Simulação numérica de escoamentos viscoelásticos
multifásicos complexos

Rafael Alves Figueiredo

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Rafael Alves Figueiredo

Simulação numérica de escoamentos viscoelásticos multifásicos complexos

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. José Alberto Cuminato

USP – São Carlos
Novembro de 2016

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

F475s Figueiredo, Rafael Alves
Simulação numérica de escoamentos viscoelásticos
multifásicos complexos / Rafael Alves Figueiredo;
orientador José Alberto Cuminato. - São Carlos - SP,
2016.
175 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, 2016.

1. Escoamento bifásico. 2. Fluido viscoelástico.
3. Volume-de-fluido. 4. Efeito de Weissenberg.
5. CaBER. 6. diferenças finitas. I. Cuminato, José
Alberto, orient. II. Título.

Rafael Alves Figueiredo

Numerical simulation of complex viscoelastic multiphase flows

Doctoral dissertation submitted to the Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – 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. José Alberto Cuminato

USP – São Carlos
November 2016

À minha esposa Clara e a meus pais Janey e Agda.

AGRADECIMENTOS

Esta tese é o resultado de muitas experiências que vivi no ICMC-USP entre dezenas de pessoas notáveis, a quem eu também gostaria de reconhecer. As pesquisas de campo realizadas no FCT-Unesp, Presidente Prudente-SP, e o estágio BEPE realizado no CEFT-FEUP, Porto, Portugal, também foram muito valiosos para o desenvolvimento e aprimoramento do presente trabalho. O desenvolvimento desta tese foi uma experiência incrível, não só pelos resultados obtidos e todo o conhecimento adquirido, mas também por todas as pessoas e lugares que conheci, e por todos os amigos que fiz. Foram-me oferecidas inúmeras oportunidades, o que incluiu trabalhar no laboratório LMACC, antigo LCAD, no ICMC-USP, São Carlos-SP, desde o mestrado em 2009.

Em primeiro lugar gostaria de expressar minha imensa gratidão ao meu orientador Prof. Dr. José Alberto Cuminato por todo suporte e conhecimento imenso.

Gostaria de agradecer o Prof. Dr. Cassio Machiavelli Oishi (FCT-Unesp, Presidente Prudente) por todo o apoio e suporte contínuo no meu doutorado, por sua paciência e conhecimento imenso.

Gostaria de agradecer também aos professores Dr. Manuel Antônio Moreira Alves e Dr. Alexandre Miguel Prior Afonso, pela oportunidade de realizar o estágio junto ao grupo CEFT-FEUP, pela disposição e as valiosas discussões.

Agradeço a minha esposa Clara por todo amor, incentivo e paciência. Todo o seu apoio foi fundamental em muitos dos caminhos que trilhei.

Agradeço aos meus pais Janey e Agda pela minha vida, todo amor e educação. Agradeço também meu irmão Gabriel pela amizade, parceria e companheirismo.

Agradeço meus sogros Francisco e Ana Paula por todo amor e incentivo, e por me acolherem na família como um filho.

Gostaria de agradecer a todos os meus professores, em especial os professores do ICMC-USP com quem tive o privilégio de aprender.

Agradeço a todos meus amigos pela parceria e companheirismo, em especial aos meus amigos do LMACC-ICMC, aos meus amigos do FCT-Unesp, Presidente Prudente, e aos meus amigos da UP, Portugal.

Gostaria de agradecer também a todos os funcionários do ICMC-USP.

Por fim, agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo suporte

financeiro por meio dos projetos de pesquisa 2011/09194-7 e 2015/04548-6.

“Tudo o que eu fiz não vale uma sinfonia de Mozart.”

(César Lattes)

RESUMO

FIGUEIREDO, R. A.. **Simulação numérica de escoamentos viscoelásticos multifásicos complexos**. 2016. 175 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

Aplicações industriais envolvendo escoamentos multifásicos são inúmeras, sendo que, o aprimoramento de alguns desses processos pode resultar em um grande salto tecnológico com significativo impacto econômico. O estudo numérico dessas aplicações é imprescindível, pois fornece informações precisas e mais detalhadas do que a realização de testes experimentais. Um grande desafio é o estudo numérico de escoamentos viscoelásticos multifásicos envolvendo altas taxa de elasticidade, devido às instabilidades causadas por altas tensões elásticas, grandes deformações, e até mudanças topológicas na interface. Assim, a investigação numérica desse tipo de problema exige uma formulação precisa e robusta.

No presente trabalho, um novo resolvidor de escoamentos bifásicos envolvendo fluidos complexos é apresentado, com particular interesse em escoamentos com altas taxas de elasticidade. A formulação proposta é baseada no método *Volume-of-fluid* (VOF) para representação da interface e no algoritmo *Continuum Surface Force* (CSF) para o balanço de forças na interface. A curvatura e advecção da interface são calculados via métodos geométricos para garantir a precisão dos resultados. Métodos de estabilização são utilizados quando números críticos de Weissenberg (Wi) são encontrados, devido ao famoso problema do alto número de Weissenberg (HWNP). O método da projeção, combinado com um método implícito para solução da equação da quantidade de movimento, são discretizados por um esquema de diferenças finitas em uma malha deslocada. Problemas de benchmarks foram resolvidos para acessar a precisão numérica da formulação em diferentes níveis de complexidade física, tal como representação e advecção da interface, influência das forças interfaciais, e características reológicas do fluido. A fim de demonstrar a capacidade do novo resolvidor, dois problemas bifásicos transientes, envolvendo fluidos viscoelásticos, foram resolvidos: o efeito de Weissenberg e o reômetro extensional (CaBER). O efeito de Weissenberg ou *rod-climbing effect* consiste em um bastão que gira dentro de um recipiente com fluido viscoelástico e, devido às forças elásticas, o fluido escala o bastão. Os resultados foram comparados com dados teóricos, numéricos e experimentais, encontrados na literatura para pequenas velocidades angulares. Além disso, resultados obtidos com altas velocidades angulares (alta elasticidade) são apresentados com o modelo Oldroyd-B, em que escaladas muito elevadas foram observadas. Valores críticos da velocidade angular foram identificados, e para valores acima foi observada a ocorrência de instabilidades elásticas, originadas pela combinação de tensões elásticas, curvatura interfacial, e escoamentos secundários. Até onde sabemos, numericamente, essas instabilidades nunca foram capturadas antes. O CaBER consiste no comportamento e colapso de um filamento de fluido viscoelástico, formado entre duas placas

paralelas devido às forças capilares. Esse experimento envolve consideráveis dificuldades, dentre as quais podemos destacar a grande influência das forças capilares e a diferença de escalas de comprimento no escoamento. Em grande parte dos resultados encontrados na literatura, o CaBER é resolvido por modelos simplificados em uma dimensão. Resultados obtidos foram comparados com tais resultados da literatura e com soluções teóricas, apresentando admirável precisão.

Palavras-chave: Escoamento bifásico, Fluido viscoelástico, Volume-de-fluido, Efeito de Weissenberg, CaBER, diferenças finitas.

ABSTRACT

FIGUEIREDO, R. A.. **Simulação numérica de escoamentos viscoelásticos multifásicos complexos**. 2016. 175 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

Industrial applications involving multiphase flow are numerous. The improvement of some of these processes can result in a major technological leap with significant economic impact. The numerical study of these applications is essential because it provides accurate and more detailed information than conducting experiments. A challenge is the numerical study of high viscoelastic multiphase flows due to instabilities caused by the high elastic tension, large deformations and even topological changes in the interface. Thus the numerical investigation of this problem requires a robust formulation.

In this study a new two-phase solver involving complex fluids is presented, with particular interest in the solution of highly elastic flows of viscoelastic fluids. The proposed formulation is based on the volume-of-fluid method (VOF) to interface representation and continuum surface force algorithm (CSF) for the balance of forces in the interface. The curvature and interface advection are calculated via geometric methods to ensure the accuracy of the results. Stabilization methods are used when critical Weissenberg numbers are found due to the famous high Weissenberg number problem (HWNP). The projection method combined with an implicit method for the solution of the momentum equation are discretized by a finite difference scheme in a staggered grid. Benchmark test problems are solved in order to access the numerical accuracy of different levels of physical complexities, such as the dynamic of the interface and the role of fluid rheology. In order to demonstrate the ability of the new resolver, two-phase transient problems involving viscoelastic fluids have been solved, the Weissenberg effect problem and the extensional rheometer (CaBER). The Weissenberg effect problem or rod-climbing effect consists of a rod that spins inside of a container with viscoelastic fluid and due to the elastic forces the fluid climbs the rod. The results were compared with numerical and experimental data from the literature for small angular velocities. Moreover results obtained for high angular velocities are presented using the Oldroyd-B model, which showed high climbing heights. Critical values of the angular speed have been identified. For values above a critical level were observed the occurrence of elastic instabilities caused by the combination of elastic tension, interfacial curvature and secondary flows. To our knowledge, numerically these instabilities were never captured before. The CaBER consists of the behavior and collapse of a viscoelastic fluid filament formed between two parallel plates due to capillary forces. This experiment involves considerable difficulties, among which we can highlight the great influence of the capillary forces and the difference of the length scales in the flow. In much of the results found in the literature, the CaBER is solved

by simplified models. The results were compared with results reported in the literature and theoretical solutions, which showed remarkable accuracy.

Key-words: Two-phase flow, Viscoelastic fluid, Finite difference method, Volume-of-fluid, Weissenberg effect, CaBER.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Ilustração do método ALE (figura extraída de Montefusco (2012)).	27
Figura 2 – Ilustração da malha do método MMM para escoamentos multifásicos (figura extraída de Scardovelli e Zaleski (1999)).	28
Figura 3 – Ilustração da representação da interface com o método sem malha.	28
Figura 4 – Ilustração dos métodos eulerianos para representar a interface.	29
Figura 5 – Relação entre tensão e taxa de deformação para fluidos viscoelásticos.	32
Figura 6 – Ilustração do comportamento de fluidos viscoelásticos em vários experimentos multifásicos.	34
Figura 7 – Ilustração dos diferentes tipos de fronteiras.	41
Figura 8 – Ilustração do volume de controle na interface.	44
Figura 9 – Ilustração da força de coesão em uma porção de fluido.	46
Figura 10 – Ilustração do ângulo de contato.	48
Figura 11 – Comportamento do ketchup escoando para fora de um tubo sem deixar resíduos. Figura extraída de Chang (2015).	48
Figura 12 – Ilustração do modelo micromecânico massa-mola utilizado para representar uma cadeia polimérica.	49
Figura 13 – Ilustração do elemento de Maxwell.	50
Figura 14 – Método VOF: (a) fração de volume $f_{i,j}$ associada à interface real; (b) representação da estratégia PLIC utilizada para construir a interface.	64
Figura 15 – Cálculo das seis candidatas a inclinação da reta, por diferenças regressiva, central, e progressiva.	67
Figura 16 – Ilustração da definição da fração de volume $\tilde{f}$, obtida através de uma candidata a inclinação $\tilde{m}$. A fração de volume f é representada pela região cinza. A região hachurada define a fração de volume $\tilde{f}$, a qual é definida pela região abaixo da reta cuja inclinação é $\tilde{m}$. A região definida pela cor laranja é a diferença entre f e $\tilde{f}$, a qual é utilizada no cálculo do erro.	68
Figura 17 – Área definida pela intersecção entre a célula (i, j) , retângulo ABCD, e o triângulo AEH.	69
Figura 18 – Operador split: cálculo do fluxo através da aresta à direita da célula (i, j)	72
Figura 19 – Ilustração do algoritmo para o cálculo da função altura.	80
Figura 20 – Ilustração do cálculo da condição de contorno para o método HF.	81
Figura 21 – Ilustração do cálculo da componente cruzada do divergente do tensor polimérico, $\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \Big _{i,j-\frac{1}{2}}$, em uma célula vizinha à parede.	84

Figura 22 – Simulação numérica do problema da cavidade com tampa deslizando no intervalo de tempo $t = 80$, utilizando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$, $Wi = 2$, e $\beta = 0.5$: a) velocidade u em $(0.5, y)$, b) velocidade v em $(x, 0.75)$, c) τ_{xx} em $(0.5, y)$, e d) energia cinética.	90
Figura 23 – Tensão de cisalhamento adimensional τ_{Wi}^* , na parede do cilindro interno. Comparação entre a solução numérica e a aproximação da solução analítica proposta por Ravanchi <i>et al.</i> (2007). A barra de erro representa a porcentagem do erro de truncamento introduzido em Ravanchi <i>et al.</i> (2007).	91
Figura 24 – Simulação numérica dos cilindros concêntricos, com rotação do cilindro interno e modelo viscoelástico Giesekus $\alpha = 0.2$: a) velocidade u_θ , b) $-\tau_{\theta\theta}/\tau_{Wi}^*$, c) τ_{rr} , e d) $-\tau_{r\theta}$	92
Figura 25 – Ilustração da geometria do disco de Zalesak.	93
Figura 26 – Convergência da solução do problema da rotação do disco de Zalesak, após uma rotação completa.	93
Figura 27 – Resultados da rotação do disco de Zalesak obtidos com a malha $M1$ ($n = 5$), figura (a), e resultado apresentado por Pilliod e Puckett (2004) com mesma malha, figura (b).	94
Figura 28 – Deformação de um elemento circular de fluido em diferentes tempos de simulação: linha solida $t = 0$ s, linha pontilhada $t = t_f/2 = 12$ s, e linha marcada por cruzeiros $t = t_f = 24$ s.	95
Figura 29 – Ilustração do experimento <i>two layer plane Couette flow</i>	96
Figura 30 – Solução numérica do experimento <i>two layer plane Couette flow</i> . Comparação dos resultados obtidos para o perfil de velocidade com a solução analítica.	97
Figura 31 – Ilustração do experimento da rotação do cilindro.	98
Figura 32 – Solução numérica da rotação do cilindro: a) comparação entre solução numérica e solução analítica, da forma da interface, b) erro da forma da interface, obtido com as normas E_2 e E_∞	99
Figura 33 – Convergência do erro absoluto do cálculo da curvatura pelo método HF, no problema da gota estática.	102
Figura 34 – Erro da estimativa da curvatura em cada célula computacional no problema da gota estática.	102
Figura 35 – Resultados numéricos do problema da gota estática, com valor exato imposto para a curvatura, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm ³ , $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$: a) $\ U\ _\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_μ , na malha $M3$, b) $\ U\ _\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_σ , na malha $M3$, c) convergência espacial da amplitude das correntes espúrias no instante de tempo $t/T_\mu \approx 0.5$, e d) $E(\Delta p)_{total}$	104

Figura 36 – Resultados numéricos do problema da gota estática, obtidos com várias malhas. Salto da pressão normalizado, com valor exato imposto para a curvatura, $\sigma = 73 \text{ dyn/cm}$, $\rho_g = 1 \text{ g/cm}^3$, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, e $La = 12000$.	105
Figura 37 – Convergência espacial do salto da pressão normalizado no problema da gota estática, com valor exato imposto para a curvatura, $\sigma = 73 \text{ dyn/cm}$, $\rho_g = 1 \text{ g/cm}^3$, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, e $La = 12000$: a) corte realizado na direção do vetor $(1, 0)$, e b) corte realizado na direção do vetor $(1, 1)$.	106
Figura 38 – Influência do número de Laplace no problema da gota estática, com a curvatura estimada pelo método HF, $\sigma = 73 \text{ dyn/cm}$, $\rho_g = 1 \text{ g/cm}^3$, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, e malha $M3$: a) $\ U\ _\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_μ , b) $\ U\ _\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_σ , c) intensidade das correntes espúrias no instante de tempo $t/T_\mu \approx 0.3$, e d) salto da pressão normalizado (corte na direção do vetor $(1, 0)$).	107
Figura 39 – Influência do número de Laplace no problema da gota estática, com a curvatura estimada pelo método HF, $\sigma = 73 \text{ dyn/cm}$, $\rho_g = 1 \text{ g/cm}^3$, $\rho_g/\rho_m = 1000$, $\mu_g/\mu_m = 100$, e malha $M3$: a) $\ U\ _\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_μ , b) $\ U\ _\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_σ .	108
Figura 40 – Salto da pressão normalizado, obtido no problema da gota estática com curvatura estimada pelo método HF, $\sigma = 73 \text{ dyn/cm}$, $\rho_g = 1 \text{ g/cm}^3$, $\rho_g/\rho_m = 1000$, $\mu_g/\mu_m = 100$, e malha $M3$.	108
Figura 41 – Evolução temporal numérica e teórica (e Lamb (1932), teoria linear do decaimento da amplitude) da oscilação natural de uma gota.	110
Figura 42 – Experimento do equilíbrio da gota sobre uma superfície rígida.	111
Figura 43 – Resultados numéricos da variação do ângulo de contato estático com $Eu = 0.6658$. Comparação da forma da gota com os resultados derivados da solução do sistema de EDO (POZRIKIDIS, 2009).	112
Figura 44 – Resultados numéricos do tamanho do molhamento para a variação do ângulo de contato estático com $Eu = 0.6658$. Comparação com os resultados obtidos pela solução do sistema de EDO (POZRIKIDIS, 2009).	113
Figura 45 – Ilustração do experimento numérico do problema do impacto da gota.	113
Figura 46 – Resultados numéricos da variação no tempo do espalhamento da gota viscoelástica com $Re = 5$, $Wi = 1$, $\beta = 0.1$, e $Fr = 2.26$.	114
Figura 47 – Visualização 3D da evolução temporal do espalhamento da gota viscoelástica, com $Re = 5$, $Wi = 1$, $\beta = 0.1$, e $Fr = 2.26$.	115
Figura 48 – Configuração inicial do problema da deformação da gota: (a) ilustração do experimento e (b) representação da malha não uniforme.	116
Figura 49 – a) Evolução temporal do parâmetro deformação Φ , para todas as configurações entre a gota e fluido que compõe o meio: NN, VN, NV and ,VV; b) forma da gota no instante de tempo $t = 10\bar{\gamma}^{-1}$.	116

Figura 50 – Efeito de Weissenberg (figura extraída de McKinley (2013)).	118
Figura 51 – Efeito de Weissenberg (<i>rod-climbing</i>): (a) ilustração do experimento numérico and (b) representação da malha não uniforme.	118
Figura 52 – Resultados numéricos do efeito de Weissenberg, estudo do refinamento da malha com o modelo de fluido Oldroyd-B ($\xi = 0$), e $\omega = 2.6$ rev/s.	120
Figura 53 – Altura máxima da escalada, h , comparada com resultados teóricos (BEAVERS; JOSEPH, 1975), e numéricos (LUO, 1999; HABLA <i>et al.</i> , 2011): a) $\xi = 0.284$ e b) $\xi = 0.318$	122
Figura 54 – Resultados numéricos do efeito de Weissenberg com $\xi = 0, 0.284$, e 0.318 : a) $\omega = 1.7$ rev/s, b) $\omega = 2.1$ rev/s, c) $\omega = 2.6$ rev/s, e d) $\omega = 2.9$ rev/s.	123
Figura 55 – Forma da interface para diferentes velocidades de rotação, $0.5 \leq \omega \leq 5.3$ rev/s.	125
Figura 56 – Problema do efeito de Weissenberg, escoamentos secundários e movimento dos vórtices secundários, em $t = 150$ s.	126
Figura 57 – Comprimento adimensional do vórtice para $1 \leq \omega \leq 5.3$ rev/s.	126
Figura 58 – Resultados numéricos do efeito de Weissenberg: a) valor médio no tempo da altura da escalada h/R (a amplitude das oscilações é marcada pelas barras de erro), e b) gráfico da amplitude em função da velocidade de rotação. A linha no grafico da amplitude representa o ajuste de uma curva para identificar o Wi_c crítico para a bifurcação de Hopf para o início das instabilidades de <i>breathing</i> ($A = 0.2492\sqrt{Wi - Wi_c}$).	127
Figura 59 – Comportamento transiente do efeito de Weissenberg com $\omega = 8$ rev/s ($Wi = 0.916$).	128
Figura 60 – Comportamento transiente do efeito de Weissenberg com $\omega = 9$ rev/s ($Wi = 1.031$).	129
Figura 61 – Ilustração do experimento CaBER, formação do filamento e das BOAS: a) pinçamento de uma gota de saliva entre os dedos indicador e polegar, b) funcionamento do reômetro extensional, sendo a sequência dos quadros das imagens definida esquerda para direita. Em ambas as figuras é possível observar a formação de um filamento que não colapsa imediatamente, e as estruturas das BOAS.	132
Figura 62 – Experimento do CaBER: a) ilustração da morfologia das BOAS e b) ilustração da geometria utilizada na realização das simulações numéricas.	134
Figura 63 – Resultados numéricos do problema do CaBER, estudo do refinamento da malha com o modelo de fluido Oldroyd-B, $R_p = 0.001$ m, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, e $\beta = 0.85$	137

Figura 64 – Comportamento do diâmetro mínimo do problema do CaBER, comparado com os resultados numéricos apresentados por Bhat <i>et al.</i> (2010). Os parâmetros utilizados foram $R_p = 0.001$ m, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $\beta = 0.85$, malha $M3$, e modelo Oldroyd-B. O tempo t_p é o instante em que o raio mínimo do filamento newtoniano, normalizado pelo raio do prato, atingiu o valor de 10^{-4} .	138
Figura 65 – Resultados numéricos do experimento do CaBER, $R_p = 0.001$ m, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $De = 0.1$, $\beta = 0.85$, malha $M3$, e modelo Oldroyd-B. Comportamento em alguns instantes de tempo de a) $R(z,t)/R_p$, b) velocidade v_z adimensional, c) componente adimensional do tensor taxa deformação, D_{zz} .	139
Figura 66 – CaBER: resultados numéricos sobre a variação no tempo do ângulo de contato (θ_c) junto a quina do prato, com $R_p = 0.001$ m, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $\beta = 0.85$, malha $M3$, e modelo Oldroyd-B.	140
Figura 67 – Tipos de células em coordenadas cilíndricas.	168
Figura 68 – Resultados numéricos do experimento do jato oscilante com fluido newtoniano, e $Re = 0.01$: a) método MAC, b) método VOF.	172
Figura 69 – Resultados numéricos do experimento do jato oscilante com o fluido Oldroyd-B, $Re = 0.01$, $Wi = 5$ e $\beta = 0.5$: a) método MAC, b) método VOF.	173
Figura 70 – Ilustração do domínio para simulação do escoamento em um tubo.	174
Figura 71 – Solução numérica do escoamento em um tubo com o modelo Giesekus, utilizando a formulação logaritmo do tensor conformação. Comparação entre as soluções obtidas com as malhas $M1$, $M2$ e $M3$ em relação à solução obtida com a malha $M4$. a) w , b) τ^{zz} , c) τ^{yz} , d) τ^{yy} .	175

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Resultados numéricos do problema da deformação do elemento de fluido circular: volume numérico V_{num} , erro volumétrico E_m , e ordem de convergência.	95
Tabela 2	– Erro relativo da solução numérica do experimento <i>two layer plane Couette flow</i> .	97
Tabela 3	– Resultados numéricos do problema da gota estática com curvatura exata, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm ³ , $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, no instante de tempo $t/T_\mu \approx 1$: $E(\Delta p)_{total}$ e $E(\Delta p)_{max}$.	105
Tabela 4	– Velocidade angular e grupo de parâmetros adimensionais, utilizados na verificação da metodologia proposta.	121
Tabela 5	– Velocidade angular e grupo de parâmetros adimensionais, utilizados no estudo do comportamento do efeito de Weissenberg com altas velocidades angulares.	124
Tabela 6	– Erros nas malhas $M1$, $M2$ e $M3$ para o escoamento em um tubo com fluido viscoelástico do tipo Giesekus, utilizando a formulação logaritmo do tensor conformação.	174

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
1.1	Motivação	25
1.2	Métodos para representar a interface	26
1.2.1	<i>Métodos lagrangeanos e mistos</i>	26
1.2.2	<i>Métodos eulerianos</i>	28
1.3	Fluidos não-newtonianos viscoelásticos	31
1.4	Desenvolvimento do projeto	35
1.5	Esboço da tese	37
2	MODELAGEM MATEMÁTICA	39
2.1	Introdução	39
2.2	Condições de contorno	40
2.2.1	<i>Contorno rígido ($\partial\Omega_1$)</i>	41
2.2.2	<i>Simetria ($\partial\Omega_2$)</i>	42
2.2.3	<i>Injetor ($\partial\Omega_3$) e ejetor ($\partial\Omega_4$)</i>	42
2.2.4	<i>Condição de contorno periódica</i>	43
2.2.5	<i>Interface</i>	44
2.2.6	<i>Tensão superficial</i>	46
2.2.7	<i>Ângulo de contato</i>	47
2.3	Modelos viscoelásticos	49
3	MÉTODOS NUMÉRICOS	55
3.1	Métodos numéricos para escoamentos viscoelásticos	55
3.1.1	<i>Método da projeção</i>	56
3.1.2	<i>Formulação semi-implícita</i>	58
3.1.3	<i>Métodos de estabilização</i>	61
3.2	Método VOF	63
3.2.1	<i>Método de reconstrução ELVIRA</i>	65
3.2.2	<i>Advecção da interface</i>	70
3.3	Tensão superficial	73
3.3.1	<i>Curvatura</i>	75
3.3.2	<i>Ângulo de contato</i>	80
3.4	Malha não-uniforme	82

3.5	Implementação	84
4	TESTES NUMÉRICOS	87
4.1	Cavidade com tampa deslizante para HWNP	88
4.2	Cilindros concêntricos com fluidos complexos	90
4.3	Rotação do disco de Zalesak	92
4.4	Deformação de um elemento circular de fluido	93
4.5	Two layer plane Couette flow	95
4.6	Rotação do cilindro	97
4.7	Gota estática	99
4.7.1	<i>Cálculo da curvatura</i>	101
4.7.2	<i>Balanço de força CSF</i>	102
4.8	Oscilação da gota	108
4.9	Ângulo de contato estático	110
4.10	Impacto da gota axissimétrica	111
4.11	Deformação da gota	114
5	EFEITO DE WEISSENBERG	117
5.1	Introdução	117
5.1.1	<i>Estudo do refinamento da malha</i>	119
5.1.2	<i>Comparação teórica, numérica e experimental</i>	120
5.1.3	<i>Dinâmica do escoamento com altas velocidades angulares</i>	123
6	ESCOAMENTOS MICRO-EXTENSIONAIS: CaBER	131
6.1	Introdução	131
6.2	Configuração do experimento numérico	134
6.3	Verificação	136
6.4	Cooperação com o grupo CEFT-FEUP	140
7	CONCLUSÃO	143
REFERÊNCIAS		145
APÊNDICE A SISTEMA DE COORDENADAS		165
A.1	Operadores e sistema de equações em coordenadas cilíndricas	166
A.2	Malha computacional em coordenadas cilíndricas	168
APÊNDICE B MELHORIAS NO SISTEMA FREEFLOW		171
B.1	Jato oscilante	171
B.2	Métodos de estabilização	173

INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Escoamentos multifásicos são escoamentos com dois (ou mais) fluidos imiscíveis. O estudo numérico desse problema tem grande importância acadêmica, no desenvolvimento de técnicas numéricas robustas capazes de prever com precisão o comportamento do escoamento, e industrial, devido às várias aplicações envolvendo este tipo de escoamento. Na indústria, soluções e melhorias dessas aplicações representam um salto tecnológico e econômico, por exemplo, na indústria aeroespacial podemos citar aplicações com escoamento multifásico no desenvolvimento de sistemas de propulsão, na parte de atomização e mistura de combustíveis. A atomização consiste em gerar instabilidades no jato de combustível para desintegrar em pequenas gotas, formando um spray para facilitar a evaporação do combustível e a mistura com o ar. O spray é gerado com injeção de alta pressão de um jato de combustível ou com a colisão entre dois jatos. Recentemente, estudos numéricos desse experimento foram realizados por [Jiang *et al.* \(2010\)](#), [Chen *et al.* \(2013\)](#), [Chen e Yang \(2014\)](#). Devido às diferentes escalas de comprimento e à complexidade da dinâmica da interface entre o líquido e o gás, os autores utilizaram técnicas com refinamento adaptativo de malha e algoritmos baseados no método *volume-of-fluid* (VOF) para representar a interface.

Na indústria de petróleo os escoamentos multifásicos são observados praticamente em todos os processos de produção, desde a extração do óleo dos reservatórios, devido às bolhas de gases, até ao transporte do óleo para os tanques de armazenamento, com a injeção de água dentro dos tubos para reduzir o arrasto e, conseqüentemente, diminuir os custos e aumentar a produção. O estudo da dinâmica das bolhas na extração do petróleo é muito importante em consequência da relação da perda de carga com a vazão. Além da indústria de petróleo, são imensas as aplicações industriais envolvendo bolhas: reatores, reações químicas, preenchimento de moldes, processos de fermentação, cavitação, fusão nuclear, etc. Um problema fascinante envolvendo bolha é o da sonoluminescência, em que energia sonora é transformada em energia luminosa. A emissão

de rápidos flashes de luz é observada quando uma bolha é excitada por uma elevada frequência acústica. Vários trabalhos são encontrados na literatura sobre o problema da ascensão da bolha, dos quais podemos mencionar (HUA *et al.*, 2008) e (PIVELLO *et al.*, 2014). Ambos os trabalhos apresentaram resultados em três dimensões, obtidos com refinamento adaptativo de malha e método *front tracking* para representar a interface.

Outro problema multifásico que é encontrado em várias aplicações industriais é o preenchimento de moldes. Esse problema é muito observado na indústria de alimentos, no armazenamento dos produtos nas embalagens ou formas, em processos de extrusão, na indústria de material bélico com a fabricação de projéteis e corpos de explosivos, e na área médica com a injeção de cimento ósseo para preenchimento e fixação de próteses. O efeito do jato oscilante (*jet buckling*) é um problema observado nesse tipo de aplicação, devido às forças viscosas. Resultados numéricos sobre esse efeito foram apresentados por Bonito *et al.* (2006) com um método VOF, e por Figueiredo *et al.* (2013) com um método *front tracking*. Ambos apresentaram resultados com fluidos viscoelástico em três dimensões.

Existem diversas outras aplicações industriais envolvendo escoamentos multifásicos, sendo que todas elas têm grande impacto econômico, tecnológico e ambiental. O estudo numérico dessas aplicações pode fornecer uma análise quantitativa muito mais rápida e barata do que a realização de testes experimentais. Além disso, em vários casos é possível extrair informações mais detalhadas sobre o escoamento. Assim, o desenvolvimento de técnicas numéricas robustas para simular esse tipo de escoamento é imprescindível.

1.2 Métodos para representar a interface

No contexto de escoamentos multifásicos, interface é uma superfície (ou uma curva no caso 2D) formada pela fronteira entre dois fluidos imiscíveis. Os maiores desafios em simular escoamentos multifásicos são a representação e a atualização correta da interface. Uma dificuldade adicional aparece quando o escoamento sofre influência da tensão superficial, devido à precisão do cálculo da curvatura. Os métodos numéricos para construir e representar a interface são classificados de acordo com o sistema de referência adotado, euleriano ou lagrangeano. Os métodos eulerianos são caracterizados por uma malha computacional fixa, que representa um volume de controle ou uma seção fixa no espaço, onde é observado o comportamento do fluido que passa por esse local. Ao contrário dos métodos eulerianos, os métodos lagrangeanos são caracterizados por uma malha móvel que se movimenta de acordo com a trajetória do fluido. Os métodos euleriano-lagrangeano mistos utilizam ambos os conceitos.

1.2.1 Métodos lagrangeanos e mistos

Os métodos lagrangeanos para representar a interface podem ser classificados em dois tipos, métodos com malha e métodos sem malha. Nos métodos com malha podemos mencionar

o método de movimentação de malha (*Moving Mesh Method*, MMM (DI *et al.*, 2005; HUANG; RUSSELL, 2010)) e o método lagrangeano-euleriano arbitrário (*Arbitrary-Lagrangian-Eulerian*, ALE (HIRT *et al.*, 1974; DONEA *et al.*, 2004)). Ambos os métodos consideram uma malha com uma quantidade fixa de pontos, em que, a malha se deforma de acordo com o campo de velocidades do escoamento. No caso de escoamentos multifásicos, a malha se deforma para acompanhar a trajetória da interface. Em outros casos, a malha é deformada para concentrar os pontos em regiões com altos gradiente, e assim, melhorar a precisão da solução numérica. A figura 1 ilustra como a interface é definida através dos pontos da malha, e como a malha se deforma para atualizar a posição da interface ao longo do tempo. Além disso, a figura 1 é um exemplo de um escoamento com superfície livre, ou seja, fisicamente existem duas fases de fluido, mas apenas a fase de interesse é modelada, enquanto os efeitos da outra fase são inseridos na dinâmica do escoamento via condições de contorno. No caso em que as duas (ou mais) fases têm influência na dinâmica do escoamento, a interface é traçada nos pontos internos da malha, como ilustra a figura 2. Devido ao transporte lagrangeano esse tipo de método é muito preciso. No entanto, quando o escoamento causa grandes deformações na malha esse tipo de método perde a precisão, devido aos erros introduzidos pela perda da qualidade da malha. Outra limitação encontrada nesse método é a mudança topológica. Para superar essas limitações é necessário o uso de métodos de remalhamento. Os métodos de remalhamento são muito complexos, pois é necessário realizar muitas interpolações, e gerenciar a conectividade entre os pontos da malha. O método se torna ainda mais complexo para resolver problemas em três dimensões. Na literatura existem melhorias apresentadas para esse tipo de método, dentre as quais podemos mencionar Quan *et al.* (2009), em que propuseram um esquema de remalhamento 3D para realizar mudança topológica em escoamentos multifásicos. Recentemente, Montefusco *et al.* (2014) propuseram um método ALE de alta ordem para simular escoamentos capilares 3D com restrição do passo temporal não muito severa.

Figura 1 – Ilustração do método ALE (figura extraída de Montefusco (2012)).

Diferentes dos métodos lagrangeanos com malha, os métodos sem malha ou métodos com partículas têm como vantagens simular escoamentos com grandes deformações na interface, fácil implementação do refinamento adaptativo, mudança topológica imediata, e fácil modelagem de problemas com geometrias complexas. Esse método considera um conjunto de pontos não

Figura 2 – Ilustração da malha do método MMM para escoamentos multifásicos (figura extraída de [Scardovelli e Zaleski \(1999\)](#)).

estruturados distribuídos no domínio, sendo que sua robustez se deve à conectividade entre os pontos, a qual é gerada pela distância entre os pontos, e pode mudar com o tempo. No entanto, essa robustez tem um preço, pois é necessário realizar uma busca a cada iteração para definir a vizinhança dos pontos. Além disso, para obter uma precisão razoável é necessário uma quantidade generosa de pontos dependendo do problema. Em escoamentos multifásicos a interface é traçada entre os pontos com diferentes propriedades, como ilustrado na figura 3. Na classe dos métodos sem malha para simular escoamentos multifásicos, podemos mencionar o método SPH (*Smooth Particle Hydrodynamics*) ([COLAGROSSI; LANDRINI, 2003](#); [LIU; LIU, 2010](#)), e o método de Lattice Boltzmann ([INAMURO *et al.*, 2004](#); [M *et al.*, 2015](#)). Uma boa descrição desses métodos e outros métodos sem malha pode ser encontrada em [Li e Liu \(2002\)](#).

Figura 3 – Ilustração da representação da interface com o método sem malha.

1.2.2 Métodos eulerianos

No contexto dos métodos eulerianos, a interface é traçada através das células de uma malha fixa, seja ela estruturada ou não estruturada. Existem vários esquemas para representar

e movimentar a interface, dos quais podemos destacar o método *Marker-And-Cell* (MAC, (HARLOW; WELCH, 1965)), o método *volume of fluid* (VOF, (HIRT; NICHOLS, 1981)) e o método *Level-Set* (LS, (SUSSMAN *et al.*, 1994)). O método MAC foi um dos primeiros métodos apresentados para representar a superfície livre em escoamentos viscosos e incompressíveis (HARLOW; WELCH, 1965). O método MAC define a interface através de um conjunto de pontos virtuais distribuídos em todo o domínio contendo fluido. Os pontos são atualizados de forma lagrangeana através de interpolações no campo de velocidades em uma malha euleriana deslocada, resultando em um método muito preciso. No entanto, a grande quantidade de pontos distribuídos no domínio resulta em um alto custo computacional. Para contornar esse problema, Amsden e Harlow (1970) propuseram o método *Simplified Marker-And-Cell* (SMAC), em que um conjunto de pontos interconectados é utilizado para definir a interface, eliminando a necessidade de inserir pontos no interior do fluido. A figura 4a ilustra como a interface é definida com o método SMAC. A posição dos pontos é atualizada pela solução da equação diferencial ordinária

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}_p, \quad (1.1)$$

onde, $\mathbf{x}$ é a posição das partículas e $\mathbf{u}_p$ o seu vetor velocidade. O método SMAC tem como vantagem a precisão da representação e movimentação da interface, além de informações precisas sobre o vetor normal e a curvatura. A complexidade do método está em gerenciar a conectividade entre os pontos da interface, pois é necessário inserir e deletar pontos para garantir a qualidade da malha. A complexidade aumenta muito quando envolve problemas com mudanças topológicas. Resultados numéricos apresentados por Sousa *et al.* (2004), comprovam a robustez do método SMAC para revolver escoamentos multifásicos. Uma boa revisão das melhorias feitas no método MAC é descrita em McKee *et al.* (2008).

Figura 4 – Ilustração do métodos eulerianos para representar a interface.

No método LS a interface é representada implicitamente através de uma curva de nível zero de uma função distância $\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$. A figura 4b ilustra a representação da interface com

o método LS em uma malha deslocada. Uma das fases é definida em regiões onde a função $\phi > 0$, enquanto a outra fase é definida em regiões onde $\phi \leq 0$, sendo a interface traçada pelos pontos onde $\phi = 0$. A principal vantagem do método é o cálculo simples e preciso da normal e da curvatura. Outra vantagem é a mudança topológica automática. A implementação é relativamente simples em duas dimensões, sendo facilmente estendida para o caso em três dimensões. No entanto, o método apresenta problemas em manter a conservação de massa. Isso ocorre devido aos erros da discretização da equação de advecção

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (1.2)$$

Para resolver esse problema é necessário o uso de métodos *upwind* de alta ordem, e técnicas de reinicialização, para garantir o balanço de massa e a precisão da interface. Uma técnica iterativa para manter o sinal da função distância, ϕ , combinada com esquemas de diferenças de alta ordem, foi proposta por [Sussman e Fatemi \(1999\)](#) para melhorar a precisão da interface em escoamentos incompressíveis. Em [Ausas et al. \(2011\)](#), os autores propuseram um esquema de correção geométrica para preservar a massa em malhas estruturadas. O esquema foi testado em problemas com velocidade prescrita, e mostrou-se mais preciso quando comparado com esquemas de reinicialização iterativos. Recentemente, [Luo et al. \(2015\)](#) propuseram uma técnica para corrigir a perda de massa do método LS, partindo do princípio de que a perda de massa é maior em regiões vizinhas a altas curvaturas. A técnica calcula a perda de massa e utiliza um método de distribuição, baseado na curvatura local da interface, para inserir a massa perdida. Os resultados mostraram boa concordância com soluções analíticas e resultados experimentais.

O método VOF constrói a interface a partir de uma única informação, a quantidade de fluido em cada célula da malha computacional. Existem várias técnicas para construir a interface no VOF, sendo a mais popular entre elas a reconstrução linear por partes, ou PLIC (*Piecewise Linear Interface Construction*, ([PILLIOD; PUCKETT, 2004](#))). Nessa técnica a interface é aproximada por segmentos de retas em cada célula do domínio computacional, normalmente descontínuas nas fronteiras das células. A figura 4c ilustra a reconstrução da interface com o método PLIC. Da mesma forma que no método LS, o método VOF é atualizado no tempo resolvendo a equação de advecção

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = 0, \quad (1.3)$$

onde, f é a fração de volume em cada célula, também conhecida como função cor. A fração de volume é definida em cada célula do domínio computacional da seguinte forma:

$$f \in [0, 1], \quad \text{tal que} \quad f = \begin{cases} 0, & \text{representa uma célula com o fluido 1} \\ 1, & \text{representa uma célula com o fluido 2} \\ (0, 1), & \text{representa uma célula com ambos os fluidos} \end{cases}. \quad (1.4)$$

As principais vantagens do método VOF são a excelente conservação da massa numérica, o conceito simples da metodologia e a mudança topológica automática. Por outro lado, esse

método é difícil de implementar em três dimensões, o cálculo da curvatura e da normal são pouco precisos. Para contornar alguns desses problemas, Renardy e Renardy (2002) propuseram um método de reconstrução parabólica chamado PROST (*Parabolic Reconstruction of Surface Tension*). Esse método estima a curvatura e a normal através de uma aproximação quadrática da interface. Os resultados do problema da gota estática mostraram que as correntes espúrias foram drasticamente reduzidas, no entanto, o custo computacional é alto. Francois *et al.* (2006) propuseram um algoritmo de balanço de massa para manter o equilíbrio entre a força da tensão superficial e os gradientes de pressão resultantes. O algoritmo foi desenvolvido para o método de representação de tensão superficial CSF (*continuum surface force* (BRACKBILL *et al.*, 1992)), e para o método SSF (*sharp surface tension force* (LIU *et al.*, 2000)). Ambos os métodos, CSF e SSF, apresentaram a mesma convergência e ordem de erro no problema das correntes espúrias, sendo que a precisão dos resultados ficou condicionada ao erro do método do cálculo da curvatura. No caso da estimativa da normal, Pilliod e Puckett (2004) propuseram uma técnica de reconstrução do tipo PLIC com segunda ordem de precisão. A técnica foi comparada com outras técnicas muito utilizadas na literatura e, apresentou excelente precisão. Além disso, Pilliod e Puckett (2004) também propuseram um algoritmo de advecção com operador *unsplit* de segunda ordem de precisão.

Todos os métodos apresentados têm vantagens e desvantagens, sendo que o melhor método vai depender do problema a ser resolvido. Para eliminar os pontos fracos de alguns métodos, foram propostos métodos híbridos que combinam as vantagens de alguns métodos. Podemos mencionar o CLSVOF (*coupled level set and volume-of-fluid method* (SUSSMAN; PUCKETT, 2000; SUSSMAN, 2003)), que acopla os métodos LS e VOF para corrigir a perda de massa do LS. Na mesma linha de combinação VOF e LS, podemos mencionar Sun e Tao (2010) e Albadawi *et al.* (2013), com melhorias na precisão do cálculo da curvatura para o método VOF. Semelhante à técnica do FT, Enright *et al.* (2002) propuseram uma técnica com o uso de partículas lagrangeanas para corrigir a perda de massa do método LS.

1.3 Fluidos não-newtonianos viscoelásticos

Fluidos não-newtonianos não seguem a lei de Newton da viscosidade. Fluidos viscoelásticos podem seguir na parte da viscosidade mas apresentam elasticidade. Os fluidos viscoelásticos são classificados pela presença de moléculas poliméricas, todas interconectadas na composição química do fluido, sendo que a cadeia de polímeros formada é responsável pelo efeito de memória do fluido, em outras palavras, responsável pelo fenômeno da elasticidade.

Uma característica muito importante dos fluidos viscoelásticos e dos fluidos não newtonianos, em geral, é o fato da viscosidade variar em função da taxa de cisalhamento, com exceção dos modelos viscoelásticos UCM e Oldroyd-B, os quais apresentam viscosidade constante. Essa característica implica que a tensão de cisalhamento varia com a taxa de deformação,

como ilustrado na figura 5. É possível observar na figura 5 que existem dois tipos de fluidos não-newtonianos, o pseudoplástico e o dilatante. O pseudoplástico, em inglês *shear thinning*, tem a característica de que a viscosidade diminui à medida que a tensão aumenta. Por outro lado, o fluido dilatante tem a característica de ser *shear thickening*, comportamento oposto ao *shear thinning*, ou seja, a viscosidade aumenta com o aumento da taxa de deformação. Vale ressaltar que para os fluidos newtonianos a tensão de cisalhamento é proporcional à taxa de deformação, sendo a viscosidade a constante de proporcionalidade.

Figura 5 – Relação entre tensão e taxa de deformação para fluidos viscoelásticos.

Outra característica importante dos fluidos viscoelásticos é a de exibir diferenças de tensões normais, sendo esse fato responsável por efeitos importantes no comportamento do escoamento. A primeira diferença de tensões normais é definida como $N_1 = \tau_{11} - \tau_{22}$, enquanto a segunda diferença de tensões normais é definida como $N_2 = \tau_{22} - \tau_{33}$, em que, τ representa o tensor das tensões. O índice “1” indica a direção do escoamento, “2” a direção em que a velocidade varia, e “3” a direção restante. Mais detalhes sobre a diferença de tensões normais podem ser encontrados em Bird *et al.* (1987).

No contexto de escoamentos viscoelásticos multifásicos, vários efeitos fascinantes são observados, como ilustra a figura 6. Alguns desses efeitos contrariam a intuição, pois movimentam-se na direção oposta da força da gravidade e da força centrífuga. Esses efeitos ocorrem devido às propriedades dos fluidos viscoelásticos, elasticidade e diferença de tensões normais. Um problema onde a influência dessas propriedades é bem relacionada com o comportamento do escoamento é o inchamento do extrudado (em inglês *die-swell*), ilustrado na figura 6a. Esse problema consiste em um escoamento dentro de um tubo, que ao ser expelido para fora do tubo o diâmetro do jato aumenta de tamanho. De acordo com Tanner (1970) e Tanner (2005), desprezando a aceleração da gravidade, a razão entre o diâmetro do jato, D , e o diâmetro do tubo, d , é dada por

$$\frac{D}{d} = 0.13 + \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{N_1}{2\tau} \right)_w \right]^{\frac{1}{6}}, \quad (1.5)$$

em que, $(N_1/2\tau)_w$ é a razão entre a primeira diferença de tensão normal e a tensão de cisalhamento na parede do tubo. Esse efeito é muito observado na indústria em processos de extrusão, em impressoras de tinta e impressoras 3D. Recentemente, [Tomé et al. \(2012\)](#) e [Figueiredo et al. \(2013\)](#) apresentaram resultados sobre o inchamento do extrudado em três dimensões, utilizando o método MAC.

Um outro problema que contraria a intuição adquirida com fluidos newtonianos é o sifão sem tubo (do inglês *tubeless siphon* ou *fano flow*), ilustrado na figura 6c. No caso de fluidos newtonianos, o sifão é utilizado para o transporte de líquidos entre reservatórios, onde o líquido é transportado de um reservatório em um nível superior para outro em um nível inferior. Isso é possível devido à força da gravidade e pelo fato de parte do nariz do tubo estar imerso no líquido. No entanto, quando o fluido é viscoelástico, é possível após alguns instantes afastar o nariz do tubo do reservatório e continuar a observar o efeito. Esse efeito é causado pela tensão elástica do alongamento das moléculas poliméricas, as quais conseguem suportar o peso da coluna de fluido ([MACMINN; MCKINLEY, 2004](#)).

Outro efeito que contraria a intuição é o efeito de Weissenberg ou *Rod-Climbing Effect*. Esse é um dos comportamentos mais interessantes exibido pelos fluidos viscoelásticos. Esse experimento consiste em um bastão que gira dentro de um recipiente com fluido viscoelástico (vide Fig. 6e). Para esse mesmo experimento com um fluido newtoniano, a superfície livre do fluido perto do bastão seria puxada para baixo, devido à força centrífuga. Ao contrário de um fluido newtoniano, um fluido viscoelástico movimenta-se na direção oposta da força centrífuga e o fluido escala o bastão, como poder ser observado na Fig. 6e. O efeito de Weissenberg ocorre devido à influência da diferença de tensões normais no valor da pressão na direção radial ([BIRD et al., 1987](#)). O efeito de Weissenberg é muito observado na indústria, em processos de mistura e homogeneização, como na indústria de alimentos, farmacêutica, e petrolífera.

Recentemente, [Lhuissier et al. \(2014\)](#) descreveu um novo efeito envolvendo fluidos viscoelásticos com interface, ilustrado na figura 6d. Esse experimento é semelhante ao problema do ressalto hidráulico, em que, um jato de fluido newtoniano é direcionado contra uma placa plana, criando uma camada de fluido fina em uma região próxima de onde o fluido atinge a placa, e uma camada de fluido mais espessa em uma região mais afastada. No caso de fluidos newtonianos, o problema do ressalto hidráulico apresenta axissimetria. Quando esse experimento é realizado com fluidos viscoelásticos, o comportamento do fluido perde a axissimetria, devido ao aparecimento de aletas formadas pelo fluido, conectando a seção transversal à parede da placa (vide figure 6d). Além disso, a região com a camada fina de fluido, que no caso newtoniano tem uma forma circular, apresenta uma forma poligonal no caso viscoelástico. O número de vértices do polígono é igual ao número de aletas. Segundo [Lhuissier et al. \(2014\)](#), o número de aletas está diretamente relacionado com o tempo de relaxação da molécula polimérica, em que, aumentando o tempo de relaxação, o número de aletas aumenta. Além disso, [Lhuissier et al. \(2014\)](#) também relatou que o número de aletas aumenta quando a velocidade é aumentada, e a distância entre o

(a) *Die-swell* (MACMINN; (b) Ascensão da bolha (c) Sifão sem tubo (MACMINN; MCKINLEY, 2004) (WAGNER *et al.*, 2000) LEY, 2004)

(d) Impacto do jato (LHUIS-SIER *et al.*, 2014)

(e) Efeito de Weissenberg (MCKINLEY, 2013)

(f) CaBER (KESHAVARZ, 2012)

Figura 6 – Ilustração do comportamento de fluidos viscoelásticos em vários experimentos multifásicos.

injetor e a placa é diminuída.

Um problema que tem atraído a atenção de vários pesquisadores em reologia é o chamado reômetro capilar, em inglês *Capillary Break-up Extensional Rheometer* (CaBER (ÉTIENNE *et al.*, 2006; BHAT *et al.*, 2010)). A figura 6f ilustra o comportamento desse reômetro. O experimento consiste em uma porção de fluido entre dois pratos paralelos, sendo que um dos pratos se move no sentido oposto do outro prato. Devido ao movimento dos pratos a interface do fluido se deforma, e a tensão superficial começa a ter muita influência no escoamento. Após a tensão superficial agir no escoamento, o fluido começa a se dividir entre os pratos e ocorre o aparecimento de um filamento entre as duas porções de fluido. Através da dinâmica desse filamento é possível extrair as características reológicas do fluido. Em alguns casos, a formação de gotículas no filamento é observada, esse efeito é conhecido como *Beads-On-A-String* (BOAS) *structures* (BHAT *et al.*, 2010). O BOAS é um efeito interessante observado em vários escoamentos viscoelásticos, onde ocorre o rompimento de um filamento ou jato. Entretanto, a ocorrência do BOAS no experimento do CaBER atrapalha a análise do comportamento do filamento, impossibilitando extrair as informações reológicas do fluido.

Uma boa descrição da teoria de alguns desses experimentos, e de outros experimentos envolvendo fluidos viscoelásticos multifásicos, podem ser encontrados em Bird e Curtiss (1984), Bird *et al.* (1987), Eggers e Villermaux (2008).

1.4 Desenvolvimento do projeto

São diversas as aplicações industriais envolvendo escoamentos viscoelásticos multifásicos, sendo que muitos escoamentos exibem comportamentos fascinantes. A simulação desses escoamentos envolvem consideráveis dificuldades numéricas e computacionais, uma vez que além de resolver as equações de Navier-Stokes, o que por si só já representa considerável desafio, é preciso também representar corretamente a interface, uma vez que esta é variável com o tempo. Os fluidos não-newtonianos introduzem uma dificuldade extra, a saber, as equações que modelam o tensor deformação devem ser resolvidas em conjunto com as equações de Navier-Stokes.

O projeto de pesquisa do presente trabalho tinha, como objetivo inicial, o estudo numérico detalhado do problema do efeito de Weissenberg com altas velocidades angulares. Esse efeito é muito observado na indústria, em processos de misturas e homogeneização de substâncias químicas. Na literatura existem poucos trabalhos que apresentam resultados numéricos sobre esse efeito, dos quais podemos mencionar os trabalhos de Debbaut e Hocq (1992), Luo (1999), Habla *et al.* (2011). Além disso, todos os resultados apresentados estão limitados por uma certa velocidade angular. Numericamente essa limitação existe, pois os métodos utilizados para simular esse efeito com altas velocidades angulares não são capazes de tratar instabilidades físicas e numéricas que ocorrem no escoamento.

O estudo do efeito de Weissenberg seria desenvolvido com o auxílio de um código para

simulação de escoamentos viscoelásticos com superfície livre, o chamado Freeflow (CASTELO *et al.*, 2000), construído no Laboratório de Matemática Aplicada e Computação Científica (LMACC), no Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC), na Universidade de São Paulo. A formulação utilizada nesse código é baseada no método SMAC para representar a interface, enquanto as equações são discretizadas por um esquema de diferenças finitas em uma malha uniforme do tipo MAC. No entanto, devido à dinâmica do efeito de Weissenberg, a qual envolve grandes deformações na interface (LUO, 1999), e o fato de o efeito ocorrer em uma pequena região do domínio computacional, concluiu-se que a formulação SMAC em uma malha uniforme não seria capaz de capturar e investigar o efeito com precisão. Essas limitações foram questionadas na defesa do exame de qualificação do projeto, e no final da discussão o método VOF foi sugerido como uma boa opção para estudar o efeito, além da necessidade de uma malha não uniforme.

Foram identificados todos os desafios em simular o efeito de Weissenberg com altas velocidades angulares, entre os quais podemos mencionar a complexidade da geometria do problema, a escolha correta do modelo do fluido viscoelástico, limitações numéricas para simular escoamentos com baixos números de Reynolds e altos números de Weissenberg, cálculo preciso da curvatura, correta representação da interface para capturar as instabilidades. O algoritmo proposto para superar esses desafios é baseado em um esquema de diferenças finitas em uma malha deslocada do tipo MAC. Coordenadas axissimétricas foram adotadas devido à curvatura da geometria. A equação da quantidade de movimento é resolvida com métodos implícitos (LI *et al.*, 1998), enquanto que métodos de estabilização são utilizados quando necessário para integrar a equação constitutiva no tempo (FATTAL; KUPFERMAN, 2005). A interface é representada pelo método VOF, sendo a normal à interface reconstruída pelo método ELVIRA (PILLIOD; PUCKETT, 2004), enquanto a atualização no tempo é realizada por um método geométrico, o qual utiliza um operador *split* de segunda ordem. As forças interfaciais são balanceadas pelo algoritmo *Continuum Surface Force* (CSF), combinado com o método da função altura (HF) para o cálculo da curvatura (FRANCOIS *et al.*, 2006; POPINET, 2009). Todas as equações foram discretizadas em uma malha não uniforme para capturar com precisão o efeito de interesse que ocorre em uma pequena região do domínio.

A formulação desenvolvida para o estudo do efeito de Weissenberg foi implementada na construção de um novo código. A fim de estudar outra classe de escoamentos, o código foi desenvolvido para resolver escoamentos bifásicos, em vez de superfície livre. Apesar dos resultados apresentados no presente trabalho serem 2D e axissimétricos, ambos os sistemas de coordenadas, cartesianas e cilíndricas, foram implementados por completo para todos os métodos, a menos do método de representação da interface. Além disso, o código foi desenvolvido para realizar processamento em paralelo, utilizando o padrão de comunicação de dados da biblioteca *Message Passing Interface* (MPI) com balanço de carga entre os processadores. A cada melhoria e formulação implementada, testes exaustivos no sistema foram realizados para garantir a robustez do código.

O novo código possibilitou o desenvolvimento de grandes avanços no projeto, e obter muitos resultados relevantes. Para aperfeiçoar os resultados obtidos, e explorar outros problemas existentes em reologia computacional, foi realizado um estágio de pesquisa no exterior, no período de Maio a Setembro de 2015, no Departamento de Engenharia Química da Universidade do Porto (CEFT), Porto, Portugal, junto com o Professor Dr. Manuel António Moreira Alves. No estágio foi possível ir além dos objetivos do projeto, com a investigação do problema do CaBER. Esse problema envolve consideráveis dificuldades, superando as do efeito de Weissenberg, e a formulação proposta demonstrou ser capaz de simular o problema. Esse era um dos problemas de maior interesse para o grupo do CEFT, pois envolve aplicações industriais muito importantes, e modificações no experimento foram propostas pelo grupo, a fim de obter melhorias significativas na dinâmica do escoamento. A principal modificação foi a realização do experimento submerso em um óleo (SOUSA *et al.*, 2016), a qual modifica a dinâmica do escoamento. A experiência junto ao grupo do CEFT contribuiu para a formação do doutorado, e consolidou o contato com o grupo CEFT, para cooperação em estudos futuros.

A fim de contribuir com melhorias no código Freeflow, o qual é utilizado por algumas pessoas do grupo do LMACC, foram implementados alguns métodos utilizados na formulação apresentada, como o método de estabilização *log-conformation* na versão implícita 3D, e o método VOF na versão 2D. Alguns dos testes realizados no Freeflow com esses métodos são apresentados no apêndice B.

1.5 Esboço da tese

No presente trabalho é apresentada uma formulação e um novo código para a investigação de escoamentos viscoelásticos multifásicos complexos, com especial interesse nos problemas do efeito de Weissenberg e do CaBER. Essa tese é estruturada da seguinte forma:

- Capítulo 1: são apresentadas algumas motivações para o estudo de escoamentos multifásicos. É realizada uma breve revisão sobre métodos de captura e representação de interface. Também é apresentada uma revisão sobre fluido viscoelásticos, e alguns dos efeitos fascinantes que eles exibem envolvendo escoamentos multifásicos. Por fim, é apresentado um resumo do desenvolvimento do trabalho.
- Capítulo 2: é apresentada a modelagem matemática das equações governantes, bem como as condições de contorno para todos os tipos de fronteiras envolvidas no trabalho.
- Capítulo 3: são apresentados os métodos numéricos adotados na construção da formulação apresentada. Também são discutidas as vantagens que eles apresentam em relação a outros métodos na literatura, para contornar alguns dos desafios encontrados em simular os problemas de interesse.

- Capítulo 4: são apresentados alguns dos testes realizados no desenvolvimento e construção do código. Os testes foram divididos em diferentes casos, com o objetivo de testar cada parte separada do código, a fim de garantir a precisão da formulação e a correta implementação no código. Os resultados foram comparados com soluções teóricas e resultados numéricos, apresentando excelente concordância.
- Capítulo 5: o problema do efeito de Weissenberg é investigado. Primeiro, uma verificação com baixas velocidades angulares foi realizada, com dados experimentais, numéricos, e teóricos, apresentados na literatura. Por fim, um estudo para altas velocidades angulares foi realizado com o modelo Oldroyd-B, em que, parâmetros críticos foram determinados, sendo que a partir desses valores oscilações periódicas foram observadas, as chamadas instabilidades de *breathing*. Numericamente, até o nosso conhecimento, essas instabilidades não foram apresentadas na literatura.
- Capítulo 6: resultados sobre o problema do CaBER são apresentados. Os resultados foram comparados com dados encontrados na literatura, e apresentaram boa concordância. Condições de contorno foram introduzidas para representar a histerese do ângulo de contato.
- Capítulo 7: são apresentadas as conclusões do trabalho, e discutidas as principais contribuições.
- Apêndices: no apêndice A são descritas algumas modificações na discretização das equações governantes causadas pela mudança do sistema de coordenadas, enquanto o apêndice B mostra alguns testes realizados com as melhorias implementadas no Freeflow.

MODELAGEM MATEMÁTICA

2.1 Introdução

As equações de Navier-Stokes são um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares, as quais descrevem o comportamento físico de um fluido, entre eles, todos os escoamentos mencionados na seção 1.1. Essas equações foram propostas no início da década de 1880 por Claude-Louis Navier e George Gabriel Stokes, simultaneamente na França e na Inglaterra. As equações de Navier-Stokes foram deduzidas a partir da segunda lei de Newton e outras leis básicas, aplicadas a um volume de controle arbitrário (FOX *et al.*, 1985).

O sistema de equações é formado pelas equações de conservação da massa, conservação da quantidade de movimento, e conservação da energia. No caso de escoamentos multifásicos a equação de advecção da interface é adicionada ao sistema. Nesse trabalho, todos os escoamentos são incompressíveis e isotérmicos, logo a densidade do fluido é constante, e a equação da conservação da energia pode ser desconsiderada. Assim, o conjunto de equações que modelam escoamentos incompressíveis, isotérmicos, viscoelásticos e multifásicos, pode ser escrito como:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu_S \dot{\gamma} + \boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{g} + \sigma \kappa n \delta, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - \left[(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = \frac{1}{\lambda} \mathbf{M}(\boldsymbol{\tau}), \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) = 0. \quad (2.4)$$

A Eq. 2.1 é a equação de conservação da massa, sendo $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ o campo de velocidade. A Eq. 2.2 é a equação da conservação da quantidade de movimento, sendo $p = p(\mathbf{x}, t)$ a pressão, ρ a densidade do fluido, μ_s é a viscosidade do solvente, $\mathbf{g}$ representa o vetor da aceleração gravitacional, $\dot{\gamma} = \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T$ é o tensor taxa de deformação, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor não newtoniano, σ o coeficiente da tensão superficial, κ a curvatura, $\mathbf{n}$ a normal à interface, e δ é uma função Delta concentrada na interface (BRACKBILL *et al.*, 1992). Em escoamentos com fluidos newtonianos $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$, e em escoamentos com fluidos viscoelásticos o tensor $\boldsymbol{\tau}$ é obtido pela equação constitutiva, Eq. 2.3. Na Eq. 2.3, λ representa o tempo de relaxação do material, e $M(\boldsymbol{\tau})$ define qual o modelo de fluido viscoelástico a ser utilizado. A Eq. 2.4 é a equação de advecção da interface dada pelo método VOF, em que, f é a fração de volume.

Para que a solução desse sistema de equações garanta o comportamento físico do escoamento é necessário impor condições de contorno e iniciais para todas as variáveis do sistema. Essas condições especificam fisicamente o que ocorre com o fluido no limiar da região espacial do domínio. Na seção seguinte são definidos quais os tipos de contorno utilizados nesse trabalho, e quais as condições físicas associadas a cada um deles.

2.2 Condições de contorno

A solução analítica das equações de Navier-Stokes ainda não existe para problemas genéricos. Assim, é necessário o uso de métodos numéricos para aproximar a solução, como o método de diferenças finitas, o método de elementos finitos, o método de volumes finitos, o método SPH, ou métodos espectrais. Em alguns casos especiais é possível obter uma solução analítica. Geralmente a solução é obtida para alguns escoamentos unidirecionais com geometrias simples, em que, é admitido um conjunto de hipóteses que permitem a simplificação de vários termos no sistema de equações. Recentemente, o professor Dr. Mukhtarbay Otelbaev da Universidade *Eurasian National University* em Astana, Cazaquistão, propôs uma solução parcial para as equações de Navier-Stokes (OTELBAEV, 2013). Algumas das hipóteses foram: escoamento incompressível, confinado, e periodicidade nas três direções. No entanto, na solução proposta por Otelbaev havia um erro. A demonstração da existência de solução é um dos sete problemas do Prêmio Millennium (*Millennium Prize Problems* (CARLSON *et al.*, 2006)), sendo o prêmio no valor de um milhão de dólares.

Para obter uma solução analítica ou uma solução aproximada por métodos numéricos, é necessário impor condições iniciais e condições de contorno para obter um problema bem posto. As condições iniciais para o campo de velocidades são definidas de modo que satisfaça a equação da conservação da massa, Eq. 2.1. Os outros campos do escoamento geralmente são iniciados com zero. As condições de contorno dependem do tipo de fronteira adotada. Neste trabalho são considerados os seguintes tipos de contornos: rígido, simetria, injetor, ejetor e interface. A figura 7 ilustra um domínio Ω com diferentes tipos de fronteira. Duas condições podem ser

impostas, a condição de Dirichlet ou a condição de Neumann, sendo que essas duas condições podem ser impostas para diferentes propriedades em um mesmo contorno. Essas condições são determinadas pelas propriedades físicas do contorno. Suponha sem perda de generalidade, um escoamento em duas dimensões, em que, $\mathbf{n}$ e $\mathbf{t}$ são os vetores normal e tangencial a cada fronteira $\partial\Omega_i$, com $i = 1, 2, 3, 4$ e 5 . Sejam $\mathbf{U}$ o vetor velocidade de cada contorno, e $\mathbf{u}$ o vetor velocidade do fluido na região do contorno. A seguir serão descritas as condições de contorno impostas a cada fronteira.

Figura 7 – Ilustração dos diferentes tipos de fronteiras.

2.2.1 Contorno rígido ($\partial\Omega_1$)

Numericamente o contorno rígido é utilizado para representar algum obstáculo ou parede no escoamento. Além disso, esse contorno também é utilizado para representar alguns objetos com velocidade prescrita, como o movimento da tampa no problema da cavidade, e a rotação do bastão no problema do efeito de Weissenberg. A fronteira rígida possui a propriedade física de aderência ou não escorregamento (*no-slip condition*). Em outras palavras, significa que o fluido tem velocidade relativa zero em relação a esse contorno. Outra característica desse contorno é a condição de impermeabilidade, significa que não há fluxo de massa através do contorno. Assim, temos que a condição de contorno para o campo de velocidades é dada por

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \quad \text{e} \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{t}. \quad (2.5)$$

A condição Eq. 2.5 implica que $\mathbf{u} = \mathbf{U}$, ou seja, a velocidade do fluido é igual a velocidade da fronteira $\partial\Omega_1$. No caso do tensor viscoelástico, $\boldsymbol{\tau}$, as condições de contorno para essa fronteira são obtidas pela substituição das condições do campo de velocidades na equação constitutiva do fluido, Eq. 2.3. Para a pressão, admitindo um contorno rígido estático, a condição de contorno é dada por

$$\nabla p \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (2.6)$$

No caso da fração de volume, f , a condição de contorno na fronteira $\partial\Omega_1$ é determinada pelo ângulo de contato. Geralmente o ângulo de contato é tomando igual a 90° , nesse caso a condição de contorno é dada por

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (2.7)$$

Uma descrição sobre o ângulo de contato é apresentada na subseção 2.2.7.

2.2.2 Simetria ($\partial\Omega_2$)

O contorno de simetria é utilizado em escoamentos laminares, e em alguns escoamentos turbulentos, onde há simetria em alguma das direções do escoamento. Quando possível, o uso desse contorno reduz o custo computacional pela metade, pois o eixo de simetria é situado no centro do domínio. Além disso, esse contorno também representa situações onde os efeitos de aderência não são desejáveis, efeito de escorregamento (*free-slip condition*). O contorno $\partial\Omega_2$, assim como $\partial\Omega_1$, também possui a propriedade de impermeabilidade, e como esse contorno é fixo no domínio, segue que

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (2.8)$$

Pela propriedade de simetria é conveniente impor que a variação de todas as outras propriedades na direção normal a essa fronteira seja zero, em outras palavras

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{u} \cdot \mathbf{t})}{\partial \mathbf{n}} &= 0, \\ \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} &= 0, \\ \frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}} &= 0, \\ \frac{\partial \tau_{i,i}}{\partial \mathbf{n}} &= 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

No caso das tensões de corte, as condições de contorno na fronteira $\partial\Omega_2$ são dadas por

$$\tau_{i,j} = 0, \quad \text{com } i \neq j, \quad (2.10)$$

em que, i e j são as componentes do tensor.

2.2.3 Injetor ($\partial\Omega_3$) e ejetor ($\partial\Omega_4$)

Em escoamentos incompressíveis, sempre que uma entrada de fluido é definida no domínio, uma saída de fluido precisa ser definida para garantir o balanço de massa. Em ambos os contornos, injetor ou ejetor, existe o fluxo de massa através da direção normal. O que diferencia

um do outro é o sinal do produto interno entre o vetor velocidade definido no contorno, e a normal ao contorno

$$\begin{aligned} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} &> 0, \text{ representa um injetor} \\ \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} &< 0, \text{ representa um ejetor.} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Esses contornos são classificados de duas formas, contorno prescrito e contorno continuado. O contorno prescrito reproduz um caso similar a uma bomba que injeta ou retira fluido do domínio. Nesse caso, o fluxo de massa através desse contorno é definido por uma velocidade prescrita, $\mathbf{u}_p$, de forma que

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_p \cdot \mathbf{n} \quad \text{e} \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{u}_p \cdot \mathbf{t} = 0. \quad (2.12)$$

O contorno de entrada ou saída prescrita, difere das condições de contorno para fronteira $\partial\Omega_1$ apenas pela condição de impermeabilidade. Assim, as condições de contorno para as outras propriedades do fluido são iguais as da fronteira $\partial\Omega_1$. Da mesma forma que em $\partial\Omega_1$, as condições de contorno para o tensor viscoelástico são obtidas pela simplificação de vários termos na Eq. 2.3, substituindo o campo de velocidades prescrito na fronteira $\partial\Omega_3$ ou $\partial\Omega_4$. Entretanto, dependendo do perfil de velocidades prescrito, e do modelo do fluido viscoelástico adotado, a simplificação de alguns termos não lineares não é possível. A solução para esse problema é utilizar a condição de contorno do modelo Oldroyd-B (ABOUBACAR *et al.*, 2005; OISHI *et al.*, 2011), sendo que esse modelo é um caso particular de vários outros modelos, apenas por alguns ajustes nos parâmetros.

A condição de contorno continuada, conhecida no inglês como *outflow condition*, é utilizada em casos onde informações sobre o campo de velocidades, e das outras variáveis do escoamento, não são conhecidas para calcular a solução do problema. Geralmente esse contorno é utilizado para representar uma saída de fluido, definido em regiões onde o escoamento esteja totalmente desenvolvido. Nesse caso, a condição de contorno continuada assume gradiente normal zero para todas as variáveis do escoamento, exceto para a pressão. Essas condições de contorno foram definidas matematicamente, pois fisicamente ainda não são bem definidas. Uma discussão detalhada sobre a condição de contorno continuada pode ser encontrada em Wesseling (2001), Carlson (2011), Prosperetti e Tryggvason (2009).

2.2.4 Condição de contorno periódica

A condição de contorno periódica não está ilustrada na figura 7, mas é utilizada nesse trabalho. Esse contorno é utilizado nos escoamentos discretizados em um sistema de coordenadas cilíndricas, para impor a propriedade de axissimetria. Essa estratégia simplifica todas as derivadas das variáveis na direção azimutal, e diminui tremendamente o custo computacional com a redução da dimensão do domínio.

2.2.5 Interface

Nessa subseção são descritas as condições de contorno para a fronteira da interface, $\partial\Omega_5$, entre dois fluidos imiscíveis. São consideradas as mesmas hipóteses das Eqs. 2.1 - 2.4, escoamento viscoso, incompressível e isotérmico. As condições para essa fronteira são derivadas a partir da conservação da massa, conservação da quantidade de movimento, e força de tensão superficial, em um volume de controle muito fino que contém uma região da interface (vide figura 8). Essas condições são chamadas de condições de salto (do inglês, *jump condition*). A condição obtida através do princípio da conservação da massa, no volume de controle ilustrado na figura 8, é conhecida como a condição de Rankine–Hugoniot (TRYGGVASON *et al.*, 2011), em que,

$$\dot{m} = \rho_1 (\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} - U) = \rho_2 (\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} - U), \quad (2.13)$$

onde, $\dot{m}$ representa o fluxo de massa através da interface, $\mathbf{u}_i$, com $i = 1, 2$, representa o vetor velocidade em cada fase da interface, e U é a magnitude da velocidade normal à interface. A condição de Rankine-Hugoniot estabelece uma relação de “mistura” entre as fases do escoamento. Assumindo as hipóteses de que não há evaporação ou condensação entre as fases, fluidos imiscíveis, e que não ocorre nenhuma reação química que cause mudança de fase, segue que $\dot{m} = 0$. Assim, pela condição de incompressibilidade e $\dot{m} = 0$, segue pela Eq. 2.13 que

$$U = \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}, \quad (2.14)$$

em que, no caso de fluidos viscosos se reduz a seguinte condição

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \quad \text{em} \quad \partial\Omega_5. \quad (2.15)$$

A Eq. 2.15 expressa uma relação contínua para a velocidade na interface. De outra forma, ela pode ser escrita como notação de salto das propriedades na interface como $[\mathbf{u}]_{\partial\Omega_5} = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1 = 0$. Mais detalhes sobre essa condição podem ser encontrados em Scardovelli e Zaleski (1999), Prosperetti e Tryggvason (2009).

Figura 8 – Ilustração do volume de controle na interface.

O equilíbrio das forças na interface é derivado a partir da conservação da quantidade de movimento. Assim, aplicando no volume de controle da figura 8, segue que

$$\int_{VC} \rho \frac{Du}{Dt} dV - \int_{VC} \mathbf{B} dV = \int_{SC} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) dS + \int_C \sigma \mathbf{p} dl, \quad (2.16)$$

em que, $\mathbf{T}_i = -p_i \mathbf{I} + \mu_{si} \dot{\gamma}_i + \boldsymbol{\tau}_i$ é o tensor tensão total, $\mathbf{B}$ representa as forças de campo no volume de controle VC , SC é a superfície de controle, C é o contorno da interface contida no volume de controle, dl é o diferencial de comprimento ao longo de C , e $\mathbf{p}$ é um vetor perpendicular ao segmento da interface. Considerando as mesmas hipóteses que reduziram a Eq. 2.13 na Eq. 2.15, e assumindo um volume de controle com uma espessura tão pequena quanto se queira, temos que a Eq. 2.16 se reduz a

$$\int_{SC} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) dS + \int_C \sigma \mathbf{p} dl = 0. \quad (2.17)$$

O segundo termo da Eq. 2.17 pode ser convertido em uma integral de superfície, pela aplicação do teorema de Stokes,

$$\int_C \sigma \mathbf{p} dl = \int_{SC} \nabla_s \sigma - \sigma \mathbf{n} (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) dS, \quad (2.18)$$

onde, ∇_s é o operador gradiente de superfície, definido como

$$\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \nabla, \quad (2.19)$$

em que, a curvatura é definida como $\kappa = \nabla_s \cdot \mathbf{n}$. Os detalhes da Eq. 2.18 podem ser encontrados em [Akylas \(2014\)](#). O equilíbrio de força é válido para qualquer que seja o volume de controle na interface. Assim, substituindo a Eq. 2.18 na Eq. 2.17, vamos obter

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) = \sigma \mathbf{n} \kappa - \nabla_s \sigma. \quad (2.20)$$

O produto escalar dessa condição pelos vetores $\mathbf{n}$ e $\mathbf{t}$, divide o balanço de força em normal e tangencial, respectivamente, por

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) \cdot \mathbf{n} = \sigma \kappa, \quad (2.21)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) \cdot \mathbf{t} = -\nabla_s \sigma \cdot \mathbf{t}. \quad (2.22)$$

Pelas hipóteses assumidas nesse trabalho, fluidos imiscíveis, isotérmicos e sem mudança de fase, temos que o coeficiente da tensão superficial, σ , permanece constante ao longo de toda a interface. Assim, o termo do lado direito da Eq. 2.22 se torna igual a zero. Mais detalhes sobre as condições de contorno na interface podem ser encontrados em [Scardovelli e Zaleski \(1999\)](#), [Tryggvason et al. \(2011\)](#).

2.2.6 Tensão superficial

A tensão superficial é um fenômeno que ocorre na interface entre diferentes líquidos, devido à força de coesão. A força de coesão é uma força de atração entre as moléculas de um mesmo material. A figura 9 ilustra a força de coesão em uma porção de fluido. No interior do fluido as moléculas são atraídas em todas as direções, sendo que no equilíbrio das forças não há nenhuma força resultante. Por outro lado, o balanço de forças das moléculas da interface, resulta em uma força na direção do interior do fluido. Essa força que puxa as moléculas da interface para o interior do fluido, faz com que a interface tenha um comportamento elástico, tentando minimizar a área da interface. A energia da interface é o trabalho necessário para criar uma nova interface, em que, em condições isotérmicas, se relaciona com a área da interface da seguinte forma

$$dE = \sigma dS, \quad (2.23)$$

onde, dS é uma interface infinitesimal ou área da interface. As moléculas que estão na interface possuem maior energia, e são propensas a diminuir a energia minimizando a área da interface. É por este motivo que uma porção de fluido, sem influência da aceleração da gravidade, tende para a forma de uma esfera, já que o formato da esfera possui a menor área na interface. Mais informações sobre a força da tensão superficial podem ser encontradas em [Tryggvason et al. \(2011\)](#).

Figura 9 – Ilustração da força de coesão em uma porção de fluido.

Em escoamentos envolvendo tensão superficial, existem dois números adimensionais que relacionam a força da tensão superficial com outras forças do escoamento. O número de

capilaridade relaciona as forças viscosas com a tensão superficial, é definido como

$$Ca = \frac{\mu U}{\sigma}. \quad (2.24)$$

O segundo número é chamado de número de Weber, relaciona as forças inerciais com a tensão superficial, é dado por

$$We = \frac{\rho LU^2}{\sigma}, \quad (2.25)$$

em que, L é a escala de comprimento, e U é a escala de velocidade. A escolha do número adimensional para relacionar a força da tensão superficial com o escoamento, depende de qual força é dominante no escoamento, viscosa ou inercial. O número de Reynolds relaciona essas duas forças, sendo definido como a razão entre as forças inerciais e viscosas,

$$Re = \frac{\rho LU}{\mu}. \quad (2.26)$$

Assim, Ca é escolhido se $Re \ll 1$, e We é escolhido se $Re \gg 1$. Uma boa descrição de vários parâmetros adimensionais, envolvendo fluidos complexos com interface, pode ser encontrada em [McKinley \(2005\)](#).

2.2.7 Ângulo de contato

O ângulo de contato é o ângulo formado entre a reta tangente à interface e o contorno rígido, no interior do fluido mais denso. Ele mede o molhamento de um líquido, em outras palavras, mede o quanto um líquido se espalha sobre uma superfície. A figura 10 ilustra o ângulo de contato entre a interface de um líquido-gás e um contorno rígido. Segundo as condições de contorno para fronteira $\partial\Omega_1$, a força de aderência mantém o fluido “colado” na parede. Entretanto, não é isso que é observado na prática, pois o ponto de contato entre a interface e a parede se move quando as forças de coesão são maiores do que as forças de aderência. O ângulo de contato depende das fases do fluido, e do substrato do contorno rígido. O balanço de forças é descrito pela equação de Young ([YOUNG, 1805](#)),

$$\sigma_{s,f_2} = \sigma_{s,f_1} + \sigma_{f_1,f_2} \cos \theta_e, \quad (2.27)$$

em que, θ_e é o valor do ângulo de contato estático, σ_{s,f_2} é a tensão superficial entre o sólido e o fluido 2, σ_{s,f_1} é a tensão superficial entre o sólido e o fluido 1, e σ_{f_1,f_2} é a tensão superficial entre os fluidos (vide figura 10c). Se $\theta_e < 90^\circ$, caso ilustrado na figura 10a, a superfície é chamada de hidrofílica, e se $\theta_e > 90^\circ$, caso ilustrado na figura 10c, a superfície é chamada de hidrofóbica. O que determina o tipo de superfície é a composição química do material e a rugosidade. Materiais com energia de interface baixa são hidrofóbicos, pois tem alto ângulo de contato para minimizar a área da interface. Já os materiais com alta energia de interface são hidrofílicos. A presença de rugosidade na superfície rígida, geralmente potencializa os efeitos hidrofílicos ou hidrofóbicos.

Nesse caso, o balanço de forças proposto por [Young \(1805\)](#) não é válido, sendo que, um novo ângulo de contato é obtido dependendo do estado de equilíbrio, equilíbrio de Wenzel ([WENZEL, 1936](#)) ou Cassie-Baxter ([CASSIE; BAXTER, 1944](#)).

Figura 10 – Ilustração do ângulo de contato.

Existem ângulos de contato que não são estáticos, denominados de ângulos dinâmicos. Esse caso ocorre quando o ponto de contato muda de posição com a dinâmica do escoamento. Nesse caso, o ângulo de contato dinâmico é limitado entre um ângulo máximo e um mínimo. Uma boa descrição do balanço de forças, e do comportamento dos ângulos de contato podem ser encontradas em [Pozrikidis \(2009\)](#), [Montefusco \(2012\)](#), [Yuan e Lee \(2013\)](#).

A influência do ângulo de contato em vários escoamentos está revolucionando a indústria de materiais. A figura 11 ilustra uma das aplicações, em que, o tubo do ketchup é uma superfície hidrofóbica, e não deixa resíduos quando esvaziado. As aplicações são inúmeras, vão desde a indústria de alimentos até à indústria aeronáutica, no desenvolvimento de tintas para evitar gotas de água presas na fuselagem do avião, em que, no caso de congelarem, aumentam o arrasto, o peso, e o consumo da aeronave. Assim, o desenvolvimento de novos materiais, para controlar o ângulo de contato nos escoamentos, tem grande impacto tecnológico, econômico e ambiental. Muito progresso tem sido obtido, como pode ser visto em [Anand et al. \(2012\)](#) e [Smith et al. \(2013\)](#).

Figura 11 – Comportamento do ketchup escoando para fora de um tubo sem deixar resíduos. Figura extraída de [Chang \(2015\)](#).

2.3 Modelos viscoelásticos

A equação constitutiva que define o modelo de fluido viscoelástico, pode ser desenvolvida através de duas estratégias, teoria cinética ou modelagem matemática. Na teoria cinética é necessário conhecer várias informações do fluido, como o tipo da molécula, viscosidade, tempo de relaxação, peso molecular, concentração, e escalas de comprimento. É definido de forma apropriada, um conjunto de elementos micromecânicos para representar a cadeia de moléculas poliméricas. Um dos elementos mais simples para representar a estrutura da molécula polimérica é o modelo massa-mola (em inglês *dumbbell*), em que, dois pontos de massa são conectados por uma mola elástica. A figura 12 ilustra uma cadeia polimérica representada por elementos massa-mola. As massas do sistema estão sujeitas à forças do escoamento, força de arrasto viscosa, força elástica, devido à deformação da mola, e forças resultantes do movimento Browniano. Essas forças são modeladas com o auxílio de métodos estocásticos e Brownianos, em escoamentos cisalhantes ou extensionais (DOYLE *et al.*, 1998; JENDREJACK *et al.*, 2002; AMMAR *et al.*, 2006). Assim, é possível estabelecer uma equação hidrodinâmica que relaciona a interação entre as moléculas poliméricas e o solvente (BIRD *et al.*, 1987).

Figura 12 – Ilustração do modelo micromecânico massa-mola utilizado para representar uma cadeia polimérica.

A teoria cinética representa muito bem o modelo físico. No entanto, a complexidade aumenta quando envolve escoamentos complexos, e elementos micromecânicos mais elaborados, tornando essa abordagem inviável computacionalmente. Esse problema pode ser contornando, se a construção do modelo for realizada em uma escala mesoscópica, em vez de uma escala microscópica (LARSON; DOI, 1991; KEUNINGS, 2004). Nesse caso, devido à mudança de escala, é necessário impor valores médios para algumas variáveis, diminuindo a semelhança com o modelo físico.

A abordagem da modelagem matemática para desenvolver a equação constitutiva do fluido, é baseada na mecânica dos meios contínuos. Os fluidos viscoelásticos exibem características de um fluido, e de um sólido, devido às forças viscosas e elásticas, respectivamente. Assim, os efeitos da viscoelasticidade podem ser descritos através da combinação de modelos mecânicos simples. O modelo mais simples é o da viscoelasticidade linear, proposta por Maxwell (MAXWELL, 1867), pela combinação em série de uma mola (força elástica) e um amortecedor (força viscosa). A figura 13 ilustra essa combinação em série, a qual é denominada de elemento de Maxwell. Na figura 13, τ e γ representam a tensão e deformação, sendo os subscritos v e e

referentes as forças viscosas e elásticas, respectivamente. Geralmente, na literatura as tensões são representadas pelo símbolo σ (tensor de Cauchy), em vez de τ . Essa substituição foi realizada para evitar alguma confusão com o coeficiente de tensão superficial, definido na seção 2.1 por σ .

Figura 13 – Ilustração do elemento de Maxwell.

A componente elástica que expressa a força da mola é modelada pela lei de Hooke,

$$\tau_e = G\gamma_e, \quad (2.28)$$

em que, G é o módulo de elasticidade da mola. Já a componente viscosa, que expressa a força do amortecedor, é considerada ser uma função linear da taxa de deformação, e não da deformação, dada por

$$\tau_v = \mu_p \dot{\gamma}_v, \quad (2.29)$$

em que, μ_p é a viscosidade do polímero, e representa a constante de proporcionalidade. O parâmetro $\dot{\gamma}_v$ é o tensor taxa de deformação, em que, o ponto em cima de γ indica a derivada em relação ao tempo.

Como no elemento de Maxwell (vide figura 13), a mola e o amortecedor estão em série, segue pelo equilíbrio de forças que

$$\tau = \tau_e = \tau_v, \quad (2.30)$$

$$\gamma = \gamma_e + \gamma_v. \quad (2.31)$$

Assim, pelo sistema anterior, é derivada a equação constitutiva para a viscoelasticidade linear, a qual é escrita como

$$\tau + \lambda \dot{\tau} = \mu_p \dot{\gamma}, \quad (2.32)$$

em que, $\lambda = \mu_p/G$ é o tempo de relaxação da molécula polimérica. A Eq. 2.32 é conhecida como modelo de Maxwell, e representa o modelo mais simples de uma equação constitutiva, para descrever viscoelasticidade linear de um fluido. Entretanto, o modelo constitutivo da Eq. 2.32, não é independente do sistema de coordenadas. Para generalizar esse modelo para escoamentos arbitrários, Oldroyd (1950) propôs formas invariantes de equações reológicas, as quais são conhecidas como derivadas convectivas. Uma dessas formas é a derivada convectiva superior (em inglês *upper-convected derivative*), a qual é definida pelo seguinte operador

$$\overset{\nabla}{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau - \left[(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \tau + \tau \cdot \nabla \mathbf{u} \right]. \quad (2.33)$$

O operador descrito na Eq. 2.33, relaciona a taxa de variação do tensor τ com o gradiente do campo de velocidades. Assim, a equação constitutiva, Eq. 2.32, pode ser escrita nesse contexto como

$$\tau + \lambda \overset{\nabla}{\tau} = \mu_p \dot{\gamma}. \quad (2.34)$$

O modelo definido pela Eq. 2.34, é chamado de modelo *upper-convected Maxwell* (UCM). O UCM é um modelo puramente elástico, isso significa que não tem a presença de solvente na sua solução. Nesse caso, as equações de Navier-Stokes possuem o tensor tensão total definido da seguinte forma:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \tau, \quad (2.35)$$

ou seja, não possui a presença do termo viscoso $\mu_s \dot{\gamma}$. O modelo UCM é muito utilizado em estudos numéricos devido à sua simplicidade, o que possibilita em alguns tipos de escoamento derivar uma solução analítica para verificar a precisão dos métodos numéricos (CRUZ; PINHO, 2015). Entretanto, o modelo apresenta apenas primeira diferença de tensões normais, a qual, numericamente, tende a ser ilimitada em escoamento extensional quando a taxa de deformação tende para um valor crítico de $\frac{1}{2\lambda}$ (ZANDEN; HULSEN, 1988). Além disso, também apresenta instabilidades numéricas em escoamentos extensionais, pois as tensões normais tendem a ser ilimitadas.

Os modelos viscoelásticos adotados para o desenvolvimento do presente projeto são soluções diluídas em solvente. Nessas soluções diluídas, um termo dissipativo é adicionado ao tensor tensão total, Eq. 2.35, o qual é reescrito como

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mu_s \dot{\gamma} + \tau. \quad (2.36)$$

Nesse caso, é definido um parâmetro adimensional, o qual estabelece a quantidade de solvente presente na solução, em outras palavras, o quão viscoelástico é o fluido,

$$\beta = \frac{\mu_s}{\mu}, \quad (2.37)$$

em que, $\mu = \mu_s + \mu_p$ é a viscosidade total. No caso em que $\beta = 0$, o fluido se reduz ao modelo UCM. Por outro lado, se $\beta = 1$, o modelo se reduz a um fluido newtoniano. Quando $0 < \beta < 1$, e a equação constitutiva é dada pelo modelo UCM, o conjunto de equações resultantes é conhecido como modelo Oldroyd-B (BIRD *et al.*, 1987). O modelo Oldroyd-B possui as mesmas características do modelo UCM, das quais podemos mencionar, viscosidade de corte constante, e segunda diferenças de tensões nula.

Em muitos dos experimentos envolvendo escoamentos viscoelásticos, confinados ou com interface, o comportamento do escoamento é muito influenciado pela viscosidade de corte, e pela primeira e segunda diferenças de tensões normais. Sendo assim, os modelos UCM e Oldroyd-B se tornam muito restritivos para estudar o comportamento de escoamentos mais

complexos. Nesse caso, foram implementados vários outros modelos de fluido viscoelásticos, os quais apresentam segunda diferenças de tensões normais. Um dos modelos implementados é o modelo de Giesekus (GIESEKUS, 1982), sendo sua equação constitutiva dada por

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \frac{\alpha \lambda}{\mu_p} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau} = \mu_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (2.38)$$

em que, α é um parâmetro adimensional, chamando de fator de mobilidade. O fator de mobilidade controla a influência da segunda diferenças de tensões normais. Quando $\alpha = 0$, a segunda diferenças de tensões normais é eliminada, e o modelo se reduz ao Oldroyd-B. Além disso, quando $\alpha > 0.5$ o modelo não garante a solução física do problema (SCHLEINIGER; WEINACHT, 1991). Uma análise semelhante a realizada por Schleiniger e Weinacht (1991), foi realizada por Baltussen *et al.* (2010) para determinar o intervalo onde o fator de mobilidade do modelo XPP (*eXtended Pom-Pom*) fornece soluções únicas e fisicamente corretas. O intervalo determinado por Baltussen *et al.* (2010) foi idêntico ao do modelo Giesekus, $0 \leq \alpha \leq 0.5$.

Outro modelo não linear utilizado nesse trabalho é o modelo Phan-Thien/Tanner (PTT) (PHAN-THIEN; TANNER, 1977), sendo sua equação constitutiva definida por

$$Y(tr(\boldsymbol{\tau})) \boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\square}{\boldsymbol{\tau}} = \mu_p \dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (2.39)$$

em que, $\overset{\square}{\boldsymbol{\tau}}$ representa a derivada de Gordon-Schowalter

$$\overset{\square}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - \left[(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] + \frac{\xi}{2} (\boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \dot{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \boldsymbol{\tau}). \quad (2.40)$$

Na Eq. 2.39, $Y = Y(tr(\boldsymbol{\tau}))$ é uma função que depende do traço do tensor $\boldsymbol{\tau}$. Existem duas formas de definir a função Y , as quais determinam a versão do modelo PTT:

- Forma linear (LPTT) (PHAN-THIEN; TANNER, 1977):

$$Y(tr(\boldsymbol{\tau})) = 1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\mu_p} tr(\boldsymbol{\tau}), \quad (2.41)$$

- Forma exponencial (PHAN-THIEN, 1978):

$$Y(tr(\boldsymbol{\tau})) = \exp\left(\frac{\varepsilon \lambda}{\mu_p} tr(\boldsymbol{\tau})\right). \quad (2.42)$$

A principal diferença entre essas duas formas está no comportamento da viscosidade extensional, a qual é definida como sendo a razão entre a primeira diferença de tensões normais e a taxa de extensão. Quando $tr(\boldsymbol{\tau})$ é pequeno, a forma exponencial se aproxima da forma linear. O parâmetro adimensional ε , estabelece um limitante superior para a viscosidade extensional, em escoamentos extensionais quando atingem o estado estacionário. Já o parâmetro ξ , configura

o quão escorregadia é a cadeia de moléculas poliméricas em relação ao meio contínuo. Além disso, ξ controla a influência da segunda diferença de tensões normais no escoamento. Quando $\xi = 0$, a segunda diferenças de tensões normais é nula. Nesse caso, o modelo é conhecido como PTT simplificado (SPTT).

Os modelos PTT e Giesekus, são modelos mais elaborados do que o modelo Oldroyd-B, e preveem uma viscosidade variável, e uma variação não-linear das tensões normais. Assim, as soluções obtidas com esses modelos são mais próximas da solução física de fluidos que apresentam viscosidade variável, como algumas soluções diluídas de polímeros. No entanto, o modelo Oldroyd-B é muito utilizado nesse trabalho, por ser um modelo simples, com apenas dois parâmetros, λ e μ_p , o qual permite analisar o comportamento de alguns escoamentos com maior facilidade, em especial para fluidos que apresentam viscosidade constante, como os fluidos de Borger (BIRD *et al.*, 1987). Em resumo, os modelos Oldroyd-B, Giesekus, e PTT, podem ser reescritos na forma da Eq. 2.3 da seguinte forma:

$$\mathbf{M}(\boldsymbol{\tau}) = \begin{cases} 2\mu_p \mathbf{D} - \boldsymbol{\tau} & \text{Oldroyd-B,} \\ 2\mu_p \mathbf{D} - \boldsymbol{\tau} - \frac{\alpha\lambda}{\mu_p} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau} & \text{Giesekus,} \\ 2\mu_p \mathbf{D} - Y(tr(\boldsymbol{\tau})) \boldsymbol{\tau} - \lambda \xi (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\tau}) & \text{PTT.} \end{cases} \quad (2.43)$$

MÉTODOS NUMÉRICOS

Nesse capítulo serão descritos os métodos numéricos adotados na construção da formulação proposta para simular escoamentos viscoelásticos multifásicos. Como descrito na seção 1.4, os desafios em simular esse tipo de escoamentos são inúmeros: escoamentos envolvendo geometrias e fluidos complexos, escoamentos com baixos números de Reynolds e altos números de Weissenberg, representação e atualização da interface, mudança topológica, tensão superficial, cálculo preciso da curvatura. Assim, propor uma metodologia capaz de capturar com precisão efeitos complexos que ocorrem em vários experimentos, é um grande desafio.

Nesse trabalho a formulação proposta para simular escoamentos viscoelásticos multifásicos é baseada em um esquema de diferenças finitas em uma malha deslocada. A equação da quantidade de movimento é resolvida com um método implícito, combinado com o método da projeção para desacoplar os campos de velocidade e pressão. Métodos de estabilização são utilizados quando necessários para resolver a equação constitutiva do modelo viscoelástico. Uma técnica de reconstrução linear por partes, baseada no método VOF, é utilizada para reconstruir a interface. A atualização da interface e o cálculo da curvatura, são realizados através de métodos geométricos para garantir melhor precisão dos resultados. Todas as técnicas implementadas no código construído ao longo desse projeto, foram testadas exhaustivamente para garantir a precisão de cada passo. Na seção 4 são apresentados alguns dos testes realizados.

3.1 Métodos numéricos para escoamentos viscoelásticos

Escoamentos viscoelásticos exibem comportamentos fascinantes, não só quando envolvem escoamentos multifásicos (vide seção 1.3), mas também em escoamentos confinados. Nesse caso, comportamentos complexos surgem através de efeitos reológicos, introduzidos por fluidos não-newtonianos e viscoelásticos. A maioria dos efeitos observados são instabilidades físicas, que ocorrem em escoamentos sujeitos a altas taxas de deformação extensional. Esses problemas são observados em muitas aplicações industriais importantes, e processos naturais, como na

extração de petróleo, redução de arrasto, impressão de jatos de tintas, e na circulação do sangue.

Esses escoamentos têm atraído a atenção de muitos pesquisadores, principalmente escoamento em microcanais, como pode ser observado em [Dubash et al. \(2012\)](#), [Haward et al. \(2012\)](#), [Galindo-Rosales et al. \(2014\)](#), [Sousa et al. \(2015\)](#). Os trabalhos mencionados anteriormente são todos estudos experimentais, em que, os problemas investigados são micro escoamentos em mecanismos de contração/expansão, e bifurcação (em inglês *cross-slot*). Esses experimentos atraem muita atenção em reologia devido à singularidades em suas geometrias, onde as macromoléculas são submetidas a altas tensões elongacionais, sendo possível obter informações sobre a viscosidade elongacional. O estudo numérico desses experimentos representam um grande desafio, especialmente quando envolvem altas taxas de elasticidade. Altas taxas de elasticidade causam perda de convergência nos métodos numéricos, esse problema é conhecido como *High Weissenberg Number Problem* (HWNP), do inglês, problema do alto número de Weissenberg. Recentemente, [Fattal e Kupferman \(2004\)](#) propuseram uma reformulação das equações constitutivas em função do logaritmo do tensor conformação, permitindo o estudo numérico de problemas envolvendo HWNP. Na seção 3.1.3 é discutido o HWNP, bem como as formulações numéricas para contornar esse problema. No caso dos problemas da contração/expansão e *cross-slot*, [Afonso et al. \(2011\)](#), [Cruz et al. \(2014\)](#), [Junior et al. \(2016\)](#) apresentaram resultados numéricos utilizando a formulação proposta por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#), e variações dessa formulação envolvendo fluidos complexos.

Nas próximas subseções, será apresentada a formulação adotada para simular viscoelásticos com altas taxas de elasticidade.

3.1.1 Método da projeção

Considere a discretização temporal das equações 2.1-2.2, utilizando um esquema explícito:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (3.1)$$

$$\rho \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n \right) = \nabla \cdot \left[-p^{n+1} \mathbf{I} + \mu_s \left(\nabla \mathbf{u}^n + (\nabla \mathbf{u}^n)^T \right) + \boldsymbol{\tau}^n \right] + \mathbf{F}^n, \quad (3.2)$$

em que, $\mathbf{F}$ representa as forças de campo, como a aceleração da gravidade e a tensão superficial. Devido à restrição de incompressibilidade, a solução numérica do sistema de equações 3.1-3.2, acopla os campos de velocidade e pressão. Tal fato ocorre porque a pressão em escoamentos incompressíveis tem como objetivo garantir que a equação da continuidade seja satisfeita em cada passo de tempo. Para contornar esse problema o método da projeção é adotado ([CHORIN, 1967](#); [CHORIN, 1968](#)). O método da projeção é um método de passo fracionado no tempo, muito eficiente para resolver escoamentos incompressíveis. Esse método desacopla os campos de

velocidade e pressão, resolvendo a Eq. 3.2 com uma pressão artificial, geralmente considerada como sendo p^n , obtendo um campo de velocidades intermediário $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$

$$\rho \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n \right) = \nabla \cdot \left[-p^n \mathbf{I} + \mu_s \left(\nabla \mathbf{u}^n + (\nabla \mathbf{u}^n)^T \right) + \boldsymbol{\tau}^n \right] + \mathbf{F}^n, \quad (3.3)$$

Essa estratégia desacopla os campos de velocidade e pressão, mas em muitos casos esse campo de velocidades não é solenoidal ($\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \neq 0$). Assim, é necessário corrigir o valor da pressão e obter um campo de velocidades atualizado que satisfaça a Eq. 3.1. Isso é feito utilizando o teorema da decomposição de Helmholtz-Hodge (CHORIN; MARSDEN, 1993), o qual projeta o campo de velocidades intermediário em um espaço vetorial onde a Eq. 3.1 é satisfeita. Isso é feito subtraindo a Eq. 3.3 da Eq. 3.2, onde obtemos

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla (p^{n+1} - p^n). \quad (3.4)$$

Por simplicidade, considere $\psi^{n+1} = \Delta t (p^{n+1} - p^n)$. Logo a Eq. 3.4 é reescrita como

$$\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = -\frac{1}{\rho} \nabla \psi^{n+1}. \quad (3.5)$$

Pela equação Eq. 3.5 é obtido o novo campo de velocidades que satisfaz a Eq. 3.1, desde que $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ e ψ^{n+1} sejam conhecidos. O termo $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ é calculado através da Eq.(3.3). Para obter a equação para o cálculo de ψ^{n+1} , aplica-se o divergente na Eq. 3.5 e, em seguida, impõe-se a equação da continuidade Eq. 3.1, obtendo assim a equação de Poisson

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \psi^{n+1} \right) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}. \quad (3.6)$$

A solução da Eq. 3.6 fornece a correção para a pressão. A equação para atualizar a pressão é obtida substituindo a Eq. 3.5 na Eq. 3.3, e subtraindo a Eq. 3.2

$$\nabla \left(\frac{\psi^{n+1}}{\Delta t} + p^n - p^{n+1} \right) = 0. \quad (3.7)$$

Se a derivada é zero, o que está sendo derivado é constante, então segue que

$$\frac{\psi^{n+1}}{\Delta t} + p^n - p^{n+1} = p_0, \quad (3.8)$$

em que, p_0 é uma constante. É possível assumir $p_0 = 0$, pois a pressão só está definida a menos de uma constante. Assim, segue que equação para atualização da pressão é dada por

$$p^{n+1} = p^n + \frac{\psi^{n+1}}{\Delta t}. \quad (3.9)$$

Após esses passos, o tensor polimérico e a interface são atualizados utilizando o novo campo de velocidades. O tensor polimérico é atualizado via método explícito sem grandes dificuldades. No caso do HWNP, o tensor polimérico é atualizado com o auxílio de métodos de estabilização. Uma descrição sobre os métodos de estabilização é realizada na subseção 3.1.3. Quanto à interface, a equação de advecção é atualizada via métodos geométricos para garantir uma boa precisão (vide subseção 3.2.2).

Todas as equações são discretizadas em uma malha deslocada do tipo MAC (HARLOW; WELCH, 1965). A malha deslocada permite obter aproximações espaciais por diferenças finitas com segunda ordem de precisão, o que fornece boas propriedades numéricas na discretização da equação de Poisson. Na seção A.2, é discutido sobre as vantagens da malha do tipo MAC, e as modificações que ocorrem na mudança do sistema de coordenadas cartesianas para coordenadas cilíndricas.

3.1.2 Formulação semi-implícita

As equações que modelam os escoamentos viscoelásticos são as equações de Navier-Stokes acopladas com a equação hiperbólica constitutiva que define o modelo do fluido. A aproximação da solução através de métodos explícitos, estabelece restrições para definição do passo temporal, as quais são impostas para os termos convectivo e difusivo. Essas restrições são obtidas através da análise de Von Neumann (LEVEQUE, 2007). Considerando sem perda de generalidade, um sistema cartesiano bidimensional, as restrições impostas para os termos convectivo e difusivo, são respectivamente,

$$\Delta t_c \leq \min \left(\frac{\Delta x}{\|u\|_{\max}}, \frac{\Delta y}{\|v\|_{\max}} \right), \quad (3.10)$$

$$\Delta t_d \leq \frac{\rho}{2\mu} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1}. \quad (3.11)$$

No caso de escoamentos multifásicos, a equação de advecção da interface é adicionada ao sistema. Se a força da tensão superficial age no sistema, outra restrição de estabilidade temporal precisa ser imposta, a qual depende do coeficiente da tensão superficial.

O critério de estabilidade imposto ao termo difusivo é conhecido como restrição de estabilidade parabólica, o qual é função do número de Reynolds na forma adimensional. Escoamentos envolvendo fluidos viscoelásticos, geralmente transcorrem a baixos números de Reynolds ($Re < 1$), o que torna a restrição de estabilidade parabólica muito rigorosa para definição do passo temporal. Dependendo do problema, o estudo numérico via métodos explícitos para resolver a equação da quantidade de movimento torna-se inviável, devido ao alto custo computacional. Além disso, em regiões com altos gradientes ou com a presença de interface, é necessário utilizar um refinamento na malha para obter bons resultados. Nesses casos, a restrição de estabilidade

parabólica torna-se ainda mais rigorosa, pois apresenta ordem $\mathcal{O}(\Delta x^2)$, enquanto a restrição de estabilidade do termo convectivo é de ordem $\mathcal{O}(\Delta x)$.

O uso de formulações implícitas para resolver a Eq. 3.3, visa estabelecer uma restrição de estabilidade temporal menos rigorosa, na ordem de $\mathcal{O}(\Delta x)$. Assim, é imprescindível o uso de métodos implícitos para resolver o termo difusivo da Eq. 3.3, envolvendo escoamentos viscoelásticos complexos com baixos números de Re . Modificações na discretização temporal da Eq. 3.3 tratam os termos difusivos com esquemas implícitos, e os termos convectivos da equação da quantidade de movimento com esquemas explícitos. No caso de escoamentos multifásicos, os termos cruzados na parte difusiva não são simplificados. Nesse caso, esses termos cruzados são tratados explicitamente. Essa estratégia desacopla o cálculo das velocidades nas respectivas direções. Segundo [Li et al. \(1998\)](#), essa estratégia é incondicionalmente estável. Essas modificações são denominadas de esquema semi-implícito e foram utilizadas em muitos trabalhos envolvendo escoamentos viscoelásticos com a presença de interface, como pode ser visto em [Khismatullin et al. \(2006\)](#), [Stewart et al. \(2007\)](#), [Oishi et al. \(2012\)](#), [Figueiredo et al. \(2013\)](#), [Paulo et al. \(2014\)](#), [Cuminato et al. \(2014\)](#).

Assim, seguindo a estratégia de solução utilizada nos trabalhos citados anteriormente, será apresentada a seguir a estratégia de solução adotada no presente projeto, para o estudo de escoamentos incompressíveis, viscoelásticos e multifásicos. Considere a aproximação discreta no tempo para a Eq. 2.2, dada por

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n \right) = -\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n + \mathbf{F}^n \\ + (1 - \Theta) \nabla \cdot \left[\mu_s \left(\nabla \mathbf{u}^n + (\nabla \mathbf{u}^n)^T \right) \right] + \Theta \nabla \cdot \left[\mu_s \left(\nabla \mathbf{u}^{n+1} + (\nabla \mathbf{u}^{n+1})^T \right) \right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

sendo que, $\Theta = 0.5$ representa o método de Crank-Nicolson e $\Theta = 1$ representa o método de Euler implícito. Se $\Theta = 0$ o caso se reduz ao método de Euler explícito. Aplicando o método da projeção para desacoplar os campos de velocidade e pressão, obtemos a seguinte aproximação

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n \right) = -\nabla p^n + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n + \mathbf{F}^n \\ + (1 - \Theta) \nabla \cdot \left[\mu_s \left(\nabla \mathbf{u}^n + (\nabla \mathbf{u}^n)^T \right) \right] + \Theta \nabla \cdot \left[\mu_s \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}}^{n+1})^T \right) \right], \end{aligned} \quad (3.13)$$

em que, a parte implícita do termo difusivo é tratado da seguinte forma para desacoplar a solução dos campos de velocidade

$$\nabla \cdot \left[\mu_s \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}}^{n+1})^T \right) \right] = \begin{bmatrix} \nabla \cdot \mu_s \nabla \tilde{u}^{n+1}_x + (\mu_s \tilde{u}^{n+1}_x)_x + (\mu_s v^n_x)_y + (\mu_s w^n_x)_z \\ \nabla \cdot \mu_s \nabla \tilde{v}^{n+1}_y + (\mu_s u^n_y)_x + (\mu_s \tilde{v}^{n+1}_y)_y + (\mu_s w^n_y)_z \\ \nabla \cdot \mu_s \nabla \tilde{w}^{n+1}_z + (\mu_s u^n_z)_x + (\mu_s v^n_z)_y + (\mu_s \tilde{w}^{n+1}_z)_z \end{bmatrix}, \quad (3.14)$$

em que, $(\cdot)_x$, $(\cdot)_y$ e $(\cdot)_z$ representam as derivadas em relação a x , y e z , respectivamente.

A formulação semi-implícita segue os mesmo passos da formulação explícita apresentada na subseção anterior, assim, as equações para atualização do campo de velocidades e o cálculo da correção da pressão, Eqs. 3.5 e 3.6, são as mesmas. A obtenção da equação para correção da pressão também segue os mesmos passos, em que, a seguinte expressão é obtida

$$\frac{\nabla \psi^{n+1}}{\Delta t} = \nabla (p^{n+1} - p^n) - \Theta \nabla \cdot \left[\mu_s \left(\nabla \left(-\frac{1}{\rho} \nabla \psi^{n+1} \right) + \left(\nabla \left(-\frac{1}{\rho} \nabla \psi^{n+1} \right) \right)^T \right) \right]. \quad (3.15)$$

Assumindo que todas as fases dos fluidos possuem mesma densidade e viscosidade, a equação para atualização da pressão é dada por

$$p^{n+1} = p^n + \frac{\psi^{n+1}}{\Delta t} - 2\Theta \frac{\mu_s}{\rho} \nabla^2 \psi^{n+1}. \quad (3.16)$$

No caso em que a densidade e viscosidade não são constantes, a solução da Eq. 3.15 se torna complexa. Assim, para contornar esse problema, o ultimo termo do lado direito da Eq. 3.15 é ignorado, e a equação para atualização da pressão ser reduz a Eq. 3.9. Essa estratégia introduz um erro na ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)$ na pressão. Segundo Brown *et al.* (2001), no mínimo primeira ordem é garantida para a pressão.

No caso de escoamentos multifásicos, as condições de contorno na interface não são aplicadas diretamente, Eqs. 2.21 e 2.22, mas substituída por uma formulação de força por volume (LI *et al.*, 1998). No caso de escoamentos com superfície livre, as condições na interface precisam ser tratadas diretamente, pois fornecem informações físicas para o escoamento nessa região, uma vez que a fase externa é desprezada. Nesse caso, as condições Eqs. 2.21 e 2.22, também precisam ser calculadas implicitamente para não prejudicar o cálculo do passo temporal da formulação semi-implícita. A estratégia para realizar o tratamento implícito das condições da superfície livre, foi proposta por Oishi *et al.* (2008). A ideia principal dessa formulação é aplicar o método da projeção na condição Eq. 2.21, e substituir a atualização da pressão para métodos implícitos, resultando em uma condição de contorno implícita para a correção da pressão, a qual é aplicada na equação de Poisson, Eq. 3.6. Além disso, a condição Eq. 2.22 é resolvida em conjunto com a Eq. 3.1 para obter o campo de velocidades na vizinhança da superfície livre. Essa formulação é muito robusta, e muitos resultados envolvendo escoamentos viscoelásticos com superfície livre foram apresentados na literatura, como pode ser visto em Oishi *et al.* (2012), Figueiredo *et al.* (2013), Paulo *et al.* (2014), Figueiredo *et al.* (2014). Todos os resultados apresentados foram obtidos com o método SMAC envolvendo fluidos complexos e problemas industriais importantes, como o impacto da gota, o inchamento do extrudado e o jato oscilante. Mais detalhes sobre o tratamento implícito da pressão na superfície livre podem ser encontrados em Cuminato *et al.* (2014), onde os autores descreveram as principais melhorias introduzidas no método SMAC.

3.1.3 Métodos de estabilização

Após resolver o método da projeção um novo campo de velocidades é obtido, o qual é utilizado para resolver a equação constitutiva do fluido. Sem grandes desafios, a equação constitutiva, Eq. 2.3, é resolvida via método explícito da seguinte forma:

$$\frac{\boldsymbol{\tau}^{n+1} - \boldsymbol{\tau}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau}^n + \left[(\nabla \mathbf{u}^{n+1})^T \cdot \boldsymbol{\tau}^n + \boldsymbol{\tau}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} \right] + \frac{1}{\lambda} \mathbf{M}(\boldsymbol{\tau}^n). \quad (3.17)$$

Uma forma alternativa de resolver a Eq. 3.17, pode ser realizada através da introdução do tensor conformação, dado por $\mathbf{A} = \frac{\lambda}{\mu_p} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{I}$. Segundo [Hulsen \(1988\)](#), o tensor conformação é simétrico definido positivo, e sob certas hipóteses, torna o sistema de equações um problema bem posto quando $\mu_s = 0$, dentre outras propriedades. Reescrevendo a Eq. 3.17, em termos do tensor conformação, a seguinte equação é obtida:

$$\frac{\mathbf{A}^{n+1} - \mathbf{A}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{A}^n + \left[(\nabla \mathbf{u}^{n+1})^T \cdot \mathbf{A}^n + \mathbf{A}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} \right] + \frac{1}{\lambda} \mathcal{M}(\mathbf{A}^n), \quad (3.18)$$

em que, $\mathcal{M}(\mathbf{A})$ é definido de acordo com o modelo do fluido viscoelástico adotado

$$\mathcal{M}(\mathbf{A}) = \begin{cases} \mathbf{I} - \mathbf{A} & \text{Oldroyd-B,} \\ \mathbf{I} - \mathbf{A} - \alpha (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \cdot (\mathbf{A} - \mathbf{I}) & \text{Giesekus,} \\ Y \left(\text{tr} \left(\frac{\mu_p}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \right) \right) (\mathbf{I} - \mathbf{A}) + 2\lambda \xi \mathbf{D} - \lambda \xi (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{A}) & \text{PTT.} \end{cases} \quad (3.19)$$

No contexto de escoamentos viscoelásticos com altas taxas de elasticidade, altas tensões normais podem gerar instabilidades elásticas, ao passo que, quando essas instabilidades se tornam mais intensas, ocasiona a turbulência elástica. Geralmente, essas instabilidades ocorrem em escoamentos com grandes deformações, próximas a pontos de estagnação ou singularidades na geometria, mesmo para baixos números de Reynolds. Em [McKinley *et al.* \(1996\)](#), os autores apresentaram um critério adimensional utilizado para caracterizar condições críticas necessárias para o início das instabilidades, para alguns tipos de geometrias. Computacionalmente, as altas tensões elásticas levam a perda de convergência dos métodos numéricos, devido à uma interpolação polinomial inadequada utilizada para aproximar um perfil exponencial. Essa perda de convergência numérica é conhecida como o problema do alto número de Weissenberg (HWNP). O problema é quantificado pelo número de Weissenberg, $Wi = \lambda/t_c$, em que, t_c é o tempo característico do escoamento. Em muitos problemas, o HWNP ocorre para valores de $Wi \sim 1$, como observado para o modelo Oldroyd-B no problema da cavidade com tampa deslizante ([FATTAL; KUPFERMAN, 2005](#)), e no problema do escoamento ao redor de um cilindro ([ALVES *et al.*, 2001](#)).

Durante um longo período, o HWNP limitou tremendamente a investigação numérica de muitos problemas. Com a ideia de superar tal falha, [Fattal e Kupferman \(2004\)](#) e [Fattal e Kupferman \(2005\)](#) propuseram uma reformulação das equações diferenciais constitutivas em termos do logaritmo da matriz do tensor conformação (LCR). O LCR foi desenvolvido para tratar singularidades exponenciais do tensor polimérico, em que, a aproximação do termo convectivo não consegue balancear. Devido às boas propriedades do tensor conformação, simétrico definido positivo, o tensor $\mathbf{A}$ pode ser decomposto como $\mathbf{A} = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^T$, sendo $\mathbf{\Lambda}$ a matriz diagonal cujos elementos são os autovalores de $\mathbf{A}$, e $\mathbf{O}$ é uma matriz ortogonal formada pelos autovetores de $\mathbf{A}$. Através dessa decomposição, é possível aplicar a seguinte transformação

$$\Psi = \log \mathbf{A} = \mathbf{O} \log \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^T. \quad (3.20)$$

O objetivo do LCR é derivar uma equação constitutiva em termos da transformação Eq. 3.20. Para isso, a formulação apresentada por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#), decompõe o gradiente do campo de velocidades em

$$\nabla \mathbf{u}^T = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N} \mathbf{A}^{-1}, \quad (3.21)$$

em que, $\mathbf{\Omega}$ e $\mathbf{N}$ são anti-simétricos (rotação pura) e $\mathbf{B}$ é simétrico e comuta com $\mathbf{A}$. Após substituir a decomposição do gradiente do campo de velocidades, Eq. 3.21, na equação do tensor conformação, Eq. 3.18, e realizar algumas transformações, a equação de evolução do LCR é obtida:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Psi - (\mathbf{\Omega} \Psi - \Psi \mathbf{\Omega}) - 2\mathbf{B} = \frac{1}{\lambda} M(\Psi). \quad (3.22)$$

Essa estratégia contorna o problema da perda de convergência causada pelos altos números de Wi . O sucesso do LCR é atribuído à transformação de crescimento multiplicativo em crescimento aditivo. Uma análise de estabilidade detalhada sobre o problema pode ser encontrada em [Fattal e Kupferman \(2005\)](#). O LCR foi verificado em diferentes geometrias com diferentes modelos de fluido, como no clássico problema da cavidade ([FATTAL; KUPFERMAN, 2004](#)), no escoamento ao redor de um cilindro ([HULSEN et al., 2005](#)), e em uma contração ([AFONSO et al., 2011](#)).

Recentemente, [Afonso et al. \(2012\)](#) propuseram uma formulação genérica da apresentada por [Fattal e Kupferman \(2004\)](#), a formulação *kernel-conformation* (KCR), em que é permitido aplicar diferentes funções ($\mathbb{k}(\cdot)$) na matriz do tensor conformação, $\mathbb{k}(\mathbf{A}) = \mathbf{O} \mathbb{k}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{O}^T$. Um estudo comparativo entre duas funções de transformação, função logarítmica e raiz quadrada, foi realizado por [Martins et al. \(2015\)](#), em que, além de problemas confinados, os autores também apresentaram resultados para o problema do inchamento do extrudado. Mais detalhes sobre a formulação KCR podem ser encontrados em [Afonso et al. \(2012\)](#), [Martins et al. \(2015\)](#).

O uso dos métodos de estabilização é imprescindível para o estudo numérico de problemas envolvendo altas taxas de elasticidade, pois em muitas das geometrias utilizadas na literatura o HWNP é encontrado, por exemplo: problema da cavidade, *cross-slot*, contração/expansão, escoamento ao redor de um cilindro (JUNIOR *et al.*, 2016). Além dos problemas confinados, o uso de métodos de estabilização também é necessário em problema multifásicos (IZBASSAROV; MURADOGLU, 2016), ou com superfície livre (TOMÉ *et al.*, 2012), devido à singularidades no escoamento.

A formulação dos métodos de estabilização em nada altera a estratégia de solução do método da projeção, pois na equação de conservação da quantidade de movimento o tensor polimérico (τ) é inserido na forma de um termo fonte, o qual é obtido através da transformação inversa da função adotada, após a solução da equação constitutiva reformulada (Eq. 3.22 no caso do LCR).

Apesar dos métodos de estabilização demonstrarem grande sucesso em resolver o HWNP, como comprovado em todos os trabalhos mencionados nesta seção, ainda não se sabe qual o limite para o número de Wi em que as transformações realizadas conseguem garantir a precisão da solução (FATTAL; KUPFERMAN, 2005).

3.2 Método VOF

O estudo numérico de escoamentos viscoelásticos confinados, por si só representa um grande desafio. No caso do escoamento envolver mais de um tipo de fluido, a complexidade aumenta ainda mais, pois é preciso representar e advectar a interface com precisão, para capturar o comportamento físico do problema. Existem diversos métodos para representar a interface, como visto na seção 1.2. Todos os métodos têm vantagens e desvantagens, sendo que o melhor método depende do problema a ser investigado. No contexto dos problemas de interesse do presente projeto, o método adotado para representar a interface foi o volume de fluido (VOF) (HIRT; NICHOLS, 1981). Esse método é muito utilizado para representar a interface em escoamentos bifásicos, devido ao conceito simples, a excelente precisão na conservação da massa, a mudança topológica automática, e a advecção precisa por métodos geométricos. Todas essas características fazem com que o VOF seja utilizado em grandes códigos abertos e comerciais, como o *Gerris flow* (POPINET, 2009), o OpenFOAM (WELLER *et al.*, 1998), o *Ansys*, e o *CD-adapco*. As mesmas características nos motivaram a adotar o método VOF para representar a interface no presente projeto.

A ideia do VOF para representar a interface é muito simples, a única informação necessária em cada passo de tempo é a quantidade de fluido em cada célula computacional (vide Fig. 14a). Considere sem perda de generalidade, o caso em duas dimensões em coordenadas cartesianas. Assim, é definida em cada célula da malha computacional, uma função $f \in [0, 1]$,

chamada de fração de volume, tal que

$$f_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{se a célula } (i,j) \text{ estiver cheia de fluido claro} \\ 1, & \text{se a célula } (i,j) \text{ estiver cheia de fluido escuro} \\ (0,1), & \text{se a célula } (i,j) \text{ contém ambos os fluidos} \end{cases}, \quad (3.23)$$

onde, o volume de fluido em cada célula é dado por

$$\begin{aligned} \text{volume do fluido claro na célula}(i,j) &= (1 - f_{i,j}) \Delta x \Delta y, \\ \text{volume do fluido escuro na célula}(i,j) &= f_{i,j} \Delta x \Delta y, \end{aligned} \quad (3.24)$$

em que, Δx e Δy é o espaçamento da malha nas direções x e y , respectivamente.

Figura 14 – Método VOF: (a) fração de volume $f_{i,j}$ associada à interface real; (b) representação da estratégia PLIC utilizada para construir a interface.

A atualização da interface no método VOF é realizada resolvendo uma equação de advecção para f , em que, para fluidos incompressíveis é dada pela Eq. 2.4. Por simplicidade, a Eq. 2.4 é reescrita a seguir

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) = 0. \quad (3.25)$$

A Eq.(3.25) significa que a conservação da massa é equivalente à conservação do volume em escoamentos incompressíveis. Métodos geométricos garantem maior precisão na solução da Eq. 3.25. No entanto, é necessário reconstruir a interface a cada passo de tempo, para obter informações geométricas da fronteira, tais como a normal e a distância do centro da célula à interface(vide figura 14b). A seguir será descrita a técnica adotada nesse projeto para reconstruir a interface.

3.2.1 Método de reconstrução ELVIRA

No método VOF a única informação disponível para construir a interface é a fração de volume em cada célula do domínio. O sucesso da advecção geométrica está diretamente ligado ao método de reconstrução da interface, sendo que boas aproximações para a normal à interface, resultam em uma advecção precisa. Na literatura existem vários esquemas para construir a interface a partir de f , os quais aproximam a interface por curvas lineares e quadráticas (RENARDY; RENARDY, 2002; PILLIOD; PUCKETT, 2004; XIAO *et al.*, 2005; II *et al.*, 2012). As aproximações por curvas quadráticas reconstroem a interface com bastante precisão, além de dar uma estimativa precisa para a curvatura. Em Renardy e Renardy (2002), os autores propuseram um método de reconstrução parabólica da interface para aprimorar o cálculo da força de tensão superficial. O método recebeu o nome de *parabolic reconstruction of surface tension* (PROST). Os resultados apresentados por Renardy e Renardy (2002), demonstraram convergência espacial no cálculo da força da tensão superficial, e redução significativa das correntes espúrias. O método PROST foi estendido para o caso 3D por Khismatullin *et al.* (2006), em que o problema da deformação da gota em uma matriz viscoelástica foi investigado. O PROST é um método muito preciso para aproximar a interface e as forças interfaciais, no entanto, exige um grande volume de cálculos e buscas no domínio computacional, tornando-o computacionalmente caro.

Devido à complexidade e ao alto custo computacional, associado aos métodos de reconstrução por curvas quadráticas, o método de reconstrução linear por partes (PLIC) (tradução direta do inglês, *piecewise linear interface calculation*), é um dos mais utilizados na literatura. Esse método foi introduzido por Youngs (1982), sendo a interface representada por segmentos de retas, em cada célula do domínio computacional, geralmente descontínuas. A figura 14b ilustra a reconstrução da interface pelo método PLIC.

Existem diversas técnicas para aproximar a normal no método PLIC, das quais podemos mencionar a *center of mass algorithm* (PUCKETT; SALTZMAN, 1992), *central difference algorithm*, *Parker and Youngs' method* (PARKER; YOUNGS, 1992), *Least squares volume-of-fluid interface reconstruction algorithm* (LVIRA), e *Efficient least squares VOF interface reconstruction algorithm* (ELVIRA) (PILLIOD; PUCKETT, 2004). Uma descrição detalhada e comparação entre esses métodos foi apresentada por Pilliod e Puckett (2004). De acordo com Pilliod e Puckett (2004), uma condição suficiente para uma técnica do tipo PLIC alcançar segunda ordem de precisão, na reconstrução de interfaces suaves, é o algoritmo aproximar a normal exata. Essa afirmação foi demonstrada numericamente por Pilliod e Puckett (2004), entretanto, segundo Puckett (2010), ainda é um problema em aberto provar se a aproximação exata da normal, é uma condição suficiente para os algoritmos serem de segunda ordem.

No método LVIRA, a normal a interface é obtida minimizando o erro entre várias candidatas a inclinação da reta, em um bloco 3×3 no caso bidimensional. Já o método ELVIRA, reduz essa busca para apenas seis candidatas, diminuindo o custo computacional. Uma boa

comparação numérica entre os dois métodos foi apresentada por [Kedely \(2015\)](#), em que, ambos os métodos apresentaram bons resultados quanto à reconstrução, no entanto, o método LVIRA gastou pelo menos o dobro do tempo do método ELVIRA. No caso tridimensional o método ELVIRA foi proposto por [Miller e Colella \(2002\)](#). Nesse caso, os candidatos ao vetor normal são calculados em um bloco de células $5 \times 5 \times 5$, sendo que um grande número de aproximações é obtido. Devido ao grande número de aproximações e ao tamanho do stencil, o método torna-se muito caro computacionalmente. Qualquer método em três dimensões se torna muito complexo, no entanto, no contexto do método VOF, o método proposto por [Aulisa *et al.* \(2007\)](#) é uma boa alternativa.

Como todos os experimentos de interesse do presente projeto são em duas dimensões ou apresentam axissimetria, o método ELVIRA foi escolhido para representar a interface. Além de representar a interface com precisão, e apresentar segunda ordem para reconstruir interfaces suaves, outras características do método influenciaram na escolha, como eficiência computacional, implementação relativamente simples, e altamente paralelizável.

A ideia do esquema ELVIRA é aproximar seis candidatas à inclinação do vetor normal, calculadas por diferenças regressiva, central e progressiva, pela soma das linhas e colunas de um bloco 3×3 células, centrado na célula (i, j) , da seguinte forma

$$\begin{aligned}\tilde{m}_r^x &= \frac{\Delta y}{\Delta x} \sum_{l=-1}^1 (f_{i,j+l} - f_{i-1,j+l}), \\ \tilde{m}_c^x &= \frac{\Delta y}{2\Delta x} \sum_{l=-1}^1 (f_{i+1,j+l} - f_{i-1,j+l}), \\ \tilde{m}_p^x &= \frac{\Delta y}{\Delta x} \sum_{l=-1}^1 (f_{i+1,j+l} - f_{i,j+l}),\end{aligned}\tag{3.26}$$

$$\begin{aligned}\tilde{m}_r^y &= \frac{\Delta x}{\Delta y} \sum_{l=-1}^1 (f_{i+l,j} - f_{i+l,j-1}), \\ \tilde{m}_c^y &= \frac{\Delta x}{2\Delta y} \sum_{l=-1}^1 (f_{i+l,j+1} - f_{i+l,j-1}), \\ \tilde{m}_p^y &= \frac{\Delta x}{\Delta y} \sum_{l=-1}^1 (f_{i+l,j+1} - f_{i+l,j}).\end{aligned}\tag{3.27}$$

A figura 15 ilustra a interpretação geométrica dessas seis candidatas à inclinação da reta para reconstruir a interface. A soma das linhas ou colunas, é chamada de função altura. As candidatas à inclinação da reta são calculadas por diferenças finitas em relação à função altura nas duas direções dos eixos coordenados, isso evita problemas causados em regiões onde a interface é definida por retas verticais ou horizontais.

A candidata à inclinação do vetor normal que minimizar o erro é escolhida como a

Figura 15 – Cálculo das seis candidatas a inclinação da reta, por diferenças regressiva, central, e progressiva.

melhor aproximação

$$\tilde{m}_{i,j} = \operatorname{argmin} \{ E_{i,j}(\tilde{m}_r^x), E_{i,j}(\tilde{m}_c^x), E_{i,j}(\tilde{m}_p^x), E_{i,j}(\tilde{m}_r^y), E_{i,j}(\tilde{m}_c^y), E_{i,j}(\tilde{m}_p^y) \}. \quad (3.28)$$

O erro é calculado através da norma $L-2$, no bloco 3×3 centrado na célula (i, j) , da seguinte forma

$$E_{i,j}(\tilde{m}) = \left[\sum_{k,l=-1}^1 (f_{i+k,j+l} - \tilde{f}_{i+k,j+l})^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.29)$$

em que, $\tilde{f}$ é uma aproximação linear de f no bloco 3×3 , com inclinação $\tilde{m}$, tal que $\tilde{f}_{i,j} = f_{i,j}$. A figura 16 ilustra como é definida a fração de volume $\tilde{f}$ através de uma reta com inclinação $\tilde{m}$.

A ideia do método ELVIRA é simples e fornece uma estimativa precisa para a normal à interface. No entanto, a implementação do método é um pouco complexa, devido a vários cálculos envolvendo informações geométricas. Numericamente, $\tilde{f}$ é calculada em cada célula de um bloco 3×3 através de informações geométricas da reta com inclinação $\tilde{m}$, e informações geométricas das células. O primeiro passo, após estimar as seis candidatas a inclinação da reta para reconstruir a interface, é determinar a equação geral da reta para cada inclinação $\tilde{m}_s$, com $s = 1, \dots, 6$, sujeita à restrição $\tilde{f}_{i,j} = f_{i,j}$,

$$n_x x + n_y y = d, \quad (3.30)$$

em que, $(n_x, n_y) = \mathbf{n}$ são as componentes do vetor normal unitário, x e y é a posição de qualquer ponto sobre a reta, e d é a distância entre o centro da célula (i, j) e a reta. As componentes do vetor normal são calculadas a partir das estimativas do coeficiente angular da reta, da seguinte

Figura 16 – Ilustração da definição da fração de volume $\tilde{f}$, obtida através de uma candidata a inclinação $\tilde{m}$. A fração de volume f é representada pela região cinza. A região hachurada define a fração de volume $\tilde{f}$, a qual é definida pela região abaixo da reta cuja inclinação é $\tilde{m}$. A região definida pela cor laranja é a diferença entre f e $\tilde{f}$, a qual é utilizada no cálculo do erro.

forma

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + \tilde{m}^2}} \begin{bmatrix} -\tilde{m} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \text{para todo } \tilde{m} \text{ calculado pela Eq. 3.26} \quad (3.31)$$

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + \tilde{m}^2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\tilde{m} \end{bmatrix}, \quad \text{para todo } \tilde{m} \text{ calculado pela Eq. 3.27.} \quad (3.32)$$

As aproximações para o vetor normal, obtidas pelas expressões anteriores, são unitárias e apontam para a fase externa do fluido escuro (região demarcada por $f = 1$). Resta agora determinar a distância d , de modo que satisfaça $\tilde{f}_{i,j} = f_{i,j}$, para obtermos a equação geral da reta, Eq. 3.30. O cálculo da distância d pode ser simplificado quando a malha é retangular, o que é o caso do presente trabalho, considerando o valor absoluto das componentes do vetor normal, pois existe simetria em relação aos eixos coordenados. Assim, todos os casos se reduzem a uma situação, a qual é ilustrada na figura 17, a menos dos casos em que a normal é paralela a um dos eixos coordenados. Nesse caso, a área do polígono ABFGD, representado na figura 17, é calculada pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} A_{\text{ABFGD}} &= A_{\text{AEH}} - A_{\text{BEF}} - A_{\text{DGH}} \\ &= \frac{\bar{d}^2}{2|n_x||n_y|} \left[1 - R(\bar{d} - |n_x|\Delta x) \left(\frac{\bar{d} - |n_x|\Delta x}{\bar{d}} \right)^2 - R(\bar{d} - |n_y|\Delta y) \left(\frac{\bar{d} - |n_y|\Delta y}{\bar{d}} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.33)$$

em que,

$$R(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq 0 \\ 1, & \text{se } x > 0 \end{cases}. \quad (3.34)$$

Figura 17 – Área definida pela intersecção entre a célula (i, j) , retângulo ABCD, e o triângulo AEH.

Na Eq. 3.33, o parâmetro $\bar{d}$ representa a distância entre a reta e a origem da célula. Assim, os parâmetros d e $\bar{d}$ diferem apenas por uma translação, pois d é a distância do centro da célula à reta. Os termos, segundo e terceiro, dentro dos colchetes na Eq. 3.33, representam a razão entre as áreas dos triângulos A_{BEF} e A_{DGH} pela área do triângulo A_{AEH} , respectivamente. As razões das áreas dos triângulos, A_{BEF}/A_{AEH} e A_{DGH}/A_{AEH} , são calculadas por semelhança de triângulos. O termo que está multiplicando o colchetes na Eq. 3.33, é a área do triângulo A_{AEH} . No caso do ponto E estar entre os pontos A e B, a área do triângulo BEF não pode ser subtraída na Eq. 3.33. O mesmo cuidado é tomado no caso do ponto H estar entre os pontos A e D, para que a área do triângulo DGH não seja subtraída na Eq. 3.33. A função R , definida pela Eq. 3.34, tem o papel de auxiliar no controle desses casos.

A Eq. 3.33 fornece a área da região definida pela intersecção entre a célula retangular, com lados Δx e Δy , e o triângulo formado pela reta definida na Eq. 3.30. Existem dois valores críticos para $\bar{d}$, resultando em valores nulos para a função Eq. 3.34, em que, a função definida pela Eq. 3.33 muda de forma. Em outras palavras, quer dizer que quando a reta definida pela Eq. 3.30, corta dois lados consecutivos da célula (i, j) , a função do cálculo da área é quadrática, e no caso contrário, quando a reta cruza dois lados opostos da célula (i, j) , a função do cálculo da área é linear. A expressão Eq. 3.33 possui boas propriedades matemáticas, como continuidade

e estritamente crescente em função de $\bar{d}$. Como a área do polígono ABFGD é conhecida devido a restrição $\tilde{f}_{i,j} = f_{i,j}$, a distância $\bar{d}$ pode ser calculada a partir da Eq. 3.33, e consequentemente o valor de d . Assim, a equação geral da reta, Eq. 3.30, é obtida, e os valores de $\tilde{f}$ nas células vizinhas à célula (i, j) podem ser calculados. Mais detalhes sobre todo o esquema para o cálculo de $\bar{d}$ podem ser encontrados em Tryggvason *et al.* (2011). Esse procedimento é realizado para todos os seis candidatos ao vetor normal, o que permite o cálculo do erro, Eq. 3.29, e consequentemente, definir a melhor inclinação da reta, Eq. 3.28.

3.2.2 Advecção da interface

A atualização da interface no método VOF é realizada pela solução da Eq. 3.25, após obter os novos campos de velocidade, pressão e tensor viscoelástico. Existem duas estratégias de solução para a Eq. 3.25, por esquemas conservativos de alta resolução (HRS), ou por advecção geométrica através dos fluxos nas faces das células. Os métodos HRS são muito utilizados na atualização da interface no método LS (OSHER; FEDKIW, 2006; SALIH; MOULIC, 2009), em que, a equação de advecção é a mesma, só que para a função distância. No caso do método VOF, a solução da Eq. 3.25 com o uso dos métodos HRS apresenta difusão e algumas oscilações não físicas na vizinhança da interface. Isso ocorre devido ao fato de que a função f é limitada entre 0 e 1. No caso do método LS, os métodos HRS demonstram maior sucesso, pois a função distância é ilimitada. Para contornar esse problema do uso de métodos HRS no contexto do VOF, uma técnica de correção do transporte de fluxos (FCT) (do inglês *Corrected Transport technique*) é utilizada (ZALESK, 1979; RUDMAN, 1997). O método FCT calcula os fluxos através de uma média ponderada obtida com esquemas de baixa e alta ordem. A ponderação é calculada através de pesos para evitar que oscilações provenientes dos métodos de alta ordem sejam introduzidas na solução. Essas ponderações são conhecidas como limitadores de fluxos. No código OpenFOAM, foi implementada uma técnica iterativa baseada no FCT, chamada de *Multidimensional Universal Limiter with Explicit Solution* (MULES) (OpenFOAM, 2014). Essa técnica tem sido utilizada em alguns estudos envolvendo escoamentos multifásicos complexos, como pode ser comprovado em Damián (2013), Wardle e Weller (2013), Damián e Nigro (2014), Tavangar *et al.* (2015).

No caso dos métodos de advecção geométrica os fluxos através das faces da célula são calculados utilizando informações geométricas da reconstrução da interface. Assim, a precisão da solução da Eq. 3.25 está diretamente ligada à precisão do método de reconstrução. Nesse caso, o método ELVIRA apresentado na seção 3.2.1, é uma excelente opção para fornecer informações geométricas sobre a interface (PILLIOD; PUCKETT, 2004). Essa estratégia foi adotada no presente projeto para resolver a equação de advecção do VOF. O sucesso dessa combinação é comprovado por vários testes apresentados na seção 4, em que, os resultados foram comparados com resultados teóricos, e apresentaram excelente concordância. Os métodos geométricos são divididos em dois tipos, os métodos com operador de passo único (*unsplit*), e os métodos com

operador de passo fracionado (*split*) (PUCKETT *et al.*, 1997; PILLIOD; PUCKETT, 2004). Considere a discretização temporal da Eq. 3.25 dada da seguinte forma

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (3.35)$$

em que, $F_{i+\frac{1}{2},j}^n = f_{i+\frac{1}{2},j}^n u_{i+\frac{1}{2},j}^n$ denota o fluxo de f através da aresta à direita da célula (i, j) e, $G_{i,j+\frac{1}{2}}^n = f_{i,j+\frac{1}{2}}^n v_{i,j+\frac{1}{2}}^n$ denota o fluxo de f através da aresta superior da célula (i, j) . Os métodos com operador de passo único resolvem a Eq. 3.35 calculando os fluxos através das faces das células em todas as direções simultaneamente. No entanto, certos cuidados precisam ser tomados, pois algumas regiões podem ser advectadas duas vezes, causando problemas na conservação da massa. O tratamento desses casos pode tornar o método muito complexo (TRYGGVASON *et al.*, 2011).

No caso do operador de passo fracionado, a Eq. 3.35 é resolvida em cada direção separadamente. Essa estratégia torna o método mais simples, e evita que uma mesma porção de fluido seja advectada duas vezes, como ocorre nos métodos de passo único. De acordo com Pilliod e Puckett (2004), o método ELVIRA combinado com o operador de passo fracionado, atinge segunda ordem de precisão, no tempo e no espaço, se alternar em cada passo de tempo as direções da advecção, isto é, no tempo $t^n = n\Delta t$, calcular primeiro na direção x e depois na direção y e, no tempo $t^{n+1} = (n+1)\Delta t$, calcular primeiro na direção y e em seguida na direção x . Sendo assim, o método de passo fracionado foi adotado para resolver a Eq. 3.35 nesse trabalho. O método de passo fracionado é muito utilizado para resolver a equação da advecção do VOF, e de métodos híbridos, em duas e três dimensões, como pode ser comprovado em Sussman e Puckett (2000), Pilliod e Puckett (2004), Aulisa *et al.* (2007). Recentemente, Kedelty (2015) comparou os métodos de advecção geométrica, operadores de passo único e passo fracionado, em duas e três dimensões, utilizando diversos algoritmos de reconstrução, entre eles o método ELVIRA e LVIRA. O métodos de reconstrução ELVIRA e LVIRA demonstraram ser muito competitivos na precisão da reconstrução, sendo que o método ELVIRA foi mais atrativo na relação entre precisão e custo computacional. No caso da advecção, a disputa entre os operadores de passo único e fracionado, foi acirrada, pois o operador de passo único demonstrou ser pouco mais preciso do que o operador de passo fracionado, enquanto que, na comparação do custo computacional o operador de passo fracionado apresentou considerável vantagem.

O método de advecção geométrico conservativo de segunda ordem de precisão, via operador de passo fracionado, calcula a solução da Eq. 3.35 da seguinte forma

$$f_{i,j}^* = f_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n \right), \quad (3.36)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^* - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right). \quad (3.37)$$

A interpretação geométrica das Eq. 3.36 e 3.37 é discutida por Puckett *et al.* (1997). Suponha sem perda de generalidade $u_{i+1/2,j}^n > 0$, dessa forma a célula (i, j) é dividida em dois retângulos, com áreas $u_{i+1/2,j}^n \Delta t \Delta y$ e $(\Delta x - u_{i+1/2,j}^n \Delta t) \Delta y$ (vide figura 18). O fluxo $F_{i+1/2,j}^n$ que irá atravessar a aresta à direita da célula (i, j) , é toda porção de fluido escuro que está definida dentro do retângulo à direita, como ilustrado na figura 18 pela região hachurada. Seja $A_{i+1/2,j}$ a área da região hachurada, logo o fluxo de fluido escuro $F_{i+1/2,j}^n$, é dados por

$$F_{i+1/2,j}^n = \frac{u_{i+1/2,j}^n A_{i+1/2,j}}{u_{i+1/2,j}^n \Delta t \Delta y} = \frac{A_{i+1/2,j}}{\Delta t \Delta y}. \quad (3.38)$$

A área $A_{i+1/2,j}$ é calculada via informações geométricas obtidas na reconstrução da interface, em que, os pontos de intersecção entre a reta que define a interface e o retângulo, cuja área é $u_{i+1/2,j}^n \Delta t \Delta y$, são determinados para calcular as distâncias utilizadas no cálculo da área. Os fluxos calculados pela Eq. 3.38, determinam uma fração de volume intermediária, f^* , calculada pela Eq. 3.36. Antes de calcular a atualização de f^{n+1} pela Eq. 3.37, é necessário reconstruir uma nova interface definida pela fração de fluido f^* . Após esse procedimento, os fluxos da Eq. 3.37 são calculados de forma análoga aos fluxos da Eq. 3.36, utilizando f^* e a reconstrução da mesma.

Figura 18 – Operador split: cálculo do fluxo através da aresta à direita da célula (i, j) .

Segundo Puckett *et al.* (1997), a solução numérica da equação de advecção Eq. 3.25, introduz alguns erros, tal que a hipótese de $f \in [0, 1]$ pode ser violada. Para contornar esse problema, a fração de volume é corrigida da seguinte forma

$$f_{i,j}^{n+1} = \min \left(1, \max \left(f_{i,j}^{n+1}, 0 \right) \right), \quad (3.39)$$

em que, o erro introduzido na massa total do fluido é na ordem de 10^{-4} . Para melhorar a conservação da função f , Puckett *et al.* (1997) modificaram o algoritmo do operador de passo

fracionado, Eqs. 3.36 e 3.37. A hipótese de incompressibilidade é utilizada, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, a qual permite reescrever a equação de advecção, Eq. 3.25 da seguinte forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f\mathbf{u}) = f\nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (3.40)$$

A modificação no algoritmo apresentada por Puckett *et al.* (1997), consiste em resolver o termo f do lado direito da Eq. 3.40, de forma implícita no primeiro passo do operador de passo fracionado, e de forma explícita no segundo passo. Nesse caso, o algoritmo de passo fracionado é dado por

$$f_{i,j}^* = \frac{f_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i-\frac{1}{2},j}^n - F_{i+\frac{1}{2},j}^n \right)}{1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(u_{i+\frac{1}{2},j}^n - u_{i-\frac{1}{2},j}^n \right)}, \quad (3.41)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[f_{i,j}^* \left(v_{i,j+\frac{1}{2}}^n - v_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) - \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \right]. \quad (3.42)$$

No caso do sistema de coordenadas axissimétricas, o operador *split* é dado por

$$f_{i,j}^* = \frac{f_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{r_i \Delta r} \left(r_{i-\frac{1}{2}} F_{i-\frac{1}{2},j}^n - r_{i+\frac{1}{2}} F_{i+\frac{1}{2},j}^n \right)}{1 - \frac{\Delta t}{r_i \Delta r} \left(r_{i+\frac{1}{2}} u_{r,i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{r,i-\frac{1}{2},j} \right)}, \quad (3.43)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^* + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[f_{i,j}^* \left(u_{z,i,j+\frac{1}{2}}^n - u_{z,i,j-\frac{1}{2}}^n \right) - \left(G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \right], \quad (3.44)$$

em que, u_r e u_z são as velocidades nas direções radial e axial, respectivamente, e $r_i = (i + \frac{1}{2}) \Delta r$ é o raio, o qual é inserido devido à curvatura do sistema de coordenadas. Essa modificação no algoritmo de advecção geométrica com operador de passo fracionado é muito utilizada nos resultados apresentados na literatura (SUSSMAN; PUCKETT, 2000; SUSSMAN, 2003; GERLACH *et al.*, 2006; AULISA *et al.*, 2007), devido às boas propriedades de conservação.

3.3 Tensão superficial

Os desafios em simular escoamentos multifásicos não aparecem apenas na representação e advecção da interface, mas também no cálculo das forças interfaciais. Em escoamentos dominados pela tensão superficial, muitos dos métodos numéricos tendem a gerar campos de velocidades não físicos na vizinhança da interface, conhecidos como correntes espúrias ou correntes parasitas, que não desaparecem com o refinamento da malha. Segundo Francois *et al.* (2006), esse problema numérico é um balanço inadequado entre a tensão superficial e o gradiente da pressão. Diversas técnicas foram propostas na literatura para melhorar o cálculo das forças interfaciais, através de melhorias na precisão da estimativa da curvatura, ou modificações na

discretização do gradiente de pressão e das forças interfaciais (RENARDY; RENARDY, 2002; FRANCOIS *et al.*, 2006; SUSSMAN *et al.*, 2007; DENNER *et al.*, 2014; COQUERELLE; GLOCKNER, 2016). No trabalho desenvolvido por Francois *et al.* (2006) é apresentado um algoritmo de balanço de força na interface, para métodos com malhas colocadas. O algoritmo calcula alguns campos nas faces das células, e utiliza esses valores para aproximar a solução no centro das células. Essa técnica demonstra grande sucesso pelo fato da discretização das equações nas faces das células conservarem boas propriedades numéricas para o gradiente da pressão e a força da tensão superficial (vide seção A.2). O algoritmo proposto por Francois *et al.* (2006) foi desenvolvido no contexto do método VOF, para modelos de tensão superficial contínuos (CSF) (BRACKBILL *et al.*, 1992), e *sharp interface* (SSF) (SUSSMAN *et al.*, 2007). De acordo com Francois *et al.* (2006), a diferença entre os modelos CSF e SSF está na distribuição espacial do salto da pressão, sendo que a ordem e precisão dos resultados, para ambos os modelos, estão condicionados à precisão do cálculo da curvatura.

No método SSF é necessário conhecer a função distância para aplicar a condição do salto na interface. Existem algumas técnicas na literatura para determinar a função distância no método VOF, (CUMMINS *et al.*, 2005; SUN; TAO, 2010). No entanto, o cálculo da função distância a cada passo de tempo aumenta muito o custo computacional do algoritmo. Dessa forma, o uso do método SSF é mais atrativo para esquemas de representação de interface híbridos, envolvendo VOF e LS, ou apenas LS.

Assim, no desenvolvimento do presente projeto, o método CSF foi adotado para modelar a força da tensão superficial. O modelo CSF expressa o termo da força da tensão superficial como força por unidade de área da interface, o qual é inserido na equação de conservação da quantidade de movimento como força de campo,

$$\mathbf{F}^{CSF} = (\sigma \kappa \mathbf{n} - \nabla_s \sigma) \delta, \quad (3.45)$$

em que, ∇_s é o operador gradiente de superfície, $\mathbf{n}$ é a normal à interface, σ é o coeficiente da tensão superficial, κ é a curvatura, e δ é a função delta concentrada na interface, sendo 1 na região da interface e 0 no interior do fluido. Pelas hipóteses do presente trabalho, escoamento isotérmico, e fluidos imiscíveis, segue que o coeficiente da tensão superficial é constante ao longo de toda interface, logo $\nabla_s \sigma = 0$. No contexto do método VOF, alguns termos da Eq. 3.45 podem ser aproximados através da fração de volume, como $\mathbf{n} = \nabla f / \|\nabla f\|$ e $\delta = \|\nabla f\|$. Assim, a Eq. 3.45 pode ser reescrita como

$$\mathbf{F}^{CSF} = \sigma \kappa \frac{\nabla f}{\|\nabla f\|} \|\nabla f\| = \sigma \kappa \nabla f. \quad (3.46)$$

Devido à malha do tipo MAC a Eq. 3.46 é discretizada por esquemas de diferenças centrais nas faces das células, no passo do cálculo da velocidade intermediária, Eq. 3.13. Segundo Francois *et al.* (2006), essa formulação estabelece um balanço de força entre a tensão superficial

e o gradiente de pressão, com precisão condicionada à estimativa da curvatura. Sem perda de generalidade, considerando uma malha com espaçamento uniforme, a Eq. 3.46 é discretizada como

$$F_x^{CSF} = \sigma \kappa_{i-\frac{1}{2},j} \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} \quad \text{e} \quad F_y^{CSF} = \sigma \kappa_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{\Delta y}, \quad (3.47)$$

em que, a curvatura é aproximada na face das células da seguinte forma

$$\kappa_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{W_{i,j} \kappa_{i,j} + W_{i-1,j} \kappa_{i-1,j}}{W_{i,j} + W_{i-1,j}}, \quad (3.48)$$

onde, $W_{i,j} = f_{i,j} (1 - f_{i,j})$. A aproximação da curvatura na face das células pela Eq. 3.48, evita problemas onde a curvatura é definida apenas em uma célula, melhorando a precisão dos resultados (RENARDY; RENARDY, 2002; GERLACH *et al.*, 2006).

A inclusão das forças interfaciais no sistema das equações de Navier-Stokes, adiciona mais uma restrição de estabilidade temporal, devido ao tratamento explícito,

$$\Delta t < \sqrt{\frac{(\rho_1 + \rho_2) \min(\Delta x, \Delta y)^3}{4\pi\sigma}}. \quad (3.49)$$

Assim, o passo temporal precisa ser definido de forma que satisfaça as restrições Eqs. 3.10, 3.11 e 3.49 no caso explícito, e Eqs. 3.10 e 3.49 no caso semi-implícito. Na próxima seção serão discutidos os métodos numéricos para estimar a curvatura.

3.3.1 Curvatura

O método VOF apresenta algumas vantagens na sua formulação, entre elas a excelente conservação da massa e a mudança topológica automática (vide seção 1.2.2). No entanto, as aproximações da normal e curvatura são pouco precisas, quando estimadas no centro das células via fração de volume, da seguinte forma

$$\mathbf{n} = \nabla f \quad \text{e} \quad \kappa = -\nabla \cdot \frac{\mathbf{n}}{\|\mathbf{n}\|} = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla f}{\|\nabla f\|} \right). \quad (3.50)$$

Essas aproximações são pouco precisas, pois o cálculo é realizado com valores nas arestas das células, e todas as propriedades necessárias para o cálculo estão armazenadas no centro das células. Para contornar o problema da aproximação da normal, o método ELVIRA foi adotado (vide seção 3.2.1). No caso da curvatura, pela regra do quociente, a Eq. 3.50 pode ser reescrita como

$$\kappa = \frac{1}{\|\mathbf{n}\|} \left[\left(\frac{\mathbf{n}}{\|\mathbf{n}\|} \cdot \nabla \right) \|\mathbf{n}\| - \nabla \cdot \mathbf{n} \right]. \quad (3.51)$$

Segundo Brackbill *et al.* (1992), o cálculo da curvatura pela Eq. 3.51 fornece melhores resultados, pois as aproximações para a normal são realizadas nos vértices das células, em vez de ser nas arestas como na Eq. 3.50, resultando em melhores aproximações para o gradiente da função f . Além disso, a aproximação por diferenças finitas da Eq. 3.51, resulta em uma divisão por média aritmética de $\|\mathbf{n}\|$, enquanto na Eq. 3.50, resulta em uma divisão por média harmônica de $\|\mathbf{n}\|$.

Na literatura são encontrados outros métodos para estimar a curvatura da interface com o VOF, dos quais podemos mencionar o *height function* (HF) (FRANCOIS *et al.*, 2006; POPINET, 2009), o PROST (RENARDY; RENARDY, 2002), e os métodos híbridos CLSVOF e VOSET (SUSSMAN, 2003; SUN; TAO, 2010). O método HF utiliza informações sobre a função altura, construída localmente através da fração de volume, para estimar a curvatura via seu conceito geométrico (Do Carmo, 1976). No método PROST a curvatura é aproximada a partir de uma aproximação quadrática para a interface. Nos métodos híbridos, CLSVOF E VOSET, a curvatura é aproximada a partir da função distância do método LS. Alguns trabalhos são encontrados na literatura, em que estudos comparativos foram realizados para acessar a precisão desses métodos com o modelo CSF, (FRANCOIS *et al.*, 2006; GERLACH *et al.*, 2006; DENNER *et al.*, 2014). Segundo Denner *et al.* (2014), o melhor método para calcular a curvatura no VOF vai depender do problema a ser resolvido.

No desenvolvimento deste projeto foram investigados três métodos para estimar a curvatura, o método dado pela Eq. 3.51, o método HF, e o VOSET. Os métodos foram testados com problemas clássicos de benchmark, e problemas envolvendo grandes deformações na interface, como o problema da ascensão da bolha (PIVELLO *et al.*, 2014). Nos problemas testados, onde a interface sofreu grandes deformações, os métodos HF e VOSET foram evidentemente melhores do que o método da Eq. 3.51. Na comparação entre os métodos HF e VOSET, ambos apresentaram bons resultados quanto a precisão e comportamento da interface. Assim, o critério de desempate para escolha do método do cálculo da curvatura no presente projeto foi o custo computacional. Neste caso, o método HF foi escolhido, pois no método VOSET é necessário determinar a função distância. Apesar do método proposto por Sun e Tao (2010), determinar a função distância apenas em uma região na vizinhança da interface, o método HF é mais barato computacionalmente. A seguir será apresentado o método HF, e uma breve discussão sobre conceito geométrico da curvatura.

No caso de uma superfície (caso 3D), a curvatura média é definida como

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}, \quad (3.52)$$

em que, κ_1 e κ_2 são as curvaturas principais, sendo R_1 e R_2 , os respectivos raios de curvatura. Na teoria de geometria diferencial, o valor da curvatura média pode ser determinado através da

segunda forma fundamental de superfícies (Do Carmo, 1976), da seguinte forma

$$\kappa = \frac{eG - 2fF + gE}{EG - F^2}, \quad (3.53)$$

em que, E , F , G , e , f e g , são coeficientes da segunda forma fundamental de superfícies, calculados através da parametrização de superfície. Muitas vezes a superfície pode ser parametrizada pela parametrização de Monge, em que, a superfície é definida por uma função altura $h = h(x_1, x_2)$, onde (x_1, x_2) pertence a um conjunto aberto $U \subset \mathbb{R}^2$. Suponha, sem perda de generalidade, $x_1 = x$ e $x_2 = y$. Assim, obtemos a seguinte parametrização para a superfície

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(x, y) = (x, y, h(x, y))^T, \quad (x, y) \in U. \quad (3.54)$$

Antes de definir os coeficientes da segunda forma fundamental, para obter a curvatura média da superfície parametrizada pela Eq. 3.54, é necessário definir alguns cálculos:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_x &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x} = (1, 0, h_x)^T, & \mathbf{x}_y &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y} = (0, 1, h_y)^T, \\ \mathbf{x}_{xx} &= \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial x^2} = (0, 0, h_{xx})^T, & \mathbf{x}_{yy} &= \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial y^2} = (0, 0, h_{yy})^T, \\ \mathbf{x}_{xy} &= \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial x \partial y} = (0, 0, h_{xy})^T, & \mathbf{n}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{1 + h_x^2 + h_y^2}} \begin{pmatrix} -h_x \\ -h_y \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.55)$$

em que, h_x representa a derivada de h na direção x , e $\mathbf{n}$ é um campo normal unitário sobre a superfície. Com essas definições, os coeficiente da segunda forma fundamental são dados de acordo com Do Carmo (1976), da seguinte forma:

$$\begin{aligned} e &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{xx}, & f &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{xy}, & g &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{yy}, \\ E &= \mathbf{x}_x \cdot \mathbf{x}_x, & F &= \mathbf{x}_x \cdot \mathbf{x}_y, & G &= \mathbf{x}_y \cdot \mathbf{x}_y. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Substituindo os valores dos coeficientes da segunda forma fundamental, Eq. 3.56, na Eq. 3.53, segue que a curvatura média da superfície parametrizada pela função altura, Eq. 3.54, é dada por

$$\kappa = \frac{(1 + h_x^2) h_{yy} - 2h_x h_y h_{xy} + (1 + h_y^2) h_{xx}}{(1 + h_x^2 + h_y^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.57)$$

No caso bidimensional, supondo a interface representada no plano xz , a função altura varia apenas na direção x . Nesse caso, é fácil ver que o cálculo da curvatura se reduz a

$$\kappa = \frac{h_{xx}}{(1 + h_x^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.58)$$

No caso axissimétrico, a parametrização de Monge também é utilizada para definir uma parametrização para a interface, da seguinte forma

$$\begin{aligned} h : \mathbb{R}^2 \supset [a, b] \times [0, 2\pi] &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ (r, \theta) &\mapsto (r \cos \theta, r \sin \theta, h(r, \theta))^T, \end{aligned} \quad (3.59)$$

sendo respectivo vetor normal unitário dado por

$$\mathbf{n}(r, \theta) = \frac{(-h_r \cos \theta, -h_r \sin \theta, 1)}{\sqrt{1 + h_r^2}}. \quad (3.60)$$

Assim, calculando os coeficientes da segunda forma fundamental através da parametrização Eq. 3.59, a curvatura é dada por

$$\kappa = \frac{h_{rr}}{(1 + h_r^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{h_r}{r\sqrt{1 + h_r^2}}. \quad (3.61)$$

As curvaturas do caso bidimensional e do caso axissimétrico, diferem apenas pelo termo $\frac{h_r}{r\sqrt{1 + h_r^2}}$, que surge devido à revolução da superfície em torno do eixo z . Esse termo é uma das curvaturas principais da Eq. 3.52, o qual é zero na simplificação do caso bidimensional. Além disso, ele pode ser reescrito como $\frac{n_r}{r}$, em que, n_r é a componente radial do vetor normal unitário. Em muitos trabalhos na literatura, o sinal do cálculo da curvatura é visto negativo, isso pode mudar dependendo da direção do vetor normal. Esse é o procedimento geométrico que o método HF utiliza para estimar a curvatura. Mais detalhes podem ser encontrados em [Do Carmo \(1976\)](#), [Tryggvason et al. \(2011\)](#).

Por fim, resta determinar uma parametrização para a interface. No método HF a parametrização é obtida localmente pela construção de uma função altura h , integrando a fração de volume ao longo da direção da componente do vetor normal de maior magnitude. Uma característica negativa do método HF, que poucos trabalhos relatam ([POPINET, 2009](#); [BORNIA et al., 2011](#)), é que uma curvatura inconsistente pode ser estimada quando o raio de curvatura da interface se aproximar do tamanho da malha. Esse tipo de problema pode ocorrer na mudança topológica. Para tentar evitar esse tipo de inconsistência, alguns cuidados são tomados na construção da função altura. No contexto deste trabalho, o método HF é aplicado aos casos bidimensional e axissimétricos, sendo que a estimativa da curvatura no caso axissimétrico, Eq. 3.61, é uma extensão imediata do caso bidimensional, Eq. 3.58. Sendo assim, iremos apresentar a estimativa para a função altura apenas para o caso bidimensional. O caso tridimensional é uma extensão imediata do caso bidimensional, cujos detalhes podem ser encontrados em [Francois et al. \(2006\)](#).

No caso bidimensional, a construção da função altura é realizada em um bloco de células 3×7 , ou 7×3 , sendo a direção com o maior número de células a mesma onde a componente do vetor normal apresenta maior magnitude. Em outras palavras, esse procedimento estabelece um

sistema de coordenadas locais para definir a parametrização, $y = h(x)$ se $|n_y| > |n_x|$, e $x = h(y)$ se $|n_x| > |n_y|$. Após definir a parametrização, três valores para função altura h são estimados para aproximar a primeira e segunda derivada por diferenças finitas. Supondo $|n_y| > |n_x|$, o bloco 3×7 é escolhido, em que, a função altura é calculada localmente como

$$h_s = \sum_{l=-3}^3 f_{i+s,j+l} \Delta y_{j+l}, \quad \text{com } s = -1, 0, 1. \quad (3.62)$$

Caso $|n_y| < |n_x|$, segue que

$$h_s = \sum_{l=-3}^3 f_{i+l,j+s} \Delta x_{i+l}, \quad \text{com } s = -1, 0, 1. \quad (3.63)$$

A partir dos valores estimados para h , segue diretamente da Eq. 3.58, que a curvatura é dada por:

$$\kappa = \frac{h''}{\left(1 + (h')^2\right)^{\frac{3}{2}}}. \quad (3.64)$$

em que, h' e h'' são aproximados por

$$h' = \frac{h_1 - h_{-1}}{2\Delta s}, \quad (3.65)$$

e

$$h'' = \frac{h_1 - 2h_0 + h_{-1}}{\Delta s^2}, \quad (3.66)$$

sendo $\Delta s = \Delta x$ se $|n_y| > |n_x|$, e $\Delta s = \Delta y$ se $|n_x| > |n_y|$. Para melhorar a precisão do cálculo da curvatura, e evitar problemas de inconsistência, como em regiões de mudanças topológicas, um algoritmo de stencil variável é adotados para o cálculo da função altura (POPINET, 2009). Considerando que o vetor normal aponta para região onde $f = 0$, e o ponto i, j onde queremos estimar a curvatura, está centrado no bloco 3×7 (resp. 7×3), o algoritmo segue nos seguintes passo para a obter h_s :

1. Inicie o somatório de $f\Delta s$ a partir da célula central da linha 7×1 (resp. coluna 1×7);
2. Continue o somatório na direção do vetor normal $\mathbf{n}_{i,j}$, até encontrar uma célula com $f = 0$, ou uma célula de fronteira, ou até que acabem as células do bloco;
3. Continue o somatório a partir da célula central, seguindo na direção oposta, e adicionando $(f - 1)\Delta s$ em vez de $f\Delta s$. Realize esse procedimento até encontrar uma célula com $f = 1$, ou uma célula de fronteira, ou até que acabem as células do bloco.

Esse algoritmo foi implementado no código desenvolvido no presente projeto. Sem perda de generalidade, suponha uma malha com espaçamento uniforme, com $\Delta x = 1u.c.$. Temos que o procedimento anterior, utilizado para calcular a função altura, evita problemas como o ilustrado na figura 19, em que, existem duas porções de fluido no bloco 3×7 .

Figura 19 – Ilustração do algoritmo para o cálculo da função altura.

3.3.2 Ângulo de contato

O ângulo de contato é o ângulo formado entre a reta tangente à interface e o contorno rígido, no interior do fluido mais denso. Uma descrição de algumas abordagens sobre o balanço de forças nessa região foi apresentada na seção 2.2.7. O ângulo de contato define a condição de contorno para a fração de volume e função altura em contornos rígidos. Em outras palavras, o ângulo de contato fornece informações para o cálculo da normal e curvatura, em células vizinhas à parede. Esse tipo de condição é muito importante no estudo numérico de escoamentos multifásicos, pois em muitos experimentos, o comportamento do escoamento é extremamente dependente dessa condição. Melhorias na precisão dos métodos para simular escoamentos influenciados pelas forças capilares foram apresentadas na literatura, sendo que Luo *et al.* (2016) apresentaram melhorias para o método LS, enquanto Montefusco *et al.* (2014) apresentaram melhorias para o método ALE. No contexto do método VOF combinado com o método HF, podemos mencionar as técnicas geométricas apresentadas por Afkhami e Bussmann (2008), Afkhami e Bussmann (2009). Essas técnicas foram adotadas no presente trabalho para definir a condição de contorno para o cálculo da curvatura.

O ângulo de contato estático, definido como θ_e , foi a técnica adotada para definir as condições de contorno em células de parede. Nesse caso, a normal à interface em uma célula

vizinha a esse contorno é definida como

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}_w \cos \theta_e + \mathbf{t}_w \sin \theta_e, \quad (3.67)$$

em que, $\mathbf{n}_w$ e $\mathbf{t}_w$, são os vetores normal e tangencial à parede, respectivamente. A técnica proposta por Afkhami e Bussmann (2008), aproxima um valor para a função altura vizinha ao ponto de contato, o qual é utilizado no processo para estimar a curvatura com o método HF. A técnica para estimar essa função altura na célula vizinha ao ponto de contato é dividida em dois casos, caso com $45^\circ \leq \theta_e \leq 135^\circ$, e caso com $\theta_e < 45^\circ$ ou $\theta_e > 135^\circ$. Esses dois casos são referentes as direções para estimativa da função altura, em que, são na mesma direção da maior componente do vetor normal (vide subseção 3.3.1). Considere sem perda de generalidade, um contorno rígido com $\mathbf{n}_w = (0, 1)^T$. A figura 20 ilustra como a função altura é calculada no caso 2D, para as duas situações mencionadas anteriormente. O caso axissimétrico é uma extensão imediata do caso 2D, onde n_r/r é uma das curvaturas principais (vide subseção 3.3.1). O procedimento é puramente geométrico, em que, a interface construída através do ângulo de contato e refletida em relação ao contorno, onde obtém-se a seguinte extrapolação linear para a função altura:

$$h_{-1} = \begin{cases} h_0 + |\mathbf{n}_w \cdot (\Delta x, \Delta y)| \cot \theta_e, & \text{se } 45^\circ \leq \theta_e \leq 135^\circ, \\ h_0 - |\mathbf{n}_w \cdot (\Delta y, \Delta x)| \tan \theta_e, & \text{se } \theta_e < 45^\circ \text{ ou } \theta_e > 135^\circ. \end{cases} \quad (3.68)$$

(a) Cálculo da função altura em contornos rígidos quando $45^\circ \leq \theta_e \leq 135^\circ$.

(b) Cálculo da função altura em contornos rígidos quando $\theta_e < 45^\circ$ ou $\theta_e > 135^\circ$.

Figura 20 – Ilustração do cálculo da condição de contorno para o método HF.

Segundo Afkhami e Bussmann (2009), o caso com $\theta_e < 45^\circ$ ou $\theta_e > 135^\circ$, é difícil de construir com precisão, pois dependendo da posição do ponto de contato, a função altura h_0 também precisa ser aproximada em função do ângulo de contato. No presente trabalho, esses casos foram tratados de forma adequada, como pode ser verificados nos resultados apresentados na seção 4.9. Os testes realizados apresentaram excelente concordância com os resultados teóricos, inclusive para casos extremos, onde o ângulo de contato definido representou situações com pequeno e grande molhamento.

3.4 Malha não-uniforme

No estudo numérico de muitos problemas industriais e físicos, é necessário um grande número de ponto em regiões com altos gradientes para garantir uma boa precisão na solução. No caso de escoamentos multifásicos, também é apropriado definir uma grande quantidade de pontos próximos à interface. Além disso, em alguns problemas o domínio físico é enorme, enquanto a região de interesse do escoamento é pequena. O uso de malhas uniformes para resolver esses problemas pode acarretar em um esforço computacional enorme, e em alguns casos, pode até inviabilizar o estudo do problema. Assim, é imprescindível uma distribuição não uniforme dos pontos no domínio computacional. Uma das técnicas mais conhecidas é o refinamento de malha, ou malha não uniforme (FERZIGER; PERIĆ, 2012), onde uma maior quantidade de pontos é posicionada em regiões de interesse no escoamento, ou em regiões onde altos gradientes são esperados. Essa técnica se tornou muito popular devido à fácil implementação. Sendo assim, ela foi adotada no presente trabalho para investigar os problemas do CaBER, e do efeito de Weissenberg. Esse foi um dos desafios superados no desenvolvimento desse projeto, pois estudos realizados com uma versão anterior do código, onde não possuía refinamento de malha, demonstraram que seria impossível explorar esses problemas. Existem outras técnicas mais elaboradas de refinamento de malha, como o refinamento de malha adaptativo (AMR) (BERGER; OLIGER, 1984). O AMR utiliza um refinamento automático que se adapta à solução do problema, baseado em um conjunto de malhas com vários níveis. Essa técnica é muito utilizada em escoamentos multifásicos, onde o refinamento é realizado na região da interface para garantir um comportamento preciso (PIVELLO *et al.*, 2014; CHEN; YANG, 2014). Uma das vantagens do AMR é a boa precisão dos resultados. No entanto, esse método é extremamente difícil de implementar, a geração da malha é um desafio, e o balanço de carga do sistema é complexo.

Na malha não uniforme, as diferenças progressiva e regressiva mantêm primeira ordem de precisão, assim como na malha uniforme. No entanto, a diferença central pode se tornar de primeira ordem, pois alguns termos são cancelados apenas na malha uniforme. De acordo com Ferziger e Perić (2012), o erro de truncamento na malha não uniforme pode ser escrito como:

$$e_\tau \approx \frac{(1 - r_e) \Delta x_i}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i, \quad (3.69)$$

em que, $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ e $r_e = \Delta x_{i+1} / \Delta x_i$. Quando $r_e \approx 1$, os erros de primeira ordem decrescem mais rápidos do que os de segunda ordem. Consequentemente, a medida que a malha é refinada, as diferenças centrais convergem assintoticamente para segunda ordem. Segundo Ferziger e Perić (2012), é possível utilizar interpolação para ajustar um polinômio de grau n , através de $n + 1$ pontos, em que, até a n -ésima derivada pode ser aproximada. Essa estratégia possibilita obter aproximações de segunda ordem para as diferenças centradas, em uma malha não uniforme.

Nesse caso, a primeira derivada é escrita com um esquema de diferença central como

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} (\Delta x_i)^2 - \phi_{i-1} (\Delta x_{i+1})^2 + \phi_i [(\Delta x_{i+1})^2 - (\Delta x_i)^2]}{\Delta x_{i+1} \Delta x_i (\Delta x_{i+1} + \Delta x_i)} \quad (3.70)$$

enquanto a segunda derivada é calculada por

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} \Delta x_i + \phi_{i-1} \Delta x_{i+1} - \phi_i (\Delta x_{i+1} + \Delta x_i)}{\frac{1}{2} (\Delta x_{i+1} + \Delta x_i) \Delta x_{i+1} \Delta x_i}. \quad (3.71)$$

É possível observar que as expressões anteriores se reduzem ao caso do esquema de diferenças centradas padrão em uma malha uniforme.

Um ponto que acho interessante discutir nessa seção é o tratamento do divergente do tensor viscoelástico, na equação do cálculo da velocidade intermediária, Eq. 3.13. Devido a natureza hiperbólica da equação constitutiva, Eq. 2.3, não é necessário condições de contorno para fronteiras rígidas. No entanto, em uma malha deslocada, a discretização por diferenças centradas do divergente do tensor polimérico, na Eq. 3.13, exige um valor na fronteira para uma das componentes cruzadas do tensor. A figura 21a ilustra tal situação com $\mathbf{n}_w = (1, 0)^T$. Para tentar manter a ordem da discretização espacial, o valor do tensor na fronteira é obtido através de extrapolação linear, ou quadrática (HABLA *et al.*, 2012). No presente trabalho, o divergente do tensor polimérico, em regiões próximas à fronteira rígida, é calculado por diferenças progressiva (ou regressiva, dependendo da direção do vetor normal ao contorno) de segunda ordem de precisão. Sem perda de generalidade, considerando $\mathbf{n}_w = (1, 0)^T$ (vide figura 21b), a parte do divergente do tensor que envolve o termo cruzado do tensor polimérico, é discretizado por diferenças progressiva de segunda ordem como

$$\left.\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{-\tau_{i,j-\frac{1}{2}}^{xy} [(x_{i+2} - x_i)^2 - (x_{i+1} - x_i)^2] + \tau_{i+1,j-\frac{1}{2}}^{xy} (x_{i+2} - x_i)^2 - \tau_{i+2,j-\frac{1}{2}}^{xy} (x_{i+1} - x_i)^2}{(x_{i+1} - x_i) (x_{i+2} - x_i) (x_{i+2} - x_{i+1})}, \quad (3.72)$$

em que, x_i é a posição do centro da célula. Em uma malha uniforme, a expressão anterior se reduz à seguinte forma

$$\left.\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{-3\tau_{i,j-\frac{1}{2}}^{xy} + 4\tau_{i+1,j-\frac{1}{2}}^{xy} - \tau_{i+2,j-\frac{1}{2}}^{xy}}{2\Delta x}. \quad (3.73)$$

É possível observar na discretização da parte do divergente que contém o termo cruzado do tensor, Eq. 3.72, que todos os valores do tensor são tomados na face, enquanto o tensor é armazenado no centro das células. Esses valores nas faces são obtidos com interpolação linear. Além dos tensores cruzados, na discretização do divergente do tensor polimérico, qualquer outro

Figura 21 – Ilustração do cálculo da componente cruzada do divergente do tensor polimérico, $\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}}$, em uma célula vizinha à parede.

campo ou propriedade armazenado no centro das células, e requerido na face, são interpolados da seguinte forma:

$$g_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{g_{i,j}\Delta y_{j-1} + g_{i,j-1}\Delta y_j}{\Delta y_j + \Delta y_{j-1}}, \quad \text{ou} \quad g_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{g_{i,j}\Delta x_{i-1} + g_{i-1,j}\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}. \quad (3.74)$$

Mais detalhes sobre as aproximações das derivadas em uma malha não uniforme, podem ser encontrados em [Ferziger e Perić \(2012\)](#).

A geração de malhas não uniformes é uma das maiores dificuldades encontradas em resolver escoamentos de fluidos. Devido ao tipo de célula adotada no presente trabalho, célula do tipo MAC, é possível construir a malha não uniforme em cada direção separadamente. Funções de controle de malha são utilizadas para facilitar a construção, como a progressão geométrica

$$x_i = r_e x_{i-1}, \quad (3.75)$$

em que, r_e é a razão da progressão. Outras funções também são utilizadas no presente trabalho, como a função definida a seguir

$$x_i = L\bar{x}_i^a + A(x_c - L\bar{x}_i)(1 - \bar{x}_i)\bar{x}_i, \quad (3.76)$$

em que, $\bar{x}_i \in [0, 1]$ é uma distribuição uniforme de pontos, L é o comprimento do domínio, A e a são fatores de compressão/expansão, e x_c é um ponto de atração das linhas da malha.

3.5 Implementação

A metodologia proposta para simular escoamentos viscoelásticos multifásicos complexos foi implementada na criação de um novo sistema ([FIGUEIREDO et al., 2016](#)). O sistema foi escrito em linguagem de programação C, e utiliza a biblioteca MPI (*Message Passing Interface*) para o suporte da paralelização do código. A distribuição de carga é realizada visando uma

distribuição uniforme dos pontos entre os processadores. Para garantir melhor eficiência, a decomposição do domínio é realizada na direção com o maior número de pontos, essa estratégia diminui a quantidade de informações na comunicação entre os processos. Essa estruturação do código possibilitou um ganho de performance considerável no estudo numérico de todos os problemas investigados. Além disso, a paralelização do código permitiu um melhor uso da infraestrutura do cluster Euler (SOUSA, 2015).

Toda formulação foi implementada em coordenadas cartesianas e cilíndricas, o que possibilita explorar problemas com geometrias complexas, como o efeito de Weissenberg e o CaBER. Além disso, toda a metodologia foi implementada no caso tridimensional, a menos da formulação para representação e advecção da interface. Por esse motivo, todos os resultados apresentados no presente projeto estão limitados aos casos bidimensional e axissimétrico.

O uso de métodos semi-implícitos para eliminar a restrição de estabilidade parabólica, possibilita simular escoamentos com baixos números de Re , mas por outro lado é necessário resolver um sistema linear para cada componente do campo de velocidades. Em um sistema de coordenadas cartesianas, os sistemas lineares resultantes são esparsos e simétricos, enquanto no sistema de coordenadas cilíndricas os sistemas lineares resultantes são esparsos e não-simétrico. No caso de escoamentos multifásicos, todos os sistemas lineares resultantes são não-simétricos, independente do sistema de coordenadas. Sendo assim, para tornar o código mais robusto, todos os sistemas lineares resultantes da equação da quantidade de movimento, Eq.(3.12), e da equação de Poisson, Eq.(3.6), são resolvidos com o auxílio de uma ferramenta chamada PETSc (*Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*) (BALAY *et al.*, 2016). O PETSc fornece uma lista de resolvidores para sistemas lineares e pré-condicionadores, os quais tem suporte da biblioteca MPI para processamento em paralelo. Essa ferramenta também permite que o usuário altere o tipo de resolvidor dos sistemas lineares, o tipo de pré-condicionamento, o valor de tolerância do erro, etc, em tempo de execução.

Testes para verificar a implementação e precisão da formulação proposta, são apresentados no próximo capítulo.

TESTES NUMÉRICOS

Nas seções anteriores foram apresentadas as equações que modelam um escoamento isotérmico, incompressível, multifásico com fluidos complexos, e a formulação proposta para resolver esse tipo de escoamento. Nesse capítulo serão apresentados um conjunto de testes numéricos para verificar a implementação da construção do código, e estimar a precisão da formulação proposta em diferentes níveis de complexidade física. Além disso, os testes foram realizados para problemas envolvendo ambos os sistemas de coordenadas, cartesianas e cilíndricas. Essa verificação garante que os novos termos que surgem devido à curvatura do sistema de coordenadas cilíndricas também estão sendo bem calculados. O conjunto de testes foi dividido em cinco casos:

1. **Problemas viscoelásticos confinados:** verifica a implementação das equações de Navier-Stokes, formulação semi-implícita, e a implementação da equação constitutiva, para ambas as formulações, padrão e métodos de estabilização. Os problemas investigados foram a cavidade de tampa deslizante com altos números de Wi (vide seção 4.1), e os cilindros concêntricos com rotação do cilindro interno e fluidos complexos (vide seção 4.2);
2. **Representação e advecção da interface:** nessa verificação foi imposto um campo de velocidades prescrito, satisfazendo a equação da conservação da massa, para estimar a precisão do método ELVIRA e da técnica geométrica para advecção da interface. Os testes realizados foram os clássicos problemas da rotação do disco de Zalesak (vide seção 4.3) e a deformação de um elemento circular de fluido (vide seção 4.4).
3. **Escoamentos newtonianos multifásicos:** esses testes foram realizados para verificar a conexão do módulo da representação e advecção da interface, com o módulo do resolvidor das equações de Navier-Stokes. Nesse ponto, as forças interfaciais ainda não são impostas, sendo apenas uma verificação da discretização da equação da quantidade de movimento e da equação de Poisson, devido ao salto das propriedades (densidade e viscosidade). Os

problemas investigados foram o *two layer plane Couette flow* (vide seção 4.5) e a rotação do cilindro (vide seção 4.6). Esses testes são importantes pois possuem solução analítica, o que possibilita estimar a precisão do cálculo do campo de velocidades com o salto entre as propriedades, e o erro da representação da interface advectado por esse campo.

4. **Forças interfaciais:** os testes realizados nesse caso, acreditamos ser um dos mais importantes na construção e verificação de um código multifásico, pois envolvem a solução das equações de Navier-Stokes, a representação e advecção da interface, e o cálculo das forças interfaciais. Em tal caso, se o balanço de forças, a curvatura e a representação da interface não forem calculadas com precisão, a solução numérica pode gerar aproximações não físicas, resultando nas chamadas “correntes parasitas” (POPINET, 2009). Assim, para verificar a formulação proposta, os problemas da gota estática (vide seção 4.7) e da gota oscilante (vide seção 4.8) foram investigados. Além disso, para verificar a condição de contorno na fronteira rígida para a fração de volume, e o cálculo da curvatura nas células vizinhas a essa fronteira, utilizou-se o experimento do ângulo de contato estático (vide seção 4.9).
5. **Escoamentos multifásicos com fluidos complexos:** os problemas investigados foram o impacto da gota axissimétrica (vide seção 4.10) e a deformação da gota (vide seção 4.11). Esses problemas finalizam o capítulo de verificação da implementação e precisão da formulação adotada, pois englobam todos os desafios esperados no presente projeto.

Esses e outros testes foram realizados ao longo da construção do código, para garantir precisão e robustez no processo de construção da formulação. Todos os resultados obtidos foram comparados com resultados teóricos e numéricos, onde apresentaram excelente concordância. Esse fato evidencia a robustez do algoritmo proposto pela combinação das técnicas apresentadas no capítulo anterior. Após os testes para verificar a implementação do algoritmo, serão apresentados os principais resultados obtidos no desenvolvimento do presente projeto, o estudo do efeito de Weissenberg para altas rotações (capítulo 5) e o problema do CaBER (capítulo 6).

4.1 Cavidade com tampa deslizante para HWNP

Nessa seção serão apresentados os resultados obtidos com o experimento da cavidade com tampa deslizante, em duas dimensões e altos números de Wi . Esse estudo pretende validar a implementação dos métodos de estabilização, e a formulação semi-implícita para escoamentos com baixos números de Re . É verificada a precisão das aproximações obtidas para o tensor polimérico através da equação constitutiva do modelo de fluido Oldroyd-B. Os resultados foram comparados com resultados apresentados na literatura.

Esse problema é muito utilizado na literatura para verificar métodos de estabilização na solução do HWNP (FATTAL; KUPFERMAN, 2005; PAN *et al.*, 2009; SU *et al.*, 2013; HABLA

et al., 2014). Em particular, para $Wi \geq 1$ e utilizando o modelo Oldroyd-B, foram apresentados resultados por Fattal e Kupferman (2005), Martins *et al.* (2015) e Junior *et al.* (2016) envolvendo diferentes funções para a transformação kernel genérica. Em Martins *et al.* (2015), os autores utilizaram um esquema de diferenças finitas, com uma malha uniforme do tipo MAC, enquanto em Junior *et al.* (2016), os resultados foram obtidos no contexto de diferenças finitas e volumes finitos.

Esse problema utiliza um perfil regularizado no espaço e tempo para definir a velocidade na tampa, $u(x, t) = 8[1 + \tanh(8t - 4)]x^2(1 - x)^2$. A condição de contorno rígido é imposta em todas as paredes, em que, exceto a tampa, todas as paredes são estacionárias. Nos resultados apresentados a seguir, os seguintes valores foram adotados, $Re = 0.01$ e $\beta = 0.5$. Com o propósito de uma comparação qualitativa com a literatura, o número de Weissenberg foi fixado em $Wi = 2$.

Uma malha não uniforme foi utilizada, com células concentradas perto das paredes. A malha foi construída com o auxílio da Eq. 3.76, com $A = 0$ e $a = 0.3$, comprimindo as células a partir do centro do domínio até as paredes. Para verificar a convergência da malha, um estudo foi realizado com três malhas não uniformes: $M1$ com 64×64 células ($\min(\Delta x_i, \Delta y_j) = 0.007068$, $i, j = 1, 2, \dots, 64$), $M2$ com 128×128 células ($\min(\Delta x_i, \Delta y_j) = 0.002892$, $i, j = 1, 2, \dots, 128$), e $M3$ com 256×256 células ($\min(\Delta x_i, \Delta y_j) = 0.001179$, $i, j = 1, 2, \dots, 256$). Para todas as figuras apresentadas nessa seção, o perfil da velocidade u e a componente τ_{xx} foram plotados ao longo da linha vertical em $x = 0.5$, enquanto o perfil da velocidade v foi tomado ao longo da linha horizontal em $y = 0.75$. A origem do sistema de coordenadas cartesianas foi definida no canto esquerdo da cavidade quadrada, sendo a tampa localizada em $y = 1$. Em todas as simulações, o passo temporal foi fixado com $\Delta t = 0.0001$. Para verificar as propriedades da estabilidade numérica do algoritmo envolvendo o HWNP, foi adotado no contexto da transformação kernel genérica, a função logarítmica na base e .

Na figura 22, é apresentado o estudo do refinamento da malha, e a comparação com os resultados da literatura. Nas figuras 22(a) e 22 (b), é possível observar que os resultados obtidos para o campo de velocidades estão em boa concordância com os resultados apresentados por Fattal e Kupferman (2005), Martins *et al.* (2015). Resultados do estudo da convergência da malha, para a componente do tensor τ_{xx} , são apresentados na figura 22(c), onde é possível observar a convergência das soluções. Além disso, a figura 22(c) também inclui uma comparação com resultados de Martins *et al.* (2015), onde observa-se razoável concordância. Por fim, a evolução temporal da energia cinética, obtida com as três malhas, é comparado com os resultados de Martins *et al.* (2015), como ilustrado na figura 22(d). Nessa figura, é possível observar que os resultados convergem para um estado estacionário, onde é observado um pico na energia cinética, $E \approx 0.018$ em $t \approx 0.8$, seguido por um decaimento assintótico para o valor de $E \approx 0.0093$ na malha $M3$.

Figura 22 – Simulação numérica do problema da cavidade com tampa deslizante no intervalo de tempo $t = 80$, utilizando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$, $Wi = 2$, e $\beta = 0.5$: a) velocidade u em $(0.5, y)$, b) velocidade v em $(x, 0.75)$, c) τ_{xx} em $(0.5, y)$, e d) energia cinética.

4.2 Cilindros concêntricos com fluidos complexos

Nessa seção será apresentada uma verificação da implementação do sistema de coordenadas cilíndricas para escoamentos viscoelásticos confinados, em que o problema investigado é o chamado cilindros concêntricos. Esse tipo de escoamento é encontrado em várias aplicações industriais, tal como em processos que envolvem resíduo de fluidos, fibras sintéticas, e na perfuração de poços de petróleo e gás, como mencionado em uma lista extensa por [Escudier et al. \(2002\)](#). Soluções para alguns modelos constitutivos reológicos foram propostos por outros autores, como [Pinho e Oliveira \(2000\)](#) que propuseram uma solução analítica para escoamentos laminares entre cilindros concêntricos sem rotação do cilindro interno, para o modelo PTT simplificado. Em [Mirzazadeh et al. \(2005\)](#), apresenta-se uma solução analítica aproximada para escoamentos puramente tangenciais, envolvendo fluidos viscoelásticos governados pelo modelo LPTT, com rotação relativa de ambos os cilindros. Além disso, [Mirzazadeh et al. \(2005\)](#) também apresentaram uma solução analítica explícita obtida para o modelo PTT simplificado. [Ravanchi et al. \(2007\)](#) propuseram uma solução analítica para escoamento estacionários puramente tangenciais, modelados pela equação constitutiva do modelo Giesekus, entre cilindros concêntricos com rotação do cilindro interno.

Na solução apresentada por [Ravanchi et al. \(2007\)](#), a tensão de cisalhamento analítica adimensional, na parede do cilindro interno, denotada como τ_{Wi}^* , é dada por uma equação não

linear. No estudo dessa seção, essa equação foi resolvida numericamente para comparar com τ_{Wi}^* obtido através do método numérico pela seguinte equação:

$$\tau_{r\theta}^* = \frac{\zeta^2 \tau_{Wi}^*}{r^*} \quad (4.1)$$

em que, ζ é a razão entre os raios, e r^* é a coordenada radial adimensional. Nesse problema, o número de Weissenberg é definido como $Wi = \frac{\lambda U}{\delta}$, em que, δ é a diferença entre os raios.

A malha adotada nesse estudo foi construída com espaçamento não uniforme na direção r , a partir da Eq. 3.75 com $r_e = 1.04$ e $\Delta r_0/\delta \approx 2.6587 \times 10^{-4}$. O fator de mobilidade do modelo Giesekus foi fixado em $\alpha = 0.2$, para todas as simulações. De acordo com [Ravanchi et al. \(2007\)](#), a aproximação da solução é válida para pequenos valores de $4\alpha^2 Wi^2 \tau_{r\theta}^{*2}$, e assim, aumentando o valor do fator de mobilidade, α , o intervalo para definir valores aceitáveis para o número de Weissenberg torna-se mais estreito. Condições de contorno rígido são definidas para ambos os cilindros, sendo a velocidade de rotação do cilindro interno definida por uma velocidade uniforme V_c , enquanto o cilindro externo é estacionário.

A figura 23 apresenta a tensão τ_{Wi}^* , obtida numericamente na parede do cilindro interno, e a aproximação da solução analítica proposta por [Ravanchi et al. \(2007\)](#). É possível observar que a porcentagem do erro de truncamento cresce, à medida que o número de Weissenberg aumenta. Esse comportamento está de acordo com os estudos apresentados por [Ravanchi et al. \(2007\)](#).

Figura 23 – Tensão de cisalhamento adimensional τ_{Wi}^* , na parede do cilindro interno. Comparação entre a solução numérica e a aproximação da solução analítica proposta por [Ravanchi et al. \(2007\)](#). A barra de erro representa a porcentagem do erro de truncamento introduzido em [Ravanchi et al. \(2007\)](#).

Por fim, a figura 24 exhibe algumas propriedades adimensionais do escoamento, para alguns números de Weissenberg. Todos os resultados obtidos estão em boa concordância com as aproximações da solução analítica, dentro do respectivo erro de truncamento.

Figura 24 – Simulação numérica dos cilindros concêntricos, com rotação do cilindro interno e modelo viscoelástico Giesekus $\alpha = 0.2$: a) velocidade u_θ , b) $-\tau_{\theta\theta}/\tau_{Wi}^*$, c) τ_{rr} , e d) $-\tau_{r\theta}$.

4.3 Rotação do disco de Zalesak

Um problema de referência muito utilizado para testar os métodos de representação e advecção da interface, é o experimento da rotação do disco de Zalesak. Esse problema foi utilizado por Ausas *et al.* (2011) para testar um método de preservação de massa geométrico para a função LS, por Yokoi (2007) para verificar um esquema de representação de interface baseado no método VOF, e também por Pilliod e Puckett (2004), para verificar métodos do tipo VOF de segunda ordem de precisão, e algoritmos de advecção de passo único e fracionado. O problema consiste em um disco de raio 0.15, centrado no ponto $(0.5, 0.75)$ no instante inicial, com uma fenda de largura 0.05 e altura 0.2479, em um domínio $[0, 1] \times [0, 1]$, vide figura 25. Para verificar o método de advecção, o disco é submetido à um campo de velocidades solenoidal, dado por

$$\begin{aligned} u &= 0.5 - y, \\ v &= x - 0.5. \end{aligned} \quad (4.2)$$

O disco é submetido ao campo solenoidal até o instante de tempo $t_f = 2\pi$, o qual constitui uma rotação completa do disco no domínio. Simulações com diferentes malhas uniformes foram realizadas para verificar a convergência da solução. Considerando n o número de células na fenda do disco (vide figura 25), as seguintes malhas foram utilizadas: $M1$ com $n = 5$ (100×100 células), $M2$ com $n = 10$ (200×200 células), $M3$ com $n = 20$ (400×400 células), e $M4$ com

Figura 25 – Ilustração da geometria do disco de Zalesak.

$n = 40$ (800×800 células). Os resultados são apresentados na figura 26, em que, observa-se a preservação da forma do disco de Zalesak, e a convergência da solução com o refinamento da malha. Alguns resultados desse estudo foram comparados com os resultados de Pilliod e Puckett (2004), para o mesmo método utilizado, reconstrução ELVIRA e advecção geométrica com operador de passo fracionado. A diferença do volume no instante inicial e final, para as diferentes malhas, foram na ordem de 10^{-12} , semelhantes aos resultados apresentados por Pilliod e Puckett (2004). A fim de comparação, a figura 27 exibe o resultado obtido com a malha $M1$, e o resultado apresentado por Pilliod e Puckett (2004) com uma malha de mesmo tamanho. Observa-se boa concordância entre os resultados, evidenciando a correta implementação, e considerável precisão do método numérico para representar e movimentar a interface.

Figura 26 – Convergência da solução do problema da rotação do disco de Zalesak, após uma rotação completa.

4.4 Deformação de um elemento circular de fluido

Um teste adicional para verificar a representação e advecção da interface, é o chamado deformação de um elemento circular de fluido (do inglês, *stretching of a circular fluid element*).

Figura 27 – Resultados da rotação do disco de Zalesak obtidos com a malha $M1$ ($n = 5$), figura (a), e resultado apresentado por Pilliod e Puckett (2004) com mesma malha, figura (b).

Esse experimento consiste em uma porção de fluido, na forma de um círculo de raio 0.2π e centro $(0.5\pi, 0.2(\pi + 1))$, em um domínio $[0, \pi] \times [0, \pi]$. A porção de fluido é submetido a um campo de velocidades solenoidal, dado por

$$\left. \begin{aligned} u(x, y, t) &= \sin(x) \cos(y) \\ v(x, y, t) &= -\cos(x) \sin(y) \end{aligned} \right\} \text{para } 0 \leq t \leq t_f/2, \quad (4.3)$$

$$\left. \begin{aligned} u(x, y, t) &= -\sin(x) \cos(y) \\ v(x, y, t) &= \cos(x) \sin(y) \end{aligned} \right\} \text{para } t_f/2 < t \leq t_f,$$

em que, t_f representa o tempo final da simulação. O campo de velocidades, Eq. 4.3, inverte o fluxo na metade do tempo da simulação, fazendo com que a forma do círculo volte a forma do instante $t = 0s$. Esse é um problema de referência muito utilizado na literatura, por exemplo Rudman (1997), Gerlach *et al.* (2006), Yokoi (2007), Salih e Moulic (2009).

Para realização do estudo foram utilizadas malhas uniformes: $M1$ com 40×40 células ($\Delta x = 0.0785$), $M2$ com 80×80 células ($\Delta x = 0.0393$), $M3$ com 160×160 células ($\Delta x = 0.0196$), e $M4$ com 320×320 células ($\Delta x = 0.00982$). A figura 28 exibe os resultados obtidos com as diferentes malhas, em três instantes de tempo: tempo inicial $t = 0$ s, instante de reversão do campo de velocidades, $t = t_f/2 = 12$ s, e tempo final da simulação $t = t_f = 24$ s. É possível observar que a forma final da interface melhora com o refinamento da malha. Na tabela 1, é apresentado o volume numérico, a ordem de convergência, e o erro entre o volume numérico e exato, calculado como

$$E_m = \frac{V_{\text{exacto}} - V_{\text{num}}}{V_{\text{exacto}}} \times 100\%, \quad (4.4)$$

obtido no tempo final da simulação. O erro do volume para a malha mais fina é na ordem de $10^{-3}\%$, em concordância com outros resultados encontrados na literatura (RUDMAN, 1997; YOKOI, 2007). Podemos verificar também que a ordem de convergência do método numérico está próxima de 2, o que vai de encontro ao esperado dado que teoricamente o método numérico utilizado é de segunda ordem.

Figura 28 – Deformação de um elemento circular de fluido em diferentes tempos de simulação: linha solida $t = 0$ s, linha pontilhada $t = t_f/2 = 12$ s, e linha marcada por cruzes $t = t_f = 24$ s.

Tabela 1 – Resultados numéricos do problema da deformação do elemento de fluido circular: volume numérico V_{num} , erro volumétrico E_m , e ordem de convergência.

malha	V_{num}	$E_m\%$	Ordem
$M1$	1.23742	2.83189×10^{-1}	—
$M2$	1.23946	7.91949×10^{-2}	1.84
$M3$	1.24004	2.11092×10^{-2}	1.90
$M4$	1.24020	5.61272×10^{-3}	1.91

4.5 Two layer plane Couette flow

Para verificar o acoplamento do módulo do resolvidor das equações de Navier-Stokes, com o módulo da representação e advecção da interface, o escoamento de Couette bifásico entre placas paralelas (do inglês *two layer plane Couette flow*) foi utilizado. Esse é um teste importante na construção de um código multifásico, pois verifica a discretização do sistema de equações, em que, envolve o salto entre as propriedades do fluido e o cálculo de vários termos extras, os quais são simplificados no caso de superfície livre. O experimento consiste em um escoamento

laminar com dois fluidos newtonianos incompressíveis entre placas paralelas, sendo que a placa superior desliza com velocidade u_B sobre uma placa fixa, vide Fig. 29.

Figura 29 – Ilustração do experimento *two layer plane Couette flow*.

Escoamentos entre placas paralelas são uma classe de problemas muito importantes em problemas de lubrificação viscosa. Além disso, nessa classe de problemas é possível supor algumas hipóteses no escoamento, possibilitando fazer algumas simplificações nas equações, e obter soluções analíticas. No contexto de escoamentos multifásicos, o *two layer plane Couette flow* é um dos escoamentos cisalhantes mais simples que existe. Devido ao salto do gradiente de velocidades através da interface, causado pela diferença de viscosidade entre as fases do fluido, podem ocorrer oscilações na interface na forma de ondas, ou até transicionar para as instabilidades de Kelvin-Helmholtz (COWARD *et al.*, 1997).

No problema *two layer plane Couette flow*, assumindo um conjunto de hipóteses, é possível derivar uma solução analítica para o campo de velocidades do escoamento. Assim, desprezando a gravidade e a tensão superficial, e supondo um escoamento permanente ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$), completamente desenvolvido ($\frac{\partial}{\partial x} = 0$), sem escoamento na direção y ($v = 0$), o campo de velocidades é dado por Lai *et al.* (2009):

$$\begin{aligned} u_1(y) &= \frac{\mu_2 u_B}{\mu_1 H_2 + \mu_2 H_1} y, & \text{em } 0 \leq y \leq H_1 \\ u_2(y) &= u_B - \frac{\mu_1 u_B}{\mu_1 H_2 + \mu_2 H_1} (H_1 + H_2 - y), & \text{em } H_1 \leq y \leq H_1 + H_2. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nos testes realizados com esse experimento, os seguintes parâmetros foram considerados: $H_1 = H_2 = 0.5$ m, $u_B = 1$ m/s, $\rho_1 = 200$ kg/m³, $\rho_2 = 100$ kg/m³, $\mu_1 = 0.5$ N·s/m² e $\mu_2 = 1$ N·s/m². Para verificar a convergência da solução, as seguintes malhas uniformes foram adotadas: 32×32 células, 64×64 células, 128×128 células, 256×256 células, e 512×512 células. A figura 30 exibe a comparação entre o perfil de velocidade u , obtido com as diferentes malhas, e o perfil de velocidade analítico, Eq. 4.5. Na tabela 2 é apresentado o erro relativo, onde é observada a convergência da solução com o refinamento da malha. Esses resultados comprovam a correta implementação do método da projeção, para resolver escoamentos multifásicos.

Tabela 2 – Erro relativo da solução numérica do experimento *two layer plane Couette flow*.

Malhas	$E(u)$
32×32	2.9867×10^{-3}
64×64	1.4986×10^{-3}
128×128	7.3736×10^{-4}
256×256	3.5615×10^{-4}
512×512	1.7464×10^{-4}

Figura 30 – Solução numérica do experimento *two layer plane Couette flow*. Comparação dos resultados obtidos para o perfil de velocidade com a solução analítica.

4.6 Rotação do cilindro

Para verificar a discretização das equações em coordenadas axissimétricas, do sistema de equações envolvendo o salto entre as propriedades dos fluidos, e dos métodos de representação e advecção da interface, o problema da rotação do cilindro foi adotado. Esse experimento consiste em um recipiente cilíndrico com dois fluidos newtonianos de densidades diferentes, semelhante ao efeito de Weissenberg, mas sem a presença do bastão. O recipiente gira com velocidade angular constante ω , e devido à força centrífuga, a interface entre os fluidos forma uma parábola (vide figura 31). Esse problema possui solução analítica para a forma da interface, o qual possibilita verificar a precisão da solução obtida em coordenadas axissimétricas.

Escoamentos transientes entre fluidos imiscíveis, dentro de geometrias cilíndricas, tem muito interesse industrial, devido aos vários problemas envolvendo esse tipo de configuração, e interesse acadêmico, no desenvolvimento de técnicas numéricas e ensaios experimentais, para analisar a dinâmica do escoamento. Das aplicações industriais, podemos mencionar processos de separação por centrifugação, processos de mistura, biorreatores, etc. Estudos experimentais apresentados por [Fujimoto e Takeda \(2009\)](#), investigaram o comportamento da interface entre

dois fluidos imiscíveis, induzidos pela rotação da tampa do cilindro. Semelhante ao efeito de Weissenberg, [Bonn et al. \(2004\)](#) conseguiu capturar experimentalmente o mesmo efeito, mas para fluidos newtonianos. No experimento realizado por [Bonn et al. \(2004\)](#), o efeito da escalada do fluido foi observado devido à ocorrência das instabilidades de Taylor-Couette entre dois fluidos viscosos. Dentre os trabalhos numéricos, podemos mencionar [Brady et al. \(2012\)](#), o qual realizou um estudo do problema da rotação do cilindro, em que, investigou a influência da tensão superficial, e casos com grandes deformações na interface. No caso de fluidos viscoelásticos, podemos mencionar [Figueiredo et al. \(2016\)](#), o qual realizou um estudo detalhado sobre o efeito de Weissenberg envolvendo altos números de Wi .

Considere um cilindro de raio R que gira com velocidade angular ω , preenchido com dois fluidos newtonianos, onde a interface entre os fluidos no instante inicial está a uma altura h_0 em relação ao fundo do cilindro, conforme mostra a figura 31. A solução analítica da forma da interface pode ser obtida assumindo as seguintes hipóteses: escoamento permanente ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$), completamente desenvolvido, incompressível, axissimétrico ($\frac{\partial}{\partial \theta} = 0$), e sem a influência da tensão superficial. Assim, supondo válidas essas hipóteses, temos que a forma analítica da interface é dada por

$$z(r)_{exata} = h_0 - \frac{(\omega R)^2}{2g} \left[\frac{1}{2} - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right], \quad (4.6)$$

em que, $z(r)_{exata}$ é a distância da interface até o fundo do recipiente. Mais detalhes sobre a solução analítica e soluções numéricas desse experimento, podem ser encontrados em [Brady et al. \(2012\)](#).

Figura 31 – Ilustração do experimento da rotação do cilindro.

Os parâmetros utilizados nessa verificação foram: $R = 0.5$ m, $h_0 = 0.5$ m, altura do

recipiente igual à $2R$, $\omega = 2$ rad/s, $\rho_1 = 1.225$ kg/m³, $\rho_2 = 1000$ kg/m³, $\mu_1 = 0.02$ N·s/m² e $\mu_2 = 4$ N·s/m². Malhas uniformes foram utilizadas: 30×60 células, 60×120 células, 120×240 células e 240×480 células. A figura 32a exibe a forma da interface para as diferentes malhas, e a comparação com a solução analítica, Eq. 4.6. É possível observar a excelente concordância dos resultados numéricos com a solução analítica. Além disso, na figura 32b é apresentado o erro da forma da interface, calculado pelas seguintes normas

$$E_2(z) = \sqrt{\frac{\sum_r (z(r) - z(r)_{exacta})^2}{\sum_r z(r)_{exata}}}, \quad (4.7)$$

$$E_\infty(z) = \max_r |z(r) - z(r)_{exata}|. \quad (4.8)$$

É possível observar convergência de primeira ordem do erro. O método ELVIRA combinando com advecção geométrica atinge segunda de ordem precisão se a interface for suave, caso contrário a precisão do método reduz para primeira ordem. Segundo Puckett *et al.* (1997) e Popinet (2009), a ordem de convergência da interface também é influenciada pela ordem de convergência do campo de velocidades, o qual pode reduzir para primeira ordem devido ao salto da viscosidade na interface.

Figura 32 – Solução numérica da rotação do cilindro: a) comparação entre solução numérica e solução analítica, da forma da interface, b) erro da forma da interface, obtido com as normas E_2 e E_∞ .

4.7 Gota estática

O problema da gota estática é um experimento de referência essencial na verificação de formulações para o cálculo das forças interfaciais. O problema consiste em uma gota estática

centrada em um domínio quadrado (ou cúbico no caso 3D), sem a influência da aceleração da gravidade. A partir dessas hipóteses, o balanço de forças na interface se reduz à

$$\Delta p = \sigma \kappa, \quad (4.9)$$

em que, a curvatura exata é conhecida, logo é possível obter o valor exato do salto da pressão, também conhecida com a pressão de Laplace. Nesse problema, perturbações não físicas podem surgir na solução numérica, as chamadas correntes “espúrias” ou “parasitas” (ABADIE *et al.*, 2015). Esse comportamento numérico se deve à dificuldade de obter um balanço exato na discretização entre a força da tensão superficial e o gradiente de pressão (FRANCOIS *et al.*, 2006). Além disso, segundo Francois *et al.* (2006), a magnitude das correntes espúrias também são influenciadas pela precisão da estimativa da curvatura.

O problema da gota estática é encontrado em muitos trabalhos na literatura, para verificar melhorias e novas formulações no balanço de força na interface, como por exemplo em Renardy e Renardy (2002), os quais propuseram o método PROST, em que, efetivamente elimina as correntes espúrias, e apresenta convergência espacial. Ainda no contexto do método VOF, podemos mencionar Francois *et al.* (2006), onde propuseram um algoritmo de balanço de força, baseado em modelos de tensão superficial contínuo (CSF) e *sharp* (SSF), enquanto Popinet (2009) apresentou um resolvidor adaptativo de escoamentos interfaciais, baseado no balanço de força CSF. Ambos os trabalhos utilizaram reconstrução geométrica para representar a interface, e o método HF para estimar a curvatura. De acordo com Francois *et al.* (2006), os métodos CSF e SSF, combinados com o método HF, apresentaram a mesma ordem de magnitude das correntes espúrias. Segundo Popinet (2009), a combinação entre os métodos CSF e HF, é suficiente para obter um equilíbrio “exato”, pois para tempos de simulação suficientemente grandes, a magnitude das correntes espúrias tendem para o zero da máquina. O tempo mínimo de simulação sugerido por Popinet (2009), para fluidos viscosos, é definido pela seguinte escala de tempo

$$T_\mu = \frac{D^2 \rho_g}{\mu_g}, \quad (4.10)$$

em que, ρ_g , μ_g e D , são respectivamente, a densidade, viscosidade, e diâmetro da gota. No caso de fluidos invíscidos, uma escala de tempo e velocidade, são definidos, respectivamente, por

$$T_\sigma = \sqrt{\frac{\rho_g D^3}{\sigma}}, \quad e \quad U_\sigma = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_g D}}. \quad (4.11)$$

As duas escalas de tempo são relacionadas como

$$T_\mu = \sqrt{La} T_\sigma = \frac{1}{Oh} T_\sigma, \quad (4.12)$$

em que, $La = \frac{\rho_g D \sigma}{\mu_g^2}$ é o número de Laplace, e $Oh = \frac{\mu_g}{\sqrt{\rho_g D \sigma}}$ é o número de Ohnesorge (MCKINLEY; RENARDY, 2011).

Seguindo a análise do problema da gota estática proposta por Popinet (2009), via escalas de tempo e velocidade, Schroeder *et al.* (2012) verificaram o método proposto para calcular as forças interfaciais via formulação semi-implícita, no contexto do método *front tracking*, com uma malha do tipo MAC. Mais recente, Abadie *et al.* (2015) utilizou a análise proposta por Popinet (2009), para comparar a precisão e convergência das soluções obtidas com os métodos LS e VOF, combinados com o balanço de força CSF e SSF, e diferentes métodos para a estimativa da curvatura, entre eles o método HF. A combinação entre os métodos VOF, CSF, HF, e um esquema de advecção geométrica preciso, demonstrou ser um dos melhores algoritmo para resolver escoamentos interfaciais, segundo os resultados apresentados por Abadie *et al.* (2015).

Nessa seção, para estimar a precisão dos diferentes métodos envolvidos no cálculo das forças interfaciais, os testes foram divididos em dois casos: convergência do cálculo da curvatura e precisão do algoritmo de balanço de forças na interface. Uma gota com $D = 0.8$ cm, foi centrada em um domínio quadrado de lado duas vezes o diâmetro. Malhas uniformes foram adotadas para realizar esse estudo: $M1$ com $D/\Delta x = 10$ células, $M2$ com $D/\Delta x = 20$ células, $M3$ com $D/\Delta x = 40$ células, $M4$ com $D/\Delta x = 80$ células, e $M5$ com $D/\Delta x = 160$ células.

4.7.1 Cálculo da curvatura

Nesse estudo será verificada a ordem de convergência do cálculo da curvatura pelo método HF. Segundo Cummins *et al.* (2005), a curvatura estimada pelo método HF apresenta segunda ordem de precisão, desde que a fração de volume seja exata. Para verificar a implementação do método HF, as normas L_2 e L_∞ , foram adotadas para estimar o erro

$$L_2(\kappa) = \sqrt{\frac{\sum_{i,j} (\kappa_{i,j} - \kappa_{exata})^2}{N}}, \quad (4.13)$$

$$L_\infty(\kappa) = \max_{i,j} |\kappa_{i,j} - \kappa_{exata}|, \quad (4.14)$$

em que, i, j representam os índices das células de interface, e N a quantidade de células de interface. É executado somente um ciclo do algoritmo computacional para estimar o valor da curvatura, sendo que o método da projeção e a advecção da interface não são calculados, apenas a reconstrução ELVIRA é realizada para fornecer informações para o método HF. A figura 33 exibe o erro calculado por ambas as normas com as diferentes malhas. É possível observar convergência de segunda ordem, como desejado. Além disso, a figura 34 exibe o erro da estimativa da curvatura para cada célula com as diferentes malhas. À medida que a normal à interface se aproxima da direção dos eixos coordenados, o erro assume valor mínimo, ao passo

que quando a interface é inclinada com um ângulo de 45° , o erro assume valor máximo. Esse mesmo comportamento foi observado por [Francois *et al.* \(2006\)](#), [Popinet \(2009\)](#).

Figura 33 – Convergência do erro absoluto do cálculo da curvatura pelo método HF, no problema da gota estática.

Figura 34 – Erro da estimativa da curvatura em cada célula computacional no problema da gota estática.

4.7.2 Balanço de força CSF

Após a verificação do cálculo da curvatura, nos resta verificar o balanço de força calculado pelo método CSF. Para realizar uma verificação minuciosa, esse teste foi subdividido em três casos. No primeiro caso foi imposto o valor exato da curvatura na Eq. 3.46, $\kappa_{exata} = 2/D$, para verificar a discretização da tensão superficial com o gradiente de pressão, enquanto no segundo caso a curvatura foi estimada com o método HF. Já no terceiro caso, o caso dois foi reproduzido com uma razão significativa entre as densidades e viscosidades de cada fase de fluido.

De acordo com o estudo realizado por [Lafaurie *et al.* \(1994\)](#), as correntes espúrias no problema da gota estática, assumem valor máximo de $c\sigma/\mu_g$, em que c é uma constante na

ordem de 10^{-2} , e σ/μ_g define uma escala de velocidade, a qual vamos chamar de U_μ . Além disso, [Lafaurie et al. \(1994\)](#) define uma escala de comprimento visco-capilar, $R_v = \mu_g^2/(\rho_g\sigma)$, sendo que para valores de $D/2R_v > 10$, a constante c pode oscilar um pouco no tempo. Esse comportamento também foi observado em [Abadie et al. \(2015\)](#), e no presente estudo. A razão $D/2R_v$ é proporcional ao número de Laplace ($La \propto Re$), e segundo [Renardy e Renardy \(2002\)](#), altos números de Laplace podem originar instabilidades no escoamento.

No presente estudo, os seguintes parâmetros foram adotados: fluido newtoniano, $\sigma = 73$ dyn/cm, e $\rho_g = 1$ g/cm³. A viscosidade é calculada em função do número de Laplace, o qual assumiu vários valores no intervalo de $[0.12, 12000]$. No intervalo onde o número de Laplace é escolhido, é possível observar o comportamento da amplitude das correntes espúrias com várias escalas de comprimento R_v . A menos que sejam definidos outros valores, os testes foram realizados com $\rho_g/\rho_m = 1$ e $\mu_g/\mu_m = 1$, em que, ρ_m e μ_m representam a densidade e viscosidade do meio, respectivamente. Semelhante aos estudos realizados por [Francois et al. \(2006\)](#), [Abadie et al. \(2015\)](#), a análise do salto da pressão é mensurada pelas seguintes medidas:

- ΔP_{total} : é a diferença entre a média do valor da pressão dentro da gota ($f \geq 0.5$), e a média da pressão fora da gota ($f < 0.5$);
- Δp_{max} : é a diferença entre o valor máximo e mínimo da pressão.

O erro relativo é calculado como

$$E(\Delta p)_n = \frac{|\Delta p_n - \Delta p_{exata}|}{\Delta p_{exata}}, \quad (4.15)$$

onde, o subscrito n representa a medida do salto da pressão, *total* ou *max*, e Δp_{exata} é o salto da pressão exato, calculado via Eq. 4.9 impondo o valor exato para a curvatura.

No primeiro caso, onde o valor exato da curvatura é imposto na solução do problema, foi investigado a precisão e convergência do balanço de força com $La = 1.2, 120$, e 12000 . As figuras 35a e 35b, exibem a evolução temporal normalizada por ambas as escalas de tempo, T_μ e T_σ , da amplitude das correntes espúrias $\left(\|U\|_\infty = \max_{i,j} \sqrt{u_{i,j}^2 + v_{i,j}^2} \right)$ normalizada pela escala de velocidade U_μ . É possível observar um decaimento assintótico, em que, após um certo instante de tempo, decresce com uma taxa muito menor. Segundo [Popinet \(2009\)](#), esse comportamento é uma evidência clara de que o método CSF fornece um balanço de força exato para a velocidade, e que o erro inicial é devido as condições iniciais impostas. A figura 35c exibe a convergência espacial da amplitude das correntes espúrias, enquanto que a figura 35d exibe a convergência espacial do erro relativo do salto da pressão Δp_{total} . É possível observar que o erro relativo do salto da pressão é o mesmo para qualquer valor do número de Laplace. No entanto, o erro relativo mensurado por Δp_{total} é muito maior do que o erro relativo mensurado por Δp_{max} , como pode ser observado na tabela 3. Esse comportamento é discutido por [Francois et al. \(2006\)](#) e, segundo os

autores o método CSF gera uma distribuição de pressão diferente na zona de transição. Por outro lado, o erro relativo mensurado por $E(\Delta p)_{max}$, tende ao zero de precisão da máquina. Segundo [Francois et al. \(2006\)](#), se a discretização do gradiente de pressão e da tensão superficial não forem bem calculados, o erro relativo $E(\Delta p)_{max}$ pode não tender ao zero da máquina, devido a picos de máximos e mínimos, no valor da pressão na região da interface. Além disso, esses picos no valor da pressão podem ser amplificados com o refinamento da malha ([KLOSTERMANN et al., 2013](#)). A figura 36 exibe o salto da pressão normalizado pela pressão de Laplace, Eq. 4.9, para $La = 12000$ em todo domínio. Para observar com detalhe o que acontece com a distribuição da pressão na região da interface, foram realizados cortes na gota em duas direções diferentes, os quais são exibidos na figura 37. É possível observar a diferença da distribuição da pressão entre as direções dos cortes, o que comprova a discussão sobre a magnitude do erro relativo mensurado por Δp_{total} .

Figura 35 – Resultados numéricos do problema da gota estática, com valor exato imposto para a curvatura, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$: a) $\|U\|_{\infty}/U_{\mu}$ com o tempo adimensionalizado por T_{μ} , na malha M3, b) $\|U\|_{\infty}/U_{\mu}$ com o tempo adimensionalizado por T_{σ} , na malha M3, c) convergência espacial da amplitude das correntes espúrias no instante de tempo $t/T_{\mu} \approx 0.5$, e d) $E(\Delta p)_{total}$.

No segundo caso, o experimento foi realizado com o valor da curvatura estimado pelo método HF. Esse teste é importante para verificar a influência do erro do cálculo da curvatura no balanço de forças da interface. No estudo apresentado por [Francois et al. \(2006\)](#), os autores mostraram que a magnitude das correntes espúrias pode crescer rapidamente no tempo, caso a curvatura não seja calculada por um método preciso. Os parâmetros geométricos e do fluido, foram os mesmos da verificação anterior, onde mais três casos foram adicionados, $La = 0.12, 12$

Tabela 3 – Resultados numéricos do problema da gota estática com curvatura exata, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, no instante de tempo $t/T_\mu \approx 1$: $E(\Delta p)_{total}$ e $E(\Delta p)_{max}$.

Malha	$La = 1.2$		$La = 120$		$La = 12000$	
	$E(\Delta p)_{total}$	$E(\Delta p)_{max}$	$E(\Delta p)_{total}$	$E(\Delta p)_{max}$	$E(\Delta p)_{total}$	$E(\Delta p)_{max}$
$M1$	5.79×10^{-2}	1.34×10^{-11}	5.59×10^{-2}	6.92×10^{-14}	5.79×10^{-2}	6.23×10^{-16}
$M2$	2.92×10^{-2}	6.34×10^{-13}	2.92×10^{-2}	3.12×10^{-15}	2.92×10^{-2}	3.11×10^{-16}
$M3$	1.63×10^{-2}	4.42×10^{-14}	1.63×10^{-2}	1.56×10^{-16}	1.63×10^{-2}	1.56×10^{-16}
$M4$	6.71×10^{-3}	7.48×10^{-15}	6.71×10^{-3}	1.56×10^{-16}	6.71×10^{-3}	1.56×10^{-16}

Figura 36 – Resultados numéricos do problema da gota estática, obtidos com várias malhas. Salto da pressão normalizado, com valor exato imposto para a curvatura, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, e $La = 12000$.

Figura 37 – Convergência espacial do salto da pressão normalizado no problema da gota estática, com valor exato imposto para a curvatura, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, e $La = 12000$: a) corte realizado na direção do vetor $(1,0)$, e b) corte realizado na direção do vetor $(1,1)$.

e 1200. A malha $M3$ foi adotada para realizar esse estudo. Antes de apresentar os resultados, gostaria de relatar que nos casos com $La \geq 120$ ($D/2R_v > 10$), a gota movimentou dentro do domínio devido à influência das correntes espúrias. No entanto, a magnitude das correntes espúrias permaneceu limitada abaixo da estimativa proposta por Lafaurie *et al.* (1994), com a constante c na ordem de 10^{-5} . Para contornar esse problema, todos os resultados apresentados a seguir foram obtidos com a estratégia utilizada por Popinet (2009), Abadie *et al.* (2015), em que, apenas um quarto da gota foi simulada, com fronteira de simetria imposta nos eixos que cruzam o centro da gota.

A figura 38a exibe a evolução temporal, normalizada por T_μ , da amplitude das correntes espúrias, normalizada por U_μ . É possível observar que quanto maior o valor de La , mais rápido a magnitude das correntes espúrias decresce em função de t/T_μ . Na figura 38b é exibida a evolução temporal da intensidade das correntes espúrias, com o tempo normalizado por T_σ . Essa normalização do tempo fornece informações mais detalhadas do comportamento das correntes espúrias. Diferente da figura 35b, a qual exibe os resultados obtidos com o valor exato da curvatura, é observado na figura 38b flutuações na magnitude da velocidade, para valores de $La \geq 120$. Segundo Lafaurie *et al.* (1994), essas flutuações se tornam maiores e mais irregulares à medida que $D/2R_v$ aumenta (equivalentemente, com o aumento de La), e relaciona esse fato com o aumento do número de Reynolds. Já Popinet (2009) relaciona essas oscilações com ondas capilares, as quais são causadas pelo erro da estimativa da curvatura, e condições iniciais impostas. No entanto, para tempos de simulação maiores do que T_μ , o algoritmo adotado praticamente elimina as correntes espúrias para $La \geq 120$. Por outro lado, para baixos valores de La , a intensidade das correntes espúrias decresce lentamente ao longo do tempo. De acordo com Lafaurie *et al.* (1994), para pequenos valores de La os efeitos capilares se tornam desprezíveis, e as correntes espúrias passam a ter pouca influência, desde que a dinâmica do escoamento seja controlada pelas forças viscosas. A figura 38c mostra a diferença da intensidade das correntes espúrias em função do número de Laplace, em um instante de tempo $t/T_\mu \approx 0.3$. O número de Laplace, e o cálculo da curvatura pelo método HF, não têm influência sobre o salto da pressão,

como pode ser observado na figura 38d. Segundo [Francois et al. \(2006\)](#), o modelo de tensão superficial é a principal influência na distribuição e no erro do salto da pressão.

Figura 38 – Influência do número de Laplace no problema da gota estática, com a curvatura estimada pelo método HF, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1$, $\mu_g/\mu_m = 1$, e malha M3: a) $\|U\|_{\infty}/U_{\mu}$ com o tempo adimensionalizado por T_{μ} , b) $\|U\|_{\infty}/U_{\mu}$ com o tempo adimensionalizado por T_{σ} , c) intensidade das correntes espúrias no instante de tempo $t/T_{\mu} \approx 0.3$, e d) salto da pressão normalizado (corte na direção do vetor $(1,0)$).

No ultimo teste realizado com o problema da gota estática, o comportamento das correntes espúrias foi investigado para vários valores de La , com curvatura calculada pelo método HF, malha M3, e uma razão significativa entre as propriedades dos fluidos, $\rho_g/\rho_m = 1000$ e $\mu_g/\mu_m = 100$. A figura 39 exibe a evolução da intensidade das correntes espúrias, normalizadas por ambas as escalas de tempo, T_{μ} e T_{σ} . Para baixos valores de La , a razão entre as propriedades do fluido não teve mudança significativa no comportamento da velocidade. Já para altos valores de La , a intensidade das correntes espúrias teve um ligeiro aumento. Em uma comparação direta entre as figuras 38b e 39b, também é possível observar um ligeiro aumento na frequência das flutuações. De acordo com o estudo realizado por [Francois et al. \(2006\)](#), a razão entre as viscosidades tem pouca influência na mudança do comportamento das correntes espúrias. Sendo assim, a razão entre as densidades é o fator mais influente na mudança do comportamento da velocidade. Por outro lado, tanto a razão entre as densidades e a razão entre as viscosidades, não provocaram mudanças no comportamento do salto da pressão, como pode ser comprovado na figura 40.

O comportamento de todos os resultados apresentados nessa seção estão em excelente concordância com os resultados apresentados em todos os artigos citados anteriormente. Isso

evidencia a boa implementação do algoritmo computacional. Além disso, esses testes foram muito importantes para estimar a precisão, e convergência da solução, obtida com a combinação do método ELVIRA, HF, e CSF. Na próxima seção será apresentada uma verificação adicional das forças interfaciais, onde a dinâmica do escoamento é adicionada ao problema.

Figura 39 – Influência do número de Laplace no problema da gota estática, com a curvatura estimada pelo método HF, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1000$, $\mu_g/\mu_m = 100$, e malha M3: a) $\|U\|_\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_μ , b) $\|U\|_\infty/U_\mu$ com o tempo adimensionalizado por T_σ .

Figura 40 – Salto da pressão normalizado, obtido no problema da gota estática com curvatura estimada pelo método HF, $\sigma = 73$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\rho_g/\rho_m = 1000$, $\mu_g/\mu_m = 100$, e malha M3.

4.8 Oscilação da gota

Nessa seção, é investigado o problema da oscilação natural de uma gota. O problema considera uma perturbação inicial em uma gota newtoniana esférica, e acompanha a oscilação na

forma da gota ao longo do tempo, devido à influência da força da tensão superficial agindo para minimizar a interface. Esse problema foi estudado por [Montefusco et al. \(2014\)](#), utilizando o método ALE, e também por [Watanabe \(2008\)](#), utilizando um método LS conservativo. Esse teste é uma verificação adicional da precisão e implementação, do balanço de força da tensão superficial, realizado pelo método CSF, e do cálculo da curvatura pelo método HF. Esse teste é essencial para verificar a construção, e implementação de uma técnica de balanço de força da interface, pois verifica o cálculo da força da tensão superficial junto com a dinâmica do escoamento.

A forma das oscilações é assumida ser axissimétrica. Assim, considerando um sistema de coordenadas esféricas $(r; \psi; \theta)$, a forma inicial da deformação, $r(\theta)$, pode ser escrita em função do polinômio de Legendre, $P_n(\cos \theta)$, de ordem 2 e amplitude 10% do raio ($\varepsilon = 0.1$):

$$r(\theta) = R_0 [1 + \varepsilon P_n(\cos \theta)], \quad (4.16)$$

em que, R_0 é o raio da gota sem perturbação. A fase externa, envolvendo a gota, é considerada um fluido newtoniano com $\rho \rightarrow 0$ e $\mu \rightarrow 0$. A solução linear generalizada do problema, incluindo a influência da fase externa, foi apresentada por [Lamb \(1932\)](#). Esta solução descreve a deformação instantânea da forma de gota, por uma série infinita de superfícies harmônicas esféricas, onde cada termo da função corresponde a um modo de oscilação natural independente.

Para verificar a convergência da malha, três malhas uniformes foram adotadas: $M1$ com 64×64 células ($\Delta r = \Delta z = 1/64$), $M2$ com 128×128 células ($\Delta r = \Delta z = 1/128$), e $M3$ com 256×256 células ($\Delta r = \Delta z = 1/256$). O passo temporal foi determinado automaticamente, satisfazendo a condição CFL e a restrição devido à tensão superficial, enquanto a restrição de estabilidade parabólica foi eliminada pelo uso dos métodos semi-implícitos.

O número de Ohnesorge, $Oh = \mu / \sqrt{\rho R \sigma}$, foi fixado em 0.0195. Para pequenos valores de Oh , a gota exibe amortecimento suave nas oscilações, com período e decaimento no tempo, estimados por $\rho \pi^2 R^3 / (2\sigma)$ e $\rho R^2 / (5\mu)$, respectivamente. A amplitude de deformação instantânea pode ser aproximada por uma solução pseudo-analítica ([MONTEFUSCOLO et al., 2014](#)), a qual é utilizada para verificação dos resultados. Em todos os testes, condições de simetria foram adotadas em $r = 0$ e $z = 0$, enquanto condições de Neumann homogêneas foram impostas para todos os campos, na fronteira superior e à direita.

A evolução temporal da amplitude numérica e teórica é apresentada na figura 41, junto com os resultados obtidos com a teoria linear de [Lamb \(1932\)](#). É possível observar que para todas as malhas, os resultados numéricos estão em boa concordância com os resultados teóricos, com uma correspondência perfeita com a teoria linear de [Lamb \(1932\)](#). O período adimensional das oscilações numérica e teórica são $T = 114.68$ e $T = 113.92$, respectivamente. Dado que a solução pseudo-analítica é válida apenas para amplitudes infinitesimais ([MONTEFUSCOLO et al., 2014](#)), algumas diferenças são observadas, que se refletem em uma pequena mudança nas

frequências das oscilações para um longo tempo de simulação.

Figura 41 – Evolução temporal numérica e teórica (e [Lamb \(1932\)](#), teoria linear do decaimento da amplitude) da oscilação natural de uma gota.

4.9 Ângulo de contato estático

Com o proposito de verificar a implementação e precisão do método adotado para calcular a condição de contorno para a função altura, em células vizinhas ao contorno rígido, o problema do ângulo de contato estático foi investigado. Esse problema é muito utilizado na literatura para verificar a precisão de novas formulações, como podemos mencionar [Montefusco \(2012\)](#), onde verificou um método do tipo ALE para simulação de escoamentos com linhas de contato dinâmica, [Afkhami e Bussmann \(2009\)](#) para verificar uma metodologia 3D baseada no método HF/VOF, para o estudo de escoamentos capilares, e [Luo et al. \(2016\)](#) para verificar condições de contorno impostas ao método LS, no estudo do comportamento de linhas de contato.

O experimento do ângulo de contato estático consiste em uma gota newtoniana semi-circular (no caso 2D, ou semi-esférica no caso 3D) apoiada em uma superfície rígida, inicialmente com ângulo de contato 90° (vide figura 42a). A gota se espalha na superfície, devido à influência do ângulo de contato e da aceleração da gravidade, até atingir o repouso. Os parâmetros adotados nesse estudo são similares aos parâmetros adotados por [Montefusco \(2012\)](#), os quais são apresentados na forma dimensional: raio inicial da gota $R = 1$ cm, $\sigma = 1.5$ dyn/cm, $\rho_g = 1$ g/cm³, $\mu_g = 0.5$ poise, $\mathbf{n}_w = (0, 1)$, e aceleração da gravidade $g_z = 1$ cm/s². As propriedades da fase externa são definidas de tal forma que $\rho_g/\rho_m = 800$ e $\mu_g/\mu_m = 100$, em que, o subscrito g e m representam as fases da gota e do meio, respectivamente. Simulações foram realizadas para ambos os sistemas de coordenadas, cartesianos e cilíndricos. A malha adotada para esse estudo utiliza um espaçamento uniforme na direção x com $\Delta x = 0.0625$ cm (respectivamente, direção r no caso axissimétrico), e espaçamento não uniforme na direção z , definido pela progressão geométrica, Eq. 3.75, com $r_e = 1.05$ e $\Delta z_0 = 0.01$ cm (vide figura 42b). Devido à geometria do

problema é possível resolver apenas metade do domínio computacional, impondo fronteira de simetria no centro da gota, para os casos 2D e axissimétrico.

Figura 42 – Experimento do equilíbrio da gota sobre uma superfície rígida.

A forma final da gota é determinada pelo valor do ângulo de contato, e pelo número de Eötvös, $E_o = \frac{|\rho_g - \rho_m| g R^2}{\sigma}$, o qual relaciona a força gravitacional com a força da tensão superficial. Segundo [Luo *et al.* \(2016\)](#), nos casos em que a gravidade é desprezada ($E_o = 0$), o molhamento da gota para o caso 2D é medido pela seguinte expressão:

$$l_s = R \sin \theta_e \sqrt{\frac{\pi/2}{\theta_e - \sin \theta_e \cos \theta_e}}. \quad (4.17)$$

Em [Pozrikidis \(2009\)](#), é derivado um sistema com duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, para determinar a forma final da gota, nos casos 2D e axissimétrico. Além disso, também é fornecido um código em *Matlab* para resolver tal sistema, o qual utiliza um método de Runge-Kutta de quarta ordem. Para verificar a metodologia implementada envolvendo pouco, médio, e grande molhamento, o estudo realizado considerou os seguintes valores para o ângulo de contato estático, $\theta_e = 30^\circ, 45^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ, 112.5^\circ, 135^\circ, 157.5^\circ$, e 170° . A figura 43 exibe a comparação entre a solução obtida e a solução do sistema de EDO, para a forma da gota em equilíbrio, enquanto a figura 44 exibe o comprimento do molhamento da gota. É possível observar que a solução obtida apresenta excelente concordância com os resultados derivados do sistema de EDO, para ambos os sistemas de coordenadas.

4.10 Impacto da gota axissimétrica

Uma validação da implementação de escoamentos axissimétricos viscoelásticos multifásicos é realizada nesta seção. No problema do impacto da gota é calculada a evolução temporal da forma de uma gota que cai sob a ação da gravidade até atingir uma superfície rígida. Esse

(a) Equilíbrio da gota 2D

(b) Equilíbrio da gota axissimétrica

Figura 43 – Resultados numéricos da variação do ângulo de contato estático com $Eo = 0.6658$. Comparação da forma da gota com os resultados derivados da solução do sistema de EDO (POZRIKIDIS, 2009).

problema é muito observado em muitas aplicações industriais, como na indústria de pintura automotiva, em processos de impressão, e na pulverização agrícola. Nessa seção, será apresentado uma comparação entre os resultados obtidos para esse problema, e os resultados da literatura (XU *et al.*, 2012; FIGUEIREDO *et al.*, 2014), utilizando o modelo de fluido Oldroyd-B. A figura 45 ilustra a configuração inicial do problema.

Figura 44 – Resultados numéricos do tamanho do molhamento para a variação do ângulo de contato estático com $Eu = 0.6658$. Comparação com os resultados obtidos pela solução do sistema de EDO (POZRIKIDIS, 2009).

Figura 45 – Ilustração do experimento numérico do problema do impacto da gota.

Os parâmetros geométricos utilizados nesse estudo foram: diâmetro da gota $D = 0.02$ m, velocidade inicial da gota $u_z = -1$ m/s, aceleração da gravidade $g = -9.81$ m/s², e distância do centro da gota até a superfície rígida igual a $H = 0.04$ m. Para verificar a implementação do código, o modelo Oldroyd-B foi adotado, e os seguintes parâmetros fixados: $\rho = 1000$ kg/m³, $\mu = 4$ Pa.s, $\beta = 0.1$, e $\lambda = 0.02$ s. Isso resulta em $Re = 5$, $Wi = 1$, e número de Froude $Fr = \frac{u_z}{\sqrt{gD}} \approx 2.26$. A fase externa é considerada como sendo ar. Condição de contorno de simetria é imposta em $r = 0$, enquanto condição de contorno rígido é imposta na superfície de impacto da

gota, em $z = 0$.

Três malhas foram utilizadas: $M1$ com $\Delta r = \Delta z = 5 \times 10^{-4}$ m, $M2$ com $\Delta r = \Delta z = 3.33 \times 10^{-4}$ m, e $M3$ com $\Delta r = \Delta z = 2.5 \times 10^{-4}$ m. A figura 46 exibe a comparação entre os resultados obtidos, e os resultados da literatura. Os resultados obtidos exibem boa convergência para o refinamento da malha, e resultados qualitativos semelhantes aos resultados encontrados na literatura com outros métodos. Na figura 47 é apresentada uma visualização 3D da evolução no tempo do espalhamento da gota.

Figura 46 – Resultados numéricos da variação no tempo do espalhamento da gota viscoelástica com $Re = 5$, $Wi = 1$, $\beta = 0.1$, e $Fr = 2.26$.

4.11 Deformação da gota

Por fim, nessa seção, é realizada uma validação da implementação da metodologia adotada, para resolver escoamentos viscoelásticos multifásicos. Nesse problema, o sistema de coordenadas cartesianas é utilizado, para estudo do comportamento da deformação de uma gota sob a influência do escoamento cisalhante de Couette. Todas as combinações possíveis entre as duas fases de fluido são consideradas: (i) gota newtoniana em um fluido newtoniano (NN), (ii) gota viscoelástica em um fluido newtoniano (VN), (iii) gota newtoniana em um fluido viscoelástico (NV), e (iv) gota viscoelástica em um fluido viscoelástico (VV). Estudos similares foram realizados por Pillapakkam e Singh (2001), utilizando um método LS, por Habla *et al.* (2011), utilizando o código aberto openFOAM, com o método VOF, e por Chinyoka *et al.* (2005) e Khismatullin *et al.* (2006), apresentando resultados 2D e 3D, respectivamente, com um método baseado no método VOF, método PROST, para representação da interface e cálculo das forças interfaciais.

Figura 47 – Visualização 3D da evolução temporal do espalhamento da gota viscoelástica, com $Re = 5$, $Wi = 1$, $\beta = 0.1$, e $Fr = 2.26$.

A figura 48a) ilustra a configuração inicial do problema da deformação da gota. Nesse problema, uma gota circular de raio R_d , é inserida no centro de um domínio retangular, e submetida à um escoamento de Couette entre placas paralelas, em que, ambas as placas se movem, em direções opostas com velocidades V_B e V_T . A placa inferior é localizada em $z = 0$, enquanto a placa superior é localizada em $z = L_z = 8R_d$. O comprimento do canal é $L_x = 16R_d$, e é grande o suficiente quando comparado com o raio da gota, de modo que a gota seja submetida à uma tensão de cisalhante constante, $\dot{\gamma} = (V_T - V_B) / L_z$. Nas laterais do domínio computacional, condições de contorno do tipo Neumann homogênea são impostas para todos os campos.

A equação constitutiva do modelo Oldroyd-B foi adotada, em que, a quantidade de solvente é controlada pelo parâmetro adimensional $\beta = \mu_s / \mu$, em cada fase separadamente. Quando $\beta = 1$ o fluido é newtoniano, e a medida que β diminui o fluido se torna mais elástico. Os outros parâmetros adimensionais são definidos como: $Ca = \frac{\mu_s \dot{\gamma} R_d}{\sigma}$, $Re = \frac{\rho \dot{\gamma} R_d^2}{\mu_s}$, e $Wi = \lambda \dot{\gamma}$. O parâmetro deformação, Φ , é definido como a razão entre a menor e a maior distância, medida do centro da gota até a interface, como $\Phi = (R_{max} - R_{min}) / (R_{max} + R_{min})$.

O domínio foi discretizado em duas malhas não-uniformes: $M1$ ($\min(\Delta x_{min}, \Delta y_{min}) / R_d \approx 4.6876 \times 10^{-2}$, 256×128 células), e $M2$ com ($\min(\Delta x_{min}, \Delta y_{min}) / R_d \approx 2.3438 \times 10^{-2}$, 512×256 células). Essas malhas foram geradas com o auxílio da Eq. 3.76, com $A = 1$, $a = 1$, e $x_c = L_x / 2$, como pode ser observado na figura 48b). O método de Euler implícito foi utilizado para

Figura 48 – Configuração inicial do problema da deformação da gota: (a) ilustração do experimento e (b) representação da malha não uniforme.

integrar a equação da quantidade de movimento, com passo temporal calculado automaticamente, satisfazendo a restrição de estabilidade devido à tensão superficial, e a condição CFL.

A figura 49 exibe os resultados para $Ca = 0.6$, $Re = 0.3$, $\beta = 0.5$, e $Wi = 0.4$, sendo que, os mesmos parâmetros foram utilizados por Chinyoka *et al.* (2005). Os resultados obtidos apresentaram boa concordância. Para a escolha dos parâmetros, é possível observar que quando a fase do meio é newtoniana, a gota se deforma continuamente ao longo do tempo, enquanto a deformação da gota tende a um estado estacionário quando a fase externa é viscoelástica. A forma da deformação da gota, no instante de tempo $t = 10\dot{\gamma}^{-1}$, é exibida na figura 49b). É possível observar que quando a gota é viscoelástica, configuração VN, a interface da gota apresenta a forma de um haltere, enquanto a gota newtoniana na configuração NV, apresenta uma forma aproximadamente elíptica.

Figura 49 – a) Evolução temporal do parâmetro deformação Φ , para todas as configurações entre a gota e fluido que compõe o meio: NN, VN, NV and ,VV; b) forma da gota no instante de tempo $t = 10\dot{\gamma}^{-1}$.

EFEITO DE WEISSENBERG

Após realizar uma verificação detalhada da implementação e precisão da formulação adotada para resolver escoamentos bifásicos com fluidos complexos, nesse capítulo será apresentado um estudo numérico sobre o problema do efeito de Weissenberg. O estudo desse problema é um dos principais objetivos desta tese.

5.1 Introdução

O efeito de Weissenberg ou efeito *rod-climbing*, é um dos problemas mais interessantes em reologia, devido ao seu comportamento peculiar. Esse experimento consiste em um bastão que gira dentro de um recipiente com fluido viscoelástico. Para esse mesmo experimento com um fluido newtoniano, a superfície livre do fluido perto do bastão seria puxada para baixo devido à força centrífuga. Ao contrário de um fluido newtoniano, um fluido viscoelástico movimenta-se na direção oposta da força centrífuga e o fluido sobe pelo bastão, como pode ser observado na figura 50. O maior contribuidor no estudo desse efeito foi Joseph e seus co-autores, em [Joseph \(1990\)](#). Vários outros autores realizaram estudos teóricos e experimentais, dos quais podemos mencionar [Beavers e Joseph \(1975\)](#), [Beavers et al. \(1980\)](#), [Joseph et al. \(1984\)](#). Por outro lado, poucos trabalhos são encontrados na literatura sobre o estudo numérico desse efeito, em que, nenhum trabalho apresenta de forma muito evidente a representação do efeito. Isso se deve a limitações numéricas das formulações adotadas, principalmente do método de representação da interface, e do algoritmo para o cálculo das forças interfaciais. [Debbaut e Hocq \(1992\)](#) apresentaram resultados numéricos sobre o efeito de Weissenberg e o *Quelleffekt*, com um método de elementos finitos em coordenadas axissimétricas. Os resultados foram comparados com resultados experimentais da literatura e soluções analíticas, e escoamentos secundários foram analisados. Também com o uso de um método de elementos finitos em coordenadas axissimétricas, [Luo \(1999\)](#) apresentou resultados numéricos para os modelos de fluidos viscoelástico UCM e PTT. Além disso, [Luo \(1999\)](#) propôs um elaborado esquema

Figura 50 – Efeito de Weissenberg (figura extraída de [McKinley \(2013\)](#)).

de trajetórias ortogonais, para atualizar malhas estruturadas e não estruturadas. O esquema apresentou boa concordância com resultados numéricos e experimentais. Recentemente, [Habla et al. \(2011\)](#) desenvolveu um algoritmo para resolver escoamentos viscoelástico bifásicos, no código OpenFOAM. Os resultados sobre o efeito de Weissenberg apresentado por [Habla et al. \(2011\)](#), foram obtidos em três dimensões com a interface representada pelo método VOF. O

Figura 51 – Efeito de Weissenberg (*rod-climbing*): (a) ilustração do experimento numérico and (b) representação da malha não uniforme.

efeito de Weissenberg ocorre devido à influência da diferença de tensões normais, na variação do valor da pressão na direção radial. De acordo com [Bird et al. \(1987\)](#), as tensões normais ($N1$ e $N2$) podem fazer com que a pressão total diminua na direção radial, como observado pela

seguinte relação

$$\frac{\partial (\tau_{zz} + p)}{\partial \ln r} = 2\tau_{r\theta} \frac{\partial}{\partial \tau_{r\theta}} \underbrace{(\tau_{rr} - \tau_{zz})}_{N_2} + \underbrace{(\tau_{\theta\theta} - \tau_{rr})}_{N_1} + \rho u_\theta^2 \quad (5.1)$$

Nesse capítulo, dois modelos de fluidos viscoelásticos foram adotados para simular o efeito de Weissenberg: o modelo Oldroyd-B, e o modelo Linear Phan-Thien-Tanner (LPTT) (PHAN-THIEN; TANNER, 1977) com $\varepsilon = 0$, conhecido também como modelo Johnson-Segalman (JOHNSON; SEGALMAN, 1977). Por simplicidade, as equações constitutivas desses modelos serão reescritas a seguir

$$\overset{\nabla}{\tau} = \frac{1}{\lambda} \begin{cases} 2\mu_p \mathbf{D} - \tau & \text{Oldroyd-B,} \\ 2\mu_p \mathbf{D} - \left(1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\mu_p} \text{tr}(\tau)\right) \tau - \lambda \xi (\tau \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \tau) & \text{LPTT.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Note que se ξ for eliminado junto com ε , o modelo LPTT se reduz ao modelo Oldroyd-B. Enquanto o modelo Oldroyd-B inclui apenas a primeira diferença de tensões normais, o modelo Johnson-Segalman (LPTT com $\varepsilon = 0$) inclui a primeira e segunda diferenças de tensões normais, sendo que ambas são responsáveis pelo efeito de escalada do fluido (BIRD *et al.*, 1987).

A geometria do problema consiste em um bastão de raio R que gira com velocidade angular ω , inserido em um recipiente cilíndrico de raio R_c , preenchido com fluido viscoelástico até uma altura H , como ilustrado na figura 51. A outra fase foi considerada newtoniana, com $\rho = 1.2 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$ e $\mu = 1.81 \text{ g/(cm}\cdot\text{s)}$. Os parâmetros geométricos adotados foram $R = 0.635 \text{ cm}$, $R_c \approx 24R$ e $H \approx 12R$. Condições de contorno rígidas foram impostas para o bastão e recipiente. Devido à geometria do problema do efeito de Weissenberg, que é composto por um bastão e um recipiente, ambos com formas cilíndricas, é conveniente utilizar um sistema de coordenadas axissimétricas. A altura da escalada do fluido no bastão é mensurada por $h/R = (\tilde{h}(r) - H)/R$, em que, $\tilde{h}(r)$ é a distância da interface até o fundo do recipiente.

5.1.1 Estudo do refinamento da malha

O sistema de equações governantes é resolvido com o auxílio de uma malha não uniforme, com os espaçamentos das células gerados via progressão geométrica, Eq. 3.75. O fator de compressão da malha $r_e = 1$, foi utilizado na direção r , em uma região de comprimento $2R$ a partir do bastão, e na direção z , em uma região perto da interface com comprimento $3R$. A partir dessas regiões, o espaçamento das células da malha expande com fator $r_e = 1.07$, em ambas as direções (vide figura 51b).

O estudo do refinamento da malha foi realizado com as seguintes malhas: $M1$ com $\Delta r_{\min}/R = \Delta z_{\min}/R = 0.125$, $M2$ com $\Delta r_{\min}/R = \Delta z_{\min}/R = 0.0625$, $M3$ com $\Delta r_{\min}/R = \Delta z_{\min}/R =$

0.03125, e $M4$ com $\Delta r_{min}/R = \Delta z_{min}/R = 0.015625$. Esse estudo foi realizado com velocidade angular $\omega = 2.6$ rev/s e $\xi = 0$, ou seja, modelo Oldroyd-B. A figura 52 exibe a altura adimensional da escalada do fluido. É possível observar convergência da solução com o refinamento da malha.

Figura 52 – Resultados numéricos do efeito de Weissenberg, estudo do refinamento da malha com o modelo de fluido Oldroyd-B ($\xi = 0$), e $\omega = 2.6$ rev/s.

5.1.2 Comparação teórica, numérica e experimental

Beavers e Joseph (1975) apresentaram previsões teóricas do efeito de Weissenberg para um fluido Rivlin-Ericksen de quarta ordem, afirmando que as suas previsões mostraram boa concordância quantitativa com medidas experimentais realizadas com um fluido STP (BEAVERS; JOSEPH, 1975), para baixas velocidades angulares. Também para pequenas velocidades angulares, Beavers e Joseph (1975) mostrou que a altura de escalada h pode ser estimada analiticamente por

$$h = \frac{R}{2\sigma\sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}} \left[\frac{4\hat{\beta}}{4 + R\sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}} - \frac{\rho R^2}{2 + R\sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}} \right] \frac{Wi^2}{\lambda^2} + \mathcal{O}(Wi^4), \quad (5.3)$$

em que, a constante de escalada, $\hat{\beta}$, definida por

$$\hat{\beta} = \left[\left(1 - \frac{\mu_s}{\mu_p} \right) (\mu_s + \mu_p) \lambda \right] (1 - 2\xi), \quad (5.4)$$

é uma combinação linear do primeiro e segundo coeficientes de tensões normais. A Eq. 5.3 prevê uma dependência quadrática da escalada h sobre Wi

Para verificar a metodologia proposta, foram realizados um conjunto de simulações com a mesma configuração da geometria descrita no estudo experimental apresentado por Beavers e

Joseph (1975), variando apenas a velocidade angular. A fim de comparar nossos resultados com os resultados apresentados na literatura (BEAVERS; JOSEPH, 1975; DEBBAUT; HOCQ, 1992; LUO, 1999; HABLA *et al.*, 2011), os seguintes parâmetros foram adotados: $\rho = 0.89 \text{ g/cm}^3$, $\mu = \mu_s + \mu_p = 146 \text{ poise}$, $\mu_s/\mu_p = 1/9$, $\lambda = 0.0162 \left(1 - \frac{\mu_s}{\mu_p}\right)^{-1} \text{ s}$, $\sigma = 30.9 \text{ dyn/cm}$, $g = 981 \text{ cm/s}^2$, e $\varepsilon = 0$. No problema do efeito de Weissenberg, existem quatro parâmetros adimensionais que relacionam as propriedades do fluido com as escalas geométricas do escoamento, o número de Weissenberg, Reynolds, Stokes, e capilaridade, respectivamente, definidos por

$$Wi = \lambda \omega, \quad Re = \frac{\rho \omega R^2}{\mu}, \quad St = \frac{\mu \omega}{\rho g R}, \quad Ca = \frac{\mu \omega R}{\sigma}. \quad (5.5)$$

Experimentalmente, Beavers e Joseph (1975) utilizou um bastão revestido, de modo que o ângulo de contato entre a interface e o bastão, seja um ângulo reto. Sendo assim, a mesma condição de contorno foi imposta para obtenção dos resultados numéricos.

Tabela 4 – Velocidade angular e grupo de parâmetros adimensionais, utilizados na verificação da metodologia proposta.

$\omega(\text{rev/s})$	Wi	Re	St	Ca
1.7	0.195	0.026	2.813	32.05
2.1	0.240	0.032	3.475	39.59
2.6	0.298	0.040	4.302	49.01
2.9	0.332	0.045	4.798	54.67

O parâmetro ξ é determinado pela constante de escalada $\hat{\beta}$, a qual depende da temperatura que pode ser obtida a partir de dados experimentais. De acordo com Beavers e Joseph (1975), Luo (1999), a uma temperatura de 27°C a constante de escalada assume valor igual à $\hat{\beta} = 0.86$, enquanto a 26°C , $\hat{\beta} = 1.02$, resultando em $\xi = 0.318$ e $\xi = 0.284$, respectivamente. A fase externa foi considerada newtoniana, com $\rho \rightarrow 0$ and $\mu_s \rightarrow 0$.

A figura 53 apresenta os resultados do valor máximo da escalada obtido com o método proposto, comparados com a aproximação teórica, Eq. 5.3 e, resultados experimentais e numéricos apresentados na literatura (BEAVERS; JOSEPH, 1975; LUO, 1999; HABLA *et al.*, 2011). É possível observar que ambos os resultados, numéricos e experimentais, diferem da teoria da perturbação para velocidades angulares elevadas, para ambos os valores de ξ . No entanto, observa-se na figura 53 que os resultados obtidos com a formulação proposta, são mais próximos dos dados experimentais (vide figura 53a), e mais próximos da solução teórica (vide figura 53b). A figura 54 exhibe os resultados numéricos obtidos com o método proposto e os valores dos parâmetros adimensionais apresentados na tabela 4. A fim de comparação, os resultados apresentados por Beavers e Joseph (1975), Debbaut e Hocq (1992), Luo (1999), Habla *et al.* (2011) também são adicionados na figura. É possível observar que o aumento no valor de ξ (de $\xi = 0.284$ para $\xi = 0.318$) acarreta no decaimento da altura da escalada do fluido, para todas as velocidades angulares. Resultados similares foram obtidos por Luo (1999), Habla *et al.* (2011).

Figura 53 – Altura máxima da escalada, h , comparada com resultados teóricos (BEAVERS; JOSEPH, 1975), e numéricos (LUO, 1999; HABLA *et al.*, 2011): a) $\xi = 0.284$ e b) $\xi = 0.318$.

A diferença na altura da escalada para diferentes valores de ξ , é consistente com a teoria de que o efeito de Weissenberg também depende da segunda diferenças de tensões normais. Além disso, também é possível observar na figura 54 que o aumento de ω , consequentemente, o aumento de Wi , promove um aumento na altura da escalada. Na comparação dos resultados obtidos com os apresentados na literatura, nota-se boa concordância. A figura 54 também apresenta resultados com o modelo Oldroyd-B ($\xi = 0$), o qual exibe altas escaladas do fluido no bastão, quase duas vezes maior do que a altura obtida com o modelo Johnson-Segalman, para o maior valor de ξ , $h_{\xi=0}/h_{\xi=0.318} \sim 2$.

A discrepância entre os resultados numéricos e experimentais, se tornam mais evidentes para altas velocidades angulares, como observado na figura 54d. Essa discrepância pode ser associada à definição da constante de escalada $\hat{\beta}$. Desde que os termos de alta ordem não são considerados na Eq. 5.3, isso pode fornecer alguma incerteza nos parâmetros do material quando o modelo Johnson-Segalman é utilizado para descrever a interface do fluido com grandes deformações. Observe que na figura 54d, com $\xi = 0.284$ a $\xi = 0.318$, a interface exibe a forma de um sino. Isso é caracterizado com uma consequência de uma rápida alteração na inclinação da

interface através de uma distância curta, enquanto para $\xi = 0$, a interface é mais suave, embora apresente maior elevação.

Figura 54 – Resultados numéricos do efeito de Weissenberg com $\xi = 0, 0.284$, e 0.318 : a) $\omega = 1.7$ rev/s, b) $\omega = 2.1$ rev/s, c) $\omega = 2.6$ rev/s, e d) $\omega = 2.9$ rev/s.

5.1.3 Dinâmica do escoamento com altas velocidades angulares

A dinâmica do escoamento do efeito de Weissenberg para altas velocidades angulares foi estudado experimentalmente por Joseph (1990), Beavers e Joseph (1979), e mais recente por Degen *et al.* (1998). Em Beavers e Joseph (1979), dependendo da velocidade do bastão, diferentes comportamentos da interface foram observados: para baixos valores de ω , o escoamento tende ao estado estacionário; aumentando ω , o escoamento torna-se transiente, e três modos foram observados, o *breathing*, *nautilus*, e *rupture*. O *breathing* é um comportamento axissimétrico e periódico da interface, o qual exibe um efeito de subida e descida na escalada do fluido no bastão. O *nautilus* é uma estrutura assimétrica que a interface do fluido apresenta na escalada do bastão, semelhante a uma espiral. Por fim, o modo *rupture* apresenta um comportamento caótico, em que, porções de fluido que estão escalando o bastão se desprendem, devido à força centrífuga, e são jogados ao redor de forma aleatória. No estudo experimental apresentado por

Degen *et al.* (1998), realizado com o mesmo tipo de fluido utilizado por Beavers e Joseph (1979), o aditivo de óleo STP, definiu três regimes diferentes da dinâmica do escoamento, escoamento fixo, periódico, e não periódico. Os autores observaram bifurcações sucessivas, a partir de um estado estacionário para estados com uma frequência, duas frequências, três frequências, e em seguida, caos, sugerindo uma rota característica Ruelle-Takens para o caos.

Até o nosso conhecimento, esses comportamentos observados nos estudos experimentais não foram relatados em nenhum estudo numérico. Assim, com o propósito de investigar a dinâmica do escoamento do efeito de Weissenberg, e em particular a instabilidade inerente, um novo conjunto de simulações foi realizado utilizando o modelo Oldroyd-B, e a malha *M2*. O conjunto completo de simulações, e respectivos grupos adimensionais, são apresentados na tabela 5. Como para os trabalhos experimentais (JOSEPH, 1990; BEAVERS; JOSEPH, 1979; DEGEN

Tabela 5 – Velocidade angular e grupo de parâmetros adimensionais, utilizados no estudo do comportamento do efeito de Weissenberg com altas velocidades angulares.

ω (rev/s)	Wi	Re	St	Ca
0.5	0.057	0.008	0.827	9.43
1.0	0.115	0.015	1.655	18.85
1.3	0.149	0.020	2.151	24.51
1.5	0.172	0.023	2.482	28.28
1.7	0.195	0.026	2.813	32.05
2.1	0.240	0.032	3.475	39.59
2.6	0.298	0.040	4.302	49.01
2.9	0.332	0.045	4.798	54.67
3.4	0.389	0.053	5.626	64.10
4.0	0.458	0.062	6.619	75.41
4.5	0.515	0.069	7.446	84.83
5.0	0.573	0.077	8.273	94.26
5.3	0.607	0.082	8.770	99.91
5.5	0.630	0.085	9.100	103.68
5.8	0.664	0.090	9.597	109.34
6.0	0.687	0.093	9.928	113.11
6.3	0.721	0.097	10.424	118.77
6.5	0.744	0.100	10.755	122.54
6.8	0.779	0.105	11.251	128.19
7.0	0.802	0.108	11.582	131.96
7.5	0.859	0.116	12.410	141.39
7.8	0.893	0.121	12.906	147.04
8.0	0.916	0.124	13.237	150.81
8.3	0.950	0.128	13.733	156.47
8.5	0.973	0.131	14.064	160.24
8.6	0.985	0.134	14.230	162.12
9.0	1.031	0.139	14.892	169.66

et al., 1998), os resultados numéricos com o modelo Oldroyd-B previram um comportamento estável para a escalada do fluido, para velocidades angulares menores que a velocidade crítica,

Figura 55 – Forma da interface para diferentes velocidades de rotação, $0.5 \leq \omega \leq 5.3$ rev/s.

no valor de $\omega_c = 5.3$ rev/s. Na figura 55 é possível observar que com o aumento da velocidade de rotação a interface evolui de uma forma suave ($\omega = 0.5$ rev/s) até à forma de um sino, com rápidas mudanças na curvatura da interface em uma distância curta a partir do bastão ($\omega = 5.3$ rev/s).

Uma análise mais detalhada dos resultados, permitiu correlacionar a evolução da forma da interface com os escoamentos secundários dentro da escalada do fluido. É bem conhecido nas experiências do efeito Weissenberg, que a inércia e as tensões não-newtonianas, causadas pelo escoamento primário induzem movimentos secundários. Esses movimentos secundários são descritos na figura 56, para $\omega = 0.5$ rev/s e $\omega = 1.7$ rev/s. Para baixas velocidades de rotação o movimento secundário é composto por apenas um vórtice inercial grande, em que, as partículas do fluido se movem no sentido anti-horário, enquanto para altas velocidades de rotação um pequeno vórtice secundário aparece junto ao bastão, devido a efeitos viscoelásticos e as diferenças de tensões normais, em que, as partículas do fluido se movem no sentido horário. Esse comportamento foi previsto teoricamente por Yoo *et al.* (1979), numericamente por Debbaut e Hocq (1992), e experimentalmente por Beavers e Joseph (1975) e Hu *et al.* (1990). Também é possível correlacionar o ponto de reentrada, onde a interface muda a curvatura (vide figura 56) com a linha entre os dois movimentos secundários opostos. Este ponto é de grande importância, desde que a elasticidade seja alta, rápidas alterações na inclinação da interface podem ocorrer dentro de uma distância muito curta, e consequentemente, a interação entre as tensões elásticas, a curvatura da interface, e os escoamentos secundários, pode levar ao aparecimento de instabilidades. A figura 57 exibe o comprimento adimensional dos vórtices (vide esboço ilustrado na figura 56b) em função da velocidade angular. É possível observar que o comprimento adimensional do vórtice aumenta monotonamente para $\omega \geq 1.7$ rev/s ($Wi \geq 0.195$), enquanto para $\omega \geq 4.0$ rev/s ($Wi \geq 0.458$), o comprimento do vórtice exibe um

Figura 56 – Problema do efeito de Weissenberg, escoamentos secundários e movimento dos vórtices secundários, em $t = 150\text{s}$.

comportamento periódico (a amplitude das oscilações é marcada pelas barras de erro na figura 57).

A média no tempo do valor adimensional da altura da escalada, h/R , em função do número de Wi é apresentada na figura 58a. Além disso, nessa figura também é apresentada a forma da interface para os seguintes valores: $\omega = 2.1 \text{ rev/s}$ ($Wi = 0.24$), $\omega = 3.4 \text{ rev/s}$ ($Wi = 0.389$), $\omega = 4 \text{ rev/s}$ ($Wi = 0.458$), $\omega = 5 \text{ rev/s}$ ($Wi = 0.573$), $\omega = 5.8 \text{ rev/s}$ ($Wi = 0.664$), e $\omega = 9 \text{ rev/s}$ ($Wi = 1.031$). De acordo com os resultados apresentados na figura 58a, as oscilações na interface (mensuradas pela variação do valor de h/R no tempo, e representadas pelas barras de erro) iniciam a partir $\omega > 5.3 \text{ rev/s}$ ($Wi > 0.607$). No entanto, o movimento periódico do vórtice, exibido na figura 57, não afetou o comportamento da interface até $\omega > 5.3 \text{ rev/s}$. É possível

Figura 57 – Comprimento adimensional do vórtice para $1 \leq \omega \leq 5.3 \text{ rev/s}$.

observar na figura 58a, que para altas velocidades de rotação, acima do valor crítico de $\omega_c = 5.3$

Figura 58 – Resultados numéricos do efeito de Weissenberg: a) valor médio no tempo da altura da escalada h/R (a amplitude das oscilações é marcada pelas barras de erro), e b) gráfico da amplitude em função da velocidade de rotação. A linha no grafico da amplitude representa o ajuste de uma curva para identificar o Wi_c crítico para a bifurcação de Hopf para o início das instabilidades de *breathing* ($A = 0.2492\sqrt{Wi - Wi_c}$).

rev/s ($Wi_c = 0.607$), a interface não atinge o estado estacionário. Todas as quantidades plotadas para $\omega > 5.3$ rev/s, são valores médios no tempo da altura da escalada adimensional. Observe que para baixas velocidades de rotação, a dependência do parâmetro de escalada h/R sobre Wi é quadrática, como previsto pela equação Eq. 5.3. O comportamento estável da interface em forma de sino, perde a estabilidade e transiciona para movimentos periódicos no tempo, o qual surge com pequenas amplitudes e frequências, e aumenta a frequência à medida que a velocidade de rotação é aumentada. Esse movimento periódico é um tipo de bifurcação do escoamento, cuja amplitude aumenta com a velocidade, conforme ilustrado no gráfico da amplitude da figura 58b. Nessa figura, a linha representa o ajuste de uma curva para identificar o Wi_c crítico para a bifurcação de Hopf para o movimento periódico da interface ($A = 0.2492\sqrt{Wi - Wi_c}$, em que, A é a amplitude). Esse tipo de escoamento bifurcado também foi observado experimentalmente por Degen *et al.* (1998). Beavers e Joseph (1979) também apresentaram resultados experimentais

para comportamentos instáveis, as chamadas instabilidades de *breathing*.

Um dos resultados mais interessantes deste trabalho, obtido no estudo do efeito de Weissenberg, são os resultados relacionados com a instabilidade de *breathing*. Numericamente, esse comportamento periódico foi capturado para valores de $\omega > 5.3$ rev/s, como observado nos instantes de tempo apresentados na figura 59, para $\omega = 8$ rev/s ($Wi = 0.916$), o qual é mais evidente para $\omega = 9$ rev/s ($Wi = 1.031$), como pode ser observado na figura 60. Uma melhor percepção da dinâmica das instabilidades de *breathing*, pode ser adquirida a partir da observação de vídeos construídos com os resultados numéricos, os quais estão disponíveis como material suplementar do artigo onde esses resultados foram publicados, em [Figueiredo et al. \(2016\)](#). A partir das figuras 59 e 60, pode ser observado que a porção de fluido do segundo vórtice sobe lentamente até uma certa altura, e em seguida cai para dentro do fluido. A frequência e a amplitude deste movimento periódico, aumenta quando a velocidade de rotação é aumentada. A fim de comparar com os resultados experimentais, uma descrição geral da instabilidade de *breathing* pode ser encontrada em [Beavers e Joseph \(1975\)](#), [Beavers et al. \(1980\)](#), nas fotografias exibidas na figura 95.3 por [Joseph \(1976\)](#), e na figura 17.13 apresentada por [Joseph \(1990\)](#). Experimentalmente, para o fluido utilizado nos trabalhos anteriores, a temperatura de 25°C , o movimento preriódico foi observado a partir de $\omega_{exp} = 4.94$ rev/s, semelhante ao valor numérico de $\omega_c = 5.3$ rev/s. Simulações para velocidades angulares mais elevadas não foram realizadas, uma vez que experimentalmente o escoamento perde simetria, apresentando quebra de simetria nas instabilidades, como os modos de *nautilus* e *rupture*.

Figura 59 – Comportamento transiente do efeito de Weissenberg com $\omega = 8$ rev/s ($Wi = 0.916$).

Figura 60 – Comportamento transiente do efeito de Weissenberg com $\omega = 9$ rev/s ($Wi = 1.031$).

ESCOAMENTOS MICRO-EXTENSIONAIS: CaBER

Nesse capítulo será apresentado o estudo numérico realizado com o problema do CaBER. Esse problema envolve consideráveis desafios numéricos, tanto quanto o efeito de Weissenberg. Uma verificação detalhada foi realizada, em que os resultados obtidos foram comparados com soluções teóricas e numéricas. O estudo desse experimento evidencia mais uma vez a precisão e robustez da formulação proposta, para simular problemas viscoelásticos multifásicos complexos, envolvendo aplicações industriais.

6.1 Introdução

A dinâmica do alongamento e quebra de um filamento de fluido viscoelástico pode fornecer informações reológicas sobre o fluido, através dos reômetros extensionais, conhecidos também como *Capillary Breakup Extensional Rheometry* (CaBER) (STELTER *et al.*, 2000; RODD *et al.*, 2004). Além disso, a formação e quebra de um filamento de fluido são encontradas em muitos processos industriais importantes, como na impressão por jatos de tintas (TAN *et al.*, 2015), impressoras 3D, atomização (THOMPSON; ROTHSTEIN, 2007), produção de filmes finos, e produção de nano fibras por processos de eletrofiação (FENG, 2003; RUTLEDGE; FRIDRIKH, 2007). No contexto da área da saúde, o comportamento do filamento de biofluidos é utilizado como ferramenta de diagnóstico para alguns tipos de doenças (KOPITO; KOSASKY, 1979; TABATABAEI *et al.*, 2015). Biofluidos apresentam característica de viscoelasticidade devido à presença de longas cadeias de macromoléculas, formada pela mistura de proteínas e outras moléculas (SCHIPPER *et al.*, 2007). Um experimento simples envolvendo biofluidos é o alongamento de uma gota de saliva, o qual consiste em pinçar uma gota de saliva entre os dedos, polegar e indicador, e em seguida afastar os dedos alguns milímetros. É possível observar a formação de um filamento que não colapsa imediatamente, e a formação de gotículas

ao longo desse filamento, como ilustrado a figura 61a. Para um fluido newtoniano, como a água, esse comportamento não seria observado, pois o filamento colapsaria muito rápido e com uma distância muito menor entre os dedos. Segundo [Bhat et al. \(2010\)](#), o atraso no tempo de quebra do filamento viscoelástico é resultante das altas tensões viscoelásticas ocasionadas pela força capilar. No caso das gotículas, conhecidas na literatura como *Beads-On-A-String structures* (BOAS), são formadas devido a perturbações elásticas no filamento, e à ação da tensão superficial. Em [Goldin et al. \(1969\)](#), os autores apresentaram por meio de uma análise de estabilidade linear, que um filamento de fluido viscoelástico é mais instável do que um filamento de um fluido newtoniano com viscosidade de corte equivalente, e relacionaram a formação das BOAS no estudo de jatos viscoelásticos, com a instabilidade de Rayleigh em jatos newtonianos.

O experimento do CaBER consiste em uma porção de fluido entre dois pratos paralelos, em que, um dos pratos se move no sentido oposto do outro prato. O movimento dos pratos provoca uma deformação na interface do fluido, a qual permite a ação da tensão superficial devido à curvatura resultante. Nesse estágio, o fluido começa a se dividir entre os pratos, e ocorre a formação do filamento entre as duas porções de fluido. Devido às altas tensões elásticas resultantes, o filamento resiste em manter a sua forma, retardando o tempo de quebra. A figura 61b exibe três quadros em sequência (da esquerda para direita) da dinâmica do experimento. É possível observar a formação das BOAS no ultimo quadro. Vale ressaltar que as tensões elásticas passam a ter influência no escoamento quando o raio do filamento é próximo de 2% do raio do prato, podendo variar um pouco dependendo das propriedades do fluido.

Figura 61 – Ilustração do experimento CaBER, formação do filamento e das BOAS: a) pinçamento de uma gota de saliva entre os dedos indicador e polegar, b) funcionamento do reômetro extensional, sendo a sequência dos quadros das imagens definida esquerda para direita. Em ambas as figuras é possível observar a formação de um filamento que não colapsa imediatamente, e as estruturas das BOAS.

É muito importante entender a formação e a dinâmica das BOAS, devido as várias aplicações que esse problema envolve. A morfologia do CaBER pode ser dividida em três casos, como ilustra a figura 62a. Em todos os casos sempre é formado duas gotas principais, as quais surgem uma em cada prato, como consequência das forças de aderência e da tensão superficial. O

primeiro caso, representado na figura 62a à esquerda, consiste em um filamento que liga as duas gotas principais, sem a formação das BOAS. Teoricamente o raio do filamento, denotado aqui como $R(t)$, apresenta um decaimento exponencial no tempo, em que, para o modelo Oldroyd-B é dado pela seguinte expressão:

$$\frac{R(t)}{R_p} = \left(\frac{\mu_p R_p}{\lambda \sigma} \right)^{\frac{1}{3}} \exp(-t/(3\lambda)), \quad (6.1)$$

onde, R_p é o raio do prato, μ_p é a viscosidade do polímero, σ é o coeficiente de tensão superficial, λ é o tempo de relaxação do fluido, e t é o tempo. Mais detalhes sobre a Eq. 6.1, e equações para outros modelos de fluidos, podem ser encontrados em [McKinley \(2005\)](#). Experimentalmente, as informações do decaimento do raio do filamento, extraídas através de medições por lasers, ou por imagens capturadas por câmeras de alta velocidade, são utilizadas para determinar o tempo de relaxação do fluido com o auxílio da Eq. 6.1. No entanto, a formação das BOAS gera perturbações no decaimento do raio do filamento, o que impossibilita extrair informações reológicas precisas do fluido ([ARDEKANI et al., 2010](#)). O segundo caso, ilustrado na figura 62a no centro, consiste na formação de uma única BOAS no filamento, também chamada de gota satélite. Esse comportamento também é observado para fluidos newtonianos, mas apenas para fluido com baixas viscosidades ([BHAT et al., 2010](#)). Por fim, o terceiro caso ilustrado na figura 62a à direita, consiste na formação de uma ou mais BOAS, menores do que a gota satélite, entre a gota principal e a gota satélite. Esse caso foi estudado experimentalmente por [Oliveira e McKinley \(2005\)](#), com soluções poliméricas de alto peso molecular, enquanto [Ardekani et al. \(2010\)](#) investigaram numericamente através de uma teoria de superfície livre unidimensional, a dinâmica da formação das BOAS em jatos viscoelásticos com os modelos Oldroyd-B e Giesekus.

A dinâmica e colapso do filamento são influenciados por diversas forças no escoamento, como inércia, tensões superficial, viscosa, e elástica. A relação entre essas forças é expressa pelos seguintes números adimensionais: número de Ohnesorge, $Oh = \mu / \sqrt{\rho R_p \sigma}$, o qual é o inverso da raiz quadrada do número de Reynolds, $Re = \rho R_p \sigma / \mu^2$, o número de Deborah, $De = \lambda / \tilde{t}$, o qual representa a razão entre o tempo de relaxação da molécula polimérica e o tempo característico do escoamento, e o número de Bond, $Bo = \rho g R_p^2 / \sigma$, definido como a razão entre as forças de campo e a força de tensão superficial. Nesse contexto, o tempo característico do escoamento, $\tilde{t}$, é definido pela escala de tempo de Rayleigh, $t_R = \sqrt{\rho R_p^3 / \sigma}$, se a força inercial for dominante ($Oh < 1$), ou pela escala de tempo viscosa, $t_v = \mu R_p / \sigma$, caso a força viscosa seja dominante ($Oh > 1$). Mais detalhes sobre os parâmetros adimensionais do problema do CaBER podem ser encontrados em [McKinley \(2005\)](#). No estudo apresentado por [Bhat et al. \(2010\)](#), um diagrama de fase descrevendo as regiões onde as diferentes morfologias do CaBER ocorre em função de Oh e De , foi apresentado para o modelo Oldroyd-B. Segundo [Bhat et al. \(2010\)](#), a inércia é necessária para a formação das BOAS, e polímeros com grandes tempos de relaxação impedem a formação das BOAS. Além disso, utilizando um método de elementos finitos, foi o primeiro artigo numérico a capturar a morfologia das sub BOAS (vide figura 62a à direita). Também com um método

Figura 62 – Experimento do CaBER: a) ilustração da morfologia das BOAS e b) ilustração da geometria utilizada na realização das simulações numéricas.

de elementos finitos, [Bhat et al. \(2008\)](#) realizaram um estudo sobre a dinâmica do filamento do CaBER, com modelos de fluidos viscoelásticos que apresentam viscosidade extensional pequena e limitada (fluidos do tipo *weakly strain hardening*), em particular os modelos Giesekus, FENE-CR, e FENE-P. A formação da BOAS não foi observada para nenhum modelo de fluido, inclusive o caso newtoniano. Acreditamos que esse comportamento seja resultante da escolha dos parâmetros, apesar do número de capilaridade baixo, as forças viscosas foram dominantes ($Re \rightarrow 0$). Além disso, no estudo apresentado por [Bhat et al. \(2008\)](#), a força elástica também era muito influente ($De \geq 1$). Uma extensão do trabalho anterior foi apresentada em [Bhat et al. \(2009\)](#), onde os autores investigaram a influência da derivada convectiva de Gordon–Schowalter do modelo PTT, Eq. 2.40. Também foi investigado a influência da contribuição do solvente através do parâmetro $\beta = \mu_s/\mu$, em que, o aumento de β resulta em um amortecimento nas oscilações da tensão de cisalhamento dentro do filamento. Além disso, em [Bhat et al. \(2009\)](#), os autores relataram que a formação das BOAS e a quebra do filamento são esperadas na direção axial, na região onde a componente zz do tensor taxa de deformação assume valor máximo.

6.2 Configuração do experimento numérico

Numericamente, desprezando a força gravitacional, o experimento exibe axissimetria e simetria em relação ao eixo z (vide figura 62b). Experimentalmente, na grande maioria dos casos, quando a força da tensão superficial passa a ter influência, o filamento quebra em um intervalo de tempo muito curto, em que, a distância que os pratos percorreram nesse instante é

insignificante. Sendo assim, é possível impor um perfil inicial para a interface, tal que a ação da tensão superficial resulta na formação do filamento. O presente trabalho adota o mesmo perfil inicial utilizado por [Bhat et al. \(2010\)](#), o qual é definido como

$$\frac{R(z)}{R_p} = 1 - \left(1 - \frac{R_0}{R_p}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{L_z}\right), \quad (6.2)$$

em que, $R_0 = R(z=0, t=0)$ é a perturbação inicial, L_z é a distância entre os pratos, onde $-L_z/2 \leq z \leq 0$, e π/L_z é o número de onda. No estudo sobre a dinâmica de filamentos viscoelásticos apresentado por [Ardekani et al. \(2010\)](#), a formação das BOAS e quebra do filamento foram relacionadas com o número de onda e outros parâmetros adimensionais, para fluidos com baixa viscoelasticidade. Condições de simetria foram impostas na direção axial, enquanto condição de contorno rígido foi imposta para o prato.

Uma condição de contorno muito importante no problema do CaBER, que não foi discutida por nenhum dos trabalhos numéricos mencionados anteriormente nesse capítulo, é o ponto de contato entre o prato, o fluido viscoelástico e a fase externa. Fisicamente esse ponto permanece fixo no prato devido à histerese¹ do ângulo de contato. A histerese é uma variação que o ângulo de contato estático pode sofrer, por consequência de impurezas ou imperfeições na superfície. A histerese é definida por $H = \theta_a - \theta_r$, em que, θ_a e θ_r são os ângulos de avanço e recuo ([YUAN; LEE, 2013](#)). No contexto do CaBER, a histerese do ângulo de contato (H) é grande devido à presença da quina do prato ([CHANG et al., 2010](#)). Portanto, por esta razão o ponto de contato permanece fixo para uma variação significativa do ângulo de contato (a velocidade do ponto de contato é zero se o ângulo de contato θ encontra-se dentro do intervalo $\theta_r < \theta < \theta_a$ ([FANG et al., 2008](#))). Uma boa revisão dos fundamentos e exemplos de diversas aplicações industriais importantes sobre a histerese do ângulo de contato foram apresentados por [Eral et al. \(2013\)](#).

Nos estudos numéricos sobre o CaBER realizados por [Yildirim e Basaran \(2001\)](#), [Bhat et al. \(2008\)](#) e [Bhat et al. \(2010\)](#), o ponto de contato foi fixado explicitamente. No estudo desse problema realizado nesse trabalho, uma estratégia diferente foi utilizada para manter o ponto de contato fixo e obter o efeito da histerese do ângulo de contato. A estratégia consiste em impor na fronteira rígida um valor para a fração de volume, calculada através do perfil inicial da interface, Eq. 6.2, em $-L_z/2 - \Delta z \leq z \leq -L_z/2$. Tal ideia estabelece uma condição para função f para representar a quina do prato, a qual é utilizada no cálculo da função altura na estimativa da curvatura via método HF. Essa condição também é utilizada na aproximação do vetor normal à interface pelo método ELVIRA, em que, a normal obtida determina o ângulo de contato da histerese. Por fim, a curvatura e a normal calculadas na célula de contato são utilizadas para calcular a velocidade do ponto de contato, a partir da solução da equação da quantidade de movimento. No contexto do método VOF, uma técnica semelhante foi apresentada por [Dupont](#)

¹ Histerese: retardo na resposta de uma unidade do sistema quando existe um acréscimo ou decréscimo no valor do sinal.

e Legendre (2010), em que o ângulo de contato e a velocidade do ponto de contato não são prescritas, mas calculadas a partir do equilíbrio de momento local. Essa estratégia demonstrou ser capaz de manter fixo o ponto de contato na simulação numérica do problema do CaBER. Alguns dos testes realizados serão apresentados nas seções seguintes, onde é possível comprovar a robustez e precisão da formulação proposta.

6.3 Verificação

Nessa seção serão apresentados alguns testes realizados na verificação da formulação proposta para simular o problema do CaBER. A verificação realiza comparações com resultados numéricos, e soluções teóricas, apresentadas na literatura. No nosso entendimento, o estudo realizado por Bhat *et al.* (2010), acreditamos ser o melhor trabalho numérico realizado sobre o CaBER, em que, a morfologia das BOAS foi investigada sob a influência da inércia e da viscoelasticidade. Uma precisão invejável foi obtida por Bhat *et al.* (2010) devido à utilização de um algoritmo unidimensional. Sendo assim, alguns dos parâmetros utilizados por Bhat *et al.* (2010), foram adotados no presente estudo para fins de comparação entre os resultados: $Oh = 0.2$, $\beta = 0.85$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\mu_s = 0.001 \text{ Pa.s}$, e $g = 0 \text{ m/s}^2$. O ar foi adotado para representar a fase externa. Os seguintes parâmetros geométricos foram utilizados: $R_p = 0.001 \text{ m}$, $Lz/R = 1.5$, com perfil inicial da interface dado pela Eq. 6.2, considerando $R_0 = 0.0002 \text{ m}$. Três malhas foram utilizadas para verificar a convergência da solução, em que, espaçamento uniforme foi utilizado na direção axial, e espaçamento não-uniforme foi utilizado na direção radial, definido pela progressão geométrica de razão $r_e = 1.07$: $M1$ com $\Delta r_{min} = 10^{-6} \text{ m}$ e $\Delta z = 1.25 \times 10^{-5} \text{ m}$, $M2$ com $\Delta r_{min} = 5 \times 10^{-7} \text{ m}$ e $\Delta z = 6.25 \times 10^{-6} \text{ m}$, e $M3$ com $\Delta r_{min} = 2.5 \times 10^{-7} \text{ m}$ e $\Delta z = 3.125 \times 10^{-6} \text{ m}$.

A figura 63 exibe a solução numérica do decaimento no tempo do raio mínimo do filamento, para diferentes números de Deborah, e a comparação com a solução teórica, Eq. 6.1. É possível observar a convergência da solução numérica entre as diferentes malhas, e a concordância com a solução teórica. Para a malha menos refinada ($M1$), ocorre um certo desvio na solução para $R_{min}/R_p < 6 \times 10^{-3}$, onde, é mais evidente para $De = 0.5$ devido ao decaimento mais lento do raio do filamento. Esse desvio ocorreu devido à baixa resolução da malha, em que, após alguns instantes de tempo ocorre a quebra do filamento. Esse mesmo desvio pode ocorrer para as malhas mais refinadas, sendo a formação das BOAS responsável por esse comportamento. Na figura 63 também é possível observar o efeito da elasticidade, quanto maior do número de Deborah, mais tempo o filamento gasta para colapsar.

Uma comparação com os resultados numéricos obtidos por Bhat *et al.* (2010) é apresentada na figura 64. Nessa figura o caso newtoniano ($De = 0$) foi adicionado. Os resultados foram adimensionalizados no tempo pela escala de tempo de Rayleigh t_R . É possível observar a formação das BOAS satélites para os casos com nenhuma, ou baixa elasticidade ($De = 0$ e 0.02).

Figura 63 – Resultados numéricos do problema do CaBER, estudo do refinamento da malha com o modelo de fluido Oldroyd-B, $R_p = 0.001$ m, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, e $\beta = 0.85$.

Segundo [Bhat et al. \(2010\)](#), o efeito da inércia ($Oh < 1$) é responsável pela formação das BOAS no caso newtoniano. No entanto, apesar de ocorrer a formação das BOAS no caso newtoniano, o filamento colapsa em um intervalo de tempo extremamente curto. No caso com $De = 0.02$, o comportamento foi semelhante ao caso newtoniano, ocorreu a formação das BOAS, e o filamento colapsou em um instante de tempo muito curto, a partir da formação da gotícula satélite. Esse comportamento está em perfeita concordância com as previsões realizadas por [Bhat et al. \(2010\)](#). Os casos com maior elasticidade ($De = 0.1$ e 0.5), também apresentaram boa concordância com os resultados apresentados por [Bhat et al. \(2010\)](#). É possível observar em ambas as figuras 63 e 64, que o aumento da elasticidade dificulta a formação das BOAS. Esse comportamento está em concordância com o diagrama de fase sobre a morfologia das BOAS, apresentado por [Bhat et al. \(2010\)](#). Nos resultados apresentados por [Bhat et al. \(2010\)](#), a formação de BOAS não foi observada para o caso com $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $\beta = 0.85$, e $De \geq 0.1$. No entanto, no presente estudo, em que, o tempo final das simulações foi suficientemente grande para que ocorresse o colapso do filamento, a formação de uma gotícula foi observada no caso com $De = 0.1$. Essa gotícula tem aproximadamente 32% do volume da gotícula formada no caso com $De = 0.02$. Na figura 64, é possível observar (caso $De = 0.1$) uma perturbação na solução a partir de 0.4 da escala de tempo da figura. Essa perturbação é um indício do início da formação da gotícula. Por esse motivo, no caso experimental, a formação das BOAS atrapalha obter um ajuste preciso da Eq. 6.1, para extrair informações reológicas do fluido.

A figura 65 exibe a forma da interface do caso com $De = 0.1$, em três instantes de tempo

Figura 64 – Comportamento do diâmetro mínimo do problema do CaBER, comparado com os resultados numéricos apresentados por [Bhat et al. \(2010\)](#). Os parâmetros utilizados foram $R_p = 0.001$ m, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $\beta = 0.85$, malha M3, e modelo Oldroyd-B. O tempo t_p é o instante em que o raio mínimo do filamento newtoniano, normalizado pelo raio do prato, atingiu o valor de 10^{-4} .

diferentes $(t - t_p)/t_R \approx -0.16, 0.13$ e 0.48 , bem como informações adimensionais ao longo da direção axial, capturadas em $r = 0$, da velocidade v_z , e da componente D_{zz} do tensor taxa de deformação. Nesses instantes de tempo, os respectivos valores adimensionais do raio mínimo do filamento são $R_{min}/R_p \approx 5 \times 10^{-2}$, 1×10^{-2} e 2.5×10^{-3} . É possível observar na figura 65a a formação da BOAS apenas para o tempo mais longo. Na figura 65b é exibida a velocidade adimensional v_z , em que é interessante observar o comportamento da velocidade em função da distância ao longo do filamento. Quando as tensões elásticas passam a ter influência no escoamento e um filamento uniforme se forma (sem BOAS), o perfil de velocidade v_z exibido no tempo adimensional 0.13 é observado. Esse perfil de velocidade mostra um escoamento elongacional homogêneo ao longo do filamento, em que, a taxa de extensão adimensional é $2/3De$ ([CLASEN et al., 2006](#); [ARDEKANI et al., 2010](#)). No caso do perfil da velocidade quando houve a formação da BOAS ($(t - t_p)/t_R \approx 0.48$), em $z/R_p \leq 0$, são observados dois pontos de máximo. Segundo [Bhat et al. \(2010\)](#), estes dois pontos de máximo surgem devido ao grande efeito da inércia ($Oh = 0.2$), enquanto apenas um ponto de máximo é observado para pouca ou moderada inércia. A figura 65c exibe o valor adimensional da componente $D_{zz} = \partial v_z / \partial z$ do tensor taxa de deformação. Através desse campo é possível extrair informações importantes sobre o comportamento do filamento. O ponto de máximo global de D_{zz} indica a região onde R_{min} é encontrado, como pode ser comprovado por uma observação direta entre as figuras 65a e

65c, onde é mais evidente no instante $(t - t_p)/t_R \approx -0.16$. É possível explicar o surgimento das BOAS quando o ponto de máximo não está localizado no centro ($z/R_p = 0$). Além disso, a região onde D_{zz} assume valor máximo, indica onde o filamento irá colapsar. Os pontos de mínimo de D_{zz} indicam a posição das BOAS e da gota principal, pois é a região onde a velocidade v_z converge para zero, e o fluido começa a se acumular. Mais detalhes podem ser encontrados em Bhat *et al.* (2010).

Figura 65 – Resultados numéricos do experimento do CaBER, $R_p = 0.001m$, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $De = 0.1$, $\beta = 0.85$, malha $M3$, e modelo Oldroyd-B. Comportamento em alguns instantes de tempo de a) $R(z, t)/R_p$, b) velocidade v_z adimensional, c) componente adimensional do tensor taxa de deformação, D_{zz} .

Por fim, a figura 66 exibe a histerese do ângulo de contato junto à quina do prato. A estratégia adotada demonstrou ser capaz de manter o ponto de contato fixo, sem a necessidade de fixá-lo explicitamente, como realizado nos trabalhos de Yildirim e Basaran (2001), Bhat *et al.* (2008), Bhat *et al.* (2010). É possível observar na figura 66 que o ângulo de contato (θ_c)

aumenta à medida que o raio filamento decresce. A diferença que ocorre no instante de tempo adimensional maior que 0.2 é devido às tensões elásticas na formação do filamento, em que, quanto maior a elasticidade, menor é o decaimento do raio do filamento no tempo, e assim, menor a transferência de massa no tempo entre o filamento e a gota principal. Além disso, em instantes de tempo anteriores a 0.2, é possível observar uma ligeira diferença entre θ_c para a variação de De , em que, quanto maior De maior é θ_c . Esse comportamento é justificado pela dinâmica inicial do escoamento, quanto maior De , mais rápido tende a formar o filamento (vide figura 64). Após o colapso do filamento, o ângulo de contato tende a um valor final de $\theta_c \approx 46^\circ$, para todos os valores de De . O valor final de θ_c varia com a configuração inicial do problema (R_p , L_z/R_p , e R_0).

Figura 66 – CaBER: resultados numéricos sobre a variação no tempo do ângulo de contato (θ_c) junto a quina do prato, com $R_p = 0.001m$, $L_z/R_p = 1.5$, $Oh = 0.2$, $\beta = 0.85$, malha $M3$, e modelo Oldroyd-B.

6.4 Cooperação com o grupo CEFT-FEUP

O estudo do CaBER no presente projeto, teve início no período de realização do estágio BEPE (Bolsa Estágio de Pesquisa no Exterior), financiado pela FAPESP, junto ao grupo de pesquisa do Centro de Estudos de Fenômenos de Transporte (CEFT), na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto, Portugal, sob a orientação do Professor Dr. Manuel António Moreira Alves e do Professor Dr. José Alberto Cuminato, e a supervisão dos Professores Dr. Cassio Machiavelli Oishi e Dr. Alexandre Miguel Prior Afonso.

O problema do CaBER ainda desperta muita atenção em todas as áreas de pesquisa, numérica, experimental, e teórica, devido às várias aplicações envolvidas, e pelo fato de que a física do problema ainda não é muito clara (BHAT *et al.*, 2010). No contexto numérico, todas as formulações propostas e os resultados apresentados, consideram apenas uma fase de fluido

(superfície livre), ou seja, a fase do ar é desconsiderada. Numericamente não existe problema em desconsiderar a fase do ar. Por outro lado, experimentalmente o contato do fluido com o ar facilita a evaporação do solvente, e influencia nos resultados. Recentemente, o grupo de pesquisa do CEFT propôs uma modificação nesse experimento, a ideia foi realizar esse experimento submerso em um óleo (SOUSA *et al.*, 2016). Essa ideia traz diversas melhorias para o experimento, as quais podemos mencionar a não evaporação do solvente, e a melhoria na qualidade das imagens capturadas devido à refração da luz entre os meios. Além dessas, a principal melhoria esperada, e a mais importante, foi a diminuição do efeito da inércia no escoamento, a qual está diretamente ligada com a formação das BOAS.

Observou-se que a formulação proposta para simular escoamentos multifásicos com fluidos complexos, além do efeito de Weissenberg, também foi capaz de investigar o problema do CaBER e a formação das BOAS sob a influência da fase externa. Isso só foi possível devido à estratégia apresentada na seção 6.2, para manter o ponto de contato fixo na quina do prato. Gostaria de ressaltar que o movimento do ponto de contato no experimento numérico, pode causar algumas perturbações na interface, que se propagam da região próxima ao prato até o filamento, influenciando na formação das BOAS, e até mesmo no colapso precoce do filamento. Assim, a investigação numérica do CaBER sob a influência do óleo como fase externa está em andamento, com a cooperação do grupo CEFT-FEUP. Esse estudo irá ajudar a entender melhor o efeito do óleo na formação das BOAS.

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi desenvolvido um novo código para resolver escoamentos viscoelásticos bifásicos, com especial interesse em escoamentos com altas taxas de elasticidade. Uma das motivações foram as várias aplicações industriais envolvendo esse tipo de escoamento, e os poucos resultados numéricos encontrados na literatura sobre alguns desses problemas, devido às limitações nas formulações adotadas. A formulação proposta para o novo código é baseada em um esquema de diferenças finitas, utilizando o método da projeção para resolver as equações governantes do escoamento de interesse. A interface entre os fluidos é aproximada pelo clássico método VOF, em que, a normal à interface é reconstruída por um algoritmo de segunda ordem, enquanto a equação de advecção é resolvida com um método geométrico de segunda ordem de precisão, via operador *split*. Vários modelos constitutivos foram implementados para representar as propriedades reológicas de cada fase de fluido, e métodos de estabilização são utilizados quando necessário, para integrar a equação constitutiva no tempo. A descrição de cada um dos métodos adotados foi apresentada no capítulo 3, enquanto as condições de contorno físicas foram apresentadas no capítulo 2.

A precisão da formulação implementada foi verificada considerando distintos níveis de complexidade física, com vários problemas de benchmark, os quais foram apresentados no capítulo 4. Os testes foram divididos em cinco casos: problemas viscoelásticos confinados, representação e advecção da interface, escoamentos newtonianos multifásicos, forças interfaciais, e escoamentos multifásicos com fluidos complexos. Em cada um dos casos, os problemas foram resolvidos em coordenadas cartesianas e cilíndricas. Em todos os testes realizados, os resultados apresentaram excelente concordância com resultados da literatura.

O estudo do efeito de Weissenberg ou *rod-climbing effect*, foi um dos principais objetivos do presente trabalho. Uma verificação inicial desse problema foi realizada com pequenas velocidades angulares, em que, os resultados apresentaram boa concordância com dados experimentais, numéricos e teóricos apresentados na literatura. Após essa verificação, um estudo

foi realizado considerando altas velocidades angulares, conseqüentemente altas elasticidades. Parâmetros adimensionais críticos foram determinados, sendo que para valores acima do crítico, foram observadas instabilidades elásticas, conhecidas como instabilidade de *breathing*. Essas instabilidades são causadas pela combinação de altas tensões elásticas, forças capilares, e escoamentos secundários. Até onde sabemos, numericamente, o efeito dessa instabilidade nunca foi capturado. Além disso, altas escaladas do fluido no bastão foram observadas. Alguns autores que investigaram esse problema (DEBBAUT; HOCQ, 1992; LUO, 1999) relataram ser um grande desafio desenvolver um esquema transiente elaborado para resolver escoamentos viscoelásticos bifásicos, capaz de simular o comportamento periódico (instabilidade de *breathing*) do problema do efeito de Weissenberg com altas velocidades angulares. Assim, os resultados obtidos nesse estudo evidenciam a capacidade do novo código. A formulação adotada na construção do código, e os resultados obtidos, foram publicados em Figueiredo *et al.* (2016).

Por fim, a formulação adotada na construção do código demonstrou ser capaz de resolver outro problema tão complexos quanto o efeito de Weissenberg, o problema do CaBER. Recentemente, o grupo do CEFT-FEUP propôs modificações na realização desse experimento, a qual realiza o experimento submerso em um óleo, a fim de trazer diversas melhorias para as medições experimentais (SOUSA *et al.*, 2016). Devido à complexidade do experimento, todas as formulações numéricas apresentadas na literatura utilizam superfície livre, ou seja, a fase externa é desconsiderada. No caso do presente trabalho, a formulação apresentada demonstrou ser capaz de realizar esse estudo considerando a fase externa. Um estudo comparativo com resultados apresentados na literatura com um modelo unidimensional foi apresentado no capítulo 6, em que, os resultados obtidos apresentaram admirável precisão e boa concordância. No entanto, a realização desse estudo só foi possível com a modificação das condições de contorno para calcular a histerese do ângulo de contato (vide seção 6.2).

Os problemas do efeito de Weissenberg e do CaBER, além dos apresentados no capítulo 4, demonstram a precisão e capacidade da formulação proposta, em simular problemas complexos envolvendo aplicações industriais importantes.

REFERÊNCIAS

ABADIE, T.; AUBIN, J.; LEGENDRE, D. On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within volume of fluid and level set frameworks. **Journal of Computational Physics**, v. 297, p. 611 – 636, 2015. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115003113>>. Citado 4 vezes nas páginas 100, 101, 103 e 106.

ABOUBACAR, M.; AGUAYO, J.; PHILLIPS, P.; PHILLIPS, T.; TAMADDON-JAHROMI, H.; SNIGEREV, B.; WEBSTER, M. Modelling pom-pom type models with high-order finite volume schemes. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 126, n. 2–3, p. 207 – 220, 2005. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037702570400360X>>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 174.

AFKHAMI, S.; BUSSMANN, M. Height functions for applying contact angles to 2D VOF simulations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 57, n. 4, p. 453–472, 2008. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1651>>. Citado 2 vezes nas páginas 80 e 81.

_____. Height functions for applying contact angles to 3D VOF simulations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 61, n. 8, p. 827–847, 2009. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1974>>. Citado 3 vezes nas páginas 80, 81 e 110.

AFONSO, A.; OLIVEIRA, P.; PINHO, F.; ALVES, M. Dynamics of high-deborah-number entry flows: a numerical study. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 677, p. 272–304, 6 2011. ISSN 1469-7645. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/article_S002211201100084X>. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 62.

AFONSO, A.; PINHO, F.; ALVES, M. The kernel-conformation constitutive laws. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, n. 0, p. 30 – 37, 2012. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025711002370>>. Citado na página 62.

AKYLAS, T. **Advanced fluid dynamics**. 2014. Available at <web.mit.edu/2.21/www/lecnote.html>. Citado na página 45.

ALBADAWI, A.; DONOGHUE, D.; ROBINSON, A.; MURRAY, D.; DELAURÉ, Y. Influence of surface tension implementation in volume of fluid and coupled volume of fluid with level set methods for bubble growth and detachment. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 53, p. 11 – 28, 2013. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932213000190>>. Citado na página 31.

ALVES, M.; PINHO, F.; OLIVEIRA, P. The flow of viscoelastic fluids past a cylinder: finite-volume high-resolution methods. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 97, n. 2–3, p. 207 – 232, 2001. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025700001981>>. Citado na página 61.

AMMAR, A.; RYCKELYNCK, D.; CHINESTA, F.; KEUNINGS, R. On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 134, n. 1–3, p. 136 – 147, 2006. ISSN 0377-0257. 2nd Annual European Rheology Conference. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025706000152>>. Citado na página 49.

AMSDEN, A.; HARLOW, F. **The SMAC Method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows**. [S.l.], 1970. Citado na página 29.

ANAND, S.; PAXSON, A.; DHIMAN, R.; SMITH, J.; VARANASI, K. Enhanced condensation on lubricant-impregnated nanotextured surfaces. **ACS Nano**, v. 6, n. 11, p. 10122–10129, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/nn303867y>>. Citado na página 48.

ARDEKANI, A.; SHARMA, V.; MCKINLEY, G. Dynamics of bead formation, filament thinning and breakup in weakly viscoelastic jets. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 665, p. 46–56, 2010. ISSN 1469-7645. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/article_S0022112010004738>. Citado 3 vezes nas páginas 133, 135 e 138.

AULISA, E.; MANSERVISI, S.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry. **Journal of Computational Physics**, v. 225, n. 2, p. 2301 – 2319, 2007. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107001325>>. Citado 3 vezes nas páginas 66, 71 e 73.

AUSAS, R.; DARI, E.; BUSCAGLIA, G. A geometric mass-preserving redistancing scheme for the level set function. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 65, n. 8, p. 989–1010, 2011. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.2227>>. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 92.

BALAY, S.; ABHYANKAR, S.; ADAMS, M.; BROWN, J.; BRUNE, P.; BUSCHELMAN, K.; DALCIN, L.; EIJKHOUT, V.; GROPP, W.; KAUSHIK, D.; KNEPLEY, M.; MCINNES, L.; RUPP, K.; SMITH, B.; ZAMPINI, S.; ZHANG, H.; ZHANG, H. **PETSc Web page**. 2016. Disponível em: <<http://www.mcs.anl.gov/petsc>>. Citado na página 85.

BALTUSSEN, M.; VERBEETEN, W.; BOGAERDS, A.; HULSEN, M.; PETERS, G. Anisotropy parameter restrictions for the extended pom-pom model. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 165, n. 19-20, p. 1047 – 1054, 2010. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037702571000145X>>. Citado na página 52.

BARBOSA, E.; DAUBE, O. A finite difference method for 3D incompressible flows in cylindrical coordinates. **Computers in Fluids**, v. 34, n. 8, p. 950 – 971, 2005. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793004001148>>. Citado na página 169.

BEAVERS, G.; JOSEPH, D. The rotating rod viscometer. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 69, p. 475–511, 6 1975. ISSN 1469-7645. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/article_S002211207500153X>. Citado 7 vezes nas páginas 18, 117, 120, 121, 122, 125 e 128.

_____. Experiments on free surface phenomena. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 5, p. 323 – 352, 1979. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025779850223>>. Citado 3 vezes nas páginas 123, 124 e 127.

BEAVERS, G.; YOO, J.; JOSEPH, D. The free surface on a liquid between cylinders rotating at different speeds. part iii. **Rheologica Acta**, v. 19, n. 1, p. 19–31, 1980. ISSN 1435-1528. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01523851>>. Citado 2 vezes nas páginas 117 e 128.

BERGER, M.; OLIGER, J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. **Journal of Computational Physics**, v. 53, n. 3, p. 484 – 512, 1984. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999184900731>>. Citado na página 82.

BHAT, P.; APPATHURAI, S.; HARRIS, M.; PASQUALI, M.; MCKINLEY, G.; BASARAN, O. Formation of beads-on-a-string structures during break-up of viscoelastic filaments. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 8, p. 625–631, 2010. Citado 11 vezes nas páginas 19, 35, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139 e 140.

BHAT, P.; BASARAN, O.; PASQUALI, M. Dynamics of viscoelastic liquid filaments: Low capillary number flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 150, n. 2–3, p. 211 – 225, 2008. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025707002327>>. Citado 3 vezes nas páginas 134, 135 e 139.

BHAT, P.; PASQUALI, M.; BASARAN, O. Beads-on-string formation during filament pinch-off: Dynamics with the PTT model for non-affine motion. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 159, n. 1–3, p. 64 – 71, 2009. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025709000342>>. Citado na página 134.

BIRD, R.; ARMSTRONG, R.; HASSAGER, O. **Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics**. [S.l.]: John Wiley and Sons Inc., New York, NY, 1987. Citado 9 vezes nas páginas 32, 33, 35, 49, 51, 53, 118, 119 e 168.

BIRD, R.; CURTISS, C. Fascinating polymeric liquids. **Physics Today**, v. 37, p. 36, 1984. Citado na página 35.

BONITO, A.; PICASSO, M.; LASO, M. Numerical simulation of 3d viscoelastic flows with free surfaces. **Journal of Computational Physics**, v. 215, n. 2, p. 691 – 716, 2006. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105005115>>. Citado na página 26.

BONN, D.; KOBYLKO, M.; BOHN, S.; MEUNIER, J.; MOROZOV, A.; SAARLOOS, W. van. Rod-climbing effect in newtonian fluids. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 93, p. 214503, 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.214503>>. Citado na página 98.

BORNIA, G.; CERVONE, A.; MANSERVISI, S.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. On the properties and limitations of the height function method in two-dimensional cartesian geometry. **Journal of Computational Physics**, v. 230, n. 4, p. 851 – 862, 2011. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110006443>>. Citado na página 78.

BRACKBILL, J.; KOTHE, D.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, n. 2, p. 335 – 354, 1992. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002199919290240Y>>. Citado 4 vezes nas páginas 31, 40, 74 e 76.

- BRADY, P.; HERRMANN, M.; LOPEZ, J. Two-fluid confined flow in a cylinder driven by a rotating end wall. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 85, p. 016308, Jan 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.016308>>. Citado na página 98.
- BROWN, D.; CORTEZ, R.; MINION, M. Accurate projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations. **Journal of Computational Physics**, Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, v. 168, p. 464–499, 2001. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://portal.acm.org/citation.cfm?id=376465.376514>>. Citado na página 60.
- CARLSON, J.; JAFFE, A.; WILES, A. **The millennium prize problems**. [S.l.]: American Mathematical Soc., 2006. Citado na página 40.
- CARLSON, J.-R. **Inflow/outflow boundary conditions with application to FUN3D**. [S.l.], 2011. Citado na página 43.
- CASSIE, A.; BAXTER, S. Wettability of porous surfaces. **Transactions of the Faraday Society**, The Royal Society of Chemistry, v. 40, p. 546–551, 1944. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/TF9444000546>>. Citado na página 48.
- CASTELO, A.; TOMÉ, M.; CÉSAR, C.; MCKEE, S.; CUMINATO, J. Freeflow: an integrated simulation system for three-dimensional free surface flows. **Computing and Visualization in Science**, v. 2, n. 4, p. 199–210, 2000. ISSN 1433-0369. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s007910050040>>. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 171.
- CHANG, F.; HONG, S.; SHENG, Y.; TSAO, H. Wetting invasion and retreat across a corner boundary. **The Journal of Physical Chemistry C**, v. 114, n. 3, p. 1615–1621, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp9097588>>. Citado na página 135.
- CHANG, K. **With new nonstick coating, the wait, and waste, is over**. 2015. The New York Times. Disponível em: <http://www.nytimes.com/2015/03/24/science/with-new-nonstick-coating-the-wait-and-waste-is-over.html?_r=1>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 48.
- CHEN, X.; MA, D.; YANG, V.; POPINET, S. High-fidelity simulations of impinging jet atomization. **Atomization and Sprays**, v. 23, n. 12, p. 1079–1101, 2013. ISSN 1044-5110. Citado na página 25.
- CHEN, X.; YANG, V. Thickness-based adaptive mesh refinement methods for multi-phase flow simulations with thin regions. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 269, p. 22–39, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 82.
- CHINYOKA, T.; RENARDY, Y.; RENARDY, M.; KHISMATULLIN, D. Two-dimensional study of drop deformation under simple shear for oldroyd-b liquids. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 130, n. 1, p. 45–56, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 114 e 116.
- CHORIN, A. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. **Journal of Computational Physics**, v. 2, n. 1, p. 12–26, 1967. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WHY-4DD1MX2-7B/2/080e55f08c7694953bf33b5d10f94355>>. Citado na página 56.
- _____. Numerical solution of the navier-stokes equations. **Mathematics of Computation**, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968. ISSN 00255718. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2004575>>. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 168.

CHORIN, A.; MARSDEN, J. **A mathematical introduction to fluid mechanics**. [S.l.]: Springer, 1993. Citado na página 57.

CLASEN, C.; EGGERS, J.; FONTELOS, M.; LI, J.; MCKINLEY, G. The beads-on-string structure of viscoelastic threads. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 556, p. 283–308, 6 2006. ISSN 1469-7645. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/article_S0022112006009633>. Citado na página 138.

COLAGROSSI, A.; LANDRINI, M. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. **Journal of Computational Physics**, v. 191, n. 2, p. 448 – 475, 2003. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999103003243>>. Citado na página 28.

COQUERELLE, M.; GLOCKNER, S. A fourth-order accurate curvature computation in a level set framework for two-phase flows subjected to surface tension forces. **Journal of Computational Physics**, v. 305, p. 838 – 876, 2016. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115007548>>. Citado na página 74.

COWARD, A.; RENARDY, Y.; RENARDY, M.; RICHARDS, J. Temporal evolution of periodic disturbances in two-layer couette flow. **Journal of Computational Physics**, v. 132, n. 2, p. 346 – 361, 1997. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999196956405>>. Citado na página 96.

CRUICKSHANK, J. **Viscous fluid buckling: A theoretical and experimental analysis with extensions to general fluid stability**. Tese (Doutorado) — Iowa State University, 1980. Disponível em: <<http://lib.dr.iastate.edu/rtd/6692>>. Citado na página 171.

CRUICKSHANK, J. Low-Reynolds-number instabilities in stagnating jet flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 193, p. 111–127, 1988. Citado na página 171.

CRUZ, D.; PINHO, F. Analytical solution of steady 2d wall-free extensional flows of UCM fluids. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 223, p. 157 – 164, 2015. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025715001226>>. Citado na página 51.

CRUZ, F.; POOLE, R.; AFONSO, A.; PINHO, F.; OLIVEIRA, P.; ALVES, M. A new viscoelastic benchmark flow: Stationary bifurcation in a cross-slot. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 214, p. 57 – 68, 2014. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025714001761>>. Citado na página 56.

CUMINATO, J.; OISHI, C.; FIGUEIREDO, R. The impact of applications on mathematics: proceedings of the forum of mathematics for industry 2013. In: _____. Tokyo: Springer Japan, 2014. cap. Implicit methods for simulating low reynolds number free surface flows: improvements on MAC-type methods, p. 123–139. ISBN 978-4-431-54907-9. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/978-4-431-54907-9_9>. Citado 3 vezes nas páginas 59, 60 e 171.

CUMMINS, S.; FRANCOIS, M.; KOTHE, D. Estimating curvature from volume fractions. **Computers & Structures**, v. 83, n. 6–7, p. 425 – 434, 2005. ISSN 0045-7949. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045794904004110>>. Citado 2 vezes nas páginas 74 e 101.

DAMIÁN, S. **An extended mixture model for the simultaneous treatment of short and long scale interfaces**. Tese (Doutorado) — Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 2013. Citado na página 70.

DAMIÁN, S.; NIGRO, N. An extended mixture model for the simultaneous treatment of small-scale and large-scale interfaces. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 75, n. 8, p. 547–574, 2014. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/flid.3906>>. Citado na página 70.

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, n. 1, p. 103 – 126, 1992. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037702579280019T>>. Citado 5 vezes nas páginas 35, 117, 121, 125 e 144.

DEGEN, M.; KAHLE, W.; ANDERECK, C. Time-dependent states in the weissenberg effect. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 57, p. 1761–1771, 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.57.1761>>. Citado 3 vezes nas páginas 123, 124 e 127.

DENNER, F.; HEUL, D. van der; OUD, G.; VILLAR, M.; NETO, A. S.; WACHEM, B. van. Comparative study of mass-conserving interface capturing frameworks for two-phase flows with surface tension. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 61, n. 0, p. 37 – 47, 2014. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932214000068>>. Citado 2 vezes nas páginas 74 e 76.

DEVENDRAN, D.; CORONA, E. **Computational fluid dynamics reading group: projection methods**. 2009. Disponível em: <http://cims.nyu.edu/~kellen/cfd/CFD_Reading_Projection_Methods_Notes.pdf>. Citado na página 168.

DI, Y.; LI, R.; TANG, T.; ZHANG, P. Moving mesh finite element methods for the incompressible navier–stokes equations. **SIAM Journal on Scientific Computing**, SIAM, v. 26, n. 3, p. 1036–1056, 2005. Citado na página 27.

Do Carmo, M. **Differential geometry of curves and surfaces**. [S.l.]: Prentice-hall Englewood Cliffs, 1976. v. 2. Citado 3 vezes nas páginas 76, 77 e 78.

DONEA, J.; HUERTA, A.; PONTOT, J.-P.; RODRÍGUEZ-FERRAN, A. **Arbitrary lagrangian–eulerian methods**. John Wiley & Sons, Ltd, 2004. ISBN 9780470091357. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/0470091355.ecm009>>. Citado na página 27.

DOYLE, P.; SHAQFEH, E.; MCKINLEY, G.; SPIEGELBERG, S. Relaxation of dilute polymer solutions following extensional flow. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 76, n. 1–3, p. 79 – 110, 1998. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025797001134>>. Citado na página 49.

DUBASH, N.; CHEUNG, P.; SHEN, A. Elastic instabilities in a microfluidic cross-slot flow of wormlike micellar solutions. **Soft Matter**, The Royal Society of Chemistry, v. 8, p. 5847–5856, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C2SM25215E>>. Citado na página 56.

DUPONT, J.; LEGENDRE, D. Numerical simulation of static and sliding drop with contact angle hysteresis. **Journal of Computational Physics**, v. 229, n. 7, p. 2453 – 2478, 2010. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109004203>>. Citado na página 136.

EGGERS, J.; VILLERMAUX, E. Physics of liquid jets. **Reports on Progress in Physics**, v. 71, n. 3, p. 036601, 2008. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0034-4885/71/i=3/a=036601>>. Citado na página 35.

ENRIGHT, D.; FEDKIW, R.; FERZIGER, J.; MITCHELL, I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. **Journal of Computational Physics**, v. 183, n. 1, p. 83 – 116, 2002. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999102971664>>. Citado na página 31.

ERAL, H.; MANNETJE, D. 't; OH, J. Contact angle hysteresis: a review of fundamentals and applications. **Colloid and Polymer Science**, v. 291, n. 2, p. 247–260, 2013. ISSN 1435-1536. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s00396-012-2796-6>>. Citado na página 135.

ESCUDIER, M.; OLIVEIRA, P.; PINHO, F. Fully developed laminar flow of purely viscous non-newtonian liquids through annuli, including the effects of eccentricity and inner-cylinder rotation. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 23, n. 1, p. 52 – 73, 2002. ISSN 0142-727X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X01001357>>. Citado na página 90.

ÉTIENNE, J.; HINCH, E.; LI, J. A lagrangian–eulerian approach for the numerical simulation of free-surface flow of a viscoelastic material. **Journal of non-newtonian fluid mechanics**, Elsevier, v. 136, n. 2, p. 157–166, 2006. Citado na página 35.

FANG, C.; HIDROVO, C.; WANG, F.-m.; EATON, J.; GOODSON, K. 3-D numerical simulation of contact angle hysteresis for microscale two phase flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 34, n. 7, p. 690 – 705, 2008. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030193220700170X>>. Citado na página 135.

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. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025704002630>>. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 62.

_____. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high weissenberg number using the log-conformation representation. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 126, n. 1, p. 23 – 37, 2005. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025705000042>>. Citado 6 vezes nas páginas 36, 61, 62, 63, 88 e 89.

FENG, J. Stretching of a straight electrically charged viscoelastic jet. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 116, n. 1, p. 55 – 70, 2003. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025703001733>>. Citado na página 131.

FERZIGER, J.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 82 e 84.

FIGUEIREDO, R.; OISHI, C.; AFONSO, A.; TASSO, I.; CUMINATO, J. A two-phase solver for complex fluids: studies of the weissenberg effect. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 84, p. 98 – 115, 2016. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932215301294>>. Citado 4 vezes nas páginas 84, 98, 128 e 144.

- FIGUEIREDO, R.; OISHI, C.; CUMINATO, J.; ALVES, M. Three-dimensional transient complex free surface flows: Numerical simulation of XPP fluid. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 195, p. 88 – 98, 2013. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037702571300030X>>. Citado 5 vezes nas páginas 26, 33, 59, 60 e 171.
- FIGUEIREDO, R.; OISHI, C.; CUMINATO, J.; AZEVEDO, J.; AFONSO, A.; ALVES, M. Numerical investigation of three dimensional viscoelastic free surface flows: impacting drop problem. In: **11th World Congress on Computational Mechanics - WCCM XI**. Spain: [s.n.], 2014. Disponível em: <<http://www.wccm-eccm-ecfd2014.org/admin/files/filePaper/p2428.pdf>>. Citado 3 vezes nas páginas 60, 112 e 171.
- FOX, R.; MCDONALD, A.; PRITCHARD, P. **Introduction to fluid mechanics**. [S.l.]: John Wiley & Sons New York, 1985. v. 7. Citado na página 39.
- FRANCOIS, M.; CUMMINS, S.; DENDY, E.; KOTHE, D.; SICILIAN, J.; WILLIAMS, M. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. **Journal of Computational Physics**, v. 213, n. 1, p. 141 – 173, 2006. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105003748>>. Citado 11 vezes nas páginas 31, 36, 73, 74, 76, 78, 100, 102, 103, 104 e 107.
- FUJIMOTO, S.; TAKEDA, Y. Topology changes of the interface between two immiscible liquid layers by a rotating lid. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 80, p. 015304, 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80.015304>>. Citado na página 97.
- FUKAGATA, K.; KASAGI, N. Highly energy-conservative finite difference method for the cylindrical coordinate system. **Journal of Computational Physics**, v. 181, n. 2, p. 478 – 498, 2002. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910297138X>>. Citado na página 169.
- GALINDO-ROSALES, F.; CAMPO-DEAÑO, L.; SOUSA, P.; RIBEIRO, V.; OLIVEIRA, M.; ALVES, M.; PINHO, F. Viscoelastic instabilities in micro-scale flows. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 59, p. 128 – 139, 2014. ISSN 0894-1777. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0894177714000697>>. Citado na página 56.
- GERLACH, D.; TOMAR, G.; BISWAS, G.; DURST, F. Comparison of volume-of-fluid methods for surface tension-dominant two-phase flows. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 49, n. 3–4, p. 740 – 754, 2006. ISSN 0017-9310. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931005005314>>. Citado 4 vezes nas páginas 73, 75, 76 e 94.
- 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. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025782850167>>. Citado na página 52.
- GOLDIN, M.; YERUSHALMI, J.; PFEFFER, R.; SHINNAR, R. Breakup of a laminar capillary jet of a viscoelastic fluid. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 38, p. 689–711, 1969. ISSN 1469-7645. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/article_S0022112069002540>. Citado na página 132.

HABLA, F.; MARSCHALL, H.; HINRICHSSEN, O.; DIETSCHKE, L.; JASAK, H.; FAVERO, J. Numerical simulation of viscoelastic two-phase flows using openFOAM. **Chemical Engineering Science**, v. 66, n. 22, p. 5487 – 5496, 2011. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250911005422>>. Citado 6 vezes nas páginas 18, 35, 114, 118, 121 e 122.

HABLA, F.; TAN, M.; HABLBERGER, J.; HINRICHSSEN, O. Numerical simulation of the viscoelastic flow in a three-dimensional lid-driven cavity using the log-conformation reformulation in OpenFOAM. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 212, p. 47 – 62, 2014. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025714001189>>. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 89.

HABLA, F.; WOITALKA, A.; NEUNER, S.; HINRICHSSEN, O. Development of a methodology for numerical simulation of non-isothermal viscoelastic fluid flows with application to axisymmetric 4:1 contraction flows. **Chemical Engineering Journal**, v. 207–208, p. 772 – 784, 2012. ISSN 1385-8947. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894712009515>>. Citado na página 83.

HARLOW, F.; WELCH, J. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. **Physics of Fluids**, v. 8, p. 2182–2189, 1965. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof1/8/12/10.1063/1.1761178>>. Citado 3 vezes nas páginas 29, 58 e 168.

HAWARD, S.; OBER, T.; OLIVEIRA, M.; ALVES, M.; MCKINLEY, G. Extensional rheology and elastic instabilities of a wormlike micellar solution in a microfluidic cross-slot device. **Soft Matter**, The Royal Society of Chemistry, v. 8, p. 536–555, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C1SM06494K>>. Citado na página 56.

HIRT, C.; AMSDEN, A.; COOK, J. An arbitrary lagrangian-eulerian computing method for all flow speeds. **Journal of Computational Physics**, v. 14, n. 3, p. 227 – 253, 1974. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999174900515>>. Citado na página 27.

HIRT, C.; NICHOLS, B. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 39, p. 201–225, 1981. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 63.

HU, H.; RICCIUS, O.; CHEN, K.; ARNEY, M.; JOSEPH, D. Climbing constant, second-order correction of trouton's viscosity, wave speed and delayed die swell for M1. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 35, n. 2, p. 287 – 307, 1990. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025790850554>>. Citado na página 125.

HUA, J.; STENE, J.; LIN, P. Numerical simulation of 3d bubbles rising in viscous liquids using a front tracking method. **Journal of Computational Physics**, v. 227, n. 6, p. 3358 – 3382, 2008. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107005530>>. Citado na página 26.

HUANG, W.; RUSSELL, R. **Adaptive moving mesh methods**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010. v. 174. Citado na página 27.

HULSEN, M. Some properties and analytical expressions for plane flow of leonov and giesekus models. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 30, n. 1, p. 85 – 92, 1988. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037702578800193>>. Citado na página 61.

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, n. 1, p. 27 – 39, 2005. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025705000455>>. Citado na página 62.

II, S.; SUGIYAMA, K.; TAKEUCHI, S.; TAKAGI, S.; MATSUMOTO, Y.; XIAO, F. An interface capturing method with a continuous function: The THINC method with multi-dimensional reconstruction. **Journal of Computational Physics**, v. 231, n. 5, p. 2328 – 2358, 2012. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111006942>>. Citado na página 65.

INAMURO, T.; OGATA, T.; TAJIMA, S.; KONISHI, N. A lattice boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. **Journal of Computational Physics**, v. 198, n. 2, p. 628 – 644, 2004. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999104000567>>. Citado na página 28.

IZBASSAROV, D.; MURADOGLU, M. A computational study of two-phase viscoelastic systems in a capillary tube with a sudden contraction/expansion. **Physics of Fluids**, v. 28, n. 1, 2016. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/28/1/10.1063/1.4939940>>. Citado na página 63.

JENDREJACK, R.; PABLO, J. de; GRAHAM, M. Stochastic simulations of DNA in flow: Dynamics and the effects of hydrodynamic interactions. **The Journal of Chemical Physics**, v. 116, n. 17, p. 7752–7759, 2002. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/116/17/10.1063/1.1466831>>. Citado na página 49.

JIANG, X.; SIAMAS, G.; JAGUS, K.; KARAYIANNIS, T. Physical modelling and advanced simulations of gas–liquid two-phase jet flows in atomization and sprays. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 36, n. 2, p. 131 – 167, 2010. ISSN 0360-1285. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128509000458>>. Citado na página 25.

JOHNSON, M.; SEGALMAN, D. A model for viscoelastic fluid behavior which allows non-affine deformation. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 2, n. 3, p. 255 – 270, 1977. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025777800037>>. Citado na página 119.

JOSEPH, D. Stability of fluid motions II, springer tracts in natural philosophy. Springer-Verlag, Berlin, v. 28, 1976. Citado na página 128.

_____. **Fluid dynamics of viscoelastic liquids**. [S.l.]: Springer-Verlag, 1990. v. 84. Citado 4 vezes nas páginas 117, 123, 124 e 128.

JOSEPH, D.; BEAVERS, G.; CERS, A.; DEWALD, C.; HOGER, A.; THAN, P. Climbing constants for various liquids. **Journal of Rheology**, v. 28, n. 4, p. 325–345, 1984. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/sor/journal/jor2/28/4/10.1122/1.549754>>. Citado na página 117.

JUNIOR, I. P.; OISHI, C.; AFONSO, A.; ALVES, M.; PINHO, F. Numerical study of the square-root conformation tensor formulation for confined and free-surface viscoelastic fluid flows. **Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences**, v. 3, n. 1, p. 1–23, 2016. ISSN 2213-7467. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1186/s40323-015-0054-4>>. Citado 3 vezes nas páginas 56, 63 e 89.

KEDELTY, D. **A comparison of performance between reconstruction and advection algorithms for volume-of-fluid methods**. Tese (Doutorado) — Arizona State University, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 66 e 71.

KESHAVARZ, B. 2012. Non-newtonian fluid mechanics laborotary-McKinley research group. Disponível em: <<http://web.mit.edu/bavand/www/research.xhtml>>. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 132.

KEUNINGS, R. Micro-macro methods for the multiscale simulation of viscoelastic flow using molecular models of kinetic theory. **Rheology reviews**, British Society of Rheology, p. 67–98, 2004. Citado na página 49.

KHISMATULLIN, D.; RENARDY, Y.; RENARDY, M. Development and implementation of VOF-PROST for 3D viscoelastic liquid–liquid simulations. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 140, n. 1–3, p. 120 – 131, 2006. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025706001558>>. Citado 3 vezes nas páginas 59, 65 e 114.

KLOSTERMANN, J.; SCHAAKE, K.; SCHWARZE, R. Numerical simulation of a single rising bubble by VOF with surface compression. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd, v. 71, n. 8, p. 960–982, 2013. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.3692>>. Citado na página 104.

KOPITO, L.; KOSASKY, H. The tackiness rheometer determination of the viscoelasticity of cervical mucus. **Human Ovulation** (ed. ESF Hafez), p. 351–361, 1979. Citado na página 131.

LAFABURIE, B.; NARDONE, C.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. **Journal of Computational Physics**, v. 113, n. 1, p. 134 – 147, 1994. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711235>>. Citado 3 vezes nas páginas 102, 103 e 106.

LAI, W.; RUBIN, D.; RUBIN, D.; KREMPL, E. **Introduction to continuum mechanics**. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2009. Citado na página 96.

LAMB, H. **Hydrodynamics Cambridge University Press**. [S.l.]: Cambridge, 1932. Citado 3 vezes nas páginas 17, 109 e 110.

LARSON, R.; DOI, M. Mesoscopic domain theory for textured liquid crystalline polymers. **Journal of Rheology**, v. 35, n. 4, p. 539–563, 1991. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/sor/journal/jor2/35/4/10.1122/1.550180>>. Citado na página 49.

LEVEQUE, R. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. [S.l.]: Siam, 2007. v. 98. Citado na página 58.

- LHUISSIER, H.; NÉEL, B.; LIMAT, L. Viscoelasticity breaks the symmetry of impacting jets. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 113, p. 194502, Nov 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.194502>>. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- LI, J.; RENARDY, Y.; RENARDY, M. A numerical study of periodic disturbances on two-layer couette flow. **Physics of Fluids**, v. 10, n. 12, p. 3056–3071, 1998. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/10/12/10.1063/1.869834>>. Citado 3 vezes nas páginas 36, 59 e 60.
- LI, S.; LIU, W. Meshfree and particle methods and their applications. **Applied Mechanics Reviews**, American Society of Mechanical Engineers, v. 55, n. 1, p. 1–34, 2002. Citado na página 28.
- LIU, M.; LIU, G. Smoothed particle hydrodynamics (sph): an overview and recent developments. **Archives of computational methods in engineering**, Springer Netherlands, v. 17, n. 1, p. 25–76, 2010. ISSN 1134-3060. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s11831-010-9040-7>>. Citado na página 28.
- LIU, X.-D.; FEDKIW, R.; KANG, M. A boundary condition capturing method for poisson's equation on irregular domains. **Journal of Computational Physics**, v. 160, n. 1, p. 151 – 178, 2000. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999100964441>>. Citado na página 31.
- LUO, J.; HU, X.; ADAMS, N. Curvature boundary condition for a moving contact line. **Journal of Computational Physics**, v. 310, p. 329 – 341, 2016. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999116000322>>. Citado 3 vezes nas páginas 80, 110 e 111.
- LUO, K.; SHAO, C.; YANG, Y.; FAN, J. A mass conserving level set method for detailed numerical simulation of liquid atomization. **Journal of Computational Physics**, v. 298, p. 495 – 519, 2015. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115003952>>. Citado na página 30.
- LUO, X.-L. Numerical simulation of weissenberg phenomena – the rod-climbing of viscoelastic fluids. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 180, p. 393 – 412, 1999. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782599001759>>. Citado 7 vezes nas páginas 18, 35, 36, 117, 121, 122 e 144.
- M, A. M.; CHIKATAMARLA, S.; KARLIN, I. Entropic lattice boltzmann method for multiphase flows. **Physical Review letters**, American Physical Society, v. 114, p. 174502, 2015. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.174502>>. Citado na página 28.
- MACMINN, C.; MCKINLEY, G. Tubeless siphon and die swell demonstration. **Department of Mechanical Engineering Massachusetts Institute of Technology, Cambridge MA**, v. 2139, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- MARTINS, F.; OISHI, C.; AFONSO, A.; ALVES, M. A numerical study of the kernel-conformation transformation for transient viscoelastic fluid flows. **Journal of Computational Physics**, v. 302, p. 653 – 673, 2015. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999115005653>>. Citado 2 vezes nas páginas 62 e 89.

MAXWELL, J. On the dynamical theory of gases. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, The Royal Society, v. 157, p. 49–88, 1867. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/108968>>. Citado na página 49.

MCKEE, S.; TOMÉ, M.; FERREIRA, V.; CUMINATO, J.; CASTELO, A.; SOUSA, F.; MANGIAVACCHI, N. The MAC method. **Computers & Fluids**, v. 37, n. 8, p. 907 – 930, 2008. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793007001909>>. Citado na página 29.

MCKINLEY, G. Dimensionless groups for understanding free surface flows of complex fluids. **SOR Rheology Bulletin**, v. 2005, p. 6–9, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 133.

_____. 2013. Non-newtonian fluid mechanics laborotary-McKinley research group. Disponível em: <<http://web.mit.edu/nmf/research/phenomena/rodclimbing.html>>. Citado 3 vezes nas páginas 18, 34 e 118.

MCKINLEY, G.; PAKDEL, P.; ÖZTEKIN, A. Rheological and geometric scaling of purely elastic flow instabilities. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 67, n. 0, p. 19 – 47, 1996. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037702579601453X>>. Citado na página 61.

MCKINLEY, G.; RENARDY, M. Wolfgang von ohnesorge. **Physics of Fluids**, v. 23, n. 12, 2011. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/23/12/10.1063/1.3663616>>. Citado na página 101.

MILLER, G.; COLELLA, P. A conservative three-dimensional eulerian method for coupled solid–fluid shock capturing. **Journal of Computational Physics**, v. 183, n. 1, p. 26 – 82, 2002. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999102971585>>. Citado na página 66.

MIRZAZADEH, M.; ESCUDIER, M.; RASHIDI, F.; HASHEMABADI, S. Purely tangential flow of a PTT-viscoelastic fluid within a concentric annulus. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 129, n. 2, p. 88 – 97, 2005. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025705001540>>. Citado na página 90.

MONTEFUSCOLO, F. **Métodos numéricos para escoamentos com linhas de contato dinâmicas**. Dissertação (Mestrado) — Universidade de São Paulo, 2012. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/55/55134/tde-24042013-150545/>>. Citado 4 vezes nas páginas 15, 27, 48 e 110.

MONTEFUSCOLO, F.; SOUSA, F.; BUSCAGLIA, G. High-order ALE schemes for incompressible capillary flows. **Journal of Computational Physics**, v. 278, p. 133–147, 2014. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999114005841>>. Citado 3 vezes nas páginas 27, 80 e 109.

OISHI, C.; MARTINS, F.; TOMÉ, M.; CUMINATO, J.; MCKEE, S. Numerical solution of the eXtended Pom-Pom model for viscoelastic free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 166, n. 3-4, p. 165–179, 2011. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TGV-51FNPC4-1/2/58a940aebcb2bc25a7ab905dbd814601>>. Citado na página 43.

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**, n. 0, p. 91 – 103, 2012. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025711002618>>. Citado 3 vezes nas páginas 59, 60 e 171.

OISHI, C.; TOMÉ, M.; CUMINATO, J.; MCKEE, S. An implicit technique for solving 3D low reynolds number moving freesurface flows. **Journal of Computational Physics**, v. 227, n. 16, p. 7446–7468, 2008. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WHY-4SD6SRN-2/2/e609768bee8db02beec5785b5859b65e>>. Citado na página 60.

OLDROYD, J. On the formulation of rheological equations of state. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 200, n. 1063, p. 523–541, 1950. ISSN 0080-4630. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/200/1063/523>>. Citado na página 50.

OLIVEIRA, M.; MCKINLEY, G. Iterated stretching and multiple beads-on-a-string phenomena in dilute solutions of highly extensible flexible polymers. **Physics of Fluids**, v. 17, n. 7, 2005. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pof2/17/7/10.1063/1.1949197>>. Citado na página 133.

OpenFOAM. **OpenFOAM version 2.3.0: multiphase modelling**. 2014. Disponível em: <<http://www.openfoam.org/version2.3.0/multiphase.php>>. Citado na página 70.

OSHER, S.; FEDKIW, R. **Level set methods and dynamic implicit surfaces**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 153. Citado na página 70.

OTELBAEV, M. The existence of a strong solution to the navier-stokes equations. **Mathematical Journal**, v. 13, n. 4, p. 50, 2013. ISSN 1682-0525. Citado na página 40.

PAN, T.; HAO, J.; GLOWINSKI, R. On the simulation of a time-dependent cavity flow of an oldroyd-b fluid. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 60, n. 7, p. 791–808, 2009. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.1919>>. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 89.

PARKER, B.; YOUNGS, D. **Two and three dimensional Eulerian simulation of fluid flow with material interfaces**. [S.l.]: Atomic Weapons Establishment, 1992. Citado na página 65.

PAULO, G.; OISHI, C.; TOMÉ, M.; ALVES, M.; PINHO, F. Numerical solution of the FENE-CR model in complex flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 204, p. 50 – 61, 2014. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025713002048>>. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 60.

PHAN-THIEN, N. A nonlinear network viscoelastic model. **Journal of Rheology**, The Society of Rheology, v. 22, n. 3, p. 259–283, 1978. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/sor/journal/jor2/22/3/10.1122/1.549481>>. Citado na página 52.

_____. **Understanding viscoelasticity: basics of rheology**. [S.l.]: Springer, 2002. Citado na página 168.

PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. A new constitutive equation derived from network theory. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 2, n. 4, p. 353 – 365, 1977. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037702577800219>>. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 119.

PILLAPAKKAM, S.; SINGH, P. A level-set method for computing solutions to viscoelastic two-phase flow. **Journal of Computational Physics**, v. 174, n. 2, p. 552 – 578, 2001. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910196927X>>. Citado na página 114.

PILLIOD, J.; PUCKETT, E. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. **Journal of Computational Physics**, v. 199, n. 2, p. 465–502, 2004. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/B6WHY-4CX14XC-1/2/cb4f3f7e28a206b1efaad47fabdeab00>>. Citado 10 vezes nas páginas 16, 30, 31, 36, 65, 70, 71, 92, 93 e 94.

PINHO, F.; OLIVEIRA, P. Axial annular flow of a nonlinear viscoelastic fluid — an analytical solution. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 93, n. 2–3, p. 325 – 337, 2000. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025700001130>>. Citado na página 90.

PIVELLO, M.; VILLAR, M.; SERFATY, R.; ROMA, A.; SILVEIRA-NETO, A. A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 58, p. 72 – 82, 2014. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932213001286>>. Citado 3 vezes nas páginas 26, 76 e 82.

POPINET, S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. **Journal of Computational Physics**, v. 228, p. 5838–5866, 2009. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910900240X>>. Citado 12 vezes nas páginas 36, 63, 76, 78, 79, 88, 99, 100, 101, 102, 103 e 106.

POZRIKIDIS, C. **Fluid dynamics: theory, computation, and numerical simulation**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009. Citado 5 vezes nas páginas 17, 48, 111, 112 e 113.

PROSPERETTI, A.; TRYGGVASON, G. **Computational methods for multiphase flow**. [S.l.]: Cambridge university press, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 44.

PUCKETT, E. A volume-of-fluid interface reconstruction algorithm that is second-order accurate in the max norm. **Communications in Applied Mathematics and Computational Science**, Mathematical Sciences Publishers, v. 5, n. 2, p. 199–220, 2010. Citado na página 65.

PUCKETT, E.; ALMGREN, A.; BELL, J.; MARCUS, D.; RIDER, W. A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. **Journal of Computational Physics**, v. 130, n. 2, p. 269 – 282, 1997. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999196955904>>. Citado 4 vezes nas páginas 71, 72, 73 e 99.

PUCKETT, E.; SALTZMAN, J. A 3D adaptive mesh refinement algorithm for multimaterial gas dynamics. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 60, n. 1–4, p. 84 – 93, 1992. ISSN 0167-2789. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016727899290228F>>. Citado na página 65.

QUAN, S.; LOU, J.; SCHMIDT, D. Modeling merging and breakup in the moving mesh interface tracking method for multiphase flow simulations. **Journal of Computational Physics**, v. 228, n. 7, p. 2660 – 2675, 2009. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910800675X>>. Citado na página 27.

- RAUWOENS, P.; VIERENDEELS, J.; MERCI, B. A solution for the odd–even decoupling problem in pressure-correction algorithms for variable density flows. **Journal of Computational Physics**, v. 227, n. 1, p. 79 – 99, 2007. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199910700321X>>. Citado na página 168.
- RAVANCHI, M.; MIRZAZADEH, M.; RASHIDI, F. Flow of giesekus viscoelastic fluid in a concentric annulus with inner cylinder rotation. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 28, n. 4, p. 838 – 845, 2007. ISSN 0142-727X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X06001500>>. Citado 3 vezes nas páginas 16, 90 e 91.
- RENARDY, Y.; RENARDY, M. Prost: a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. **Journal of Computational Physics**, v. 183, n. 2, p. 400 – 421, 2002. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999102971901>>. Citado 7 vezes nas páginas 31, 65, 74, 75, 76, 100 e 103.
- RODD, L.; SCOTT, T.; COOPER-WHITE, J.; MCKINLEY, G. Capillary break-up rheometry of low-viscosity elastic fluids. **Applied Rheology**, p. 12–27, 2004. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/1721.1/16533>>. Citado na página 131.
- RUDMAN, M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd, v. 24, n. 7, p. 671–691, 1997. ISSN 1097-0363. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0363\(19970415\)24:7<671::AID-FLD508>3.0.CO;2-9](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-0363(19970415)24:7<671::AID-FLD508>3.0.CO;2-9)>. Citado 2 vezes nas páginas 70 e 94.
- RUTLEDGE, G.; FRIDRIKH, S. Formation of fibers by electrospinning. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v. 59, n. 14, p. 1384 – 1391, 2007. ISSN 0169-409X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169409X07001846>>. Citado na página 131.
- SALIH, A.; MOULIC, S. Some numerical studies of interface advection properties of level set method. **Sadhana**, Springer-Verlag, v. 34, n. 2, p. 271–298, 2009. ISSN 0256-2499. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s12046-009-0013-1>>. Citado 2 vezes nas páginas 70 e 94.
- SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 31, n. 1, p. 567–603, 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1146/annurev.fluid.31.1.567>>. Citado 4 vezes nas páginas 15, 28, 44 e 45.
- SCHIPPER, R.; SILLETTI, E.; VINGERHOEDS, M. Saliva as research material: Biochemical, physicochemical and practical aspects. **Archives of Oral Biology**, v. 52, n. 12, p. 1114 – 1135, 2007. ISSN 0003-9969. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003996907001653>>. Citado na página 131.
- SCHLEINIGER, G.; WEINACHT, R. A remark on the giesekus viscoelastic fluid. **Journal of Rheology**, v. 35, n. 6, p. 1157–1170, 1991. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/sor/journal/jor2/35/6/10.1122/1.550169>>. Citado na página 52.
- SCHROEDER, C.; ZHENG, W.; FEDKIW, R. Semi-implicit surface tension formulation with a lagrangian surface mesh on an eulerian simulation grid. **Journal of Computational Physics**, v. 231, n. 4, p. 2092 – 2115, 2012. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999111006760>>. Citado na página 101.
- SMITH, J.; DHIMAN, R.; ANAND, S.; REZA-GARDUNO, E.; COHEN, R.; MCKINLEY, G.; VARANASI, K. Droplet mobility on lubricant-impregnated surfaces. **Soft Matter**, The Royal

Society of Chemistry, v. 9, p. 1772–1780, 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C2SM27032C>>. Citado na página 48.

SOUSA, F. **Cluster Euler**. 2015. Supercomputador do Centro de Ciências Matemáticas Aplicadas à Indústria. Disponível em: <<http://www.cemeai.icmc.usp.br/Euler>>. Citado na página 85.

SOUSA, F.; MANGIAVACCHI, N.; NONATO, L.; CASTELO, A.; TOMÉ, M.; FERREIRA, V.; CUMINATO, J.; MCKEE, S. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. **Journal of Computational Physics**, v. 198, n. 2, p. 469 – 499, 2004. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999104000488>>. Citado na página 29.

SOUSA, P.; PINHO, F.; OLIVEIRA, M.; ALVES, M. Purely elastic flow instabilities in microscale cross-slot devices. **Soft Matter**, The Royal Society of Chemistry, v. 11, p. 8856–8862, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5SM01298H>>. Citado na página 56.

SOUSA, P.; VEGA, E.; SOUSA, R.; MONTANERO, J.; ALVES, M. Measurement of relaxation times in extensional flow of weakly viscoelastic polymer solutions. 2016. Submitted. Citado 3 vezes nas páginas 37, 141 e 144.

STELTER, M.; BRENN, G.; YARIN, A.; SINGH, R.; DURST, F. Validation and application of a novel elongational device for polymer solutions. **Journal of Rheology**, v. 44, n. 3, p. 595–616, 2000. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/sor/journal/jor2/44/3/10.1122/1.551102>>. Citado na página 131.

STEWART, P.; LAY, N.; SUSSMAN, M.; OHTA, M. An improved sharp interface method for viscoelastic and viscous two-phase flows. **Journal of Scientific Computing**, v. 35, n. 1, p. 43–61, 2007. ISSN 1573-7691. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10915-007-9173-5>>. Citado na página 59.

SU, J.; OUYANG, J.; WANG, X.; YANG, B.; ZHOU, W. Lattice boltzmann method for the simulation of viscoelastic fluid flows over a large range of weissenberg numbers. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 194, p. 42 – 59, 2013. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025712002558>>. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 89.

SUN, D.; TAO, W. A coupled volume-of-fluid and level set (VOSET) method for computing incompressible two-phase flows. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 53, n. 4, p. 645 – 655, 2010. ISSN 0017-9310. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931009005717>>. Citado 3 vezes nas páginas 31, 74 e 76.

SUSSMAN, M. A second order coupled level set and volume-of-fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. **Journal of Computational Physics**, v. 187, n. 1, p. 110 – 136, 2003. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999103000871>>. Citado 3 vezes nas páginas 31, 73 e 76.

SUSSMAN, M.; FATEMI, E. An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 20, n. 4, p. 1165–1191, 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1137/S1064827596298245>>. Citado na página 30.

SUSSMAN, M.; PUCKETT, E. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. **Journal of Computational Physics**, v. 162, n. 2, p. 301 – 337, 2000. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999100965379>>. Citado 3 vezes nas páginas 31, 71 e 73.

SUSSMAN, M.; SMEREKA, P.; OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. **Journal of Computational Physics**, v. 114, n. 1, p. 146 – 159, 1994. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999184711557>>. Citado na página 29.

SUSSMAN, M.; SMITH, K.; HUSSAINI, M.; OHTA, M.; ZHI-WEI, R. A sharp interface method for incompressible two-phase flows. **Journal of Computational Physics**, v. 221, n. 2, p. 469 – 505, 2007. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106002981>>. Citado na página 74.

TABATABAEI, S.; JAHROMI, H.; WEBSTER, M.; WILLIAMS, P.; HOLDER, A.; LEWIS, K.; DAVIES, G.; GRIFFIN, L.; EBDEN, P.; ASKILL, C. A CaBER computational–experimental rheological study on human sputum. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 222, p. 272 – 287, 2015. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025715000579>>. Citado na página 131.

TAN, H.; TORNIAINEN, E.; MARKEL, D.; BROWNING, R. Numerical simulation of droplet ejection of thermal inkjet printheads. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 77, n. 9, p. 544–570, 2015. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.3997>>. Citado na página 131.

TANNER, R. A theory of die-swell. **Journal of Polymer Science Part A-2: Polymer Physics**, John Wiley & Sons, Inc., v. 8, n. 12, p. 2067–2078, 1970. ISSN 1542-9377. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/pol.1970.160081203>>. Citado na página 32.

_____. A theory of die-swell revisited. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 129, n. 2, p. 85 – 87, 2005. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025705001618>>. Citado na página 32.

TAVANGAR, S.; HASHEMABADI, S.; SABERIMOGHADAM, A. CFD simulation for secondary breakup of coal–water slurry drops using OpenFOAM. **Fuel Processing Technology**, v. 132, p. 153 – 163, 2015. ISSN 0378-3820. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378382014005578>>. Citado na página 70.

THOMPSON, J.; ROTHSTEIN, J. The atomization of viscoelastic fluids in flat-fan and hollow-cone spray nozzles. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 147, n. 1–2, p. 11 – 22, 2007. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025707001553>>. Citado na página 131.

TOMÉ, M.; CASTELO, A.; AFONSO, A.; ALVES, M.; 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. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025712000511>>. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 63.

TRYGGVASON, G.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. **Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado 6 vezes nas páginas 44, 45, 46, 70, 71 e 78.

VILLE, L.; SILVA, L.; COUPEZ, T. Convected level set method for the numerical simulation of fluid buckling. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 66, n. 3, p. 324–344, 2010. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.2259>>. Citado na página 171.

WAGNER, A.; GIRAUD, L.; SCOTT, C. Simulation of a cusped bubble rising in a viscoelastic fluid with a new numerical method. **Computer Physics Communications**, v. 129, n. 1–3, p. 227 – 232, 2000. ISSN 0010-4655. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465500001090>>. Citado na página 34.

WARDLE, K.; WELLER, H. Hybrid multiphase cfd solver for coupled dispersed/segregated flows in liquid-liquid extraction. **International Journal of Chemical Engineering**, Hindawi Publishing Corporation, v. 2013, 2013. Disponível em: <<http://www.hindawi.com/journals/ijce/2013/128936/>>. Citado na página 70.

WATANABE, T. Numerical simulation of oscillations and rotations of a free liquid droplet using the level set method. **Computers & Fluids**, v. 37, n. 2, p. 91 – 98, 2008. ISSN 0045-7930. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004579300700093X>>. Citado na página 109.

WELLER, H.; TABOR, G.; JASAK, H.; FUREBY, C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. **Computers in Physics**, v. 12, n. 6, p. 620–631, 1998. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/cip/12/6/10.1063/1.168744>>. Citado na página 63.

WENZEL, R. Resistance of solid surfaces to wetting by water. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 28, n. 8, p. 988–994, 1936. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/ie50320a024>>. Citado na página 48.

WESSELING, P. **Principles of computational fluid dynamics**. 1. ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2001. (Springer Series in Computational Mathematics). ISBN 9783540678533, 3540678530. Disponível em: <<http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=43CCEC07B7887BEE668FD7E03805F53D>>. Citado na página 43.

XIAO, F.; HONMA, Y.; KONO, T. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, John Wiley & Sons, Ltd., v. 48, n. 9, p. 1023–1040, 2005. ISSN 1097-0363. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/fld.975>>. Citado na página 65.

XU, X.; OUYANG, J.; JIANG, T.; LI, Q. Numerical simulation of 3D-unsteady viscoelastic free surface flows by improved smoothed particle hydrodynamics method. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 177–178, p. 109 – 120, 2012. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025712000730>>. Citado na página 112.

YILDIRIM, O.; BASARAN, O. Deformation and breakup of stretching bridges of newtonian and shear-thinning liquids: comparison of one- and two-dimensional models. **Chemical Engineering Science**, v. 56, n. 1, p. 211 – 233, 2001. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250900004085>>. Citado 2 vezes nas páginas 135 e 139.

- YOKOI, K. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. **Journal of Computational Physics**, v. 226, n. 2, p. 1985 – 2002, 2007. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107002732>>. Citado 2 vezes nas páginas 92 e 94.
- YOO, J.; JOSEPH, D.; BEAVERS, G. Higher-order theory of the weissenberg effect. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 92, p. 529–590, 6 1979. ISSN 1469-7645. Disponível em: <http://journals.cambridge.org/article_S0022112079000768>. Citado na página 125.
- YOUNG, T. An essay on the cohesion of fluids. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, v. 95, p. 65–87, 1805. Citado 2 vezes nas páginas 47 e 48.
- YOUNGS, D. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. **Numerical methods for fluid dynamics**, Academic Press New York, v. 24, n. 2, p. 273–285, 1982. Citado na página 65.
- YUAN, Y.; LEE, T. **Surface science techniques**. Springer Berlin Heidelberg, 2013. 3–34 p. ISBN 978-3-642-34243-1. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-34243-1_1>. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 135.
- ZALESK, S. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. **Journal of Computational Physics**, v. 31, n. 3, p. 335 – 362, 1979. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999179900512>>. Citado na página 70.
- ZANDEN, J.; HULSEN, M. Mathematical and physical requirements for successful computations with viscoelastic fluid models. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 29, p. 93 – 117, 1988. ISSN 0377-0257. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377025788850523>>. Citado na página 51.

SISTEMA DE COORDENADAS

No código desenvolvido nesse projeto, dois sistemas de coordenadas foram adotados, coordenadas cartesianas e cilíndricas. O sistema de coordenadas cilíndricas foi adotado para resolver problemas envolvendo geometrias complexas, como o efeito de Weissenberg e o CaBER (vide seção 1.3). A utilização de coordenadas cilíndricas permite que a malha computacional coincida com a geometria do problema físico. Isso permite alcançar uma melhor precisão na aproximação da solução por diferenças finitas. No entanto, a mudança de coordenadas cartesianas para coordenadas cilíndricas, adiciona vários termos no sistema de equações governantes, devido à mudança no operador ∇ , e o envolvimento das forças centrífuga e de Coriolis.

A mudança no sistema de coordenadas, foi um dos estudos iniciais no desenvolvimento desse projeto, para modelar problemas com geometrias curvas. No entanto, foi uma parte um pouco trabalhosa, pois grande parte dos artigos que apresentam resultados sobre fluidos viscoelásticos em coordenadas cilíndricas, são simplificados para o caso axissimétrico, e quase nenhum autor apresenta o sistema de equações escrita nesse sistema de coordenadas. No caso axissimétrico, todas as derivadas das variáveis na direção azimutal são eliminadas, $\frac{\partial}{\partial \theta} = 0$, menos $\frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial \theta} = \mathbf{e}_\theta$ e $\frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial \theta} = -\mathbf{e}_r$, em que, $\mathbf{e}_r$ e $\mathbf{e}_\theta$ são os vetores unitários nas direções radial, azimutal, respectivamente.

A seguir são apresentados os operadores em coordenadas cilíndricas, bem como o sistema de equações escrito nesse sistema de coordenadas. Também são discutidas as mudanças que ocorrem no tipo de células devido a curvatura do domínio.

A.1 Operadores e sistema de equações em coordenadas cilíndricas

Em um sistema de coordenadas cilíndricas o vetor velocidade é definido como

$$\mathbf{u} = u_r \mathbf{e}_r + u_\theta \mathbf{e}_\theta + u_z \mathbf{e}_z, \quad (\text{A.1})$$

em que, o subscrito r , θ e z , representam as direções radial, azimutal e axial, respectivamente. O operador ∇ é definido em coordenadas cilíndricas da seguinte forma

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (\text{A.2})$$

Nesse caso, o gradiente do campo de velocidades é dado por

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial r} & \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

enquanto que, o divergente do campo de velocidades é dado pelo seu traço

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial (ru_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

O lado esquerdo da equação de quantidade de movimento, Eq.(2.2), representa as componentes da aceleração, em coordenadas cilíndricas são escritas como

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] &= \rho \left[\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_\theta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} \right) + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} \right] \mathbf{e}_r \\ &+ \rho \left[\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + u_\theta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right) + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right] \mathbf{e}_\theta \\ &+ \rho \left[\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_\theta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} \right) + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] \mathbf{e}_z. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Os termos $-\frac{u_\theta^2}{r}$, na direção radial, e $\frac{u_r u_\theta}{r}$, na direção azimutal, representam as forças centrífuga e de Coriolis, respectivamente. Essas forças agem no sistema devido à curvatura do sistema de coordenadas. Considerando que as forças de campo agindo no sistema, como

gravidade e tensão superficial, são representadas por $\mathbf{F}$, o lado direito da Eq.(2.2), é escrito em coordenadas cilíndricas através do operador vetorial Eq. A.2 como

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu_s \dot{\gamma} + \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{F}]_r = & -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau^{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau^{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau^{zr}}{\partial z} - \frac{\tau^{\theta\theta}}{r} \\ & + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_s r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\mu_s \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_s \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right] - \frac{2\mu_s}{r^2} \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_r \right) + F_r, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu_s \dot{\gamma} + \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{F}]_\theta = & -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau^{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau^{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau^{z\theta}}{\partial z} + \frac{\tau^{\theta r} - \tau^{r\theta}}{r} \\ & + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu_s r^2 \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right) \right] + \frac{2}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\mu_s \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_r \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_s \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) \right] + F_\theta, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} [\nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu_s \dot{\gamma} + \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{F}]_z = & -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau^{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau^{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau^{zz}}{\partial z} \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu_s r \left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\mu_s \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) \right] \\ & + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_s \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + F_z. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Assim, as equações de conservação da massa e conservação da quantidade de movimento, são representadas em um sistema de coordenadas cilíndricas pelas Eqs. A.4-A.8. No caso da equação constitutiva, Eq. 2.3, não tem mistério, o gradiente do campo de velocidades é definido pela Eq. A.3, enquanto que o termo convectivo é definido como

$$\begin{aligned} \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{rr} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{rr} - \frac{u_\theta}{r} (\tau^{r\theta} + \tau^{\theta r}), \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{r\theta} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{r\theta} + \frac{u_\theta}{r} (\tau^{rr} - \tau^{\theta\theta}), \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{rz} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{rz} - \frac{u_\theta}{r} \tau^{\theta z}, \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{\theta r} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{\theta r} + \frac{u_\theta}{r} (\tau^{rr} - \tau^{\theta\theta}), \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{\theta\theta} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{\theta\theta} + \frac{u_\theta}{r} (\tau^{r\theta} + \tau^{\theta r}), \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{\theta z} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{\theta z} + \frac{u_\theta}{r} \tau^{rz}, \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{zr} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{zr} - \frac{u_\theta}{r} \tau^{z\theta}, \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{z\theta} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{z\theta} + \frac{u_\theta}{r} \tau^{zr}, \\ \{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}\}_{zz} &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau^{zz}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

em que, o operador $(\mathbf{u} \cdot \nabla) = u_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial}{\partial z}$. O tensor τ é simétrico (BIRD *et al.*, 1987), assim, é necessário calcular apenas seis componentes para atualizar o tensor viscoelástico. No caso axissimétrico, todas as derivadas das variáveis na direção azimutal são eliminadas, mas ainda é necessário calcular 10 variáveis, três componentes da velocidade, seis componentes do tensor viscoelástico, e a pressão. Mais detalhes sobre o sistema de coordenadas cilíndricas podem ser encontrados em (BIRD *et al.*, 1987; PHAN-THIEN, 2002).

A.2 Malha computacional em coordenadas cilíndricas

As equações são discretizadas em uma malha deslocada do tipo MAC (HARLOW; WELCH, 1965), em que, as componentes do vetor velocidade são armazenadas nas faces das células, e outras propriedades como a pressão e o tensor viscoelástico, são armazenadas no centro das células. Esse método foi proposto para resolver escoamentos incompressíveis com a presença de superfície livre. No caso de escoamentos incompressíveis, a pressão tem o papel de garantir que a equação da continuidade, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, seja satisfeita em cada passo de tempo. A pressão é obtida com o auxílio do método da projeção (CHORIN, 1968), resolvendo a equação de Poisson, Eq. 3.6, para obter a correção da pressão. Nesse caso, a malha deslocada define aproximações de segunda ordem para os operadores divergente e gradiente, evitando problemas numéricos na discretização da equação de Poisson, como as instabilidades de *odd-even decoupling* (RAUWOENS *et al.*, 2007; DEVENDRAN; CORONA, 2009).

Figura 67 – Tipos de células em coordenadas cilíndricas.

Devido ao sistema de coordenadas cilíndricas, as equações são discretizadas no espaço em uma malha do tipo MAC, em que, dois tipos de células são consideradas (vide figura 67). A figura 67a ilustra as células presentes no eixo de coordenadas. Considerando que a posição

das células no domínio computacional são definidas pelos índices i, j, k , em que, esses índices correspondem a distribuição nas direções radial, azimutal, e axial, respectivamente, as células que estão no eixo de coordenadas correspondem a $i = 1$. Para o caso $i > 1$, a célula é ilustrada pela figura 67b. As células no eixo de coordenadas ($i = 1$) geram problemas na aproximação numérica da solução, devido à singularidade. Esse problema ocorre no cálculo da velocidade radial, na posição onde o raio é zero. Existem alguns trabalhos na literatura que tratam dessas singularidades, como em (FUKAGATA; KASAGI, 2002; BARBOSA; DAUBE, 2005). No entanto, assumindo a hipótese de axissimetria esse problema não ocorre, pois a velocidade radial é zero na posição do eixo de coordenadas.

MELHORIAS NO SISTEMA FREEFLOW

Nas seções seguintes serão apresentados alguns testes com contribuições realizadas no sistema Freeflow (CASTELO *et al.*, 2000). As contribuições foram realizadas no módulo Freeflow 2D, com a implementação do método ELVIRA (VOF-PLIC) para representação da superfície livre, com um esquema de advecção geométrica (vide seção 3.2), e no módulo Freeflow 3D, com a implementação do método de estabilização *LOG-conformation* (vide seção 3.1.3) para os modelos Oldroyd-B e Giesekus. Além dessas, foram realizadas outras melhorias, que estão documentadas em (FIGUEIREDO *et al.*, 2013; FIGUEIREDO *et al.*, 2014; CUMINATO *et al.*, 2014).

B.1 Jato oscilante

O método VOF com o algoritmo de reconstrução da interface ELVIRA, e um esquema de advecção geométrica, foram inseridos no sistema Freeflow 2D. Para verificar essa implementação, dois testes foram realizados com o experimento do jato oscilante (*jet buckling*), um com fluido newtoniano, e outro com fluido viscoelástico. O experimento do jato oscilante consiste em um fluido injetado contra uma placa rígida, e devido às forças viscosas ao atingir a parede rígida, o fluido se acumula e inicia-se a ocorrência de oscilações no jato do fluido, caracterizando o fenômeno.

Esse problema é encontrado em diversas aplicações industriais, sendo mais comum no preenchimento de moldes ou formas. Para fluidos viscosos, Cruickshank (1980) e Cruickshank (1988) determinaram dois parâmetros necessários para a ocorrência dessas oscilações, $H/D > 7.2$ e $Re < 1.2$, em que, H é a distância do injetor até a placa rígida, e D é o diâmetro do injetor. Recentemente, Ville *et al.* (2010) desenvolveram uma técnica baseado no método LS para resolver escoamentos newtonianos com superfície livre, e apresentaram resultados do jato oscilante em duas e três dimensões. Escoamentos desse fenômeno envolvendo fluidos viscoelásticos foram apresentados por Oishi *et al.* (2012), Figueiredo *et al.* (2013). Nesses trabalhos, foram

investigados a influência dos parâmetros do modelo XPP, com um método implícito para o tratamento da pressão na superfície livre, em duas e três dimensões.

Os parâmetros utilizados no estudo do jato oscilante foram: $H = 7.5$ cm, $D = 0.4$ cm, $U = 0.1$ m/s, $g = -9.81$ m/s² e $Re = \frac{\rho DU}{\mu} = 0.01$, com um malha uniforme onde $\Delta x = \Delta y = 0.05$ cm. Os resultados obtidos foram comparados com os resultados do método MAC. A figura 68 mostra a comparação dos resultados obtidos com o fluido newtoniano, enquanto a figura 69 exibe uma comparação para o fluido viscoelástico, com o modelo Oldroyd-B, $Wi = \frac{\lambda U}{D} = 5$, e $\beta = \frac{\mu_s}{\mu} = 0.2$. Observa-se que o comportamento do jato com os métodos MAC e VOF, para ambos os tipos de fluido, apresentam boa concordância, tanto na forma do jato, quanto na frequência das oscilações. É possível verificar a frequência das oscilações pelo número de “dobras” observadas nas laterais da porção do fluido que acumulou junto ao prato.

Figura 68 – Resultados numéricos do experimento do jato oscilante com fluido newtoniano, e $Re = 0.01$: a) método MAC, b) método VOF.

A implementação do método VOF para representar a superfície livre no sistema Freeflow deixou o sistema muito mais robusto, pois agora permite o estudo de problemas onde ocorre mudança topológica. Apesar do problema do jato oscilante não exibir mudança topológica nos experimentos realizados nesse estudo comparativo, as rotinas do método VOF inseridas no sistema Freeflow são as mesmas rotinas desenvolvidas na construção da metodologia proposta no presente projeto. Assim, todos os testes realizados no presente projeto podem ser considerados

Figura 69 – Resultados numéricos do experimento do jato oscilante com o fluido Oldroyd-B, $Re = 0.01$, $Wi = 5$ e $\beta = 0.5$: a) método MAC, b) método VOF.

como uma verificação do método VOF inserido no Freeflow.

B.2 Métodos de estabilização

Nessa seção é descrito o estudo realizado para verificação do método de estabilização log-conformação, implementado no sistema Freeflow 3D com o modelo Giesekus em coordenadas cartesianas. Para problemas transientes, o modelo Giesekus não possui solução analítica para a velocidade e nem para as componentes do tensor não-newtoniano τ . Desta forma, para verificar o método numérico implementado, foi realizado um estudo de convergência da solução numérica utilizando diferentes tamanhos de malhas. Para isso, foi considerado um escoamento em um tubo de raio R e comprimento $10R$ como ilustrado na figura 70.

Na entrada do tubo foi imposto um perfil de velocidade parabólico. Nas paredes do tubo foram impostas condição de contorno rígido, enquanto nos ejetores utilizou-se condição de Neumann homogênea, tanto para a velocidade quanto para a contribuição não-newtoniana.

Os parâmetros de entrada utilizados neste experimento foram: $R = 1$ m, $Re = \frac{\rho UL}{\mu_s + \mu_p} = 1$, $Wi = \frac{\lambda U}{L} = 1$, $\alpha = 0.2$, $\beta = \frac{\mu_s}{\mu_s + \mu_p} = 0.5$ e aceleração da gravidade nula. Neste caso, $L = 2R$ representa a escala de comprimento, e $U = 1$ m/s representa a escala de velocidade. Para analisar

Figura 70 – Ilustração do domínio para simulação do escoamento em um tubo.

a convergência do método foram adotadas malhas uniformes com $\Delta x = \Delta y = \Delta z$: malha *M1* com $\Delta x = 0.1$, malha *M2* com $\Delta x = 0.0714$, malha *M3* com $\Delta x = 0.0455$, e malha *M4* com $\Delta x = 0.0263$. Como a solução analítica do modelo Giesekus não é conhecida, considerou-se a solução da malha mais fina *M4* como a solução de referência.

Na figura 71 são apresentadas as soluções numéricas obtidas para a velocidade w e alguns tensores não-newtonianos, em uma seção transversal próxima ao ejetor do tubo. É necessário considerar uma seção transversal próxima ao ejetor, pois no inflow é imposto para o tensor polimérico o perfil desenvolvido do modelo Oldroyd-B, e de acordo com (ABOUBACAR *et al.*, 2005), o tensor polimérico se desenvolve ao longo do canal, o que leva à obtenção do perfil do modelo Giesekus.

Para verificar a convergência do método numérico, foram utilizados os resultados obtidos com as malhas *M1*, *M2* e *M3*, sendo os resultados da malha *M4* a solução de referência. O erro relativo é calculado por meio da norma $L - 2$, da seguinte forma

$$\|E\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_{ijk} (SOL_{ref} - SOL_{num})^2}{\sum_{ijk} (SOL_{ref})^2}}, \quad (B.1)$$

em que, SOL_{ref} denota a solução obtida com a malha *M4* e SOL_{num} denota as soluções obtidas com as malhas *M1* – *M3*. A tabela 6 apresenta o cálculo do erro relativo utilizando as malhas *M1*, *M2* e *M3*. Observa-se que os erros decrescem com o refinamento da malha, evidenciando a convergência do método numérico.

Tabela 6 – Erros nas malhas *M1*, *M2* e *M3* para o escoamento em um tubo com fluido viscoelástico do tipo Giesekus, utilizando a formulação logaritmo do tensor conformação.

Malhas	$E(w)$	$E(\tau^{zz})$	$E(\tau^{yz})$	$E(\tau^{yy})$
<i>M1</i>	4.2543×10^{-2}	3.7499×10^{-2}	2.4898×10^{-2}	4.7526×10^{-2}
<i>M2</i>	2.2925×10^{-2}	2.3590×10^{-2}	1.6530×10^{-2}	2.7858×10^{-2}
<i>M3</i>	7.9991×10^{-3}	8.4446×10^{-3}	5.9262×10^{-3}	9.9837×10^{-3}

A verificação realizada é um indicativo de que o método log-conformação implementado no sistema Freeflow 3D está apto para simular escoamentos com o modelo Giesekus, ou Oldroyd-

Figura 71 – Solução numérica do escoamento em um tubo com o modelo Giesekus, utilizando a formulação logaritmo do tensor conformação. Comparação entre as soluções obtidas com as malhas $M1$, $M2$ e $M3$ em relação à solução obtida com a malha $M4$. a) w , b) τ_{zz} , c) τ_{yz} , d) τ_{yy} .

B (Giesekus com $\alpha = 0$), o que nos encoraja a resolver outros problemas com altos números de Wi , inclusive com a presença da superfície livre.