

ESCOAMENTO VISCOELÁSTICO NUM “T” BIDIMENSIONAL

H.M.M. Matos^{1*}, M.A. Alves² e P.J. Oliveira¹

1: Unidade de Materiais Têxteis e Papeleiros, Departamento de Engenharia Electromecânica
Universidade da Beira Interior
Rua Marques D’Avila e Bolama, 6200-001 Covilhã, Portugal
e-mail: heldermiguelmm@hotmail.com
e-mail: pjpo@ubi.pt

2: Departamento de Engenharia Química, CEFT
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal
e-mail: mmalves@fe.up.pt, web: <http://paginas.fe.up.pt/~ceft/>

Palavras-chave: Métodos Numéricos, Bifurcação, Recirculações, Viscoelasticidade, Hemodinâmica

Resumo. *É efectuada a simulação numérica do escoamento numa conduta bidimensional com uma bifurcação de 90°, com o duplo objectivo de: (1) verificar o comportamento do escoamento nesta geometria para valores crescentes de elasticidade; (2) testar várias formulações que permitem evitar a dependência da solução numérica com o valor utilizado para o passo no tempo. Com base neste objectivo é proposta uma nova formulação para o cálculo das tensões nas faces dos volumes de controlo, que mostrou ser não só independente do valor de Δt , como mais robusta entre as várias formulações testadas.*

1. INTRODUÇÃO

A simulação de escoamentos em regime laminar, através de bifurcações, é de enorme importância prática, pois trata-se de uma geometria de escoamento que está presente em muitas situações com relevância para a saúde humana, nomeadamente na hemodinâmica.

Na engenharia, este tipo de escoamento é muito vulgar para o transporte e separação de fluidos. No transporte de fluidos, o problema que se coloca com este tipo de geometria é o depósito de partículas na entrada do ramal secundário onde ocorre uma recirculação, afectando assim o desempenho da geometria projectada; este problema torna-se mais relevante quando a quantidade de sedimentos é elevada e as paredes da bifurcação são bastante rugosas, como é o caso do escoamento de águas residuais [1]. O escoamento através de “Tês” é também muito utilizado para a separação de fluidos, como acontece no caso do transporte de misturas de petróleo líquido, gás natural e outras misturas, como foi estudado por Issa e Oliveira [2].

Na bio-engenharia, o escoamento neste tipo de geometria possui também uma enorme importância como é exemplo o sistema circulatório humano, no qual o sangue escoar ao longo de bifurcações sucessivas de artérias e veias. O escoamento em bifurcações é complexo, originando recirculações, as quais estão normalmente associadas aos problemas de aterosclerose e trombose [3-4], e essa complexidade é acrescida pelo facto do fluido em questão poder ter propriedades reológicas não newtonianas. As zonas das recirculações são caracterizadas por possuírem tensões de corte baixas, existindo a possibilidade de se formarem coágulos devido à adesão das plaquetas arrastadas, dos glóbulos vermelhos e dos lipóides, resultando na formação de placas ateróticas e trombos. Esta relação tem sido estabelecida por inúmeros estudos, tendo sido um dos pioneiros, feito por Caro et al. [5], em 1971, e confirmada por Zarins et al. [6] e Ku et al. [7], entre outros. Neste tipo de geometria, surgem também zonas de elevada tensão de corte, onde pode ocorrer a danificação do endotélio dos vasos sanguíneos, tal como foi descrito por Fry [8] em 1969, assim como hemólise com a indesejável libertação de hemoglobina na corrente sanguínea, como referido por Miranda et al. [9]. As causas relacionadas com a origem das doenças vasculares têm continuado a ser alvo de inúmeros estudos numéricos e experimentais, onde, para além da natureza do escoamento nas bifurcações, se relacionam também outros factores como o regime pulsante do sistema circulatório, a pressão envolvente nas paredes das veias [10-14] e a alteração da geometria da bifurcação devido ao regime pulsante [15]. O presente trabalho enquadra-se na continuação dos trabalhos de Miranda [10] onde foi estudado o comportamento do escoamento de um fluido newtoniano ou não-newtoniano inelástico, em regime permanente e pulsante no mesmo tipo de geometria.

Os principais objectivos do presente trabalho são: (i) o estudo físico do escoamento laminar, em regime estacionário, de diferentes tipos de fluidos viscoelásticos numa conduta bidimensional com uma bifurcação de 90°, (ii) o estudo numérico do desempenho de várias formulações usadas na discretização das equações, por forma a verificar quais as melhores opções a usar para fluidos newtonianos ou não newtonianos viscoelásticos. Concretamente, pretende-se que os resultados obtidos por estas formulações sejam independentes do valor de Δt escolhido para o avanço do tempo ao longo da simulação. Este último objectivo resulta de

em simulações realizadas anteriormente se ter constatado a dependência indesejada dos resultados obtidos no valor de Δt utilizado, quer para escoamentos com fluidos newtonianos ou não newtonianos viscoelásticos. A dependência de uma solução numérica, em regime estacionário, no valor utilizado para o passo no tempo está relacionada com dois factores: a formulação usada para o cálculo dos fluxos convectivos nas faces dos volumes de controlo e a formulação para as tensões nas faces dos volumes de controlo. Estes dois pontos serão detalhados quando se efectuar a descrição das várias formulações utilizadas.

2. EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

As equações que regem o escoamento são as que exprimem a conservação da massa e a conservação do momento linear,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \boldsymbol{\tau} + \nabla(\eta_s \mathbf{D}) \quad (2)$$

Nestas equações \mathbf{u} é o vector velocidade, p é a pressão, ρ é a massa volúmica do fluido, \mathbf{D} é o tensor da taxa de deformação e η_s é a viscosidade do solvente. No nosso estudo, a massa volúmica e a viscosidade total ($\eta_0 = \eta_s + \eta_p$, onde η_p designa a viscosidade do polímero) são assumidas constantes.

A resolução da Eq. 2 implica a necessidade de uma nova equação referente à evolução do tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$, e para tal são utilizados dois modelos constitutivos da família FENE (Finite Extensible Non-linear Elastic) [16]: o modelo FENE-CR e o modelo FENE-MCR. No modelo FENE-CR proposto por Chilcott e Rallison [17], o tensor das tensões é expresso por:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \left(\overset{\nabla}{\frac{\boldsymbol{\tau}}{f(\boldsymbol{\tau})}}} \right) = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (3)$$

onde λ é o tempo de relaxação do fluido. O símbolo $\overset{\nabla}{}$ representa a derivada convectiva superior de Oldroyd dada por,

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \left[\nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \nabla \mathbf{u} \right] \quad (4)$$

onde o expoente “T” denomina o tensor transposto e $D()/Dt$ é a derivada material. Na Eq. 3 a função $f(\boldsymbol{\tau})$ é dada por:

$$f(\boldsymbol{\tau}) = \frac{L^2 + (\lambda / \eta_p) \text{tr}(\boldsymbol{\tau})}{L^2 - 3} \quad (5)$$

onde L^2 é o parâmetro de extensibilidade que é mantido constante ao longo de toda a

simulação ($L^2 = 100$) para ambos os modelos e tr representa o operador traço. Se em relação ao modelo anterior impusermos a simplificação $Df(A)/Dt \approx 0$, obtemos o modelo FENE-CR modificado (FENE-MCR), utilizado por Coates et al. [18], onde a equação constitutiva é dada por:

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\lambda}{f(\boldsymbol{\tau})} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (6)$$

Os modelos FENE-CR e FENE-MCR são idênticos para escoamentos simples em regime estacionário, verificando-se apenas diferenças entre os dois modelos para escoamentos complexos e fortemente convectivos onde o termo desprezado pelo modelo FENE-MCR ($\mathbf{u} \cdot \nabla(l/f)$) passa a ser significativo.

3. MÉTODO NUMÉRICO

As equações diferenciais descritas anteriormente são discretizadas utilizando o método dos volumes finitos, cada vez mais utilizado em escoamentos viscoelásticos por ser menos exigente em recursos computacionais. Neste método, as equações de governo são integradas em cada volume de controlo, dando origem a equações algébricas onde as incógnitas são os valores nodais das várias variáveis [19, 20]. A integração é feita numa malha de volumes finitos com arranjo “colocado” das variáveis [21] (malhas não desfasadas, em que todas as variáveis são localizadas no centro dos volumes de controlo) seguindo a técnica de Rhie e Chow [22] para evitar o desacoplamento entre a pressão e a velocidade neste tipo de malhas. Para o acoplamento entre a tensão e a velocidade é usado um processo semelhante, tal como descrito em Oliveira et al. [23, 24].

Como os vários sistemas de equações algébricas resultantes para as componentes da velocidade e pressão são linearizados e resolvidos sequencialmente, temos de usar um processo iterativo. O algoritmo utilizado está preparado para o cálculo de estado não estacionário, no entanto, pode ser utilizado também para cálculos em regime permanente, como é o caso do presente trabalho, onde as iterações são substituídas por avanços fictícios no tempo, produzindo um efeito análogo ao uso de um factor de sub-relaxação.

Os termos difusivos e o termo gradiente de pressão na equação de conservação de movimento foram representados por diferenças centrais (segunda ordem), enquanto que para os termos convectivos é usado o esquema de alta resolução CUBISTA desenvolvido por Alves et al. [25], por possuir boa precisão numérica (3ª ordem de convergência para malhas uniformes e em escoamento suave) e ser muito robusto em relação à convergência iterativa do algoritmo numérico no cálculo de escoamentos viscoelásticos.

O algoritmo utilizado está baseado no algoritmo SIMPLEC [26] que permite ligar os campos de velocidade e pressão, de forma a verificar-se a equação da continuidade em escoamentos no regime permanente. A convergência do processo iterativo é obtida quando os resíduos de todas as variáveis são inferiores a 10^{-8} . A escolha deste valor deveu-se ao facto de soluções numéricas calculadas com uma tolerância de 10^{-4} se terem mostrado

ainda dependentes de Δt , quando o número de Débora era elevado (e.g. $D_e = 5$).

Descrição das formulações utilizadas

Tal como foi referido na introdução, as várias formulações utilizadas estão relacionadas com a forma de cálculo dos fluxos convectivos e das tensões nas faces dos volumes de controlo. Assim, por uma questão de facilidade de compreensão, vamos designar as formulações para o cálculo dos fluxos convectivos por formulações do tipo **F**, e as formulações para o cálculo das tensões nas faces dos volumes de controlo por formulações do tipo **T**, sendo a formulação final utilizada na prática uma combinação destes dois tipos de formulação (**F** e **T**).

3.1. Formulações para o cálculo dos fluxos convectivos (Tipo **F**)

Os fluxos convectivos foram calculados segundo duas formulações; a primeira foi utilizada em simulações anteriores (**F1**) [23] e é dependente do valor de Δt utilizado, tanto em escoamentos de fluidos newtonianos como não newtonianos, razão pela qual será só utilizada esporadicamente no decorrer do presente trabalho. A segunda formulação para o cálculo dos fluxos convectivos (**F2**) foi proposta na Ref. [21] e resulta em soluções estacionárias independentes do Δt . As duas formulações para o cálculo dos fluxos convectivos diferem na forma como são obtidas as componentes da velocidade nas faces dos volumes de controlo, a partir de uma equação semelhante à equação da quantidade de movimento.

A equação discretizada da quantidade de movimento com o termo inercial, após interpolação linear (indicada pela barra superior), é:

$$\overline{a_p u_p} = \overline{H(u)} - \overline{B \Delta p} + \frac{\overline{\rho V}}{\Delta t} u^0 \quad (7)$$

onde u_p é a velocidade no centro da célula P , $H(u) = \sum a_f u_f$ onde o índice F corresponde às células vizinhas de P , B é uma área superficial, Δp uma diferença de pressões, V é o volume da célula e u^0 a velocidade no nível temporal (iteração) anterior.

3.1.1. Formulação do tipo **F1**

Para obtermos a formulação do tipo **F1** seguimos a técnica sugerida por Rhie e Chow [22], e escrevemos uma equação semelhante à equação da quantidade de movimento, onde o termo referente à pressão é obtido directamente na face do volume de controlo:

$$\overline{a_p \widetilde{u}_f} = \overline{H(u)} - \overline{B_f \widetilde{\Delta p}_f} + \frac{\overline{\rho V}}{\Delta t} u^0 \quad (8)$$

O índice f refere-se a condições na face do volume de controlo e $\widetilde{\Delta p}_f = p_f - p_p$. Se procedermos à subtracção das Eqs. 7 e 8 obtemos a equação correspondente para a

velocidade na face do volume de controlo \widetilde{u}_f :

$$\widetilde{u}_f = \frac{\overline{a_p u_p} - \overline{B_f} \widetilde{\Delta p_f} + \overline{B \Delta p}}{\overline{a_p}} \quad (9)$$

Como $a_p = (a_0 + \rho V / \Delta t)$ constatamos que esta formulação para o cálculo das velocidades e posteriormente dos fluxos nas faces dos volumes de controlo é dependente do passo no tempo (Δt) e por esta razão se explica a dependência temporal registada.

3.1.2. Formulação do tipo *F2*

A formulação do tipo *F2* apresenta uma pequena diferença em relação à formulação do tipo *F1*, neste caso a Eq. 8 é reescrita na forma:

$$\overline{a_p} \widetilde{u}_f = \overline{H(u)} - \overline{B_f} \widetilde{\Delta p_f} + \frac{\overline{\rho V}}{\Delta t} \widetilde{u}^0 \quad (10)$$

onde a velocidade calculada na iteração anterior é agora obtida também através da técnica de Rhie e Chow [22]. De forma idêntica ao que foi feito anteriormente, se procedermos à subtração das Eqs. 7 e 10 obtemos a equação correspondente para a velocidade na face do volume de controlo \widetilde{u}_f :

$$\widetilde{u}_f = \frac{\overline{a_p u_p} - \overline{B_f} \widetilde{\Delta p_f} + \overline{B \Delta p} + \frac{\overline{\rho V}}{\Delta t} u^0 - \frac{\overline{\rho V}}{\Delta t} \widetilde{u}^0}{\left(\overline{a_0 + \frac{\rho V}{\Delta t}} \right)} \quad (11)$$

Neste caso podemos constatar que o valor da velocidade na face dos volumes de controlo quando se atinge o estado permanente deixa de ser dependente do passo no tempo (uma vez que, quando o processo converge, temos $\widetilde{u}_f = \widetilde{u}^0$ e $\overline{u}_f = \overline{u}^0$, e os termos em Δt cancelam-se mutuamente).

3.2. Formulações para o cálculo das tensões (Tipo *T*)

As várias formulações utilizadas para o cálculo das tensões nas faces dos volumes de controlo utilizaram o modelo constitutivo FENE-MCR à excepção da formulação “**Tau E**” que utilizou ambos os modelos constitutivos, FENE-CR e FENE-MCR.

3.2.1. Formulação do tipo *T1*

A formulação utilizada até à realização do presente trabalho, onde se constatou a dependência dos resultados no valor do passo no tempo Δt escolhido, é do tipo *F1T1*. Neste trabalho, iremos utilizar uma formulação do tipo *F2T1* e que será aqui designada

por formulação “**Geral**”. Nesta formulação (**TI**) a expressão para o cálculo da tensão é obtida discretizando a equação constitutiva para as tensões Eq. (6), segundo o procedimento descrito em Oliveira e Pinho [24]. A expressão obtida desta forma garante que não existirão problemas de desacoplamento entre os campos de tensão e velocidade, sendo expressa pela equação 12 e pelas relações auxiliares (Eq. 13).

$$\begin{aligned} (\tilde{\tau}_{ij}) = & (\overline{\tau}_{ij})_f - \left(b'_{fi} [\Delta u_j]_f + b'_{fj} [\Delta u_i]_f - \frac{2}{3} \sum_k \eta_p B'_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) \\ & + \left(\tilde{b}'_{fi} [\Delta u_j]_f + \tilde{b}'_{fj} [\Delta u_i]_f - \frac{2}{3} \sum_k \overline{\eta}_p \tilde{B}'_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

com

$$\begin{aligned} b'_{fi} = & \frac{\eta_p B_{fi} + \lambda \sum_k B_{fk} \tau_{ki}}{a_p^\tau} \quad ; \quad B'_{fi} = \frac{B_{fi}}{a_p^\tau} \\ \tilde{b}'_{fi} = & \frac{\left(\eta_p B_{fi} + \lambda \sum_k B_{fk} \overline{\tau}_{ki} \right)_f}{V_f (a_p^\tau / V_p)} \quad ; \quad \tilde{B}'_{fi} = \frac{B_{fi}}{V_f (a_p^\tau / V_p)} \end{aligned} \quad (13)$$

onde B_{fi} é a componente i da área da superfície da célula alinhada com a direcção f , V_p e V_f correspondem aos volumes da célula centrada em P e da célula centrada na face f . O sobrescrito (\sim) corresponde à interpolação especial feita na face da célula [25], enquanto o sobrescrito ($-$) corresponde a interpolações lineares. Como o coeficiente central a_p^τ é

dado por $a_p^\tau = \left(\frac{\lambda V_p}{\Delta t} + V_p + \lambda \sum_{F=1}^f a_F^\tau \right)$, esta formulação para as tensões nas faces dos volumes

de controlo vai produzir resultados que, quando convergidos (solução estacionária), vão depender do valor de Δt utilizado. A formulação da Eq. 12 é algo “inconsistente” pois os termos que contém Δt não se cancelam mutuamente.

3.2.2. Formulação do tipo T2

A segunda formulação utilizada é um novo tipo de formulação proposto no presente trabalho que resulta de uma simplificação da formulação “**Geral**” descrita anteriormente, por forma a que essa formulação ficasse independente do valor de Δt escolhido e que será designada por formulação “**Tau E MCR**” e “**Tau E CR**” dependendo do modelo constitutivo utilizado. A expressão para o cálculo das tensões é agora dada pela Eq. 14.

Relativamente à formulação **TI** expressa pela Eq. 12 são realçados dois pontos: (i) o termo inercial da equação constitutiva, $\partial \tau_{ij} / \partial t$, foi simplificado, resultando no desaparecimento dos termos que continham Δt , inseridos no coeficiente a_p^τ das Eqs. 13; (ii) o termo

adicional da derivada convectiva superior (entre parêntesis recto na Eq. 4) foi também removido da definição da interpolação especial para a tensão na face $(\tilde{\tau}_{ij})_f$. O ponto (i) teve como consequência que os resultados se tornaram independentes do Δt utilizado; o ponto (ii), ao desligar uma influência forte da viscoelasticidade, uma vez que o termo removido era multiplicado pelo tempo de relaxação do fluido, implicou uma melhoria notável em termos de estabilidade numérica.

$$(\tilde{\tau}_{ij}) = (\overline{\tau}_{ij})_f + \frac{1}{(1 + a_0^r / V_p)} \left[-\frac{1}{V_p} \left(\eta_p B_{fi} [\Delta u_j]_f + \eta_p B_{fj} [\Delta u_i]_f - \frac{2}{3} \eta_p \sum_k B_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) + \frac{1}{V_f} \left(\eta_p B_{fi} [\Delta u_j]_f + \eta_p B_{fj} [\Delta u_i]_f - \frac{2}{3} \eta_p \sum_k B_{fk} [\Delta u_k]_f \delta_{ij} \right) \right] \quad (14)$$

3.2.3. Formulação do tipo T3

A última formulação utilizada consiste numa simplificação “drástica” em que as tensões nas faces são calculadas procedendo-se à interpolação linear com as tensões nos volumes de controlo vizinhos:

$$(\tilde{\tau}_{ij}) = (\overline{\tau}_{ij}) \quad (15)$$

Na Tabela 1 é feito um resumo da designação das várias formulações utilizadas.

Tabela 1. Resumo da designação das várias formulações utilizadas e respectiva dependência temporal.

Designação da formulação	Formulação para o cálculo dos fluxos convectivos	Formulação para o cálculo das tensões	Dependência com o passo no tempo utilizado Δt
Formulação Geral	F2	T1	Sim
Formulação Tau E-MCR	F2	T2	Não
Formulação Tau E-CR	F2	T2	Não
Formulação com Interpolação Linear	F2	T3	Não

4. GEOMETRIA, CARACTERIZAÇÃO DO ESCOAMENTO NA BIFURCAÇÃO E MALHAS COMPUTACIONAIS

A simulação numérica foi realizada nas condições descritas por Khodadadi et al. [12], para uma geometria em T com uma secção de área constante e rectangular, como está representado na figura 1. O comprimento total segundo x é de 0.26 m, segundo y de

0.21 m e a altura dos canais (H) é igual a 0.01 m. A entrada do escoamento é feita no bloco 1 (B1) em $x = -3.5H$, onde é imposto um perfil de velocidades parabólico com velocidade média $u_1 = 0.0745$ m/s; as saídas estão localizadas em $x = 22.5H$ (B5) e $y = 20.5H$ (B6), onde o escoamento se encontra completamente desenvolvido. À excepção da entrada e saída do escoamento, todos os planos da geometria coincidem com paredes sólidas nas quais é imposta a condição de não escorregamento, obrigando a que a velocidade do fluido na parede seja igual à velocidade da parede, que neste caso é nula.

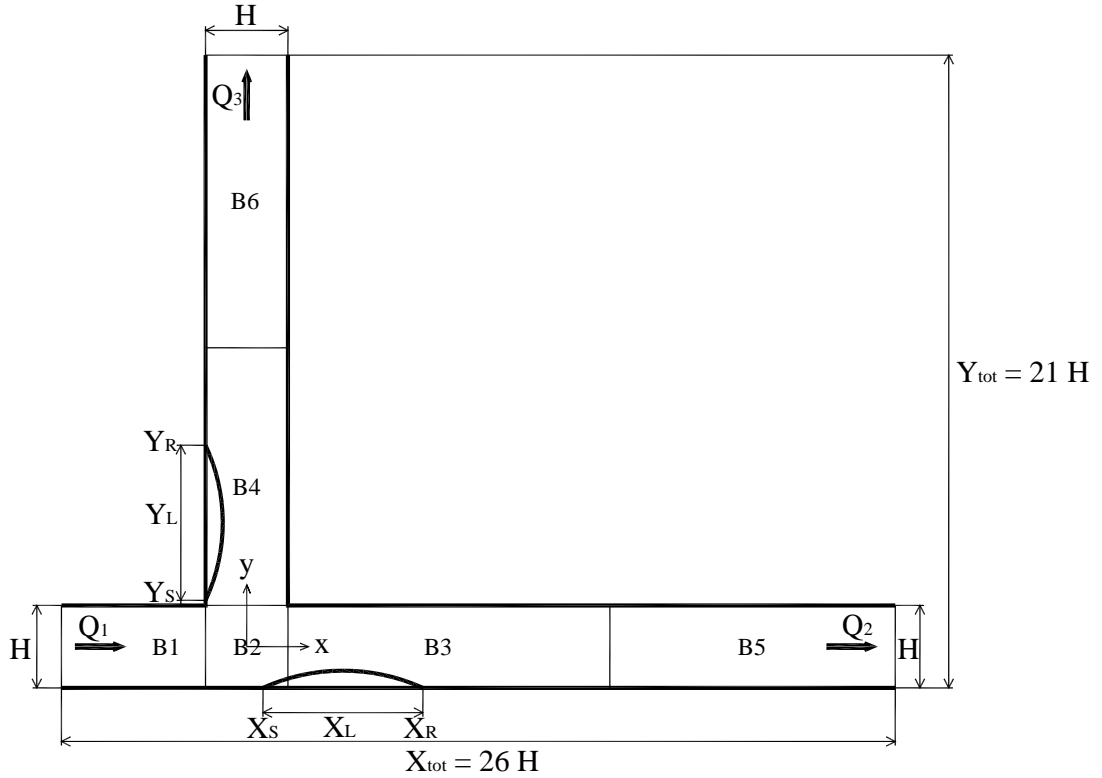


Figura 1. Representação gráfica da geometria em estudo.

De acordo com [12], a razão de extracção usada foi $\beta = Q_3 / Q_1 = 0.7$, onde Q_1 , Q_2 e Q_3 são respectivamente os caudais volúmicos na entrada, na saída principal e na saída secundária, tal como estão identificados na figura 1. A imposição da relação de extracção constitui uma condição de fronteira adicional para escoamentos em bifurcações de forma a garantir a unicidade da solução das equações. O número de Reynolds é calculado para as condições na entrada do escoamento, velocidade média na entrada do escoamento (u_1) e largura do canal à entrada ($Re = \rho u_1 H / \eta_0 \approx 102$).

Foram realizadas simulações numéricas, utilizando um fluido newtoniano e três fluidos viscoelásticos com números de Débora iguais a 1, 2.5 e 5 respectivamente. O número de

Débora é definido por.

$$De = \frac{\lambda u_p}{H} \quad (16)$$

Todos os fluidos utilizados têm $\rho = 1150 \text{ kg/m}^3$ e viscosidade $\eta_0 = 0.0084 \text{ Pa.s}$; no caso de fluidos viscoelásticos optou-se pela escolha de uma razão entre a viscosidade do solvente e a viscosidade total de 0.8, obtendo-se uma viscosidade do solvente $\eta_s = 0.0067 \text{ Pa.s}$ e uma viscosidade do polímero $\eta_p = 0.0017 \text{ Pa.s}$.

Devido à complexidade da geometria em questão, a malha do domínio de cálculo tem de ser constituída por mais de um bloco. No presente trabalho optou-se pelo uso de 6 blocos estruturados (B1-B6) tal como estão representados na figura 1, com malhas não uniformes (utilizando uma progressão geométrica) de forma a concentrar mais células na zona da bifurcação por ser esta a zona mais crítica do escoamento onde se observam os gradientes mais elevados. Junto à bifurcação, tal como é ilustrado pela figura 1, surgem junto às paredes duas recirculações, uma vertical e uma horizontal, estas são caracterizadas pelo seu início, onde existe um ponto de separação do escoamento X_s e Y_s para a recirculação horizontal e vertical, pelo ponto de recuperação do escoamento X_R e Y_R onde termina a recirculação e pelo comprimento das recirculações X_L e Y_L dados pela diferença entre os pontos de recuperação e separação.

Procedeu-se ao estudo do refinamento de malha, utilizando três malhas progressivamente refinadas, e para tal, a malha mais refinada é obtida da malha precedente, duplicando o número de células nas duas direcções do plano. Os factores de progressão geométrica f_x e f_y usados na malha mais refinada são obtidos pela raiz quadrada dos factores de progressão geométrica da malha precedente.

Tabela 2. Resumo das características da malha intermédia (M2).

Blocos	Nº de células $NX \times NY$	Comprimento x [m]	Comprimento y [m]	f_x	f_y
B1	40×40	$-0.035 \rightarrow -0.005$	$-0.005 \rightarrow 0.005$	0.95260	1.00000
B2	40×40	$-0.005 \rightarrow 0.005$	$-0.005 \rightarrow 0.005$	1.00000	1.00000
B3	100×40	$0.005 \rightarrow 0.125$	$-0.005 \rightarrow 0.005$	1.02657	1.00000
B4	40×100	$-0.005 \rightarrow 0.005$	$0.005 \rightarrow 0.105$	1.00000	1.02385
B5	20×40	$0.125 \rightarrow 0.225$	$-0.005 \rightarrow 0.005$	1.06413	1.00000
B6	40×20	$-0.005 \rightarrow 0.005$	$0.105 \rightarrow 0.205$	1.00000	1.06413

A malha mais grosseira será designada por M1 (6400 volumes de controlo), enquanto a mais refinada por M3 (25600 volumes de controlo); na Tabela 2 estão resumidas as características da malha intermédia (M2 com 12800 volumes de controlo) que, como se irá demonstrar é suficiente para os cálculos em questão terem boa precisão numérica.

Com as condições de refinamento consistente da malha, descritas anteriormente, pode ser aplicada a técnica de extrapolação de Richardson [27], que nos permite calcular a ordem de convergência do método numérico (p) e estimar uma solução mais precisa com base nos valores obtidos em várias malhas com diferentes níveis de refinamento. A ordem de convergência do método é dada por [20]

$$p = \frac{\log\left(\frac{\phi_{2h} - \phi_{4h}}{\phi_h - \phi_{2h}}\right)}{\log 2} \quad (17)$$

onde $4h$, $2h$ e h são respectivamente os espaçamentos característicos das malhas M1, M2 e M3. Uma solução mais precisa, ϕ_{extr} , pode ser obtida através da expressão [20]

$$\phi_{extr} \approx \phi_h + \varepsilon_h = \phi_h + \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^p - 1} \quad (18)$$

onde ε_h é o erro estimado da solução calculada com a malha mais refinada (M3). De seguida, na Tabela 3, são resumidos os erros obtidos pelas três malhas no cálculo dos comprimentos de recirculação horizontal e vertical utilizando a formulação **Tau E MCR** para dois casos, $De = 0$ (newtoniano) e para $De = 2.5$ (viscoelástico), assim como uma solução mais precisa e a ordem de convergência obtidas pela técnica de Richardson.

Tabela 3. Resumo dos erros obtidos para as várias malhas utilizando a formulação **Tau E MCR**.

	$De = 0$		$De = 2.5$	
	X_L	Y_L	X_L	Y_L
Malha M1	1.52410	1.90309	1.49743	1.73787
Malha M2	1.53367	1.95232	1.47461	1.88648
Malha M3	1.53475	1.96689	1.46957	1.94449
p	3.15	1.76	2.18	1.36
ϕ_{extr}	1.53489	1.97301	1.46814	1.98163
ε_{4h} (M1)	0.70%	3.54%	1.99%	12.3%
ε_{2h} (M2)	0.079%	1.05%	0.44%	4.80%
ε_h (M3)	0.0091%	0.31%	0.097%	1.87%

Como se pode constatar, pela análise da Tabela 3 a malha intermédia M2 já fornece resultados bastante próximos da solução exacta obtida através da técnica da extrapolação de Richardson [27], razão pela qual foi escolhida e utilizada no decorrer do presente trabalho em detrimento da malha M3 devido ao elevado tempo de CPU necessário com esta última malha.

5. RESULTADOS

Todos os resultados que se apresentam de seguida mostram variáveis adimensionais, usando para escala de comprimento a altura da conduta de entrada (H ; $Y = y/H$ e $X = x/H$), para escala de velocidade a velocidade média na entrada do escoamento (u_1), para as tensões o valor da tensão de corte na parede à entrada do escoamento (τ_{w0}) e para a escala de tempo a razão (u_1/H).

As figuras 2 e 3, fornecem os resultados relativos aos comprimentos de recirculação criados ao longo das direcções x e y , obtidos através de perfis de velocidade paralelos às paredes horizontal ($Y = -0.5$) e vertical ($X = -0.5$), para as várias formulações e fluidos considerados. Estas figuras ilustram a eventual dependência dos resultados no valor de Δt . Realça-se novamente que os Δt são adimensionais e que o caso newtoniano permite a convergência iterativa para valores muito elevados de Δt .

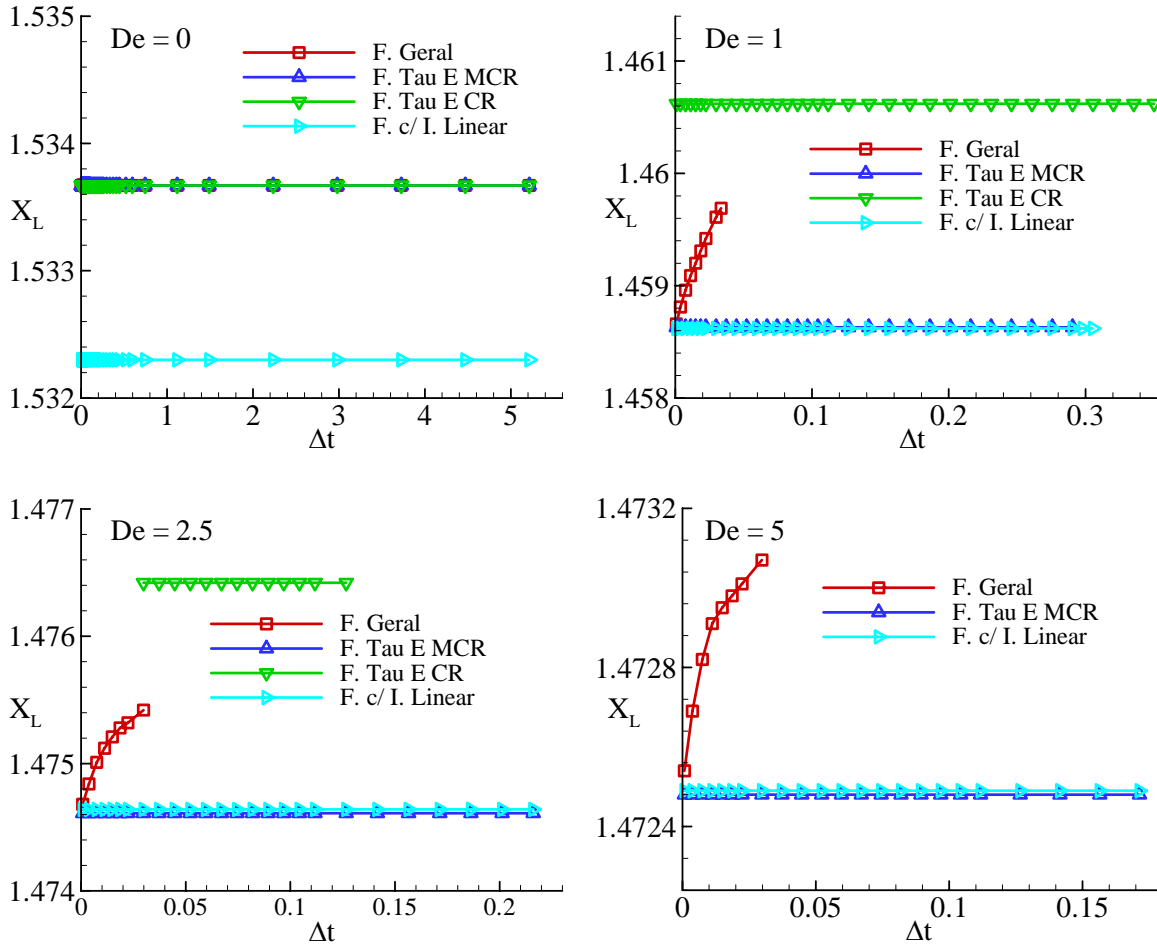


Figura 2. Variação do comprimento da recirculação horizontal com Δt para as várias formulações utilizadas.

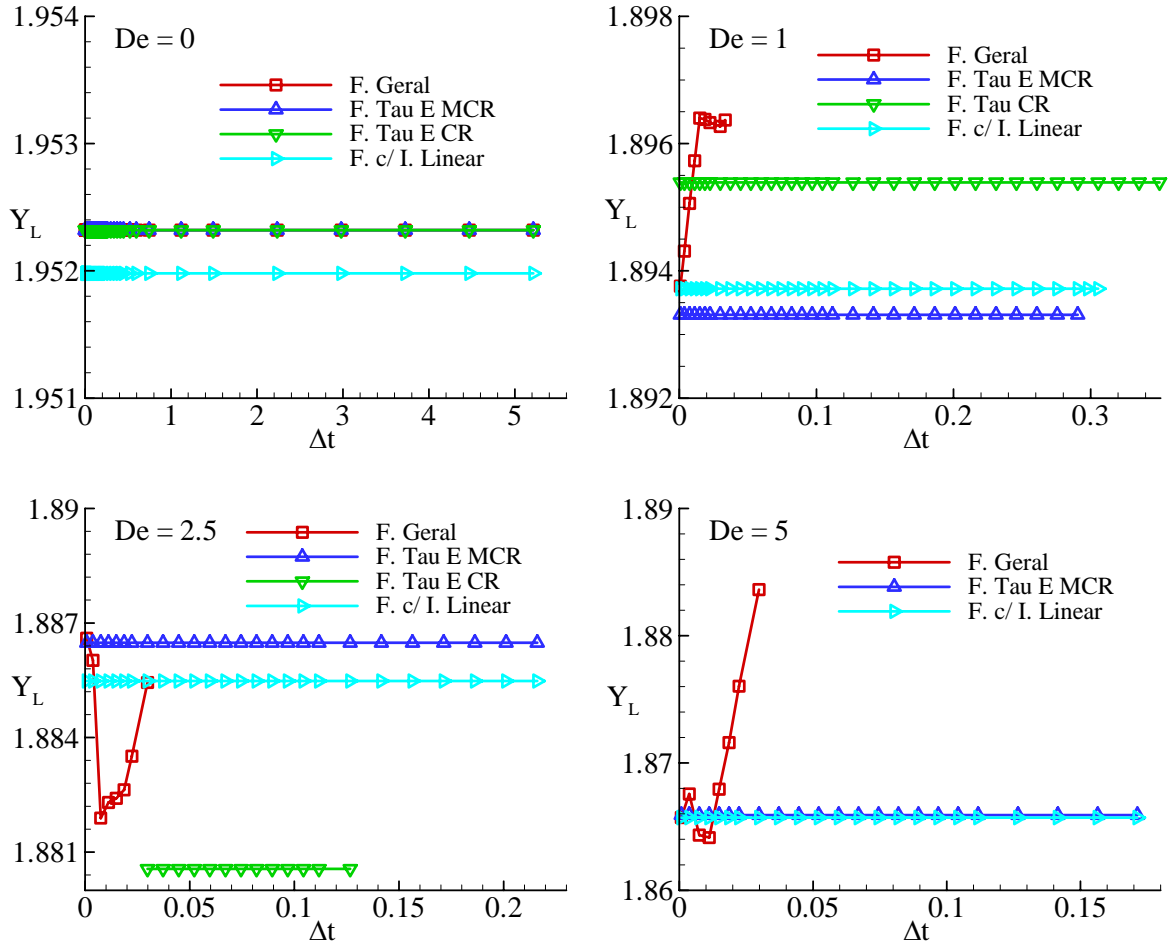


Figura 3. Variação do comprimento da recirculação vertical com Δt para as várias formulações utilizadas.

Como se pode observar nas figuras 2 e 3, para o caso newtoniano ($De = 0$) os comprimentos de recirculação são independentes do valor de Δt utilizado para todas as formulações, o que era de esperar pois a formulação para os fluxos, **F2**, é, teoricamente, invariante em relação a Δt . Nenhuma das formulações utilizadas mostra qualquer limitação para o valor de Δt escolhido, denotando boa robustez, não se tendo procedido a simulações com valores de Δt superiores devido ao tempo de CPU ser já elevado. As formulações **Tau E MCR**, **Tau E CR** e **Geral** apresentam resultados idênticos, como era esperado, pois a formulação **Tau E** para simulações de casos newtonianos ($\lambda = 0$) simplifica-se, obtendo-se uma equação idêntica à obtida para a formulação **Geral** na mesma condição ($\lambda = 0$), fazendo $\lambda = 0$ nas equações 12 e 14, e tendo em atenção a definição de a_p^r .

A formulação com **Interpolação Linear** apresenta resultados ligeiramente diferentes dos obtidos com as restantes formulações (diferença máxima de 0.46%), e revela simultaneamente uma maior dificuldade para a obtenção da solução, como pode ser constatado na figura 4 para

o caso newtoniano, onde o número de iterações é superior às restantes formulações. Esta diferença é ainda mais significativa no ponto onde todas as formulações apresentam um valor mínimo do número de iterações (valor de Δt ótimo, $\Delta t \approx 0.15$).

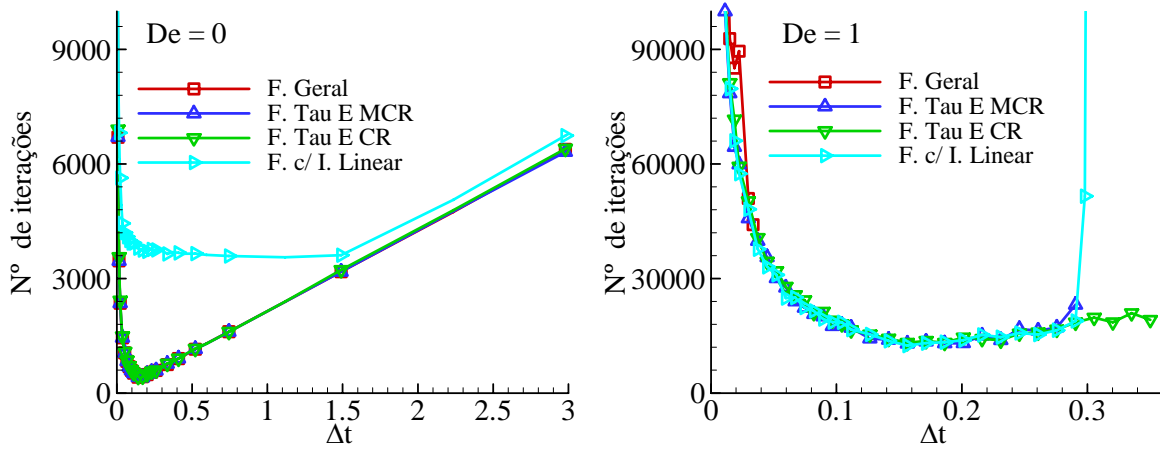


Figura 4. Variação do número iterações com Δt para as várias formulações utilizadas ($De = 0$ e $De = 1$).

Da análise das figuras 2 e 3, podemos constatar ainda que, para o caso dos escoamentos viscoelásticos, os resultados obtidos com a formulação **Geral** são dependentes do valor do passo no tempo escolhido para a simulação, além de que só converge para valores de Δt inferiores a 0.023. As formulações **Tau E** e a formulação com **Interpolação Linear** convergem para uma solução independente do valor de Δt escolhido, sendo possível utilizar valores de Δt a variar dentro de uma certa gama que diminui com De . No entanto, para o caso de $De = 2.5$ a formulação **Tau E CR** deixa de ter um comportamento semelhante às restantes formulações convergindo apenas para um intervalo de valores de passo no tempo compreendido entre 0.03 e 0.13. Estes limites de Δt tendem a ser cada vez mais próximos à medida que se aumenta o número de Débora, até deixar de se obter convergência iterativa da solução. O valor máximo de Débora para o qual se obteve uma solução sem se recorrer ao uso de uma solução que tivesse convergido para a inicialização das variáveis, foi $De = 3.8$, convergindo apenas para valores do passo no tempo muito próximos de 0.0797, pois, para os casos simulados com passos no tempo de $7.97 \times 10^{-2} \pm 7.5 \times 10^{-4}$, já não foi possível obter-se uma solução. No caso de $De = 5$, as formulações **Tau E MCR** e com **Interpolação Linear**, convergem para valores máximos de passo no tempo idênticos ($\Delta t = 0.17$). A máxima variação entre os valores de (X_L) e (Y_L) , obtidos com estas duas ultimas formulações foi de 0.022 % para $De = 1$, e 0.011 % para $De = 5$. Mesmo para modelos constitutivos diferentes, FENE-MCR e FENE-CR, as diferenças são muito pequenas (0.14% em X_L e 0.11% em Y_L para $De = 1$; e 0.12% em X_L e 0.31% em Y_L para $De = 2.5$).

Da análise da figura 4, podemos constatar que, para o caso do escoamento viscoelástico ($De = 1$), o número total de iterações para se obter a solução numérica, para as várias formulações, é praticamente idêntico para todos os valores de Δt assumidos. Para os

restantes escoamentos viscoelásticos, o comportamento é semelhante. Observam-se valores mínimos de iterações para $\Delta t \approx 0.15$, para os valores de Débora estudados, valor de Δt a que corresponde um número de Courant local de $C \approx 6$.

Contrariamente ao caso newtoniano, a formulação baseada em interpolação linear para o cálculo das tensões, não piora a taxa de convergência. As melhores formulações para a simulação de fluidos não newtonianos foram a **Tau E MCR** e a **Interpolação Linear**; a formulação **Tau E CR** mostrou-se mais limitada em relação ao valor máximo do número de Débora alcançado na simulação, mas no entanto, para baixos valores de Débora, como se pode ver pelas figuras 2 e 3 ($De = 1$), apresenta um intervalo maior de valores de passo no tempo para os quais é possível obter uma solução numérica. A formulação com **Interpolação Linear** apresentou bons resultados, contudo, a sua utilização pode ser problemática, como é referido em [21], por poder conduzir a um perfil da variável em zigzague (fisicamente irrealista).

Na figura 5 pode ser observada a evolução do tamanho das recirculações horizontal e vertical com a variação do número de Débora para as formulações independentes do valor do passo no tempo (Δt). Aqui, foram usados consecutivamente os campos de velocidade e tensão da última simulação para a inicialização das variáveis.

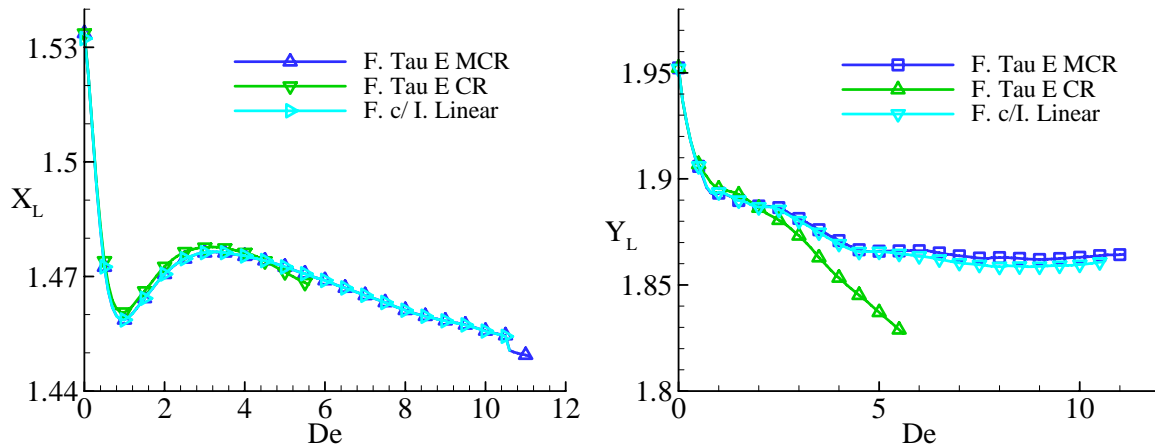


Figura 5. Variação dos comprimentos de recirculação horizontal (esquerda) e vertical (direita) com o número de Débora.

Na figura 6, são exibidas as linhas de corrente do escoamento, obtidas com a formulação **Tau E MCR**, para o caso newtoniano ($De = 0$). As duas zonas de recirculação formadas nos canais principal e secundário são reduzidas cerca de 5-6 % quando o fluido possui propriedades viscoelásticas, para valores idênticos de Re e β (vide Fig. 5)

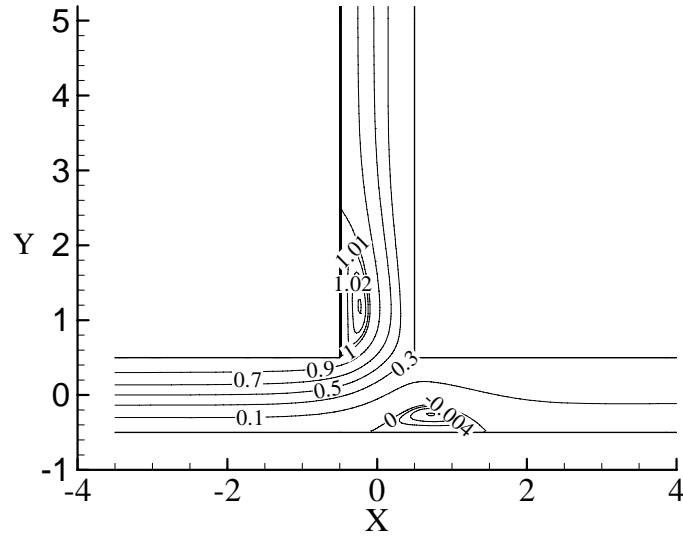


Figura 6. Linhas de corrente do escoamento para $De=0$ obtidas a partir da formulação **Tau E MCR**.

Os valores mínimos e máximos da função de corrente na Fig. 6 correspondem à proporção de fluido que fica retido dentro de cada bolha de recirculação; a variação destes valores com o número de Débora é exibida na figura 7, para as várias formulações utilizadas.

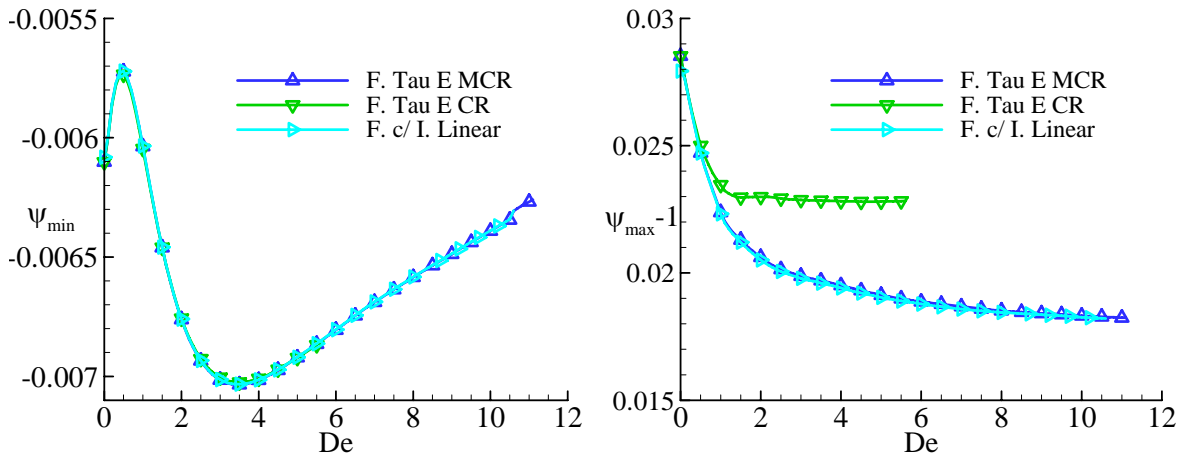


Figura 7. Variação do caudal nas recirculações horizontal e vertical.

Da análise das figuras 5 e 7, constata-se que, na recirculação vertical, o caudal no interior da recirculação e o comprimento da recirculação (Y_L) tende a diminuir com o aumento do número de Débora. A recirculação horizontal tem um comportamento distinto: o comprimento da recirculação (X_L) inicialmente diminui com o aumento do número de Débora e volta a aumentar posteriormente; a variação do caudal no interior da recirculação apresenta um comportamento ainda mais oscilatório, apresentando inicialmente um

aumento com o número de Débora, seguido depois por um comportamento semelhante ao apresentado pelo comprimento de recirculação. De seguida, na figura 8, são exibidas as componentes horizontal e vertical da velocidade e na figura 9 o campo das tensões de corte na zona da bifurcação.

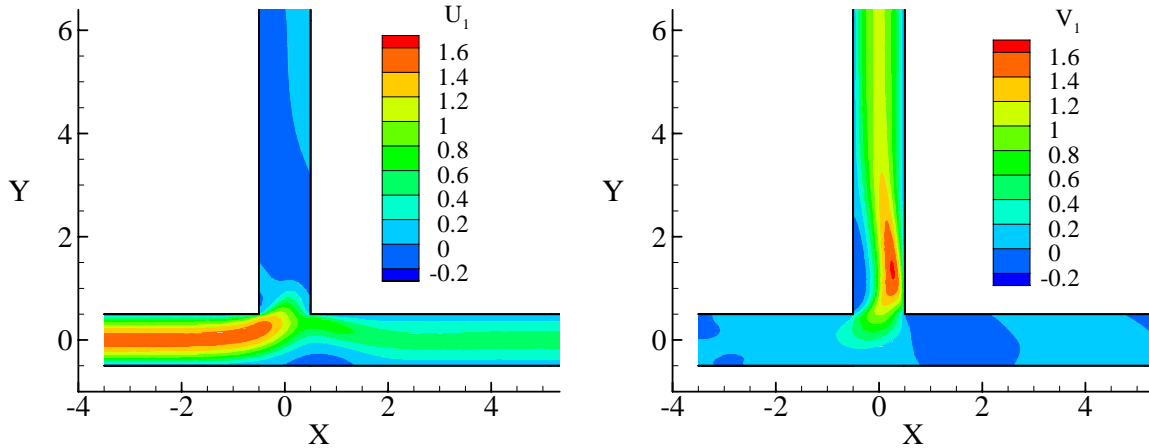


Figura 8. Variação das componentes horizontal e vertical da velocidade na zona da bifurcação $De = 1$.

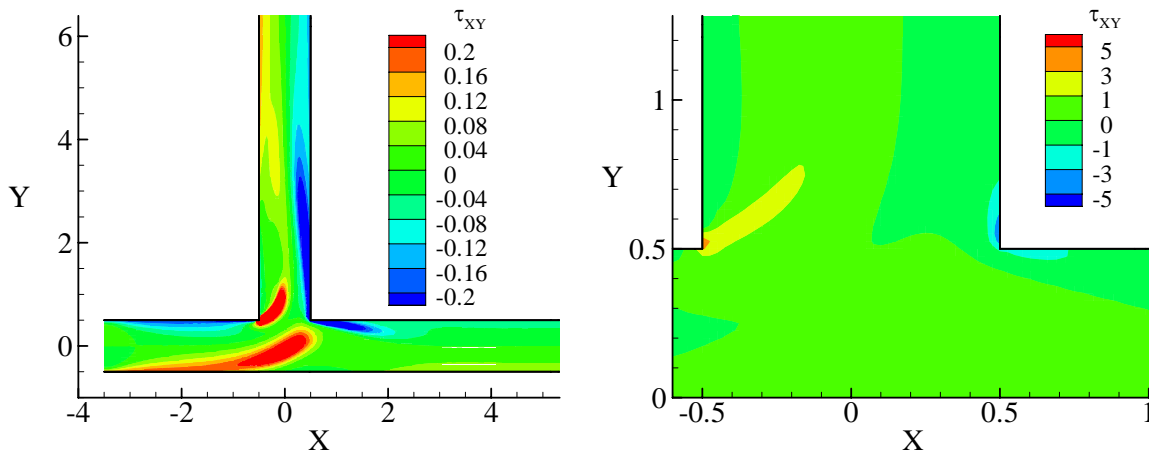


Figura 9. Variação da tensão de corte na zona da bifurcação $De = 1$.

Observa-se da figura 9 que, tal como foi referido na Introdução, dentro das zonas da recirculação as tensões de corte são muito baixas, existindo a possibilidade de se formarem coágulos devido à adesão das plaquetas arrastadas, dos glóbulos vermelhos e dos lipóides, resultando na formação de placas ateróticas e trombos. No detalhe da figura 9 (direita), observa-se também a existência de tensões de corte muito elevadas (em módulo), junto aos cantos reentrantes onde pode ocorrer a danificação do endotélio dos vasos sanguíneos, assim como hemólise com a indesejável libertação de hemoglobina na corrente sanguínea.

6. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos das simulações mostram que a formulação **Tau E** proposta no presente trabalho, utilizando o modelo constitutivo FENE-MCR, é a formulação mais versátil, tanto para escoamentos newtonianos, como para escoamentos não newtonianos viscoelásticos. Com todas as formulações utilizadas, à excepção da formulação **Geral**, foi possível obterem-se resultados independentes do valor do passo no tempo Δt utilizado. A formulação com **Interpolação Linear**, no caso dos escoamentos viscolásticos, apresentou-se bastante versátil; no entanto, para o escoamento newtoniano mostrou-se desadequada por resultar em maiores dificuldades de convergência.

A formulação **Tau E CR** para escoamentos viscoelásticos, apresenta-se menos versátil do que as formulações **Tau E MCR** e com **Interpolação Linear** para valores de *De* mais elevados, pois só converge para um intervalo de valores do passo no tempo pequeno e diminuindo à medida que se aumenta o número de *Débora*. Os resultados obtidos com esta formulação afastam-se ligeiramente dos resultados obtidos com as formulações **Tau E MCR** e com **Interpolação Linear**, embora a variação máxima registada entre as formulações **Tau E MCR** e **Tau E CR**, seja apenas de 0.31% para *De* = 2.5. Com o recurso à inicialização das variáveis com resultados de simulações anteriores, foi possível obter soluções até *De* = 5.6, e neste caso a variação máxima registada entre as formulações **Tau E MCR** e **Tau E CR** é 2.1 % nos valores do comprimento da recirculação vertical (Fig. 7).

À medida que se aumentou o número de *Débora* registou-se a necessidade de diminuir a tolerância para a convergência do processo iterativo, de forma a que os resultados fossem independentes do passo no tempo utilizado, principalmente quando este possuía valores muito baixos. Assim, adoptou-se uma tolerância de 10^{-8} em todas as simulações para se ultrapassar este problema.

Foi confirmada a existência de elevadas tensões de corte junto aos cantos da recirculação assim como a existência de baixas tensões de corte nas zonas da recirculação.

AGRADECIMENTOS

H.M.M. Matos agradece o apoio financeiro concedido pela FCT através da Bolsa de Doutoramento SFRH/BD/18062/2004. M.A. Alves agradece o apoio financeiro concedido pela FCT e FEDER no âmbito do projecto POCI/EQU/59256/2004.

REFERÊNCIAS

- [1] V.S. Neary, F. Sotiropoulos e A.J. Odgaard, “Three-dimensional numerical model of lateral-intake inflows”, *J. Hydr. Engng.* Vol. **125** (Nº 2), pp. 126-140, (1999).
- [2] R.I. Issa e P.J. Oliveira, “Numerical prediction of phase separation in two-phase flow through T-junctions”, *Computers and Fluids*, Vol. **23** (Nº 2), pp. 347-372, (1994).
- [3] Y.C. Fung, *Biomechanics: Circulation*, Springer, 2edn., 1997.
- [4] R.M. Neren, “Vascular fluid mechanics, the arterial wall and atherosclerosis”, *J. Biomechanical Eng.* Vol. **114** (Nº 3), pp. 274-282, (1992).

- [5] C.G. Caro, J.M. Fitz-Gerald e R.C. Schroter, "Atheroma and arterial wall shear observation, Correlation and proposal of a shear dependent mass transfer mechanism for atherogenesis", *Proc. Roy. Soc London Ser.B*, Vol. **177** (Nº **1046**), pp. 109-133, (1971).
- [6] C.K. Zarins, D.P. Gieddens, B.K. Bharadaj, V.S. Sotturai, R.F. Mabon e S. Glagov, "Carotid bifurcation atherosclerosis: Quantitative correlation of plaque localization with flow velocity profiles and wall shear stress", *Circulation Res.* Vol. **53** (Nº **4**), pp. 502-514, (1983).
- [7] D.N. Ku, D.P. Giddens, D.J. Phillips e D.E. Strandness, "Hemodynamics of the normal human carotid bifurcation: in Vitro and in vivo studies", *Ultrasound in Med. & Biol.* Vol. **11**(Nº **1**), pp. 13-26, (1985).
- [8] D.L. Fry "Certain histological and chemical responses of the vascular interface to acutely induced mechanical stress in the aorta of the dog", *Circulation Res.* Vol. **24** (Nº **1**), pp. 93-108, (1969).
- [9] A.I.G.P. Miranda, P.J. Oliveira e F.T. Pinho *Simulação numérica do escoamento de um fluido newtoniano numa bifurcação com vista a aplicações hemodinâmicas. Proc. VI Congresso Nacional de Mecânica Aplicada e Computacional, Vol. 2, Aveiro, 2000*, pp. 1523-1534.
- [10] A.I.G.P. Miranda, *Modelação matemática de escoamentos não estacionários de fluidos complexos com vista a aplicações hemodinâmicas*, Tese de Doutoramento, Universidade da Beira Interior, 2007.
- [11] J.M. Khodadadi, "Wall pressure and shear stress variations in a 90-deg bifurcation during pulsatile laminar flow", *J. Fluids Engng.* Vol. **113**, pp. 111-115, (1991).
- [12] J.M. Khodadadi, N.S. Vlachos, D. Liepsch e S. Moravec, "LDA measurements and numerical prediction of pulsatile laminar flow in a 90-degree bifurcation", *J. Biomechanical Engng.* Vol. **110** (Nº **2**), pp. 129-136, (1988).
- [13] R.S. Salzar, M.J. Thubrikar e R.T. Eppink, "Pressure-induced mechanical stress in the carotid artery bifurcation: a possible correlation to atherosclerosis", *J. Biomech.* Vol. **28** (Nº **11**), pp. 1333-1340, (1995).
- [14] M.J. Thubrikar, S.K. Roskelley e R.T. Eppink, "Study of stress concentration in the walls of the bovine coronary arterial branch", *J. Biomech.* Vol. **23**(Nº **1**), pp. 15-26, (1990).
- [15] S.Z. Zhao, X.Y. Xu e A.D. Hughes, S.A. Thom, A.V. Santon, B. Ariff e Q. Long, "Blood flow and vessel mechanics in a physiologically realistic model of a human carotid arterial bifurcation", *J. Biomech.* Vol. **33**(Nº **8**), pp. 975-984, (2000).
- [16] R.B. Bird, O. Hassager, R.C. Armstrong e C.F. Curtiss, *Dinamics of polymeric liquids: Kinetic theory*, John Wiley & Sons, Vol. II., 1987.
- [17] M.D. Chilcott e J.M. Rallison, "Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres", *J. Non-Newton. Fluid Mech.* Vol. **29**, pp. 381-432, (1988).
- [18] P.J. Coates, R.C. Armstrong e R.A. Brown, "Calculation of steady state viscoelástico flow through axisymmetric contractions with the EEME formulation", *J. Non-Newton. Fluid Mech.* Vol. **42** (Nº **1-2**), pp. 141-188, (1992).

- [19] S.V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere, 1980.
- [20] J.H. Ferziger e M. Peric, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer Verlag, 1996.
- [21] P.J. Oliveira, *Computer modelling of multidimensional multiphase flow and application to T-junctions*, Ph.D Thesis, Imperial Collage, University of London, 1992.
- [22] C.M. Rhie e W.L. Chow, "A numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation", *AIAA J.* Vol. **21** (Nº **11**), pp. 1525-1533, (1983).
- [23] P.J. Oliveira, F.T. Pinho e G.A. Pinto, "Numerical Simulation of non-linear flows with a general collocated finite-volume method", *J. Non-Newton. Fluid Mech.* Vol. **79** (Nº **1**), pp. 1-43, (1998).
- [24] P.J. Oliveira e F.T. Pinho, "Numerical procedure for the computation of fluid flow with arbitrary stress-strain relationships", *Numer. Heat Transf. Part B*, Vol. **35** (Nº **2**), pp. 295-315, (1999).
- [25] M.A. Alves, P.J. Oliveira e F.T. Pinho, "A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. **41** (Nº **1**), pp. 47-75, (2003).
- [26] J.P. Van Doormaal e G.D. Raithby, "Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows", *Numer. Heat Transf.* Vol. **7**, pp. 147-163, (1984).
- [27] L.F. Richardson, "On the approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations with an application to the stresses in a masonry dam", *Proc. Roy. Soc London Ser. A*, Vol. **83** (Nº **563**), pp. 335-336, (1910).