

Instabilidades Puramente Elásticas de Escoamentos Viscoelásticos Através da Junção de Dois Canais Planos

Gerardo N. Rocha*, Robert J. Poole**, Manuel A. Alves*** e Paulo J. Oliveira*

* Unidade de I&D dos Materiais Têxteis e Papeleiros, Departamento de Engenharia Electromecânica
Universidade da Beira Interior
Calçada Fonte do Lameiro – 6201-001 Covilhã
Telf: +351 275 329 925; fax: +351 275 329 972; e-mail: gerardorocha@portugalmail.pt,
pjpo@ubi.pt

** Department of Engineering
University of Liverpool
Brownlow Street, Liverpool, L69 3GH – United Kingdom
Telf: +44 (0)151 794 4806; fax: +44 0151 4944848; e-mail: robpoole@liverpool.ac.uk

*** Departamento de Engenharia Química, CEFT
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Rua Dr. Roberto Frias – 4200-130 Porto
Telf: +351 22 508 1680; fax: +351 22 508 1449; e-mail: mmalves@fe.up.pt

Resumo — Este artigo trata do estudo numérico de um fenómeno de bifurcação matemática que ocorre para escoamento de um fluido viscoelástico numa geometria que consiste na junção de 2 canais planos. O interesse será analisar o comportamento do escoamento na zona do cruzamento dos canais e verificar se a simetria da geometria conduz, como seria intuitivo, a um escoamento também simétrico. Os resultados obtidos demonstram a existência de uma bifurcação, em concordância qualitativa com os resultados experimentais de Arratia *et al.* [1].

1. Introdução

A utilização de códigos numéricos na resolução de problemas de Dinâmica de Fluidos Computacional (ver, por exemplo, Patankar [2] ou Ferziger e Peric [3] como livros de texto básicos) tem tido um crescimento significativo incluindo a simulação de escoamentos viscoelásticos. Estes fluidos têm a particularidade da relação entre tensão e deformação não ser local (no espaço e no tempo) e, muitas vezes, a viscosidade não ser constante (para uma determinada temperatura e pressão), mas variar com a taxa de deformação local [4]. Pelo contrário, no caso de um fluido newtoniano a tensão de corte é directamente proporcional à taxa de deformação local.

O principal interesse deste estudo é analisar os efeitos de elasticidade e extensibilidade das macromoléculas no escoamento que ocorre na zona de cruzamento de dois canais planos e verificar que a simetria da geometria não conduz a um escoamento simétrico e estável. O

escoamento neste tipo de geometria é conhecido pela designação anglo-saxónica de “cross-slot flow”. A motivação surgiu do trabalho experimental publicado por Arratia *et al.* [1], onde é feita a descrição de um novo tipo de instabilidade que está associado a viscoelasticidade para uma geometria deste tipo em forma de cruz +. Os elementos de fluido sofrem, na zona do cruzamento dos canais, um elevado estiramento para baixos valores do número de Reynolds ($<10^2$). Os resultados experimentais mostram que devido a este forte estiramento molecular, que é precedido por compressão, o escoamento fica elasticamente instável e o campo de velocidades torna-se assimétrico. No seguimento desses resultados experimentais surge o trabalho teórico/numérico publicado por Poole *et al.* [5] que provaram que essa instabilidade elástica pode ser prevista com um modelo de extensibilidade infinita (UCM) para um fluido viscoelástico. Os resultados obtidos mostram que o escoamento passa do estado simétrico a assimétrico para números de Deborah superiores a 0.31. No presente trabalho, utilizou-se o método dos volumes finitos e obtiveram-se resultados que permitem uma vez mais constatar que o escoamento viscoelástico num cruzamento de canais plano se torna assimétrico a partir de um certo valor crítico do número de Deborah (De_{cr}). Este fenómeno de assimetria é obtido usando o modelo constitutivo FENE-CR [6], que apresenta viscosidade constante mas extensibilidade limitada, e é previsto em escoamentos a baixo número de Reynolds.

Este artigo está organizado da seguinte forma: na secção 2 apresentam-se as equações que regem o escoamento e o modelo constitutivo utilizado, e descreve-se de forma

sucinta o método numérico utilizado; na secção 3 é feita uma descrição do problema em estudo; e por fim na secção 4 apresentam-se e discutem-se os resultados obtidos.

2. Equações e método numérico

Neste trabalho considera-se o escoamento isotérmico e incompressível de um fluido não newtoniano viscoelástico através do cruzamento de canais planos bidimensional. As equações de governo que regem o escoamento são as equações de conservação da massa,

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

e da quantidade de movimento,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{t}_s + \nabla \cdot \mathbf{t} \quad (2)$$

Nestas equações, ρ , \mathbf{u} e p representam a massa volúmica do fluido (constante), a velocidade e a pressão, respectivamente. O tensor das tensões para o solvente \mathbf{t}_s segue a usual lei de Newton da viscosidade:

$$\mathbf{t}_s = 2\eta_s \mathbf{D} \quad (3)$$

onde η_s é a viscosidade do solvente (constante) e \mathbf{D} é o tensor velocidade de deformação, $\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)/2$. As componentes do tensor das tensões da parte polimérica, \mathbf{t} na Eq. (2), são calculadas a partir de uma equação constitutiva adicional. A equação será do tipo FENE (Bird *et al.* [7]), sendo baseada na teoria cinética para moléculas com extensão elástica finita e não linear. Este modelo é útil porque permite descrever o estiramento que ocorre no polímero e a sua orientação em escoamentos complexos. Assim sendo, será aplicado o modelo proposto por Chilcott e Rallison [6] (FENE-CR), que fizeram uma alteração empírica à equação do modelo FENE original de modo a eliminar a dependência da viscosidade de corte, por forma a descrever um fluido de Boger. Este modelo inclui efeitos de elasticidade e de reofluidificação nas tensões normais do fluido, mas a viscosidade de corte mantém-se constante. A equação tensorial a resolver para o modelo FENE-CR é a seguinte:

$$\mathbf{t} + L^2 \left(\frac{\mathbf{t}}{f(t)} \right) = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (4)$$

podendo a função de extensibilidade $f(t)$ ser reescrita em termos de t da seguinte forma:

$$f(t) = \frac{L^2 + (1/\eta_p) \text{tr}(\mathbf{t})}{L^2 - 3} \quad (5)$$

onde tr é o operador traço, η_p é o tempo de relaxação do fluido, η_p é a viscosidade de corte do polímero (considerado constante) e L^2 é o parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR, que mede os efeitos elongacionais. Na Eq. (4), o símbolo ∇ corresponde à derivada convectiva superior de Oldroyd que é expressa pela seguinte equação:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{t}} = \frac{D\mathbf{t}}{Dt} - \mathbf{t} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{t} \quad (6)$$

Os parâmetros adimensionais utilizados neste trabalho são:

- L^2 – o parâmetro que mede os efeitos elongacionais do modelo FENE-CR;

- $b = \eta_s/\eta_0$ – a razão de viscosidade do solvente, onde $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ (constante);
- $Re = \rho U d / \eta_0$ – o número de Reynolds;
- $De = L U / d$ – o número de Débora.

sendo U a velocidade média nos canais de entrada e d a respectiva largura (ver Fig. 1).

Uma vez apresentadas as equações necessárias para a resolução do problema é preciso um método numérico para resolver as equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que contêm a função incógnita. Neste trabalho será aplicado o método dos volumes finitos. As equações de conservação e constitutiva são discretizadas por integração em volumes de controlo que compõem a malha computacional, ver Fig. 3. O conceito de discretização resume-se a conhecer os valores de uma certa variável num número discreto de pontos. Todas as variáveis são calculadas nos centros dos volumes de controlo e a malha computacional é ortogonal. Além disso, será usado o esquema de alta-resolução CUBISTA [8], de 3ª ordem, para a discretização dos termos convectivos, por forma a obterem-se resultados precisos e que possam ser utilizados futuramente como resultados de referência. Para maiores detalhes sobre este método consultar o trabalho de Oliveira *et al.* [9].

3. Descrição do problema

Uma representação esquemática da geometria é apresentada na Fig. 1. Como foi referido anteriormente este problema é bidimensional e o domínio do escoamento assemelha-se a uma “cruz (+)”, com o fluido a entrar pelos canais planos da direita e da esquerda e a sair pelos canais de cima e de baixo. Assume-se que o escoamento decorre a velocidades muito baixas, ou seja, desprezam-se os efeitos inerciais (i.e. $Re \ll 1$). O interesse do trabalho prende-se com a análise do comportamento do escoamento na zona central da junção dos canais. Os canais de entrada e saída do escoamento têm larguras unitárias (d) e comprimentos $10d$.

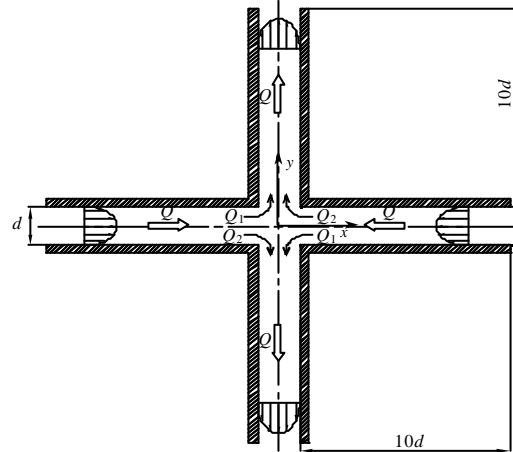


Fig. 1. Configuração esquemática da “cross-slot”.

Como condições de fronteira foi imposto um perfil completamente desenvolvido para todas as variáveis (u , t_{xx} e t_{xy}) nos canais de entrada. Como o fluido utilizado é incompressível, o valor absoluto da pressão é irrelevante, interessando apenas a sua variação ao longo do domínio de cálculo. Na entrada impõe-se pressão igual a zero e o campo de pressão é corrigido em cada iteração, de forma a garantir a equação da continuidade. Nos canais de saída aplicam-se as condições de Neumann para todas as variáveis de cálculo, ou seja, gradientes axiais nulos ($\partial/\partial y = 0$). As restantes condições de fronteira dizem respeito às paredes dos canais onde é imposta a condição de não deslizamento ($u = v = 0$). Para explicações mais detalhadas sobre as condições de fronteira a aplicar no domínio de cálculo devem ser consultados os trabalhos de Oliveira *et al.* [9] e Alves [10].

A malha computacional está dividida em cinco blocos (ver Fig. 2) e as suas principais características geométricas estão apresentadas na Tabela 1.

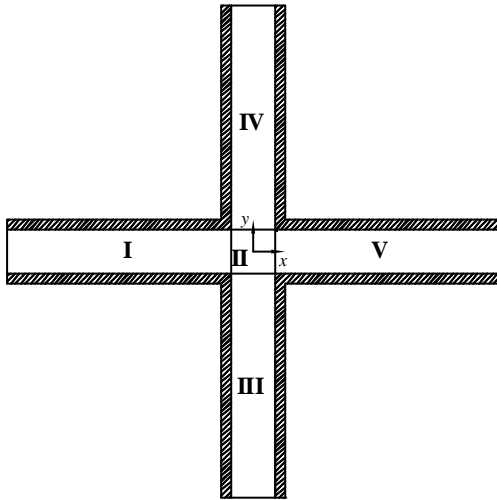


Fig. 2. Representação esquemática, em blocos, da geometria.

A Tabela I contém o número de células para cada bloco, N_x ao longo da direcção x , N_y ao longo da direcção y e o número total de volumes de controlo (NVC) utilizados para descrever a malha computacional.

Tabela I – Características geométricas da malha computacional.

Blocos	N_x	N_y	f_x	f_y
I	50	51	0.929296	1.000000
II	51	51	1.000000	1.000000
III	51	50	1.000000	0.929296
IV	51	50	1.000000	1.075369
V	51	50	1.075369	1.000000
NVC = 12801				

Na Tabela I são também apresentados os factores de expansão ou compressão (f_x e f_y) do espaçamento das células ao longo das direcções x e y . O número de graus de liberdade correspondente à malha computacional é de

76806 e o tamanho mínimo das células na zona da junção dos canais é $dx_{\min} = dy_{\min} = 0.02d$.

Apresenta-se na Fig. 3 a malha computacional utilizada para cobrir o domínio de cálculo, sendo de realçar ser não uniforme ao longo da direcção x e y . Na zona do cruzamento dos canais ($|x/d| \leq 0.5, |y/d| \leq 0.5$) existe uma maior concentração de volumes de controlo, de forma a ser possível resolver com precisão os elevados gradientes de tensão que aí ocorrem.

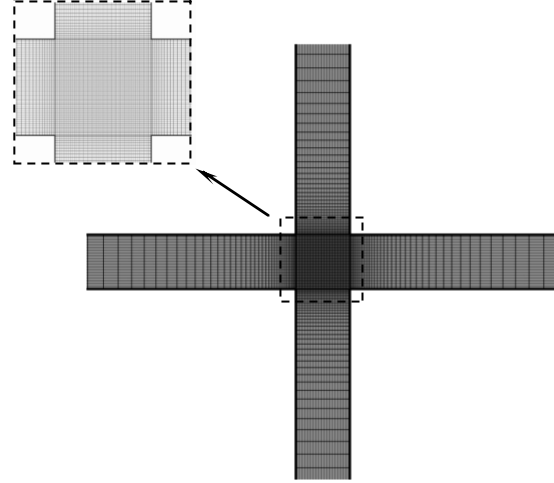


Fig. 3. Detalhe da malha utilizada no cálculo computacional. ($-4 = x/d = 4$; $-4 = y/d = 4$)

4. Resultados e conclusões

Neste estudo definiu-se um parâmetro adimensional $DQ = (Q_2 - Q_1)/Q$ para quantificar o grau de assimetria do escoamento [5]. O fluxo total que escoar em cada um dos canais de entrada é $Q = Q_1 + Q_2 = Ud$, e divide-se em dois fluxos Q_1 e Q_2 na zona do cruzamento, para os canais de cima e de baixo, ver Fig. 1. Assim, no caso do escoamento ser simétrico, tem-se $Q_1 = Q_2$ e $DQ = 0$, enquanto que para o escoamento assimétrico $DQ \neq 0$ podendo atingir ± 1 (no limite – completamente assimétrico). Uma vez que as simulações foram efectuadas para $Re = 0$ (desprezaram-se efeitos de inércia), apenas serão analisados os efeitos devidos à variação da elasticidade (De), da concentração do solvente (β) e do parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR (L^2).

A. Efeitos devido à elasticidade, De

A elasticidade do fluido é uma propriedade que depende das características do material, nomeadamente do seu tempo de relaxação, induzindo efeitos não lineares relacionados com diferenças de tensões normais. Os resultados em termos do parâmetro de assimetria DQ obtidos estão apresentados na Fig. 4, para valores de $L^2 = 100$ e $\beta = 0.1$, variando o número de Déborah.

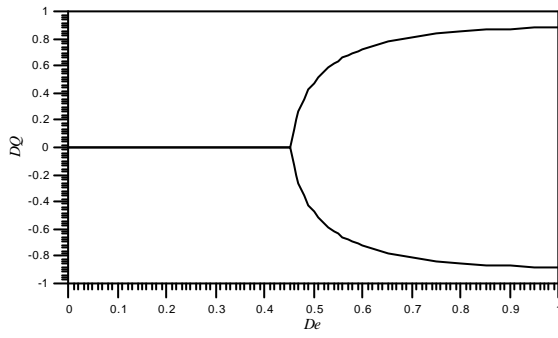


Fig. 4. Efeito da elasticidade (De) na assimetria do escoamento ($Re = 0$; $L^2 = 100$; $\beta = 0.10$).

A Fig. 4 ilustra o comportamento típico duma bifurcação sobre-estável. Para valores de De abaixo do número de Débora crítico ($De_{cr} = 0.46$) o escoamento mantém-se estável e simétrico ($DQ = 0$), enquanto que para valores acima de De_{cr} o escoamento passa a ficar assimétrico mas estacionário, com diferentes taxas de fluxo (DQ) a cruzarem na zona de junção dos canais de entrada e saída. Nesta geometria a elasticidade actua de forma a aumentar a assimetria do escoamento, demonstrando que o fenómeno de bifurcação do escoamento é puramente elástico, uma vez que o efeito de inércia é desprezado ($Re = 0$). Na Fig. 5 apresentam-se as linhas de corrente previstas a De crescentes de forma a se visualizar, com maior detalhe, o fenómeno que ocorre na transição do escoamento simétrico para o assimétrico.

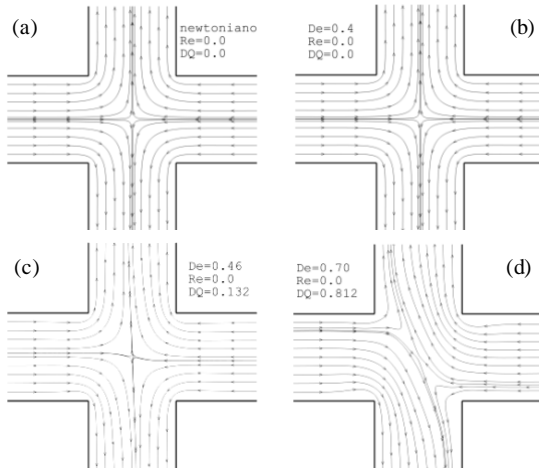


Fig. 5. Evolução das linhas de corrente para o caso: (a) fluido newtoniano, (b) $De = 0.4$, (c) $De = 0.46$ e (d) $De = 0.70$ ($Re = 0$; $L^2 = 100$; $\beta = 0.10$).

A partir das figuras anteriores pode-se concluir que:

- O número de Débora crítico, correspondente à transição entre o estado simétrico e assimétrico do escoamento, é $De_{cr} = 0.46$ ($Re = 0$, $\beta = 0.10$ e $L^2 = 100$);
- À medida que o número de Débora aumenta, acima de De_{cr} , o parâmetro de assimetria (DQ) cresce. Isto pode ser constatado com maior detalhe através da Fig. 4.

B. Efeitos devido à concentração do solvente, β

Este parâmetro adimensional está relacionado com a concentração da solução polimérica, denotando que para valores elevados de β a mistura é diluída. Os resultados obtidos dizem respeito a valores de $\beta = 0.05, 0.10$ e 0.20 , com $Re = 0$ e $L^2 = 100$, em função do número de Débora.

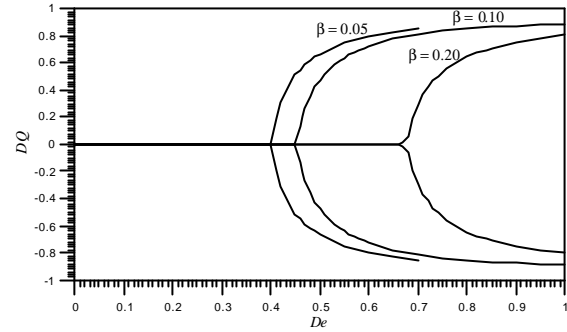


Fig. 6. Efeito da concentração do solvente na assimetria do escoamento para $\beta = 0.05, 0.10$ e 0.20 ($Re = 0$; $L^2 = 100$).

Pode-se concluir com base na Fig. 6, que a diminuição de concentração de polímero na solução tende a retardar o fenómeno de assimetria do escoamento. O valor do parâmetro β determina o número de Débora crítico a partir do qual há a transição do escoamento simétrico para assimétrico. As presentes previsões permitem elaborar o seguinte quadro:

- $\beta = 0.00$: $De_{cr} = 0.31$ ($L^2 = 8$) [5];
- $\beta = 0.05$: $De_{cr} = 0.41$;
- $\beta = 0.10$: $De_{cr} = 0.46$;
- $\beta = 0.20$: $De_{cr} = 0.68$;
- $\beta ? 1.00$: $De_{cr} ? 8$.

Na Fig. 7 são apresentadas as linhas de corrente correspondentes às situações críticas acabadas de referir.

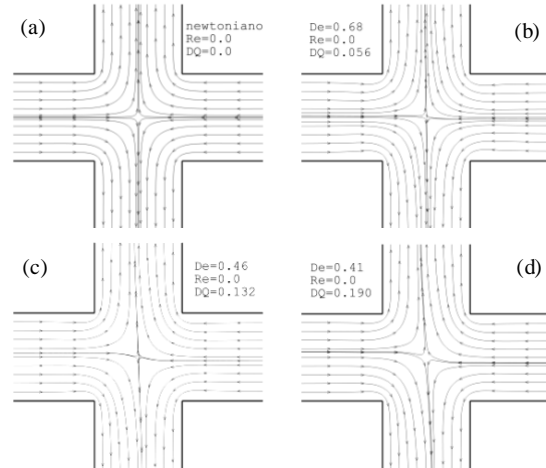


Fig. 7. Linhas de corrente na situação imediatamente pós-crítica em função da concentração: (a) fluido newtoniano, $\beta = 1.0$, (b) $\beta = 0.20$, (c) $\beta = 0.10$ e (d) $\beta = 0.05$. (O caso newtoniano é apresentado como referência).

C. Efeitos devido ao parâmetro de extensibilidade, L^2

O parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR está relacionado com os efeitos elongacionais e é proporcional ao quadrado da razão entre o comprimento das moléculas do polímero quando estão completamente esticadas e o seu comprimento em estado de equilíbrio. Pode-se também salientar que quanto maior for este parâmetro maior será a viscosidade elongacional limite previsto pelo modelo. Na Fig. 8, apresenta-se graficamente os resultados obtidos para $L^2 = 50, 100$ e 200 , em função do número de Débora (com $\beta = 0.10$ e $Re = 0$). Pode-se concluir que o aumento do parâmetro de extensibilidade tende a acentuar o fenómeno de bifurcação do escoamento e a acelerar o ponto crítico para a sua ocorrência. Deste modo, os resultados do diagrama de bifurcação da Fig. 8 demonstram que a causa física geradora da instabilidade decorre não só da presença de viscoelasticidade (uma necessidade), mas também, e sobretudo, das características elongacionais do fluido.

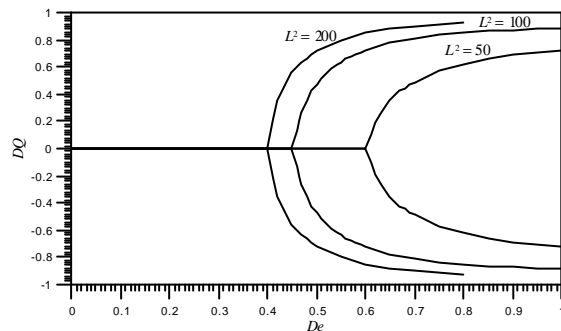


Fig. 8. Efeito do parâmetro de extensibilidade na assimetria do escoamento para $L^2 = 50, 100$ e 200 ($Re = 0; \beta = 0.10$).

Os valores críticos obtidos com a variação do parâmetro de extensibilidade L^2 ($\beta = 0.1$ e $Re = 0$) foram:

- $L^2 = 200$? $De_{cr} = 0.41$;
- $L^2 = 100$? $De_{cr} = 0.46$;
- $L^2 = 50$? $De_{cr} = 0.61$.

As linhas de corrente que representam cada um destes casos estão apresentadas na Fig. 9.

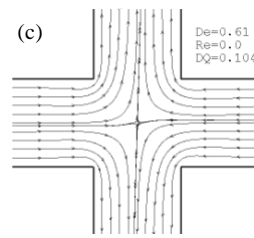
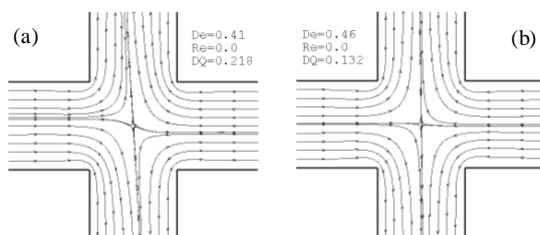


Fig. 9. Linhas de corrente na situação imediatamente pós-crítica em função da extensibilidade: (a) $L^2 = 200$, (b) $L^2 = 100$ e (c) $L^2 = 50$.

Em conclusão, fez-se um estudo numérico relativo ao comportamento de um fluido viscoelástico FENE-CR quando flui através de um cruzamento de canais planos. Uma vez que se desprezou o efeito de inércia, o estado de simetria ou assimetria do escoamento fica controlado unicamente pela viscoelasticidade do fluido. Apresentaram-se resultados dos efeitos do parâmetro de extensibilidade L^2 e da concentração do solvente β em função de De . Pode-se concluir que a transição em cada um dos casos analisados é função apenas de características puramente elásticas e os resultados obtidos permitem prever o ponto de transição.

Agradecimentos

Agradece-se o apoio financeiro prestado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), através da bolsa de doutoramento SFRH/BD/22644/2005 (G.N. Rocha) e dos projectos POCI/EQU/59256/2004 e PTDC/EMEMFE/70186/2006.

Referências

- [1] P.E. Arratia, C.C. Thomas, J.D. Diorio e J.P. Gollub, "Elastic instabilities of polymer solutions in extensional flows," *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 14, pp. 144502-1 – 144502-4, April 2006.
- [2] S.V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC (1980).
- [3] J.H. Ferziger e M. Perić, Computational Methods for Fluid Dynamics – 3ª Edição, Springer-Verlag, Berlin (2002).
- [4] R.B. Bird, R.C. Armstrong, e O. Hassager, Dynamics of Polymeric Liquids: Vol. 1: Fluid Dynamics, John Wiley & Sons, New York (1977).
- [5] R.J. Poole, M.A. Alves e P.J. Oliveira, "Purely-elastic flow asymmetries" *Physical Review Letters*, Vol. , No. , pp. , 2007, em publicação.
- [6] M.D. Chilcott e J.M. Rallison, "Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres," *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 29, pp. 381-432, 1988.
- [7] R.B. Bird, C.F. Curtiss, R.C. Armstrong e O. Hassager, Dynamics of Polymeric Liquids: Vol 2: Kinetic Theory. – 2ª Edição, John Wiley & Sons, New York (1987).
- [8] 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. Mech. Fluids*, Vol. 41, pp. 47-75, 2003.
- [9] P.J. Oliveira, F.T. Pinho e G.A. Pinto, "Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite volume method", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 79, pp. 1-43, 1998.
- [10] M.A. Alves, "Escoamentos de fluidos viscoelásticos em regime laminar: análise numérica, teórica e experimental", *Tese de Doutoramento*, FEUP, Porto, 2004.