

AVANÇOS EM REOLOGIA COMPUTACIONAL COM O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Paulo J. Oliveira

Departamento de Engenharia Electromecânica
Universidade da Beira Interior
6201-001 Covilhã, Portugal
e-mail: pjpo@ubi.pt

Palavras chave: Reologia computacional; Fluidos viscoelásticos; Método do Volumes Finitos.

Resumo.

A reologia computacional é uma disciplina relativamente recente na qual se procura resolver com base em métodos numéricos as equações de conservação e reológicas que regem o movimento de fluidos não newtonianos. Um aspecto novo relativamente à mais tradicional dinâmica dos fluidos computacional (CFD) é que, para os fluidos não newtonianos, não existe em geral uma única equação constitutiva que caracterize universalmente o comportamento material de todos os fluidos em todos os escoamentos. Nesta lição serão apresentados alguns avanços efectuados pelo autor e colegas durante os últimos anos na "arte" da resolução numérica, através do método dos volumes finitos, das equações que governam o escoamento de líquidos não newtonianos. Dar-se-á sobretudo ênfase ao caso em que esses líquidos apresentam características de viscoelasticidade, ou seja misturando propriedades típicas de líquidos viscosos com outras típicas de sólidos elásticos. A lição aborda não só aspectos relacionados com os métodos numéricos em si, mas também com a discussão de resultados que possam ter interesse para a audiência.

1. INTRODUÇÃO

Ao contrário da ideia comum enraizada na mente de um aluno que se inicia na aprendizagem da Mecânica dos Fluidos, acontece que a maior parte dos fluidos com que se depara na prática um engenheiro mecânico possui características não newtonianas. De forma simplista, podemos dizer que qualquer fluido composto por moléculas relativamente simples (monómeros, como O_2 , N_2 , H_2O , etc.) irá ser bem descrito pela equação tensão--deformação newtoniana, como é o caso do ar ou da água; mas, fluidos com moléculas complexas (moléculas com uma certa extensão e estrutura, por ex. os polímeros) não seguem tal equação e apresentam comportamentos em escoamento mais complicados, sendo designados como fluidos não newtonianos.

Assim na hidrodinâmica, por exemplo no estudo do movimento de navios ou submarinos, e na aerodinâmica, fabrico de aviões ou foguetões, a mecânica dos fluidos newtonianos é perfeitamente adequada e, deve dizer-se, abrange um leque muito vasto de situações diversas e de grande complexidade teórica (basta pensar no fenómeno da turbulência, o “último aspecto não resolvido da mecânica dos fluidos”). No entanto o fabrico e concepção de aeronaves ou automóveis não é ainda comum em Portugal, onde o comum para um engenheiro mecânico é lidar com processos de produção ou de transformação de produtos, como tintas, óleos, vernizes, colas, massas alimentares, iogurtes, cosméticos, pastas, emulsões ou suspensões diversas, etc. No campo da engenharia biomecânica, quando se trata de aplicar conhecimentos de engenharia ou de física ao entendimento do funcionamento de um ser vivo, os fluidos que aparecem são o sangue, a saliva, mucos e outros fluidos biológicos. Em todos estes casos o comportamento do fluido não é descrito adequadamente pela equação newtoniana que relaciona localmente as tensões \mathbf{t} com as taxas de deformação \mathbf{D} :

$$\mathbf{t} = 2\boldsymbol{\mu}\mathbf{D} - \frac{2}{3}\boldsymbol{\mu}(\tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} = \boldsymbol{\mu}(\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}^T) - \frac{2}{3}\boldsymbol{\mu}(\tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \quad (1)$$

sendo o coeficiente de proporcionalidade $\boldsymbol{\mu}$ a viscosidade, que não depende das quantidades cinemáticas (a velocidade \mathbf{u} , ou o gradiente de velocidades $\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}$; o índice T designa o tensor transposto).

Uma primeira característica bastante importante do ponto de vista da engenharia que surge desde logo nestes fluidos ditos “não newtonianos” é que a “viscosidade” já não é constante, mas passa a ser uma função do próprio estado de deformação ou de tensão a que um elemento de fluido está sujeito. Este tipo de fluidos é designado com “fluido newtoniano generalizado” (GNF, do inglês), constituindo a primeira generalização da mecânica de fluidos clássica para a mecânica dos fluidos não newtonianos. Nesta situação a equação constitutiva continua a ser semelhante à anterior (o termo em $\tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{u}$ é negligenciado):

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{h}(\dot{\mathbf{g}})(\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}^T) \quad (2)$$

mas onde a viscosidade $\boldsymbol{h}(\dot{\mathbf{g}})$ é agora uma função da taxa de deformação $\dot{\mathbf{g}}$ (esta é igual ao

segundo invariante do tensor \mathbf{D}). Existem muitos modelos empíricos que fornecem relações matemáticas entre \mathbf{h} e \mathbf{g} mas que só são válidos para determinados fluidos ou em determinadas gamas de aplicação; um dos mais comuns é o modelo de lei-de-potência (com constantes K e n):

$$\mathbf{h}(\mathbf{g}) = K \mathbf{g}^{n-1} \quad (3)$$

que permite representar o efeito de reofuidificação (*shear-thinning*, no inglês) tão comum nos materiais de uso diário (por exemplo, a manteiga espalha-se mais facilmente quando a deformação imposta pela faca aumenta). Basta que o índice n seja menor do que 1 para que a viscosidade de corte \mathbf{h} diminua com o aumento da taxa de deformação \mathbf{g} . É claro que um método numérico concebido para resolver a equação constitutiva newtoniana (Eq. 1) também poderá facilmente, em princípio, resolver a equação constitutiva do fluido GNF (Eq. 2), bastando tomar em conta a variação local da viscosidade segundo o modelo empírico desejado. Portanto a simulação deste tipo de fluidos não oferece dificuldades acrescidas relativamente ao fluido newtoniano mas é de assinalar desde logo o facto da equação do movimento passar a ser não linear nas velocidades, mesmo para números de Reynolds nulos.

No entanto os materiais não newtonianos apresentam uma outra característica que vai tornar a simulação do seu movimento consideravelmente mais complicada e também, por consequência, o seu comportamento físico consideravelmente mais interessante: além de serem viscosos, como qualquer outro fluido newtoniano, têm características elásticas, típicas de um material sólido. É fácil retirarmos as implicações desta situação considerando um modelo mecânico muito simples: filamento material a comportar-se como uma mola (comportamento elástico) e como um amortecedor (comportamento viscoso) colocados em série. A equação para a tensão da mola elástica é $G\mathbf{g}_1 = \mathbf{t}$ (G é a constante de rigidez da mola e \mathbf{g} a deformação) e para o amortecedor $m\mathbf{g}_2 = \mathbf{t}$; como a tensão nos dois ramos em paralelo tem de ser somada chegamos à equação $\mathbf{t} + I \dot{\mathbf{t}} = m\mathbf{g}$ (onde $\mathbf{g} = \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2$, $\mathbf{t} = \partial \mathbf{t} / \partial t$, e $I = m/G$ é um tempo de relaxação). Esta é a equação de estado para um meio viscoelástico linear, válida para pequenos deslocamentos. Em geral, a equação que representa as características de um material não pode depender de movimentos do sistema de coordenadas usado como referencial, o que matematicamente implica a seguinte generalização descoberta por Oldroyd (1958):

$$\mathbf{t} + I \overset{\nabla}{\mathbf{t}} = 2\mathbf{h}\mathbf{D} \quad (4)$$

com I sendo o tempo de relaxação, $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}^T)$ o tensor da taxa de deformação, η um coeficiente de viscosidade de corte e o índice ∇ designa uma derivada especial (derivada convectiva de Oldroyd [18]) que garante a “objectividade”:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{t}} = D\mathbf{t} / Dt - \{ \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u} \cdot \mathbf{t} + \mathbf{t} \cdot \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}^T \} \quad (\text{com: } Dt / Dt = \partial \mathbf{t} / \partial t + \mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{N}} \mathbf{t}) \quad (5)$$

Qualquer das equações constitutivas de tipo diferencial aqui utilizadas pode ser vista como correspondendo a pequenas modificações da Eq. (4). Esta é assim a equação material a ser resolvida conjuntamente com as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, que regem o movimento do meio contínuo, ficando bem patente o grau de dificuldade relativamente ao caso newtoniano:

- O cálculo do tensor das tensões \mathbf{t} requer a resolução de equações diferenciais às derivadas parciais para cada um dos seus componentes;
- O estado de tensão num ponto já não depende só do estado de deformação local: a “convecção” de tensões é agora relevante, introduzindo um efeito de “memória” na evolução das mesmas;
- Já não é possível substituir \mathbf{t} na equação da quantidade de movimento para se obter uma equação final explícita para o campo de velocidades (como a equação de Navier-Stokes);
- As equações para as tensões são hiperbólicas, enquanto que as equações de conservação da quantidade de movimento são parabólicas ou elípticas (problema estacionário).

O facto de ser necessário resolver equações diferenciais para as tensões, num problema envolvendo o movimento de fluidos não newtonianos viscoelásticos, indicia alguma semelhança com problemas de escoamento turbulento de fluidos newtonianos, onde surgem equações diferenciais de transporte para as tensões turbulentas. Essa semelhança de forma, e também em alguns pormenores, foi já apontada por alguns autores, mas deve ser referido em contraponto que as equações que surgem nos modelos de “transporte das tensões de Reynolds” contêm termos de tipo difusivo, fazendo com que o sistema deixe de ter carácter puramente hiperbólico. Como iremos ver, o facto das equações constitutivas serem hiperbólicas não acarreta implicações de monta do ponto de vista do método de resolução, mas tem consequências importantes do ponto de vista da representação dos termos “convectivos” presentes nas equações constitutivas.

Nesta apresentação iremos lidar com métodos desenvolvidos pelo autor e colegas com vista à resolução de problemas de escoamento de líquidos não newtonianos viscoelásticos. A classe de métodos em causa segue a formulação dos volumes finitos para a discretização espacial (FVM=“*Finite Volume Method*”), utilizando malhas computacionais genéricas (podendo ser não ortogonais para se adaptarem a curvaturas impostas pelas fronteiras do domínio) mas estruturadas,

com um arranjo colocado dos campos variáveis (todas as variáveis dependentes são calculadas no centro dos volumes de controlo que compõem a malha), e com um algoritmo de solução do tipo de “correção-de-pressão”. Desta forma os métodos reflectem a origem do autor, em termos de investigação, que se iniciou na Dinâmica de Fluidos Computacional clássica (CFD) tendo posteriormente vindo a situar-se na área da Reologia Computacional, o tema desta apresentação.

2. EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO E MODELOS REOLÓGICOS

Em geral qualquer problema de mecânica de fluidos requer satisfação das equações de conservação de massa:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{N}} \cdot (\mathbf{r}\mathbf{u}) = 0 \quad (6)$$

e de quantidade de movimento:

$$\left(\frac{\partial (\mathbf{r}\mathbf{u})}{\partial t} + \tilde{\mathbf{N}} \cdot (\mathbf{r}\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\tilde{\mathbf{N}}p + \tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{t}_s + \tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{t} \quad (7)$$

Nos problemas aqui considerados a massa volúmica \mathbf{r} é constante e não são tomados em conta efeitos de compressibilidade; no entanto, do ponto de vista do método numérico não há diferenças em tratar o caso de um fluido em que \mathbf{r} varie com a temperatura, por exemplo, pelo que preferimos deixar doravante as equações inalteradas, excepto a Eq. (6) onde o termo $\partial \mathbf{r} / \partial t$ é anulado. O fluido em consideração irá ser uma mistura de um solvente e um soluto polimérico. O solvente é assumido como newtoniano com tensões dadas por uma equação igual à Eq. (1), $\mathbf{t}_s = 2\mathbf{h}_s \mathbf{D}$. O tensor das tensões adicionais \mathbf{t} (tensões “elásticas” ou “poliméricas”) na Eq. (7) é obtido através de uma equação constitutiva com uma forma semelhante à Eq. (4), com a parte da derivada de Oldroyd (entre chavetas na Eq. 5) escrita no membro da direita:

$$\mathbf{t} + \mathbf{I}_{eq} \left(\frac{\partial \mathbf{t}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{N}} \cdot (\mathbf{u}\mathbf{t}) \right) = \mathbf{h}_{p,eq} (\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}^T) + \mathbf{I}_{eq} (\mathbf{t} \cdot \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{u}^T \cdot \mathbf{t}) \quad (8)$$

onde \mathbf{I}_{eq} e $\mathbf{h}_{p,eq}$ são o tempo de relaxação e o coeficiente de viscosidade polimérica equivalentes, definidos como $\mathbf{I}_{eq} \equiv \mathbf{I} / f(\mathbf{t})$ e $\mathbf{h}_{p,eq} \equiv \mathbf{h}_p / f(\mathbf{t})$, onde $f(\mathbf{t})$ é uma função de invariantes de \mathbf{t} que deverá ser especificada para cada modelo considerado. No modelo de Phan-Thien e Tanner (PTT, [16]), por exemplo, $f(\mathbf{t})$ toma as formas:

$$f(t) = 1 + e \frac{I}{h_p} tr(t) \quad (\text{PTT linear}) \quad (9)$$

ou

$$f(t) = \exp \left(e \frac{I}{h_p} tr(t) \right) \quad (\text{PTT exponencial}) \quad (10)$$

Nestas expressões, e é um parâmetro do modelo relacionado com as suas propriedades extensionais: quando um filamento de fluido é estirado axialmente, a oposição ao estiramento é tanto maior quanto menor for e . Por outras palavras, um e maior corresponde a um fluido com uma viscosidade elongacional menor. A compreensão deste tipo de características requer um estudo mais alargado, que extravasa o âmbito desta apresentação, na qual o interesse está mais directamente relacionado com os métodos numéricos desenvolvidos para resolver as equações constitutivas viscoelásticas típicas. A única ideia a ser retida do que foi dito é que uma solução numérica é mais facilmente conseguida quando os fluidos apresentam um e maior (mas $e < 1$).

Este modelo concebido em 1977 por Phan-Thien e Tanner [16] a partir da teoria de redes (*network theory*) tem sido muito utilizado para representar o comportamento de polímeros fundidos, por exemplo o poliestireno ou o polietileno a temperaturas elevadas (cerca de 200 C), e nestes casos a contribuição de uma viscosidade de “solvente” h_s é muito pequena, podendo ser ignorada. Obviamente em escoamentos de polímeros fundidos não existe nenhum solvente e h_s deve ser interpretado como um coeficiente resultante de um modo com tempo de relaxação muito pequeno. No modelo original existe um termo adicional proveniente de uma derivada convectiva “inferior” de Oldroyd, quando se define a Eq. (5), e que resulta num termo $-\mathbf{x} \mathbf{I}_{eq}(\mathbf{t} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{t})$ a ser acrescentado ao membro da direita da Eq. (8). Fazendo $\mathbf{x} = 0$ este termo anula-se, uma simplificação invocada amíude. Por limitações de ordem física \mathbf{x} deve ser limitado (tipicamente $\mathbf{x} \leq 0.2$) e assim a contribuição deste termo adicional é pequena, sendo somente importante em situações nas quais é necessário existir uma segunda diferença de tensões normais, isto é $N_2 \neq 0$, por exemplo para que ocorra um escoamento secundário numa conduta de secção rectangular.

Existem outros modelos reológicos cuja fundamentação está baseada em teorias cinéticas, deduzidas a partir de considerações relativas à microestrutura do fluido, que acabam por poder ser escritos sob uma forma análoga aquela dada pela Eq. (8). No caso do modelo FENE-CR (de Chilcott e Rallison, 1988) tem-se para a função $f(t)$ que divide o tempo de relaxação:

$$f(\mathbf{t}) = \frac{L^2 + \frac{\mathbf{I}}{h_p} \text{tr}(\mathbf{t})}{L^2 - 3} \quad (11)$$

enquanto que a função $f(\mathbf{t})$ que divide a viscosidade h_p fica unitária. Na Eq. (11) o parâmetro L^2 do modelo representa a extensibilidade adimensional das moléculas (máximo comprimento possível a dividir pelo comprimento em equilíbrio). Este modelo tipo “FENE” (“*Finite Extensible Nonlinear Elastic*”) reduz-se à conhecida equação de Oldroyd-B [18] quando L^2 tende para infinito, deduzida por Oldroyd a partir de considerações relacionadas puramente com a mecânica dos meios contínuos (sem qualquer justificação de ordem “molecular”). Quando vista segundo a teoria cinética, a equação de Oldroyd-B representa o movimento de estruturas esfera/mola (“dumbbell”) quando a mola segue a lei de Hooke (elasticidade linear e extensibilidade ilimitada), e escreve-se:

$$\mathbf{t} + \mathbf{I} \left(\frac{\partial \mathbf{t}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{N}} \cdot (\mathbf{u} \mathbf{t}) \right) = h_p (\tilde{\mathbf{N}} \mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}} \mathbf{u}^T) + \mathbf{I} (\mathbf{t} \cdot \tilde{\mathbf{N}} \mathbf{u} + \tilde{\mathbf{N}} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{t}) \quad (12)$$

com \mathbf{I} e h_p constantes. Adicionalmente, se a viscosidade do solvente for considerada nula, $h_s = 0$, o que equivale a dizer que não há tensões newtonianas devidas a um solvente ($\mathbf{t}_s = 0$ na Eq. 7), obtém-se a equação constitutiva de Maxwell (fluido tipo UCM).

Para terminar esta secção tem interesse referir o modelo reológico desenvolvido por Giesekus [17], também baseado em considerações moleculares com sistemas esfera/mola em que a mola segue a lei de Hooke, mas onde foi introduzido um efeito de não isotropia na definição da força de arrastamento sobre as esferas. Este modelo resulta numa equação com forma ainda análoga às anteriores contendo um termo adicional:

$$\mathbf{t} + \mathbf{I} \left(\frac{\nabla}{\mathbf{t}} + \frac{\mathbf{a}}{h_p} \mathbf{t} \cdot \mathbf{t} \right) = 2h_p \mathbf{D} \quad (13)$$

Se $\mathbf{a} \neq 0$ (e $0 \leq \mathbf{a} \leq 2$) este modelo conduz a um N_2 diferente de zero, de forma semelhante à que acontecia com o PTT se $\mathbf{x} \neq 0$, como explicado acima.

3. MÉTODO DE RESOLUÇÃO – VOLUMES FINITOS

As equações de governo são discretizadas por integração em volumes de controlo que formam a malha computacional, o que resulta em equações algébricas que reflectem a conservação de massa

e de quantidade de movimento, e o transporte de tensões [5;1-3]. A equação da continuidade fica:

$$\sum_f F_f = 0 \quad (14)$$

onde F_f representa os fluxos mássicos que saiem da célula em questão através da sua face f (f varia de 1 a 6, no caso genérico tridimensional). A forma linearizada da equação algébrica correspondente à conservação da quantidade de movimento é:

$$a_p \mathbf{u}_p = \sum_F a_F \mathbf{u}_F + S(\tilde{N}p) + S_{HRS}(\mathbf{u}) + S(\mathbf{t}) + S(\mathbf{u}_p^n) \quad (15)$$

onde a_F e a_p são coeficientes (incluem efeitos convectivos e difusivos), e os termos fonte S no segundo membro representam, sucessivamente, o efeito devido ao esquema de alta resolução (HRS ="High Resolution Scheme", [10]), o efeito do termo devido às tensões elásticas, e o termo de inércia resultante da variação temporal da quantidade de movimento. Neste trabalho procurou-se obter soluções precisas na evolução temporal, pelo que este último termo irá conter contribuições resultantes da discretização mais cuidada de $\partial \mathbf{u} / \partial t$.

A equação constituinte discretizada vai ter uma forma análoga à da equação da quantidade de movimento, isto é:

$$a_p^t \mathbf{t}_p = \sum_F a_F^t \mathbf{t}_F + S_{HRS}^t(\mathbf{t}) + S^t(\mathbf{t}, \tilde{N}\mathbf{u}) + S^t(\mathbf{t}_p^n) \quad (16)$$

onde os coeficientes incorporam somente efeitos convectivos, e um dos termos fonte contém a parte da derivada de Oldroyd constituído por produtos de tensões por gradientes de velocidade (vide Eq. 5), assim como o termo em \mathbf{D} .

Nestas equações todas as variáveis são calculadas nos centros dos volumes de controlo (células) e a malha computacional é não ortogonal. Os sistemas de equações lineares, como Eqs. (15) e (16), são posteriormente resolvidos pelo método dos gradientes conjugados. A discretização é feita com métodos de segunda ordem. Genericamente isto é conseguido utilizando interpolação linear, regras de integração segundo o esquema do ponto médio, e aproximação dos termos convectivos com um esquema de alta resolução denominado CUBISTA [10]. Segundo este esquema, um valor na face de um volume de controlo é dado por [1]:

$$\tilde{f}_f = \text{Max} \left\{ \tilde{f}_p, \text{Min} \left[\frac{7}{4} \tilde{f}_p, \frac{3}{8} + \frac{3}{4} \tilde{f}_p, \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \tilde{f}_p \right] \right\} \quad (17)$$

onde onde \tilde{f} denota o valor normalizado de uma variável genérica (f pode ser uma componente

da velocidade u_i ou da tensão t_{ij}). A normalização introduz nas equações discretizadas a propriedade de “transporte” ao tomar em conta a direcção local do campo de velocidades no ponto f da face, sendo definida como $\tilde{\mathbf{f}} = (\mathbf{f} - \mathbf{f}_U)/(\mathbf{f}_D - \mathbf{f}_U)$; nesta equação \mathbf{f}_U e \mathbf{f}_D são os valores nos nós situados em “upwind” e “downwind”, respectivamente, do nó P em causa. Por fim, o esquema de discretização temporal é dado por:

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} \approx \frac{(1 + \mathbf{k})\mathbf{f}^{n+1} - (1 + 2\mathbf{k})\mathbf{f}^n + \mathbf{k}\mathbf{f}^{n-1}}{\mathbf{dt}} \quad (18)$$

onde se toma $\mathbf{k} = 1/2$ (esquema regressivo de segunda ordem no tempo) e onde o índice n representa o nível temporal.

O algoritmo numérico de solução, descrito com mais detalhe na Ref. [1], consiste em resolver sucessivamente, partindo de um campo de variáveis dependentes existente \mathbf{u}^* e \mathbf{t}^* (no início de cada passo no tempo, tem-se $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n$ e $\mathbf{t}^* = \mathbf{t}^n$):

(i) uma equação de conservação da quantidade de movimento:

$$a_P \mathbf{u}_P^{**} = \sum_F a_F \mathbf{u}_F^{**} - \tilde{\mathbf{N}} p^* + S_{HRS}(\mathbf{u}^*) + S(\mathbf{t}^*) + \frac{\mathbf{r}V}{\mathbf{dt}} \{ (1 + 2\mathbf{k})\mathbf{u}_P^n - \mathbf{k}\mathbf{u}_P^{n-1} \} \quad (19)$$

de forma a se obter uma velocidade intermédia \mathbf{u}^{**} ;

(ii) uma equação para a correcção de pressão:

$$\tilde{\mathbf{N}} \cdot \mathbf{u}^{**} = \tilde{\mathbf{N}} \cdot \left(\frac{1}{(1 + \mathbf{k}) \frac{\mathbf{r}V}{\mathbf{dt}}} \tilde{\mathbf{N}} p' \right) \quad (20)$$

de forma a se obter essa correcção p' .

De seguida, tanto a pressão como a velocidade são corrigidas explicitamente através das fórmulas:

$$p^{n+1} = p^* + p' \quad (21)$$

e

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^{**} - \left(\frac{1}{(1+\mathbf{k}) \frac{\mathbf{r}V}{dt}} \right) \tilde{\mathbf{N}}_p, \quad (22)$$

obtendo-se a pressão e velocidade correspondentes ao nível de tempo seguinte $n+1$.

Nesta altura encontra-se resolvida a primeira parte do algoritmo, que consistiu na obtenção de campos de velocidade e de pressão, tais que, seja simultaneamente satisfeita uma equação aproximada para a quantidade de movimento, e a equação da conservação de massa. Na segunda parte do algoritmo a equação constitutiva para a tensão é avançada implicitamente no tempo:

$$a_p^t \mathbf{t}_p^{n+1} = \sum_F a_F^t \mathbf{t}_F^{n+1} + S_{HRS}^t(\mathbf{t}^*) + S^t(\mathbf{t}^*, \tilde{\mathbf{N}} \mathbf{u}^{n+1}) + \frac{IV}{f(\mathbf{t}^*) dt} \{(1+2\mathbf{k}) \mathbf{t}_p^n - \mathbf{k} \mathbf{t}^{n-1}\} \quad (23)$$

resultando num novo campo de tensões \mathbf{t}^{n+1} .

Uma vez que a equação da quantidade de movimento é somente aproximada, devido ao problema linear da interligação velocidade/pressão, e como temos também a questão das velocidades dependerem das tensões, e as tensões das velocidades, torna-se necessário iterar o processo descrito anteriormente. A iteração é prosseguida, dentro de cada passo no tempo, até que as equações sejam satisfeitas com uma tolerância normalizada de 1% a 0.01%.

4. RESULTADOS

Os resultados apresentados correspondem a escoamentos fundamentais que englobam os seguintes casos e geometrias:

- Escoamento tipo “slip/stick” para modelos reológicos UCM [5] e Giesekus [9] (escoamento de entrada num canal plano).
- Escoamentos em contracções planas bidimensionais, com razões de contracção de 4 para 1; os modelos reológicos foram o UCM e o Oldroyd-B; foram testados vários esquemas de discretização espacial para os termos convectivos: “upwind”, “upwind linear” e “CUBISTA” [6,12,14].
- Escoamento em torno de cilindros livres e confinados, para números de Reynolds nulos e moderados, com vista à previsão de instabilidades elásticas e do efeito da viscoelasticidade sobre o desprendimento de vórtices de Karman [1,8,13].
- Escoamentos em expansões planas, para razões de expansão de 1:3 e de 1:4, com fluidos viscoelásticos sem reofluidificação na viscosidade de corte (modelo FENE-CR); efeito da viscoelasticidade sobre a bifurcação do escoamento quando o número de Reynolds é aumentado [11,15].

AGRADECIMENTOS

Este trabalho não teria sido conseguido sem a continuada e prestimosa colaboração de F.T. Pinho, M.A. Alves, G.N. Rocha e A.I.P. Miranda, a quem o autor deseja exprimir aqui por escrito a sua elevada apreciação.

REFERENCIAS

- [1] P.J. Oliveira, "Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: Vortex shedding behind cylinder", *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **101**, 113-137 (2001).
- [2] G. Monpean, M. Deville, "Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction", *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **72**, 253-279 (1997).
- [3] S.C. Xue, N. Phan-Thien, R.I. Tanner, "Fully three-dimensional, time-dependent numerical simulations of Newtonian and viscoelastic swirling flows in a confined cylinder. Part I. Method and steady flows", *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **87**, 337-367 (1999).
- [4] M.D. Chilcott, J.M. Rallison, "Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres", *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **29**, 381-432 (1988).
- [5] 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.*, **79**, 1-43 (1998).
- [6] M.A. Alves, F.T. Pinho e P.J. Oliveira, "Effect of a High-Resolution Differencing Scheme on Finite-Volume Predictions of Viscoelastic Flows", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **93**, 287-314 (2000).
- [7] P.J. Oliveira (2000), "A Traceless Stress Tensor Formulation for Viscoelastic Fluid Flow", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **95**, 55-65 (2000).
- [8] M.A. Alves, F.T. Pinho, P.J. Oliveira, "The Flow of Viscoelastic Fluids Past a Cylinder: Finite-Volume High-Resolution Methods", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **97**, 207-232 (2001).
- [9] P. J. Oliveira, "On the Numerical Implementation of Non-Linear Viscoelastic Models in a Finite-Volume Method", *Numer. Heat Transf. B*, **40**, 283-301 (2001).
- [10] M.A. Alves, P.J. Oliveira e F.T. Pinho, "A Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection", *Int. J. Num. Methods in Fluids*, **41**, 47-75 (2003).
- [11] P.J. Oliveira, "Asymmetric Flows of Viscoelastic Fluids in Symmetric Planar Expansion Geometries", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **114**, 33-63 (2003).
- [12] M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, "On the Effect of Contraction Ratio in Viscoelastic Flow Through Abrupt Contractions", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **122**, 117-130 (2004).
- [13] P.J. Oliveira, A.I.P. Miranda, "A Numerical Study of Steady and Unsteady Viscoelastic Flow Past Bounded Cylinders", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **127**, 51-66(2005).

- [14] M.A. Alves, F.T. Pinho, P.J. Oliveira (2005), "Visualizations of Boger Fluid Flows in a 4:1 Square/Square Contraction", *A.I.Ch.E. J.*, in press, (2005).
- [15] G.N. Rocha, P.J. Oliveira, "Viscoelastic Flows in 1-to-4 Sudden Expansions", *IBEREO'04 Encontro Ibérico de Reologia*, "Progress in Rheology of Biological and Synthetic Polymer Systems", Ed. AC Diogo et al., Inst. Politéc. de Beja, pp. 403-408 (2004).
- [16] N. Phan-Thien, R.I. Tanner, "A new constitutive equation derived from network theory", *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **2**, 353-365 (1977).
- [17] H. Giesekus, "A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of the deformation dependent tensorial mobility", *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **11**, 69-109 (1982).
- [18] J.G. Oldroyd, "Non-newtonian effects in steady motion of some idealized elastico-viscous liquids", *Proc. Royal Soc.*, **A 245**, 278-297 (1958).