

ESTUDO DE ESCOAMENTOS VISCOELÁSTICOS SIMPLES EM REGIME VARIÁVEL: ANÁLISE DETALHADA DE UM “ESCOAMENTO DE ARRANQUE”

Ana S.R. Duarte^{1*}, Paulo J. Oliveira¹

1: Unidade de materiais têxteis e papeleiros, Departamento de Engenharia Electromecânica
Universidade da Beira Interior

6201-001 Covilhã

e-mail: sofiauarte@portugalmail.pt, pjpo@ubi.pt, web: <http://www.ubi.pt/externos/dem.html>

Palavras-chave: Método dos volumes finitos, escoamento não-estacionário, fluido viscoelástico, “escoamento de arranque” plano de Poiseuille.

Resumo. *A capacidade de previsão de escoamentos transientes de fluidos viscoelásticos é importante uma vez que estes ocorrem em muitos processos de produção a nível industrial e laboratorial. Neste artigo é apresentado um estudo numérico pormenorizado do “escoamento de arranque” plano de Poiseuille baseado no método dos volumes finitos. Foram obtidos resultados para fluidos newtonianos e não newtonianos variando o número de elasticidade. Os resultados dos fluidos UCM e Oldroyd-B são reproduzidos analiticamente. Os resultados obtidos para os modelos PTT e FENE-MCR aproximam-se dos obtidos para os fluidos UCM e Oldroyd-B respectivamente.*

1 INTRODUÇÃO

A reologia é uma disciplina complexa quando apreciada sob o ponto de vista matemático. A sua complexidade forçou os investigadores que trabalham na área a desenvolverem ferramentas úteis, em particular métodos numéricos, para dar resposta a quaisquer problemas de escoamentos de fluidos.

Nas últimas duas décadas desenvolveram-se e optimizaram-se algoritmos numéricos estáveis que permitiram resolver problemas de escoamentos estacionários de fluidos viscoelásticos – ver, por exemplo, Keunings [1] e Baaijens [2] como artigos de revisão. Devido a estes avanços, actualmente, a atenção dos reologistas está direccionada no sentido de dar resposta a problemas de escoamentos não-estacionários. É muito importante conseguir prever este tipo de fenómenos uma vez que eles espelham a realidade da maioria dos processos de produção a nível industrial ou laboratorial (e.g. escoamentos puramente extensionais, moldação por injeção ou sopro e outros).

Apesar dos avanços que se têm sentido nesta direcção, ainda há muito pouca informação sobre o comportamento de fluidos viscoelásticos em escoamentos dependentes do tempo bem

como sobre a capacidade de previsão das equações constitutivas que modelam este tipo de escoamento. Contudo, existem algumas tentativas de cálculo numérico de escoamentos não-estacionários baseadas numa combinação do método dos volumes finitos com o método dos elementos finitos (FVM/FEM) (e.g. [3], [4]) bem como alguns trabalhos com suporte numérico enquadrado apenas no método dos volumes finitos (FVM) (ver referências [5], [6]). Neste trabalho apresenta-se um estudo numérico pormenorizado de um escoamento viscoelástico em regime não-estacionário denominado “escoamento de arranque” plano de Poiseuille (em inglês *start-up flow*). Os resultados numéricos foram obtidos através da utilização de um programa de simulação computacional desenvolvido por P.J. Oliveira [7], enquadrado, do ponto de vista numérico, num método Euleriano de volumes finitos.

Os métodos de volumes finitos usam a forma integral das equações da conservação como ponto de partida. As equações da conservação são aplicadas a cada volume de controlo (VC) que é visto como uma subdivisão do domínio físico do problema. As incógnitas são calculadas no centro de cada volume de controlo onde existe um nodo computacional. A interpolação é usada para obter os valores das variáveis na superfície do VC em termos de valores nodais. Os integrais de superfície e volume são aproximados de forma adequada. No final obtém-se uma equação algébrica para cada VC, da qual fazem parte os valores dos nodos vizinhos [8]. Este tipo de método tem-se vindo a popularizar por se adequar a malhas complexas, por proporcionar maior estabilidade numérica e devido a propriedades atractivas de poupança de tempo e espaço computacionais.

Inicialmente, o programa estava preparado para efectuar simulações de escoamentos estacionários de fluidos viscoelásticos e mais recentemente, foi adaptado para resolver problemas de escoamentos unidimensionais não-estacionários. As alterações introduzidas devido à natureza transiente do presente método, são essencialmente duas: (1) os termos dependentes do tempo encontrados nas equações do governo são representados por um esquema de segunda ordem; e (2) o algoritmo da solução precisa de um ajuste, já que são necessárias iterações dentro de cada passo no tempo.

O programa de simulação numérica brevemente descrito foi aplicado ao problema de referência em estudo. Neste problema, inicialmente, o fluido encontra-se no estado de repouso e é-lhe aplicado instantaneamente um gradiente de pressão constante que provoca o escoamento. Após a aplicação do gradiente constante de pressão as características do escoamento variam ao longo do tempo até este se tornar estacionário, constituindo assim um exemplo de escoamento em regime transitório. Assumindo que o escoamento é completamente desenvolvido, i.e., não existem variações da velocidade ao longo do canal, torna-se possível obter uma solução analítica das equações do movimento. Para fluidos newtonianos essa solução é conhecida e encontra-se descrita em diversos livros da especialidade (e.g., [9]).

Contudo, o interesse deste trabalho está sobretudo centrado em fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas. Este tipo de fluidos apresenta características que não são previstas pela mecânica clássica de fluidos; eles são caracterizados por uma dependência da viscosidade de corte em relação à taxa de deformação, pela presença de tensões normais em escoamentos viscométricos, pela elevada resistência a deformações alongacionais e ainda

pelos efeitos de memória relacionados com as propriedades elásticas. Estes fluidos podem ser soluções de polímeros, suspensões de fibras, etc... Eles são muito importantes em diversas aplicações industriais [10]. Existem diversos modelos desenvolvidos e incorporados em programas de simulação computacional que permitem simular o seu comportamento.

Para o caso de fluidos que obedecem às equações constitutivas de Maxwell e Oldroyd – modelos UCM (*upper-convected Maxwell*) e Oldroyd-B respectivamente, foi determinada, por Waters e King [11], uma solução analítica para o problema do “escoamento de arranque” plano de Poiseuille aqui em estudo. Formalmente, esta solução é dada em termos de uma série infinita de funções transcendentais e foi programada em linguagem FORTRAN para servir como base de comparação aos resultados numéricos obtidos directamente por resolução das equações do governo. Desta forma, os resultados das soluções analíticas e simulações numéricas podem ser comparados. Os resultados numéricos obtiveram-se fazendo variar o número de elasticidade, e para fluidos seguindo o modelo UCM ainda se avaliaram os erros de discretização espacial e temporal através da criação de malhas sucessivamente refinadas e do uso de passos no tempo progressivamente menores.

Apesar dos modelos UCM e Oldroyd-B terem em conta propriedades elásticas e viscosas, eles são modelos relativamente simples e apresentam algumas restrições. Por isso, neste trabalho, o programa é aplicado ao problema do “escoamento de arranque” plano de Poiseuille usando fluidos que seguem modelos constitutivos mais complexos, nomeadamente o modelo PTT (Phan-Thien-Tanner) deduzido com base em modelos de redes moleculares [12] e o modelo FENE (*finite extensible nonlinear elastic*) baseado na teoria cinética e proposto por Chilcott e Rallison donde segue a denominação FENE-CR [13]. Estes modelos já têm em conta algumas particularidades dos fluidos não newtonianos com propriedades viscoelásticas como o efeito reofluidificante ou a viscosidade elongacional finita que não são tidas em conta nos modelos UCM ou Oldroyd-B. A equação constitutiva que advém do modelo matemático e descreve as propriedades do fluido tem um impacto tremendo nos resultados das simulações numéricas e na estabilidade do método.

2 EQUAÇÕES DO GOVERNO

Nesta secção são apresentadas as equações básicas da conservação bem como as relações constitutivas para os modelos UCM, Oldroyd-B, PTT e FENE-MCR, considerando um escoamento isotérmico e incompressível num canal.

2.1 Equações da conservação

As equações da conservação que regem o escoamento de um fluido nas condições apontadas em cima são a equação da continuidade, que expressa a conservação da massa:

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

onde \mathbf{u} representa o vector velocidade cujas componentes u e v correspondem às coordenadas cartesianas x e y respectivamente; e a equação do movimento que expressa a conservação do momento linear. Considerando um fluido newtoniano em escoamento

completamente desenvolvido, pode-se escrever esta equação da seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx}, \quad v = 0 \quad (2)$$

mas se tivermos em conta um fluido viscoelástico, na equação do movimento, tem que intervir o tensor das tensões, $\boldsymbol{\tau}$, que vai ser determinado por uma terceira equação - equação constitutiva reológica que traduz o comportamento viscoelástico do fluido. A equação que expressa a conservação da quantidade de movimento para um fluido viscoelástico é dada pela seguinte expressão:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{tot} \quad (3)$$

Nestas equações, ρ , ν , p e t correspondem à massa volúmica constante do fluido, viscosidade cinemática, pressão e tempo respectivamente.

O tensor das tensões, $\boldsymbol{\tau}_{tot}$, é escrito da forma que se segue:

$$\boldsymbol{\tau}_{tot} = \boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau} \quad (4)$$

onde $\boldsymbol{\tau}$ é a tensão do polímero e $\boldsymbol{\tau}_s$ é a tensão do solvente dada pela lei newtoniana ($\boldsymbol{\tau}_s = 2\eta_s \mathbf{D}$, onde η_s corresponde à viscosidade constante do solvente e \mathbf{D} é o tensor da taxa de deformação, $\mathbf{D} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)/2$).

2.2. Modelos constitutivos

Neste trabalho são usadas várias equações constitutivas para modelar o comportamento do fluido viscoelástico.

Considere-se o modelo de Maxwell que é um modelo linear, no qual o fluido segue a lei newtoniana quando sujeito a deformações lentas, e para deformações rápidas comporta-se como um sólido elástico linear. Quando este modelo é generalizado para escoamentos arbitrários sob a forma tensorial, em vez da derivada parcial é usada a derivada convectiva superior do tempo e obtém-se a seguinte equação constitutiva UCM:

$$\lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (5)$$

onde λ é o tempo de relaxação do fluido, η_p é a viscosidade do fluido e $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ é a derivada convectiva superior do tensor das tensões em ordem ao tempo definida como:

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

O valor do tempo de relaxação indica a extensão da componente elástica do fluido. À medida que o tempo de relaxação aumenta também aumenta a elasticidade do fluido. Para

um tempo de relaxação de zero obtém-se a equação constitutiva newtoniana.

O modelo de Oldroyd-B deriva do modelo de Jeffreys quando as derivadas parciais do tempo são substituídas por derivadas convectivas superiores. A equação constitutiva para este modelo é dada através da seguinte expressão:

$$\boldsymbol{\tau}_{tot} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{tot} = 2\eta_0 \left(\mathbf{D} + \lambda_r \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (7)$$

onde λ e λ_r são, respectivamente, os tempos de relaxação e retardação do fluido, η_0 é a viscosidade do fluido correspondente à soma da viscosidade do polímero com a viscosidade do solvente, e $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor das tensões já definido em cima, onde τ satisfaz o modelo UCM. As viscosidades do polímero (η_p) e do solvente (η_s) estão relacionadas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \beta &= \eta_s / \eta_0 \\ \eta_0 &= \eta_s + \eta_p \\ \lambda_r &= (\eta_s / \eta_0) \lambda \end{aligned} \quad (8)$$

A relação constitutiva baseada no modelo de Oldroyd-B é equivalente a uma combinação linear do modelo UCM com o newtoniano. Se os tempos de relaxação e retardação forem iguais, então o modelo é equivalente ao modelo newtoniano. Se o tempo de retardação for igual a zero obtém-se o modelo UCM.

A equação constitutiva para um fluido PTT pode ser escrita da seguinte forma:

$$f(tr(\boldsymbol{\tau}))\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (9)$$

As duas expressões mais comuns para o modelo PTT são a forma linearizada [14] onde a função f é dada por:

$$f(tr(\boldsymbol{\tau})) = 1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta_p} tr(\boldsymbol{\tau}) \quad (10)$$

e a forma exponencial [15] onde a função f se escreve da seguinte forma:

$$f(tr(\boldsymbol{\tau})) = \exp\left(\frac{\varepsilon \lambda}{\eta_p} tr(\boldsymbol{\tau})\right) \quad (11)$$

Em ambas as formas o parâmetro ε está relacionado com o carácter extensional do modelo e tr é o operador traço. Note-se que a forma linear resulta da forma exponencial quando o traço do tensor das tensões é pequeno. Note-se ainda que este modelo degenera no modelo Oldroyd-B quando $\varepsilon=0$ e no modelo UCM se $\eta_s=\varepsilon=0$.

Os modelos da família FENE têm todos uma base molecular e são desenvolvidos a partir da teoria cinética [16]. Neste modelo a tensão e o tensor conformação \mathbf{A} estão relacionados da

seguinte forma:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta_p f(\mathbf{A})}{\lambda} (\mathbf{A} - g(\mathbf{A})\mathbf{I}) \quad (12)$$

As funções $f(\mathbf{A})$ e $g(\mathbf{A})$ representam a força da mola no modelo molecular e o efeito reofluidificante na viscosidade, respectivamente. Para um fluido com viscosidade constante e com extensibilidade da mola infinita tem-se $f=g=1$ e é fácil mostrar que se obtém o modelo Oldroyd-B. Para um fluido com extensibilidade da mola finita é comum usar-se a aproximação de Peterlin para f :

$$f = \frac{L^2}{(L^2 - tr(\mathbf{A}))} \quad (13)$$

onde L^2 é o parâmetro de extensibilidade que mede os efeitos elongacionais. Neste caso, a condição de viscosidade constante ($g=1$) origina o modelo FENE-CR. Se for efectuada a simplificação $Df(\mathbf{A})/Dt \approx 0$, obtém-se uma equação implícita para $\boldsymbol{\tau}$.

$$\boldsymbol{\tau} + \frac{\lambda}{f(\boldsymbol{\tau})} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (14)$$

$$f(\boldsymbol{\tau}) = \frac{L^2 + \left(\frac{\lambda}{\eta_p} \right)}{L^2 - 3} tr(\boldsymbol{\tau}) \quad (15)$$

permitindo trabalhar directamente com $\boldsymbol{\tau}$ sem recorrer ao tensor \mathbf{A} . Este modelo é conhecido como modelo Chilcott-Rallison modificado (FENE-MCR). Em escoamentos estacionários simples, a reologia é idêntica ao do modelo original do fluido de Chilcott-Rallison, mas se for definido um tempo de relaxação efectivo como $\lambda(\dot{\gamma}) \equiv \lambda/f(tr(\boldsymbol{\tau}))$, verifica-se que $\lambda(\dot{\gamma})$ diminui com o aumento de $tr(\boldsymbol{\tau})$, apresentando um efeito reofluidificante para a primeira diferença de tensões normais. Quando o parâmetro de extensibilidade L^2 tende para infinito, $\lambda(\dot{\gamma}) \rightarrow \lambda$, o modelo Oldroyd-B reaparece.

3 MÉTODO NUMÉRICO

Tal como já tinha sido apontado na introdução, o programa de computador que está a ser utilizado para resolver o problema do “escoamento de arranque” plano de Poiseuille é baseado no método dos volumes finitos. As equações da conservação e a equação constitutiva são transformadas usando um sistema de coordenadas generalizadas e são depois discretizadas numa malha colocada usando este método.

A discretização espacial ocorre por integração nos volumes de controlo (VC) que

compõem a malha computacional e a discretização temporal ocorre por integração num passo de tempo (Δt). Todas as variáveis são calculadas nos centros dos VC e são requeridos procedimentos especiais para assegurar o acoplamento da pressão/velocidade (de acordo com o método de Rhie e Chow [17]) e o acoplamento velocidade/tensão (de acordo com o método Oliveira *et al.* [18]).

As equações obtidas têm a forma geral:

$$a^\phi_P \phi_P = \sum_F a^\phi_F \phi_F + S^\phi, \quad (16)$$

que deve ser resolvida para os componentes da velocidade ou da tensão ($\phi = \mathbf{u}$ ou $\boldsymbol{\tau}$). Nestas equações, a^ϕ_P e a^ϕ_F são os coeficientes que introduzem as influências convectivas e difusivas, S^ϕ é o termo fonte que reúne todos os termos que não são incluídos nos coeficientes, o índice P denota a célula em questão e F as suas células vizinhas. Na equação (16) verifica-se que os coeficientes a^τ_P e a^τ_F possuem apenas contribuições convectivas e existe um termo fonte dependente do próprio campo de tensões e de gradientes de velocidades. O problema que está a ser tratado neste trabalho torna-se mais fácil de resolver uma vez que os termos convectivos desaparecem devido à condição de escoamento completamente desenvolvido e por existir um gradiente de pressões uniforme. Todos os detalhes sobre o método numérico e a discretização espacial podem ser encontrados na literatura [7, 18]. Direcçionemos agora a nossa atenção sobre as alterações introduzidas no programa que lhe permitem resolver problemas de escoamentos não-estacionários.

Devido à natureza do tempo (coordenada de um-sentido), o método de solução avança no tempo passo a passo. O método aplicado no programa para integrar as equações diferenciais no tempo é um esquema de segunda ordem denominado “três níveis de tempo” [8]. Este método foi implementado a partir do método de Euler implícito para a discretização temporal, que é um método de primeira ordem. Desta forma, as alterações exigidas foram apenas sobre os coeficientes centrais das equações, a^ϕ_P , e sobre o termo fonte, S^ϕ , para além da necessidade de se guardarem os valores das variáveis dependentes nos tempos anteriores.

4 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O problema de referência que se pretende estudar é a geração de um escoamento de Poiseuille plano de um fluido viscoelástico. Este escoamento, que ocorre entre dois pratos paralelos, resulta da aplicação instantânea e espacialmente constante de um gradiente de pressão e é um problema inerentemente não-estacionário de cariz transitório.

O problema foi inicialmente estudado por Waters e King [11] que determinaram uma solução analítica quando este escoamento é aplicado a modelos constitutivos baseados nas equações de Maxwell e Oldroyd (modelos UCM e Oldroyd-B).

A análise aqui efectuada é válida para um canal bidimensional entre dois pratos paralelos, no plano (x, y), com y a representar a direcção transversa de acordo com a Figura 1.

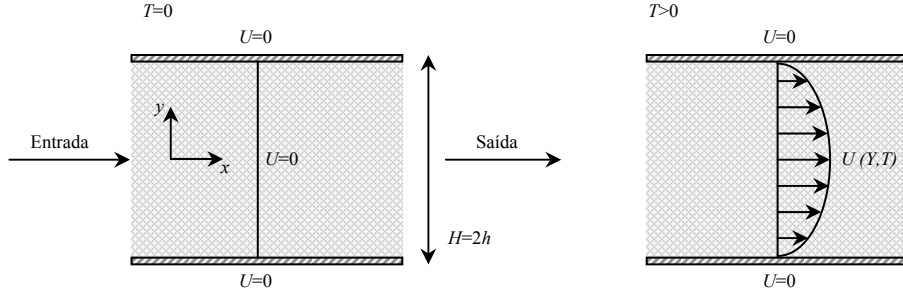


Figura 1. Representação esquemática da geometria onde o problema do “escoamento de arranque” plano de Poiseuille vai ser resolvido.

O objectivo é determinar a evolução da velocidade no canal à medida que o tempo passa e até que o regime estacionário é atingido.

Para o caso de um fluido newtoniano incompressível, a solução, tal como foi dada por Waters e King e retirada por Xue *et al.* [5], é dada pela seguinte expressão:

$$U(T, Y) = 1.5(1.0 - Y^2) - 48 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{Y+1}{2}\right) \times N}{N^3} e^{-\left(N^2 T/4\right)} \quad (17)$$

onde $T = t/(\rho h^2/\eta_0)$.

No caso de um fluido viscoelástico a solução obtida é a seguinte:

$$U(T, Y) = 1.5(1.0 - Y^2) - 48 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{Y+1}{2}\right) \times N}{N^3} e^{-\left(\alpha_n T/2\right)} G(T) \quad (18)$$

onde

$$G(T) = \cosh\left(\frac{\beta_n T}{2}\right) + \frac{\gamma_n}{\beta_n} \sinh\left(\frac{\beta_n T}{2}\right) \quad (19)$$

$$U(T, Y) = \frac{u(t, y)}{\bar{U}}, \quad \bar{U} = \frac{h^2 C}{3\eta_0}, \quad T = \frac{t}{\lambda}, \quad N = (2n-1)\pi, \quad Y = \frac{y}{h} \quad (20)$$

e

$$\alpha_n = 1 + \frac{\beta E N^2}{4}, \quad \beta_n = \sqrt{\alpha_n^2 - E N^2}, \quad \gamma_n = 1 - \frac{(2 - \beta) E N^2}{4}.$$

A normalização para a distância é feita em relação a metade da distância entre os dois pratos, h , para a velocidade é feita em relação à velocidade média da linha central, \bar{U} , e para o tempo é feita com o tempo de relaxação λ . C é o gradiente de pressão imposto e E é o número de elasticidade. Este número relaciona os números de Weissenberg (We) e Reynolds (Re) que

são definidos da seguinte forma:

$$E = \frac{We}{Re}, \quad We = \frac{\lambda \bar{U}}{h}, \quad Re = \frac{\rho \bar{U} h}{\eta_0} \quad (21)$$

Quando $\alpha_n^2 - EN^2 < 0$, a função $G(T)$ transforma-se em:

$$G(T) = \cos\left(\frac{\beta_n T}{2}\right) + \frac{\gamma_n}{\beta_n} \sin\left(\frac{\beta_n T}{2}\right) \quad (22)$$

onde agora $\beta_n = \sqrt{EN^2 - \alpha_n^2}$.

Note-se que o modelo UCM é obtido colocando $\beta=0$ na solução dada em cima. Esta variável representa a relação entre as viscosidades do solvente e do polímero e já foi descrita na equação (8).

No caso que está a ser estudado, e remetendo para a Figura 1, a distância entre os dois pratos paralelos é 2 ($2xh$, onde h é 1) e o gradiente não-dimensional de pressão (-3) é subitamente imposto ao longo da direcção principal sobre o fluido em repouso ($T=0$). A aplicação deste gradiente de pressão origina o escoamento do fluido.

Em todos os cálculos efectuados, salvo indicação em contrário, foram utilizadas malhas com 100 VC uniformes de maneira a discretizar o domínio na direcção transversa, ou seja, $\Delta y=0.01$. Os cálculos numéricos foram corridos para valores diferentes do número de elasticidade ($E=1, 10$ e 100).

Para avaliar a precisão das soluções em relação ao tempo, calculou-se o erro $e(T)$ da velocidade axial normalizada, $U(T,Y)$, através da norma Euclidiana tal como se mostra na equação (23).

$$e(T) = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_i (U_\Delta(Y_i, T) - U(Y_i, T))^2} \quad (23)$$

O erro devido à discretização do domínio físico foi calculado de forma semelhante. Na expressão através da qual o erro é calculado, $U_\Delta(Y_i, T)$ define as previsões numéricas na malha Δy .

5 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Nesta secção, inicialmente, apresentam-se os resultados correspondentes a um fluido newtoniano para comparação com os dados seguintes; de seguida analisa-se o modelo UCM em relação ao qual são discutidas as precisões temporal e espacial. A análise é então estendida aos modelos Oldroyd-B, PTT e FENE-MCR.

5.1 “Escoamento de arranque” plano de Poiseuille de um fluido newtoniano

O programa foi utilizado para simular o escoamento de um fluido newtoniano. A malha

usada tinha 100 VC na direcção y , o que significa que $\Delta y = 0.01$. Assumindo valores normalizados, considera-se que a altura do canal é $H = 2h = 2$, o gradiente de pressão $dp/dx = -3$, a densidade constante $\rho = 1$ e as viscosidades dinâmica e cinemática $\eta = \nu = 1$.

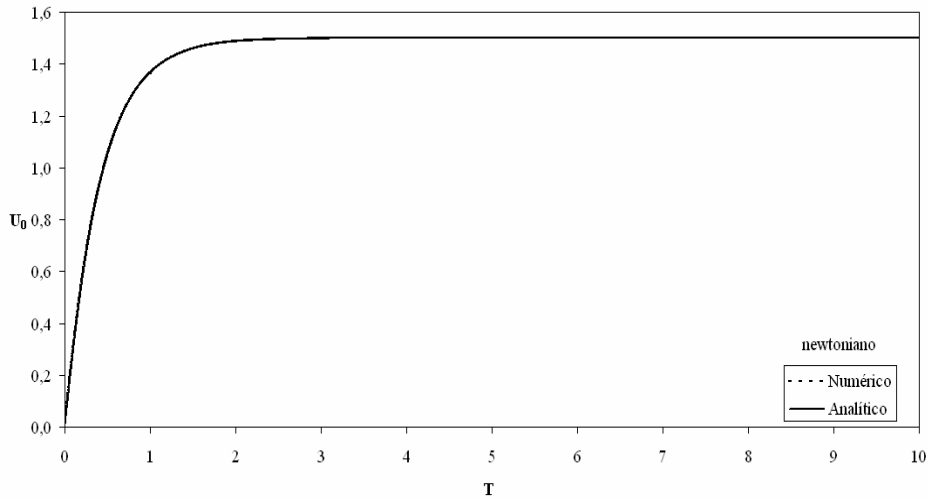


Figura 2. Evolução da velocidade da linha central com o tempo durante o “escoamento de arranque” plano de Poiseuille para um fluido newtoniano ($\Delta T = 1.00 \times 10^{-3}$; $\Delta y = 0.01$).

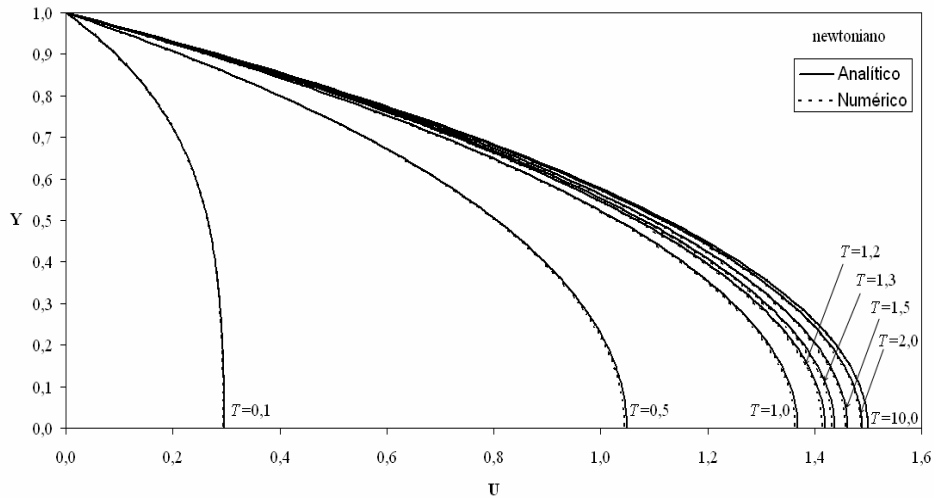


Figura 3. Perfis de velocidade para o caso fluido newtoniano calculados para tempos diferentes ($\Delta T = 1.00 \times 10^{-3}$; $\Delta y = 0.01$).

Com estes valores, obtém-se, no regime estacionário, uma velocidade média igual a 1 e uma velocidade máxima (na linha central do canal) igual a 1.5.

Na Figura 2 pode-se observar a evolução da velocidade da linha central durante o “escoamento de arranque” plano de Poiseuille para um fluido newtoniano ao longo do

tempo. Os resultados numéricos ajustam-se bem à curva analítica obtida através da equação (17). Neste caso, o passo no tempo, ΔT , usado foi de 1.00×10^{-3} . Para passos no tempo maiores do que este, a resposta do programa continua a ser boa. Isto deve-se ao uso do esquema temporal de segunda ordem dos “três níveis de tempo”.

Na Figura 3 apresentam-se ainda diversos perfis de velocidade obtidos em tempos não-dimensionais diferentes. Verifica-se mais uma vez que os resultados numéricos obtidos estão bastante próximos dos resultados analíticos. Apresenta-se apenas metade do perfil porque os cálculos foram obtidos com metade da geometria para poupar tempo computacional.

5.2 “Escoamento de arranque” plano de Poiseuille de um fluido UCM

Nesta secção considera-se o fluido UCM que é um fluido puramente elástico, situação obtida quando se coloca $\beta=0$. Inicialmente analisou-se o erro de discretização espacial que foi determinado usando três malhas computacionais com 50 (Malha1), 100 (Malha2) e 200 (Malha3) VC uniformes usados para discretizar o domínio do escoamento ao longo da direcção y . Foram efectuadas diversas corridas para valores diferentes do número de elasticidade e a Tabela 1 apresenta os resultados do erro de discretização espacial (multiplicado por 10^{-4}), obtidos considerando um número de elasticidade, E , igual a 1.

	Malha1	Malha2	Malha3
$T=0.01$	5.91	2.51	1.41
$T=0.02$	6.61	2.53	1.45
$T=0.03$	7.32	3.82	2.23
$T=0.05$	9.68	3.40	1.53
$T=0.1$	11.9	3.76	1.62
$T=0.8$	16.6	5.18	1.86
$T=1.0$	16.7	5.19	1.78
$T=1.2$	16.7	4.76	1.55
$T=20.0$	0.376	0.239	0.169

Tabela 1. Erros ($e(T) \times 10^{-4}$) calculados de acordo com a equação (23) para alguns tempos não-dimensionais e para três malhas diferentes ($E=1$, $\Delta T=1.25 \times 10^{-3}$).

Verifica-se que à medida que a malha vai ficando mais fina o erro diminui, e que os erros determinados são bastante pequenos com ordem de grandeza 10^{-4} . Tendo em conta estes resultados resolveu usar-se a Malha2 ao longo de todo o trabalho por oferecer bons resultados a nível de precisão e tempo computacional.

Avaliou-se ainda o efeito do passo no tempo usado para os diferentes valores do número de elasticidade usando sempre a Malha2 com 100 VC. Observe-se o caso de $E=1$ (Figura 4). O escoamento do fluido foi simulado para diversos passos no tempo começando por $\Delta T=0.01$ e dividindo este valor por 2 até se obter um passo no tempo de 1.25×10^{-3} . Os erros determinados para diversos tempos não-dimensionais são apresentados na Tabela 2.

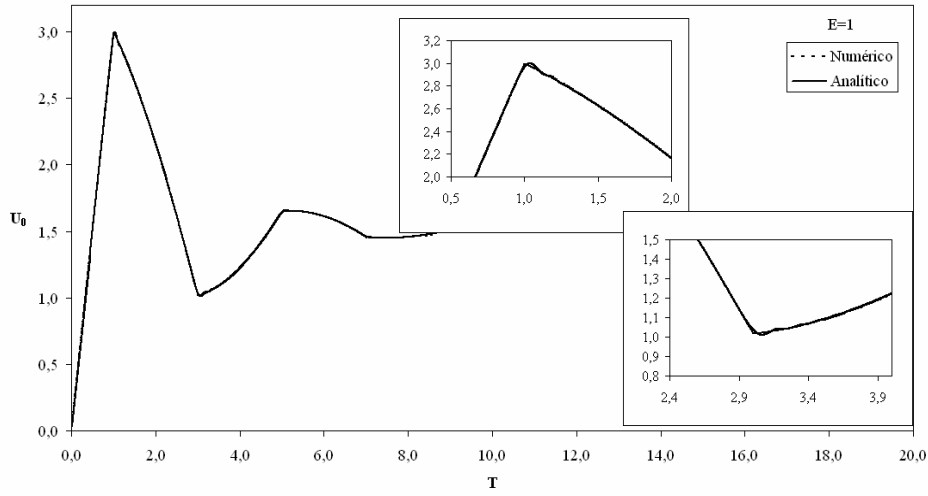


Figura 4. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido UCM ($\Delta T=1.25 \times 10^{-3}$, $E=1$) e gráficos locais para comparação da solução analítica com os resultados numéricos em duas zonas.

	$\Delta T=1 \times 10^{-2}$	$\Delta T=5 \times 10^{-3}$	$\Delta T=2.5 \times 10^{-3}$	$\Delta T=1.25 \times 10^{-3}$
$T=0.02$	13.5	7.62	4.12	2.53
$T=1.0$	8.69	6.03	5.22	5.19
$T=5.2$	2.27	1.68	1.61	1.62
$T=20.0$	0.298	0.290	0.275	0.239

Tabela 2. Erros ($e(T) \times 10^{-4}$) calculados de acordo com a equação (23) para alguns tempos não-dimensionais e para passos no tempo diferentes ($E=1$, $\Delta y=0.01$).

Da Tabela 2 verifica-se que os erros são da ordem de grandeza de 10^{-4} apresentando bastante precisão. À medida que o passo no tempo se vai tornando mais pequeno o erro diminui. Em todos os cálculos efectuados para $E=1$ foi usada a Malha2 uma vez que foi a malha seleccionada aquando da análise do erro de discretização espacial.

Através da análise da Figura 4 verifica-se que há uma boa concordância entre os resultados numéricos e os dados da solução teórica. Por comparação com os resultados obtidos para o fluido newtoniano observa-se uma resposta oscilatória da velocidade face à aplicação instantânea do gradiente de pressão. A partir dos gráficos locais podem ainda observar-se pequenas oscilações de origem numérica. Estas oscilações ocorrem nas zonas de descontinuidade da derivada temporal da velocidade nos picos das oscilações. Portanto, as soluções analítica e numérica são concordantes excepto na vizinhança desses pontos. Verificou-se que as oscilações de origem numérica aumentam quando o passo no tempo usado diminui ainda que a resposta numérica, neste caso, esteja mais próxima da que é dada teoricamente.

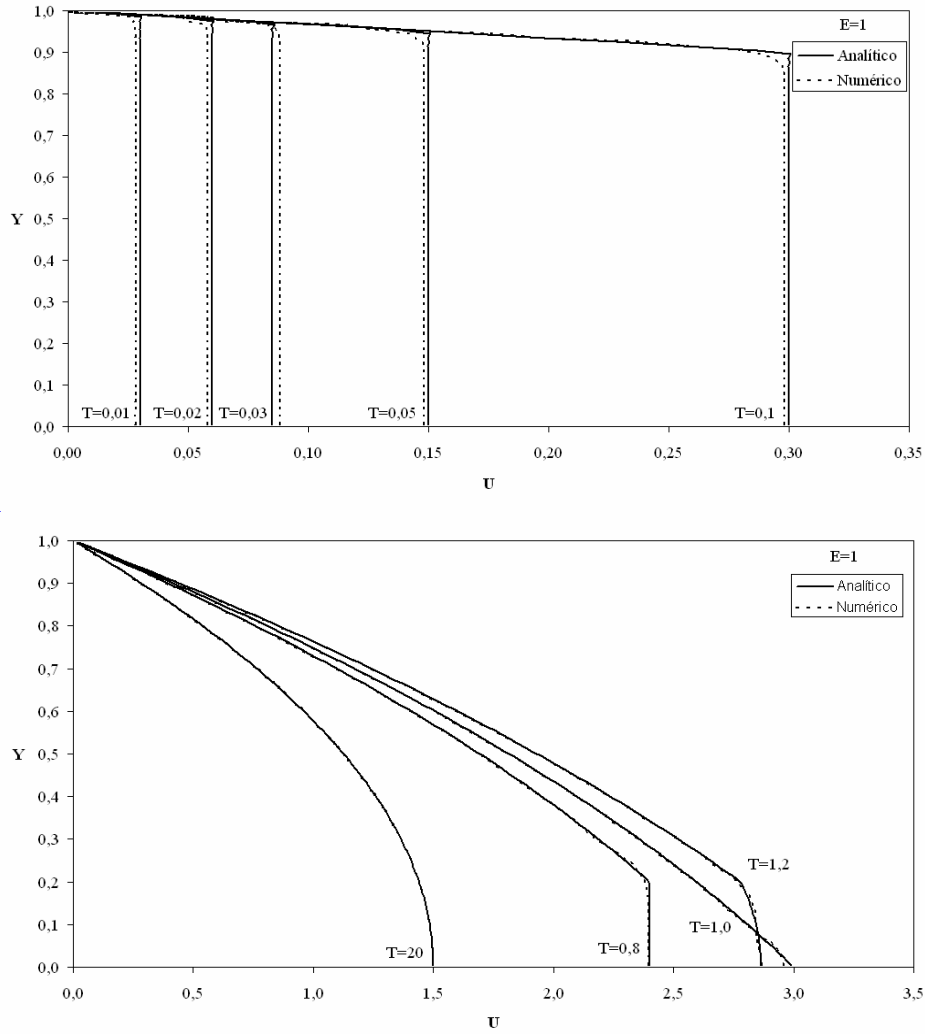


Figura 5. Perfis de velocidade para o caso do fluido UCM calculados para tempos diferentes ($E=1$, $\Delta T=1.25 \times 10^{-3}$, $\Delta y=0.01$).

Na Figura 5 podem-se observar ainda alguns perfis da velocidade obtidos na linha central para diferentes tempos não-dimensionais: (1) logo a seguir à aplicação do gradiente de pressão ($T=0.01-0.1$), (2) durante o primeiro pico ($T=0.8-1.2$) e (3) quando o escoamento se torna estacionário ($T=20$).

Analisa-se de seguida as respostas da velocidade na linha central durante o “escoamento de arranque” para um fluido UCM e números de elasticidade 10 e 100. Para ambos os casos usou-se a Malha2 e $\Delta T=1.25 \times 10^{-4}$ e 2.5×10^{-5} respectivamente.

O aumento do número de elasticidade origina um aumento da frequência e amplitude oscilatórias, como se pode observar nas Figuras 6 e 7 na página seguinte. Mais uma vez se pode verificar que a resposta analítica é reproduzida pela previsão numérica. Dentro de cada gráfico é apresentado um gráfico local correspondente ao primeiro pico para melhor

se identificarem as discrepâncias já discutidas para o caso $E=1$. Verifica-se que com o passar do tempo o erro na frequência torna-se cada vez maior e coloca-se em evidência uma resposta fictícia devido ao erro de fase. A diferença de fase diminui com a diminuição do passo no tempo usado.

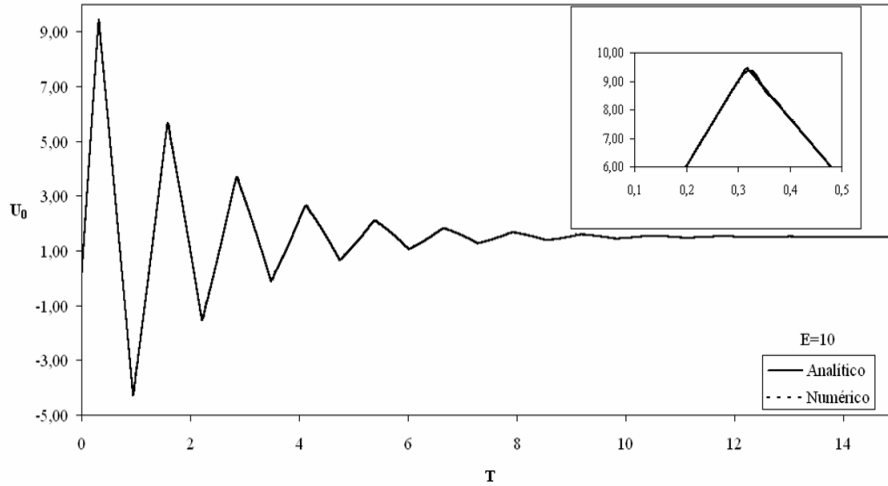


Figura 6. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido UCM ($\Delta T=1.25 \times 10^{-4}$, $E=10$) e gráfico local para uma melhor comparação da solução analítica com os resultados numéricos.

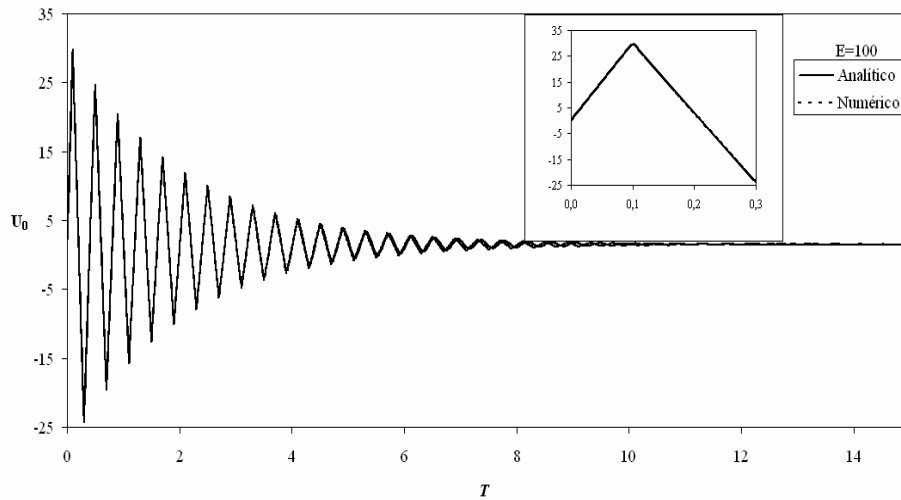


Figura 7. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido UCM ($\Delta T=2.5 \times 10^{-5}$, $E=100$) e gráfico local para uma melhor comparação da solução analítica com os resultados numéricos.

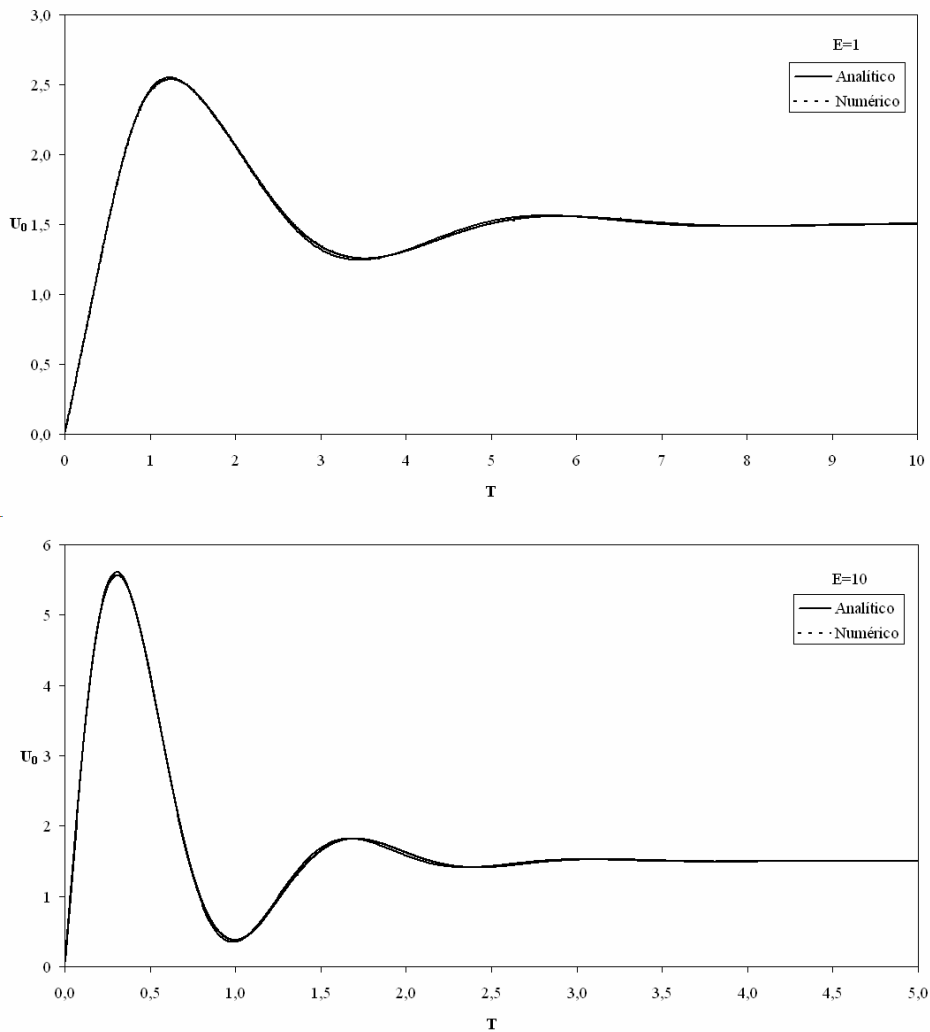
5.3 “Escoamento de arranque” plano de Poiseuille de um fluido Oldroyd-B

Nesta secção são apresentados os resultados obtidos para o “escoamento de arranque”

plano de Poiseuille para um fluido Oldroyd-B. Para todos os cálculos vai ser usada a Malha2 ($\Delta y=0.01$) e serão utilizados os melhores passos no tempo (determinados na secção anterior) que variam com o número de elasticidade.

Na Figura 8 pode-se observar a comparação dos perfis temporais analítico e numérico para $E=1, 10$ e 100 e $\beta=1/9$ que é um valor comum usado em problemas de referência. Como se pode observar, existe uma boa concordância entre a solução analítica e as previsões numéricas.

O perfil de variação temporal da velocidade na linha central é claramente diferente do obtido para o fluido UCM. Ao contrário deste fluido, a equação da quantidade de movimento de um fluido Oldroyd-B inclui um termo equivalente à viscosidade newtoniana.



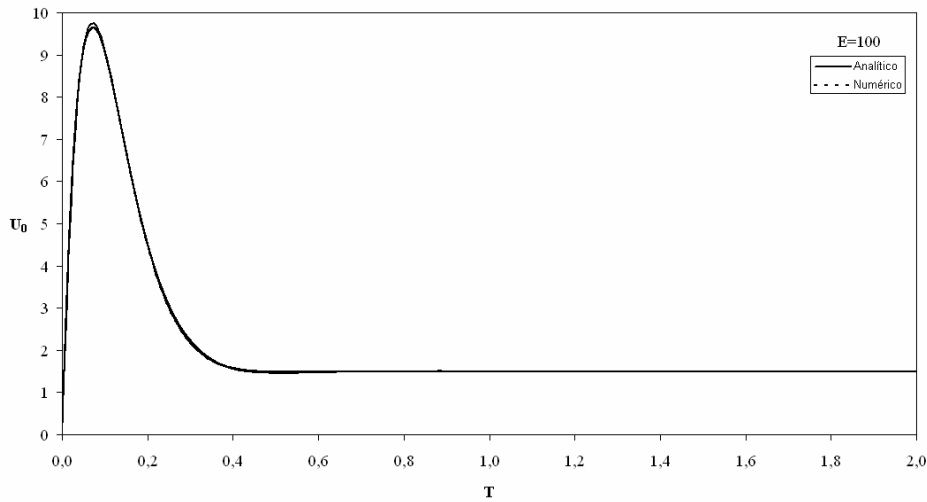


Figura 8. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido Oldroyd-B ($\beta=1/9$); De cima para baixo tem-se $E=1, 10$ e 100 ($\Delta T=1.25 \times 10^{-3}, 1.25 \times 10^{-4}$ e 2.5×10^{-5} respectivamente; $\Delta y=0.01$).

Desta forma, a velocidade de propagação de perturbações de tensão é infinita e as pequenas oscilações numéricas observadas anteriormente para o fluido UCM, junto aos picos abruptos não são observadas. Observa-se um desenvolvimento suave da evolução transiente e da variação espacial do campo do escoamento que é devido à introdução de difusão física pela viscosidade do solvente.

5.4 “Escoamento de arranque” plano de Poiseuille dos fluidos PTT e FENE-MCR

Nesta secção são investigados numericamente os “escoamentos de arranque” planos de Poiseuille para os fluidos PTT e FENE-MCR e são comparados com os resultados obtidos para os fluidos UCM e Oldroyd-B.

Na Figura 9 são apresentados os resultados numéricos do “escoamento de arranque” de Poiseuille para um fluido PTT (sem viscosidade de solvente). Como o fluido PTT (desprovido de solvente) é um fluido puramente elástico, o comportamento observado é semelhante ao encontrado para o fluido UCM no que se refere à resposta da velocidade depois do arranque do escoamento e antes da frente da onda de corte chegar à linha central. Contudo, devido ao efeito reofluidificante implícito neste modelo, o estado estacionário é atingido mais cedo.

Analisou-se ainda o efeito do parâmetro de extensibilidade na evolução da velocidade ao longo do tempo e pode ser observado na Figura 10 que é relativa a um número de elasticidade 10 e $\varepsilon=0.1$ e 0.3. Observa-se que à medida que o valor de ε cresce, o modelo PTT distancia-se do modelo UCM e obtém-se um carácter mais suave. Para valores mais pequenos de ε as oscilações tornam-se mais acentuadas. Chama-se a atenção que a velocidade na Figura 10 continua adimensionalizada com a velocidade média no canal correspondente ao fluido newtoniano; devido ao efeito reofluidificante, a velocidade

média do PTT assume valores superiores.

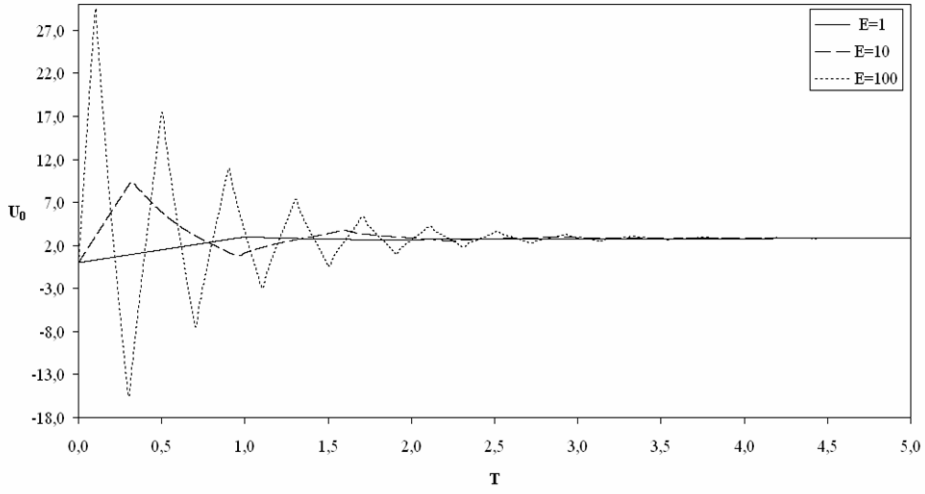


Figura 9. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido PTT; $E=1$, 10 e 100 ($\Delta T=1.25 \times 10^{-3}$, 1.25×10^{-4} e 2.5×10^{-5} respectivamente, $\Delta y=0.01$).

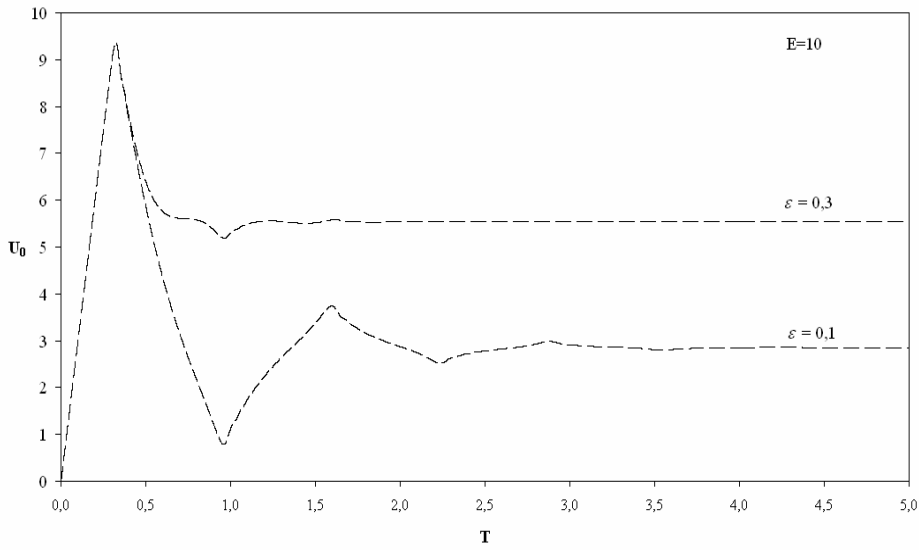


Figura 10. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido PTT para $E=10$ variando o parâmetro ε .

Finalmente, apresentam-se os resultados referentes aos cálculos numéricos do “escoamento de arranque” plano de Poiseuille para um fluido FENE-MCR.

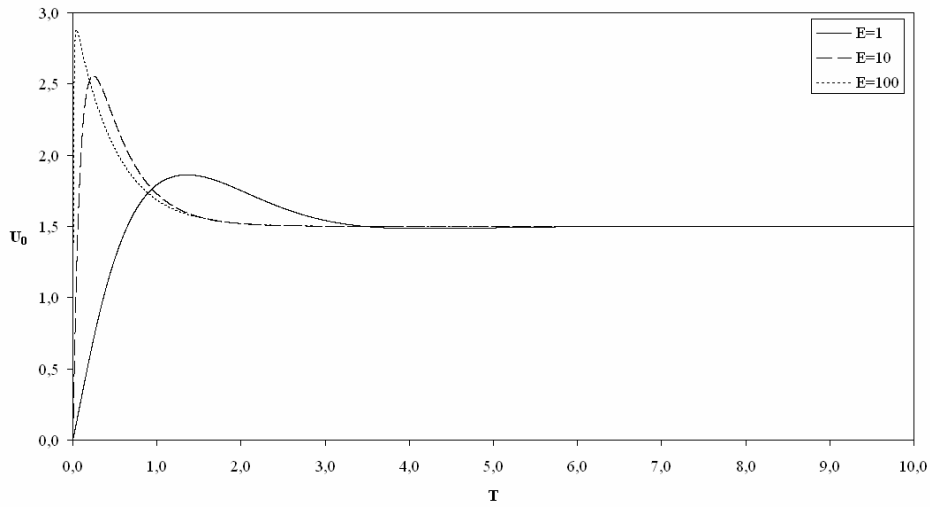


Figura 11. Evolução da velocidade da linha central com o tempo para um fluido FENE-MCR; $E=1, 10$ e 100 ($\Delta T=1.25 \times 10^{-3}, 1.25 \times 10^{-4}$ e 2.5×10^{-5} respectivamente, $\Delta y=0.01$).

Neste caso, são comparados perfis temporais de velocidade obtidos para números de elasticidade 1, 10 e 100 usando um parâmetro de extensibilidade, L^2 , igual a 100 que é um valor comum usado em diversos problemas de referência, e um valor de β igual a 0.5 o que significa que as viscosidades de polímero e de solvente existem na mesma proporção.

Através da Figura 11 é possível observar que está patente um desenvolvimento suave da evolução da velocidade fazendo lembrar os resultados obtidos para o fluido Oldroyd-B. Apesar do valor de β ser maior neste caso, a existência de uma certa quantidade de solvente leva a uma redução na frequência da função e a uma atenuação quase imediata após o primeiro pico da oscilação, cuja magnitude aumenta com o número de elasticidade E .

6 CONCLUSÕES

Foi discutida a modelação numérica de escoamentos viscoelásticos dependentes do tempo no contexto do método dos volumes finitos. Seguem agora as conclusões mais importantes a retirar do estudo efectuado:

- O programa de simulação numérica utilizado descreve com precisão suficiente o comportamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos do tipo UCM e Oldroyd-B;
- Os erros de discretização foram minimizados através da escolha de um passo no tempo e refinamento de malha adequados;
- Fluido UCM: os previsões numéricas estão de acordo com a solução teórica excepto na vizinhança das descontinuidades nos gradientes de velocidade;
- Fluido Oldroyd-B: Não há dificuldade na aplicação do programa de simulação para este tipo de fluido
- Fluido PTT: comportamento semelhante ao do fluido UCM mas devido ao efeito

reofluidificante o estado estacionário é atingido mais rapidamente;

- Fluido FENE-MCR: comportamento semelhante ao do fluido Oldroyd-B, ocorrendo contudo uma redução na frequência da função e uma amplitude menor com redução do pico da velocidade.

REFERÊNCIAS

- [1] R. Keunings, *Simulation of viscoelastic flow*, em C.L. Tucker (Ed), Computer Modelling for Polymer processing, Hanser, Munique, 1989.
- [2] F.T.P. Baaijens, “Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **79**, pp. 361-385, (1998).
- [3] M.F. Webster, H.R. Tamaddon-Jahromi e M. Aboubacar, “Transient viscoelastic flows in planar contractions”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **118**, pp. 83-101, (2004).
- [4] T. Sato e S.M. Richardson, “Explicit numerical simulation of time-dependent viscoelastic flow problems by a finite-element/finite-volume method”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **51**, pp. 249-275, (1994).
- [5] S.-C. Xue, R.I. Tanner e N. Phan-Thien, “Numerical modelling of transient viscoelastic flows”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **123**, pp. 33-58, (2004).
- [6] G. Mompean e M. Deville, “Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **72**, pp. 253-279, (1997).
- [7] P.J. Oliveira, “Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: vortex shedding behind cylinder”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **101**, pp. 113-137, (2001).
- [8] J.H. Ferziger e M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.
- [9] F.M. White, *Fluid Mechanics*, McGraw-Hill, 1999.
- [10] N. Fiétier e M.O. Deville, “Time-dependent algorithms for the simulation of viscoelastic flows with spectral element methods: applications and stability”, *J. of Computational Physics* Vol. **186**, pp. 93-121, (2003).
- [11] N.D. Waters e M.J. King, “Unsteady flow of an elastico-viscous liquid”, *Rheologica Acta* Vol. **9**, pp. 345-355, (1970).
- [12] N. Phan-Thien e R.I. Tanner, “A new constitutive equation derived from network theory”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **2**, pp. 353-365, (1977).
- [13] M.D. Chilcott e J.M. Rallison, “Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **29**, pp. 381-432,

- (1988).
- [14] N. Phan-Thien, “A nonlinear network viscoelastic model”, *J. of Rheology* Vol. **22**, pp. 259-283, (1978).
 - [15] N. Phan-Thien e R.I. Tanner, “A new constitutive equation derived from network theory”, *J. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **2**, pp. 353-365, (1977).
 - [16] R.B. Bird, R.C. Armstrong e O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids: Volume II Kinetic Theory*, Jonh Wiley&Sons, New York, 1987.
 - [17] C.M. Rhie e W.L. Chow, “Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation”, *AIAA Journal* Vol. **21**, pp. 1525-1532, (1983).
 - [18] 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. of Non-Newtonian Fluid Mech.* Vol. **79**, pp. 1-43, (1998).