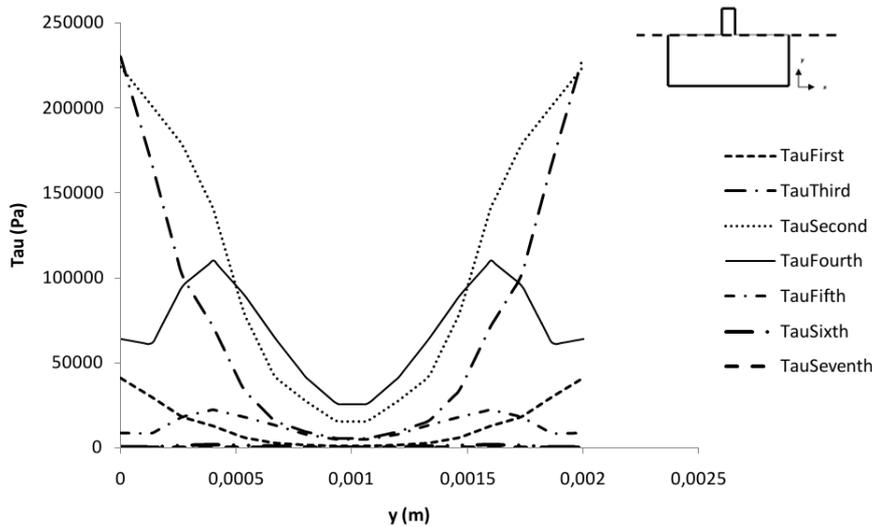


Figura 4.15: Magnitude de τ_i do primeiro até o sétimo modo do espectro de relaxação ao longo da coordenada y na região do capilar.

A otimização para esse estudo de caso foi baseada na estimação do parâmetro λ do segundo modo do espectro de relaxação do PELBD para o modelo constitutivo PTT. Este parâmetro foi escolhido para ser estimado porque é o parâmetro não linear do modelo e é responsável por descrever o comportamento elástico, conforme visto no Capítulo 2. A escolha da utilização do parâmetro λ do segundo modo de relaxação foi baseada no estudo da influência de cada modo de relaxação na soma total da tensão τ mostrado na Figura 4.15, onde percebe-se que o segundo modo é o que proporciona os valores máximos de tensão. Para os demais parâmetros, foram usados os valores dados na Tabela 4.5.

A velocidade especificada na entrada do capilar foi de 0,015 m/s. Esta velocidade foi especificada de forma a obter valor semelhante para a taxa de cisalhamento na parede do capilar àquele obtido experimentalmente por *Béraudo et al.*(1998) para PELBD em geometrias de capilares curtos (razão entre comprimento e diâmetro do capilar igual a 4,8). A

Figura 4.16 mostra a predição numérica para a taxa de cisalhamento obtida usando-se o espectro de relaxação fornecido na Tabela 4.5. Pode-se observar que o valor da taxa de cisalhamento na parede obtido na predição numérica foi aproximadamente 34 s^{-1} , enquanto o valor experimental foi de 33 s^{-1} (Béraudo *et al.*, 1998).

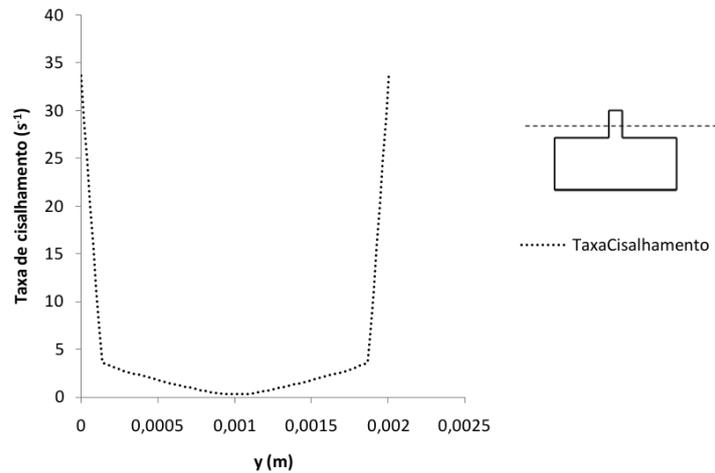


Figura 4.16: Perfil de taxa de cisalhamento ao longo do eixo y na região do capilar.

Conforme mencionado no Capítulo 3, foram usadas duas geometrias para este estudo de caso: uma geometria onde não foi considerado o plano de simetria, a qual denominou-se G1 e uma geometria onde a simetria do escoamento foi considerada na modelagem, denominada G2. Foi apresentado também no capítulo anterior que para a geometria G2 foi alterada a condição de contorno na superfície inferior de parede para uma abertura para a atmosfera de forma a permitir que o perfil de diâmetros do inchamento do fluido alcançasse estado estacionário, como será discutido mais adiante. Desta forma, na geometria G1 o filete de fluido, à medida que escoar a partir do capilar, passa a se depositar na parede inferior da geometria, enquanto na geometria G2 esta superfície se comporta como uma saída para o fluido.

A seguir serão mostrados os resultados obtidos na estimação do parâmetro λ usando a geometria G1. A solução do problema de otimização neste estudo de caso se mostrou muito sensível ao valor da aproximação inicial, pois o uso de valores muito distantes do valor de referência para o parâmetro levaram a solução a divergir, devido ao fato de ter sido usado na otimização um método de busca local. Devido ao tempo necessário para completar a solução do problema, conforme mencionado na Seção 3.3.5, e o grande volume de dados gerados nas simulações neste caso, tornou-se inviável o armazenamento dos arquivos *log*, que são arquivos que armazenam toda a informação de saída *script* de otimização, incluindo informações a respeito dos resíduos das simulações e dados referentes ao processo de otimização. Por este motivo, a informação a respeito do valor da função objetivo para cada passo de otimização não está disponível para este caso de estudo. A Figura 4.17 mostra os valores estimados para o parâmetro λ normalizado em função do passo de otimização usando a geometria G1. O valor da aproximação inicial para o parâmetro a ser estimado foi de $4,0 \times 10^{-3}$ e o valor final estimado foi de $5,94 \times 10^{-3}$, resultando em uma diferença de 2,8% com relação ao valor obtido por *Carrot et al.*(1996) a partir de dados de reometria rotacional em regime oscilatório.

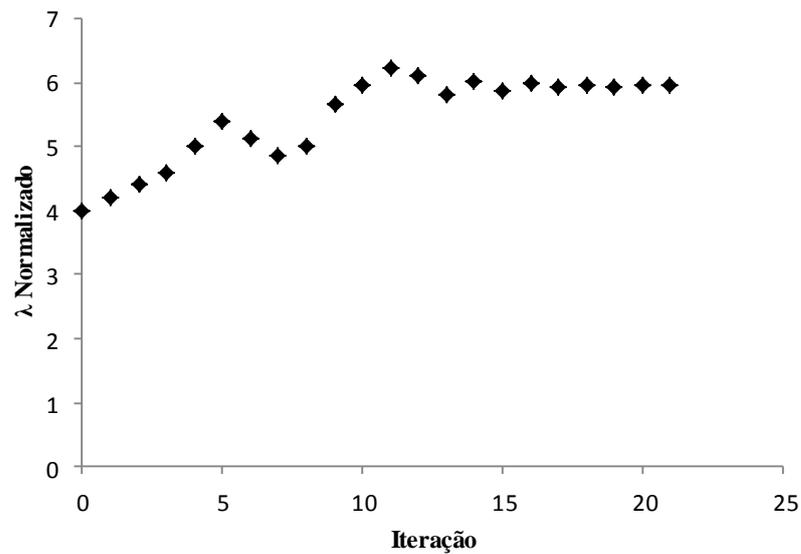


Figura 4.17: Valor normalizado do parâmetro λ em função das iterações.

A Figura 4.18 mostra a predição numérica da fração volumétrica de polímero para os passos de tempo de 0 a 2 s de simulação, onde se percebe a evolução do inchamento do extrusado e da frente de avanço. Para representar a evolução de forma mais compacta, somente a região central da geometria, onde ocorre o inchamento, está representada na Figura 4.18. Foi usado o valor estimado anteriormente para o parâmetro λ do segundo modo do espectro de relaxação e os parâmetros restantes são dados na Tabela 4.5. O formato da frente de avanço do fluido não parece muito realista, devendo ser melhor investigado o efeito desta imprecisão no restante do formato da superfície livre do fluido e, portanto, o diâmetro do inchamento.

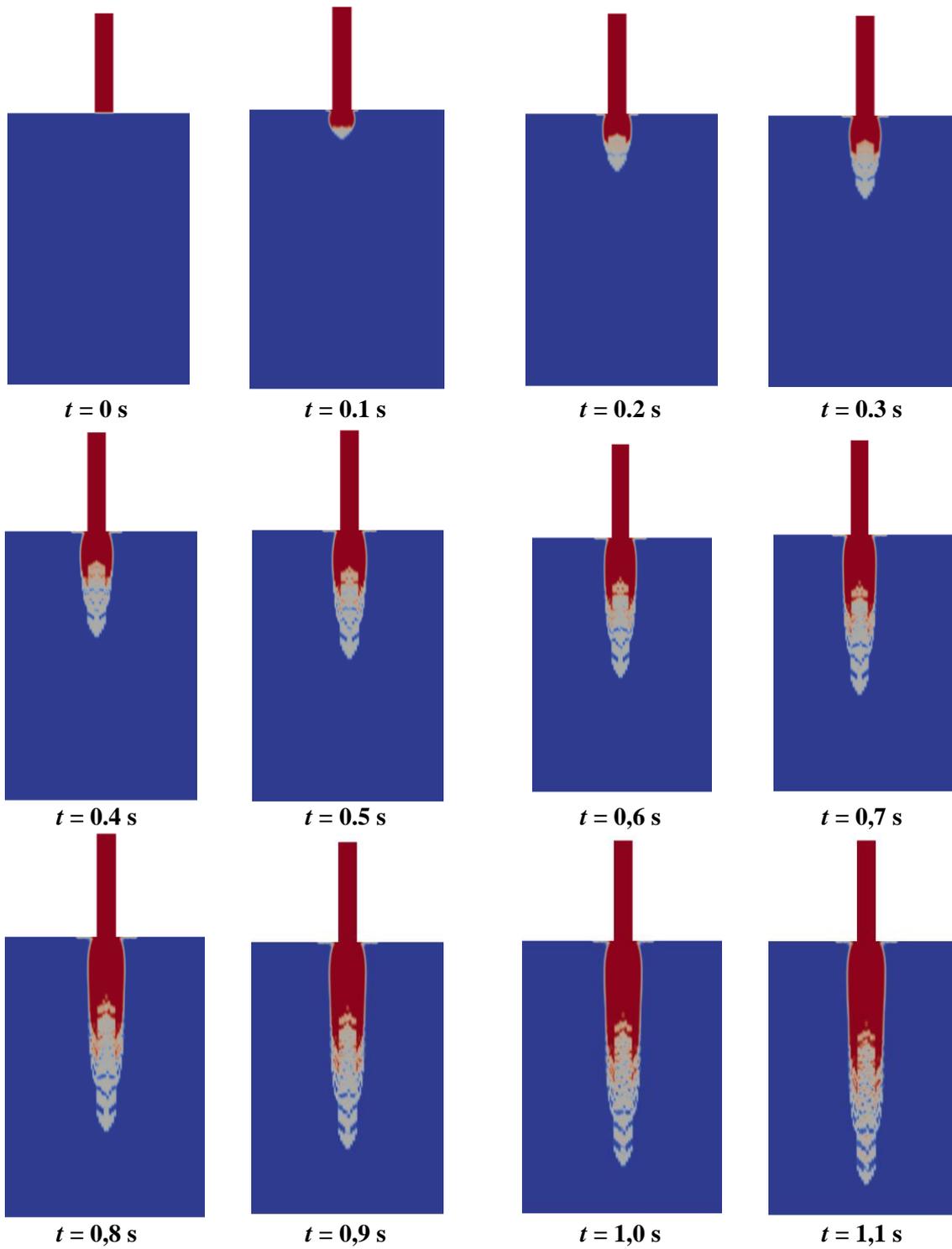


Figura 4.18: Evolução da superfície livre do escoamento na saída de um capilar usando a geometria G1, desde $t = 0$ até $t = 2$ s.

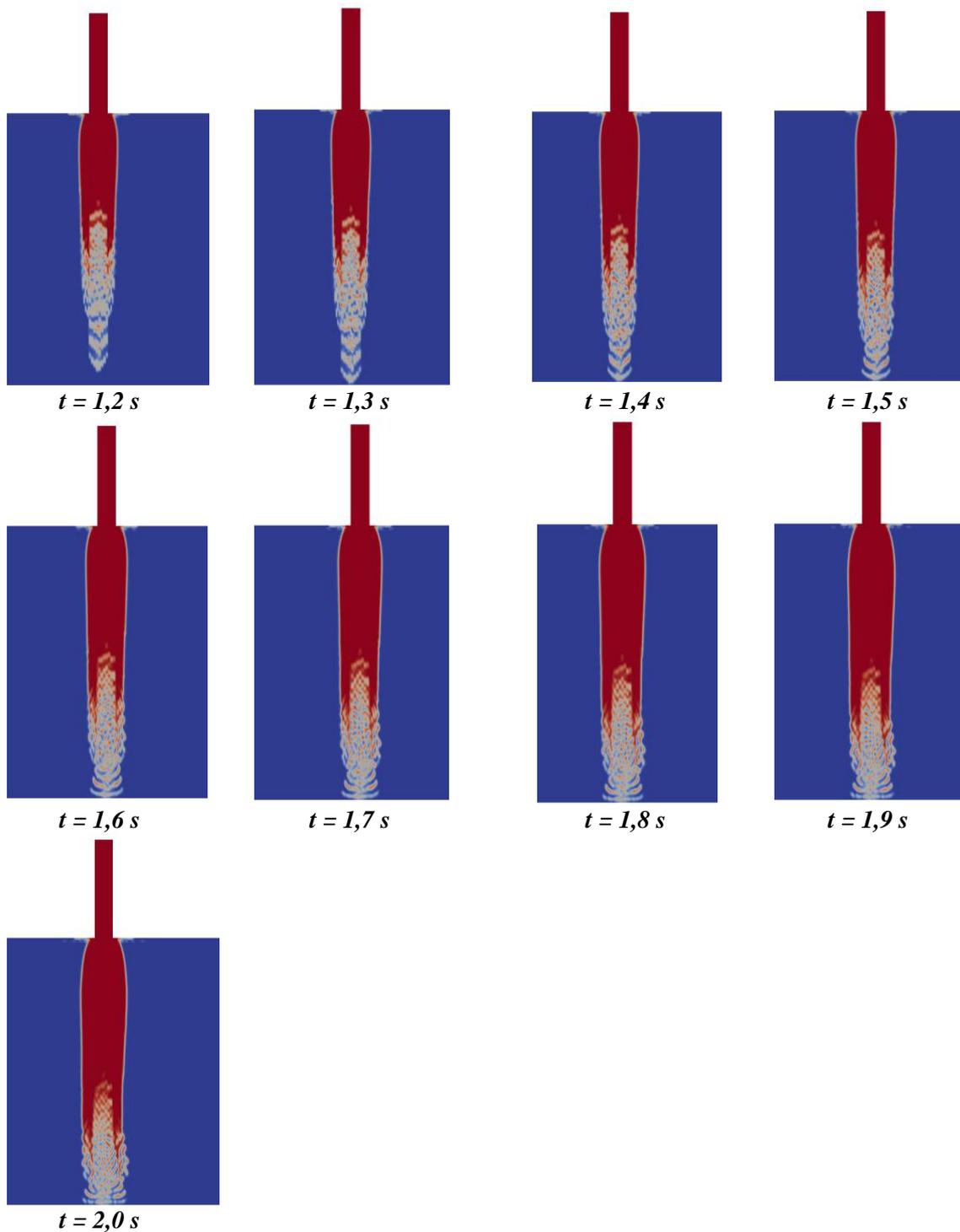


Figura 4.18: Evolução da superfície livre do escoamento na saída de um capilar usando a geometria G1, desde $t = 0$ até $t = 2$ s.

A Figura 4.19 mostra a razão entre o diâmetro do inchamento e o diâmetro do capilar, D/D_1 em função da distância da saída do capilar. Como se observa, o inchamento ocorre não

somente próximo à saída do capilar, mas também ao longo do filete de fluido. Assim que a frente de avanço alcança a parede inferior da geometria em $t = 1,3$ s, o inchamento passa a aumentar devido ao acúmulo de massa, desde as posições mais distantes da saída do capilar até a posição mais próxima.

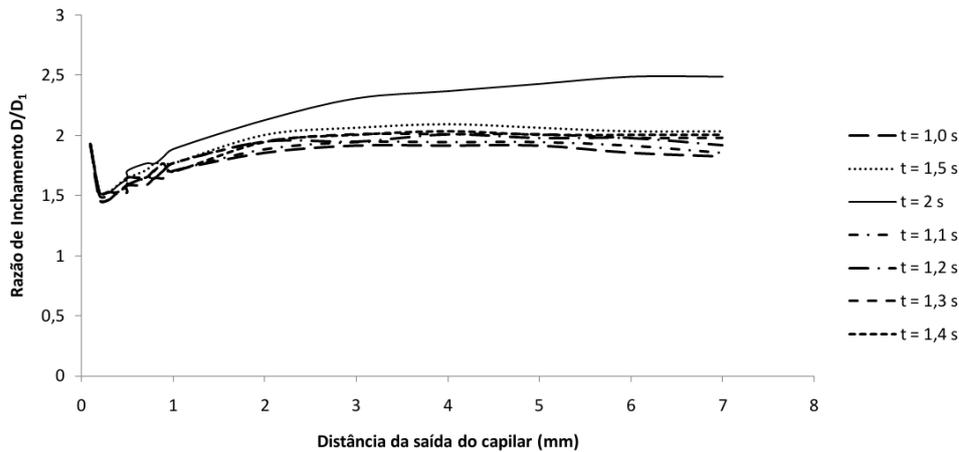


Figura 4.19: Taxa de inchamento D/D_1 em função da distância da saída do capilar para diferentes tempos de simulação.

A Figura 4.20 mostra a razão de inchamento em função do tempo para distâncias fixas da saída do capilar. Percebe-se que para os instantes de tempo iniciais é evidente o caráter transiente dos perfis de diâmetro, até que o perfil se torna aproximadamente estável para os tempos anteriores a 1 s. Entretanto, pode-se notar uma mudança na inclinação das curvas por volta de 1,3 s, especialmente para os pontos mais distantes da saída do capilar. Sendo assim, foi considerado para o escoamento que o estado estacionário foi atingido para o passo de tempo imediatamente anterior àquele em que a frente de avanço alcança a parede onde o fluido será depositado, ou seja, para $t = 1,3$ s.

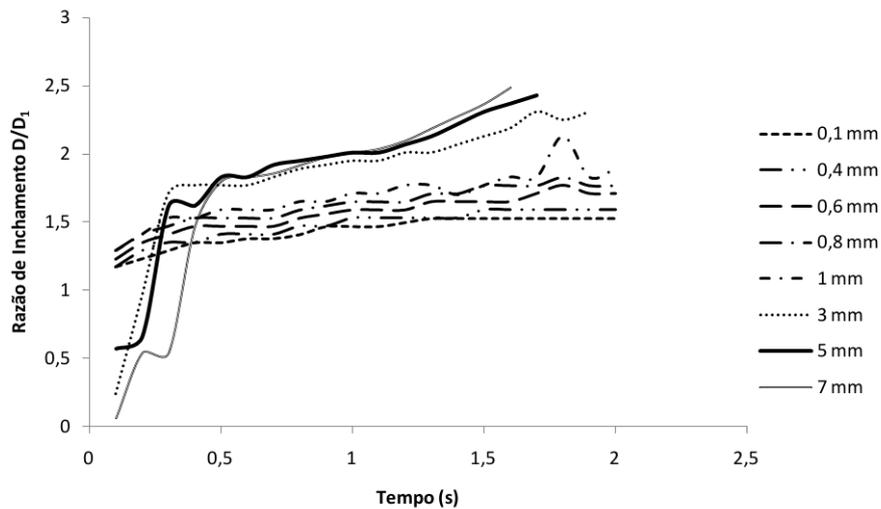


Figura 4.20: Taxa de inchamento em função do tempo para diferentes distâncias fixas da saída do capilar.

A seguir será feita a comparação entre a predição numérica para o perfil de diâmetros do inchamento com os resultados experimentais conduzidos por *Béraudo et al.* (1998). Os experimentos foram realizados em um reômetro capilar Instron 3211 e os diâmetros do inchamento foram medidos utilizando-se um dispositivo eletro-ótico simultaneamente com fotografias para obter a evolução da superfície livre. A Figura 4.21 mostra a predição numérica para a razão de inchamento D/D_1 em função da distância axial da saída do capilar e compara os valores com aqueles obtidos por *Béraudo et al.* (1998) para capilares curtos (razão entre comprimento e diâmetro do capilar igual a 4,8). O resultado refere-se a $t = 1,3$ s de simulação. Pode-se notar que a predição está superestimada, com um erro médio de 50,36 % na razão de inchamento com relação aos valores experimentais. Neste sentido observou-se que o diâmetro do extrusado passava a aumentar quando o filete de fluido toca a parede inferior da geometria G1, um fenômeno que se observa na prática para fluidos de viscosidade elevada. Também em função deste fato, surgiu a hipótese de que o perfil de inchamento do estado estacionário poderia apresentar dependência com as dimensões da geometria, mais especificamente com a distância entre o capilar e a parede inferior, caso esta distância não

fosse o suficientemente grande. No entanto, a utilização de valores maiores para a distância entre o capilar e a parede inferior implicaria em aumento significativo do tempo computacional, além do que seriam requeridos testes com diferentes distâncias até determinar o valor mínimo a ser utilizado para que o perfil de inchamento na saída do capilar não fosse dependente desta variável. Desta forma, resolveu-se testar uma condição de contorno de abertura para a atmosfera na parte inferior da geometria, de acordo ao descrito na geometria G2.

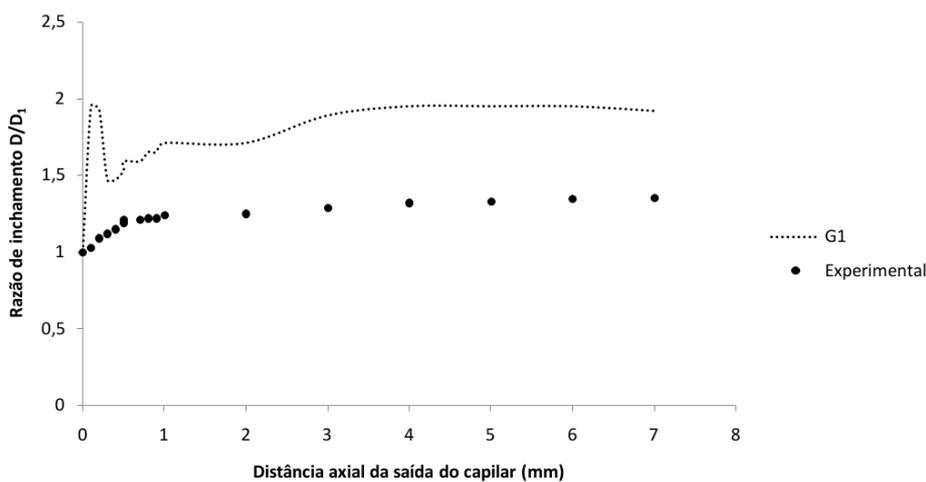


Figura 4.21: Comparação entre razão de inchamento experimental e simulada com a geometria G1.

Outro aspecto a mencionar com relação aos resultados com a geometria G1 é o fato que o erro acentuado com relação à taxa de inchamento experimental também poderia estar em parte associado com a difusão de origem numérica observada nas proximidades do ponto de descontinuidade de tensão existente na saída do capilar. Esta difusão é apresentada na Figura 4.22. Como o refinamento local da malha seria uma alternativa para tentar diminuir esta difusão, nos testes com a geometria G2, também se trabalhou com um refinamento maior de malha nesta região.

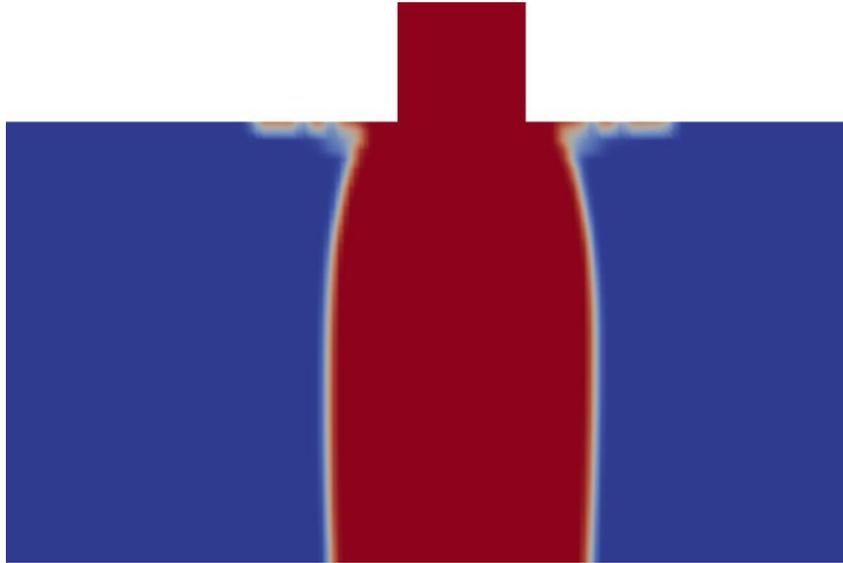


Figura 4.22: Detalhe da difusão observada próximo à saída do capilar.

A seguir será apresentada a estimação do parâmetro λ a partir da simulação do escoamento com a geometria contendo um plano de simetria, G2. O valor da aproximação inicial para o parâmetro a ser estimado foi de $4,0 \times 10^{-3}$. A Figura 4.23 mostra a evolução do parâmetro λ ao longo do processo de otimização. O valor final do parâmetro estimado foi de $6,16 \times 10^{-3}$, o qual resulta em uma diferença de 0,75% com relação ao valor obtido por *Carrot et al.* (1996).

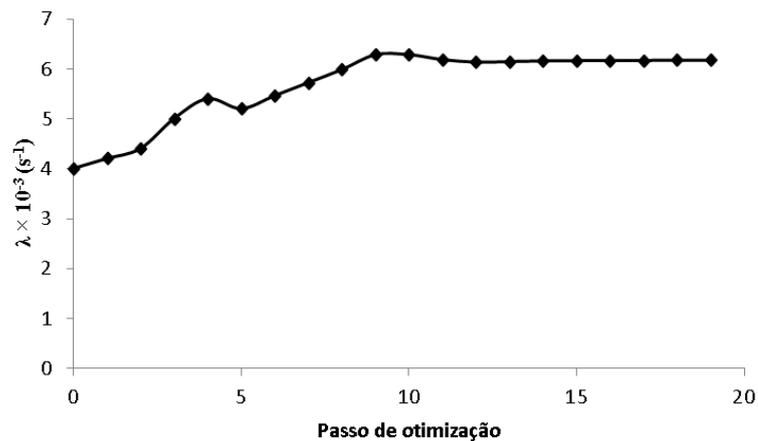
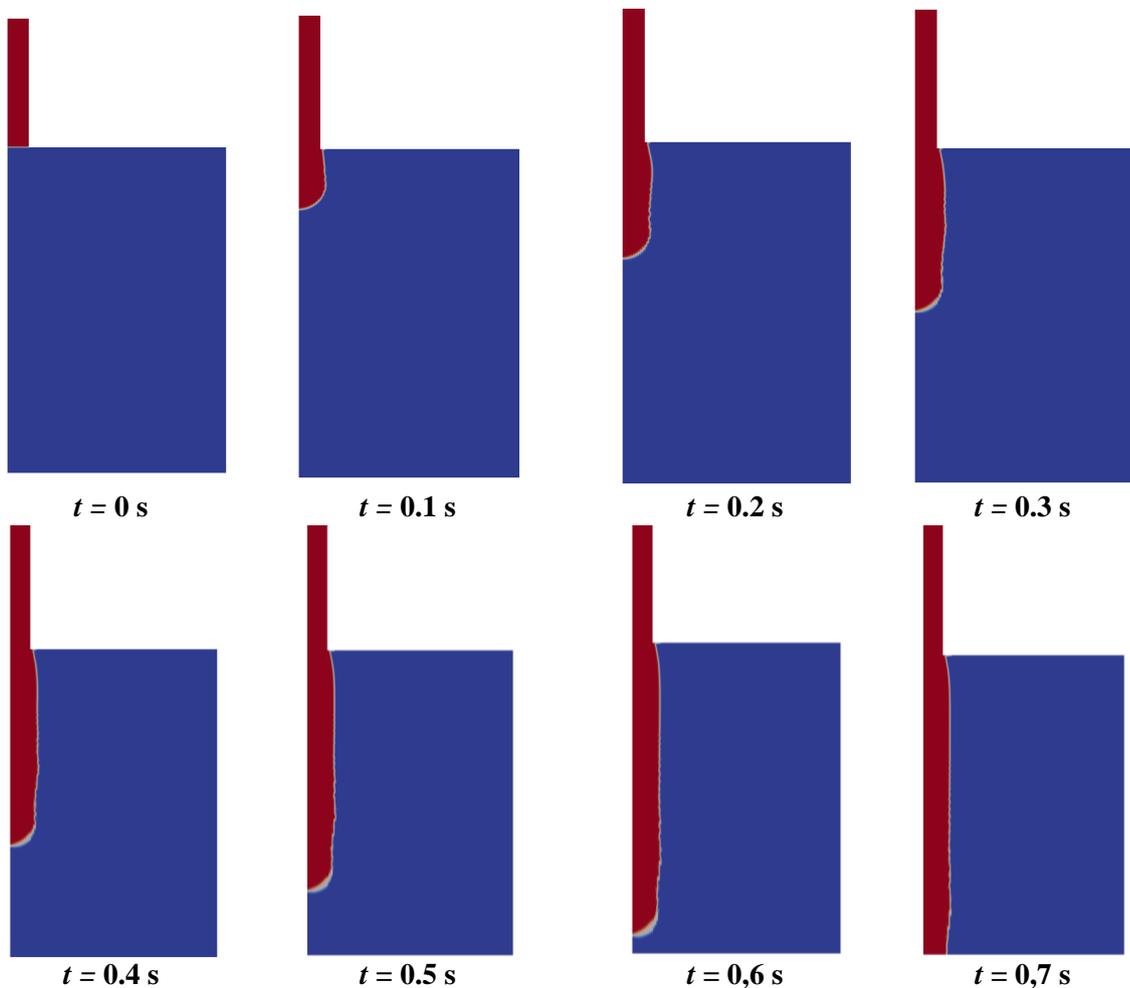


Figura 4.23: Valor estimado para o parâmetro λ em função do passo de otimização.

A Figura 4.24 mostra a predição numérica obtida com o valor final estimado do parâmetro λ para a evolução da superfície livre ao longo do tempo, desde $t = 0$ s até $t = 1,1$ s.

A Figura 4.25 mostra os valores para a razão de inchamento em função do tempo e da distância a partir da saída do capilar. Pode-se observar que devido à substituição da condição de contorno na superfície inferior da geometria onde anteriormente era a parede onde se depositava o filete de fluido extrusado para uma abertura para a atmosfera foi possível alcançar o estado estacionário antes de 1 segundo de simulação. Além disso, é possível perceber que o formato da frente de avanço obtido é mais realista com relação àquele obtido usando a geometria G1, além da magnitude da difusão anteriormente encontrada na superfície equivalente à parede inferior da matriz ter praticamente desaparecido.



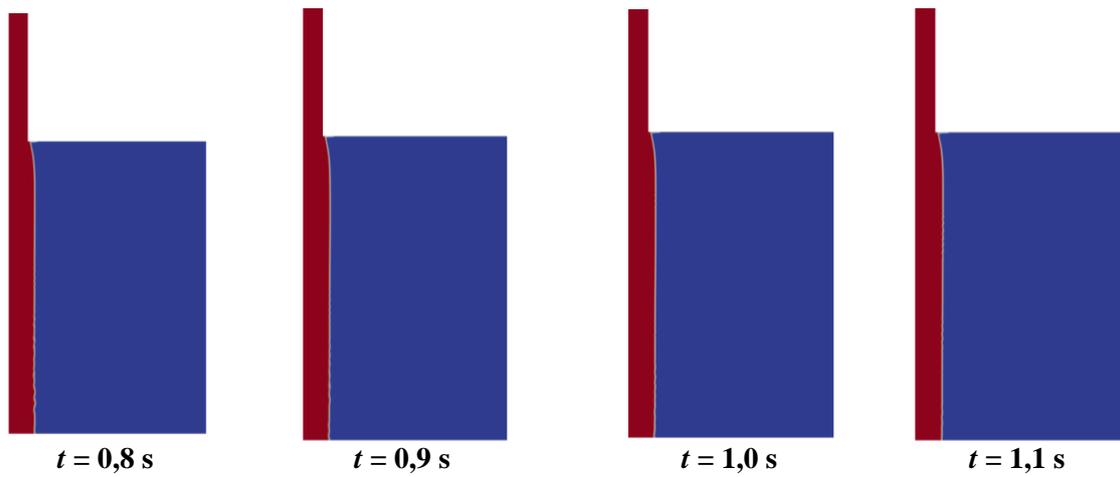


Figura 4.24: Evolução da superfície livre desde $t = 0$ até $t = 1,1 \text{ s}$ para geometria com plano de simetria.

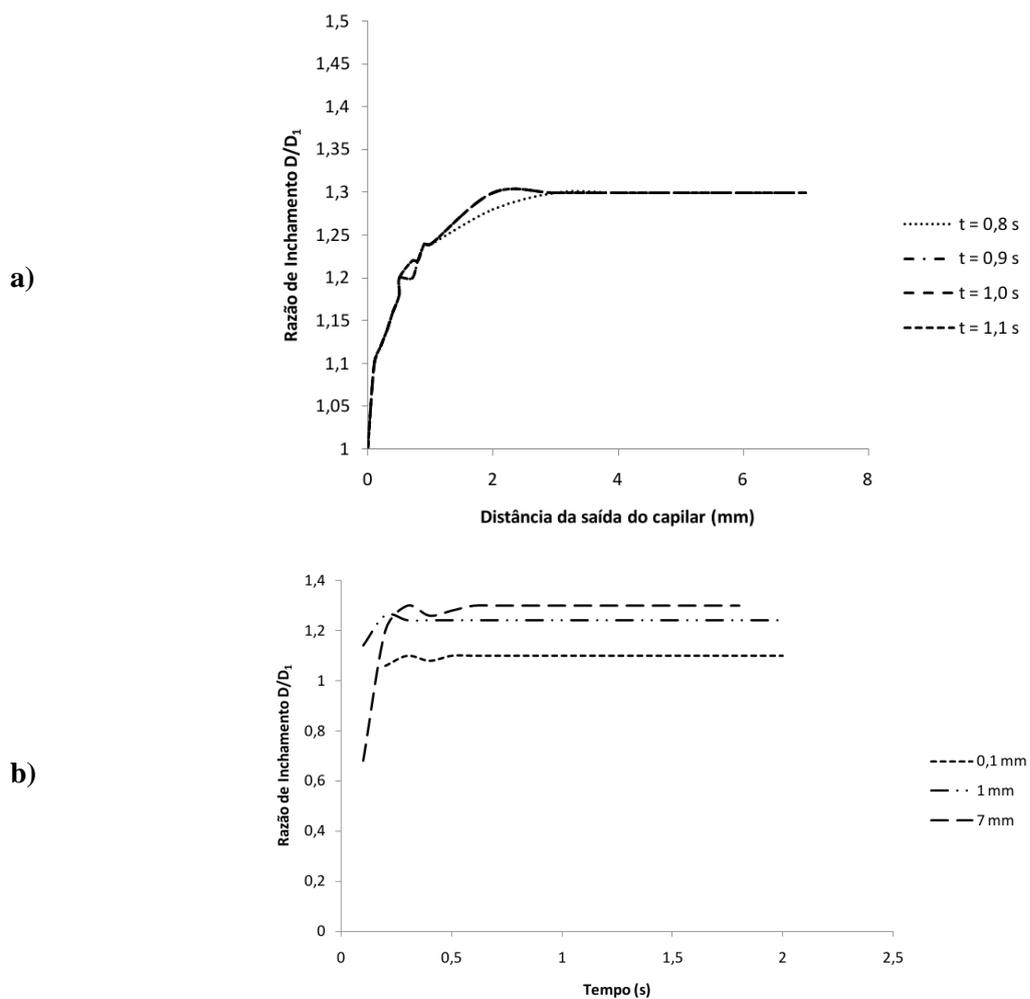


Figura 4.25: Razão de inchamento em função de: **a)** distância da saída do capilar para diferentes tempos de simulação e **b)** tempo para diferentes distâncias a partir da saída do capilar.

Observou-se que a pequena difusão presente na frente de avanço não afeta significativamente o resultado, com suporte nos seguintes fatos: *i*) o valor obtido para o parâmetro λ está de acordo com o obtido por outra técnica, como comentado anteriormente; e *ii*) a predição do perfil de inchamento em estado estacionário obtida usando esta geometria e o valor de λ estimado é similar à encontrada por *Béraudo et al.* (1998) em simulação pelo método dos elementos finitos utilizando os valores de parâmetros reportados por *Carrot et al.* (1996), ficando inclusive mais próxima do perfil experimental, como mostra a Figura 4.26. O erro médio obtido para a razão de inchamento com relação ao respectivo valor experimental foi de 2% utilizando o valor de λ estimado no presente trabalho, enquanto este erro foi de 1,8 % nos resultados obtidos por *Béraudo et al.* (1998).

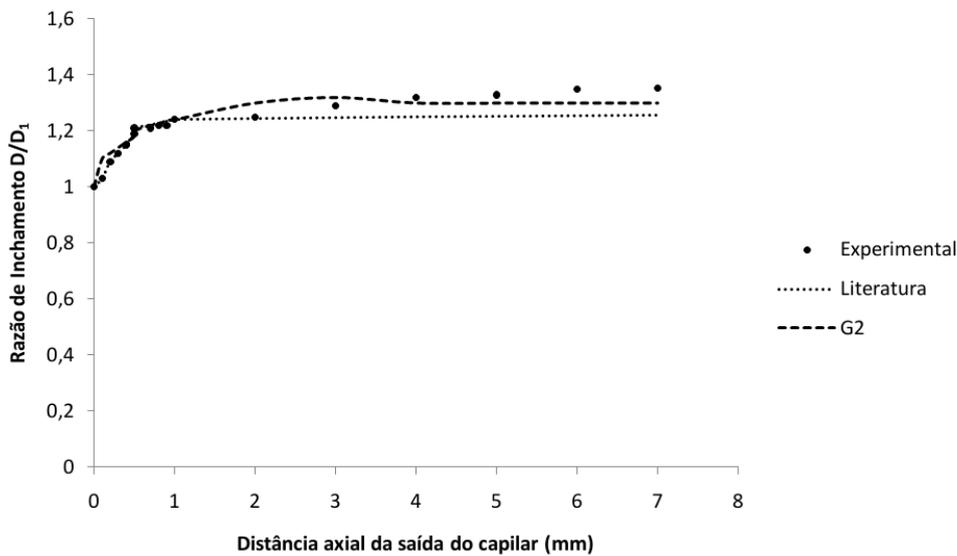


Figura 4.26: Comparação entre razão de inchamento experimental, encontrada na literatura e obtida com a geometria G2.

Capítulo 5

Conclusão

Foi apresentada neste trabalho uma metodologia de estimação de parâmetros viscoelásticos baseada na simulação em fluidodinâmica computacional. Utilizou-se dois estudos de caso para testar a implementação da metodologia: um com solução analítica envolvendo o escoamento de um fluido newtoniano entre placas paralelas e outro com dados experimentais relativos ao escoamento de um fluido viscoelástico na saída de um capilar.

Em ambos os casos a validação dos resultados, baseada na comparação entre soluções analíticas ou dados experimentais e a simulação CFD do respectivo escoamento de referência, permitiu concluir que a modelagem dos problemas gerou resultados com acurácia suficiente para que os modelos pudessem ser utilizados na etapa de estimação de parâmetros. No caso do escoamento na saída de um capilar, as modificações efetuadas nas condições de contorno na geometria denominada G2 levaram a uma melhora significativa na predição do inchamento do extrusado, sendo que o valor do erro com relação ao valor experimental foi muito próximo a valores encontrados na literatura para a simulação numérica do fenômeno.

Os valores para os erros obtidos na estimação da viscosidade newtoniana e do parâmetro não linear do modelo viscoelástico são da mesma ordem de grandeza de erros encontrados na literatura para os parâmetros obtidos através dos métodos clássicos de estimação, o que possibilita concluir que a metodologia apresentada pode ser uma boa alternativa aos métodos clássicos de obtenção de parâmetros não lineares de modelos constitutivos viscoelásticos.

Como sugestão para trabalhos futuros propõe-se estender a metodologia apresentada à caracterização completa do espectro de relaxação de um polímero. Para isso será necessário desenvolver os modelos numéricos de outros tipos de escoamentos de polímeros, que sejam representativos daqueles que ocorrem nos processos industriais. Além disso, é necessário avaliar estratégias numéricas para a redução do tempo de cálculo das simulações e do procedimento geral de estimação, além de estratégias para o aumento da estabilidade da otimização.

Referências Bibliográficas

- Al-Muslimawi, A., Tamaddon-Jahromi, H. R. & Webster, M. F. - Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, **191**, p.45 (2013).
- Azaiez, J., Guénette, R. & Aït-Kadi, A. - Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, **62**, p.253 (1996).
- Béraudo, C., Fortin, A., Coupez, T., Demay, Y., Vergnes, B. & Agassant, J.F. – J. Non-Newtonian Fluid Mech., **75**, p.1 (1998).
- Bird, R.B., Armstrong, R.C. & Hassager, O. – “*Dinamics of Polymeric Liquids*”, John-Wiley, New York (1987).
- Bird, R. B., Dotson, P. J. & Johnson, N. L. - J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **7**, p.213, (1980).
- Borges, L.E., “*Python para desenvolvedores*”, Edição do Autor, 2010.
- Bretas, R.E.S. & d’Avila, M.A. - “*Reologia de Polímeros Fundidos*”, EDUFSCAR, 2005.
- Calin, A., Wilhelm, M. & Balan, C. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **165**, p.1564, (2010).
- Carrot, C., Guillet, J., Revenu, P., Arsac, A. Piau, J.M. & Agassant, J.F. – “*Rheology for Polymer Melt Processing*”, Elsevier, Amsterdam (1996).
- Cooreman, S., Lecompte, D., Sol, H., Vantomme, J., & Debruyne, D. – Int. J. Solids and Structures, **44**, p.4329 (2007).
- Crochet, M.J. & Keunings, R. – J. of Non-Newtonian Fluids Mech., **10**, p.339, 1982.
- Favero, J.L. – “*Simulação de escoamentos viscoelásticos : desenvolvimento de uma metodologia de análise utilizando o software OpenFOAM e equações constitutivas diferenciais*”. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009.
- Favero, J.L., Secchi, A.R., Cardozo, N.S.M., Jasak, H. – J. of Non-Newtonian Fluid Mechanics, **165**, p.1625, 2010.
- Favero, J. L., Secchi, A. R., Cardozo, N. S. M. & Jasak, H. – Comp. & Chem. Eng., **34**, p.1984 (2010).
- Fox, R.W., McDonald, A.T., Pritchard, P.J., “*Introdução à Mecânica dos Fluidos*”, LTC, 2006.
- Fulchiron, R., Revenu, P., Kim, B., Carrot, C., & Guillet, J. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **69**, p.113 (1997).
- Ganvir, V., Lele, A., Thaokar, R. & Gautham, B. P. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **156**, p.21, (2009).

- Ganvir, V., Gautham, B. P., Pol, H., Bhamla, M. S., Sclesi, L., Thaokar, R., Lele, A. & Mackley, M. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **166**, p.12, (2011).
- Ghouati, O. & Gelin, J. – Comp. Material Sci., **21**, p.57 (2001).
- Giesekus, H. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **11**, p. 69, (1982).
- Guillet, J., Carrot, C., Kim, B. S., Agassant, J. F., Vergnes, B., Béraudo, C., Clermont, J.R., Normandin, N. & Béreaux, Y. – “*Rheology for polymer Melts Processing*”, J.M. Piau and J.F. Agassant, 1996.
- Harlow, F. H & Welch, J. E. - Physics of Fluids, **8**, p.2182, (1965).
- Hesteness, M.R. & Stiefel, E. – J. of Research of the National Bureau of Standards, **49**, p.409, (1952).
- Hirt, C.W. & Nichols, B.D. – J. of Computational Physics, **39**, p. 201 (1981).
- Huang, D.C & White, J.L. – Polym. Eng. Sci. **19**, p.609 (1979).
- Huang, S., Chen, X., Lu, C., Peng, Z., Wan, C., He, X. & Sun, M. – J. of Hydrodynamics, **22**, p.915 (2010).
- Issa, R. I. – J. of Comp. Physics, **62**, p.40, (1986).
- Jasak, H. – “*Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows.*” Tese de Doutorado, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London, (1996).
- Kajberg, J. & Lindkvist, G. – Int. J. of Solids and Structures, **41**, p.3439 (2004).
- Kavanagh, K.T. – Int. J. Solids and Structures, **7**, p.11 (1971).
- Larson, R.G. – “*Constitutive equations for polymer melts and solutions*”, Butterworths, Boston, (1988).
- Lecompte, D., Smits, A., Sol, H., Vantomme, J. & Van Hemelrijck, D. – Int. J. of Solids and Structures, **44**, p.1643 (2007).
- Leonov, A. I. - Rheologica Acta, **15**, p.85, (1976).
- Liu, Q., Liu, W., Ruan, F. & Qiu, H. – J. of Materials Proc. Tech., p.187, (2007).
- Luo, X.L. & Tanner, R. I. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **21**, p.179, (1986).
- Macosko, C. - “*Rheology: Principles, Measurements and Applications*”, VCH Publishers, (1994).
- McLeish, T. C. B. & Larson, R. G. – J. of Rheology, **42**, p.81, (1998).

-
- Meuwissen, M.H.H., Oomens, C.W.J., Baaijens, F.P.T., Petterson, R. & Janssen, J. D. – J. of Material Proc. Tech., **75**, p.204 (1998).
- Mitsoulis, E. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **165**, p.812, (2010).
- Molimard, J., Le Riche, A., Vautrin, A. & Lee, J.R., - Experimental Mechanics, **45**, p.404, 2005.
- Moussawi, A., Lubineau, G., Florentin, E. & Blaysat, B. – Comp. Meth. in Applied Mech. and Eng., **265**, p.1, (2013).
- Nelder, J.A. & Mead, R. - The Computer J., **7**, p.308 (1965).
- Oldroyd, J. G. - Proceedings of Royal Society, **A200**, p.523, 1950.
- “OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox – User’s Guide”, 2012.
www.openfoam.com
- Pagnacco, E., Moreau, A. & Lemosse, D. – Mat. Sci. and Eng., **A 452-453**, p.737, (2007).
- Park, H. M., Hong, S. M. & Lim, J. Y. – Chem. Eng. Sci., **62**, p.6806 (2007).
- “ParaView User’s Guide (v3.14)”, (2012). Disponível em:
<http://denali.princeton.edu/Paraview/ParaViewUsersGuide.v3.14.pdf>.
- Patankar, S.V. - “*Numerical heat transfer and fluid flow*”, Hemisphere Publishing Corporation, (1981).
- Phan-Thien, N. & Tanner, R.I. - J. Non-Newtonian Fluid Mech., **2**, p.353 (1977).
- Phan-Thien, N. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **26**, p.327, 1988.
- Pichler, B., Lackner, R. & Mang, H. A. – Int. J. for Num. Meth. in Eng., **57**, p.1943(2003).
- Pottier, T., Toussaint, F. & Vacher, P. - European J. of Mech., **30**, p.373, (2011).
- Rusche, H. Tese de Doutorado, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London (2003).
- Russo, G. – “*Spectral element method for predicting the die-swell of Newtonian and viscoelastic fluids*”, Tese de Doutorado, Cardiff University, Cardiff, 2009.
- Shi, Y., Sol, H. & Hua, H., J. of Sound and Vibration, **290**, p.1234 (2006).
- Sol, H., Hua, H., Visscher, J. De, Vantomme, J. & De Wilde, W. P. – NDT&E International, **30**, p.85(1997).
- Tomé, M. F., Paulo, G. S., Pinho, F. T. & Alves, M. A. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **165**, p.247–262. (2010).

Trang, C.T. & Yeow, Y. L. – J. of Non-Newtonian Fluid Mech., **20**, p.103 (1986).

Versteeg, H.K., Malalasekera, W., “*An Introduction to Computational fluid Dynamics*”, Longman scientific & Technical, 1995.

“*VTK User's Guide*” Kitware Inc. 11th Edition (2010).

Wang, Z. & Hirai, S. – J. of Food Eng., **102**, p.136, (2011).

White, J. L. & Metzner, A. B. – J. of Applied Polymer Sci., **7**, p.1867, (1963)

Wong, A.C.Y. & Liang, J.Z. – Chem. Eng. Sci., **52**, p.3219 (1997).

Xu, X., Zhao, G., Qin, S., & Wang, W. - Chinese J. of Chem. Eng., **19**, p.10, (2011).

Xue, S.C., Tanner, R.I. & Phan-Thien, N. – Comp. Methods Appl. Mech. Eng., **188**, p.305, (1999).