

Comparação de diferentes formulações numéricas para o cálculo de escoamentos viscoelásticos não estacionários

José Amoreira¹, Paulo J. Oliveira²

¹Universidade da Beira Interior, Dep. Física, Unidade de Detecção Remota, Covilhã
email: amoreira@ubi.pt

²Universidade da Beira Interior, Dep. de Eng^a Electromecânica, Unidade de Materiais Têxteis e Papeleiros, Covilhã
email: pipo@ubi.pt

Sumário

Diferentes abordagens habitualmente utilizadas na estabilização numérica das equações que descrevem a dinâmica de fluidos viscoelásticos (separação das componentes viscosa e elástica da tensão, separação das componentes de solvente e polímero da tensão e inclusão explícita de termo difusivo) são comparadas relativamente à exactidão, à estabilidade e à eficiência, no contexto de um problema simples com solução analítica conhecida: escoamento de Poiseuille de arranque.

Palavras-chave: Escoamento viscoelástico não estacionário; Escoamento de arranque; Reologia computacional;

1 Introdução, problema e objectivo do trabalho

O modelo de Oldroyd-B [1] tem sido muito usado no estudo do escoamento de fluidos viscoelásticos. Nele, o tensor da tensão extra é definido pela equação constitutiva

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_0 \left(\mathbf{D} + \lambda_2 \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (1)$$

onde η_0 representa a viscosidade do fluido, λ_1 e λ_2 são dois parâmetros do modelo (chamados respectivamente *tempo de relaxação* e *tempo de retardamento*), \mathbf{D} representa o tensor taxa de deformação $D_{ij} = (\partial_i v_j + \partial_j v_i)/2$ ($\mathbf{v} = \sum v_i \hat{\mathbf{e}}_i$ é a velocidade do escoamento) e se usa a derivada convectiva superior de Oldroyd [1; 2],

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\theta}} = \frac{d\boldsymbol{\theta}}{dt} - \boldsymbol{\theta} \cdot (\partial \mathbf{v}) - (\partial \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\theta}$$

Numa abordagem numérica a problemas de escoamento de fluidos descritos com o modelo de Oldroyd-B, resolvem-se simultaneamente as equações constitutivas e as que traduzem a Segunda Lei de Newton (para simplificar, não se consideram forças externas),

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\partial p + \partial \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2)$$

onde ρ representa a massa volúmica e p a pressão. Em resoluções numéricas iterativas, os membros da direita das equações a resolver (1) e (2) são em geral tratados como termos de fonte, ou seja, em cada passo da iteração são definidos pelos valores calculados na iteração anterior. Se assim for, o sistema de equações não apresenta termos difusivos, o que dificulta a estabilidade numérica dos ditos processos iterativos.

Para resolver esta dificuldade várias possibilidades têm sido consideradas. Perera e Walkers [3] (ver também [4; 5]) sugeriram a separação da tensão em duas componentes, uma das quais com comportamento puramente viscoso, de acordo com

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_e + 2\eta_0 \mathbf{D}. \quad (3)$$

Substituindo esta decomposição na Eq. (1) obtém-se a equação constitutiva da *componente elástica* da tensão, $\boldsymbol{\tau}_e$,

$$\boldsymbol{\tau}_e + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}_e} = -2\lambda_1 \eta_e \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \quad (4)$$

onde o parâmetro de viscosidade η_e é dado por

$$\eta_e = (1 - \beta)\eta_0, \quad (5)$$

com $\beta = \lambda_2/\lambda_1$. Substituindo em (2) e tratando implicitamente o termo difusivo resultante, obtém-se

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \eta_0 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \partial \cdot \boldsymbol{\tau}_e\}. \quad (6)$$

(Nesta equação e nas que se seguirem identificam-se os termos de fonte limitando-os com chavetas.) As equações (4), (5) e (6) definem uma formulação alternativa do modelo de Oldroyd-B, conhecida em reologia computacional como *separação das componentes elástica e viscosa da tensão* (EVSS, do inglês Elastic-Viscous Stress Splitting).

Uma outra possibilidade [2] foi introduzida em aplicações de ciência de polímeros, que consiste em decompor a tensão numa contribuição dita *de polímero*, descrita com o modelo de Maxwell, e numa outra, dita *de solvente* (newtoniana), de acordo com

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2 \\ \boldsymbol{\tau}_1 + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 &= 2\eta_1 \mathbf{D} \\ \boldsymbol{\tau}_2 &= 2\eta_2 \mathbf{D} \end{aligned} \quad (7)$$

Uma tal descrição é equivalente ao modelo de Oldroyd-B, se se tomarem para as viscosidades das duas componentes os valores

$$\begin{aligned} \eta_1 &= (1 - \beta)\eta_0 \\ \eta_2 &= \beta\eta_0. \end{aligned}$$

Note-se que a viscosidade de polímero η_1 é a viscosidade da componente não newtoniana no formalismo EVSS da eq. (5). Expressa em termos da componente polimérica da tensão $\boldsymbol{\tau}_1$, a equação da quantidade de movimento (2) reescreve-se como

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \eta_2 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \partial \cdot \boldsymbol{\tau}_1\}. \quad (8)$$

Esta equação, juntamente com as eqs. (7), define uma nova formulação do modelo de Oldroyd-B, com o nome *decomposição solvente-polimérica da tensão* (SPSS, do inglês Solvent-Polymer Stress Splitting).

Ao contrário do que acontece na formulação EVSS, o termo difusivo introduzido no método SPSS é, de certa forma, incompleto, uma vez que diz respeito apenas à componente de solvente. No entanto, podemos “completá-lo” somando um novo termo difusivo, mas envolvendo agora a viscosidade de polímero. Compensamos a parcela assim introduzida subtraindo-a nos termos fonte. Obtemos então uma nova formulação, a que chamamos de *difusão explícita* (ou EDIF, de Explicit Diffusion) [6; 7; 8], definida pelas equações

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \eta_0 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \partial \cdot \boldsymbol{\tau}_1 - \eta_1 \partial^2 \mathbf{v}\} \\ \boldsymbol{\tau}_1 + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 &= 2\eta_1 \mathbf{D} \\ \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_1 + 2\eta_2 \mathbf{D} \end{aligned} \quad (9)$$

Para mais fácil referência, condensamos em baixo os conjuntos de equações que definem as diferentes formulações:

- **Formulação original (ORIG)**

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \{-\partial p + \partial \cdot \boldsymbol{\tau}\} \\ \boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} &= \left\{ 2\eta_0 \left(\mathbf{D} + \lambda_2 \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) + \lambda_1 [\boldsymbol{\tau} \cdot (\partial \mathbf{v}) + (\partial \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}] \right\} \end{aligned} \quad (10)$$

- **Decomposição elástico-viscosa da tensão (EVSS)**

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \eta_0 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \partial \cdot \boldsymbol{\tau}_e\} \\ \boldsymbol{\tau}_e + \lambda_1 \frac{d\boldsymbol{\tau}_e}{dt} &= \left\{ -2\eta_e \lambda_1 \overset{\nabla}{\mathbf{D}} + \lambda_1 [\boldsymbol{\tau}_e \cdot (\partial \mathbf{v}) + (\partial \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}_e] \right\} \\ \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_e + 2\eta_0 \mathbf{D} \end{aligned} \quad (11)$$

- **Decomposição solvente-polimérica da tensão (SPSS)**

$$\begin{aligned}\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \eta_2 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \boldsymbol{\partial} \cdot \boldsymbol{\tau}_1\} \\ \boldsymbol{\tau}_1 + \lambda_1 \frac{d\boldsymbol{\tau}_1}{dt} &= \{2\eta_1 \mathbf{D} + \lambda_1 [\boldsymbol{\tau}_1 \cdot (\partial \mathbf{v}) + (\partial \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}_1]\} \\ \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_1 + 2\eta_2 \mathbf{D}\end{aligned}\quad (12)$$

- **Difusão explícita (EDIF)**

$$\begin{aligned}\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \eta_0 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \boldsymbol{\partial} \cdot \boldsymbol{\tau}_1 - \eta_1 \partial^2 \mathbf{v}\} \\ \boldsymbol{\tau}_1 + \lambda_1 \frac{d\boldsymbol{\tau}_1}{dt} &= \{2\eta_1 \mathbf{D} + \lambda_1 [\boldsymbol{\tau}_1 \cdot (\partial \mathbf{v}) + (\partial \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}_1]\} \\ \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_1 + 2\eta_2 \mathbf{D}\end{aligned}\quad (13)$$

Estas quatro abordagens ao modelo de Oldroyd-B podem ser escritas na forma comum

$$\begin{aligned}\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= s\eta_0 \partial^2 \mathbf{v} + \{-\partial p + \boldsymbol{\partial} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}} + (r-s)\eta_0 \partial^2 \mathbf{v}\} \\ \tilde{\boldsymbol{\tau}} + \lambda_1 \frac{d\tilde{\boldsymbol{\tau}}}{dt} &= \left\{ 2\eta_0 \left[(1-r)\mathbf{D} + (\lambda_2 - r\lambda_1) \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right] + \lambda_1 [\tilde{\boldsymbol{\tau}} \cdot (\partial \mathbf{v}) + (\partial \mathbf{v})^T \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}] \right\} \\ \boldsymbol{\tau} &= \tilde{\boldsymbol{\tau}} + 2r\eta_0 \mathbf{D}\end{aligned}\quad (14)$$

onde r e s são parâmetros reais que seleccionam o algoritmo considerado, de acordo com a tabela:

	r	s
ORIG	0	0
EVSS	1	1
SPSS	β	β
EDIF	β	1

Tabela 1: Valores dos parâmetros de selecção para as diferentes formulações.

Note-se que, com $\beta = 0$, as formulações ORIG e SPSS são idênticas. Tal era de esperar, uma vez que a SPSS se distingue pela separação da tensão viscosa de solvente, que é nula se η_2 (logo, β) se anular.

Com este trabalho, pretendeu-se fazer uma avaliação dos méritos e deméritos de cada um destes quatro algoritmos (ORIG, EVSS, SPSS e EDIF), relativamente à estabilidade, à exactidão e à eficiência. Para tal, implementámos resoluções numéricas para um problema simples — o problema do escoamento de arranque de um fluido num canal plano e rectilíneo (escoamento de Poiseuille), para o qual se conhece a solução analítica — usando os quatro algoritmos considerados.

2 O escoamento de Poiseuille de um fluido de Oldroyd-B

Consideremos um canal plano e rectilíneo de largura $2h$ e um sistema de coordenadas com o eixo dos xx sobreposto ao eixo do canal. Num escoamento completamente desenvolvido, a velocidade do fluido depende apenas do tempo, t , e da coordenada transversal, y , de forma que as equações que governam o escoamento (14) tomam a forma

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial u}{\partial t} &= s\eta_0 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \left\{ -\frac{dp}{dx} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{xy}}{\partial y} + (r-s)\eta_0 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right\} \\ \tilde{\tau}_{xy} + \lambda_1 \frac{\partial \tilde{\tau}_{xy}}{\partial t} &= \eta_0 \left\{ (1-r) \frac{\partial u}{\partial y} + (\lambda_2 - \lambda_1 r) \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial y} \right\} \\ \tilde{\tau}_{xy} &= \tau_{xy} - r\eta_0 \frac{\partial u}{\partial y}\end{aligned}\quad (15)$$

Todas as restantes componentes da tensão se anulam à excepção de τ_{xx} , mas esta não desempenha qualquer papel na dinâmica do escoamento. Procuramos soluções destas equações que satisfaçam as condições fronteira

$$u(t, y = \pm h) = 0$$

e ainda a condição inicial

$$u(t = 0, y) = 0.$$

Uma solução particular é a de regime estacionário, idêntica à de um fluido newtoniano com viscosidade η_0 ,

$$u_\infty(y) = -\frac{1}{2\eta_0} \frac{dp}{dx} (h^2 - y^2), \quad (16)$$

a que corresponde um valor médio

$$\bar{u}_\infty = -\frac{h^2}{3\eta_0} \frac{dp}{dx}.$$

Introduzimos agora variáveis adimensionais através das transformações

$$t \rightarrow \lambda_1 t; \quad y \rightarrow hy; \quad u \rightarrow \bar{u}_\infty u; \quad \tilde{\tau}_{xy} \rightarrow \frac{\eta_0 \bar{u}_\infty}{h} \tilde{\tau}_{xy}, \quad (17)$$

em termos das quais as equações a resolver reescrevem-se como

$$\begin{aligned} \frac{1}{E} \frac{\partial u}{\partial t} &= s \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \left\{ 3 + \frac{\partial \tilde{\tau}_{xy}}{\partial y} + (r - s) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right\} \\ \tilde{\tau}_{xy} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{xy}}{\partial t} &= \left\{ (1 - r) \frac{\partial u}{\partial y} + (\beta - r) \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial y} \right\} \\ \tilde{\tau}_{xy} &= \tau_{xy} - r \frac{\partial u}{\partial y}, \end{aligned} \quad (18)$$

onde $E = (\lambda_1 \eta_0)/(\rho h^2)$ é o número de elasticidade. O número de parâmetros do modelo reduziu-se, nesta versão adimensional, a dois: o número de elasticidade, E , e a razão entre as viscosidades de solvente e de polímero, $\beta = \lambda_2/\lambda_1$.

A solução analítica deste problema foi obtida por Waters e King [9] (ver também [10; 11]). A velocidade é dada por

$$u^{(a)}(t, y) = \frac{3}{2}(1 - y^2) + \sum_{k=1}^{\infty} A_k(t) B_k(y) \quad (19)$$

com

$$A_k(t) = e^{-b_k t} \begin{cases} \frac{b_k - a_k^2}{c_k} \sinh c_k t + a_k^2 \cosh c_k t, & b_k \geq a_k \\ \frac{b_k - a_k^2}{c_k} \sin c_k t + a_k^2 \cos c_k t, & b_k < a_k \end{cases} \quad (20)$$

$$B_k(y) = \frac{48(-1)^k}{(2k-1)^3 \pi^3} \cos \frac{2k-1}{2} \pi y \quad (21)$$

$$a_k = \frac{2k-1}{2} \pi \sqrt{E}; \quad b_k = \frac{1 + \beta a_k^2}{2}; \quad c_k = \sqrt{|b_k^2 - a_k^2|} \quad (22)$$

ao passo que a tensão é

$$\tau_{xy}^{(a)}(t, y) = -3y + \frac{1}{E} \sum_{k=1}^{\infty} C_k(t) D_k(y) \quad (23)$$

$$C_k(t) = \frac{dA_k}{dt} = -e^{-b_k t} \begin{cases} \left(b_k \frac{b_k - a_k^2}{c_k} - c_k \right) \sinh c_k t + a_k^2 \cosh c_k t, & b_k \geq a_k \\ \left(b_k \frac{b_k - a_k^2}{c_k} + c_k \right) \sin c_k t + a_k^2 \cos c_k t, & b_k < a_k \end{cases} \quad (24)$$

$$D_k(y) = \int_0^y B_k(y') dy' = \frac{96(-1)^k}{(2k-1)^4 \pi^4} \sin \frac{2k-1}{2} \pi y \quad (25)$$

3 Método numérico

Usou-se um método de volumes finitos para resolver as equações (18) com uma malha homogênea unidimensional cobrindo a metade $0 \leq y \leq 1$ do canal (ver a Figura 1). As equações que constituem o sistema de equações diferenciais são discretizadas por integração no volume de cada célula da malha e em pequenos intervalos de tempo, resultando um sistema de equações lineares algébricas que se escreve na forma padrão como

$$a_P \phi_P = a_N \phi_N + a_S \phi_S + S_P^*.$$

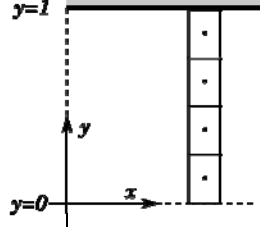


Figura 1: Geometria usada no cálculo. Note-se que apenas está representada metade da largura do canal.

Nesta expressão ϕ_P representa o valor do campo que se pretende determinar (velocidade ou tensão de corte) no centro de um volume de controlo genérico, ϕ_N e ϕ_S os valores correspondentes no centros dos dois volumes de controlo contíguos, a_P , a_N , a_S são coeficientes independentes determinados pelos termos difusivos e S_P^* engloba os termos de fonte. Este sistema é, no máximo, tridiagonal (de facto, para a determinação da tensão de corte, ou da velocidade no formalismo ORIG — caracterizado matematicamente pela ausência de termo difusivo — até desacopla, constituindo então um sistema de equações independentes). Como o termo de fonte S_P^* inclui os campos a determinar, a solução do sistema é obtida iterativamente (o asterisco em S_P^* indica que deve ser calculado com os valores da velocidade e tensão obtidos na iteração anterior) num processo que é repetido enquanto o residuo

$$R = \sqrt{\sum_P (a_P u_P - a_N u_N - a_S u_S - S_P)^2} \quad (26)$$

se mantiver acima do valor fixado para um dado critério de convergência.

A discretização temporal é feita de um modo totalmente implícito e usando uma aproximação de três níveis temporais [12; 13]. Este método apresenta um erro proporcional ao quadrado do passo da integração temporal, nível de exactidão considerado em geral necessário para uma correcta descrição da evolução temporal do escoamento, mas apresenta a desvantagem de gerar oscilações espúrias em situações em que as funções integrandas têm variações bruscas. Por esta razão, ele é substituído pelo método de Euler implícito no passo inicial do arranque do escoamento, em que o bombeamento se estabelece subitamente.

4 Resultados e discussão

A Figura 2 apresenta a velocidade no centro do canal para diferentes conjuntos de parâmetros do fluido. Verifica-se genericamente um bom acordo entre as soluções analíticas e os resultados numéricos, mesmo com uma malha relativamente grosseira. Ao contrário dos fluidos newtonianos, cujo escoamento de arranque consiste numa aproximação monótona e assintótica à velocidade do regime estacionário, os fluidos viscoelásticos apresentam uma grande diversidade de comportamentos transitórios, incluindo oscilações (que podem até traduzir-se em deslocamentos transitoriamente contrários ao bombeamento), *overshoots* com estabilização posterior, etc.

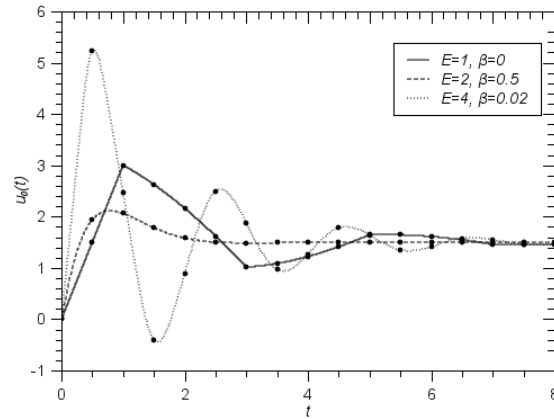


Figura 2: Velocidade no centro do canal para diferentes conjuntos de parâmetros do fluido. As linhas representam as soluções analíticas, os círculos resultados numéricos (todos obtidos com o algoritmo SPSS e com passos de integração $\delta y=0.01; \delta t=0.004$).

4.1 Convergência e estabilidade

Os vários métodos testados são estáveis, no sentido em que os erros não se amplificam no tempo. No entanto, verificou-se que a introdução de termos difusivos é, em geral, necessária para assegurar a convergência do processo iterativo. Com efeito, para fluidos com viscosidade de solvente não nula ($\beta > 0$), o algoritmo ORIG, desprovido desses termos difusivos, não converge senão com passos temporais extremamente reduzidos (tipicamente $\delta t \lesssim 0.001\delta y$, para $\beta \gtrsim 0.1$). Com fluidos UCM ($\beta = 0$) este problema não se faz sentir com tanta intensidade e é possível obter resultados com $\delta t = 0.4\delta y$ mesmo com o algoritmo original. Mas, como foi referido anteriormente, para fluidos UCM o método ORIG é equivalente ao método SPSS.

Com qualquer dos restantes métodos, a convergência do processo iterativo não apresenta dificuldades, mesmo com passos temporais da mesma ordem de grandeza do passo espacial.

4.2 Equivalência EDIF \leftrightarrow EVSS

Os quatro métodos descritos são analiticamente equivalentes. Numericamente, distinguem-se entre si pelo que em cada um se considera termo fonte. Nos métodos EDIF e EVSS, os termos fonte na equação da quantidade de movimento são idênticos. Isso pode verificar-se constatando que o que *não é* termo fonte nos dois casos é idêntico ($s\partial^2 u/\partial y^2$ com $s = 1$), ou escrevendo explicitamente o termo fonte em termos de uma tensão de corte comum. As duas formulações são assim numericamente equivalentes. Com efeito, os resultados obtidos com um ou o outro método são exactamente iguais até ao último algarismo e são obtidos exactamente no mesmo número de iterações. Dada esta equivalência, não se irá, daqui para a frente, dar mais atenção ao algoritmo EDIF.

4.3 Exactidão

A Figura 3 apresenta valores da velocidade no centro do canal e da tensão de corte na margem para um fluido UCM com $E = 1$ e um fluido de Oldroyd-B com $E = 5, \beta = 0.05$, calculados com as formulações SPSS e EVSS (não se apresentam resultados obtidos com as formulações ORIG e EDIF porque a primeira, nas situações em que converge, é equivalente à SPSS, e a segunda, como se concluiu acima, é equivalente à EVSS). É patente o acordo entre os resultados obtidos com diferentes formulações. Os diferentes algoritmos considerados são, assim, equivalentes do ponto de vista da exactidão. Compreende-se que assim seja, uma vez que as diferenças de formulação para formulação consistem no que se trata como termo de fonte (isto é, que termos das equações entram nos cálculos com os valores que lhes foram atribuídos na iteração anterior) e no que é tratado implicitamente. Ora, no processo iterativo as variações sofridas pelas várias variáveis em cada iteração vão-se reduzindo, esbatendo-se efectivamente a diferença entre termo de fonte ou termo a tratar implicitamente, logo, as diferenças entre as formulações.

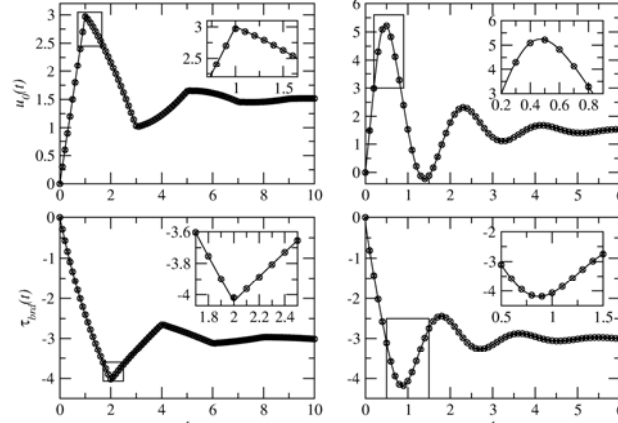


Figura 3: Soluções analíticas (linhas contínuas) e resultados obtidos com as formulações SPSS (círculos) e EVSS (cruzes) para um fluido com $E = 1, \beta = 0$ (esquerda) e $E = 5, \beta = 0.05$ (direita) com $\delta y = 0.01, \delta t = 0.004$. Nos dois gráficos acima apresenta-se a velocidade no centro do canal, nos dois abaixo a tensão de corte na margem.

Para melhor aferir a exactidão dos resultados numéricos introduzimos uma estimativa quantitativa do erro como a norma L_2 da diferença relativamente à solução analítica

$$\varepsilon(t_i) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_j (u_{ij} - u^{(a)}(t_i, y_j))^2}, \quad (27)$$

onde a soma se estende a todos os N pontos da malha. Apresentam-se na Figura 4 curvas do erro de resultados obtidos com o algoritmo SPSS, para diferentes malhas. Notam-se nos gráficos erros de forma geral maiores nos cálculos com fluidos UCM. Isto deve-se às súbitas variações na derivada da velocidade (os vértices visíveis nas curvas das Figura 2 e Figura 3), características do escoamento de arranque deste tipo de fluidos. Este comportamento é causado por uma onda de tensão com origem numa descontinuidade do gradiente da tensão de corte gerada nas margens do canal no momento do arranque [11], que se propaga no canal transversalmente, das margens para o centro, com velocidade \sqrt{E} , para a qual os fluidos UCM não dispõem de um mecanismo dissipativo.

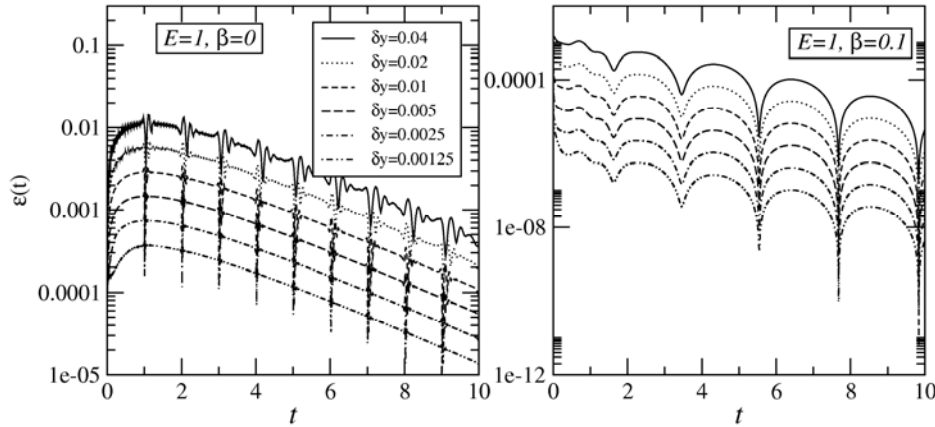


Figura 4: Erros obtidos com o algoritmo SPSS para o escoamento de arranque de um fluido UCM (esquerda) e de um fluido de Oldroyd-B com $\beta = 0.1$ (à direita, a legenda é comum aos dois gráficos). O passo temporal usado foi $\delta t = 0.4\delta y$.

4.4 Eficiência

A viscosidade do solvente tem um natural efeito atenuador das oscilações elásticas do fluido que dificultam a convergência nos estágios iniciais do arranque do escoamento. Em conformidade, os processos iterativos tendem a convergir mais rapidamente à medida que o tempo de escoamento avança e convergem também com tanto maior facilidade quanto maior é o valor de β , independentemente da formulação particular utilizada (descontando aqui, obviamente, a formulação original, que, como se disse acima, só com muita dificuldade converge para valores de β diferentes de zero).

Na Figura 5 apresentam-se gráficos do número de iterações necessário para a convergência em cada passo temporal, em simulações do escoamento de diferentes fluidos (mantendo o número de elasticidade sempre unitário), onde está bem ilustrada a discussão precedente. Nota-se também que o algoritmo SPSS é muito mais

eficiente que o EVSS, conseguindo satisfazer o critério de convergência com um número de iterações dez a cem vezes menor.

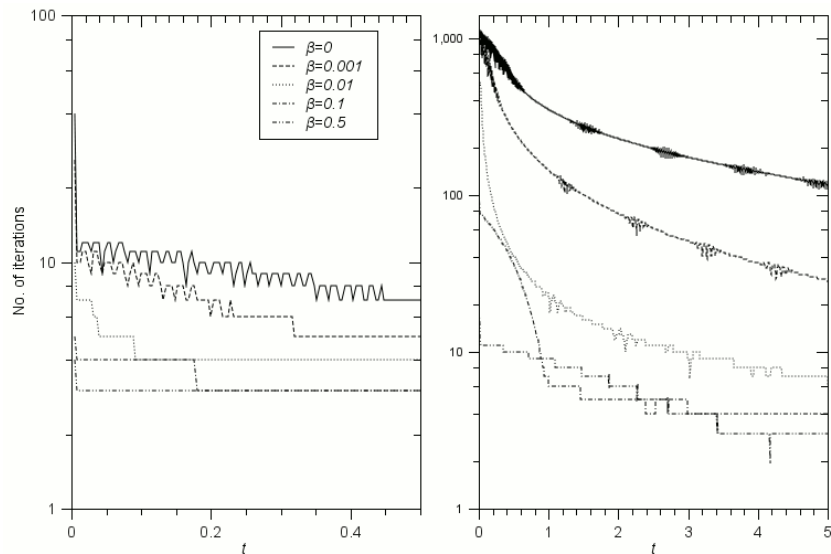


Figura 5: Número de iterações em cada passo temporal na formulação SPSS (esquerda) e EVSS (direita), para o cálculo do escoamento de diferentes fluidos com $E=1$ ($\delta y = 0.01$; $\delta t = 0.004$).

A Figura 6 mostra o número total de iterações necessárias para completar uma simulação até $t = 10$, como função de β . Nota-se muito claramente o papel estabilizador da viscosidade do solvente, bem como a superior eficiência do algoritmo SPSS, particularmente expressiva para $\beta \lesssim 0.1$.

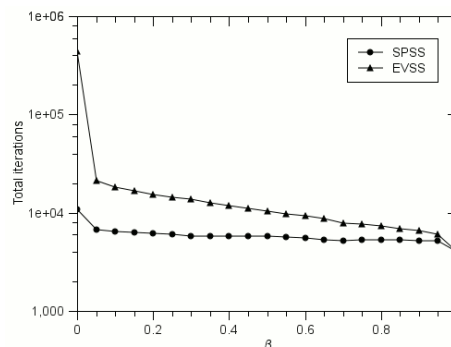


Figura 6: Números totais de iterações na resolução de escoamentos de fluidos com $E=2$, como função de β . As simulações foram todas executadas com os passos $\delta y = 0.01$; $\delta t = 0.004$.

Num estudo (ainda em fase preliminar) do escoamento canal pulsante de fluidos de Oldroyd-B, verificou-se também esta superior eficiência do método SPSS.

5 Conclusões

Com este trabalho, confirmou-se a inadequação de uma abordagem directa, sem a introdução de termos difusivos, na descrição de escoamentos de fluidos de Oldroyd-B. Foram estudados três métodos que têm sido correntemente usados para responder a essa inadequação (os algoritmos EVSS, SPSS e EDIF) e verificou-se que (a) do ponto de vista da exactidão não apresentam diferenças apreciáveis; (b) os algoritmos EVSS e EDIF são, também do ponto de vista numérico, equivalentes; (c) o algoritmo SPSS é significativamente mais eficiente que o EVSS, em todas as situações testadas.

Referências

1. Oldroyd, J. G. On the formulation of rheological equations of state. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1950, Vol. 200, pp. 523-541.
2. Bird, R.B., Armstrong, R.C. and Hassager, O. *Dynamics of Polymeric Liquids*. New York : John Wiley & Sons, 1987.

3. Perera, M.G.N. and Walters, K. Long-Range Memory Effects in Flows Involving Abrupt Changes in Geometry. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1977, Vol. 2, pp. 49-81.
4. Rajagopalan, Brown, R.C. and Armstrong, R.C. Finite element methods for calculation of steady viscoelastic flow using constitutive equations with a Newtonian viscosity. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1990, Vol. 36, pp. 159-199.
5. Sun, J., Phan-Thien, N and Tanner, R.I. An adaptative viscoelastic stress splitting scheme and its applications: AVSS/SI and AVSS/SUPG. *J. Non-Newtonian fluid Mech.* 1996, Vol. 65, pp. 76-91.
6. Guénette, R. and Fortin, M. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1995, Vol. 60, pp. 27-52.
7. Oliveira, P.J., Pinho, F.T. and Pinto, G.A. Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1998, Vol. 79, pp. 1-43.
8. Alves, M.A., Pinho, F.T. and Oliveira, P.J. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2000, Vol. 93, pp. 287-314.
9. Waters, N.D. and King, M.J. Unsteady flow of an elastico-viscous liquid. *Rheol. Acta.* 1970, Vol. 9, p. 345:355.
10. Hayat, T. and Massood, K. Some simple flows of an Oldroyd-B fluid. *Int. J. Eng. Sci.* 2001, Vol. 39, pp. 135-147.
11. Duarte, A.S., Miranda, A.I.P. and Oliveira, P.J. Numerical and Analytical modeling of unsteady viscoelastic flows: The start-up and pulsating test case problems. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2008, Vol. 154, pp. 153-169.
12. Lilek, Z., Muzafarerija, S., Peric, M., Seidl, V. An implicit finite-volume method using nonmatching blocks of structured grid. *Numer. Heat Transf. B.* 1997, Vol. 32, pp. 403-418.
13. Oliveira, P. J. Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: vortex shedding behind cylinder. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2001, Vol. 101, pp. 113-137.