

FENÓMENO DA BIFURCAÇÃO EM EXPANSÕES PLANAS COM FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Gerardo N. Rocha* e Paulo J. Oliveira

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

Palavras-chave: Assimetria do escoamento, Modelo FENE-CR, Método dos Volumes Finitos, Fluido Viscoelástico, Expansão plana 1:4.

Resumo. *O objectivo principal deste trabalho numérico é analisar efeitos de viscoelasticidade na transição de um escoamento simétrico para outro assimétrico num canal plano com razão de expansão 1:4. O fluido viscoelástico segue o modelo FENE-CR e o estudo foi efectuado recorrendo ao método dos volumes finitos para resolver as equações que regem o escoamento. Foi utilizado o esquema de alta resolução CUBISTA para representar os termos convectivos das equações de transporte. Os resultados revelam que o efeito da elasticidade do fluido não newtoniano, provoca um atraso na transição do regime simétrico para o assimétrico estacionário, quando comparado com o caso newtoniano.*

1 INTRODUÇÃO

O escoamento de fluidos incompressíveis através de condutas com variação da secção transversal é um dos problemas clássicos que permitem estudar em detalhe a separação e o recolamento do escoamento. No caso de condutas planas, acontece que para um certo valor do número de Reynolds o escoamento desenvolve instabilidades que levam a que ocorra o fenómeno da bifurcação (assimetria do escoamento em geometrias simétricas). A importância da investigação deste fenómeno não-linear da bifurcação na mecânica de fluidos revela da possível interligação com o estudo da estabilidade hidrodinâmica e o mecanismo de transição do escoamento laminar para turbulento. Estudos da separação de escoamentos em expansões planas têm sido apresentados por diversos investigadores. Drikakis [1], Battaglia *et al.* [2], Rocha e Oliveira [3], entre outros, apresentaram estudos numéricos extensivos relativos à instabilidade do escoamento em expansões planas. Drikakis [1] analisa o fenómeno da bifurcação em diversas geometrias planas, para escoamentos estacionários, utilizando as equações de Navier-Stokes. Os resultados revelam que o escoamento é assimétrico a partir de um certo número de Reynolds, dependendo do valor da razão de expansão. Para uma razão de expansão 1:4, o valor do número de Reynolds crítico obtido é $Re_{cr} = 35.3$ (baseado na velocidade média U à entrada e altura do canal de entrada d). Para valores de Re acima do

número de Re_{cr} estamos na presença do fenómeno da bifurcação, com existência de 3 soluções possíveis e para valores inferiores o escoamento é simétrico. Os resultados numéricos apresentados por Drikakis [1] também revelam que à medida que aumenta a razão de expansão da geometria o número de Reynolds crítico diminui. Battaglia *et al.* [2] fazem o mesmo estudo para várias razões de expansão (entre 1.5 e 7) e apresentam conclusões semelhantes às verificadas no trabalho de Drikakis [1]. O número de Reynolds crítico obtido por estes autores, para uma razão de expansão 1:4, é de $Re_{cr} = 35.8$ para o fluido newtoniano. Existe assim concordância com os resultados obtidos por estes autores. Rocha e Oliveira [3] apresentam resultados numéricos para o escoamento newtoniano e viscoelástico numa expansão plana com razão de expansão 1:4. Os resultados conduzem a um número de Reynolds crítico de $Re_{cr} = 35.5$ para uma malha computacional com $\delta x_{min} = \delta y_{min} = 0.05$, valor que está em conformidade com os resultados apresentados anteriormente. Podemos também salientar que os resultados obtidos em [3] demonstram que existem diferenças na transição de escoamento simétrico para o escoamento assimétrico entre fluidos newtonianos e viscoelásticos. Constata-se que a presença de efeitos elásticos no fluido não newtoniano tende a atrasar o ponto de transição do regime simétrico para o assimétrico estacionário. Pretendemos com a elaboração do presente trabalho complementar os resultados já obtidos em trabalhos anteriores, relativos à bifurcação do escoamento para uma razão de expansão de 1:4 utilizando malhas computacionais mais refinadas.

O método numérico aplicado neste trabalho envolve a utilização do método dos volumes finitos (FVM) aplicado a uma malha computacional colocada, sendo todos os termos das equações de governo transformados em termos algébricos. As diferentes equações discretizadas para cada variável são resolvidas separadamente de forma sequencial e os termos convectivos são calculados através da aplicação de um esquema de alta resolução de terceira ordem.

2 EQUAÇÕES PRINCIPAIS DO ESCOAMENTO

Consideramos que o escoamento é isotérmico e bidimensional e se processa através de um canal com uma expansão plana. Devido a esta variação abrupta da secção transversal do canal aparecem duas zonas de recirculação a jusante da zona de expansão. O escoamento é predominantemente de corte (esc. de Couette) junto às paredes e extensional na zona central do canal.

O canal de entrada e saída do escoamento têm, respectivamente, alturas $d = 1$ e $D = 4$, quando normalizados com a altura do canal de entrada (d), o que corresponde a uma razão de expansão $E = D/d = 4$. A entrada do escoamento situa-se a uma distância $L_1 = 20$ a montante da expansão, e a saída a uma distância $L_2 = 50$ a jusante da expansão (normalizados com a altura do canal de entrada d), conforme esquematizado na Figura 1.

O escoamento é regido pelas equações de conservação da massa:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

e pela equação de conservação da quantidade de movimento:

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

onde nos termos com índices repetidos é aplicado a convenção de Einstein, ρ é a densidade do fluido (assumida constante) e u_i é a componente da velocidade segundo a direcção das coordenadas Cartesianas x_i . As variáveis dependentes são as componentes da velocidade u_i , a pressão p e as componentes do tensor das tensões τ_{ij} , sendo necessário a utilização de uma equação constitutiva reológica para a sua descrição. No caso de utilizarmos uma solução polimérica homogénea, o tensor das tensões (τ_{ij}) é decomposto na soma de uma parte devido ao solvente newtoniano e uma parte devida à solução polimérica ($\tau_{ij} = \tau_{ij,s} + \tau_{ij,p}$). Assim sendo, consideramos dois tipos de equações constitutivas. A primeira segue o modelo newtoniano e é expressa pela relação linear e explícita entre tensão e taxa de deformação do fluido, dada por:

$$\tau_{ij} = \eta_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

onde a viscosidade do solvente η_s é constante. A segunda equação constitutiva rege o comportamento viscoelástico e segue o modelo baseado na teoria cinética para moléculas com extensão elástica finita e não-linear (FENE) [4], segundo a proposta de Chilcott e Rallison [5] (modelo FENE-CR [5]). Este modelo tem a particularidade de incluir efeitos de elasticidade e de reofluidificação (“shear-thinning”) nas tensões normais, mas mantendo a viscosidade de corte (η_p) como constante. A equação diferencial a resolver para o tensor das tensões (usa-se $\tau_{ij,p} = \tau_{ij}$ para simplificar a escrita) é dada por:

$$\tau_{ij} + \frac{\lambda}{f(\tau)} \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} \right) = \eta_p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\lambda}{f(\tau)} \left(\tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (4)$$

com a função de extensibilidade $f(\tau)$ definida da seguinte forma:

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

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 do escoamento, proporcional ao quadrado da razão entre o comprimento das moléculas do polímero quando estão completamente estendidas e o seu comprimento em estado de equilíbrio.

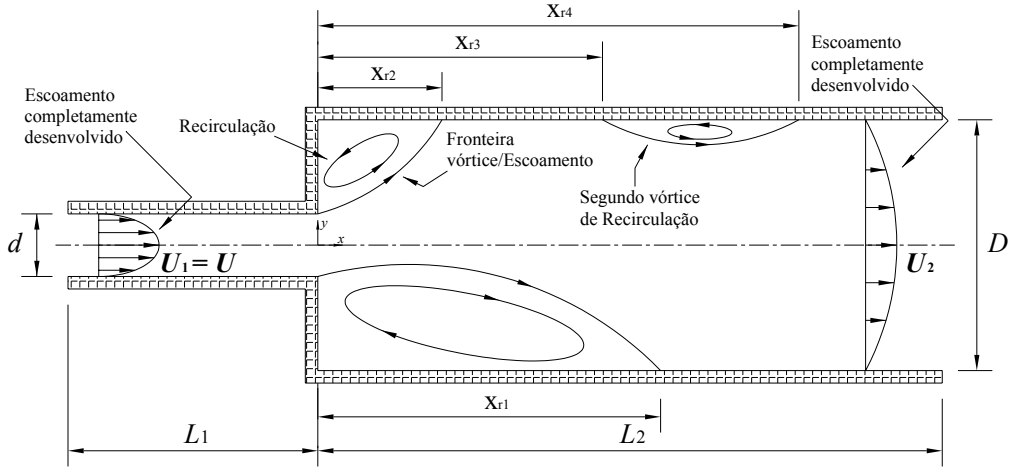


Figura 1. Configuração esquemática do canal com a representação de um escoamento assimétrico.

O modelo que é utilizado neste trabalho (FENE-MCR) apresenta uma simplificação em relação ao modelo proposto por Chilcott e Rallison [5]. A modificação consiste em desprezar o termo da derivada substantiva da função de extensibilidade $D(1/f)/Dt$ e o novo modelo denomina-se por FENE-CR Modificado. Podemos constatar que o modelo FENE-CR e FENE-MCR são praticamente idênticos quando utilizados em condições estacionárias e que eventuais diferenças só ocorrem onde o efeito do termo desprezado ($\mathbf{u} \cdot \nabla(1/f)$) é importante, por exemplo num escoamento com forte convecção local. O modelo reológico FENE-MCR foi utilizado em diversos trabalhos numéricos anteriores, tais como Oliveira [6] no estudo do escoamento viscoelástico através de uma expansão plana com razão 1:3 e Rocha e Oliveira [3] também no estudo do escoamento viscoelástico numa expansão plana de 1:4. Os resultados desses trabalhos serão utilizados para complementar o presente estudo.

Por forma a utilizarmos variáveis adimensionais, as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, juntamente com a equação constitutiva, são transformadas nas equações adimensionais dadas de seguida:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (6)$$

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\beta}{Re} \cdot \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (7)$$

$$\tau_{ij} + \frac{We}{f(\tau)} \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} \right) = \frac{1-\beta}{Re} \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{We}{f(\tau)} \left(\tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \quad (8)$$

e a função de extensibilidade adimensional $f(\tau)$ é expressa por:

$$f(\tau) = \frac{L^2 + (1 - \beta) \cdot We \cdot Re \cdot tr(\tau_{ij})}{L^2 - 3} \quad (9)$$

As equações anteriores foram adimensionalizadas tendo em conta as seguintes variáveis adimensionais:

$$\begin{aligned} u_i &= \frac{\bar{u}_i}{U}, & x_i &= \frac{\bar{x}_i}{d}, & t &= \frac{\bar{t}}{d/U} \\ p &= \frac{\bar{p}}{\rho U^2}, & \tau_{ij} &= \frac{\bar{\tau}_{ij}}{\rho U^2} \end{aligned} \quad (10)$$

onde as variáveis com um traço superior são dimensionais (Eqs. (1) – (5)), e U e d correspondem à velocidade média e altura do canal de entrada, respectivamente, conforme indicado na Fig. 1.

Os parâmetros independentes adimensionais utilizados neste trabalho são:

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

3 MÉTODO NUMÉRICO (DISCRETIZAÇÃO)

O método numérico utilizado neste trabalho é o método dos volumes finitos (FVM) aplicado a uma malha não-deslocada, como podemos ver na Figura 2 (a). Para maiores detalhes sobre este método numérico consultar Ref. [7]. As equações de conservação da massa e da quantidade de movimento e a equação constitutiva são discretizadas espacialmente por integração em volumes de controlo (células, com volume V_P) que compõem a malha computacional, e temporalmente por integração num passo no tempo δt . Este método numérico garante que a massa e a quantidade de movimento são conservados em qualquer um dos volumes de controlo e também em todo o domínio de cálculo. A malha utilizada neste trabalho é ortogonal e de “nós-centrados”, isto é, os nós estão situados no centro dos volumes de controlo (VC), conforme apresentado na Figura 2 (b). O processo de discretização resulta num conjunto de equações algébricas linearizadas para as equações de conservação juntamente com a equação constitutiva reológica. Uma vez que todas as variáveis são calculadas nos centros dos volumes de controlo, são necessários

alguns procedimentos especiais por forma a podermos assegurar o acoplamento da pressão/velocidade (segundo o método de Rhie e Chow [8]) e o acoplamento da velocidade/tensão (segundo o método de Oliveira *et al.* [9]).

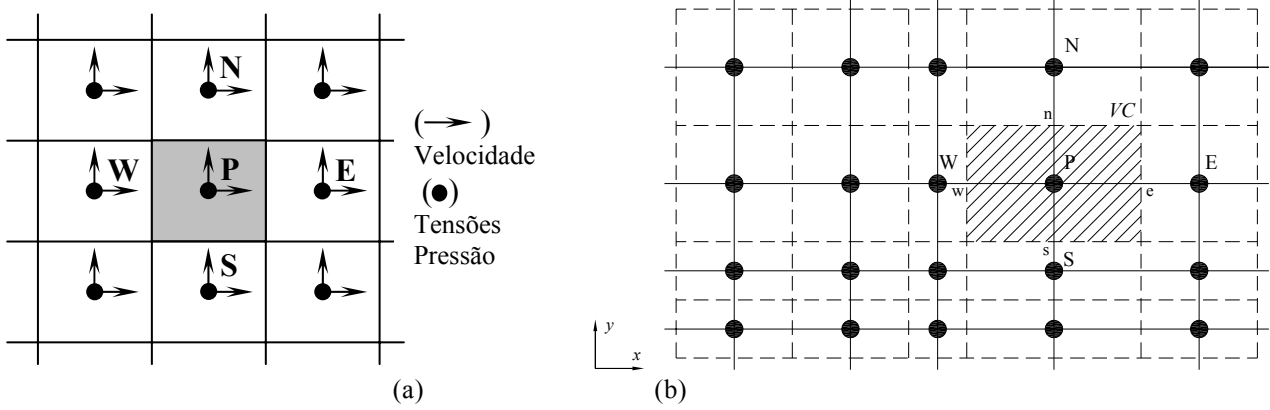


Figura 2. a) Malha não-deslocada. Localização dos nós onde são calculados as componentes de velocidade, das tensões e da pressão. b) Malha de “nós-centrados”.

A equação de conservação da massa (Eq. (1)), na forma discretizada, é dada pela seguinte equação algébrica:

$$\sum_f F_f = 0 \quad (11)$$

onde F_f representa o fluxo de massa que deixa a célula em questão através da sua face f (para o caso bidimensional $f = 1, 2, 3$ e 4 , segundo a orientação “este - e”, “oeste - w”, “norte - n” e “sul - s” do volume de controlo, respectivamente (ver Fig. 2 (b)).

A forma discretizada da equação algébrica correspondente à conservação da quantidade de movimento (Eq. (2)) é dada por:

$$a_P \mathbf{u}_P = \sum_F a_F \mathbf{u}_F + S_P(p) + S_{HRS}(\mathbf{u}) + S_{Difusao}(\mathbf{u}) + S_\tau(\boldsymbol{\tau}) + \frac{\rho V_P}{\delta t} \mathbf{u}_P^n \quad (12)$$

onde o índice P representa qualquer VC , o índice F corresponde aos VC vizinhos, os termos a_P e a_F são os coeficientes (que incluem os efeitos convectivos e difusivos) e o índice n corresponde ao nível temporal (ou iterativo) anterior. Os termos S (no segundo membro da Eq. (12)) representam, sucessivamente, o efeito devido à pressão, o efeito devido ao esquema de alta resolução (esquema CUBISTA[10]), o efeito devido ao termo difusivo artificial (explícito) que é incorporado na equação por forma a garantir a estabilidade do método quando é aplicado a equações de transporte (consultar Ref. [9]), o efeito devido às tensões elásticas ($\boldsymbol{\tau}$) e o termo inercial resultante da derivação temporal da equação da quantidade de movimento. Uma vez que apenas estamos na presença de escoamentos estacionários (as soluções finais não variam com o tempo) o último termo do segundo membro da Eq. (12) (termo inercial) é utilizado de forma equivalente a uma

subrelaxação das equações.

A forma linearizada da equação algébrica discretizada da equação constitutiva vai ser semelhante à equação de conservação da quantidade de movimento (Eq. (12)) e é dada por:

$$a_p^\tau \tau_p = \sum_F a_F^\tau \tau_F + S^\tau(\tau, \nabla \mathbf{u}) + S_{HRS}^\tau(\tau) + \frac{\lambda_p V_p}{f(\tau_p) \delta t} \tau_p^n \quad (13)$$

As principais diferenças entre a equação anterior (Eq. (13)) e a equação de conservação da quantidade de movimento (Eq. (12)) 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. Nas equações discretizadas (12) e (13) os coeficientes contêm termos difusivos aproximados através de diferenças centrais e termos convectivos nos quais as interpolações necessárias à obtenção de valores nas faces das células são calculadas pelo esquema “*upwind*”. Os termos que requerem maior atenção e que necessitam de tratamento especial são os termos convectivos. Para o cálculo destes termos utilizamos o esquema de alta-resolução CUBISTA proposto por Alves *et al.* [10], que é de terceira ordem no espaço e que possui, simultaneamente, uma elevada precisão numérica e boas características de convergência. Este esquema de resolução é implementado explicitamente através de um processo de correcção diferida desenvolvido por Khosla e Rubin [11]. Posteriormente, as equações discretizadas são resolvidas utilizando uma forma modificada do algoritmo SIMPLEC proposto por Van Doormal e Raithby [12]. Este algoritmo permite, através de um processo de correcção de pressão, garantir ligação dos campos de velocidade e de pressão, por forma a verificar a equação da continuidade. Como estamos na presença de fluidos não newtonianos viscoelásticos é necessário resolver uma equação constitutiva reológica, tal como referida anteriormente, implicando a introdução de dois novos passos na parte inicial do algoritmo, relacionados com o cálculo do tensor das tensões, tal como descrito na Ref. [9], e que são os seguintes:

- As componentes da tensão τ_{ij}^* (que corresponde a um valor intermédio (imperfeito) e que ainda não é solução do problema), são obtidas por resolução das Eqs. (13) através de um método iterativo (gradientes conjugados), esses valores são necessários antes de ser usada a equação de conservação da quantidade de movimento.
- Seguidamente, a equação de conservação da quantidade de movimento é resolvida implicitamente para cada componente da velocidade (u^* , v^* e w^*), com as tensões obtidas no passo anterior incluídas no termo fonte. O ponto importante neste passo prende-se com a obtenção do valor da tensão na face da célula, sendo necessário recorrer à aplicação de um método de interpolação especial, proposto por Oliveira *et al.* [9].

A sequência das operações utilizadas no processo de solução, para cada avanço no tempo (δt), são as seguintes:

Passo 1:

O primeiro passo é obter os valores das componentes da tensão através da resolução da equação constitutiva discretizada (Eq. (13)):

$$a_p^\tau \tau_{ij,p}^* = \sum_F a_F^\tau \tau_{ij,F}^* + S_{\tau_{ij}} \quad (14)$$

Trata-se de uma equação implícita em τ_{ij}^* , com o termo em τ_{ij}^n incorporado no termo fonte, e onde os coeficientes e o termo fonte são baseados em valores correspondentes ao tempo anterior (n). O termo τ_{ij}^* corresponde ao novo tempo τ_{ij} . A Eq. (14) representa um sistema de equações lineares que deve ser resolvido através de um método iterativo de forma a se obter o valor de τ_{ij}^* .

Passo 2:

Neste segundo passo, após obtermos os valores das componentes da tensão por resolução da Eq. (14), será resolvida implicitamente a equação de conservação da quantidade de movimento para cada componente intermédia da velocidade u^* , v^* e w^* . A equação (12) é necessária como:

$$a_p u_{i,p}^* = H(u_i^*) + \left[-\nabla p^n + \nabla \cdot \tau_{ij}^* + \frac{\rho V}{\delta t} u_i^n \right] \quad (15)$$

onde $a_p = a_0 + \frac{\rho V}{\delta t}$ e o operador $H(u_i^*) = \sum_F a_F u_{i,F}^*$. Nesta equação existem dois termos fonte importantes, que são o termo do divergente da tensão ($\nabla \cdot \tau_{ij}^*$) e o termo do gradiente de pressão (∇p^n). Enquanto que o termo do divergente da tensão é baseado nos τ_{ij}^* obtidos no passo 1 do algoritmo, sendo necessário garantir o acoplamento entre a velocidade e a tensão tal como descrito em Oliveira *et al.* [9], o termo do gradiente de pressão conduz a um procedimento de correcção de pressão, segundo o algoritmo SIMPLEC [12], o qual é descrito de seguida.

Passo 3:

Neste terceiro passo, obtemos a equação para a correcção de velocidade e pressão. As equações para a correcção de velocidade e de pressão são obtidas através da seguinte factorização da equação da quantidade de movimento:

$$a_0 u_{i,p}^* + \frac{\rho V}{\delta t} u_{i,p}^{n+1} = H(u_i^*) + \left[-\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot \tau_{ij}^* + \frac{\rho V}{\delta t} u_i^n \right] \quad (16)$$

onde a velocidade no termo de inércia no membro da esquerda da equação foi avançada de um nível de iteração ($u_{i,p}^* \longrightarrow u_{i,p}^{n+1}$), assim como a pressão. Os restantes termos mantiveram-se inalterados. Subtraindo as duas equações anteriores (Eq. (16) e Eq. (15)), obtemos a equação de correcção de velocidade dada por:

$$\frac{\rho V}{\delta t} (u^{n+1} - u^*) = -\nabla p' \Leftrightarrow u^{n+1} = u^* - \frac{\nabla p'}{\rho V / \delta t} \quad (17)$$

sendo a correcção de pressão definida por:

$$p' = p^{n+1} - p^n \quad (18)$$

De forma a garantir que a velocidade u^{n+1} satisfaz a equação da continuidade ($\nabla \cdot u^{n+1} = 0$, ou seja $\sum_f F_f^{n+1} = 0$, ver Eqs. (1) e (11)), torna-se necessário resolver uma equação de Poisson para a correcção de pressões p' , ou seja:

$$a_p^p p'_p = \sum_F a_F^p p'_p - (\nabla \cdot u^*) \quad (19)$$

onde os coeficientes são dados por $a_F^p = B_f^2 / (\overline{\rho V / \delta t})_f$ e $a_p^p = \sum_F a_F^p$ (B_f é a área das faces do VC) e o termo sublinhado superior corresponde à média aritmética. Completa-se desta forma o procedimento de cálculo das diversas variáveis independentes. Os novos valores de τ , u e p , obtidos por resolução das equações (14), (17) e (18), são reiniciadas para um novo tempo e repete-se todo o algoritmo até se atingir um valor residual das equações de governo, correspondente a uma tolerância (TOL). Para além da monitorização dos resíduos das equações, um outro critério de convergência obtém-se a partir do erro relativo para a velocidade, pressão e o tensor das tensões quando atinge a tolerância de: $\left| \frac{u^{n+1} - u^n}{u_{\max}^{n+1}} \right| \leq TOL$,

$\left| \frac{p^{n+1} - p^n}{p_{\max}^{n+1}} \right| \leq TOL$ e $\left| \frac{\tau^{n+1} - \tau^n}{\tau_{\max}^{n+1}} \right| \leq TOL$, onde o índice n e $n+1$ corresponde ao tempo de iteração anterior e actual, respectivamente. Neste trabalho foi utilizado $TOL = 10^{-4}$, baseado nos valores normalizados dos resíduos e das variações das variáveis, e foi possível constatar que esta tolerância produz bons resultados do ponto de vista de convergência iterativa.

4 CONDIÇÕES DE FRONTEIRA

São necessárias condições de fronteira para especificar as componentes de velocidade na entrada, na saída e nas paredes do canal. Para fluidos incompressíveis ($\rho = \text{constante}$) o valor absoluto da pressão é irrelevante, interessando apenas só as suas variações. Na entrada do escoamento é considerado de forma arbitrária que a pressão é igual a zero. O campo de pressão é então corrigido para cada iteração de forma a garantir a equação de conservação da massa, de acordo com o algoritmo descrito na Secção anterior.

Na entrada do canal (a uma distância de $x = -20d$ a montante da zona de expansão) foi imposto um perfil completamente desenvolvido para todas as variáveis (u , τ_{xx} e τ_{xy}), com o perfil de velocidades axiais definido de forma parabólica (Eq. (20)) e assumindo-se que a velocidade média do canal de entrada é $U = 1$. Em escoamentos completamente desenvolvidos, nenhuma das propriedades do fluido varia ao longo do canal, isto é, essas propriedades são independentes da direcção- x . Tendo em conta as coordenadas definidas na Fig. 1, temos os seguintes perfis impostos como condição de fronteira no canal de entrada:

$$u = \frac{3}{2}U \left(1 - \left(\frac{y}{d/2} \right)^2 \right) \quad (20)$$

$$\tau_{xy} = \eta_p \frac{du}{dy} = - \left(\frac{12\eta_p U}{d} \right) \left(\frac{y}{d} \right) \quad (21)$$

A equação que descreve o perfil de tensões normais τ_{xx} segue uma variação mais complicada, dada na Ref. [6]. Esse perfil de τ_{xx} depende da taxa de deformação local, do tempo de relaxação do fluido e do parâmetro de extensibilidade do modelo FENE-CR (L^2). Na saída do canal, para $x = +50d$, considera-se também que o escoamento é completamente desenvolvido e assume-se que as variações longitudinais das variáveis são nulas, excepto a pressão que é extrapolada linearmente a partir dos valores nos VC interiores. Estas condições de fronteira são adequadas e não afectam as características do escoamento perto da zona de expansão, devido ao comprimento do canal de saída L_2 ser suficientemente longo. Nas paredes sólidas considera-se que não existe escorregamento, ou seja, a velocidade local é igual a zero, tal como explicado de seguida.

4.1 Condições fronteira na parede paralela ao eixo- x

Nesta situação, atendendo às condições de não escorregamento, temos: $u = v = 0$; $\partial u / \partial x = \partial v / \partial x = 0$ e, da equação da continuidade (Eq. (1)), vem: $\partial v / \partial y = 0$. Substituindo estas relações na equação constitutiva adimensional (Eq. (8)), obtemos um conjunto de três equações dadas por:

$$\begin{aligned}
\tau_{xx} &= 2 \frac{We}{f(\tau_{xx})} \left(\frac{1-\beta}{Re} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \\
\tau_{yy} &= 0 \\
\tau_{xy} &= \left(\frac{1-\beta}{Re} \right) \frac{\partial u}{\partial y}
\end{aligned} \tag{22}$$

4.2 Condições fronteira na parede paralela ao eixo-y

De maneira similar ao caso anterior, podemos descrever a situação para as condições de parede paralela ao eixo-y, vindo:

$$\begin{aligned}
\tau_{xx} &= 0 \\
\tau_{yy} &= 2 \frac{We}{f(\tau_{yy})} \left(\frac{1-\beta}{Re} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \\
\tau_{xy} &= \left(\frac{1-\beta}{Re} \right) \frac{\partial v}{\partial x}
\end{aligned} \tag{23}$$

sendo a função de extensibilidade adimensional $f(\tau)$ dada pela Equação (9).

5 RESULTADOS

Nesta Secção apresentam-se os resultados numéricos obtidos da análise do escoamento, divididos em duas sub-secções. Na primeira, iremos apenas analisar o comportamento do fluido newtoniano e validar os resultados obtidos por forma a garantir que os resultados são correctos e suficientemente precisos, para que possam servir de referência em estudos similares. Na segunda sub-secção, apresentamos os resultados não newtonianos viscoelásticos utilizando o mesmo programa de cálculo utilizado para o caso newtoniano. Foram utilizadas três malhas computacionais de forma a ser possível quantificar os erros de discretização dos resultados. Os valores apresentados ao longo deste trabalho dizem apenas respeito à malha mais refinada (Malha 3), apresentada esquematicamente na Figura 3; para maiores detalhes consultar Ref. [3]. Esta malha computacional contém 35200 volumes de controlo e o tamanho mínimo das células na vizinhança da expansão é de $\delta x_{\min} = \delta y_{\min} = 0.025$ (valores normalizados com a altura do canal de entrada d).

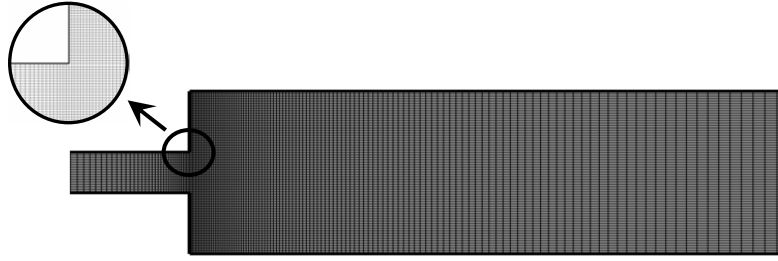


Figura 3. Zoom da malha computacional utilizada no cálculo numérico.
 $(-2 \leq x \leq 10; -2 \leq y \leq 2)$

Como podemos ver pela figura anterior, a malha computacional é não uniforme ao longo da direcção- x e uniforme ao longo da direcção- y . Na vizinhança da zona de expansão optou-se por concentrar o maior número de células (ou volumes de controlo), por forma a ser possível resolver com boa precisão os elevados gradientes de tensão que aí ocorrem como consequência da presença do canto re-entrante e da variação abrupta da área transversal do canal.

5.1 Fluido newtoniano ($We = 0$)

Nesta situação o único parâmetro passível de ser variado é o número de Reynolds. Os resultados obtidos estão apresentados quantitativamente na Tabela 1, com $X_r = x_r/d$, mostrando que o número de Reynolds crítico para a razão de expansão de 1:4 é de $Re_{cr} = 36$ para a malha 3. Podemos comparar este valor com os resultados obtidos por Drikakis [1] que obteve um valor de $Re_{cr} = 35.3$ e Battaglia *et al.* [2] que obtiveram um valor de $Re_{cr} = 35.8$, para a mesma razão de expansão. Existe assim uma boa concordância entre o número de Re_{cr} aqui obtido e os resultados obtidos pelos autores referidos anteriormente.

Re	X_{r1}	X_{r2}	X_{r3}	X_{r4}	$\psi_{r1}(\times 10^{-2})$	$\psi_{r2}(\times 10^{-2})$
36	6.449	6.428	---	---	9.5968	9.5896
37	7.645	5.389	---	---	10.1461	9.3449
39	8.595	4.812	---	---	10.8616	9.2823
40	8.929	4.681	---	---	11.2026	9.2902
45	10.183	4.423	---	---	13.2847	9.3963
50	11.127	4.386	---	---	15.2756	9.5123
55	11.903	4.417	---	---	16.8136	9.6068
60	12.561	4.474	---	---	17.9903	9.6723
63	12.910	4.515	---	---	18.5691	9.7004
64	13.018	4.529	13.476	14.050	18.7372	9.7112
65	13.126	4.544	13.004	14.866	18.9094	9.7204
70	13.607	4.619	12.512	16.869	19.6357	9.7454
80	14.405	4.774	12.483	19.806	20.7585	9.7614
90	15.068	4.926	12.718	22.274	21.7628	9.7463
100	15.689	5.075	13.058	24.558	22.8727	9.7034

Tabela 1. Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação para o escoamento newtoniano.

Na Figura 4 apresentam-se graficamente os resultados dos comprimentos de recirculação (X_{r1} e X_{r2}) e o diagrama de bifurcação ($DX = X_{r1} - X_{r2}$) em função do número de Reynolds, sendo comparados com o caso de razão de expansão de 1:3, do trabalho de Oliveira [6].

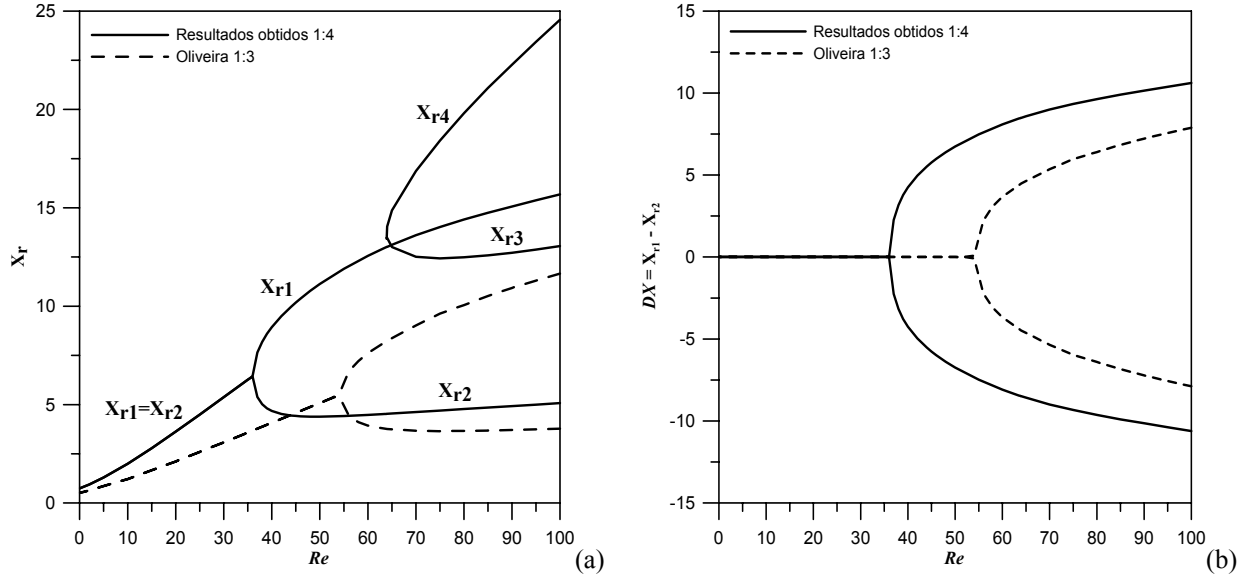


Figura 4. Comparação das características dos vórtices para razões de expansão 1:4 e 1:3: a) Comprimento de recirculação; b) Diagrama de bifurcação.

Como podemos verificar pela Figura 4, à medida que se aumenta o número de Reynolds o comprimento de recirculação cresce de forma aproximadamente linear, até que se atinge um limite a partir do qual já não se verifica a simetria do escoamento, como foi referido anteriormente. Comparando-se os casos com razão de expansão de 1:4 e 1:3, verifica-se existir um desfasamento entre os comprimentos de recirculação e a bifurcação ocorre mais rapidamente quando a razão de expansão é maior: com razão de expansão de 1:4, temos $Re_{cr} = 36$ e para 1:3 passamos para $Re_{cr} = 54$. Esta conclusão poderá ser complementada com as previsões de Battaglia *et al.* [2], baseados no método dos elementos finitos para várias razões de expansão ($D/d = 1.5, 2, 3, 4, 5$ e 7). Um outro fenómeno de salientar na Fig. 4 (a) é o aparecimento de um segundo comprimento de recirculação posterior às recirculações principais. Para a expansão 1:3 o fenómeno semelhante só ocorre para $Re > 100$. Podemos definir um segundo número de Reynolds crítico (Re_{cr2}) a partir do qual surge um segundo comprimento de recirculação. No caso de estarmos na presença de um escoamento newtoniano obtemos, da Tabela 1, $Re_{cr2} = 64$. Na Figura 9 (a) estão apresentadas as linhas de corrente resultantes das simulações numéricas, para valores crescentes do número de Reynolds e fluido newtoniano. A partir de Re_{cr} aparece naturalmente um comprimento de recirculação maior numa das paredes relativamente à outra (ver Fig. 9 (a)). Nestas simulações é na parede inferior que se situa o maior comprimento de recirculação, mas isso depende das condições iniciais impostas. Quando o escoamento bifurca, existem 2 soluções estacionárias

estáveis: recirculação maior em baixo e menor em cima, e vice-versa. Existe ainda uma terceira solução instável: 2 recirculações simétricas. Esta solução consegue-se obter numericamente fazendo a simulação em metade do domínio de cálculo; na prática, não ocorre.

5.2 Fluido viscoelástico ($We \neq 0$)

Nesta sub-secção são apresentados os resultados numéricos referentes ao escoamento não newtoniano viscoelástico que ocorre com o aumento do número de Re , para os valores típicos de $L^2 = 100$, $We = 2$ e usando uma concentração do solvente newtoniano moderado, com $\beta = 0.5$. Os resultados numéricos obtidos são apresentados na Tabela 2 para os comprimentos e intensidades de recirculação. De uma primeira análise podemos constatar que devido à existência de viscoelasticidade, a bifurcação é retardada quando comparado com o fluido newtoniano. Com a presença de efeitos elásticos no fluido obtemos um número de $Re_{cr} = 46$ ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). Para valores de Re abaixo do número de Reynolds crítico ($Re_{cr} = 46$) o escoamento mantém-se estável e simétrico, para valores superiores o escoamento mantém-se estável mas assimétrico. O mesmo tínhamos verificado no caso do escoamento newtoniano, mas com o número de Reynolds crítico diferente.

Re	X_{r1}	X_{r2}	X_{r3}	X_{r4}	$\psi_{r1}(\times 10^{-2})$	$\psi_{r2}(\times 10^{-2})$
46	6.345	6.296	---	---	8.4262	8.3997
47	7.363	5.490	---	---	9.1786	8.3997
48	7.891	5.161	---	---	9.7050	7.9409
50	8.627	4.849	---	---	10.6468	7.8838
60	10.835	4.564	---	---	14.5739	8.0229
70	12.272	4.651	---	---	17.0103	8.1980
73	12.619	4.691	---	---	17.5377	8.2394
73.5	12.673	4.698	13.387	13.533	17.6181	8.2449
74	12.729	4.705	12.937	14.179	17.6943	8.2501
75	12.834	4.719	12.637	14.802	17.8500	8.2644
80	13.323	4.794	12.215	16.768	18.5255	8.3130
85	13.751	4.871	12.154	18.304	19.0891	8.3516
90	14.137	4.948	12.213	19.647	19.5749	8.3839
100	14.829	5.100	12.465	22.151	20.5459	8.4179

Tabela 2. Comprimentos (X_r) e intensidades (ψ_r) de recirculação para o escoamento viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Na Figura 5, apresentamos os resultados do comprimento de recirculação para o caso do escoamento newtoniano e viscoelástico, juntamente com a representação do diagrama de bifurcação do escoamento. Podemos reparar que existe um desfasamento induzido pelas viscoelasticidades relativamente aos comprimentos das recirculações que se formam a jusante da expansão.

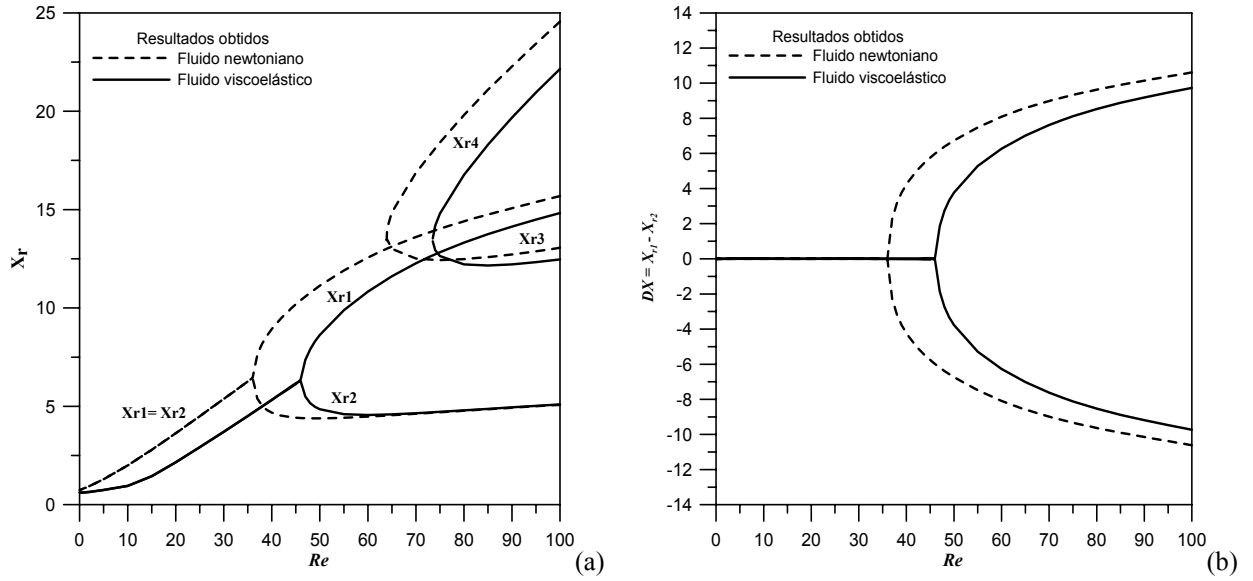


Figura 5. Comparação das características dos vórtices para o fluido newtoniano e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) na expansão 1:4: a) Comprimentos de recirculação; b) Diagrama de bifurcação.

O número de Reynolds crítico correspondente à transição entre o estado simétrico e assimétrico do escoamento é de $Re_{cr} = 36$ (fluido newtoniano) e $Re_{cr} = 46$ (caso viscoelástico, com $We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). Em ambos os casos ocorre o aparecimento de uma segunda recirculação que surge a $Re_{cr2} = 64$ (caso newtoniano) e $Re_{cr2} = 73.5$ (caso viscoelástico). Observa-se assim que a presença de efeitos elásticos provoca a tendência para estabilizar o escoamento, atrasando o ponto crítico de transição do regime simétrico para o regime assimétrico estacionário, de forma análoga ao observado na Ref. [6] para uma razão de expansão de 1:3.

O efeito decorrente da variação dos restantes parâmetros adimensionais independentes (We , β e L^2) foi já estudado em trabalhos anteriores ([3;6]), pelo que não é aqui discutido. Seguidamente apresentamos algumas características relativas aos campos de tensões, nomeadamente as linhas de contorno adimensionais para a primeira diferença de tensões normais ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$) e as tensões de corte ou tangenciais (τ_{xy}), quando se aumenta o número de Weissenberg ($We = 0, 2, 5$ e 10), para $Re = 20$ ($\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$). Faz-se notar que nestas figuras as tensões foram normalizadas com um factor de escala convectivo, ρU^2 , como referido na Secção 2, em lugar da escala difusiva $\eta_p U/d$. A relação entre estes dois tipos de adimensionalização é: $\tau_{ij}/(\eta_p U/d) = (\tau_{ij}/\rho U^2) Re/(1-\beta)$.

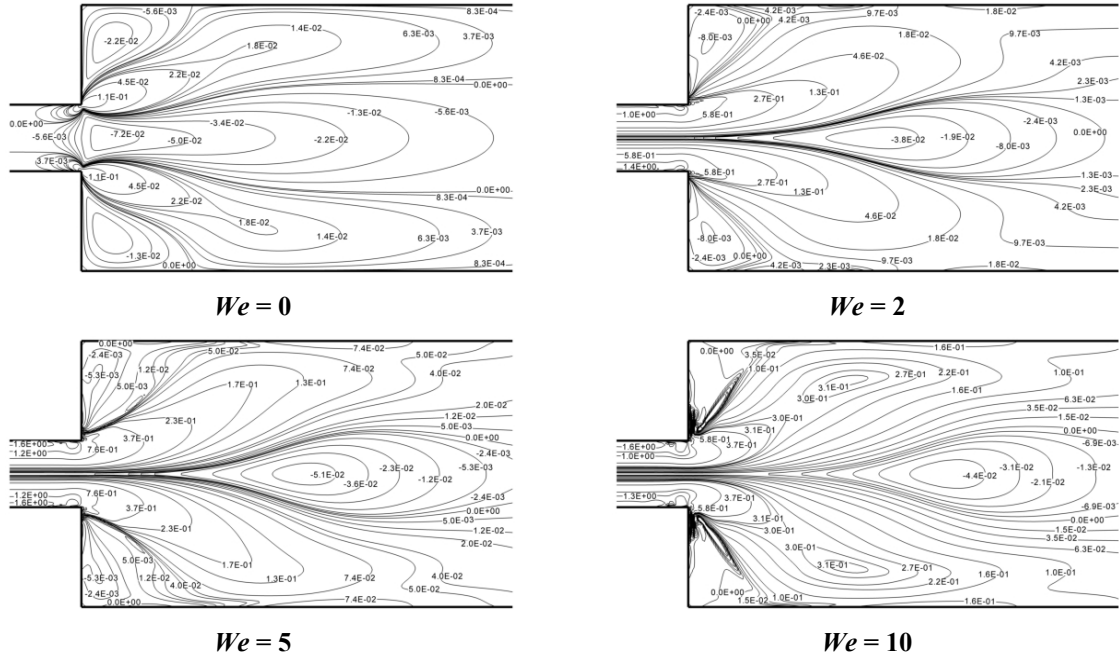


Figura 6. Linhas de contorno adimensionais para a primeira diferença de tensões normais (N_1), aumentando o número de Weissenberg ($Re = 20$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

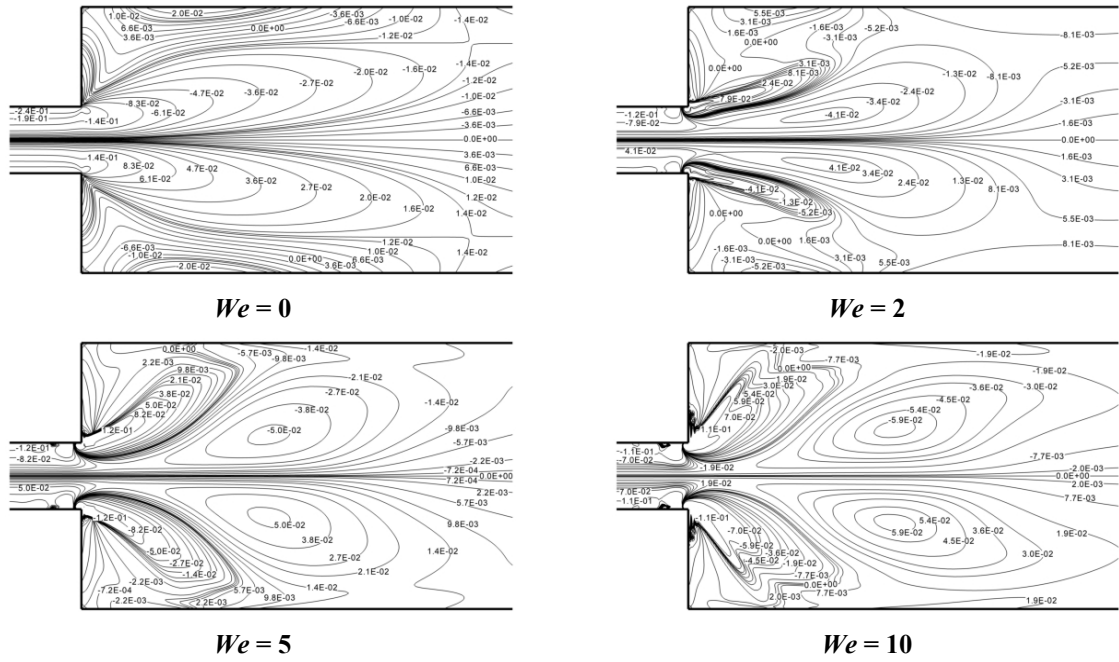


Figura 7. Linhas de contorno adimensionais das tensões de corte (τ_{xy}) para números de Weissenberg crescentes ($Re = 20$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$).

Das Figuras 6 e 7 podemos verificar que existe uma maior concentração de tensões junto aos cantos e na zona de entrada da expansão no caso do escoamento ser viscoelástico, tanto no que se refere a tensões normais como de corte. Por sua vez, os campos de tensão mantêm-se simétricos, demonstrando que para baixos números de Reynolds ($Re < Re_{cr}$) não há ainda efeitos devidos à bifurcação do escoamento, no sentido de quebra de simetria. Outro efeito curioso que podemos salientar refere-se à deslocação da zona das máximas tensões compressivas para jusante da expansão, visível por comparação na Figura 6 de $We = 2$ com $We = 5$. Uma vez que Re é constante, esse efeito resulta dos termos convectivos na equação das tensões, que tendem a arrastar estas na direcção do escoamento como seria de prever. Por fim, podemos realçar a progressiva concentração de tensões em torno dos cantos da expansão à medida que o efeito de elasticidade aumenta (os valores máximos de N_1 vão de 0.371 para 1.988 quando $We = 0$ para 2).

A variação das tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} ao longo da linha central ($y = 0$) estão representadas na Figura 8, usando o número de Weissenberg como parâmetro ($We = 0, 1, 2$ e 5) e para um fluido viscoelástico com características: $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$. O valor do número de Reynolds é mantido constante, $Re = 20$, e nota-se que as tensões para o caso viscoelástico não incluem a componente do solvente.

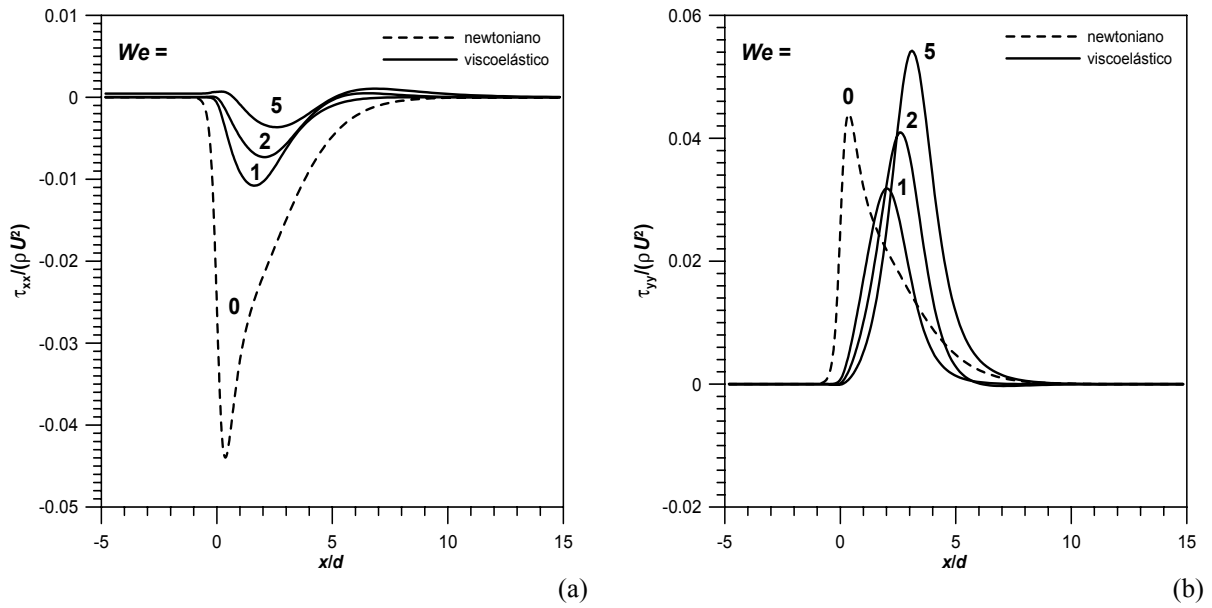


Figura 8. Perfil das tensões normais τ_{xx} e τ_{yy} ao longo do plano central ($y = 0$) para fluido newtoniano e viscoelástico ($\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$), com $Re = 20$ e We a variar.

Analisando as Figuras 8 (a) e (b), podemos verificar que existe um progressivo aumento do máximo das tensões elásticas de extensão lateral ($\tau_{yy} > 0$), sendo a localização desse máximo deslocado para além da zona de expansão no sentido do escoamento. Este fenómeno resulta do efeito de “memória” contido na equação constitutiva reológica e foi discutido no parágrafo anterior. A configuração das tensões τ_{yy} é preponderante no cálculo da primeira diferença de

tensões normais ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$), resultando no máximo negativo, tal como visto anteriormente na Figura 6 para os casos de $We = 2$ e $We = 5$. Deste modo um elemento de fluido à entrada do canal maior fica sujeito a uma compressão axial e uma extensão lateral, o que induz o efeito de “divergência” das linhas de corrente discutido em Rocha e Oliveira [3].

Finalmente a Figura 9 já comentada anteriormente apresenta as linhas de corrente para os casos newtoniano e viscoelástico ($We = 2$, $\beta = 0.5$ e $L^2 = 100$) e para números de Reynolds crescentes.

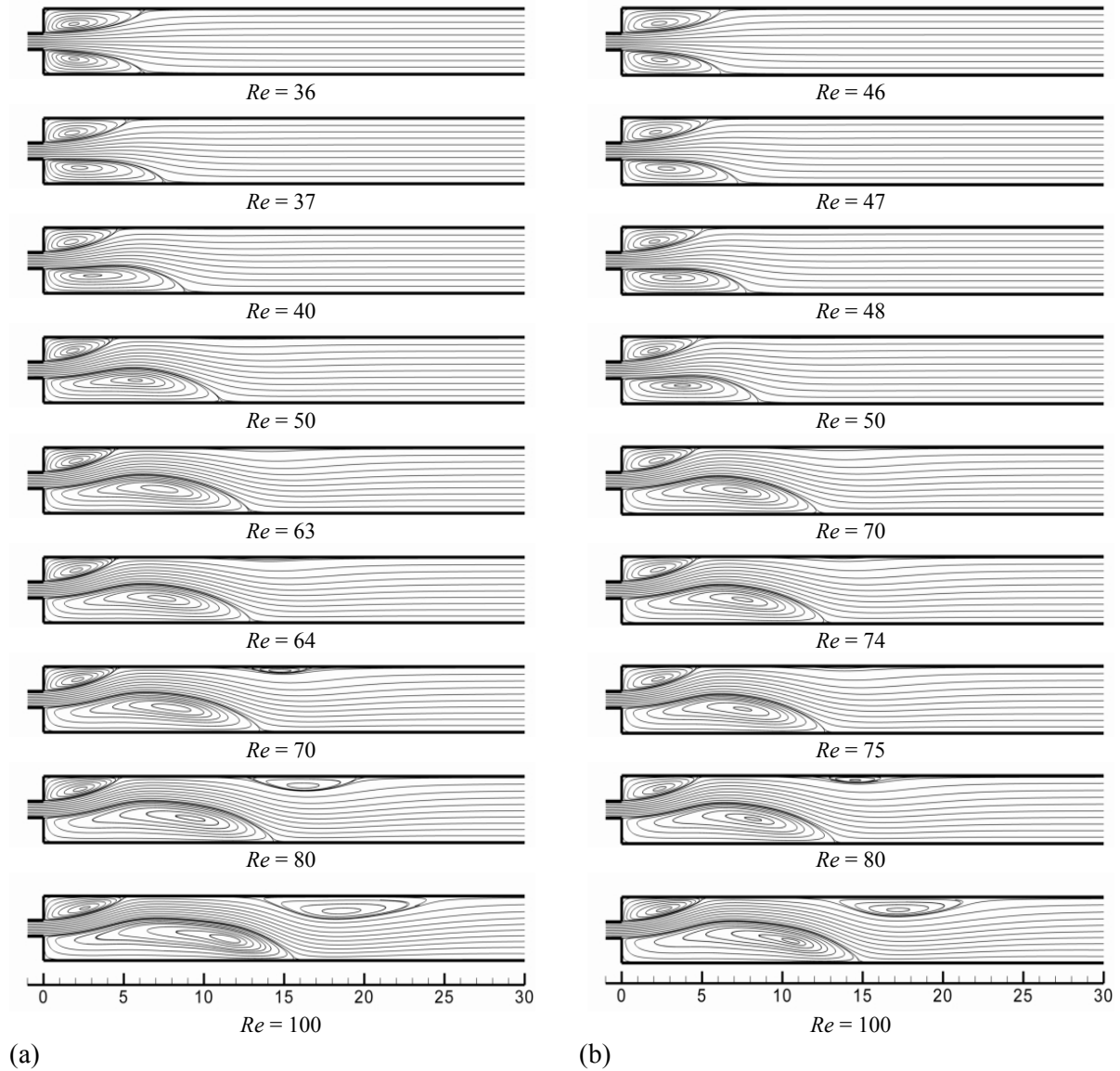


Figura 9. Linhas de corrente para vários números de Re : a) Fluido newtoniano; b) Fluido viscoelástico.

6 CONCLUSÕES

Os resultados de simulação de escoamentos não newtonianos apresentados permitem clarificar alguns pontos relativos no fenómeno de bifurcação que ocorrem em expansões planas. Foram obtidos utilizando um canal plano bidimensional com razão de expansão de 1:4 e um modelo constitutivo reológico baseado na teoria cinética para moléculas com extensão finita e não-linear, denominado modelo FENE-CR. A discretização das equações foi feita utilizando o método dos volumes finitos juntamente com a aplicação de um esquema de alta resolução (CUBISTA), por forma a ser possível obter resultados com boa precisão.

O número de Reynolds crítico previsto para o caso newtoniano foi de $Re_{cr} = 36$ enquanto que para o caso viscoelástico foi de $Re_{cr} = 46$ (utilizando a malha mais refinada). Verificou-se que com o aumento do número de Reynolds surge uma segunda recirculação posterior a recirculação principal que ocorre para um $Re_{cr2} = 64$ (fluido newtoniano) e $Re_{cr2} = 73.5$ (fluido viscoelástico). Constatou-se que o efeito da elasticidade provoca a retardação do fenómeno de bifurcação do escoamento e que no caso do fluido viscoelástico existe uma maior concentração de tensões normais e de corte na zona da expansão. Outro efeito observado foi a deslocação da zona das máximas tensões compressivas no sentido da direcção do escoamento, após a zona de expansão, à medida que se aumenta o número de Weissenberg.

AGRADECIMENTOS

Para a realização deste trabalho agradece-se o apoio financeiro prestado pela Fundação para a Ciência e Tecnologia (FCT), através dos projectos POCTI/EQU/37699/2001 e BD/22644/2005.

REFERÊNCIAS

- [1] D. Drikakis, “Bifurcation phenomena in incompressible sudden expansion flows”, *Phys. Fluids* Vol. **9**, pp. 76-87 (1997).
- [2] 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).
- [3] G.N. Rocha e P.J. Oliveira, *Investigação computacional do escoamento viscoelástico a baixo número de Reynolds numa expansão plana*, J.L. Aparício, A. Ferran, J.A.C. Martins, R. Gallego y J. César de Sá eds. *Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería, Granada, 2005*, SEMNI, pp. 308.
- [4] R.B. Bird, C.F. Curtiss, R.C. Armstrong e O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids: Kinetic Theory*, Wiley, Vol II, (1987).
- [5] M.D. Chilcott e J.M Rallison, “Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres”, *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics* Vol. **29**, pp. 381-432, (1988).

- [6] P.J. Oliveira, “Asymmetric flows of viscoelastic fluids in symmetric planar expansion geometries”, *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics* Vol. **114**, pp. 33-63 (2003).
- [7] S.V. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere Publishing Corporation, (1980).
- [8] 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).
- [9] P.J. Oliveira, F.T. Pinho e G.A. Pinto, “Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method”, *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics* Vol. **79**, pp. 1-43, (1998).
- [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. Mech. 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 Doormal e G.D. Raithby, “Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows”, *Numerical Heat Transfer* Vol. **7**, pp. 147-163, (1984).