

INVESTIGAÇÃO COMPUTACIONAL DO ESCOAMENTO VISCOELÁSTICO NUMA EXPANSÃO PLANA PARA NÚMEROS DE REYNOLDS BAIXOS E MODERADOS

Gerardo N. Rocha* e Paulo J. Oliveira

Departamento de Engenharia Electromecânica, Unidade Materiais Têxteis e Papeleiros
Universidade da Beira Interior, 6201-001 Covilhã, Portugal
Email: pjpo@ubi.pt

Palavras-chave: Assimetria do escoamento, Expansão Plana, Fluido Viscoelástico, Modelo FENE-CR, Método dos Volumes Finitos.

Resumo. Neste trabalho é elaborado um estudo numérico do comportamento de um líquido viscoelástico numa expansão plana. O modelo constitutivo utilizado é baseado na noção de moléculas poliméricas com extensão limitada (modelos FENE), resultando na equação reológica FENE-CR. Apresentam-se resultados relativos à estrutura do escoamento, quer para o caso newtoniano quer para o caso viscoelástico e mostra-se a evolução do campo de velocidades ao longo da linha central ($y = 0$). A situação de bifurcação do escoamento, que ocorre para números de Reynolds superiores a 47.5 no caso viscoelástico (com $\beta=0.5$) e 35.5 no caso newtoniano, é tratado com grande detalhe.

1. INTRODUÇÃO

O estudo numérico do escoamento de líquidos não newtonianos (viscoelásticos), através de expansões planas tem sido actualmente alvo de intensa investigação, quer através da utilização de métodos numéricos, quer com meios experimentais. O estudo deste tipo de escoamentos é importante para analisar o comportamento de fluidos em geometrias mais complexas que contenham uma expansão da secção transversal, um arranjo utilizado em várias aplicações de engenharia, tais como na extrusão de polímeros, no processamento de tintas e géis, no fabrico de pastas alimentares, entre outras aplicações [1]. Em geral, estes processos envolvem o escoamento de materiais viscoelásticos mediante canais com variação da secção, produzindo assim uma alteração significativa do escoamento e das propriedades do fluido (quando este é não newtoniano).

O comportamento hidrodinâmico numa geometria deste tipo é razoavelmente bem conhecido para um fluido newtoniano em regime laminar, mas o grau de conhecimento é muito menor para fluidos que combinam características viscosas e elásticas. Existem alguns estudos numéricos que englobam somente uma região muito limitada dos parâmetros passíveis de serem variados, a que se adicionam alguns (poucos) estudos experimentais onde os resultados são essencialmente qualitativos. De facto têm aparecido, muito recentemente (2003; 2004), trabalhos experimentais envolvendo o movimento de fluidos através de expansões planas, mas o regime preponderantemente considerado tem sido o turbulento. No entanto, o interesse prático com a situação que ocorre a baixo número de Reynolds não deixa de ser interessante, sobretudo em aplicações na área das nanotecnologias e dos microfluidos, além de se tratar de um escoamento fundamental que aparece como “módulo” elementar em inúmeras geometrias mais complexas.

As equações a resolver num problema com fluidos não newtonianos (viscoelásticos) são as habituais equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, em conjunto com as equações às derivadas parciais que representam o transporte das componentes do tensor das tensões. Na maioria deste tipo de problemas, este conjunto total de equações não se consegue resolver de forma analítica, sendo necessário aplicar métodos numéricos adequados para obtermos uma solução do problema. Em muitos trabalhos relacionados com o estudo numérico do comportamento de fluidos nas diversas geometrias tem sido utilizado, predominantemente, o método dos volumes finitos e o dos elementos finitos, cada um deles tendo as suas vantagens e desvantagens. Para maiores detalhes consultar Ref. [2] e [3].

Neste trabalho, iremos utilizar para o cálculo numérico o método dos volumes finitos para a resolução das equações que governam o escoamento. Este método será descrito com algum detalhe posteriormente.

Os resultados que iremos apresentar dizem respeito ao comportamento do fluido newtoniano e não newtoniano (viscoelástico) numa mesma geometria, com a utilização de um modelo não-linear para representar o fluido viscoelástico (modelo FENE [4] e [5]). Será aplicado um esquema de diferenças de 3ª ordem (*HRS*) nos termos convectivos [10], por forma a obterem-se resultados que possam ser utilizados como resultados de referência (“benchmark results”) neste tipo de geometria.

2. EQUAÇÕES DO ESCOAMENTO E CONSTITUTIVAS

Neste trabalho consideramos que o escoamento é isotérmico e bidimensional, sendo o líquido incompressível ($\rho = \text{constante}$) e fluindo através de um canal com uma expansão plana. O canal a montante e a jusante têm alturas $d = 1$ e $D = 4$, respectivamente, correspondendo a uma razão de expansão $E = D/d = 4$. Os comprimentos dos canais são normalizados com a altura do canal de entrada d e medem $L_1 = 20d$ e $L_2 = 50d$, conforme apresentado na Figura 1.

Este problema é regido pelas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento escritas da seguinte forma:

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

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

onde \mathbf{u} é o vector velocidade com componentes u e v , segundo as direcções x e y (caso bidimensional), ρ é a massa volúmica (assumida constante), p é a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor das tensões adicionais e $D(\)/Dt = \partial(\)/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla(\)$ é a derivada substancial ou total. No caso de utilizarmos uma solução polimérica homogénea, o tensor das tensões extra é decomposto na soma de uma parte do solvente newtoniano com uma parte devida à solução polimérica ($\boldsymbol{\tau}_{\text{tot}} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}$).

A componente do solvente newtoniano segue a usual lei de Newton e é dada pela seguinte equação:

$$\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \equiv 2\eta_s \mathbf{D} \quad (3)$$

onde a viscosidade do solvente η_s é constante, $\nabla \mathbf{u}$ é o gradiente de velocidades e \mathbf{D} é o tensor da velocidade de deformação, $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$. O índice T denota a matriz transposta.

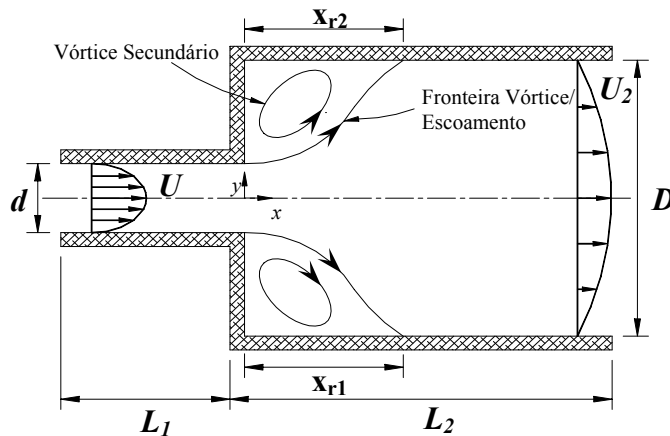


Figura 1. Configuração esquemática do canal.

Para a determinação das componentes de $\boldsymbol{\tau}$ utilizamos como equação constitutiva um modelo baseado na teoria cinética para moléculas com extensão elástica finita e não-linear (FENE) [4], denominado por modelo FENE-CR [5] modificado. Este modelo inclui efeitos de elasticidade e de reofluidificação (“shear-thinning”) nas tensões normais, mas a viscosidade de corte (η_p) é constante.

A equação diferencial a resolver para o tensor das tensões $\boldsymbol{\tau}$ é:

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\lambda}{g(\boldsymbol{\tau})} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (4)$$

com a função de extensibilidade $g(\boldsymbol{\tau})$ definida da seguinte forma:

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

sendo tr o operador traço, λ é o tempo de relaxação do fluido, η_p é a viscosidade polimérica (constante) e L^2 é o parâmetro que mede os efeitos elongacionais, proporcional ao quadrado da razão entre o comprimento das moléculas do polímero quando estão completamente estendidas e o seu comprimento em estado de equilíbrio. O símbolo $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ na eq. (4) corresponde à derivada superior de Oldroyd e é definida como:

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

Este modelo é aqui designado por FENE-MCR e apresenta uma simplificação em relação ao modelo original proposto por Chilcott e Rallison [5], que corresponde a desprezar-se o termo Dg/Dt . Este modelo foi utilizado por Coates *et al.* [6] num estudo numérico do escoamento numa contração axissimétrica e por Oliveira [7] também num estudo numérico do escoamento assimétrico de um fluido viscoelástico numa expansão plana com razão de 1:3.

Os parâmetros adimensionais utilizados neste problema são:

- L^2 - o parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR;
- $\beta = \eta_s / \eta_0$ - a razão da viscosidade do solvente, onde a viscosidade de corte total é $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ (constante);
- $Re = \rho U d / \eta_0$ - o número de Reynolds;
- $We = \lambda U / d$ - o número de Weissenberg.

sendo U a velocidade média no canal de entrada e d a altura do respectivo canal (ver Fig. 1).

3. MÉTODO NUMÉRICO

Como foi referido anteriormente, o método numérico utilizado neste trabalho é o método dos volumes finitos. As equações de conservação e constitutiva são discretizadas por integração em volumes de controlo que compõem a malha computacional. Este processo resulta em equações algébricas para as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, juntamente com a equação constitutiva [8]. Nestas equações, todas as variáveis são calculadas nos centros dos volumes de controlo (células) e a malha computacional é ortogonal. Em consequência disso, são requeridos procedimentos especiais por forma a assegurar o acoplamento da pressão/velocidade (segundo o método de Rhie e Chow [9]) e o acoplamento velocidade/tensão (segundo o método de Oliveira *et al.* [8]).

A equação discretizada correspondente à equação de conservação da massa (1) é escrita da seguinte forma:

$$\sum_f F_f = 0 \quad (7)$$

onde F_f corresponde aos fluxos de massa que atravessam a célula em questão, através da sua face f (neste trabalho, f varia de 1 a 4 para o caso bidimensional).

A forma linearizada da equação algébrica correspondente à conservação da quantidade de movimento é dada por:

$$a_p \mathbf{u}_p = \sum_F a_F \mathbf{u}_F + S_p(p) + S_{HRS}(\mathbf{u}) + S_{Difusao}(\mathbf{u}) + S_\tau(\boldsymbol{\tau}) + \frac{\rho V_p}{\delta t} \mathbf{u}_p^n \quad (8)$$

onde a_p e a_F são os coeficientes (que incluem efeitos convectivos e difusivos) e os termos S (no segundo membro) representam, sucessivamente, o efeito devido à pressão, o efeito devido ao esquema de alta resolução (HRS – *High Resolution Scheme*), o efeito devido ao termo difusivo artificial (explícito), o efeito devido às tensões elásticas e o termo de inércia resultante da derivação temporal da equação da quantidade de movimento. Neste trabalho, não se pretende calcular soluções que variem em função do tempo (consideramos que o escoamento resultante é estacionário) e sendo assim este último termo é utilizado de forma equivalente a uma subrelaxação das equações.

A equação constitutiva discretizada vai ter uma forma semelhante à equação de conservação da quantidade de movimento, isto é:

$$a_p^\tau \boldsymbol{\tau}_p = \sum_F a_F^\tau \boldsymbol{\tau}_F + S^\tau(\boldsymbol{\tau}, \nabla \mathbf{u}) + S_{HRS}^\tau(\boldsymbol{\tau}) + \frac{\lambda_p V_p}{g(\boldsymbol{\tau}_p) \delta t} \boldsymbol{\tau}_p^n \quad (9)$$

A diferença desta equação com a eq. (8) é que os coeficientes a_p^τ e a_F^τ contêm apenas efeitos convectivos e existe um termo fonte dependente do próprio campo de tensões e de gradientes de velocidade. Em geral, os coeficientes das equações discretizadas são substituídas por diferenças centrais (CDS) e as interpolações necessárias para a obtenção de valores nas faces das células são calculadas pelo esquema *upwind* (UDS). Os únicos termos

nas equações (8) e (9) que necessitam de tratamento especial são os termos convectivos. Para o cálculo destes termos utilizamos o esquema de alta-resolução CUBISTA [10], de terceira ordem no espaço, e que possui simultaneamente uma elevada precisão numérica e boas características de convergência. É implementado explicitamente através de um processo de correcção diferida (*deferred correction*) desenvolvido por Khosla e Rubin [11].

A equação constitutiva e a equação de conservação da quantidade de movimento, na forma discretizada, são resolvidas utilizando uma forma modificada do algoritmo SIMPLEC (*SIMPLE Consistent*) [12]. Este algoritmo teve como base principal o algoritmo SIMPLE [13] que permite, através de um processo iterativo de correcção de pressão, garantir uma ligação dos campos de velocidade e pressão, de forma a que se verifique a equação da continuidade. A presença de uma equação constitutiva para um fluido viscoelástico produz uma pequena alteração no algoritmo. Dois novos passos são introduzidos na parte inicial do algoritmo, relacionados com o cálculo da tensão, tal como descrito na Ref. [8].

4. RESULTADOS

Para a análise do escoamento, optamos por considerar a geometria total sem assumir simetria em relação ao eixo x . A malha computacional está dividida em quatro blocos, como podemos ver pela Figura 2 e as suas características geométricas estão apresentadas na Tabela 1.

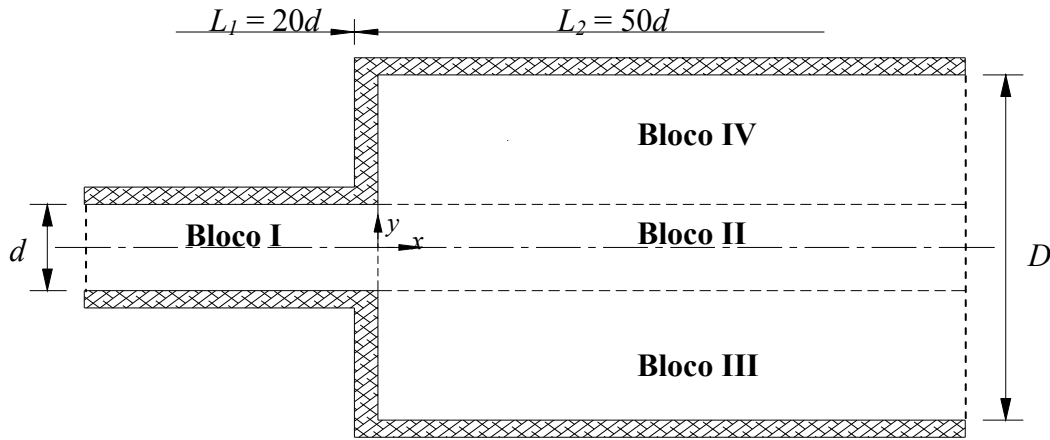


Figura 2. Representação esquemática, em blocos, da expansão plana 1:4.

Neste trabalho foram utilizadas as três malhas computacionais apresentadas na Tabela 1. A tabela 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 ou células (NVC) utilizados para descrever a malha computacional. O número total de graus de liberdade (DOF), correspondente a cada uma das malhas, é obtido através da multiplicação do NVC pelas 6 incógnitas (2 componentes da velocidade, 1 pressão e 3 componentes da tensão) que compõem o problema em questão.

O tamanho mínimo das células na vizinhança da expansão é também apresentado na Tabela 1 ($\delta x_{\min} = \delta y_{\min}$; valores normalizados com d) tal como o factor de expansão ou compressão (f_x) para as células ao longo da direcção x (malha não uniforme). Ao longo da direcção y , optou-se por utilizar uma malha uniforme, ou seja, o factor de expansão ou compressão (f_y) é igual a 1, como podemos ver pela Figura 3.

	Malha 1		Malha 2		Malha 3	
	$N_x \times N_y$	f_x	$N_x \times N_y$	f_x	$N_x \times N_y$	f_x
Bloco I	20×10	0.8294	40×20	0.9121	80×40	0.9554
Bloco II	50×10	1.0760	100×20	1.0370	200×40	1.0183
Bloco III	50×15	1.0760	100×30	1.0370	200×60	1.0183
Bloco IV	50×15	1.0760	100×30	1.0370	200×60	1.0183
<i>NVC</i>	2200		8800		35200	
<i>DOF</i>	13200		52800		211200	
	$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.10$		$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.05$		$\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.025$	

Tabela 1. Características geométricas das malhas computacionais.

Os resultados apresentados neste trabalho foram calculados utilizando a malha média (Malha 2). A malha fina (Malha 3) e a malha grosseira (Malha 1), com o dobro ou metade dos volumes de controlo da malha média relativamente a cada uma das direcções x e y , serviram para quantificar os erros de discretização.

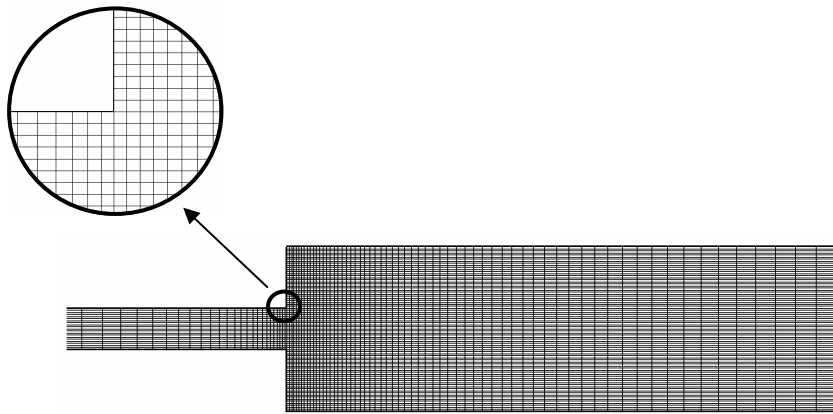


Figura 3. Zoom da Malha 2 utilizada no cálculo computacional.
($-5 \leq x \leq 12.5$, $-2 \leq y \leq 2$)

Na figura anterior, está apresentada a malha computacional que foi utilizada neste trabalho. Na vizinhança da zona de expansão ($x = 0$) existe uma maior concentração das células, por forma a ser possível resolver numericamente e com precisão adequada os elevados gradientes de tensão que ocorrem devido à variação abrupta da secção transversal da

geometria do escoamento. Segundo a direcção x , a razão de expansão (f_x) é de 3.7% para a Malha 2 ($\delta x_{i+1} = f_x \delta x_i$, onde i representa a posição segundo x). Comparando com outros trabalhos, o presente refinamento da malha é semelhante ao usado em Oliveira [7].

Os resultados obtidos respeitantes ao tamanho e intensidade dos vórtices nas três malhas computacionais estão apresentadas na Tabela 2, para o caso de um fluido newtoniano e viscoelástico ($Re = 20$, $L^2 = 100$, $\beta = 0.5$ e $We = 2$). No processo de refinamento das malhas, o número de células em cada direcção é duplicado e as razões da progressão geométrica (f_x , compressão ou expansão das células) tomam o valor da raiz quadrada das razões da progressão geométrica da malha anterior. Este procedimento permite utilizar a extrapolação de Richardson [14] para uma estimativa da ordem de convergência das aproximações numéricas e desse modo calcular uma solução mais precisa, recorrendo aos valores obtidos nas três malhas com diferentes níveis de refinamento. Estes valores na Tabela 2 estão denotados por “Extrapolação de Richardson” para o comprimento (X_r) e intensidade de recirculação (ψ_r).

	X_r	$\psi_r (x10^{-2})$
(a) Caso newtoniano		
Malha-1	3.6416	6.4721
Malha-2	3.6281	6.5039
Malha-3	3.6307	6.5487
Extrapolação Richardson	3.6316	6.5636
Erro Discretização (%)	0.09	0.90
(b) Caso viscoelástico		
Malha-1	1.9364	1.4519
Malha-2	2.0684	2.2307
Malha-3	2.1562	2.6163
Extrapolação Richardson	2.1855	2.7448
Erro Discretização (%)	5.35	18.73

Tabela 2. Efeito devido ao refinamento das malhas para $Re = 20$: (a) Caso newtoniano; (b) Caso viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Na Tabela 2, os erros de discretização foram calculados relativamente aos resultados da Malha 2. Podemos constatar que o erro de discretização para X_r , nessa malha, é menor que 0.1% para o caso newtoniano e menor que 5.5% para o caso viscoelástico. Enquanto que o erro de discretização para ψ_r é menor que 1% para o caso newtoniano, mas para o caso viscoelástico este valor é de 19% (no caso do fluido que segue o modelo FENE-MCR). De facto, constata-se que os erros de discretização de ψ_r são bastante elevados quando comparados com os erros de X_r . Isto ocorre devido à forma de avaliação de ψ_r , que requer uma integração dos resultados do campo de velocidades, o que tende a diminuir a precisão dos resultados.

4.1 Resultados para o caso newtoniano (Validação)

Na Figura 4 apresentamos uma comparação dos resultados para os comprimentos dos vórtices que foram obtidos neste trabalho, com DX correspondendo à diferença entre os comprimentos de recirculação nas paredes superior e inferior ($DX \equiv X_{r2} - X_{r1}$, em função do número de Reynolds), com os resultados obtidos por Drikakis [15]. No trabalho de Drikakis, foi analisado o comportamento do escoamento em diversas razões de expansão, onde as condições impostas na entrada correspondiam a um escoamento completamente desenvolvido e o número de Reynolds foi definido com a velocidade máxima de entrada ($U_0 = 1.5U$) e altura do canal (d).

Todos os resultados apresentados na Figura 4 são para um Re definido com a velocidade média (U) e para a altura do canal de entrada (d). Parece existir alguma discrepância relativamente ao X_r de Drikakis na zona de bifurcação, para $Re \geq 45$, embora essas diferenças possam resultar da dificuldade de extrair resultados numéricos a partir dos gráficos apresentados em [15].

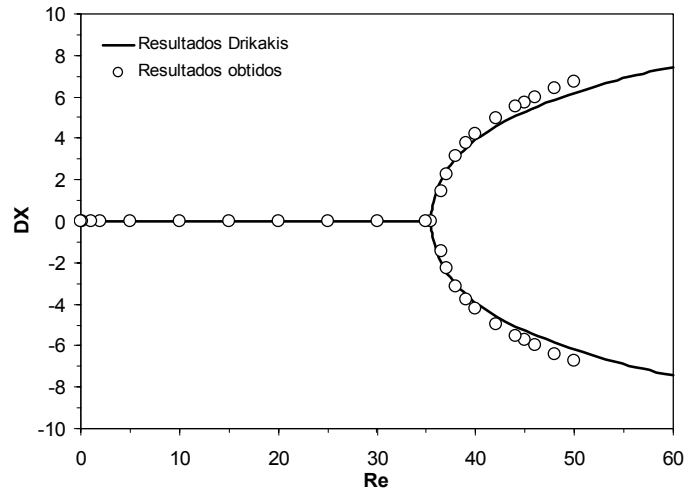


Figura 4. Comparação dos comprimentos de recirculação obtidos neste trabalho para o caso newtoniano, com os resultados numéricos de Drikakis [15].

Estes resultados são também apresentados na Tabela 3, com $X_r = x_r/d$. Neste trabalho analisamos o comportamento do fluido para vários números de Reynolds e o estudo feito permite-nos constatar que à medida que Re é incrementado, aumenta linearmente o comprimento de recirculação até que se atinge um limite, onde o escoamento se torna assimétrico. O valor que obtivemos para o número de Reynolds crítico (Re_c) é de 35.5 no caso do fluido newtoniano. Drikakis [15] obteve um valor de $Re_c = 35.3$ ($Re_0 = 53$) e no trabalho de Battaglia *et al.* [16] é referido $Re_c = 35.8$. Existe assim uma boa concordância entre os nossos resultados e os de estes outros autores.

Re	X_{r1}	X_{r2}	$\psi_{r1}(\times 10^{-2})$	$\psi_{r2}(\times 10^{-2})$
0.01	0.742	0.742	0.0597	0.0597
0.1	0.750	0.750	0.0629	0.0629
1	0.831	0.831	0.1029	0.1029
2	0.933	0.933	0.1741	0.1741
5	1.286	1.286	0.6645	0.6645
10	1.989	1.989	2.4580	2.4580
15	2.784	2.784	4.6578	4.6578
20	3.628	3.628	6.5039	6.5039
25	4.494	4.494	7.8238	7.8238
30	5.373	5.373	8.7488	8.7488
35	6.259	6.259	9.4310	9.4310
35.5	6.256	6.261	9.4299	9.4317
37	5.397	7.634	9.3129	10.0802
38	5.025	8.174	9.2529	10.4512
40	4.681	8.916	9.2512	11.1359
45	4.419	10.167	9.3810	13.2441
50	4.380	11.107	9.4942	15.2504

Tabela 3. Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação obtidos para o caso newtoniano.

Na Figura 5 (a) e (b) apresentamos os resultados de X_r e ψ_r para o caso newtoniano e comparamos com os valores obtidos através das correlações propostas por Scott *et al.* [17].

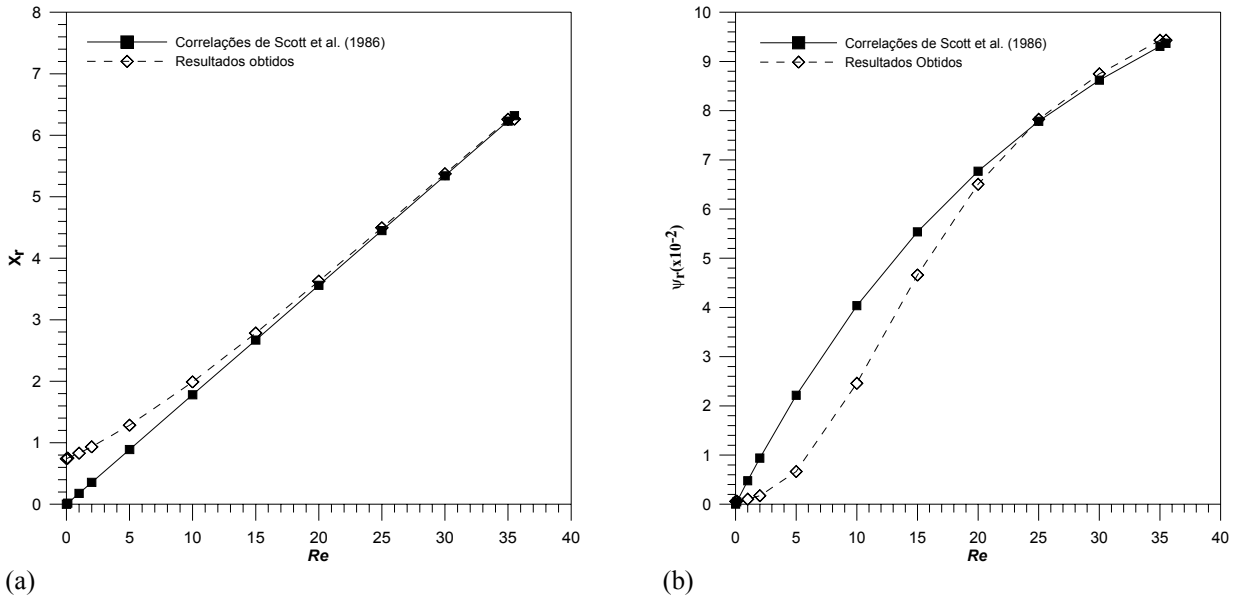


Figura 5. (a) Comprimento de recirculação em função do número de Reynolds. (b) Intensidade de recirculação em função do número de Reynolds.

Podemos verificar que para valores de Reynolds acima de 15-20, os resultados aqui obtidos coincidem com as correlações propostas pelos autores Scott *et al.* [17]. Torna-se claro, pela leitura deste trabalho, que não seria de esperar concordância para valores inferiores de Re . Na análise das características globais do escoamento de um fluido newtoniano, foram efectuadas várias corridas computacionais, em regime estacionário, com valores de $\delta t = 2.0$ (tempo de marcha) para $Re \geq 1$ e $\delta t = 0.5$ para $Re < 1$. As figuras seguintes (Fig. 6) mostram as linhas de corrente resultantes das simulações numéricas, para valores crescentes do número de Reynolds. Podemos concluir que o comprimento de recirculação aumenta, simetricamente, com o crescimento do número de Reynolds até se atingir o número de Reynolds crítico ($Re_c = 35.5$). A partir deste valor, o escoamento torna-se assimétrico, apresentando um comprimento de recirculação maior numa das paredes relativamente à outra (no caso presente é a parede superior, mas isso depende das condições iniciais).

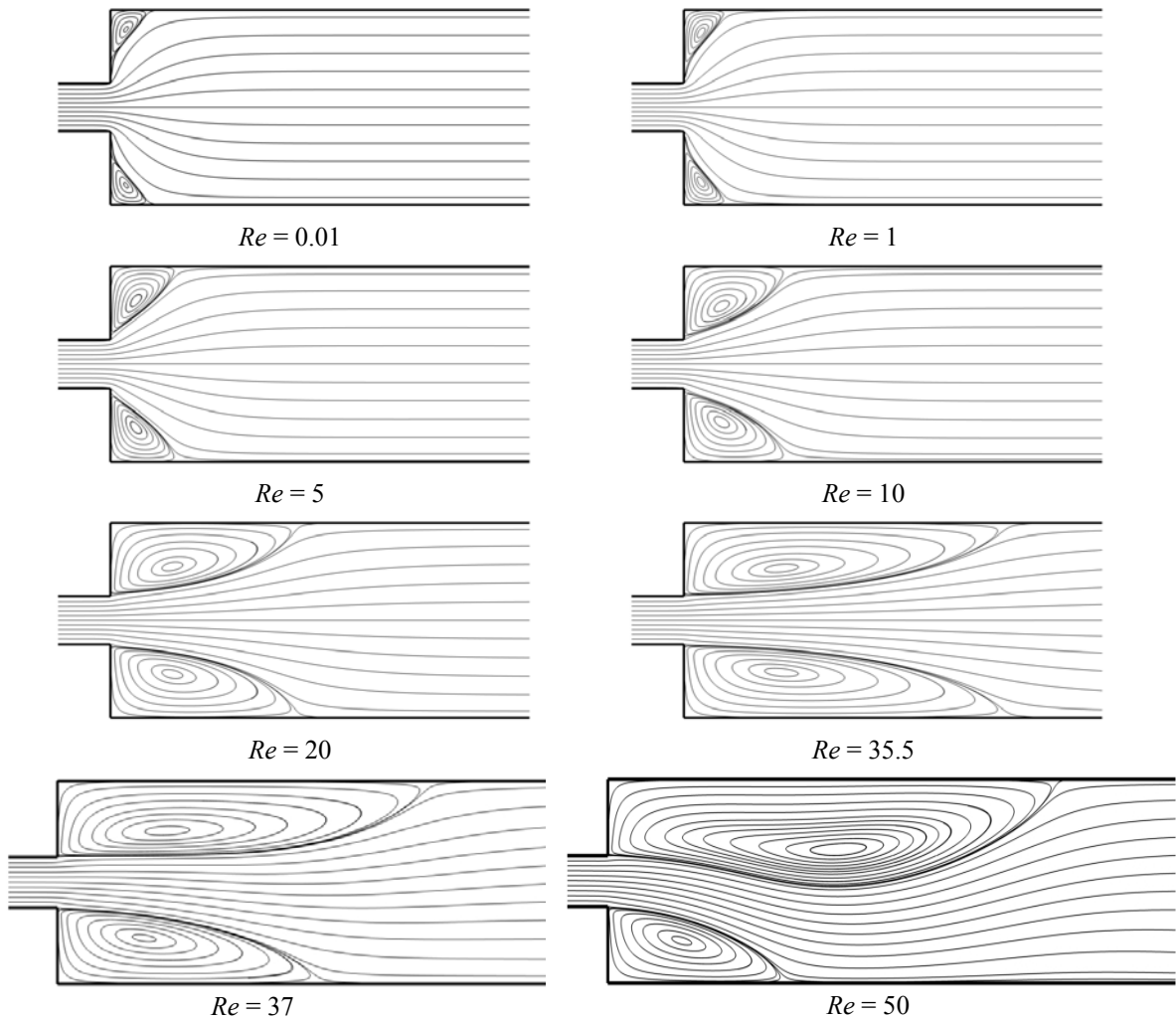


Figura 6. Linhas de corrente para vários números de Reynolds no caso newtoniano.

4.2 Resultados para o caso viscoelástico

No caso de se utilizar um fluido viscoelástico poderão ser alterados mais parâmetros independentes, que decorrem do modelo constitutivo considerado. Enquanto que no caso de se utilizar um fluido newtoniano apenas foi possível alterar o número de Reynolds, em cada corrida computacional, para o fluido viscoelástico existem mais variáveis independentes que permitem variar as propriedades do fluido. No modelo FENE-MCR, existem no total quatro parâmetros adimensionais independentes (Re , We , L^2 e β). Os efeitos que resultam da variação de cada um dos parâmetros serão apresentados nesta secção, com excepção do valor do parâmetro de extensibilidade (L^2) onde foi utilizado um valor constante para todos os cálculos. Quanto maior for este parâmetro de extensibilidade do fluido, maior é a viscosidade elongacional. Como valor base optamos por considerar $L^2 = 100$ tal como utilizado no trabalho de simulação numérica de Oliveira [7].

4.2.1 Efeitos devido à elasticidade, We

A viscoelasticidade de um fluido é uma propriedade que depende das características do material e que, após a aplicação de um estado de tensão, conduz a efeitos não lineares relacionados com as diferenças de tensões normais. Esta propriedade é caracterizada através da utilização do número de Weissenberg que é definido por $We = \lambda U/d$. Como a velocidade média (U) e a altura do canal de entrada (d) são aqui considerados constantes e unitários, apenas variamos o tempo de relaxação (λ). Este tempo λ corresponde ao tempo de resposta do material viscoelástico após ser retirada instantaneamente a aplicação de uma tensão constante.

Na Tabela 4, apresentamos os resultados obtidos para valores de We entre 0 e 5 dos valores de X_r e ψ_r , com $Re = 50$ e $\beta = 0.9$.

We	X_{r1}	X_{r2}	$\psi_{r1} (x10^{-2})$	$\psi_{r2} (x10^{-2})$
0.0	4.380	11.107	9.4942	15.2504
0.2	4.390	11.067	9.4087	15.0445
0.4	4.400	11.026	9.3509	14.8883
0.6	4.408	10.985	9.2812	14.7534
0.8	4.411	10.941	9.2036	14.6404
1.0	4.415	10.895	9.1418	14.5353
1.5	4.417	10.790	9.0396	14.3618
2.0	4.414	10.698	8.9688	14.3021
2.5	4.407	10.619	8.9071	14.3055
3.0	4.397	10.552	8.8524	14.3357
3.5	4.387	10.496	8.8038	14.3772
4.0	4.377	10.449	8.7599	14.4183
4.5	4.367	10.409	8.7207	14.4589
5.0	4.358	10.378	8.6847	14.4955

Tabela 4. Caso viscoelástico - efeito do número de Weissenberg ($Re = 50$, $\beta = 0.9$, $L^2 = 100$).

Estes resultados estão representados na Figura 7, mostrando a variação diferenciado dos dois comprimentos de recirculação com We , desde $We = 0$ (caso newtoniano) até $We = 5$. O comprimento do maior dos dois vórtices tende a diminuir de tamanho, enquanto que o vórtice mais pequeno é ligeiramente estendido. Assim sendo, ambos estes efeitos actuam por forma a diminuir a assimetria do escoamento, mas a assimetria mantém-se para todos os valores de We calculados.

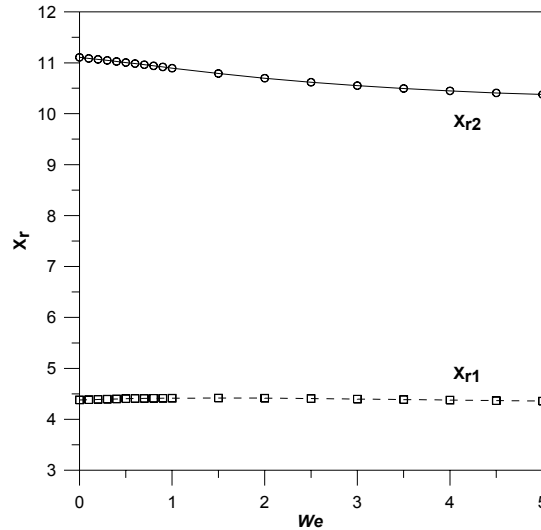


Figura 7. Efeito da elasticidade (We) dos comprimentos dos dois vórtices assimétricos ($Re = 50$; $L^2 = 100$; $\beta = 0.9$).

4.2.2 Efeitos devido à concentração do solvente, β

Este parâmetro está relacionado com a concentração do solvente existente na mistura polimérica, sendo dado pela razão entre a viscosidade do solvente (η_s) e a viscosidade total da mistura (η_0). Valores elevados de β denotam que a mistura polimérica é diluída. Os resultados obtidos com a variação de β , em termos de comprimentos e intensidades de recirculação, são apresentados numericamente na Tabela 5 e estão ilustrados graficamente na Figura 8, para valores de $Re = 40$, $We = 2$ e $L^2 = 100$. O caso base da secção 4.2.1, com $\beta = 0.9$, corresponde a uma situação de bifurcação com um dos vórtices significativamente maior que o outro.

β	X_{r1}	X_{r2}	$\psi_{r1} (x10^{-2})$	$\psi_{r2} (x10^{-2})$
1.0	4.681	8.916	9.2512	11.1359
0.9	5.051	8.108	8.7996	10.1382
0.8	6.236	6.547	8.6838	8.8318
0.7	6.001	6.056	8.0966	8.1314
0.6	5.652	5.675	7.4799	7.4987
0.5	5.272	5.286	6.7968	6.8067

Tabela 5. Valores obtidos do comprimento e intensidade de recirculação para o caso viscoelástico – efeito do parâmetro de concentração β ($We = 2$; $L^2 = 100$; $Re = 40$).

O efeito que podemos verificar com a variação da concentração do solvente é que à medida que β diminui o escoamento tende a torna-se simétrico. Para valores de $\beta \leq 0.8$ o escoamento é simétrico, com $Re = 40$, e para valores de $\beta > 0.8$ o escoamento torna-se assimétrico para as mesmas condições. A Fig. 8 ilustra esse efeito.

Como menores valores de β corresponde a uma maior concentração de polímero, uma vez mais a elasticidade tende a atenuar assimetrias, ou seja, reduz a tendência para o aparecimento de instabilidades.

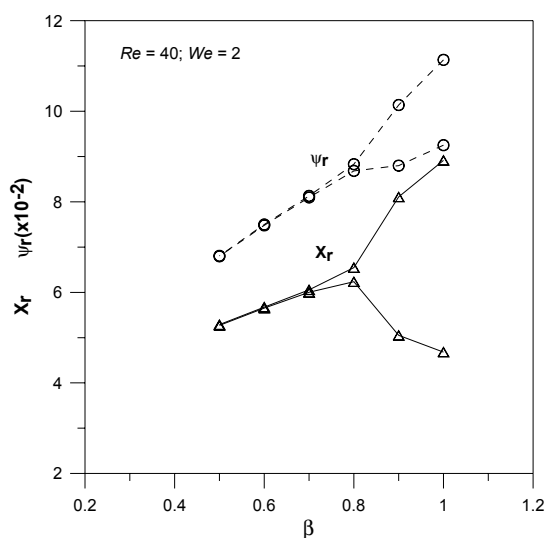


Figura 8. Efeito da concentração do solvente para o comprimento e intensidade de recirculação.

Nas Figuras 9 e 10 comparamos as linhas de corrente resultantes para o caso newtoniano e viscoelástico ($We = 2$; $\beta = 0.9$ e $L^2 = 100$), para $Re = 40$, e os casos viscoelásticos com $\beta = 0.9$ e $\beta = 0.6$ ($We = 2$; $Re = 40$ e $L^2 = 100$). Podemos constatar da Fig. 9 que para o escoamento newtoniano existe uma maior assimetria e esta diminui à medida que é introduzido o efeito da elasticidade no fluido (tal como visto na secção anterior). Para ambos os casos viscoelásticos na Fig. 10 relativos a variação da concentração do solvente, podemos verificar que quando β vai decrescendo aumenta a tendência para se atingir a simetria do escoamento.

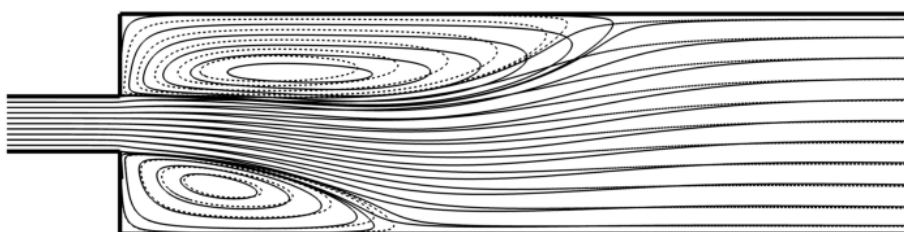


Figura 9. Comparação das linhas de corrente para o caso newtoniano (linha sólida) e viscoelástico (linha tracejada) ($We = 2$; $L^2 = 100$ e $\beta = 0.9$), com $Re = 40$.



Figura 10. Linhas de corrente para $Re = 40$ com influência da concentração do solvente, $\beta = 0.9$ (linha tracejada) e $\beta = 0.6$ (linha sólida) ($We = 2$; $L^2 = 100$).

4.2.3 Efeitos devido à inércia, Re

Nesta secção analisamos os efeitos nas características do escoamento que ocorrem com o aumento do número de Reynolds. Os nossos resultados numéricos são dados na Tabela 6 e estão representados graficamente nas Figuras 11 (a) e (b). Na Figura 11 (a) apresentamos a variação dos comprimentos de recirculação nas paredes superior e inferior com o número de Reynolds, enquanto que na Figura 11 (b) apresentamos as respectivas intensidades.

Re	X_{r1}	X_{r2}	$\psi_{r1}(\times 10^{-2})$	$\psi_{r2}(\times 10^{-2})$
0.01	0.657	0.669	0.0365	0.0394
0.1	0.659	0.670	0.0368	0.0396
1	0.662	0.676	0.0381	0.0425
2	0.683	0.698	0.0441	0.0493
5	0.736	0.743	0.0639	0.0695
10	0.901	0.907	0.1551	0.1648
15	1.383	1.384	0.7778	0.7700
20	2.068	2.070	2.2307	2.2330
25	2.855	2.865	3.7906	3.7851
30	3.660	3.669	4.9865	4.9895
35	4.468	4.477	5.9333	5.9377
40	5.272	5.286	6.7968	6.8067
45	6.110	6.127	7.4766	7.4903
46	6.277	6.297	7.6056	7.6242
47	6.427	6.490	7.7149	7.7669
48	5.473	7.593	7.2419	8.8070
49	5.159	8.094	7.1487	9.3793
50	4.979	8.472	7.1206	9.9039

Tabela 6. Comprimento (X_r) e intensidade (ψ_r) de recirculação obtidos para o caso viscoelástico –
– Efeito do número de Reynolds ($We = 2$; $\beta = 0.5$; $L^2 = 100$).

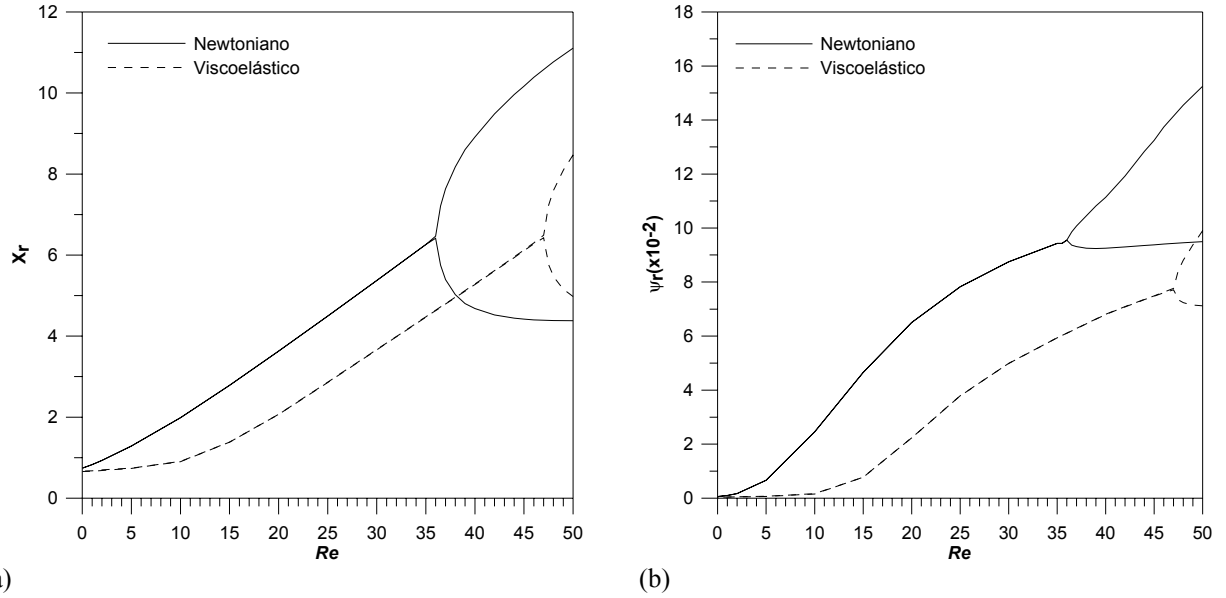


Figura 11. Comparação das características das recirculações com o número de Reynolds, para o caso newtoniano e viscoelástico ($We = 2$; $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$): (a) tamanho dos vórtices; (b) intensidade dos vórtices.

Para valores de Re abaixo do número de Reynolds crítico ($Re_c = 47.5$) o escoamento mantém-se estável e simétrico, enquanto que para valores acima de Re_c o escoamento mantém-se estacionário mas assimétrico, com um dos comprimentos de recirculação maior que o outro. Na Figura 12, apresentamos um diagrama de bifurcação do escoamento para o caso viscoelástico ($DX = X_{r2} - X_{r1}$, em função de Re) e comparamos com o caso newtoniano.

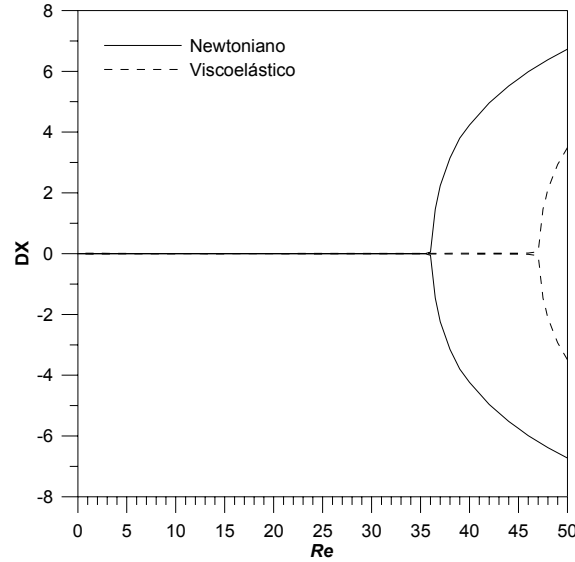


Figura 12. Diagrama de bifurcação ($DX = X_{r2} - X_{r1}$) para os casos newtoniano e viscoelástico ($We = 2$; $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

A partir das figuras apresentadas podemos concluir que:

- O número de Reynolds crítico, correspondente à transição entre o estado simétrico e assimétrico do escoamento, é de $Re_c = 35.5$ (caso newtoniano) e $Re_c = 47.5$ (caso viscoelástico, com $We = 2$; $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).
- Os comprimentos de recirculação (X_r) e as intensidades (ψ_r) são menores para o caso viscoelástico, quando comparados com o caso newtoniano. A única exceção é o comprimento da menor recirculação, após a bifurcação

Na Figura 13, apresentamos as linhas de corrente para o escoamento viscoelástico base ($We = 2$; $L^2 = 100$; $\beta = 0.5$) quando se aumenta o número de Reynolds.

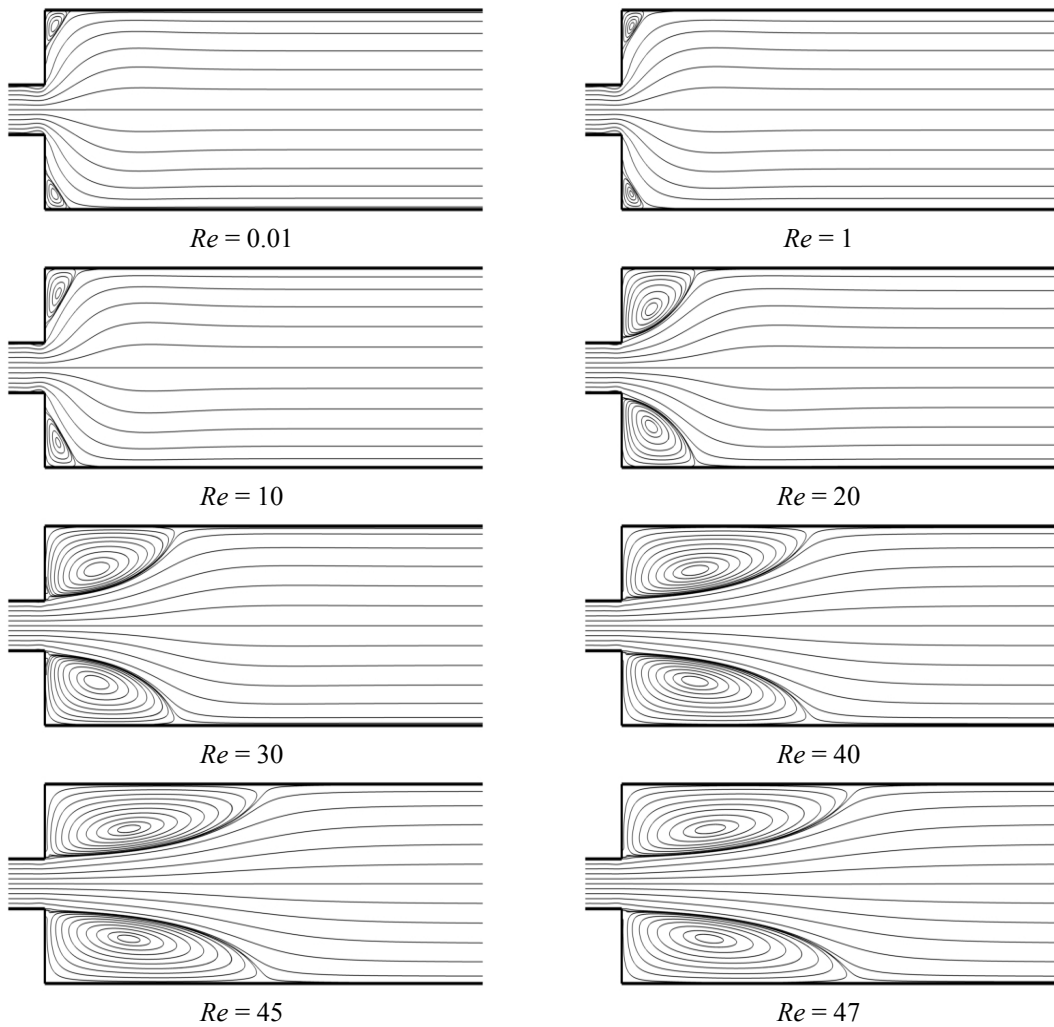


Figura 13. Evolução das linhas de corrente com o número de Reynolds, para o caso viscoelástico ($We = 2$; $L^2 = 100$; $\beta = 0.5$).

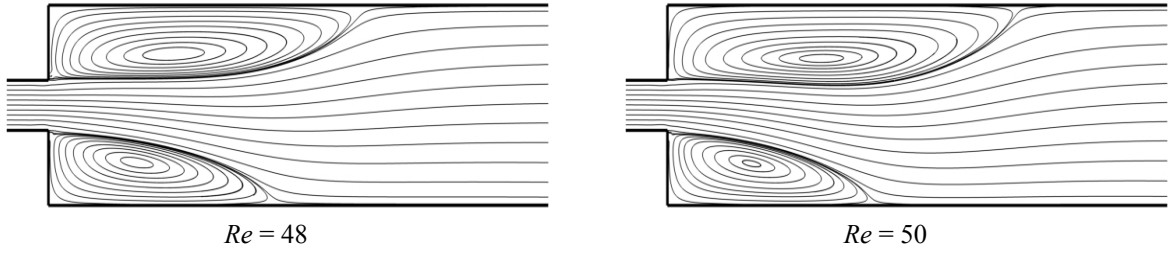


Figura 13. Evolução das linhas de corrente com o número de Reynolds, para o caso viscoelástico ($We = 2$; $L^2 = 100$; $\beta = 0.5$) (continuação).

Constata-se que o efeito inercial é semelhante ao observado para o caso newtoniano, mas uma comparação cuidada das Figs. 6 e 13 mostra que a elasticidade faz diminuir o tamanho dos comprimentos de recirculação e a respectiva intensidade. Um efeito muito curioso é o “dilatamento” lateral das linhas de corrente após a zona de expansão (“bulging”), que é devido a razões puramente elásticas. Este efeito pode ser visto como se um elemento de fluido estivesse submetido a uma compressão, segundo y , antes da expansão e que essa compressão fosse posteriormente recuperada elasticamente, após a zona de expansão, conduzindo a uma separação das linhas de corrente (vide Fig. 13, para $Re = 10$).

Com a variação do número de Reynolds, podemos analisar o comportamento do fluido ao longo da linha central ($y = 0$). Nas Figuras 14 (a) e (b), apresentamos a variação do perfil de velocidade ao longo do plano central.

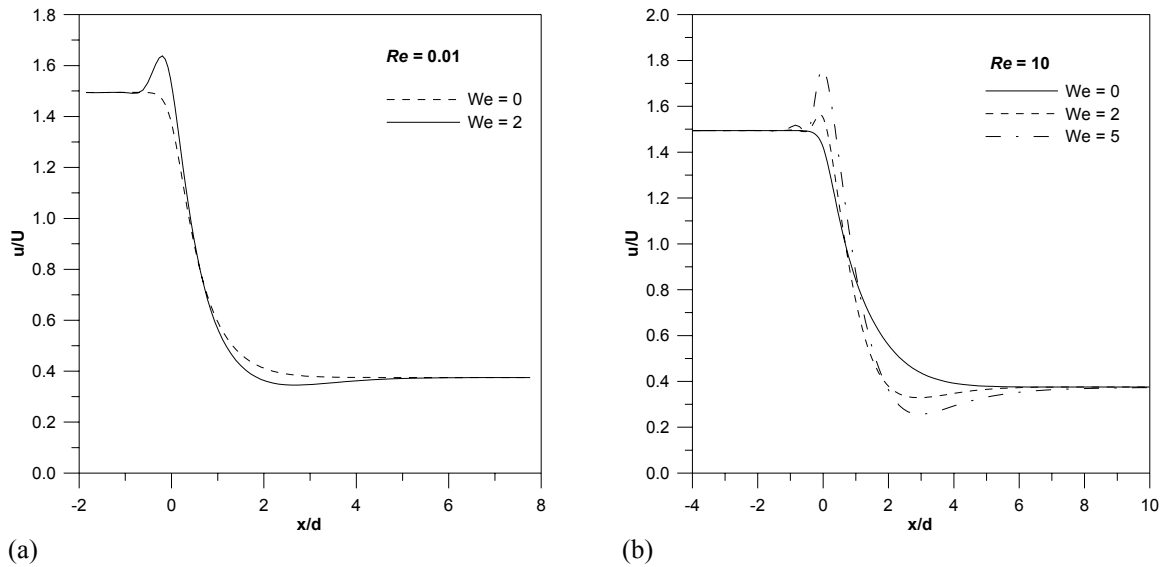


Figura 14. Variação do perfil de velocidades ao longo do plano central ($y = 0$): (a) $Re = 0.01$, com $We = 0$ (newtoniano) e $We = 2$ (viscoelástico: $L^2 = 100$; $\beta = 0.5$); (b) $Re = 10$, com $We = 0$ (newtoniano), $We = 2$ e $We = 5$ (viscoelástico: $L^2 = 100$; $\beta = 0.5$).

Para valores de Re baixos, observa-se que o fluido viscoelástico vai convergindo para a zona central do canal, antes da expansão, verificando-se posteriormente uma grande divergência para as paredes do canal, após a zona de expansão. Devido a este facto, ocorre um “overshoot” assinalável antes da expansão, isto é, existe um acréscimo da velocidade comparativamente ao caso newtoniano (com $u/U > 1.5$) e um “undershoot” (com $u/U < 1.5/4 = 0.375$), logo após a expansão. Observa-se, da Figura 14, que para o fluido newtoniano não existe qualquer “overshoot” (velocidade acima da média esperada) e que para o fluido viscoelástico a magnitude do “overshoot” diminui com o número de Reynolds, podendo correlacionar-se com um número de elasticidade definido por $E = We/Re$. Podemos concluir também que o “overshoot” e o “undershoot” que ocorrem antes e depois da expansão, respectivamente, decrescem com a diminuição do número de Weissenberg, sendo um fenómeno típico resultante de efeitos elásticos.

5. CONCLUSÕES

Com a variação de Re entre 0.01 e 50, verificamos que quer para o caso newtoniano quer para o viscoelástico existe um número de Reynolds crítico a partir do qual o escoamento se torna assimétrico. O efeito da elasticidade atrasa o processo de bifurcação do escoamento e o número de Reynolds crítico é $Re_c = 47.5$ para $We = 2$, $L^2 = 100$ e $\beta = 0.5$ comparado com o caso newtoniano, onde $Re_c = 35.5$. O tamanho do maior comprimento de recirculação tende a diminuir para o caso em que se utiliza um fluido elástico, enquanto que o tamanho do menor tende a aumentar. Por sua vez, a intensidade de recirculação é sempre menor para o fluido elástico, quando comparado com o caso newtoniano (inelástico). Estes resultados estão em sintonia com os da Ref.[7], completando esses dados para a expansão 1:4.

Analisando separadamente cada um dos parâmetros que constituem o modelo FENE-MCR e, tendo em conta que utilizamos $L^2 = 100$ para todos os cálculos computacionais, podemos concluir que:

- o efeito de elasticidade do fluido, medido pelo número de Weissenberg (We), provoca uma diminuição do comprimento de recirculação quando comparado com o caso newtoniano.
- o parâmetro de concentração do solvente β impõe sobre o escoamento um forte efeito e para valores de $\beta = 0.9$, com $Re = 40$, o escoamento é assimétrico, mas à medida que β vai decrescendo até 0.5 a assimetria já não se verifica (o escoamento fica simétrico).
- o efeito devido à inércia permite-nos bifurcação do escoamento ($DX = X_{r2} - X_{r1}$) em função do Re . Podemos verificar, pela Fig. 12, que o caso viscoelástico apresenta a mesma configuração que o caso newtoniano, sendo avançado para a direita, para valores superiores de Re .

AGRADECIMENTOS

Para a realização deste trabalho, agradecemos o apoio financeiro que nos foi prestado pela Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT), de Portugal, através do projecto POCTI/EQU/37699/2001.

REFERÊNCIAS

- [1] A.G. Castro, J.A. Covas e A.C. Diogo, *Reologia e suas aplicações industriais*, Ciência e Técnica, Instituto Piaget, (2001).
- [2] S.V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere, Washington (1980).
- [3] J.H. Ferziger e M. Perić, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer, New York (2002).
- [4] R.B. Bird, C.F. Curtiss, R.C. Armstrong e O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids*, Wiley, New York, Vol. 2, (1977).
- [5] M.D. Chilcott e J.D. Rallison, "Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **29**, pp. 381-432, (1988).
- [6] P.J. Coates, R.C. Armstrong e R.A. Brown, "Calculation of steady-state viscoelastic flow through axisymmetric contractions with the EEME formulation", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **42**, pp. 141-188, (1992).
- [7] P.J. Oliveira, "Asymmetric flows of viscoelastic fluids in symmetric planar expansion geometries", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **144**, pp. 33-63, (2003).
- [8] 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).
- [9] C.M. Rhie e W.L. Chow, "A numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation", *AIAA Journal*, Vol. **21**, pp. 1525-1532, (1983).
- [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. Numer. Methods Fluids* Vol. **41**, pp. 47-75, (2003).
- [11] P.K. Khosla e S.G. Rubin, "A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme", *Computers and Fluids* Vol. **2**, pp. 207-209 (1974).
- [12] J.P. Van Doormaal e G.D. Raithby, "Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows", *Numerical Heat Transfer* Vol. **7**, pp. 147-163, (1984).
- [13] S.V. Patankar e D.B. Spalding, "A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows", *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol. **25**, pp. 17-87, (1972).
- [14] L.F. Richardson, "The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations with an application to the stress in masonry dam.", *Trans. Roy. Soc. London* Vol. **210**, pp. 307-357, (1910).
- [15] D. Drikakis, "Bifurcation phenomena in incompressible sudden expansion flows", *Phys. Fluids* Vol. **9**, pp. 76-87, (1997).
- [16] F. Battaglia, S.J. Tavener, A.K. Kulkarni e C.L. Merkle, "Bifurcation of low Reynolds number flows in symmetric channels", *AIAA Journal* Vol. **35**, pp. 99-105, (1997).
- [17] P.S. Scott, F.A. Mirza e J. Vlachopoulos, "A finite element analysis of laminar flows through planar and axisymmetric abrupt expansions", *Computers and Fluids* Vol. **14**, pp. 423-432, (1986).