

Uma nota sobre a aplicação de condições de fronteira em problemas da dinâmica de fluidos

P.J. Oliveira

Universidade da Beira Interior, Departamento de Engenharia Electromecânica, Unidade de Materiais Têxteis e Papeleiros, 6201-001 Covilhã, Portugal
email: pjpo@ubi.pt <http://webx.ubi.pt/~pjpo/>

Sumário

A correcta implementação de condições fronteira é crucial na resolução numérica de problemas envolvendo o escoamento de fluidos, especialmente quando estes se comportam de forma não newtoniano e ocorrem em regime variável. É mostrado que a aproximação habitualmente empregue para calcular a tensão de corte na parede, em que esta é igual ao produto da viscosidade pela taxa de corte local, não é adequada para os modelos reológicos não newtonianos em uso corrente. Uma forma diferente de obter as condições de fronteira permite evitar oscilações artificiais de origem numérica, e assim recuperar a convergência de segunda ordem em acordo com a discretização utilizada no interior do domínio de cálculo.

Palavras-chave: Condições fronteira; Fluido viscoelástico; Escoamento não estacionário.

1 Introdução

A correcta implementação de condições de fronteira é crucial para a resolução por métodos numéricos de problemas envolvendo o escoamento de fluidos, especialmente quando estes se comportam de forma não newtoniana ou turbulenta em regime variável. Junto a uma parede sólida, por exemplo, a condição de não escorregamento é válida em grande parte dos casos mas a existência de elevados gradientes de velocidade, de forma semelhante ao que acontece com escoamentos turbulentos, faz com que erros cometidos na implementação das condições fronteira tenham tendência a amplificar-se e a induzir oscilações artificiais (de origem numérica) nos campos de velocidade, pressão e tensões.

O interesse pela mecânica de fluidos complexos tem vindo a aumentar, uma vez que existe um grande número de indústrias de processamento de polímeros, plásticos, pastas, matérias alimentares, tintas, etc., cuja matéria-prima se comporta, do ponto de vista do escoamento durante os processos de fabrico, como um líquido não newtoniano que possui propriedades viscoelásticas [1]. A simulação numérica desse tipo de processos requer a resolução simultânea da equação da quantidade de movimento e duma equação constitutiva que represente o comportamento reológico do material.

A ênfase desta apresentação prende-se com escoamentos viscoelásticos completamente desenvolvidos em canais planos, gerados pela imposição súbita de um gradiente de pressões constante. Este problema tem solução analítica que permite o cálculo exacto dos erros cometidos pelas aproximações inerentes aos métodos numéricos. Foi um problema já utilizado como caso teste em trabalhos anteriores [2] onde ficou demonstrado que, apesar da sua simplicidade aparente, esconde dificuldades numéricas não negligenciáveis. Será mostrado que a aproximação habitualmente empregue para calcular a tensão de corte na parede, baseada na hipótese de escoamento localmente viscométrico, não é adequada para os modelos reológicos não newtonianos em uso corrente. Uma forma diferente de obter as condições de fronteira permite evitar zig-zagues numéricos, de comprimento de onda igual ao espaçamento da malha, e, concomitantemente, permite voltar a obter convergência com refinamento de malha de segunda ordem, em acordo com a discretização utilizada no interior do domínio de cálculo.

2 Problema

O problema concreto aqui considerado consiste no escoamento gerado pela imposição súbita de um gradiente de pressões uniforme a um fluido em repouso, contido num canal plano formado por duas placas paralelas infinitas. O objectivo será calcular a evolução da velocidade $u(y,t)$ e da tensão de corte $\tau_{xy}(y,t)$ ao longo do tempo, em todos os pontos na direcção transversal y , normal aos planos que formam as paredes do canal. O fluido apresenta propriedades físicas constantes e está submetido a um escoamento bidimensional, incompressível e

laminar, em situação de desenvolvimento completo. Isto significa que a velocidade, as tensões e o gradiente de pressões não dependem da coordenada alinhada com a direcção do escoamento, direcção longitudinal x . Neste caso a equação da continuidade $\partial u / \partial x + \partial v / \partial y = 0$ implica que a componente da velocidade v segundo a direcção transversal y é nula, pelo que o problema consiste na obtenção da componente segundo x da velocidade, a qual dependerá somente do tempo t e da direcção transversal, isto é $u(y, t)$. Como parte integrante do problema é necessário ainda obter a evolução da tensão, $\tau_{xy}(y, t)$.

Assume-se um fluido não newtoniano viscoelástico constituído por uma solução de um solvente newtoniano (viscosidade η^s) e um soluto polimérico (viscosidade η^p) tal que a tensão de corte total possa ser decomposta na soma das respectivas componentes:

$$\tau_{xy} = \tau_{xy}^s + \tau_{xy}^p \quad (1)$$

com a tensão do solvente dada por:

$$\tau_{xy}^s = \eta^s \frac{\partial u}{\partial y} \quad (2)$$

e a tensão do polímero pela equação (o índice p de polímero é omitido, $\tau_{xy} \equiv \tau_{xy}^p$):

$$\tau_{xy} + \lambda \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} = \eta^p \frac{\partial u}{\partial y} \quad (3)$$

Este modelo reológico, que compreende as Eqs. (1) a (3), é designado como modelo de Oldroyd-B [3] e está aqui escrito para o caso simplificado de escoamento completamente desenvolvido em canal plano. O parâmetro λ representa o tempo de relaxação do fluido, estreitamente relacionado com o seu comportamento elástico.

A conservação da quantidade de movimento segundo x é expressa pela equação:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{dp}{dx} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta^s \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \quad (4)$$

onde u representa a velocidade ao longo do canal, ρ a massa volumica e $-dp/dx$ o gradiente de pressões constante aplicado ao fluido. No problema considerado, estas equações estão sujeitas à condição inicial:

$$u(y, t = 0) = 0 \text{ e } \tau_{xy}(y, t = 0) = 0 \quad \text{para } 0 \leq y \leq 2H \quad (5)$$

onde H é metade da largura do canal (comprimento característico a ser usado para se obter valores sem dimensões). As condições de fronteira são do tipo de Dirichlet, isto é, a velocidade é dada em ambas as extremidades e não varia ao longo do tempo:

$$u(y = 0, t) = 0 \text{ e } u(y = 2H, t) = 0, \text{ para qualquer } t. \quad (6)$$

Estas condições descrevem o não escorregamento do fluido sobre as paredes do canal. Quanto à tensão, o seu valor na fronteira pode ser calculado directamente a partir do campo de velocidades.

O significado físico do problema é simples: um fluido viscoelástico está inicialmente em repouso e é submetido subitamente, em $t = 0$, a um gradiente de pressões constante. Devido à condição de não escorregamento, a velocidade adjacente às paredes é sempre nula, enquanto na parte central do canal a velocidade vai aumentando ao longo do tempo até atingir o perfil parabólico característico de escoamento completamente desenvolvido, o que acontecerá para um tempo “infinito”. Nessa altura a velocidade média obtida é dada por $U = (-dp/dx)H^2 / 3\eta_0$, onde $\eta_0 = \eta^s + \eta^p$ representa a viscosidade total do fluido, que é constante.

Quando se adimensionaliza o problema, fazendo $u \equiv u/U$; $y \equiv y/H$; e $t \equiv \rho H^2 t / \eta_0$ (newtoniano) ou $t \equiv t/\lambda$ (viscoelástico), verifica-se que a solução depende só do número de elasticidade $E = \lambda \eta_0 / \rho H^2$ e da razão de viscosidades $\beta = \eta^s / \eta_0$.

A solução analítica das equações (3) e (4), com condições iniciais (5) e condições de fronteira (6), foi obtida por Waters e King [4]:

$$u_{teor}(y, t) = 1.5y(2-y) - \frac{48}{\pi^3} \sum_{k=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{1}{k^3} \sin\left(\frac{1}{2}k\pi y\right) \exp\left(-(\alpha_k/2)t\right) G(t) \quad (7)$$

onde $G(t) = \cosh(\frac{1}{2}\beta_k t) + \frac{\gamma_k}{\beta_k} \sinh(\frac{1}{2}\beta_k t)$ ($\beta_k^2 \geq 0$) ou $G(t) = \cos(\frac{1}{2}\beta_k t) + \frac{\gamma_k}{\beta_k} \sin(\frac{1}{2}\beta_k t)$ ($\beta_k^2 < 0$),

com: $\alpha_k = 1 + \frac{1}{4}\beta E \pi^2 k^2$, $\beta_k = \sqrt{\alpha_k^2 - E \pi^2 k^2}$, $\gamma_k = 1 - \frac{1}{4}(2 - \beta) E \pi^2 k^2$.

Quando $t \rightarrow \infty$ o exponencial no final do segundo termo faz este tender para zero e resta a solução de regime permanente dada pelo primeiro termo, ou seja o usual perfil parabólico para a velocidade.

3 Método numérico

As equações de governo (Eqs. 3 e 4) são integradas numa malha de volumes finitos com espaçamento uniforme segundo y : $\Delta y = 2H/(NY-2)$ onde NY é o número total de nós e $2H$ o comprimento do domínio espacial. A Fig. 1 (a) mostra um volume de controlo interior sobre o qual se procede à integração, utilizando basicamente diferenças centrais para a discretização espacial e o método implícito dos três níveis temporais (3TL) para a discretização temporal, obtendo-se:

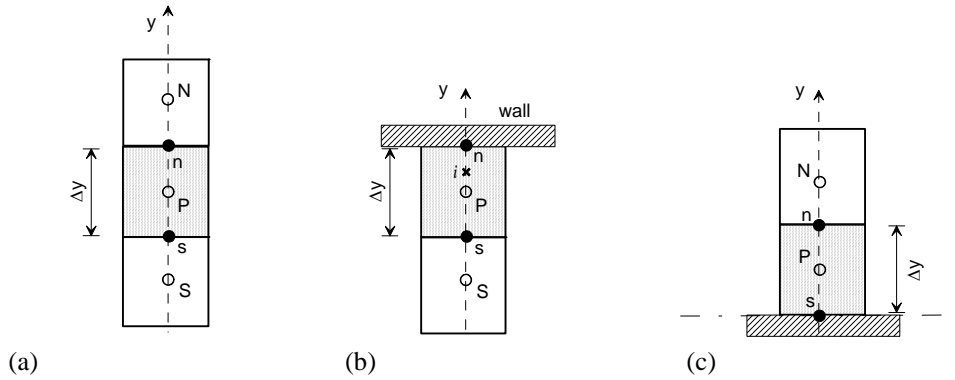


Fig. 1. Volume de controlo interior (a), junto à fronteira “norte” (b) e “sul” (c).

$$(\tau_{xy})_P^{n+1} + \lambda \left(\frac{3(\tau_{xy})_P^{n+1} - 4(\tau_{xy})_P^n + (\tau_{xy})_P^{n-1}}{2\Delta t} \right) = \eta^P \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_P^{n+1} = \eta^P \frac{(u_n^{n+1} - u_s^{n+1})}{\Delta y_P} \quad (8)$$

e

$$\rho \left(\frac{3u_P^{n+1} - 4u_P^n + u_P^{n-1}}{2\Delta t} \right) \Delta y_P = \left(-\frac{dp}{dx} \right) \Delta y_P + \left(\eta^s \frac{\partial u}{\partial y} \right)_n^{n+1} - \left(\eta^s \frac{\partial u}{\partial y} \right)_s^{n+1} + ((\tau_{xy})_n^{n+1} - (\tau_{xy})_s^{n+1}) \quad (9)$$

O índice inferior P designa a posição no centro de cada volume de controlo (Fig. 1 a), n como índice superior designa o nível temporal (tempo passado é $n-1$, tempo presente é n , tempo futuro é $n+1$), e n e s as faces “norte” e “sul” do volume de controlo. Na Eq. (9), as derivadas da velocidade nas faces do volume de controlo são aproximadas por diferenças centrais (teoricamente de segunda ordem de precisão),

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_n^{n+1} = \frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_s^{n+1} = \frac{u_p^{n+1} - u_s^{n+1}}{\Delta y_s} \quad (10)$$

Reagrupando os diversos termos, as equações discretizadas para as tensões e velocidades escrevem-se sob a forma padrão como:

$$a_p^\tau (\tau_{xy})_p^{n+1} = b^\tau \quad (11)$$

$$a_p^u u_p^{n+1} = a_N^u u_N^{n+1} + a_s^u u_s^{n+1} + b^u \quad (12)$$

com coeficientes:

$$a_p^\tau = \Delta y_p (1 + 1.5\lambda / \Delta t) \quad (13)$$

$$a_N^u = (\eta^s)_n / \Delta y_n, \quad a_s^u = (\eta^s)_s / \Delta y_s, \quad a_p^u = a_s^u + a_N^u + 1.5\rho\Delta y_p / \Delta t \quad (14)$$

e termos fonte:

$$b^\tau = \eta^p (u_n^{n+1} - u_s^{n+1}) + \frac{\lambda\Delta y_p}{\Delta t} (2(\tau_{xy})_p^n - (\tau_{xy})_p^{n-1}) \equiv S^\tau + \frac{\lambda\Delta y_p}{\Delta t} (2(\tau_{xy})_p^n - (\tau_{xy})_p^{n-1}) \quad (15)$$

$$b^u = \left(-\frac{dp}{dx} \right) \Delta y_p + ((\tau_{xy})_n^{n+1} - (\tau_{xy})_s^{n+1}) + \frac{\rho\Delta y_p}{\Delta t} (2u_p^n - u_p^{n-1}) \equiv S^u + \frac{\rho\Delta y_p}{\Delta t} (2u_p^n - u_p^{n-1}) \quad (16)$$

Repare-se que enquanto a Eq. (11) para as tensões é uma equação algébrica explícita, uma vez que não há qualquer ligação, difusiva ou convectiva, com as tensões circundantes (a norte e a sul), já a Eq. (12) representa um sistema tridiagonal que pode ser resolvido facilmente por aplicação do algoritmo TDMA.

3.1 Interpolações

A malha usada será uniforme, pelo que se torna desnecessário utilizar um índice para Δy , e as viscosidades η são constantes. As velocidades nas faces dos volumes de controlo que aparecem no termo S^τ da Eq. (15) para as tensões, são calculados por interpolação linear:

$$u_n = 0.5(u_p + u_N) \quad \text{e} \quad u_s = 0.5(u_p + u_s) \quad (17)$$

As tensões nas faces dos volumes de controlo que aparecem no termo fonte S^u da Eq. (16) para as velocidades são calculadas segundo o método de Oliveira et al [5] que basicamente consiste na interpolação linear (denotada com barra superior) de todos os termos da Eq. (11), depois desta ser dividida por Δy_p , excepto o termo de gradiente de velocidades (S^τ) que é calculado directamente na face. Esta definição fornece:

$$\left(\overline{a_p^\tau / \Delta y_p} \right) (\tau_{xy})_n^{n+1} = \eta^p \left(\frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \right) + \frac{\lambda}{\Delta t} \left(2(\tau_{xy})_p^n - (\tau_{xy})_p^{n-1} \right)_n \quad (18)$$

que se pode também escrever de forma computacionalmente mais eficaz como:

$$(\tau_{xy})_n^{n+1} = \overline{(\tau_{xy})_n^{n+1}} + \left(\overline{\frac{\eta^p}{a_p^\tau / \Delta y_p}} \right) \left\{ \left(\frac{u_N^{n+1} - u_p^{n+1}}{\Delta y_n} \right) - \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_p \right]_n \right\} \quad (19)$$

Esta será a fórmula usada no programa para calcular as tensões nas faces dos VC. Existe uma fórmula semelhante para a tensão na face sul “s”. Os gradientes de velocidade no centro dos VC são calculados como no 2º membro da Eq. (8). Repare-se que a tensão na face é dada pela média aritmética mais um termo corrector que é proporcional a uma 3ª derivada da velocidade; é este termo dissipativo que permite atenuar oscilações espúrias das variações de tensão ou velocidade, permitindo um bom acoplamento entre os dois campos.

3.2 Condições de fronteira

Esta secção fornece a contribuição principal deste trabalho. A velocidade é nula sobre uma parede sólida mas a tensão de corte na parede precisa de ser calculada. Vamos considerar para efeitos ilustrativos a parede situada em “norte” (Fig. 1 b). A implementação usual para fluidos newtonianos, ou para o termo de solvente presente na Eq. (4), pode ser feita usando método de 1ª ordem:

$$(\tau_{xy})_n = \eta^s \left(\frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} \right) \quad (\text{onde } u_n \text{ é nulo}) \quad (\text{Método Antigo}) \quad (20)$$

ou de 2ª ordem (Fig. 1 b):

$$(\tau_{xy})_n = \eta^s \left(\frac{8u_n - 9u_p + u_s}{3\Delta y} \right) \quad (21)$$

A questão principal prende-se com a representação da tensão de corte polimérica na parede, que aparece no termo em $\partial \tau_{xy} / \partial y$ da Eq. (4). Em trabalhos anteriores usou-se uma aproximação idêntica à da Eq. (20), com a viscosidade polimérica η^p em vez da viscosidade do solvente η^s . Esta abordagem, baseada na solução teórica da tensão em escoamento estacionário de corte simples ($\tau_{xy} = \eta \partial u / \partial y$), será designada como método antigo.

Em regime variável, a Eq. (3) mostra que essa abordagem não passa duma aproximação uma vez que $\partial \tau_{xy} / \partial t \neq 0$ e portanto $\tau_{xy} \neq \eta \partial u / \partial y$ na parede. Um método novo consiste em utilizar a própria equação da quantidade de movimento para calcular a tensão na parede. Quando a Eq. (4) é aplicada a uma parede sólida, mesmo em escoamento não estacionário, reduz-se a (o termo do solvente é para já anulado de forma a simplificar a explicação e considera-se a parede a “norte”):

$$-\frac{dp}{dx} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right)_n = \frac{dp}{dx} \quad (22)$$

e uma integração de 1ª ordem (Fig. 1 b) fornece:

$$(\tau_{xy})_n = (\tau_{xy})_p + \frac{dp}{dx} \Delta y / 2 \quad (23)$$

No presente problema o gradiente de pressões é conhecido e constante. No caso mais geral duma camada limite sobre uma parede sólida, o gradiente de pressões é basicamente independente da direcção normal à parede, pelo que a aproximação acima é válida com dp/dx representando o gradiente de pressões paralelo à parede calculado no ponto P . Incluindo agora os termos da tensão do solvente, vem:

$$(\tau_{xy})_n = (\tau_{xy})_p + (dp/dx) \Delta y / 2 - \left((\tau_{xy})_n^s - (\tau_{xy})_p^s \right)$$

Fazendo

$$(\tau_{xy})_n^s = \eta^s \frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} \quad \text{e} \quad (\tau_{xy})_p^s = \eta^s \frac{u_n - u_s}{\Delta y} \quad \Rightarrow \quad \frac{(\tau_{xy})_n^s - (\tau_{xy})_p^s}{\Delta y / 2} = \eta^s \frac{1}{\Delta y / 2} \left(\frac{u_n - u_p}{\Delta y / 2} - \frac{u_n - u_s}{\Delta y} \right)$$

obtém-se:

$$(\tau_{xy})_n = (\tau_{xy})_p + (dp/dx) \frac{\Delta y}{2} - \eta^s \left(\frac{u_n - \left(\frac{3}{2} u_p - \frac{1}{2} u_s \right)}{\Delta y} \right) \quad (\text{Método Novo}) \quad (24)$$

onde, recorda-se, a condição de não-escorregamento dá $u_n = 0$. A Eq. (24) representa o novo método para a condição fronteira numa face “norte”. Para uma face a “sul” é fácil verificar que o mesmo raciocínio conduz a:

$$-\frac{dp}{dx} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{(\tau_{xy})_p - (\tau_{xy})_s}{\Delta y / 2} = +(dp/dx) - \left(\frac{(\tau_{xy})_n - (\tau_{xy})_p}{\Delta y / 2} \right)$$

ou

$$(\tau_{xy})_s = (\tau_{xy})_p - (dp/dx) \frac{\Delta y}{2} - \eta^s \left(\frac{(\frac{3}{2}u_p - \frac{1}{2}u_s) - u_s}{\Delta y} \right) \quad (25)$$

com $u_s = 0$. Na dedução conducente à Eq. (23) utilizou-se um esquema de 1ª ordem para aproximar $\partial \tau / \partial y$. Para uma quantidade genérica ϕ uma extrapolação linear dos pontos “i” e “s” na Fig. 1 b conduz a:

$$\frac{\phi_n - \phi_i}{\Delta y / 4} = \frac{\phi_i - \phi_s}{\Delta y 3 / 4} \Rightarrow \phi_n = \phi_i + \frac{1}{3}(\phi_i - \phi_s) = \frac{4}{3}\phi_i - \frac{1}{3}\phi_s$$

uma expressão particularmente adequada para aproximar derivadas. Aplicando-a a $\phi = \partial \tau / \partial y$, e aproximando as derivadas com diferenças centrais, obtém-se:

$$\left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right)_n = \frac{4}{3} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right)_i - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right)_s = \frac{4}{3} \frac{(\tau_{xy})_n - (\tau_{xy})_p}{\Delta y / 2} - \frac{1}{3} \frac{(\tau_{xy})_p - (\tau_{xy})_s}{\Delta y} = \frac{8(\tau_{xy})_n - 9(\tau_{xy})_p + (\tau_{xy})_s}{3\Delta y}$$

uma expressão semelhante à da Eq. (21) para a representação de 2ª ordem da primeira derivada da velocidade. Desta forma, a tensão a ser aplicada na parede, da Eq. (22) vem:

$$(\tau_{xy})_n = \frac{9(\tau_{xy})_p - (\tau_{xy})_s + 3(dp/dx)\Delta y}{8} = \left((\tau_{xy})_p + \frac{1}{2}\Delta y(dp/dx) \right) + \underbrace{\frac{1}{8}\{(\tau_{xy})_p - (\tau_{xy})_s - \Delta y(dp/dx)\}}_{2^\text{ª ordem}} \quad (26)$$

onde o termo assinalado entre chavetas representa a correcção de 2ª ordem relativamente ao termo de 1ª ordem dado pela Eq. (23). Para uma fronteira a “sul”, um procedimento idêntico dá (Fig. 1 c):

$$(\tau_{xy})_s = (\tau_{xy})_p - \frac{1}{2}\Delta y(dp/dx) + \underbrace{\frac{1}{8}\{(\tau_{xy})_p - (\tau_{xy})_n + \Delta y(dp/dx)\}}_{2^\text{ª ordem}} \quad (27)$$

3.3 Estudo de convergência

Sendo o método dos três níveis temporais de 2ª ordem no tempo e as diferenças centrais também de 2ª ordem no espaço, o erro de discretização terá a forma:

$$erro = A\Delta t^p + B\Delta y^q \quad (28)$$

com $p = 2$ e $q = 2$, e onde A e B são as duas constantes assintóticas do erro.

Para se conseguir avaliar na prática a ordem de convergência do método, podem seguir-se dois procedimentos:

(1º) Usar um Δt muito pequeno e fazer o estudo do refinamento espacial da malha (isto é, diminuir progressivamente Δy). Nesta altura o erro é controlado pela discretização espacial. De seguida inverter a ordem do refinamento: usar malha muito fina e fazer o estudo da variação do erro com o passo no tempo ($\Delta t \downarrow$). O erro é agora controlado pela discretização temporal. Tem de se ter cuidado especial para não haver interferência entre a variação do erro com Δt e com Δy . Por exemplo, quando se diminui Δt chega-se a uma situação em que o erro é tão pequeno que atinge a precisão imposta pela discretização espacial, o que implica uma interferência entre as duas discretizações. Nesta situação deixa de existir convergência quadrática para método de 2ª ordem, uma vez que o erro fica limitado pela discretização mais desfavorável.

(2º) Uma forma alternativa de fazer o estudo do erro evitando o problema de interferência entre discretizações espaciais e temporais é refinar proporcionalmente o espaço e o tempo, isto é, ter sempre $\Delta t = C\Delta y$. Com este procedimento, para um método de 2ª ordem a Eq. (14) fica:

$$\text{erro} = (A + B/C^2)\Delta t^2 = A'\Delta t^2 = A'\Delta t^p \quad (29)$$

e o erro diminui sempre quadraticamente em Δt sem qualquer interferência por parte da discretização espacial. As constantes (locais) A, B, C, A' serão, em princípio, de ordem unitária.

4 Resultados

Antes de se discutir o efeito da implementação das condições de fronteira, apresentam-se resultados para o campo de velocidades em função do tempo e do espaço, para vários valores de β . Estes resultados foram obtidos com o melhor método. A evolução com o tempo da velocidade no plano central do canal ($u_0 \equiv u(y=1)$) para o fluido Oldroyd-B com dois valores de β (0.1 e 0.001) é mostrada na Fig. 2, onde os símbolos representam resultados numéricos obtidos com o método dos três níveis no tempo (3TL), numa malha com $NY = 103$ e passos no tempo de 0.02 e 0.01. Estes valores correspondem a um espaçamento de $\Delta y \approx 0.02$, e a um número de 50 (para $\beta = 0.1$) ou de 100 (para $\beta = 0.001$) passos no tempo para progredir do momento inicial até $t = 1$. Graficamente a concordância entre a previsão e a solução analítica é excelente, com as linhas e símbolos praticamente sobrepostos, apesar de em ambos os casos, $\beta = 0.1$ e 0.001, a evolução ser oscilante e seguir um caminho marcadamente diferente do caso newtoniano tratado em relatório anterior. Para o menor valor de β o andamento é já muito próximo daquele para o fluido UCM, o qual não possui qualquer viscosidade de solvente, sendo notório a propagação duma frente de onda que se reflecte nas paredes e se propaga novamente na direcção do plano central com uma velocidade de fase unitária (do ponto de vista adimensional). Enquanto para o fluido newtoniano um tempo adimensional de aproximadamente $t = 2.0$ era suficiente para se atingir um regime permanente, com a velocidade no plano central $y=1$ a tender para $u_0 = 1.5$, no caso do fluido viscoelástico esse regime não está ainda atingido para $t = 10$, e picos de oscilações são evidentes em $t = 1, 3, 5, \dots$.

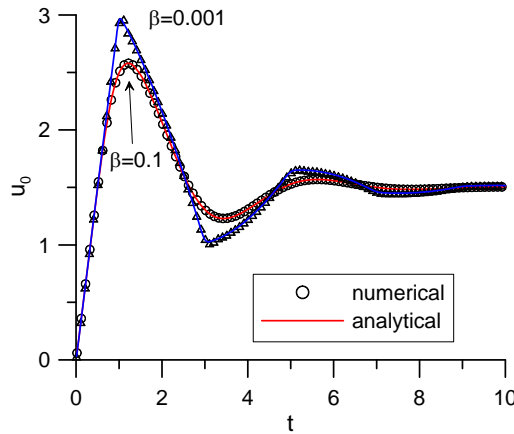


Fig. 2. Evolução da velocidade no centro do canal para Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ e 0.001 ($E = 1$).

Alguns perfis de velocidade para o fluido Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ e 0.001 e elasticidade $E = 1$ são apresentados na Fig. 3, para tempos adimensionais de $t = 0.1, 0.2, 0.5, 1.0$ e 2.0. Nesta figura a solução numérica foi obtida com o método 3TL para uma malha com 103 VC e passos no tempo de 0.02 ($\beta = 0.1$) e 0.01 ($\beta = 0.001$). A primeiro perfil mostrado na Fig. 3a, para $t = 0.1$, equivale a avançar a solução de 5 passos no tempo após o momento inicial ($t = 0.0$). Observa-se o enchimento progressivo dos perfis de velocidade, desde uma forma quase “tampão” quando t é pequeno, até ao perfil parabólico para t elevado. A difusão viscosa junto às paredes faz arredondar os perfis de velocidade. Tanto a malha como o passo no tempo, assim como o método de integração temporal, parecem adequados para oferecer previsões com bom grau de precisão. Quando se diminui

a contribuição do solvente, fazendo $\beta = 0.001$, obtêm-se perfis de velocidade (Fig. 3b) semelhantes aos anteriores, mas com uma descontinuidade acentuada na variação da velocidade $u(y)$ através do canal. Essa frente, correspondente ao ponto com $\partial u / \partial y$ descontínuo, propaga-se da parede para o plano central, que é atingido em $t = 1$, reflectindo-se e voltando a avançar na direcção do centro. Este fenómeno é repetido com um período de $1/\sqrt{E}$, ou seja, um período unitário para o valor de elasticidade aqui considerado, $E = 1$.

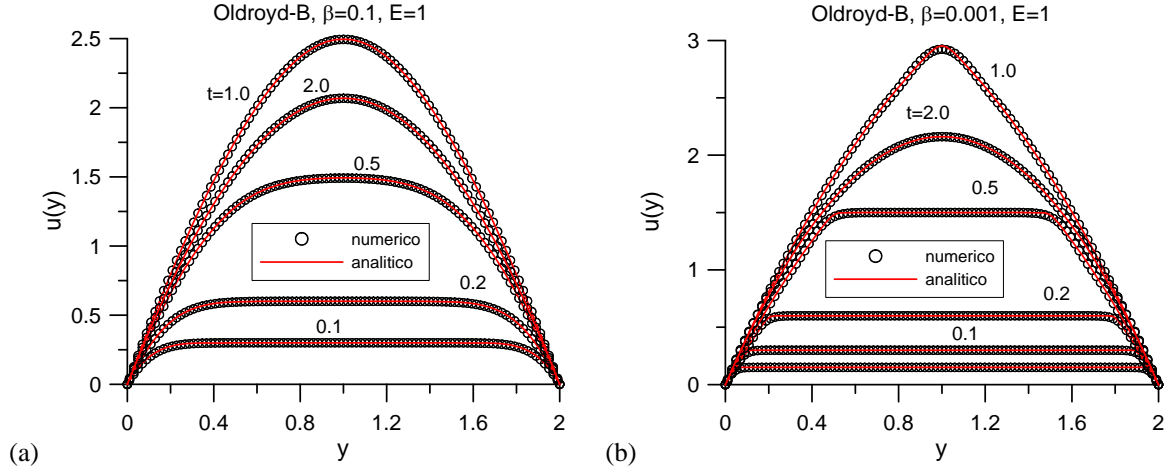


Fig. 3. Perfis de velocidade para Oldroyd-B com $E = 1$: (a) $\beta = 0.1$; (b) $\beta = 0.001$.

Para tornar mais evidentes as diferenças entre resultados obtidos com os métodos numéricos considerados é necessário estimar o erro cometido nas previsões. No presente problema o erro de discretização pode ser calculado exactamente uma vez que se conhece a solução analítica. Usando a norma L_2 , esse erro é definido como:

$$erro_2 = \sqrt{\frac{1}{NY-1} \sum_{i=2}^{NY-1} (u_i^n - u_{teor}(y_i, t_n))^2} \quad (30)$$

onde a solução teórica para um tempo $t_n = n\Delta t$ é dada pela Eq. (7) para caso viscoelástico. O somatório é feito para os volumes de controlo interiores, $NY - 2$. Note-se que o erro determinado desta forma é um valor médio integrado através da largura do canal, mas que varia com o tempo.

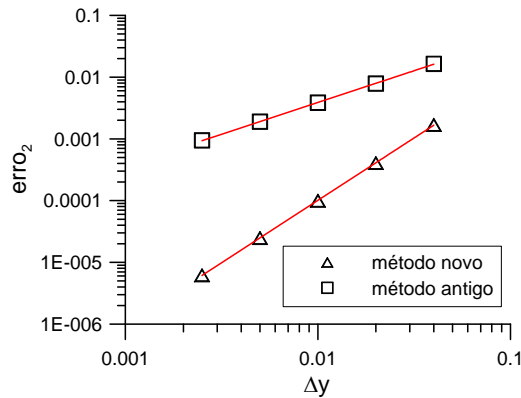


Fig. 4. Efeito do método para implementar condições fronteira nas paredes. Oldroyd-B $\beta = 0.1$, $E = 1$, para $t = 1.5$ e com refinamento do passo no tempo e malha ($\Delta t = \Delta y$).

Como já referido, nos cálculos mencionados até agora utilizou-se o novo método para a implementação das condições fronteira (Eqs. 24 e 25). O ponto essencial do trabalho prende-se com a implementação das condições fronteira na parede. Tem interesse agora mostrar a deterioração da precisão, em termos da ordem de

convergência alcançada, quando se utiliza o método anterior (Eq. 20). Para o caso do fluido Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ e $E = 1$, a evolução dos erros em $t = 1.5$ calculados segundo a Eq. (30) é mostrada na Fig. 4. Existe uma diminuição da inclinação das linhas, de $p = 2.02$ para $p = 1.03$, quando se passa para o antigo método; ou seja, globalmente o método passa a ser de 1ª ordem, apesar de se apoiar em esquemas de 2ª ordem na discretização para os volumes de controlo interiores.

A perda de precisão decorre da condição fronteira e tem como origem oscilações numéricas artificiais junto às paredes nos perfis de velocidade e tensão. Isto é ilustrado na Fig. 5, que apresenta o perfil de tensão de corte τ_{xy} numa zona localizada perto da parede (em $y \leq 0.2$), para Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ e $E = 1$, numa malha $NY = 203$ e $\Delta t = 0.02$. Enquanto o novo método prevê uma variação praticamente linear do perfil de τ_{xy} vs. y , o método anterior dá azo ao aparecimento de oscilações que são claramente provocadas por efeitos numéricos, uma vez que o valor de τ_{xy} oscila entre nós consecutivos.

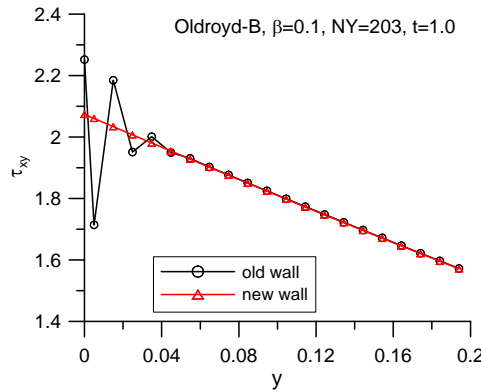


Fig. 5. Comparação dos perfis de tensão de corte junto à parede calculados com o antigo e o novo método para implementar as condições fronteira. Oldroyd-B $\beta = 0.1$, $E = 1$; $\Delta y = 0.01$ e $\Delta t = 0.02$. Zoom na zona $0 \leq y \leq 0.2$.

Quando β diminui a situação piora (Fig. 6 para $\beta = 0.01$), reflectindo-se não só em perda de precisão como de estabilidade (dificuldades de convergência iterativa). De facto, ao se tentar correr o caso $\beta = 0.01$ com a mesma malha e passo no tempo utilizados para $\beta = 0.1$, verificou-se não ser viável quando se utilizava o método anterior para aplicar as condições de fronteira junto às paredes. Com o novo método, o processo convergia sem problemas, necessitando de 3 a 5 iterações por passo no tempo, em média, para uma tolerância iterativa de 10^{-6} (para os resíduos médios normalizados). Esta Fig. 6 mostra ainda que as oscilações das tensões induzem oscilações sobre o perfil de velocidades que, embora sendo de menor magnitude uma vez que o método para calcular as tensões nas faces dos VC introduz alguma dissipação, estão sempre presentes.

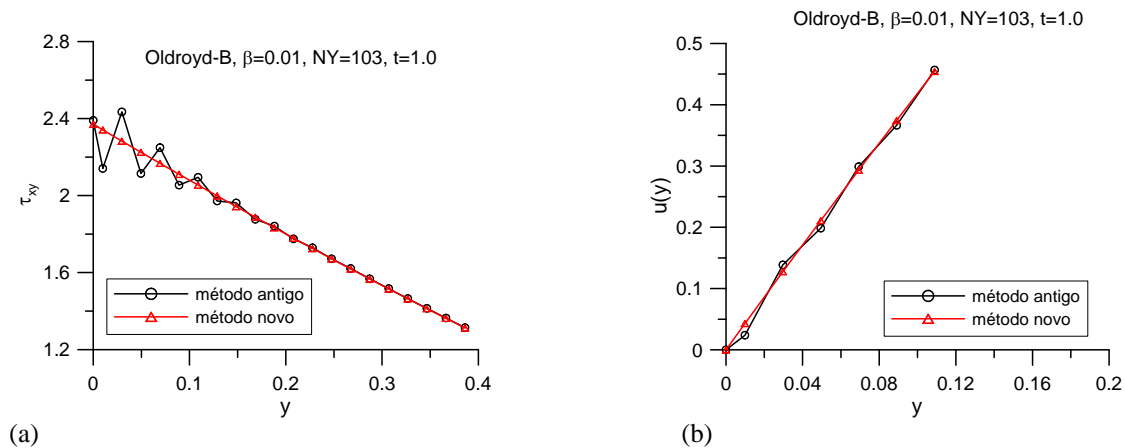


Fig. 6. Oscilações das (a) tensões e (b) velocidades junto à parede para Oldroyd-B com $\beta = 0.01$ e $E = 1$ ($\Delta y = 0.02$, $\Delta t = 0.01$).

Fica assim claro que o método de eleição para aplicar as condições de fronteira na parede é o novo método dado pela Eq. (24), a ser usado no seguinte estudo de refinamento de malha. A convergência dos resultados para vários valores de β , desde $\beta = 1$ correspondente ao fluido newtoniano, até $\beta = 0$ para fluido viscoelástico UCM, é mostrada na Fig. 7. De forma a evitar o problema da interferência entre refinamento do erro no espaço e no tempo, seguiu-se o segundo procedimento indicado na Sec. 3.3 (Eq. 29). Como primeira malha e passo no tempo usou-se $\Delta y = 0.04$ e $\Delta t = 0.04$; esses valores foram depois sendo sucessiva e simultaneamente divididos por dois, de forma a refinar globalmente a discretização. Os erros resultantes da aplicação do esquema implícito dos 3 níveis temporais estão representados na Fig. 7 através de símbolos, para fluido newtoniano e Oldroyd-B com elasticidade de $E = 1$. Estes erros foram calculados no tempo $t = 1.5$. As linhas representam o decaimento em lei de potência obtido por ajuste através do programa de gráficos; as inclinações encontradas foram $p = 1.99$ (newtoniano) e $p = 2.02$ (viscoelástico), portanto muito próximas da 2ª ordem teórica. A variação do erro está representada em função do espaçamento da malha Δy porque para valores baixos de β foi necessário diminuir o Δt : usou-se $\Delta t = \Delta y$ para $\beta = 1$ e 0.1 , e $\Delta t = 0.5\Delta y$ para $\beta = 0.01, 0.001$ e 0.0 . Verifica-se que só para $\beta = 0$ o decaimento deixa de ser de 2ª ordem para passar a ser praticamente de 1ª ordem (inclinação de 1.24). Os valores da ordem de convergência estão na Tabela 1.

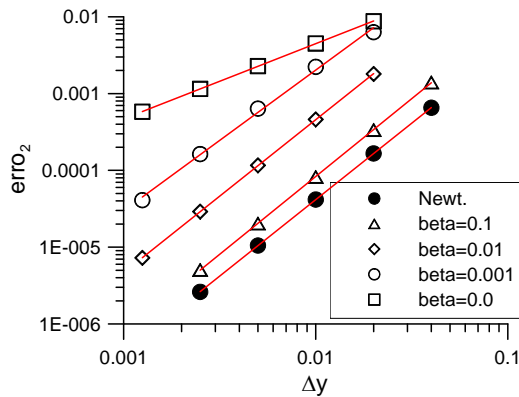


Fig. 7. Convergência com refinamento no espaço e no tempo em função de β .

| Fluido | β | Mét. Novo $erro_2$ | Mét. Antigo $erro_2$ |
|------------|---------|-----------------------|-------------------------|
| Newtoniano | 1.0 | 1.99 | 1.99 |
| Oldroyd-B | 0.1 | 2.02 | 1.03 |
| Oldroyd-B | 0.01 | 1.99 | 1.22 |
| Oldroyd-B | 0.001 | 1.83 | 1.50 |
| UCM | 0.0 | 0.98 | 1.01 |

Tabela 1. Variação da ordem de convergência p (Eq. 29).

5 Conclusões

A conclusão essencial é que se deve ter um cuidado especial na formulação das condições de fronteira, nomeadamente no que diz respeito ao método para se obter a tensão de corte na parede, de forma a que um método formalmente de 2ª ordem se comporte efectivamente com esse grau de precisão, mesmo em simulações de fluidos viscoelásticos. No problema abordado existe uma descontinuidade inicial do gradiente de pressões, que dá origem à propagação duma frente de onda de gradientes de tensões e velocidade. No caso de um modelo reológico sem viscosidade de solvente, como é o UCM, a propagação dessa descontinuidade faz-se sem qualquer dissipação (embora haja atenuação da magnitude da onda) e o esquema de diferenças perde precisão, passando de 2ª para 1ª ordem.

Por fim, nota-se que não foi necessário introduzir um termo difusivo adicional na equação da quantidade de movimento, mesmo para modelo reológico sem qualquer viscosidade de solvente, como o UCM. Quando um termo desse tipo $((1-\beta)\eta_0 \partial^2 u / \partial y^2)$ é somado e subtraído à Eq. (4), verifica-se que o número de iterações dentro de cada passo no tempo aumenta consideravelmente (de cerca de 2-3 para 100-200). Este facto deve ser alvo de mais estudo.

Referências

1. A.G. Castro, J.A. Covas, A.C. Diogo, Reologia e suas Aplicações Industriais, Colecção Ciências e Técnica, Instituto Piaget, 2001.
2. A.S.R. Duarte, A.I.P. Miranda, P.J. Oliveira, Numerical and analytical modeling of unsteady viscoelastic flows: The start-up and pulsating test case problems, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 154, 153-169, 2008.
3. J.G. Oldroyd, On the formulation of rheological equations of state, *Proc. Royal Soc. A*, 200, 523-541, 1950.
4. N.D. Waters, M.J. King, Unsteady flow of an elastico-viscous liquid, *Rheologica Acta* 9, 345-355, 1970.
5. P.J. Oliveira, F.T. Pinho, G.A. Pinto, Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 79, 1-43, 1998.