**Simulação numérica de escoamentos tridimensionais com
superfícies livres governados pelo modelo Giesekeus**

Reginaldo Merejolli

Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de
Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Reginaldo Merejoli

Simulação numérica de escoamentos tridimensionais com superfícies livres governados pelo modelo Giesekus

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Murilo Francisco Tomé

USP – São Carlos
Dezembro de 2017

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M558s Merejolli, Reginaldo
 Simulação numérica de escoamentos tridimensionais
 com superfícies livres governados pelo modelo
 Giesekus / Reginaldo Merejolli; orientador Murilo
 Francisco Tomé. -- São Carlos, 2017.
 91 p.

 Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em
 Ciências de Computação e Matemática Computacional) --
 Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
 Universidade de São Paulo, 2017.

 1. Diferenças finitas. 2. Escoamentos
 viscoelásticos. 3. Superfícies livres. 4. Modelo
 Giesekus. 5. Inchamento do extrudado. I. Tomé,
 Murilo Francisco, orient. II. Título.

Reginaldo Merejoli

**Numerical simulation of three-dimensional free surfaces
flows governed by Giesekus model**

Doctoral dissertation submitted to the Institute of
Mathematics and Computer Sciences – ICMC-USP, in
partial fulfillment of the requirements for the degree of
the Doctorate Program in Computer Science and
Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Murilo Francisco Tomé

**USP – São Carlos
December 2017**

*Dedico as pessoas mais importantes da minha vida: **meus pais.***

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus e a Nossa Senhora Aparecida, por estarem sempre presentes em minha vida, enchendo-a de graças e alegrias.

Ao meu orientador, professor Murilo Francisco Tomé, pelos ensinamentos, apoio, paciência e pela amizade ao longo desta caminhada.

À minha orientadora de mestrado, professora Gilcilene Sanchez de Paulo, pelo incentivo, apoio, amizade e pelas conversas.

Aos professores do LMACC/ICMC que sempre estiveram presentes nos momentos de dúvidas.

Aos amigos e colegas do CPPP/UFMS e CPTL/UFMS, pela compreensão, risadas e pelas conversas sempre muito produtivas.

Aos amigos e colegas do LMACC/ICMC pela constante troca de conhecimento e pelos momentos de diversão.

À minha família, em especial aos meus pais, Luiz e Isabel, pelo apoio e pela confiança.

À minha namorada, Laís, pela paciência, apoio, dedicação, ajuda e sugestões e, principalmente, pela constante troca de conhecimento.

“A persistência é o menor caminho do êxito”. (Charles Chaplin)

RESUMO

MEREJOLLI, R.. **Simulação numérica de escoamentos tridimensionais com superfícies livres governados pelo modelo Giesekus**. 2017. 91 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos tridimensionais com superfícies livres governados pelo modelo constitutivo Giesekus. As equações governantes são resolvidas pelo método de diferenças finitas numa malha deslocada. A superfície livre do fluido é modelada por partículas marcadoras, possibilitando assim a visualização e localização da superfície livre do fluido. A equação constitutiva de Giesekus é resolvida utilizando as seguintes formulações: método de Runge-Kutta de segunda ordem (também conhecido como método de Euler modificado) e transformação logarítmica do tensor conformação. O método numérico apresentado é verificado comparando-se os resultados obtidos por meio de refinamento de malha para os escoamentos em um tubo e de um jato incidindo em uma placa plana. Resultados de convergência foram obtidos por meio de refinamento de malha do escoamento totalmente desenvolvido em um tubo. Os resultados numéricos obtidos incluem a simulação de um jato incidindo em uma caixa vazia e a simulação do inchamento do extrudado (*dieswell*) para vários números de Weissenberg utilizando diferentes valores do fator de mobilidade do fluido. Resultados adicionais incluem simulações do fenômeno *delayed dieswell* para altos números de Weissenberg e altos valores do número de Reynolds. Uma comparação qualitativa com resultados experimentais é apresentada.

Palavras-chave: Diferenças finitas, Escoamentos viscoelásticos, Superfícies livres, Modelo Giesekus, Inchamento do extrudado.

ABSTRACT

MEREJOLLI, R.. **Numerical simulation of three-dimensional free surfaces flows governed by Giesekus model.** 2017. 91 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICM-C/USP), São Carlos – SP.

In this work, a numerical method for simulating viscoelastic free surface flows governed by the Giesekus constitutive equation is developed. The governing equations are solved by the finite difference method on a staggered grid. The fluid free surface is approximated by marker particles which enables the visualization and location of the free surface fluid. The Giesekus constitutive equation is solved by the following techniques: second-order Runge-Kutta, conformation tensor and logarithmic transformation of the conformation tensor. The numerical method is verified by comparing the numerical solutions obtained on a series of embedding meshes of the flow in a tube and by the flow produced by a jet flowing onto a planar surface. Additional verification and convergence results are obtained by solving tube flow employing several meshes. Results obtained include the simulation of a jet flowing into a three dimensional container and the simulation of extrudate swell using several values of the Reynolds and Weissenberg numbers and different values of the mobility parameter α . Furthermore, we present results from the simulation of the phenomenon know as *delayed dieswell* using high Weissenberg and Reynolds numbers. Comparisons with experimental results are given.

Key-words: Finite difference, Viscoelastic flows, Free surface, Giesekus model, Extrudate swell.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Localização das variáveis numa célula computacional 3D.	39
Figura 2 – Exemplo de classificação das células para um escoamento bidimensional. . .	40
Figura 3 – Tipos de superfícies planas: (a) Superfície-1D, (b) Superfície-2D e (c) Superfície-3D.	41
Figura 4 – Célula de superfície (S) com apenas a face $(i + \frac{1}{2})$ em contato com células vazias (E).	46
Figura 5 – Células de superfície (S) com duas ou três faces adjacentes em contato com faces de células vazias (E).	47
Figura 6 – Domínio computacional utilizado na simulação do escoamento em um tubo.	50
Figura 7 – Visualização do escoamento nos tempos: (a) $t = 3$, (b) $t = 5$, (c) $t = 8$ e (d) $t = 50$	50
Figura 8 – Perfil da velocidade w (a) e componente τ^{zz} do tensor extra-tensão (b) capturados no meio do tubo ($z = 5$, $y = 1$ e $0 < x < 2$). Dados utilizados: $Re = 1.0$, $Wi = 1.0$ e $\alpha = 0.1$	51
Figura 9 – Perfil da componente τ^{xz} (a) e perfil da componente τ^{xx} do tensor (b) capturados no meio do tubo ($z = 5$, $y = 1$ e $0 < x < 2$). Dados utilizados: $Re = 1.0$, $Wi = 1.0$, $\alpha = 0.1$	51
Figura 10 – Visualização de um jato de fluido Newtoniano incidindo sobre uma placa plana.	53
Figura 11 – Domínio computacional utilizado na simulação do enchimento de uma caixa tridimensional.	54
Figura 12 – Escoamento do jato ao atingir o fundo da caixa utilizando várias malhas. Visualização obtida no plano xz	55
Figura 13 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional com um fluido Giesekus em tempos selecionados. Dados utilizados: $Re = 1.5$, $H/D = 15$, $Wi = 10$ e diferentes valores de α	56
Figura 14 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional com um fluido Giesekus em tempos selecionados. Dados utilizados: $Re = 1.5$, $H/D = 15$, $Wi = 100$ e diferentes valores de α	58
Figura 15 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional com um fluido Giesekus em tempos selecionados. Dados utilizados: $Re = 1.5$, $H/D = 15$, $Wi = 200$ e diferentes valores de α	60

Figura 16 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional nos tempos $t = 125, 250$ para diferentes valores de Wi . Dados utilizados: $Re = 1.5$ e $\alpha = 0.01$	62
Figura 17 – Esboço do domínio computacional (a), ilustração da geometria utilizada na simulação do inchamento do extrudado (b), e resultado experimental mostrando o inchamento de um fluido viscoelástico (c).	63
Figura 18 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $\alpha = 0.01$ e diferentes valores de Wi	65
Figura 19 – Velocidade w adjacente a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $\alpha = 0.01$ e diferentes valores de Wi	66
Figura 20 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 1$ e diferentes valores do fator de mobilidade α	67
Figura 21 – Primeira e segunda diferenças de tensões normais $N1(x^*, y^*, z)$ e $N2(x^*, y^*, z)$. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 1.0$ e diferentes valores do fator de mobilidade α	68
Figura 22 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores do fator de mobilidade α	69
Figura 23 – Primeira e segunda diferenças de tensões normais $N1(x^*, y^*, z)$ e $N2(x^*, y^*, z)$. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 2.0$ e diferentes valores do fator de mobilidade α	70
Figura 24 – Velocidade $w(x^*, y^*, z)$ na linha longitudinal adjacente a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 1, 2$ e diferentes valores de α	70
Figura 25 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 3$ e diferentes valores do fator de mobilidade α	71
Figura 26 – Primeira e Segunda diferenças de tensões normais. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 3$ e diferentes valores do fator de mobilidade α	72
Figura 27 – Velocidade w na linha longitudinal adjacente a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 3$ e diferentes valores de α	72
Figura 28 – Representação do fenômeno <i>Delayed Dieswell</i>	73
Figura 29 – Descrição do fenômeno inchamento do extrudado retardado (a). Definição da distância de retardamento (<i>delay</i>) (b).	74
Figura 30 – Visualização das linhas de corrente de <i>dieswell</i> e de <i>delayed dieswell</i> . (b)	75
Figura 31 – Linhas de Corrente da simulação inchamento do extrudado retardado. Dados utilizados $E = 0.1$	76
Figura 32 – Visualização do inchamento do extrudado retardado em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 17.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores de α	77

Figura 33 – Velocidade w (a) e primeira diferença de tensões normais $N1$ (b) adjacentes a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 17.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores de α	77
Figura 34 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 10$, e diferentes valores de Wi	79
Figura 35 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 12.5$ e diferentes valores de Wi	79
Figura 36 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 15$ e diferentes valores de Wi	79
Figura 37 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 17.5$ e diferentes valores de Wi	80
Figura 38 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 20$ e diferentes valores de Wi	80
Figura 39 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 10$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi	81
Figura 40 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 12.5$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi	81
Figura 41 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 15.0$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi	82
Figura 42 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 17.5$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi	83
Figura 43 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 20$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi	83
Figura 44 – Distâncias de retardamento do inchamento do extrudado.	84
Figura 45 – Comparação qualitativa com resultados experimentais. Dados utilizados: $Re = 20$, $Wi = 2$ e $Re = 17.5$, $Wi = 2$	84

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Erros nas malhas $M1$, $M2$, $M3$ e $M4$ do escoamento num tubo em relação à malha M_{ref}	52
Tabela 2 – Dados utilizados nas simulações do enchimento de uma caixa tridimensional.	54
Tabela 3 – Dados utilizados nas simulações do dieswell.	64
Tabela 4 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi	64
Tabela 5 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro α	72
Tabela 6 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi	80
Tabela 7 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi	81
Tabela 8 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi	82
Tabela 9 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi	82
Tabela 10 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi	83

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
2	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	27
2.1	Adimensionalização das Equações	29
2.2	Condições Iniciais e de Contorno	31
2.2.1	<i>Contornos de Entrada e Saída</i>	31
2.2.2	<i>Condições de Contorno na Superfície Livre</i>	32
2.3	Método Numérico	33
2.3.1	<i>Cálculo de $u(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$</i>	33
2.3.2	<i>Cálculo do tensor $\tau(\mathbf{x}, t_{n+1})$</i>	35
2.3.3	<i>Algoritmo Computacional</i>	36
3	METODOLOGIA NUMÉRICA	39
3.1	Aproximação das Equações	40
3.1.1	<i>Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre</i>	45
3.1.2	<i>Cálculo do passo no tempo</i>	47
4	RESULTADOS	49
4.1	Escoamento totalmente desenvolvido em um tubo	49
4.2	Jato oscilante (<i>Jet Buckling</i>)	53
4.3	Inchamento do Extrudado (<i>Dieswell</i>)	63
4.4	Inchamento do Extrudado Retardado (<i>Delayed Dieswell</i>)	73
4.4.1	<i>Cálculo da distância de retardamento do inchamento do extrudado</i>	75
4.4.2	<i>Resultados obtidos</i>	76
5	CONCLUSÕES	85
	Referências	87

INTRODUÇÃO

A simulação numérica de fluidos Newtonianos e não-Newtonianos tem sido tema de intensa pesquisa em vários centros do mundo e tornou-se possível a partir da década de 50, com o surgimento do computador. Esta área de pesquisa ficou conhecida como Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) e, desde então, os desenvolvimentos nessa área têm sido intensos devido a sua importância em aplicações nas indústrias petroquímica, automotiva, biomédica, farmacêutica, alimentícia, entre outras.

Neste trabalho, uma classe particular de fluidos não-Newtonianos, conhecida como fluidos viscoelásticos, é abordada. Esses fluidos, quando submetidos a uma deformação, apresentam simultaneamente, efeitos viscosos e elásticos e, devido a esta combinação de efeitos, é comum serem observados fenômenos inesperados, como por exemplo, *rod climbing* ((DEBBAUT; HOCQ, 1992), (DEBBAUT, 1993), (LIAO; HU; JOSEPH, 1994), (LUO, 1999)), *jet buckling* ((OISHI *et al.*, 2012), (TOMÉ *et al.*, 2014), (VILLE; SILVA; COUPEZ, 2011), (PAULO; TOMÉ; MCKEE, 2007)), *extrudate swell* ((GANVIR *et al.*, 2011), (MOMPEAN *et al.*, 2011), (TOMÉ *et al.*, 2010), (OISHI *et al.*, 2008)), entre outros. Tais comportamentos estão associados as deformações das moléculas poliméricas as quais são responsáveis pelos efeitos de elasticidade resultantes da memória do fluido. Muitos pesquisadores têm utilizado equações constitutivas apropriadas para modelar esses tipos de fluidos (ver, por exemplo, Bird, Armstrong e Hassager (1987), Owens e Phillips (2002)).

Na literatura pode-se encontrar uma grande quantidade de trabalhos sobre solução numérica de modelos viscoelásticos, como por exemplo, solução numérica do modelo constitutivo *Upper-Convected Maxwell* (UCM) ((CROCHET; KEUNINGS, 1980), (TOMÉ *et al.*, 2009), (TOMÉ *et al.*, 2012)), soluções do modelo Oldroyd-B ((THAIS; HELIN; MOMPEAN, 2006), (TOMÉ *et al.*, 2008), (CRUZ *et al.*, 2014)), investigações utilizando o modelo PTT ((PAULO; TOMÉ; MCKEE, 2007), (TOMÉ *et al.*, 2010), (FERRÁS; NÓBREGA; PINHO, 2012)) e o modelo de Giesekus ((GIESEKUS, 1982), (SCHLEINIGER; WEINACHT, 1991)),

(CRUZ; PINHO, 2007), (FERRÁS; NÓBREGA; PINHO, 2012)), entre outras.

Devido as aplicações em processos industriais, existe um grande interesse em desenvolver métodos numéricos eficientes para simular escoamentos viscoelásticos com superfícies livres em movimento. Porém, esta não é uma tarefa fácil, dado que, além de resolver as equações governantes, é necessário determinar a superfície livre do fluido, a qual varia com o tempo e o espaço. Outro desafio é simular escoamentos sujeitos a altos números de Weissenberg, já que a maioria dos métodos numéricos tornam-se instáveis para valores de Weissenberg $\gg 1$ (ver, por exemplo, Fattal e Kupferman (2004) e Hulsen, Fattal e Kupferman (2005)).

Uma das primeiras técnicas para simular escoamentos de fluidos com superfícies livres foi o método MAC (*Marker-and-Cell*), que foi apresentado por Harlow e Welch (1965), Welch *et al.* (1966) na década de 60. Este método é baseado na técnica de diferenças finitas e utiliza variáveis primitivas, velocidade e pressão. As principais características deste método são o uso de uma malha deslocada e de partículas marcadoras para a representação do fluido. As partículas movimentam-se de uma célula para outra, de acordo com o campo de velocidades calculado e assim podem simular escoamento com superfície livre em movimento. A partir do método MAC, Amsden e Harlow (1970) apresentaram o método MAC simplificado, o SMAC (*Simplified Marker-and-Cell*) que introduz melhorias no método MAC e elimina problemas associados com condições de contorno e reduz o custo computacional.

Na década de 90, Tomé e McKee (1994) apresentaram uma extensão do método SMAC conhecido como GENSMAC (*GENeralized-Simplified-Marker-and-Cell*), que tem como principal característica utilizar partículas marcadoras virtuais apenas na superfície livre do fluido e inclui tratamento para contornos curvos. O GENSMAC foi estendido para tratar escoamentos viscoelásticos de fluidos Oldroyd-B Tomé *et al.* (2002) e outras aplicações dessa metodologia podem ser encontradas nos trabalhos, (TOMÉ *et al.*, 2007), (TOMÉ *et al.*, 2007), (PAULO; TOMÉ; MCKEE, 2007), (OISHI *et al.*, 2012), entre outros.

Motivados por aplicações industriais, Tomé *et al.* (2001) desenvolveram uma extensão da metodologia GENSMAC para simular escoamentos tridimensionais com superfícies livres, denominada GENSMAC3D. Este método objetiva simular escoamentos Newtonianos tridimensionais com superfícies livres em domínios complexos e foi aplicado para resolver problemas tais como enchimento de contêineres, *jet buckling*, entre outros. GENSMAC3D foi desenvolvido para simular escoamentos não-Newtonianos tridimensionais e atualmente, pode resolver escoamentos definidos pelas equações constitutivas GNF (Generalized Newtonian Fluid) Tomé *et al.* (2004), OLDROYD-B Tomé *et al.* (2008), PTT Tomé *et al.* (2010), UCM Tomé *et al.* (2012).

O modelo reológico Giesekus tem atraído muitos pesquisadores porque consegue ajustar muitas propriedades de fluidos poliméricos e pode prever primeira e segunda diferença de tensões normais em escoamentos utilizados em processos industriais. No entanto, existem poucos resultados provenientes da aplicação deste modelo na literatura e os trabalhos encontrados

têm utilizado o método de elementos finitos (ÖZTEKIN; BROWN; MCKINLEY, 1994), (MU *et al.*, 2012), (MU *et al.*, 2013), (JOIE; GRAEBLING, 2013). Além disso, trabalhos envolvendo superfícies livres são poucos e usualmente empregam geometrias bidimensionais ou axissimétricas e analisam escoamentos estacionários. Um estudo da aplicação desse modelo reológico em escoamentos tridimensionais envolvendo superfícies livres e uma análise da influência do parâmetro α no escoamento ainda não foi realizado.

O trabalho desenvolvido nesta tese teve como objetivo desenvolver um método numérico para simular escoamentos complexos tridimensionais com superfícies livres modelados pela equação constitutiva Giesekus (GIESEKUS, 1982). A metodologia proposta aborda o método de diferenças finitas e emprega o método de partículas marcadoras para representar o fluido. Essa pesquisa é uma aplicação do método GENSMAC3D para o tratamento de escoamentos viscoelásticos governados por uma equação constitutiva não-linear. Os principais resultados obtidos nesse trabalho incluem:

- Implementação da equação constitutiva Giesekus utilizando a técnica *log-conformation*. O motivo da utilização dessa técnica é que pretende-se simular escoamentos com alta elasticidade (números de Weissenberg altos);
- Verificação da metodologia empregada. Para isso, simulou-se o escoamento desenvolvido em um tubo e utilizou-se resultados de refinamento de malha para mostrar a convergência do método numérico empregado;
- O fenômeno *jet buckling* foi simulado para altos números de Weissenberg e os resultados mostraram que o efeito da elasticidade pode conduzir ou suprimir esse fenômeno;
- O problema do inchamento do extrudado foi simulado para altos valores do número de Weissenberg e do número de Reynolds. O objetivo foi demonstrar que o método desenvolvido pode resolver problemas com alta taxa de elasticidade (representado por números de elasticidade, $E = Wi/Re$, elevados) e com alta inércia (representado pelo número de Mach viscoelástico, $M = \sqrt{Re Wi}$ altos).

As seções deste trabalho estão organizadas da seguinte forma:

- Capítulo 2: Formulação Matemática, onde são apresentadas as equações governantes, as condições de contorno em fronteiras fixas e de superfícies livres, a metodologia utilizada e o algoritmo computacional.
- Capítulo 3: Formulação Numérica, onde são descritas as aproximações por diferenças finitas das equações governantes.
- Capítulo 4: Resultados, onde é feita a verificação do método numérico e o estudo dos escoamentos com superfícies livres simulados neste trabalho.

- Capítulo 5: Conclusões e considerações finais.

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

As equações governantes para escoamentos incompressíveis isotérmicos de fluidos modelados pelo modelo Giesekus são as equações de conservação de quantidade de movimento e a equação da continuidade, que podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^T) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.2)$$

em que t é o tempo, $\mathbf{u}$ é o campo de velocidades, p é a pressão, $\mathbf{g}$ é o campo gravitacional, ρ é a massa específica do fluido e $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor extra-tensão. Neste trabalho, este tensor é definido pela equação constitutiva de Giesekus (SCHLEINIGER; WEINACHT, 1991), definida por:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \frac{\alpha}{\eta_P} (\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}) + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_P \mathbf{D}, \quad (2.3)$$

em que α é o fator de mobilidade do fluido, η_P e λ são a viscosidade polimérica e o tempo de relaxação do fluido, respectivamente. A derivada contravariante $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ é definida por:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\tau}) - (\nabla \mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{u})^T.$$

Para resolver as equações (2.1)-(2.3) foi utilizada a transformação *Elastic-Viscous-Split-Stress* (EVSS) (RAJAGOPALAN; ARMSTRONG; BROWN, 1990) que permite escrever o tensor extra-tensão como uma combinação linear de um tensor Newtoniano e um tensor não-Newtoniano, como segue:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_0 \mathbf{D} + \mathbf{S}, \quad (2.4)$$

em que o tensor não-Newtoniano $\mathbf{S}$ é responsável por efeitos elásticos no escoamento, $\eta_0 = \eta_P + \eta_S$ é a viscosidade total do material e η_S é a viscosidade do solvente. Se a solução polimérica

não contiver solvente então $\eta_S = 0$. Aplicando esta transformação na equação de conservação de quantidade de movimento (2.1), obtém-se a seguinte equação transformada:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \bar{p} + \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{S}), \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{S}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) + \left(\frac{\eta_0}{\rho} \right) \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{g}, \quad (2.5b)$$

em que $\bar{p} = \frac{p}{\rho}$ denota a pressão por unidade de massa específica.

Na literatura encontram-se muitos estudos que atestam que os métodos usuais para calcular o tensor extra-tensão apresentam problemas de instabilidade numérica devido aos altos gradientes desse tensor. Visando solucionar esses problemas, [Fattal e Kupferman \(2004\)](#) desenvolveram a técnica da transformação logaritmica do tensor conformação. Esse método permite simular escoamentos com alta elasticidade, os quais envolvem altos gradientes do tensor extra-tensão.

Para o modelo de Giesekus, o tensor extra-tensão $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t)$ está relacionado com o tensor conformação $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ pela equação

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t) = \frac{\eta_P}{\lambda} [\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{I}], \quad (2.6)$$

a qual, ao ser introduzida na equação (2.3), resulta na equação

$$\lambda \left[\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{C}) - (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{C} - \mathbf{C} (\nabla \mathbf{u})^T \right] = P(\mathbf{C}), \quad (2.7)$$

sendo $P(\mathbf{C}) = -[\mathbf{C} - \mathbf{I} + \alpha(\mathbf{C} - \mathbf{I})^2]$. Para resolver a equação (2.7), o gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$ é decomposto na forma

$$\nabla \mathbf{u} = \boldsymbol{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{C}^{-1}, \quad (2.8)$$

onde $\boldsymbol{\Omega}$ e $\mathbf{N}$ são tensores anti-simétricos e $\mathbf{B}$ é um tensor simétrico que comuta com $\mathbf{C}$. Esta decomposição foi introduzida por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#), que apresentaram o método da transformação logarítmica do tensor conformação $\mathbf{C}$.

Substituindo $\nabla \mathbf{u}$ pela decomposição (2.8) na equação (2.7), obtém-se:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{C} - (\boldsymbol{\Omega} \mathbf{C} - \mathbf{C} \boldsymbol{\Omega}) - 2\mathbf{B}\mathbf{C} = -\frac{1}{\lambda} P(\mathbf{C}). \quad (2.9)$$

O tensor $\mathbf{C}$ é simétrico e definido positivo, portanto existe uma matriz $\mathbf{R}$, de forma que

$$\mathbf{C} = \mathbf{R}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{R}^T, \quad (2.10)$$

em que $\mathbf{R}$ é a matriz que contém os autovetores de $\mathbf{C}$ e $\boldsymbol{\Lambda}$ é uma matriz diagonal com os autovalores de $\mathbf{C}$. A estratégia utilizada por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#) consiste em aplicar a transformação

$$\boldsymbol{\Psi} = \log(\mathbf{C}). \quad (2.11)$$

Assim, $\mathbf{C} = e^{\Psi}$, e a partir da equação (2.9), obtém-se a seguinte equação de evolução para Ψ :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Psi - (\boldsymbol{\Omega} \Psi - \Psi \boldsymbol{\Omega}) - 2\mathbf{B} = -\frac{1}{\lambda} e^{-\Psi} P(e^{\Psi}) \quad (2.12)$$

onde $P(e^{\Psi}) = [\mathbf{e}^{\Psi} - I + \alpha (\mathbf{e}^{\Psi} - I)^2]$.

Desta forma, para simular escoamentos governados pela equação constitutiva de Giesekus, resolve-se o sistema composto pelas equações (2.4), (2.2), (2.5), (2.6), (2.11) e (2.12), nesta ordem.

2.1 Adimensionalização das Equações

Considerando L e U valores de referência para comprimento e velocidade, respectivamente, e g a constante gravitacional, define-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* &= \frac{\mathbf{x}}{L}, & \mathbf{u}^* &= \frac{\mathbf{u}}{U}, & t^* &= \frac{U}{L}t, & \mathbf{g}^* &= \frac{\mathbf{g}}{g}, \\ p^* &= \frac{p}{\rho U^2}, & \boldsymbol{\tau}^* &= \frac{\boldsymbol{\tau}}{\rho U^2}, & \mathbf{S}^* &= \frac{\mathbf{S}}{\rho U^2}, & \boldsymbol{\tau}^* &= \frac{L}{\rho U^3} \boldsymbol{\tau}^{\nabla}. \end{aligned}$$

Substituindo essas variáveis nas equações (2.2)-(2.12) e considerando escoamentos cartesianos tridimensionais, obtém-se as seguintes equações adimensionalizadas (os símbolos $[\cdot]^*$ foram omitidos por conveniência):

- Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (2.13)$$

- Equação de Conservação de Quantidade de Movimento:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + F_1(u, v, w), \\ F_1(u, v, w) &= -\frac{\partial(u^2)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} - \frac{\partial(uw)}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ &\quad + \frac{\partial S^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S^{xy}}{\partial y} + \frac{\partial S^{xz}}{\partial z} + \frac{1}{Fr^2} g_x, \end{aligned} \right. \quad (2.14)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + F_2(u, v, w), \\ F_2(u, v, w) &= -\frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(v^2)}{\partial y} - \frac{\partial(vw)}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ &\quad + \frac{\partial S^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial S^{yy}}{\partial y} + \frac{\partial S^{yz}}{\partial z} + \frac{1}{Fr^2} g_y, \end{aligned} \right. \quad (2.15)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z} + F_3(u, v, w), \\ F_3(u, v, w) = -\frac{\partial(uw)}{\partial x} - \frac{\partial(vw)}{\partial y} - \frac{\partial(w^2)}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \\ \quad + \frac{\partial S^{xz}}{\partial x} + \frac{\partial S^{yz}}{\partial y} + \frac{\partial S^{zz}}{\partial z} + \frac{1}{Fr^2} g_z. \end{array} \right. \quad (2.16)$$

- Equação para calcular o tensor conformação de Giesekus:

$$C^{xx} = ReWi\tau^{xx} + 1, \quad C^{xy} = ReWi\tau^{xy}, \quad C^{xz} = ReWi\tau^{xz}, \quad (2.17a)$$

$$C^{yy} = ReWi\tau^{yy} + 1, \quad C^{yz} = ReWi\tau^{yz}, \quad C^{zz} = ReWi\tau^{zz} + 1. \quad (2.17b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi^{xx}}{\partial t} = G_1(\mathbf{u}, \Psi) \\ G_1(\mathbf{u}, \Psi) = -\left(\frac{\partial u \Psi^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial v \Psi^{xx}}{\partial y} + \frac{\partial w \Psi^{xx}}{\partial z} \right) + \Psi^{xy}(\Omega^{xy} - \Omega^{yx}) + \Psi^{xz}(\Omega^{xz} - \Omega^{zx}) \\ \quad + 2B^{xx} + \frac{1}{Wi} \left[(1 - \alpha)e^{-\Psi^{xx}} + (2\alpha - 1) - \alpha(ReWi\tau^{xx} + 1) \right] \end{array} \right. \quad (2.18)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi^{yy}}{\partial t} = G_2(\mathbf{u}, \Psi) \\ G_2(\mathbf{u}, \Psi) = -\left(\frac{\partial u \Psi^{yy}}{\partial x} + \frac{\partial v \Psi^{yy}}{\partial y} + \frac{\partial w \Psi^{yy}}{\partial z} \right) + \Psi^{xy}(\Omega^{yx} - \Omega^{xy}) + \Psi^{yz}(\Omega^{yz} - \Omega^{zy}) \\ \quad + 2B^{yy} + \frac{1}{Wi} \left[(1 - \alpha)e^{-\Psi^{yy}} + (2\alpha - 1) - \alpha(ReWi\tau^{yy} + 1) \right] \end{array} \right. \quad (2.19)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi^{zz}}{\partial t} = G_3(\mathbf{u}, \Psi) \\ G_3(\mathbf{u}, \Psi) = -\left(\frac{\partial u \Psi^{zz}}{\partial x} + \frac{\partial v \Psi^{zz}}{\partial y} + \frac{\partial w \Psi^{zz}}{\partial z} \right) + \Psi^{xz}(\Omega^{zx} - \Omega^{xz}) + \Psi^{yz}(\Omega^{zy} - \Omega^{yz}) \\ \quad + 2B^{zz} + \frac{1}{Wi} \left[(1 - \alpha)e^{-\Psi^{zz}} + (2\alpha - 1) - \alpha(ReWi\tau^{zz} + 1) \right] \end{array} \right. \quad (2.20)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi^{xy}}{\partial t} = G_4(\mathbf{u}, \Psi) \\ G_4(\mathbf{u}, \Psi) = -\left(\frac{\partial u \Psi^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v \Psi^{xy}}{\partial y} + \frac{\partial w \Psi^{xy}}{\partial z} \right) + \Psi^{xy}(\Omega^{xx} - \Omega^{yy}) + \Omega^{xy}(\Psi^{yy} - \Psi^{xx}) \\ \quad + \Omega^{xz}\Psi^{yz} - \Omega^{zy}\Psi^{xz} + 2B^{xy} + \frac{1}{Wi} \left[(1 - \alpha)e^{-\Psi^{xy}} - \alpha(ReWi\tau^{xy}) \right] \end{array} \right. \quad (2.21)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi^{xz}}{\partial t} = G_5(\mathbf{u}, \Psi) \\ G_5(\mathbf{u}, \Psi) = - \left(\frac{\partial u \Psi^{xz}}{\partial x} + \frac{\partial v \Psi^{xz}}{\partial y} + \frac{\partial w \Psi^{xz}}{\partial z} \right) + \Psi^{xz} (\Omega^{xx} - \Omega^{zz}) + \Omega^{xz} (\Psi^{zz} - \Psi^{xx}) \\ + \Omega^{xy} \Psi^{yz} - \Omega^{yz} \Psi^{xy} + 2B^{xz} + \frac{1}{Wi} \left[(1 - \alpha) e^{-\Psi^{xz}} - \alpha (Re Wi \tau^{xz}) \right] \end{cases} \quad (2.22)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \Psi^{yz}}{\partial t} = G_6(\mathbf{u}, \Psi) \\ G_6(\mathbf{u}, \Psi) = - \left(\frac{\partial u \Psi^{yz}}{\partial x} + \frac{\partial v \Psi^{yz}}{\partial y} + \frac{\partial w \Psi^{yz}}{\partial z} \right) + \Psi^{yz} (\Omega^{yy} - \Omega^{zz}) + \Omega^{yz} (\Psi^{zz} - \Psi^{yy}) \\ + \Omega^{yx} \Psi^{xz} - \Omega^{xz} \Psi^{xy} + 2B^{yz} + \frac{1}{Wi} \left[(1 - \alpha) e^{-\Psi^{yz}} - \alpha (Re Wi \tau^{yz}) \right] \end{cases} \quad (2.23)$$

Nessas equações, $Re = \frac{\rho UL}{\eta_0}$ representa o número de Reynolds, $Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}}$ é o número de Froude e $Wi = \frac{\lambda U}{L}$ é o número de Weissenberg, o qual é responsável pelos efeitos elásticos no escoamento.

2.2 Condições Iniciais e de Contorno

Para resolver as equações (2.13)-(2.23), deve-se impor condições iniciais e de contorno fisicamente adequadas para as componentes da velocidade e para as componentes do tensor $\boldsymbol{\tau}$ ((BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987), (FORTUNA, 2000), (BATCHELOR, 1967)). Neste trabalho, as componentes do vetor velocidade são inicializadas com um valor constante U_0 e o tensor $\boldsymbol{\tau}$ como sendo $\boldsymbol{\tau}_0$. Nos contornos rígidos é adotada a condição de não-eskorregamento (*no-slip*) para as componentes da velocidade.

2.2.1 Contornos de Entrada e Saída

As condições de contorno na entrada (*Inflow*) e saída (*Outflow*) são definidas da seguinte forma:

- **Inflow:** $u_n = U_{inf}$, $u_a = 0$ e $u_b = 0$;
- **Outflow:** $\frac{\partial u_n}{\partial n} = 0$, $\frac{\partial u_a}{\partial n} = 0$, $\frac{\partial u_b}{\partial n} = 0$,

onde a e b são as direções tangenciais e n é a direção normal ao contorno.

2.2.2 Condições de Contorno na Superfície Livre

Neste trabalho, considera-se escoamentos tridimensionais com superfícies livres, em que o fluido escoar numa atmosfera passiva. Supondo que a tensão superficial possa ser desprezada na interface entre os fluidos (fluido viscoso e ar), as componentes do tensor de tensão total devem ser contínuas, de modo que a condição de contorno apropriada é descrita pela equação (ver [Batchelor \(1967\)](#)):

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0},$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor normal a superfície livre. Desta forma, é consistente impor as seguintes condições na superfície livre:

$$\mathbf{n}^T \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0, \quad (2.24)$$

$$\mathbf{a}^T \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{b}^T \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = 0, \quad (2.26)$$

sendo $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ vetores tangenciais à superfície livre, e $\boldsymbol{\sigma}$ o tensor de tensão total definido por

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \frac{2}{Re}\mathbf{D} + \mathbf{S}. \quad (2.27)$$

Tomando $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ e $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$, e substituindo a equação (2.27) nas equações (2.24)-(2.26), obtém-se as seguintes equações de contorno na superfície livre:

$$\begin{aligned} p &= S^{xx}n_x^2 + S^{yy}n_y^2 + S^{zz}n_z^2 + 2(S^{xy}n_xn_y + S^{xz}n_xn_z + S^{yz}n_yn_z) \\ &+ \frac{2}{Re} \left[\frac{\partial u}{\partial x}n_x^2 + \frac{\partial v}{\partial y}n_y^2 + \frac{\partial w}{\partial z}n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_xn_y \right. \\ &\left. + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) n_xn_z + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) n_yn_z \right], \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{Re} &\left[2\frac{\partial u}{\partial x}n_xa_x + 2\frac{\partial v}{\partial y}n_ya_y + 2\frac{\partial w}{\partial z}n_za_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_ya_x + n_xa_y) \right. \\ &\left. + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_za_x + n_xa_z) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_za_y + n_ya_z) \right] = \\ &- [S^{xx}n_xa_x + S^{yy}n_ya_y + S^{zz}n_za_z + S^{xy}(n_ya_x + n_xa_y) \\ &+ S^{xz}(n_za_x + n_xa_z) + S^{yz}(n_za_y + n_ya_z)], \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{Re} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} n_x b_x + 2 \frac{\partial v}{\partial y} n_y b_y + 2 \frac{\partial w}{\partial z} n_z b_z + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) (n_y b_x + n_x b_y) \right. \\
& + \left. \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) (n_z b_x + n_x b_z) + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) (n_z b_y + n_y b_z) \right] = \\
& - \left[S^{xx} n_x b_x + S^{yy} n_y b_y + S^{zz} n_z b_z + S^{xy} (n_y b_x + n_x b_y) \right. \\
& + \left. S^{xz} (n_z b_x + n_x b_z) + S^{yz} (n_z b_y + n_y b_z) \right].
\end{aligned} \tag{2.30}$$

As equações (2.28)-(2.30) fornecem as condições de contorno apropriadas na superfície livre.

Logo, para obter uma solução aproximada para $\mathbf{u}$, p , $\boldsymbol{\tau}$, é preciso resolver as equações (2.13)-(2.23) sujeitas as condições iniciais e de contorno apropriadas conforme discutido na seção 2.2.

2.3 Método Numérico

Nesta seção são apresentadas as etapas do método numérico utilizado para obter uma solução aproximada das equações governantes. Supõe-se que são conhecidos $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$, $p(\mathbf{x}, t_n)$, $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_n)$ e procura-se obter as soluções em $t_{n+1} = t_n + \delta t$, em que δt é conhecido. Essas soluções são obtidas em 2 passos: calcula-se $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$ os quais são utilizados para obter $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$, como segue.

2.3.1 Cálculo de $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$

Em geral, o campo de velocidade e pressão devem ser calculados resolvendo-se um sistema de equações acoplado para $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$. Este sistema é não-linear e existem muitos métodos baseados em elementos finitos para resolvê-lo (CAMPION-RENSON; CROCHET, 1978). No entanto, devido as não-linearidades das equações, esses métodos não são eficientes para tratar problemas inerciais ($Re \gg 1$). Para evitar resolver o sistema de equações acoplado, Chorin (1967) desenvolveu o método da projeção, o qual desacopla a velocidade e pressão nas equações. Os métodos que empregam essa estratégia utilizam as ideias do Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge (WEIL, 1940).

Para calcular $\mathbf{u}^{(n+1)}$, primeiro calcula-se um campo de velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)}$ a partir da equação

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} &= \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{S}), \\
\mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{S}) &= -\nabla \tilde{p} - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) + \left(\frac{1}{Re} \right) \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}
\end{aligned} \tag{2.31}$$

onde $\tilde{p}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é um campo de pressão que assume o valor de $p^{(n)}$ no fluido e na superfície livre é calculado segundo a condição de contorno da pressão conforme a equação (2.28). Por exemplo, utilizando o método de Euler modificado, as componentes de $\tilde{\mathbf{u}}^{(n+1)}$ são obtidas por:

$$\tilde{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = u(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{F}_1(u, v, w) + \mathbf{F}_1(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \right], \quad (2.32a)$$

$$\tilde{v}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = v(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{F}_2(u, v, w) + \mathbf{F}_2(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \right], \quad (2.32b)$$

$$\tilde{w}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = w(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{F}_3(u, v, w) + \mathbf{F}_3(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \right], \quad (2.32c)$$

onde cada $\mathbf{F}_i(u, v, w)$, $i = 1, 2$ e 3 , é definido pelas equações (2.14)-(2.16), e $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ são calculados por:

$$\bar{u} = u(\mathbf{x}, t_n) + \delta t \mathbf{F}_1(u, v, w), \quad (2.33a)$$

$$\bar{v} = v(\mathbf{x}, t_n) + \delta t \mathbf{F}_2(u, v, w), \quad (2.33b)$$

$$\bar{w} = w(\mathbf{x}, t_n) + \delta t \mathbf{F}_3(u, v, w). \quad (2.33c)$$

Em geral, o campo de velocidades $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ não satisfaz a equação de conservação de massa e pode-se mostrar que $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ contém a vorticidade correta no tempo t_{n+1} (ver [Tomé, Duffy e McKee \(1996\)](#)). Pelo Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge, existe um único campo escalar $\psi(\mathbf{x}, t)$, tal que

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1}) - \nabla \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.34)$$

Impondo conservação de massa para $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$, obtém-se a seguinte equação de Poisson para $\psi(\mathbf{x}, t)$:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1}). \quad (2.35)$$

As condições de contorno para $\psi(\mathbf{x}, t)$ são dadas por:

$$\nabla \psi(\mathbf{x}, t) = 0, \text{ em contornos rígidos e } inflows, \quad (2.36a)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \tilde{p}(\mathbf{x}, t), \text{ na superfície livre,} \quad (2.36b)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = 0, \text{ em } outflows. \quad (2.36c)$$

Substituindo a equação (2.34) na equação (2.5), subtraindo da equação (2.31), e remanejando os termos, obtém-se (para detalhes, ver [Tomé, Duffy e McKee \(1996\)](#)):

$$p(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \tilde{p}(\mathbf{x}, t_{n+1}) + \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}. \quad (2.37)$$

Logo, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$ são obtidos resolvendo-se as equações (2.31), (2.35), (2.34), (2.37).

2.3.2 Cálculo do tensor $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$

Tendo obtido a velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e pressão $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$, o tensor extra-tensão $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é calculado através das equações a seguir:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} = \mathbf{G}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}). \quad (2.38)$$

Aplicando o método de Euler modificado na equação (2.38) obtém-se:

$$\Psi^{xx}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \Psi^{xx}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_1(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}) + \mathbf{G}_1(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}) \right], \quad (2.39a)$$

$$\Psi^{yy}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \Psi^{yy}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_2(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}) + \mathbf{G}_2(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}) \right], \quad (2.39b)$$

$$\Psi^{zz}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \Psi^{zz}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_3(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}) + \mathbf{G}_3(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}) \right], \quad (2.39c)$$

$$\Psi^{xy}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \Psi^{xy}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_4(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}) + \mathbf{G}_4(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}) \right], \quad (2.39d)$$

$$\Psi^{xz}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \Psi^{xz}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_5(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}) + \mathbf{G}_5(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}) \right], \quad (2.39e)$$

$$\Psi^{yz}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \Psi^{yz}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_6(\mathbf{u}, \boldsymbol{\Psi}) + \mathbf{G}_6(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\boldsymbol{\Psi}}) \right]. \quad (2.39f)$$

Na literatura existem muitos estudos que atestam que os métodos usuais para calcular o tensor extra-tensão apresentam problemas de instabilidade numérica devido aos altos gradientes desse tensor. Visando solucionar esses problemas, [Fattal e Kupferman \(2004\)](#) desenvolveram a técnica da transformação logarítmica do tensor conformação. Este método permite simular escoamentos com alta elasticidade, os quais envolvem altos gradientes do tensor extra-tensão.

Para o modelo de Giesekus, o tensor extra-tensão $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t)$ está relacionado com o tensor conformação $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ pela equação

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = ReWi\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{I}, \quad (2.40)$$

a qual, ao ser introduzida na equação (2.3), resulta na equação

$$Wi \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{C}) - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{C} - \mathbf{C}(\nabla \mathbf{u})^T \right) + \mathbf{C} + \alpha(\mathbf{C} - \mathbf{I})^2 = \mathbf{I}. \quad (2.41)$$

Para resolver a equação (2.41), o gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$ é decomposto na forma

$$\nabla \mathbf{u} = \boldsymbol{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{C}^{-1}, \quad (2.42)$$

onde $\mathbf{\Omega}$ e $\mathbf{N}$ são tensores anti-simétricos e $\mathbf{B}$ é um tensor simétrico que comuta com $\mathbf{C}$. Esta decomposição foi introduzida por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#), que apresentaram o método da transformação logarítmica do tensor conformação $\mathbf{C}$.

Substituindo $\nabla \mathbf{u}$ pela decomposição (2.42) na equação (2.41), obtém-se:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{C} - (\mathbf{\Omega} \mathbf{C} - \mathbf{C} \mathbf{\Omega}) - 2\mathbf{B} \mathbf{C} = -\frac{1}{Wi} \left[\mathbf{C} - I + \alpha (\mathbf{C} - I)^2 \right]. \quad (2.43)$$

O tensor $\mathbf{C}$ é simétrico e definido positivo, portanto existe uma matriz $\mathbf{R}$, de forma que

$$\mathbf{C} = \mathbf{R} \mathbf{\Lambda} \mathbf{R}^T, \quad (2.44)$$

em que $\mathbf{R}$ é a matriz que contém os autovetores de $\mathbf{C}$ e $\mathbf{\Lambda}$ é uma matriz diagonal com os autovalores de $\mathbf{C}$. A estratégia utilizada por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#) consiste em aplicar a transformação

$$\mathbf{\Psi} = \log(\mathbf{C}). \quad (2.45)$$

Assim, $\mathbf{C} = e^{\mathbf{\Psi}}$, e a partir da equação (2.43), obtém-se a seguinte equação de evolução para $\mathbf{\Psi}$:

$$\frac{\partial \mathbf{\Psi}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{\Psi} - (\mathbf{\Omega} \mathbf{\Psi} - \mathbf{\Psi} \mathbf{\Omega}) - 2\mathbf{B} = -\frac{1}{Wi} e^{-\mathbf{\Psi}} \left[e^{\mathbf{\Psi}} - I + \alpha (e^{\mathbf{\Psi}} - I)^2 \right]. \quad (2.46)$$

Esta equação, é resolvida pelo método de Euler modificado apresentado anteriormente para obter $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e então, as componentes de $\mathbf{C}$ são calculadas por (2.45). Por fim, calcula-se as componentes de $\boldsymbol{\tau}$ pela equação (2.40).

2.3.3 Algoritmo Computacional

As soluções $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$, $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ utilizando a transformação logarítmica do tensor conformação são obtidas através dos seguintes passos.

1. Utilizando $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ e $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_n)$, calcula-se:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t_n) = \frac{1}{2} \left[\nabla(\mathbf{u}) + (\nabla(\mathbf{u}))^T \right], \quad (2.47a)$$

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}, t_n) = \frac{2}{Re} \mathbf{D}(\mathbf{x}, t_n) - \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_n). \quad (2.47b)$$

2. Seja $\tilde{p}(\mathbf{x}, t^{n+1})$ um campo de pressão que satisfaz as condições de contorno para a pressão na superfície livre. Esse campo de pressão é obtido pela equação (2.28).
3. Calcula-se o campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t^{n+1})$ pelas equações (2.32a)-(2.32c).
4. Resolve-se a equação de Poisson (2.35). As condições de contorno para ψ são: $\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0$ em contornos rígidos e *inflows*, e $\psi = 0$ em *outflows* e superfície livre. Para mais detalhes, ver [Tomé e McKee \(1994\)](#).

5. Calcula-se $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ pela equação (2.34).
6. Calcula-se $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$ pela equação (2.37).
7. Decompõe-se o gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{C}^{-1}$ (para mais detalhes ver [Fattal e Kupferman \(2004\)](#)).
8. Calcula-se o tensor conformação $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t_n)$ usando $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_n)$ dado pela equação (2.40).
9. Calcula-se os tensores $\mathbf{R}^n$ e Λ^n pela equação (2.44) e então calcula-se $\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}, t_n) = \log(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t_n))$.
10. Calcula-se $\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ pela equação (2.46).
11. Calcula-se $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ pela equação (2.45).
12. Calcula-se $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ pela equação (2.40).
13. Por fim, atualizam-se as posições das partículas marcadoras que representam a superfície livre do fluido. Estas partículas são atualizadas e armazenadas no fim de cada ciclo de cálculo, integrando-se a equação

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}). \quad (2.48)$$

Para calcular os autovalores e os autovetores associados ao tensor conformação $\mathbf{C}$ nos passos 9 e 11 utiliza-se o método iterativo de Jacobi.

METODOLOGIA NUMÉRICA

As equações apresentadas na seção 2.3 são resolvidas utilizando-se o método de diferenças finitas numa malha deslocada tridimensional (ver Fig. 1) onde as componentes do vetor velocidade $\mathbf{u}$ são definidas no centro das faces da célula, enquanto que a pressão p , a função potencial ψ e as componentes do tensor $\boldsymbol{\tau}$ são posicionados no centro da célula. Essas equações são resolvidas utilizando-se a metodologia GENSMAC3D que foi desenvolvida por [Tomé et al. \(2001\)](#). Como o fluido está em movimento contínuo, este método utiliza uma estratégia para definir o fluido dentro do domínio computacional e uma técnica que utiliza algoritmos de modelagem geométrica ([MANTYLA, 1988](#)) para monitorar a deformação da superfície livre. Para isso, as células da malha são especificadas da seguinte forma:

Figura 1 – Localização das variáveis numa célula computacional 3D.

Fonte: Elaborada pelo autor.

1. Calcular $\mathbf{D}_{i,j,k}$ e $\mathbf{S}_{i,j,k}$, por

$$D_{i,j,k}^{xx} = \left[\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} \right], \quad S_{i,j,k}^{xx} = \frac{2}{Re} D_{i,j,k}^{xx} - \tau_{i,j,k}^{xx} \quad (3.1a)$$

$$D_{i,j,k}^{yy} = \left[\frac{v_{i,j,k+\frac{1}{2}} - v_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta y} \right], \quad S_{i,j,k}^{yy} = \frac{2}{Re} D_{i,j,k}^{yy} - \tau_{i,j,k}^{yy} \quad (3.1b)$$

$$D_{i,j,k}^{zz} = \left[\frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} \right], \quad S_{i,j,k}^{zz} = \frac{2}{Re} D_{i,j,k}^{zz} - \tau_{i,j,k}^{zz} \quad (3.1c)$$

$$D_{i,j,k}^{xy} = \frac{1}{2} \left[\frac{u_{i,j+\frac{1}{2},k} - u_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} + \frac{v_{i+\frac{1}{2},j,k} - v_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} \right], \quad S_{i,j,k}^{xy} = \frac{2}{Re} D_{i,j,k}^{xy} - \tau_{i,j,k}^{xy} \quad (3.1d)$$

$$D_{i,j,k}^{xz} = \frac{1}{2} \left[\frac{u_{i,j,k+\frac{1}{2}} - u_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} + \frac{w_{i+\frac{1}{2},j,k} - w_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} \right], \quad S_{i,j,k}^{xz} = \frac{2}{Re} D_{i,j,k}^{xz} - \tau_{i,j,k}^{xz} \quad (3.1e)$$

$$D_{i,j,k}^{yz} = \frac{1}{2} \left[\frac{v_{i,j,k+\frac{1}{2}} - v_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} + \frac{w_{i,j+\frac{1}{2},k} - w_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} \right], \quad S_{i,j,k}^{yz} = \frac{2}{Re} D_{i,j,k}^{yz} - \tau_{i,j,k}^{yz} \quad (3.1f)$$

2. Definir $\tilde{p}^{(n+1)} = p^{(n)}$ nas células $\mathbf{F}$ e calcular $\tilde{p}^{(n+1)}$ nas células $\mathbf{S}$ utilizando a equação (2.28). Esta equação é aproximada em cada célula $\mathbf{S}$ supondo que a superfície livre é linear e considera-se 3 inclinações dessa superfície conforme é mostrado na Fig. 3. As orientações adotadas são: superfícies-1D, em que o vetor normal $\mathbf{n}$ é assumido ser paralelo a um dos eixos ordenados (ver Fig. 3a); superfícies-2D, onde o vetor normal $\mathbf{n}$ forma um ângulo de 45° com dois eixos ordenados (um exemplo é mostrado na Fig. 3b); ou superfícies-3D, em que o vetor normal $\mathbf{n}$ faz um ângulo de 60° com os três eixos ordenados (ver Fig. 3c). O cálculo de $\tilde{p}^{(n+1)}$ nas células $\mathbf{S}$ utilizando essas orientações para a superfície livre segue as mesmas aproximações adotadas por Tomé *et al.* (2010) e por isso não são apresentados nesse trabalho.

Figura 3 – Tipos de superfícies planas: (a) Superfície-1D, (b) Superfície-2D e (c) Superfície-3D.

Fonte: Elaborada pelo autor.

3. Calcular as velocidades intermediárias $\tilde{u}$, $\tilde{v}$ e $\tilde{w}$ em cada célula utilizando o método de Euler

modificado conforme as equações:

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{(n+1)} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{F}_1(u, v, w) + \mathbf{F}_1(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \right], \quad (3.2a)$$

$$\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k}^{(n+1)} = \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k}^{(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{F}_2(u, v, w) + \mathbf{F}_2(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \right], \quad (3.2b)$$

$$\tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{(n+1)} = \tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{F}_3(u, v, w) + \mathbf{F}_3(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) \right], \quad (3.2c)$$

onde $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ são calculadas por:

$$\bar{u} = u_{i+\frac{1}{2},j,k} + \delta t \mathbf{F}_1(u, v, w), \quad (3.3a)$$

$$\bar{v} = v_{i,j+\frac{1}{2},k} + \delta t \mathbf{F}_2(u, v, w), \quad (3.3b)$$

$$\bar{w} = w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + \delta t \mathbf{F}_3(u, v, w). \quad (3.3c)$$

Cada $\mathbf{F}_i(u, v, w)$, $i = 1, 2$ e 3 , é calculado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1(u, v, w) = & \left[-\mathbf{conv}(uu) - \mathbf{conv}(uv) - \mathbf{conv}(uw) - \frac{\tilde{p}_{i+1,j,k} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\delta x} \right. \\ & + \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j-1,k}}{\delta y^2} \right. \\ & + \left. \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i+\frac{1}{2},j,k-1}}{\delta z^2} \right) + \frac{S_{i+1,j,k}^{xx} - S_{i,j,k}^{xx}}{\delta x} + \frac{S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{xy} - S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{xy}}{\delta y} \\ & \left. + \frac{S_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz} - S_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{xz}}{\delta z} + \frac{1}{Fr^2} g_x \right], \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_2(u, v, w) = & \left[-\mathbf{conv}(uv) - \mathbf{conv}(vv) - \mathbf{conv}(wv) - \frac{\tilde{p}_{i,j+1,k} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\delta y} \right. \\ & + \frac{1}{Re} \left(\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} - 2v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i-1,j+\frac{1}{2},k}}{\delta x^2} + \frac{v_{i,j+\frac{3}{2},k} - 2v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y^2} \right. \\ & + \left. \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k+1} - 2v_{i,j+\frac{1}{2},k} + v_{i,j+\frac{1}{2},k-1}}{\delta z^2} \right) + \frac{S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{xy} - S_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{xy}}{\delta x} + \frac{S_{i,j+1,k}^{yy} - S_{i,j,k}^{yy}}{\delta y} \\ & \left. + \frac{S_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{yz} - S_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{yz}}{\delta z} + \frac{1}{Fr^2} g_y \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_3(u, v, w) = & \left[-\mathbf{conv}(uw) - \mathbf{conv}(vw) - \mathbf{conv}(ww) - \frac{\tilde{p}_{i,j,k+1} - \tilde{p}_{i,j,k}}{\delta z} \right. \\
& + \frac{1}{Re} \left(\frac{w_{i-1,j,k+\frac{1}{2}} - 2w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} + \frac{w_{i,j+1,k+\frac{1}{2}} - 2w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i,j-1,k+\frac{1}{2}}}{\delta y^2} \right. \\
& + \left. \frac{w_{i,j,k+\frac{3}{2}} - 2w_{i,j,k+\frac{1}{2}} + w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z^2} \right) + \frac{S_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz} - S_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz}}{\delta x} + \frac{S_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{yz} - S_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{yz}}{\delta y} \\
& \left. + \frac{S_{i,j,k+1}^{zz} - S_{i,j,k}^{zz}}{\delta z} + \frac{1}{Fr^2} g_z \right], \tag{3.6}
\end{aligned}$$

em que as expressões $\mathbf{conv}(\cdot)$ denotam os termos convectivos. O cálculo do divergente do tensor $\mathbf{S}$ envolve termos que não estão definidos na célula, como por exemplo $S_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz}$. Esses termos são obtidos por uma média aritmética dos valores vizinhos, como por exemplo:

$$S_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz} = \frac{S_{i,j,k}^{xz} + S_{i,j,k+1}^{xz} + S_{i+1,j,k}^{xz} + S_{i+1,j,k+1}^{xz}}{4}. \tag{3.7}$$

Os demais termos provenientes do cálculo do divergente de $\mathbf{S}$ são obtidos de forma análoga.

4. A equação de Poisson (2.35) é aproximada por:

$$\begin{aligned}
\frac{\psi_{i+1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i-1,j,k}}{\delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j-1,k}}{\delta y^2} \\
+ \frac{\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k-1}}{\delta z^2} = \tilde{D}_{i,j,k}, \tag{3.8}
\end{aligned}$$

em que

$$\tilde{D}_{i,j,k} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} + \frac{\tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{w}_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z}.$$

Essa equação é aplicada em cada célula $\mathbf{F}$ utilizando-se as condições de contorno especificadas pelas equações (2.36a)-(2.36c), o que resulta em um sistema linear simétrico que é resolvido pelo método dos gradientes conjugados.

5. A velocidade final é obtida pela equação (2.34) aplicada nas células $\mathbf{F}$ e $\mathbf{S}$:

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{(n+1)} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j,k}^{(n+1)} - \frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{\delta x}, \tag{3.9}$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{(n+1)} = \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2},k}^{(n+1)} - \frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{\delta y}, \tag{3.10}$$

$$w_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{(n+1)} = \tilde{w}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{(n+1)} - \frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{\delta z}. \tag{3.11}$$

6. A pressão é obtida da equação (2.37) que é aproximada por

$$p_{i,j,k}^{(n+1)} = \tilde{p}_{i,j,k} + \frac{\psi_{i,j,k}}{\delta t}. \tag{3.12}$$

7. O tensor $\tau(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é calculado utilizando a técnica da transformação logarítmica do tensor conformação, apresentada na Seção 2.3. Primeiramente, calcula-se as componentes do tensor conformação $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ pelas equações:

$$C_{i,j,k}^{xx(n)} = ReWi\tau_{i,j,k}^{xx(n)} + 1, \quad C_{i,j,k}^{xy(n)} = ReWi\tau_{i,j,k}^{xy(n)}, \quad C_{i,j,k}^{xz(n)} = ReWi\tau_{i,j,k}^{xz(n)}, \quad (3.13a)$$

$$C_{i,j,k}^{yy(n)} = ReWi\tau_{i,j,k}^{yy(n)} + 1, \quad C_{i,j,k}^{yz(n)} = ReWi\tau_{i,j,k}^{yz(n)}, \quad C_{i,j,k}^{zz(n)} = ReWi\tau_{i,j,k}^{zz(n)} + 1. \quad (3.13b)$$

8. Conhecendo-se as componentes do tensor conformação $\mathbf{C}$ no tempo t_n , calcula-se as matrizes $\mathbf{R}^{(n)}$ e $\mathbf{\Lambda}^{(n)}$ pela equação

$$\mathbf{C}^{(n)} = e^{\mathbf{\Psi}^{(n)}} = \mathbf{R}^{(n)} \mathbf{\Lambda}^{(n)} (\mathbf{R}^{(n)})^T, \quad (3.14)$$

e, em seguida, obtém-se $\mathbf{\Psi}^{(n)}$ através da equação

$$\mathbf{\Psi}^{(n)} = \log(\mathbf{C}^{(n)}). \quad (3.15)$$

Esses cálculos são realizados de acordo com os apresentados por [Tomé et al. \(2012\)](#) e por questões de limitação de espaço, os detalhes são omitidos.

9. Após obter $\mathbf{\Psi}^{(n)}$, o tensor $\mathbf{\Psi}^{(n+1)}$ é calculado pelo método de Euler modificado, segundo as equações de diferenças finitas a seguir:

$$\Psi_{i,j,k}^{xx(n+1)} = \Psi_{i,j,k}^{xx(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_1(\mathbf{u}, \mathbf{\Psi}) + \mathbf{G}_1(\mathbf{u}, \overline{\mathbf{\Psi}}) \right], \quad (3.16a)$$

$$\Psi_{i,j,k}^{yy(n+1)} = \Psi_{i,j,k}^{yy(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_2(\mathbf{u}, \mathbf{\Psi}) + \mathbf{G}_2(\mathbf{u}, \overline{\mathbf{\Psi}}) \right], \quad (3.16b)$$

$$\Psi_{i,j,k}^{zz(n+1)} = \Psi_{i,j,k}^{zz(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_3(\mathbf{u}, \mathbf{\Psi}) + \mathbf{G}_3(\mathbf{u}, \overline{\mathbf{\Psi}}) \right], \quad (3.16c)$$

$$\Psi_{i,j,k}^{xy(n+1)} = \Psi_{i,j,k}^{xy(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_4(\mathbf{u}, \mathbf{\Psi}) + \mathbf{G}_4(\mathbf{u}, \overline{\mathbf{\Psi}}) \right], \quad (3.16d)$$

$$\Psi_{i,j,k}^{xz(n+1)} = \Psi_{i,j,k}^{xz(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_5(\mathbf{u}, \mathbf{\Psi}) + \mathbf{G}_5(\mathbf{u}, \overline{\mathbf{\Psi}}) \right], \quad (3.16e)$$

$$\Psi_{i,j,k}^{yz(n+1)} = \Psi_{i,j,k}^{yz(n)} + \frac{\delta t}{2} \left[\mathbf{G}_6(\mathbf{u}, \mathbf{\Psi}) + \mathbf{G}_6(\mathbf{u}, \overline{\mathbf{\Psi}}) \right], \quad (3.16f)$$

onde $\overline{\Psi}$ é calculado através das seguintes equações:

$$\overline{\Psi^{xx}} = \Psi_{i,j,k}^{xx} + \delta t G_1(\mathbf{u}, \Psi), \quad (3.17a)$$

$$\overline{\Psi^{yy}} = \Psi_{i,j,k}^{yy} + \delta t G_2(\mathbf{u}, \Psi), \quad (3.17b)$$

$$\overline{\Psi^{zz}} = \Psi_{i,j,k}^{zz} + \delta t G_3(\mathbf{u}, \Psi), \quad (3.17c)$$

$$\overline{\Psi^{xy}} = \Psi_{i,j,k}^{xy} + \delta t G_4(\mathbf{u}, \Psi), \quad (3.17d)$$

$$\overline{\Psi^{xz}} = \Psi_{i,j,k}^{xz} + \delta t G_5(\mathbf{u}, \Psi), \quad (3.17e)$$

$$\overline{\Psi^{yz}} = \Psi_{i,j,k}^{yz} + \delta t G_6(\mathbf{u}, \Psi), \quad (3.17f)$$

sendo cada G_i , $i = 1, 2, \dots, 6$, definido nas equações (2.18)-(2.23).

10. Conhecidos os valores de $\Psi_{i,j,k}^{(n+1)}$ no tempo t_{n+1} , calcula-se $\mathbf{C}_{i,j,k}^{(n+1)}$ da seguinte forma:

$$\mathbf{C}_{i,j,k}^{(n+1)} = e^{\Psi_{i,j,k}^{(n+1)}} = \left[\mathbf{R}^{(n+1)} \mathbf{\Lambda}^{(n+1)} (\mathbf{R}^{(n+1)})^T \right]_{i,j,k}. \quad (3.18)$$

11. Por fim, utiliza-se $\mathbf{C}_{i,j,k}^{(n+1)}$ nas equações (3.13a) - (3.13b) e encontra-se os valores das componentes do tensor extra-tensão $\boldsymbol{\tau}_{i,j,k}^{(n+1)}$.

3.1.1 Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre

As condições de contorno impostas para superfície livre são especificadas pelas equações (2.28) - (2.30), as quais foram descritas na Seção 2.2.2. Para aplicá-las, supõe-se que a equação de conservação de massa seja satisfeita nas células de superfície livre e considera-se uma aproximação linear local da superfície livre que é baseada nas células vizinhas $\mathbf{E}$. Considera-se 3 tipos de aproximações, como mostrado na Fig. 3.

Por exemplo, se considerarmos a célula $\mathbf{S}$ mostrada na Fig. 2.2.2 (a), então assume-se que a superfície livre é uma superfície linear paralela ao plano-xy. Nesse caso, as variáveis envolvidas são mostradas na Fig. 4. Para esse tipo de célula, toma-se $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$, $\mathbf{a} = (0, 1, 0)$ e $\mathbf{b} = (0, 0, 1)$ e as equações (2.28), (2.29) e (2.30), reduzem-se a:

$$\tilde{p} = \frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial x} + S^{xx}, \quad (3.19)$$

$$\frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + S^{xy} = 0, \quad (3.20)$$

$$\frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) + S^{xz} = 0. \quad (3.21)$$

Figura 4 – Célula de superfície (**S**) com apenas a face $(i + \frac{1}{2})$ em contato com células vazias (**E**).

Fonte: Elaborada pelo autor.

As quatro variáveis mostradas na fig. 4 são obtidas pela discretização das equações (3.19)-(3.21) juntamente com a equação de conservação de massa, conforme apresentado a seguir: a equação de conservação de massa aplicada no centro da célula **S** fornece

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k} - v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\delta y} + \frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\delta z} = 0, \quad (3.22)$$

de onde obtém-se:

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k} = u_{i-\frac{1}{2},j,k} - \frac{\delta x}{\delta y} (v_{i,j+\frac{1}{2},k} - v_{i,j-\frac{1}{2},k}) - \frac{\delta x}{\delta z} (w_{i,j,k+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}). \quad (3.23)$$

Os valores de $v_{i+1,j+\frac{1}{2},k}$ e $w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}$ são calculados pelas equações (3.20) e (3.21), as quais são discretizadas nas posições $(i + \frac{1}{2}, j, k + \frac{1}{2})$ e $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k)$, respectivamente, fornecendo:

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\delta z} + \frac{w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\delta x} = -ReS_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz}, \quad (3.24)$$

e

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1,k} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} - v_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\delta x} = -ReS_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{xy}, \quad (3.25)$$

de onde obtém-se

$$v_{i+1,j+\frac{1}{2},k} = v_{i,j+\frac{1}{2},k} - \frac{\delta x}{\delta y} (u_{i+\frac{1}{2},j+1,k} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}) - dxReS_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{xy}, \quad (3.26)$$

$$w_{i+1,j,k+\frac{1}{2}} = w_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\delta x}{\delta z} (u_{i+\frac{1}{2},j,k+1} - u_{i+\frac{1}{2},j,k}) - dxReS_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^{xz}. \quad (3.27)$$

Por último, o valor de $\tilde{p}_{i,j,k}$ é computado pela equação (3.19) discretizada no centro da célula **S**, que fornece:

$$\tilde{p}_{i,j,k} = \frac{2}{Re} \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\delta x} + S_{i,j,k}^{xx}. \quad (3.28)$$

Para configurações de células **S** que possuem 2 ou 3 faces adjacentes com faces de células **E** (por exemplo, as células apresentadas na fig. 5), as variáveis são calculadas resolvendo-se um sistema linear 2×2 ou 3×3 conforme é detalhado no trabalho de [Tomé et al. \(2010\)](#) e por isso é omitido aqui.

Figura 5 – Células de superfície (S) com duas ou três faces adjacentes em contato com faces de células vazias (E).

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.1.2 Cálculo do passo no tempo

O tamanho do passo no tempo é calculado de forma a satisfazer as seguintes restrições:

- A condição CFL resulta na condição

$$\delta t < \frac{\delta x}{|u|}, \quad \delta t < \frac{\delta y}{|v|}, \quad \delta t < \frac{\delta z}{|w|}. \quad (3.29)$$

e uma análise de Von Neumann conduz a

$$\delta t < \frac{Re}{2} \frac{\delta x^2 \delta y^2 \delta z^2}{\delta x^2 \delta y^2 + \delta x^2 \delta z^2 + \delta y^2 \delta z^2}. \quad (3.30)$$

Mais detalhes sobre a implementação dessas condições podem ser encontrados em [Tomé *et al.* \(2001\)](#) e [Tomé e McKee \(1994\)](#).

RESULTADOS

O método numérico descrito no Capítulo 3 foi implementado em um código computacional para simular escoamentos governados pelo modelo de Giesekus. A seguir, para verificação do método numérico, são apresentados resultados obtidos da simulação do escoamento em um tubo utilizando várias malhas. Apresentam-se também resultados da simulação do *jet buckling*, do fenômeno inchamento do extrudado (*extrudate swell*) e do fenômeno inchamento do extrudado retardado (*delayed dieswell*) para vários valores do número de elasticidade E e do número de Mach viscoelástico (M).

4.1 Escoamento totalmente desenvolvido em um tubo

Considera-se o escoamento em um tubo de raio R e comprimento $10R$ como mostrado na Fig. 6. Na entrada e na saída do tubo, as condições apresentadas na Seção 2.2.1 para a velocidade e o tensor extra-tensão são aplicadas. Nas paredes do tubo são impostas as condições de não escorregamento (*no-slip*) para as componentes da velocidade, e as componentes do tensor são calculadas pelas equações apresentadas no Capítulo 2. Durante o processo de enchimento do tubo, na superfície livre do fluido, são impostas as condições apresentadas na Seção 2.2.2.

As simulações são iniciadas com o tubo completamente vazio ($t = 0$) e o fluido vai sendo continuamente injetado até o tempo $t = 50$. Após esse tempo, pode-se verificar que o escoamento encontra-se em regime estacionário. A Fig. 7 mostra a visualização do fluido nos tempos $t = 3, 5, 8$ e 50 (Figs. 7 (a), (b), (c) e (d), respectivamente). Nos tempos, $t = 3, 5$ e 8 , o tubo ainda não está totalmente preenchido e, portanto, observa-se que o fluido se move na direção da saída do tubo. No tempo $t = 50$ o tubo está totalmente preenchido, o fluido está confinado pelas paredes do tubo, e verifica-se que o escoamento atingiu o estado estacionário.

As Figs. 8 e 9 mostram o perfil da velocidade w e os perfis das componentes do tensor extra-tensão τ^{zz} , τ^{xx} e τ^{xz} nas malhas utilizadas. Pode-se observar que há uma boa concordância

dos resultados nas malhas simuladas, especialmente quando comparados com os resultados da malha de referência M_{ref} .

Figura 6 – Domínio computacional utilizado na simulação do escoamento em um tubo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Dados utilizados.

- Domínio computacional: $2 \times 2 \times 10$;
- Número de Reynolds e número de Weissenberg: $Re = 1.0$ e $Wi = 1.0$;
- Parâmetro de mobilidade do fluido: $\alpha = 0.1$;
- Perfil de velocidade imposta no *inflow*: $U = 2(1 - (x^2 + y^2))$;
- Para verificar a convergência e independência de malha, as seguintes malhas foram utilizadas: $M1 : dx = dy = dz = 0.125$, $M2 : dx = dy = dz = 0.1$, $M3 : dx = dy = dz = 0.0625$, $M4 : dx = dy = dz = 0.05$ e $M_{ref} : dx = dy = dz = 0.025$.

Figura 7 – Visualização do escoamento nos tempos: (a) $t = 3$, (b) $t = 5$, (c) $t = 8$ e (d) $t = 50$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 8 – Perfil da velocidade w (a) e componente τ^{zz} do tensor extra-tensão (b) capturados no meio do tubo ($z = 5, y = 1$ e $0 < x < 2$). Dados utilizados: $Re = 1.0$, $Wi = 1.0$ e $\alpha = 0.1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 9 – Perfil da componente τ^{xz} (a) e perfil da componente τ^{xx} do tensor (b) capturados no meio do tubo ($z = 5, y = 1$ e $0 < x < 2$). Dados utilizados: $Re = 1.0$, $Wi = 1.0$, $\alpha = 0.1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A convergência do método numérico foi verificada utilizando os resultados nas malhas Ml e a malha M_{ref} , sendo esta última utilizada como malha de referência. O erro relativo em cada malha Ml , $l = 1, \dots, 4$ é calculado por:

$$||E|| = \sqrt{\frac{\sum_{ijk} (S_{ref} - S_{Ml})^2}{\sum_{ijk} (S_{ref})^2}}, \quad (4.1)$$

em que S_{ref} é a solução de referência obtida pela malha M_{ref} e S_{Ml} é a solução numérica obtida com cada uma das malhas Ml . A Tabela 1 apresenta os erros calculados. Observa-se que, conforme refina-se a malha, o erro relativo decresce, mostrando a convergência do método numérico apresentado.

Tabela 1 – Erros nas malhas $M1$, $M2$, $M3$ e $M4$ do escoamento num tubo em relação à malha M_{ref} .

<i>Malhas</i>	$E(w)$	$E(\tau^{xz})$	$E(\tau^{xy})$	$E(\tau^{zz})$
$M1$	3.65×10^{-2}	1.43×10^{-2}	2.97×10^{-2}	7.18×10^{-2}
$M2$	2.03×10^{-2}	8.08×10^{-3}	1.67×10^{-2}	4.15×10^{-2}
$M3$	7.68×10^{-3}	4.27×10^{-3}	7.51×10^{-3}	8.36×10^{-3}
$M4$	3.66×10^{-3}	1.55×10^{-3}	3.14×10^{-3}	7.82×10^{-3}

4.2 Jato oscilante (*Jet Buckling*)

Quando um jato de fluido viscoso incide sobre uma placa rígida, o fluido desacelera devido a condição de não-eskorregamento (*no-slip*) e sob certas condições, ocorre um acúmulo de fluido que ocasiona o fenômeno conhecido como *jet-buckling* (ver Fig. 10). Vários pesquisadores tem investigado esse fenômeno, como mostram os trabalhos de Cruickshank e Munson (1981) e Cruickshank (1988), os quais mostraram que as seguintes condições devem ser satisfeitas para que ocorra o fenômeno do jato oscilante:

$$Re < 1.2 \quad \text{e} \quad \frac{H}{D} > 7.2,$$

em que H é a altura do injetor até a placa rígida e D é o diâmetro do injetor. Outros autores também investigaram o fenômeno do jato oscilante, a saber, Tomé *et al.* (2001), Paulo, Tomé e McKee (2007), Oishi *et al.* (2008), Ville, Silva e Coupez (2011), Tomé *et al.* (2010), Tomé *et al.* (2014), Andrade *et al.* (2015), Hua *et al.* (2016) e Castillo e Codina (2017).

Figura 10 – Visualização de um jato de fluido Newtoniano incidindo sobre uma placa plana.

Fonte: Tomé *et al.* (2014).

Para verificar o método numérico e independência de malha para esse problema, simulou-se um jato escoando para dentro de uma caixa vazia, conforme mostrado na Fig. 11, utilizando várias malhas. Os dados empregados nessas simulações foram:

- Domínio computacional: $10 \times 10 \times 15$ ($100 \times 100 \times 150$ células);
- Diâmetro do injetor: $D = 1$;
- Altura do injetor até a placa rígida: $H = 15$;
- Velocidade de injeção: $U = 1.0$;
- Número de Froude: $Fr = 2.5240$;

- Número de Reynolds: $Re = 1.5$;
- $Wi = 10$, $\alpha = 0.01$;

Figura 11 – Domínio computacional utilizado na simulação do enchimento de uma caixa tridimensional.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig. 12 apresenta a visualização da superfície do jato em 4 malhas, a partir da qual pode-se observar uma boa concordância entre os resultados nas malhas utilizadas. Nesta verificação utilizou-se as seguintes malhas: $M_1 : h = D/8 = 0.125$, ($48 \times 48 \times 136$ células) ; $M_2 : h = D/10 = 0.10$, ($60 \times 60 \times 170$ células) ; $M_3 : h = D/12 = 0.083333$, ($72 \times 72 \times 204$ células) e $M_4 : h = D/14 = 0.071428$, ($84 \times 84 \times 238$ células).

A seguir, os resultados obtidos nas simulações do enchimento parcial da caixa mostrada na Fig. 11 são apresentados. Essas simulações foram efetuadas para vários números de Weissenberg (Wi) e diferentes valores do parâmetro de mobilidade do fluido (α), conforme são mostrados na Tabela 2. O código desenvolvido simulou o enchimento da caixa ilustrada na Fig. 11 para cada valor de α e Wi descritos na Tabela 2 utilizando a malha M_2 . Um total de 20 simulações foram realizadas.

Tabela 2 – Dados utilizados nas simulações do enchimento de uma caixa tridimensional.

$Re = 1.5$	
Wi	α
10, 50, 100, 200	0.0, 0.01, 0.1, 0.3, 0.5

Figura 12 – Escoamento do jato ao atingir o fundo da caixa utilizando várias malhas. Visualização obtida no plano xz .

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig. 13 apresenta a visualização do fluido obtida com $Wi = 10$ em vários tempos. Pode-se observar que o aumento do parâmetro α ocasiona um aumento do *shear thinning* do fluido, ou seja, uma diminuição na viscosidade do fluido, e como consequência o fluido adquire maior mobilidade com o aumento do valor de α . Esse fato é evidenciado nos resultados mostrados na Fig. 13 nos tempos $t = 50, \dots, 250$, em que para $\alpha = 0.01, 0.1$ observa-se o efeito do *jet buckling*, enquanto que os resultados referentes a $\alpha = 0.5$ não apresentam esse efeito. Os resultados referentes a $\alpha = 0.3$ não são mostrados porque são semelhantes aos obtidos com $\alpha = 0.5$. Com $\alpha = 0$ obtemos o modelo UCM e portanto, os resultados obtidos com esse modelo são mostrados como referência.

Os resultados obtidos com $Re = 1.5$, $Wi = 100$ e 200 são apresentados nas Figs. 14 e 15 em tempos selecionados, respectivamente. Nessas figuras observa-se um resultado diferente do obtido com $Wi = 10$. No tempo $t = 75$, os resultados com $Wi = 10$ e $\alpha = 0.01, 0.1$ apresentam a formação de *buckling*, enquanto que os resultados obtidos com $Wi = 100, 200$ e $\alpha = 0.01$ mostram um acúmulo de fluido ao atingir o fundo da caixa. No entanto, os resultados com $\alpha = 0.1, 0.5$ não apresentam esse efeito e nesses problemas o fluido apresenta uma maior mobilidade e escoar radialmente como visto no escoamento com $Wi = 10, \alpha = 0.5$. Em tempos subsequentes, $t = 125, 250$, os escoamentos com $Wi = 100, 200$ e $\alpha = 0.01$ apresentam o mesmo comportamento de acúmulo de fluido e os resultados referentes a $\alpha = 0.1, 0.5$ não mostram esse efeito.

Figura 13 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional com um fluido Giesekus em tempos selecionados. Dados utilizados: $Re = 1.5$, $H/D = 15$, $Wi = 10$ e diferentes valores de α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 14 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional com um fluido Giesekus em tempos selecionados. Dados utilizados: $Re = 1.5$, $H/D = 15$, $Wi = 100$ e diferentes valores de α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 15 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional com um fluido Giesekus em tempos selecionados. Dados utilizados: $Re = 1.5$, $H/D = 15$, $Wi = 200$ e diferentes valores de α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para evidenciar o efeito do número de Weissenberg no escoamento do enchimento da caixa, a Fig. 16 apresenta os resultados obtidos com $Re = 1.5$, $\alpha = 0.01$ e diferentes valores do número de Weissenberg, como mostrado na Tabela 2, nos tempos $t = 125$ e 250. Pode-se observar nesta figura que o aumento no número de Wi produziu uma aglomeração do fluido no centro da caixa, exceto para $Wi = 10$ que gerou o efeito *buckling*. Acredita-se que esses efeitos são ocasionados pelo aumento da elasticidade do fluido.

Figura 16 – Simulação do enchimento de uma caixa tridimensional nos tempos $t = 125, 250$ para diferentes valores de Wi . Dados utilizados: $Re = 1.5$ e $\alpha = 0.01$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.3 Inchamento do Extrudado (*Dieswell*)

Nesta Seção são apresentados os resultados obtidos nas simulações do inchamento do extrudado. A Fig. 17 (a) apresenta as dimensões do domínio computacional empregado, a Fig. 17 (b) ilustra a geometria utilizada nas simulações realizadas, bem como as estruturas envolvidas: tubo, *inflow* (superfície vermelha) e *outflow* (superfície circular pink). Este fenômeno é caracterizado pelo inchamento do fluido que ocorre após o mesmo ser expelido na atmosfera. O diâmetro do fluido expelido (D_{max}) aumenta em relação ao diâmetro interno do tubo (D) e então mede-se a taxa de inchamento, S_r , pela fórmula

$$S_r = \frac{D_{max}}{D}. \quad (4.2)$$

Figura 17 – Esboço do domínio computacional (a), ilustração da geometria utilizada na simulação do inchamento do extrudado (b), e resultado experimental mostrando o inchamento de um fluido viscoelástico (c).

(a) Elaborada pelo autor.

(b) Elaborada pelo autor.

(c) (MACMINN; MCKINLEY, 2004).

Esse fenômeno tem sido bastante investigado experimentalmente (ver Fig. 17 (c) e numericamente (ver por exemplo Mompean *et al.* (2011), Ganvir *et al.* (2011), Mitsoulis, Georgiou e Kountouriotis (2012), Tomé *et al.* (2012), Mu *et al.* (2013), Konaganti *et al.* (2015), Tanner (1970), e sabe-se que sob certas condições (TANNER, 1970; TANNER, 2005), fluidos viscoelásticos possuem taxa de inchamento elevada ($S_r \gg 1$) e fluidos Newtonianos apresentam uma taxa de inchamento no intervalo $[1, 1.13]$.

Os dados utilizados nas simulações do inchamento do extrudado foram:

- Domínio computacional: $6.6666 \times 6.6666 \times 15$ ($60 \times 60 \times 135$ células);
- Raio do tubo: $R = 1$;
- Comprimento do tubo: $H = 8$;
- Velocidade no *inflow*: $w(x, y) = 2(1 - (x^2 + y^2))$;
- Número de Reynolds: $Re = 0.5$.

As simulações foram realizadas para vários valores de Wi e α , conforme mostrado na Tabela 3.

Tabela 3 – Dados utilizados nas simulações do dieswell.

$Re = 0.5$	
Wi	1, 1.5, 2, 2.5, 3
α	0.01, 0.1, 0.3, 0.5

A Figura 18 apresenta a visualização do fluido obtida com $Re = 0.5$, $\alpha = 0.01$ e os valores de Wi apresentados na Tabela 3, em diferentes tempos. Pode-se observar que o aumento do parâmetro Wi ocasiona uma desaceleração no fluido, levando a um aumento no inchamento. Nestes resultados, os valores da taxa de inchamento calculados são mostrados na Tabela 4, a partir da qual observa-se que a taxa S_r aumenta com o aumento do parâmetro Wi .

Tabela 4 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi .

$Re = 0.5, \alpha = 0.01$					
Wi	1	1.5	2	2.5	3
S_r	1.55	1.84	1.94	2.02	2.22

Figura 18 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $\alpha = 0.01$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para mostrar que o aumento do número de Weissenberg ocasiona uma desaceleração no fluido, a velocidade $w(x^*, y^*, z)$ nas células adjacentes a parede do tubo (ver linha pontilhada vermelha mostrada na Fig. 17 (a)), é plotada na Fig. 19, onde pode-se observar que quanto maior for o parâmetro Wi menor é a velocidade w no fluido extrudado.

Figura 19 – Velocidade w adjacente a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $\alpha = 0.01$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

As Figs. 20, 22 e 25 apresentam a visualização do fluido obtida com $Re = 0.5$, $Wi = 1$, $Wi = 2$ e $Wi = 3$ respectivamente, e os valores de α apresentados na Tabela 3, em diferentes tempos. Pode-se observar que o aumento do parâmetro α leva a uma aceleração do fluido, causando uma diminuição no inchamento do extrudado, que pode ser observado na Fig. 24.

Esses resultados concordam com o modelo de Giesekus, o qual prevê um aumento do *shear thinning* do fluido com o aumento do fator de mobilidade α , causando uma diminuição na viscosidade e uma consequente aceleração no fluido. De fato, os valores da taxa de inchamento calculados são mostrados na Tabela 5, em que pode-se observar que a taxa S_r diminui com o aumento do parâmetro α . Adicionalmente, as diferenças de tensões normais, $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$ e $N2 = \tau^{xx} - \tau^{yy}$ nos pontos da linha vermelha pontilhada (x^*, y^*, z) mostrada na Fig. 17 (a), são plotadas nas Figs. 21, 23 e 26. Nessas figuras, observa-se que $N1(x^*, y^*, z)$ decresce com o aumento de α e os valores de $N2(x^*, y^*, z)$ também decrescem. No fluido extrudado, ambas as diferenças de tensões normais são nulas.

Figura 20 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 1$ e diferentes valores do fator de mobilidade α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 21 – Primeira e segunda diferenças de tensões normais $N1(x^*, y^*, z)$ e $N2(x^*, y^*, z)$. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 1.0$ e diferentes valores do fator de mobilidade α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 22 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores do fator de mobilidade α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 23 – Primeira e segunda diferenças de tensões normais $N1(x^*, y^*, z)$ $N2(x^*, y^*, z)$. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 2.0$ e diferentes valores do fator de mobilidade α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 24 – Velocidade $w(x^*, y^*, z)$ na linha longitudinal adjacente a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 1, 2$ e diferentes valores de α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 25 – Simulação numérica do inchamento do extrudado de um fluido Giesekus. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 3$ e diferentes valores do fator de mobilidade α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 26 – Primeira e Segunda diferenças de tensões normais. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 3$ e diferentes valores do fator de mobilidade α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 27 – Velocidade w na linha longitudinal adjacente a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 0.5$, $Wi = 3$ e diferentes valores de α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 5 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro α .

$Re = 0.5$				
α	$Wi = 1$	$Wi = 2$	$Wi = 2.5$	$Wi = 3$
0.01	1.55	1.94	2.02	2.22
0.1	1.33	1.48	1.52	1.59
0.3	1.22	1.27	1.29	1.34
0.5	1.14	1.19	1.21	1.25

4.4 Inchamento do Extrudado Retardado (*Delayed Dieswell*)

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos nas simulações do fenômeno inchamento do extrudado retardado, também conhecido como *delayed dieswell*. Esse problema foi inicialmente estudado de forma experimental por Joseph, Matta e Chen (1987). Segundo Joseph, Matta e Chen (1987), esse fenômeno pode ser descrito da seguinte forma: quando um fluido viscoelástico é extrudado para fora de um tubo na atmosfera, o diâmetro do jato extrudado usualmente expande. Em geral, esses fluidos são bastante viscosos e em baixas taxas de fluxo ($Re < 1$), devido ao relaxamento das tensões normais, observa-se que o fluido extrudado começa inchar imediatamente após a saída do tubo. Em taxas de fluxo elevadas, pode ocorrer que o inchamento do jato na saída do tubo seja suprimida o que ocasiona um atraso no inchamento, como pode ser observado na Fig. 28. Em 1998, os investigadores Cloitre *et al.* (1998) publicaram um estudo experimental do problema do inchamento do extrudado retardado utilizando *micellar solutions*. Nesse estudo, Cloitre *et al.* (1998) mostraram que mantendo fixo o número de elasticidade (E) e aumentando o número de Reynolds, portanto aumentando o número de $Mach$ viscoelástico, os resultados mostraram que a distância de ocorrência de *delayed swell* é uma função crescente do número de $Mach$.

Figura 28 – Representação do fenômeno *Delayed Dieswell*.

Fonte: Joseph, Matta e Chen (1987).

Estudos desse fenômeno mostram que o mesmo é caracterizado pelos números adimensionais $E = \frac{Wi}{Re}$ (número de elasticidade) e $M = \sqrt{Re Wi}$ (número de Mach viscoelástico) e resultados experimentais mostram que:

- ▼ Altos valores de E e baixos valores de M conduzem a altas taxas de inchamento (S_r).
- ▼ Altos valores de M produzem grandes distâncias de retardamento L_{ex} (ver Fig. 29).

Em 1990, [Delvaux e Crochet \(1990\)](#) estudaram esse fenômeno numericamente utilizando os modelos Upper Convected Maxwell, Oldroyd-B e Giesekus, e utilizando um método de elementos finitos obtiveram resultados que concordaram qualitativamente com os resultados experimentais apresentados por [Joseph, Matta e Chen \(1987\)](#). No entanto, devido as limitações dos métodos numéricos e computacionais da época, os autores [Delvaux e Crochet \(1990\)](#) apresentaram resultados envolvendo números de $Wi \leq 1$ e $E \in [0, 0.05]$. Motivados pelos avanços dos métodos numéricos e o desenvolvimento de técnicas numéricas robustas, nesse trabalho utilizou-se um código three-dimensional e simulou-se esse problema utilizando altas taxas de elasticidade e simulou-se o inchamento do extrudado retardado com valores de $Wi > 1$ e obteve-se resultados para números de elasticidade $E \in [0, 0.2]$.

A figura 29 apresenta uma descrição do problema *delayed dieswell*, onde d_{en} é o diâmetro interno do tubo, L_{en} é o comprimento do tubo, L_{ex} é a distância do retardamento *delay* e D_{ex} é o inchamento máximo. De forma análoga ao apresentado na seção do *dieswell*, pode-se calcular a taxa de inchamento S_r a partir do diâmetro interno do tubo e do diâmetro máximo atingido pelo fluido extrudado,

$$S_r = \frac{D_{ex}}{d_{en}}. \quad (4.3)$$

Figura 29 – Descrição do fenômeno inchamento do extrudado retardado (a). Definição da distância de retardamento (*delay*) (b).

(a) Fonte: ([DELVAUX; CROCHET, 1990](#))

(b) Fonte: Elaborada pelo autor.

4.4.1 Cálculo da distância de retardamento do inchamento do extrudado

A distância de retardamento, L_{ex} , pode ser calculada utilizando a metodologia adotada por (DELVAUX; CROCHET, 1990) em que o valor de L_{ex} é definido como sendo a distância entre a saída do tubo e o ponto onde ocorre o máximo inchamento do jato (ver Fig. 29). Todavia, para escoamentos em três dimensões, a definição quantitativa desse ponto não é muito evidente e achamos melhor definir essa distância como sendo o comprimento entre a saída do tubo (z_t) e o ponto em que a diferença de tensões normais $N1$ tornam-se nulas. Para isso, os valores de $N1(x^*, y^*, z)$ (ver reta pontilhada vermelha na Fig. 17a) foram impressos e o valor da primeira coordenada z_0 em que $N1(x^*, y^*, z_0) = 0$. A distância de retardamento é definida como sendo $L_{ex} = z_0 - z_t$ em que z_t denota o valor da coordenada z na saída do tubo (ver detalhes na Fig. 29b).

Figura 30 – Visualização das linhas de corrente de *dieswell* e de *delayed dieswell*. (b)

(a) $Re = 0.5$, $Wi = 2.5$ e $\alpha = 0.01$

(b) $Re = 20$, $Wi = 2.5$ e $\alpha = 0$

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 30 apresenta a visualização das linhas de corrente do fluido dos problemas do inchamento do extrudado, Fig. 30 (a), e do inchamento do extrudado retardado Fig. 30 (b). Pode-se observar na Fig. 30(a) que devido ao valor de Re ser pequeno, produz um baixo número de $M = 1.12$. O fluido logo após ser extrudado, devido ao relaxamento das tensões normais, se expande. No entanto, para $Re = 20$, tem-se $M = 7.07$ e observa-se na Fig. 30(b) que o fluido após ser extrudado na atmosfera, devido as forças inerciais, resiste as tensões normais e começa a expandir somente após um certo período de tempo, tal fenômeno é denominado *delayed dieswell*. Isto ocorre devido ao alto valor do número de Re o que implica em um alto número de M .

O fenômeno de retardamento do inchamento do extrudado fica evidenciado na Fig. 31, que mostra a visualização das linhas de corrente do fluido mantendo o número de elasticidade E fixo e variando o número M . Esta figura mostra que a medida que aumenta-se o número M , a saber, $M = 3.16, 4.74$ e 6.32 , aumenta-se a distância de retardamento do inchamento do extrudado como pode ser observado na primeira linha de corrente adjacente à linha de corrente no eixo de simetria. Para atestar tal resultado mediu-se a distância do *delay*, L_{ex} , e obteve-se os valores 2.72, 3.61 e 5.05, respectivamente.

Figura 31 – Linhas de Corrente da simulação inchamento do extrudado retardado. Dados utilizados $E = 0.1$

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.4.2 Resultados obtidos

Foram realizadas várias simulações variando o número de Reynolds e o número de Weissenberg. Os dados utilizados nas simulações foram:

- Domínio computacional: $6.6666R \times 6.6666R \times 10R$;
- Malha utilizada: $dx = dy = dz = R/9$ fornecendo $60 \times 60 \times 90$ células);
- Raio do tubo: $R = L = 1$;
- Comprimento do tubo: $H = 3R$;
- Velocidade de injeção: $U = 2(1 - (x^2 + y^2))$;
- Números de Reynolds: $Re = 10, 12.5, 15, 17.5, 20$;
- Números de Weissenberg: $Wi = 1, 1.25, 1.5, 1.75, 2.0, 2.25, 2.5$.

A Figura 32 apresenta as visualizações das simulações do *delayed dieswell* utilizando o modelo Giesekus para $Re = 17.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores do fator de mobilidade do fluido α , em $t = 100$. Nessa figura, observa-se que o parâmetro α tem grande influência sobre o es-

coamento, pois a medida que aumenta-se o valor de α ocorre uma grande redução na taxa de inchamento, como pode ser observado na Fig. 32. Pode ser visto também que, o fator de mobilidade do fluido α apresenta um pequeno efeito na distância de retardamento do inchamento do extrudado, sendo que para $\alpha = 0.001$ obteve-se $L_{ex} = 4.38$ e para $\alpha = 0.01$ produziu $L_{ex} = 5.27$ e $\alpha = 0.1$ não houve retardamento do inchamento do extrudado.

Mais ainda, a Fig. 33(a) apresenta os valores da velocidade obtidos na linha adjacente a parede do tubo e pode-se observar nessa figura que quanto maior for o parâmetro α maior é a velocidade do fluido e por decorrência desse aumento na velocidade ocorre a diminuição da taxa de inchamento e a Fig. 33 (b) apresenta a variação de $N1$ onde pode-se observar que para $\alpha = 0.1$ a tensão normal $N1$ apresenta um *delay* para se anular mas não mostra nenhum inchamento do extrudado.

Figura 32 – Visualização do inchamento do extrudado retardado em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 17.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores de α .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 33 – Velocidade w (a) e primeira diferença de tensões normais $N1$ (b) adjacentes a parede do tubo. Dados utilizados: $Re = 17.5$, $Wi = 2$ e diferentes valores de α

(a) Fonte: Elaborada pelo autor.

(b) Fonte: Elaborada pelo autor.

Como foi mostrado nos resultados da Fig. 32, o modelo Giesekus apresenta bons resultados de *delayed dieswell* somente para valores de α muito pequenos ($\alpha = 10^{-2}, 10^{-3}$) e portanto, nos resultados obtidos a seguir nessa seção foi utilizado o modelo UCM ($\alpha = 0$).

Foram realizadas várias simulações do fenômeno inchamento do extrudado retardado. Nessas simulações utilizou-se os valores dos números de Reynolds e de Weissenberg apresentados anteriormente nessa mesma seção (ver parágrafos iniciando com o símbolo ■). Os números adimensionais E e M encontram-se nos intervalos: $E \in [0.1 \ 0.2]$ e $M \in [3.16, 7.07]$.

As Figs. 34, 35, 36, 37 e 38 apresentam as visualizações do jato de fluido no tempo $t = 100$, para $Re = 10, 12.5, 15, 17.5$ e 20 , respectivamente.

Observa-se na Fig. 34, que o aumento de Wi provocou um grande aumento na taxa de inchamento (ver S_r na Tabela 6 e velocidades na Fig. 39) enquanto que o efeito de retardamento do inchamento do extrudado foi pouco evidenciado fornecendo valores entre $2.5 \leq L_{ex} \leq 2.72$ (ver Tabela 6). Os resultados obtidos com $Re = 12.5$ foram semelhantes aos resultados com $Re = 10$, conforme pode ser visto na Fig. 35. Porém, os valores de *delay* estão entre $3.05 \leq L_{ex} \leq 3.38$ (para mais detalhes, ver Fig. 40 e Tabela 7).

A Figura 36 mostra que o efeito de retardamento do inchamento do extrudado é mais evidenciado sendo que $3.5 \leq L_{ex} \leq 3.73$ (ver decaimento de $N1$ na Fig. 41) bem como que a taxa de inchamento do extrudado é reduzida (ver Tabela 8 e velocidade na Fig. 41), em comparação com os mesmos valores de Wi apresentados nas Figs. 34 e 35. Para mais detalhes ver Tabelas 6 e 7. Os resultados obtidos com $Re = 17.5$ são semelhantes aos resultados com $Re = 15$, conforme pode ser visto na Fig. 37. No entanto, os valores de *delay* estão entre $4.05 \leq L_{ex} \leq 4.72$ (para mais detalhes, ver Fig. 42 e Tabela 9).

Na Figura 38 pode-se observar que a taxa de inchamento do extrudado é consideravelmente reduzida como pode ser visto na Tabela 10 (ver também velocidades na Fig. 43) comparado com os valores de Re apresentados anteriormente. Pode-se observar que a distancia de retardamento do inchamento do extrudado está entre os valores $4.72 \leq L_{ex} \leq 5.72$ (ver também o decaimento das tensões na Fig. 43).

Em resumo, os resultados obtidos nas simulações do *delayed dieswell* mostram que o aumento do número de Reynolds ocasiona uma redução na taxa de inchamento do extrudado e um aumento na distância do retardamento do inchamento do extrudado, como é mostrado na Fig. 44.

Um resultado de validação experimental é apresentado na Fig. 45, que mostra uma comparação qualitativa dos resultados numéricos obtidos com $Re = 17.5, Wi = 2.5$ e $Re = 20, Wi = 2$ e os resultados experimentais apresentados por Joseph, Matta e Chen (1987). Ve-se na Fig. 45 uma boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais.

Figura 34 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 10$, e diferentes valores de Wi .

Figura 35 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 12.5$ e diferentes valores de Wi .

Figura 36 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 15$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 37 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 17.5$ e diferentes valores de Wi .

Figura 38 – Visualização do inchamento do extrudado retardado de um fluido UCM em $t = 100$. Dados utilizados: $Re = 20$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 6 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi .

$Re = 10, \alpha = 0.0$			
Wi	S_r	$M = \sqrt{ReWi}$	L_{ex}
1.0	1.69	3.16	2.72
1.25	1.90	3.54	2.61
1.5	2.21	3.87	2.5
1.75	2.80	4.18	2.5
2.0	3.17	4.47	2.5

Figura 39 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 10$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi .

Tabela 7 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi .

$Re = 12.5, \alpha = 0.0$			
Wi	S_r	$M = \sqrt{ReWi}$	L_{ex}
1.0	1.52	3.53	3.38
1.25	1.73	3.95	3.20
1.5	1.99	4.33	3.05
1.75	2.29	4.67	3.05
2.0	2.75	5.0	3.05

Figura 40 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 12.5$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 8 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi .

$Re = 15.0, \alpha = 0.0$			
Wi	S_r	$M = \sqrt{ReWi}$	distância de delay
1.0	1.30	3.87	3.73
1.25	1.55	4.33	3.61
1.5	1.77	4.74	3.61
1.75	2.05	5.12	3.5
2.0	2.37	5.47	3.5
2.25	2.82	5.81	3.5

Figura 41 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 15.0, \alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 9 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi .

$Re = 17.5, \alpha = 0.0$			
Wi	S_r	$M = \sqrt{ReWi}$	L_{ex}
1.0	1.30	4.18	4.72
1.25	1.42	4.68	4.72
1.5	1.60	5.12	4.61
1.75	1.76	5.53	4.38
2.0	2.04	5.92	4.16
2.25	2.37	6.27	4.05
2.5	2.65	6.61	4.05

Figura 42 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 17.5$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 43 – Velocidade w numa linha longitudinal adjacente a parede do tubo e primeira diferença de tensão normal $N1 = \tau^{zz} - \tau^{xx}$. Dados utilizados: $Re = 20$, $\alpha = 0.0$ e diferentes valores de Wi .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 10 – Razão de inchamento S_r obtidas variando o parâmetro Wi .

$Re = 20, \alpha = 0.0$			
Wi	S_r	$M = \sqrt{ReWi}$	L_{ex}
1.0	1.29	4.47	5.72
1.5	1.50	5.48	5.61
2.0	1.80	6.32	5.05
2.5	2.10	7.07	4.72

Figura 44 – Distâncias de retardamento do inchamento do extrudado.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 45 – Comparação qualitativa com resultados experimentais. Dados utilizados: $Re = 20$, $Wi = 2$ e $Re = 17.5$, $Wi = 2$

(a) Fonte: (JOSEPH; MATTA; CHEN, 1987)

(b) Fonte: Elaborada pelo autor.

CONCLUSÕES

Esse trabalho teve como objetivo a simulação numérica de escoamentos viscoelásticos tridimensionais com superfícies livres governados pelos modelos constitutivos Giesekus e UCM, sujeitos a altas taxas de elasticidade ($Wi \gg 1$). Para isso, desenvolveu-se um código robusto para simular escoamentos em três dimensões utilizando a técnica da transformação logarítmica do tensor conformação para resolver as equações constitutivas.

No Capítulo 1, realizou-se uma revisão bibliográfica dos trabalhos envolvendo o modelo Giesekus e verificou-se que muito poucos trabalhos empregaram esse modelo para tratar de escoamentos viscoelásticos com superfícies livres.

Considerou-se coordenadas cartesianas tridimensionais e as equações governantes para escoamentos incompressíveis foram apresentadas no Capítulo 2. No Capítulo 3 discutiu-se um método numérico e um algoritmo computacional para resolver as equações governantes juntamente com as condições de contorno, o qual foi implementado em um código computacional utilizando aproximações de diferenças finitas em uma malha deslocada. No Capítulo 4, simulou-se o escoamento totalmente desenvolvido em um tubo e em seguida, foram apresentados resultados de verificação do código desenvolvido e da convergência do método numérico implementado.

Após a verificação, considerou-se o escoamento proveniente do fenômeno *jet buckling*, o qual foi simulado com $Re = 1.5$ e vários valores do número de Weissenberg e do fator de mobilidade do fluido. Nessas simulações utilizou-se um container tipo 'caixa aberta' e estudou-se os escoamentos durante o enchimento desse container. Os resultados obtidos apresentaram-se em conformidade com o modelo constitutivo, os quais mostram que os parâmetros α e Wi têm grande influência na formação de *buckling* após o jato de fluido colidir no fundo da caixa. Tais resultados mostraram que quanto maior é o valor de α menor é a formação de *buckling* e que a medida que aumenta-se o valor de Wi ocorre um acúmulo de fluido em formato de cone após o jato incidir no fundo da caixa. Mostrou-se que para valores de Wi suficientemente grandes,

devido a alta elasticidade do fluido, o efeito de *buckling* é suprimido.

Na Seção 4.3, apresentou-se as simulações do inchamento do extrudado, o qual foi simulado com $Re = 0.5$, vários valores do número de Weissenberg e do parâmetro α . Os resultados obtidos mostraram que a medida que aumenta-se os valores de α tanto a taxa de inchamento do fluido quanto o valor das tensões normais diminuem consideravelmente, mostrando assim o forte efeito que o fator de mobilidade do fluido exerce no escoamento. Em paralelo, o parâmetro Wi tem efeito contrário ao parâmetro α , ou seja, a medida que aumenta-se os valores de Wi , as taxas de inchamento e os valores das tensões normais aumentam. Cabe ressaltar aqui, que nesse trabalho foram feitas simulações utilizando o modelo constitutivo Giesekus com altos valores do número de Weissenberg.

Em seguida, apresentou-se os resultados provenientes das simulações do fenômeno inchamento do extrudado retardado, (*delayed dieswell*). Esse problema foi simulado utilizando vários valores do número de Reynolds, Weissenberg e do fator de mobilidade do fluido. Os resultados obtidos mostraram que o parâmetro α acarretou uma grande variação da taxa de inchamento do extrudado S_r . Adicionalmente, como característica do aumento do número de Weissenberg, a medida que aumentou-se Wi houve um aumento na taxa de inchamento do fluido S_r . Por fim, analisou-se o principal efeito apresentado na Seção 4.4 que é o fenômeno de retardamento do inchamento do extrudado. Tal fenômeno tem relação com o aumento do número de Reynolds e por sua vez o aumento do número de $Mach$, e observou-se nos resultados que a medida que aumenta-se o valores de Re ocorre um aumento na distância de *delay* do inchamento do extrudado. Nesses resultados, apresentou-se valores do número de elasticidade entre $0.1 \leq E \leq 0.2$. Foi também apresentada uma comparação qualitativa entre resultados experimentais e numéricos.

Conforme apresentado no Capítulo 4, o código computacional mostrou-se muito eficiente para simular escoamentos tridimensionais com superfícies livres modelados pela equação constitutiva Giesekus/UCM sujeitos a altas taxas de elasticidade. Diante dos resultados e discussões apresentadas pode-se concluir a eficiência do método numérico apresentado. Destaca-se que os resultados obtidos nessa tese são de grande interesse científico e tecnológico e acreditamos que são inéditos.

REFERÊNCIAS

ALVES, M. A.; OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. **International journal for numerical methods in fluids**, v. 41, p. 47–75, 2003. Citado na página [40](#).

AMSDEN, A.; HARLOW, F. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. technical report. **Los Alamos Scientific Laboratory Report**, v. 4370, 1970. Citado na página [24](#).

ANDRADE, L. F. S.; SANDIM, M.; PETRONETTO, F.; PAGLIOSA, P.; PAIVA, A. Particle-based fluids for viscous jet buckling. **Computers & Graphics**, v. 52, p. 106–115, 2015. Citado na página [53](#).

BATCHELOR, G. K. **An Introduction to Fluid Dynamics**. [S.l.: s.n.], 1967. Citado 2 vezes nas páginas [31](#) e [32](#).

BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O. **Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid Mechanics**. [S.l.: s.n.], 1987. Citado 2 vezes nas páginas [23](#) e [31](#).

CAMPION-RENSON, A.; CROCHET, M. J. On the stream function-vorticity finite element solutions of navier-stokes equations. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 12, p. 1809–1818, 1978. Citado na página [33](#).

CASTILLO, E.; CODINA, R. Finite element approximation of the viscoelastic flow problem: A non-residual based stabilized formulation. **Computers & Fluids**, v. 142, p. 72–78, 2017. Citado na página [53](#).

CHORIN, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. **Journal of Computational Physics**, v. 2, p. 12–26, 1967. Citado na página [33](#).

CLOITRE, M.; HALL, T.; MATA, C.; JOSEPH, D. D. Delayed-die swell and sedimentation of elongated particles in wormlike micellar solutions. **Journal of Non-Newtonian fluid Mechanics**, v. 79, p. 157–171, 1998. Citado na página [73](#).

CROCHET, M. J.; KEUNINGS, R. Die swell of a maxwell fluid: Numerical prediction. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 7, p. 199–212, 1980. Citado na página [23](#).

CRUICKSHANK, J. O. Low-reynolds-number instabilities in stagnating jet flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 113, p. 111–127, 1988. Citado na página [53](#).

CRUICKSHANK, J. O.; MUNSON, B. R. Viscous-fluid buckling of plane axisymmetric jets. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 113, p. 221–239, 1981. Citado na página [53](#).

CRUZ, D. O. A.; PINHO, F. T. Fully-developed pipe and planar flows of multimode viscoelastic fluids. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 141, p. 85–98, 2007. Citado na página [24](#).

- CRUZ, F. A.; POOLE, R. J.; AFONSO, A. M.; PINHO, F. T.; OLIVEIRA, P. J.; ALVES, M. A. A new viscoelastic benchmark flow: Stationary bifurcation in a cross-slot. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 214, p. 57–68, 2014. Citado na página 23.
- DEBBAUT, B. On the development of secondary motion induced by the free surface in the rod climbing flow. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 48, 1993. Citado na página 23.
- DEBBAUT, B.; HOCQ, B. On the numerical simulation of axisymmetric swirling flows of differential viscoelastic liquids: the rod climbing effect and the quelleffekt. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 43, 1992. Citado na página 23.
- DELVAUX, V.; CROCHET, M. J. Numerical simulation of delayed die swell. **Rheologica Acta**, v. 29, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 74 e 75.
- FATTAL, R.; KUPFERMAN, R. Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 123, p. 281–285, 2004. Citado 5 vezes nas páginas 24, 28, 35, 36 e 37.
- FERRÁS, L. L.; NÓBREGA, J. M.; PINHO, F. T. Analytical solutions for channel flows of phan-thien-tanner and giesekus fluids under slip. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 171-172, p. 97–105, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.
- FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos-Conceitos Básicos e Aplicações**. [S.l.: s.n.], 2000. Citado na página 31.
- GANVIR, V.; GAUTHAM, B. P.; HARSHAWARDHAN, P.; BHAMLA, M. S.; SCLESI, L.; THAOKAR R. LELE, A.; MACKLEY, M. Extrudate swell of linear and branched polyethylenes: Ale simulations and comparison with experiments. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 166, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 64.
- GIESEKUS, H. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 11, p. 69 – 109, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 25.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. The mac method. **Physics of Fluids**, v. 8, p. 2182–2189, 1965. Citado na página 24.
- HUA, S.; ZHANG, S.; CAO, W.; WANG, Y.; SHAO, C.; LIU, C.; DONG, B.; SHEN, C. Simulation of jetting in injection molding using a finite volume method. **Polymers**, v. 8, n. 5, 2016. Citado na página 53.
- HULSEN, M.; FATTAL, R.; KUPFERMAN, R. Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high weissenberg number: Stabilized simulations using matrix logarithms. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 127, p. 27–39, 2005. Citado na página 24.
- JOIE, J.; GRAEBLING, D. Numerical simulation of polymer flows using non-conforming finite elements. **Computers & Fluids**, v. 79, p. 178–189, 2013. Citado na página 25.
- JOSEPH, D. D.; MATTA, J. E.; CHEN, K. Delayed die swell. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 24, p. 31–65, 1987. Citado 4 vezes nas páginas 73, 74, 78 e 84.

KONAGANTI, V. K.; ANSARI, M.; MITSOULIS, E.; HATZIKIRIAKOS, S. G. Extrudate swell of a high-density polyethylene melt: Ii. modeling using integral and differential constitutive equations. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 225, p. 94–105, 2015. Citado na página 64.

LIAO, T.; HU, H. H.; JOSEPH, D. White-metzner models for rod climbing in al. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 51, 1994. Citado na página 23.

LUO, X.-L. Numerical simulation of weissenberg phenomena - the rod-climbing of viscoelastic fluids. **Comput. Methods Appl. Mech. Engg**, v. 180, 1999. Citado na página 23.

MACMINN, C. W.; MCKINLEY, G. H. **Tubeless Siphon and Die Swell Demonstration**. Department of Mechanical Engineering Massachusetts Institute of Technology: [s.n.], 2004. Disponível em: <<http://web.mit.edu/nnf/research/phenomena/Demos.pdf>>. Acesso em: 11/09/2017. Citado na página 63.

MANTYLA, M. **An Introduction to solid modeling**. Rockville: [s.n.], 1988. Citado na página 39.

MITSOULIS, E.; GEORGIOU, G. C.; KOUNTOURIOTIS, Z. A study of various factors affecting newtonian extrudate swell. **Computers & Fluids**, v. 57, p. 195–207, 2012. Citado na página 64.

MOMPEAN, G.; THAIS, L.; TOMÉ, M. F.; A., C. Numerical prediction of three-dimensional time-dependent viscoelastic extrudate swell using differential and algebraic models. **Computers & Fluids**, v. 44, p. 68–78, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 64.

MU, Y.; ZHAO, G.; CHEN, A.; WU, X. Modeling and simulation of tree-dimensional extrusion swelling of viscoelastic fluids with ptt, giesekus and fene-p constitutive models. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 72, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 64.

MU, Y.; ZHAO, G.; WU, X.; ZHAI, J. Modeling and simulation of tree-dimensional planar contraction flow of viscoelastic fluids with ptt, giesekus and fene-p constitutive models. **Applied Mathematics and Computation**, v. 218, 2012. Citado na página 25.

OISHI, C.; MARTINS, F.; TOMÉ, M.; ALVES, M. Numerical simulation of drop impact and jet buckling problems using the extended pom - pom model. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.

OISHI, C. M.; TOMÉ, M. F.; CUMINATO, J. A.; MCKEE, S. An implicit technique for solving 3d low reynolds number moving free surface flows. **Journal of Computational Physics**, v. 227, p. 7446–7468, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.

OWENS, R.; PHILLIPS, T. **Computational Rheology**. London: Imperial College Press, 2002. Citado na página 23.

PAULO, G. S.; TOMÉ, M. F.; MCKEE, S. A marker-and-cell approach to viscoelastic free surface flows using the ptt model. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 147, p. 149–174, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 53.

RAJAGOPALAN, D.; ARMSTRONG, R. C.; BROWN, R. A. Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a newtonian viscosity. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 36, p. 159–192, 1990. Citado na página 27.

- SCHLEINIGER, G.; WEINACHT, R. J. Steady poiseuille flows for a giesekus fluid. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 40, p. 79–102, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 27.
- TANNER, R. I. A theory of die-swell. **Journal of Polymer Science**, v. 8, p. 2067–2078, 1970. Citado na página 64.
- _____. A theory of die-swell revisited. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 129, p. 85–87, 2005. Citado na página 64.
- THAIS, L.; HELIN, L.; MOMPEAN, G. Numerical simulation of viscoelastic flows with oldroyd-b constitutive equations and novel algebraic stresses models. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 140, p. 145–158, 2006. Citado na página 23.
- TOMÉ, M. F.; A., C.; FERREIRA, V. G.; MCKEE, S. A finite difference technique for solving the oldroyd-b model for 3d-unsteady free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 154, p. 179–206, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 24.
- TOMÉ, M. F.; CASTELO, A.; AFONSO, A. M.; ALVES, M. A.; PINHO, F. Application of the log-conformation tensor to three-dimensional time-dependent free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 175–176, p. 44–54, 2012. Citado 4 vezes nas páginas 23, 24, 44 e 64.
- TOMÉ, M. F.; CASTELO, A.; CUMINATO, J. A.; MANGIAVACCHI, N.; MCKEE, S. Gens-mac3d: A numerical method for solving unsteady three-dimensional free surface flows. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 37, p. 747–796, 2001. Citado 4 vezes nas páginas 24, 39, 47 e 53.
- TOMÉ, M. F.; CASTELO, A.; NÓBREGA, J.; CARNEIRO, O. S.; PAULO, G. S.; PEREIRA, F. T. Numerical and experimental investigations of three-dimensional container filling with newtonian viscous fluids. **Computers & Fluids**, v. 90, p. 172–185, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.
- TOMÉ, M. F.; DORICIO, J. L.; CASTELO, A.; CUMINATO, J. A.; MCKEE, S. Solving viscoelastic free surface flows of a second-order fluid using a marker-and-cell approach. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 53, p. 599–627, 2007. Citado na página 24.
- TOMÉ, M. F.; DUFFY, B.; MCKEE, S. A numerical technique for solving unsteady non-newtonian free surface flows. **Journal of non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 62, p. 9–34, 1996. Citado na página 34.
- TOMÉ, M. F.; GROSSI, L.; CASTELO, A.; CUMINATO, J. A.; MCKEE, S.; WALTERS, K. Die-swell, splashing drop and a numerical technique for solving the oldroyd-b model for axisymmetric free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 141, p. 148–166, 2007. Citado na página 24.
- TOMÉ, M. F.; GROSSI, L.; MANGIAVACCHI, N.; CASTELO, A.; CUMINATO, J. A.; FERREIRA, V. G.; SOUZA, F. S.; MCKEE, S. A numerical method for solving three-dimensional generalized newtonian free surface flows. **Journal of non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 123, p. 85–103, 2004. Citado na página 24.
- TOMÉ, M. F.; MANGIAVACCHI, N.; CASTELO, A.; CUMINATO, J. A.; MCKEE, S. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 106, p. 61–106, 2002. Citado na página 24.

TOMÉ, M. F.; MCKEE, S. Gensmac: a computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains. **Journal of Computational Physics**, v. 110, p. 171–186, 1994. Citado 3 vezes nas páginas 24, 36 e 47.

TOMÉ, M. F.; PAULO, G. S.; PINHO, F.; ALVES, M. A. Numerical solution of the ptt constitutive equation for unsteady three-dimensional free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 165, p. 247–262, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 23, 24, 41, 46 e 53.

TOMÉ, M. F.; PIMENTEL, R. A.; OISHI, C. M.; MCKEE, S. Numerical solution of the upper-convected maxwell model for three-dimensional free surface flows. **Commun. Comput. Phys.**, v. 6, p. 367–395, 2009. Citado na página 23.

VILLE, L.; SILVA, L.; COUPEZ, T. Convected level set method for the numerical simulation of fluid buckling. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 66, p. 324–344, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.

WEIL, H. The method of orthogonal projection in potential theory. **Duke Mathematical Journal**, v. 7, p. 411–444, 1940. Citado na página 33.

WELCH, J. E.; HARLOW, F. H.; SHANNON, J. P.; DALY, B. J. The mac method , tech. report. **Los Alamos Scientific Laboratory Report**, v. 3425, 1966. Citado na página 24.

ÖZTEKIN, A.; BROWN, R. A.; MCKINLEY, G. H. Quantitative prediction of the viscoelastic instability in cone-and-plate flow of a boger fluid using a multi-mode giesekus model. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 54, p. 351–377, 1994. Citado na página 25.