

Estudo da cascata de energia em escoamentos turbulentos viscoelásticos

António Pedro Mósca¹, Ricardo D. B. Marques¹, Carlos B. da Silva¹, Fernando Pinho²

¹Universidade Técnica de Lisboa, IST/IDMEC, Av. Rovisco Pais, 1040-001 Lisboa, Portugal
email: Carlos.Silva@ist.utl.pt

²CEFT, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto, R. Dr. Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal
email: fpinho@fe.up.pt

Sumário

Simulações numéricas directas (direct numerical simulation - DNS) de turbulência homogénea e isotrópica num fluido viscoelástico são levadas a cabo para estudar a transferência de energia cinética e as estruturas do campo turbulento associado, no espaço físico e no espaço de Fourier. O algoritmo numérico assenta no uso de métodos pseudo-espectrais e a reologia do fluido é modelada usando o modelo constitutivo reológico de extensibilidade elástica finita não linear na variante de Peterlin (FENE-P do inglês 'Finitely extensible nonlinear elastic-Peterlin'). A cascata de energia é estudada analisando a transferência de energia entre as grandes e as pequenas escalas do escoamento em diferentes zonas do espectro de energia. A separação de escalas é conseguida usando operações de filtragem no espaço físico e no espaço de Fourier e os resultados são interpretados através dos invariantes dos tensores da taxa de deformação, taxa de rotação e taxa do gradiente de velocidade. Os resultados obtidos permitem delinear estratégias para a simulação das grandes escalas (large-eddy simulation - LES) de escoamentos turbulentos viscoelásticos.

Palavras-chave: turbulência viscoelástica, cascata de energia, turbulência isotrópica, DNS, FENE-P

1 Introdução

A redução da força de resistência provocada pela adição de polímero foi descoberta no final da década de 40, havendo estudos onde foram observadas reduções de 30 – 40% utilizando pequenas quantidades (10ppm em massa) de metilmetacrilato. No entanto, apesar da experiência (ver Fig. 1) o mostrar, o fenómeno de redução da força de resistência (designado *drag reduction* na literatura inglesa) nunca foi explicado numa perspectiva mais fundamental.

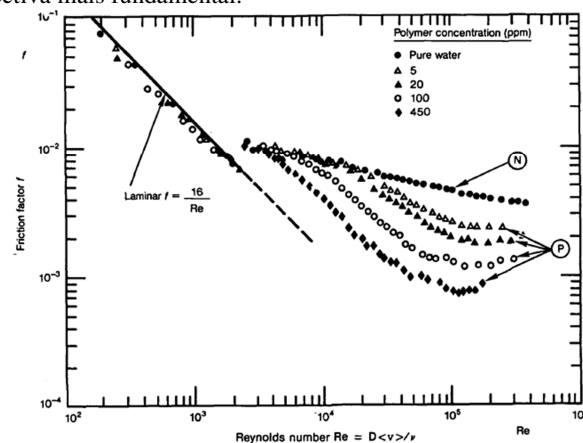


Fig. 1. Factor de atrito definido como função do Número de Reynolds para água a escoar numa conduta com várias concentrações de Polietileno. Os pontos identificados com "N" são sem adição de polímero, enquanto que os identificados com "P" são com adição de várias concentrações de polímero. Tirado de [1].

A experiência mostra então que, no regime laminar, a influência da adição de polímero, a ser sentida, é muito diminuta. No regime turbulento (que no caso da Fig. 1, se verifica para $Re \geq 2500$) verifica-se que, quanto maior for a concentração de polímero adicionado, menor é (relativamente ao verificado com fluido newtoniano) o factor de atrito, para o mesmo número de Reynolds.

Em regime laminar, uma possível justificação do efeito insignificante dos polímeros na força de resistência é dada pelo facto da taxa à qual o trabalho viscoso é feito ser determinada pelas velocidades de grande escala do escoamento, enquanto que a acção do polímero nas tensões viscosas é significativa apenas nas pequenas escalas.

Em regime turbulento, os polímeros na camada limite são esticados (ver Fig. 2). Como resultado da transição *coil-stretch* (ou *relax-stretch*), a viscosidade aumenta drasticamente. Como resultado do aumento local da viscosidade, o transporte da quantidade de movimento para a parede diminui (devido ao amortecimento dos turbilhões de pequena escala) e a resistência é então reduzida.

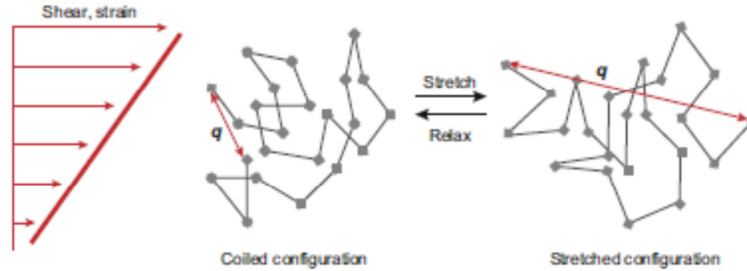


Fig. 2. Representação esquemática dos fenômenos de *relaxation* e *stretch* de um polímero. O fenómeno de *stretch* é quantificado pela grandeza q , distância entre o início da cadeia do polímero e o fim da mesma. Tirada de [2].

De forma a estudar a interacção aditivos-turbulência com DNS, um termo adicional das tensões do polímero foi incluído nas equações de *Navier-Stokes*. Existem duas grandes dificuldades na Simulação Numérica Directa dum escoamento com aditivos poliméricos: (1) como modelar os polímeros de forma precisa e eficiente e (2) como simular as equações sem originar instabilidades numéricas.

Têm sido desenvolvidos alguns modelos de conformação importantes: *Oldroyd-B*, *FENE-P* e *Giesekus*, utilizados sobretudo em escoamentos confinados (e.g. canal). Neste trabalho, o modelo que será utilizado será o modelo *FENE-P* (apesar do escoamento não ser confinado, o modelo reproduz bem o comportamento do fluido na presença de aditivos poliméricos). Este é o modelo mais utilizado devido à representação precisa da dinâmica do polímero, complexidade numérica mínima e capacidade de mostrar a redução da resistência provocada por soluções diluídas com aditivos poliméricos (ver [3]).

Neste modelo, *FENE-P*, o polímero é modelado com recurso a massas e molas (ver Fig. 3). As massas representam blocos de monómero que são suficientemente pequenos que o movimento rotacional entre eles está altamente correlacionado. As molas actuam como factores probabilísticos que devolvem à molécula esticada configurações que são mais prováveis, ou seja, actuam basicamente como inércias do polímero e tendência do mesmo para voltar à sua configuração de equilíbrio (ver [4]).

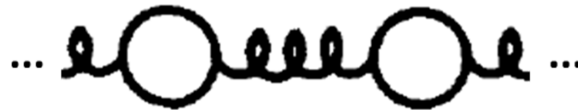


Fig. 3. Configuração das cadeias de polímeros na modelação segundo *FENE-P*.

2 Métodos Numéricos

As equações que se pretende resolver são as seguintes:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T}^{[s]} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{T}^{[p]} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{C} = \mathbf{C} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{C} - \frac{f(r)\mathbf{C} - \mathbf{I}}{\tau_p} \quad (2.2)$$

Em que, nas equações (2.1) e (2.2), $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ é o vector velocidade, p é a pressão local, ρ é a densidade do fluído, $T^{[s]} = 2\rho\nu^{[s]}\mathbf{S}$ é o tensor das tensões newtonianas devido ao solvente, $\nu^{[s]}$ é viscosidade cinemática do solvente, $\mathbf{S} = \frac{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)}{2}$, $\mathbf{T}^{[p]} = \left(\frac{\rho\nu^{[p]}}{\tau_p}\right)(f(r)\mathbf{C} - \mathbf{I})$ é tensor das tensões devido ao polímero, $\nu^{[p]}$ é a viscosidade do polímero, \mathbf{I} é a matriz identidade, τ_p é o tempo de relaxação do polímero e \mathbf{C} é o tensor de conformação do polímero. No modelo *FENE-P* (utilizado aqui), $f(r) = (L^2 - 3)/(L^2 - r^2)$ assegura a extensibilidade finita, $r = \sqrt{C_{kk}}$ e L são o comprimento de extensão do polímero e a máxima extensão possível do mesmo polímero, respectivamente.

Para resolver a equação (2.1), um código pseudo-espectral num domínio 2D periódico de tamanho $\mathbb{L} = 2\pi \text{ cm}$ é utilizado para a discretização espacial. Para discretização temporal, Runge-Kutta de 2ª ordem é adoptado. Notar, no entanto, que, para a equação (2.2), métodos espectrais não são apropriados, pois há perda de convergência na vizinhança de descontinuidades.

Logo, foram utilizadas diferenças finitas. Para a discretização temporal, manteve-se Runge-Kutta de 2ª ordem. No domínio espacial, diferenças centrais de segunda ordem foram utilizadas excepto para o termo convectivo. Para este termo foi utilizada a discretização de KT de segunda ordem (detalhada em [3]). Este esquema é de, forma breve, apresentado em baixo.

O termo convectivo é obtido através de (2.3):

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{C} = \frac{H_{i+1/2,j}^x - H_{i-1/2,j}^x}{\Delta x} + \frac{H_{i,j+1/2}^y - H_{i,j-1/2}^y}{\Delta y} \quad (2.3)$$

Onde o fluxo convectivo em cada direcção vem dado por:

$$\begin{aligned} H_{i+1/2,j}^x &= \frac{1}{2}u_{i+1/2,j}(C_{i+1/2,j}^+ + C_{i+1/2,j}^-) - \frac{1}{2}|u_{i+1/2,j}|\left(C_{i+1/2,j}^+ + C_{i+1/2,j}^-\right) \\ H_{i,j+1/2}^y &= \frac{1}{2}v_{i,j+1/2}(C_{i,j+1/2}^+ + C_{i,j+1/2}^-) - \frac{1}{2}|v_{i,j+1/2}|\left(C_{i,j+1/2}^+ + C_{i,j+1/2}^-\right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Os valores do tensor de conformação de (2.4) obtêm-se da seguinte forma:

$$\begin{aligned} C_{i+1/2,j}^\pm &= C_{i+1/2\pm 1/2,j} \mp \left(\frac{\Delta x}{2}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i+1/2\pm 1/2,j} \\ C_{i,j+1/2}^\pm &= C_{i,j+1/2\pm 1/2} \mp \left(\frac{\Delta x}{2}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i,j+1/2\pm 1/2} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Onde, os potenciais candidatos para aproximar os gradientes segundo x são:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i,j} = \begin{cases} (C_{i+1,j} - C_{i,j})/\Delta x \\ (C_{i,j} - C_{i-1,j})/\Delta x \\ (C_{i+1,j} - C_{i-1,j})/(2\Delta x) \end{cases} \quad (2.6)$$

Selecciona-se a aproximação da derivada (das três formas de (2.6)) que leve a que $C_{i+1/2}^+$ e $C_{i+1/2}^-$ sejam semi-positivas definidas. Caso haja mais do que uma hipótese, selecciona-se aquele que maximiza o menor valor próprio das mesmas duas matrizes. Se nenhuma das aproximações satisfizer o primeiro critério (de tornar as matrizes $C_{i+1/2}^+$ e $C_{i+1/2}^-$ semi-positivas definidas) a derivada é aproximada a zero, reduzindo o esquema a primeira ordem.

As velocidades necessárias para calcular o fluxo convectivo são dadas pelas operações de interpolação e filtragem mostradas em (2.7):

$$u_{i\pm 1/2,j} = F^{-1} \left\{ \hat{u} e^{\pm i k_x \Delta x / 2} \frac{\sin(k_y \Delta y / 2)}{k_y \Delta y / 2} \frac{\sin(k_z \Delta z / 2)}{k_z \Delta z / 2} \right\}$$

$$v_{i,j\pm 1/2} = F^{-1} \left\{ \hat{v} e^{\pm i k_y \Delta y / 2} \frac{\sin(k_z \Delta z / 2)}{k_z \Delta z / 2} \frac{\sin(k_x \Delta x / 2)}{k_x \Delta x / 2} \right\}$$
(2.7)

Onde k_x , k_y e k_z são os números de onda nas direcções respectivas.

3 Resultados e Verificação do código

Foram realizados vários "runs" para testar o código implementado. Duas delas são apresentadas aqui como prova do estado em que o programa se encontra no final deste trabalho. A primeira corrida é feita sem acoplar as equações (2.1) e (2.2), e como tal o que se obtém é um campo de velocidade não afectado pela adição de polímero e o mesmo se aplica ao tensor da conformação (i.e. não tem qualquer influência da velocidade que sai de *Navier-Stokes*). Na segunda corrida faz-se a acoplagem das equações ficando estas dependentes uma da outra e evoluindo desta forma no tempo. As condições de simulação são mostradas na Tab. 4.

Tab. 1. Condições de simulação utilizadas nos dois "runs" apresentadas neste artigo. As condições a destacar são o número de Reynolds (laminar), as dimensões da caixa e as propriedades do polímero (comprimento máximo do polímero, tempo de relaxação e concentração que permite obter a viscosidade do polímero). Nos dois "runs" o domínio foi discretizado com 128 pontos em ambas direcções.

Número de Schmidt Sc	0.7
Número de Reynolds Re	1000
Passo tempo Δt	0.1
Número máximo de iterações	1000
Comprimento da molécula de polímero L	100
Tempo de relaxação λ	0.1
Concentração de polímero β	0.7
Dimensão da caixa	4 diâmetros x 4 diâmetros

O campo inicial de velocidades é apresentado na Fig. 4.

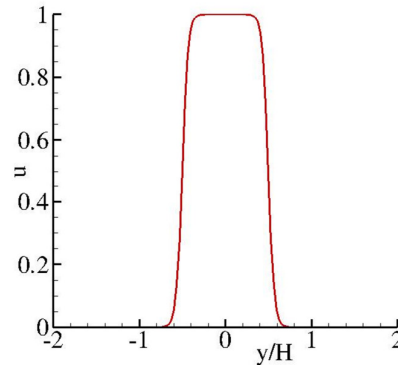


Fig. 4. Perfil da velocidade em tangente hiperbólica segundo x (segundo y não há velocidade) para ambos os "runs". H é metade do diâmetro do jacto.

Os campos de velocidade obtidos por ambos os "runs" são apresentados na Fig. 6. O instante em que foram tirados os campos é o último instante da simulação, pelo que é possível comparar os campos. O

primeiro aspecto de notar é a velocidade máxima maior¹ no caso em que se adicionou polímero. O segundo aspecto notável é o facto de não haverem zonas de recirculação quando se adiciona polímero, pois não há velocidades negativas. A zona fora do jacto é também mais uniforme com polímero do que sem este.

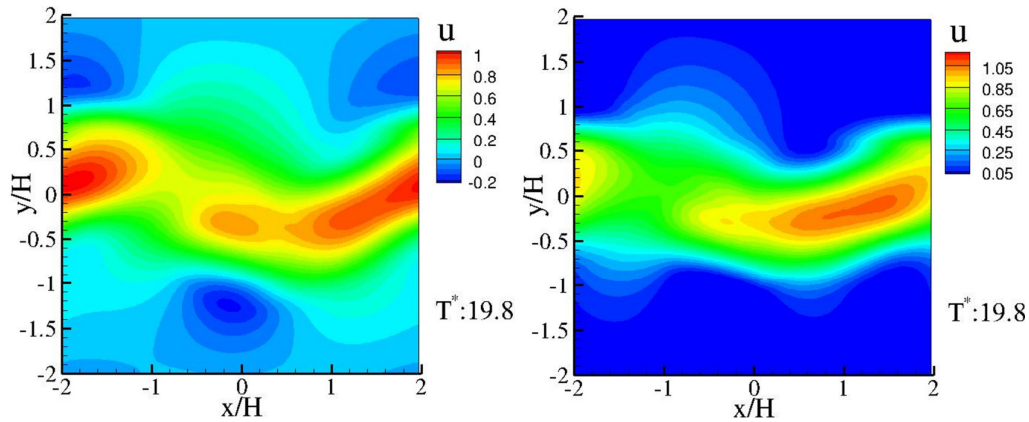


Fig. 5. Campos de velocidade segundo x numa solução sem polímero (à esquerda) e numa solução com polímero (à direita) no instante adimensionalizado 19.8. O tempo é adimensionalizado por um tempo de referência que é obtido dividindo o comprimento de referência H pela velocidade de referência (1 m/s neste caso).

Os resultados obtidos para a vorticidade são apresentados na Fig. 6. Pelas imagens recolhidas (no mesmo instante da Fig. 6) existe um erro de fase e de amplitude entre as soluções. Em termos quantitativos, os valores são semelhantes sendo os máximo e mínimo iguais.

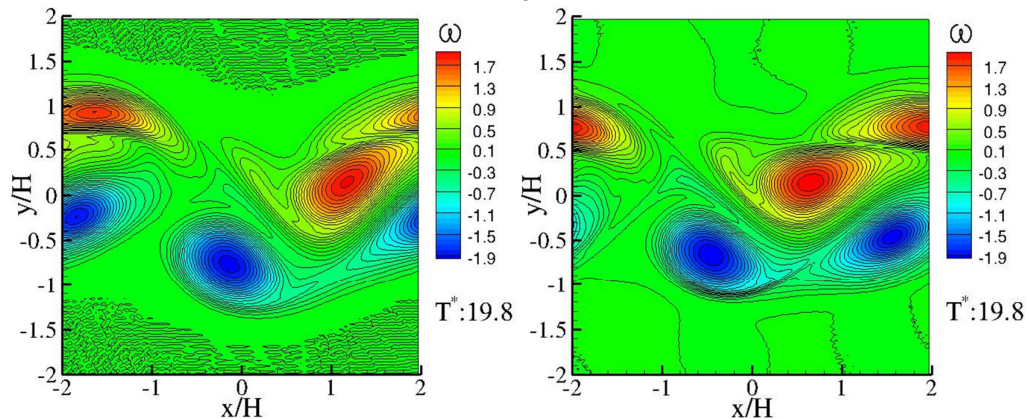


Fig. 6. Campos da vorticidade numa solução sem polímero (à esquerda) e numa solução com polímero (à direita) no instante adimensionalizado 19.8.

De seguida são apresentados os valores máximos de cada uma das componentes² do tensor da conformação, no domínio em estudo, ao longo do tempo. De notar que na solução sem acoplamento, há um instante para o qual todas as componentes instabilizavam (o que não era de esperar) mas com acoplamento isso já não acontece. Outro pormenor interessante é o facto da componente do tensor segundo z , C_{33} , não ser igual a zero apesar da análise ser feita a 2D. No entanto, já era esperado que assim fosse, pois foi feito um estudo analítico para o escoamento de Couette 2D e constatou-se que $C_{33} \neq 0$. Era também de esperar que este variasse muito pouco e que fosse sempre próximo de um, que é precisamente o que acontece para a solução acoplada.

¹ Este aspecto foi inclusivamente medido num ensaio de balística em que compararam os alcances obtidos pelas soluções com e sem polímero. Na altura, o ensaio foi um fracasso pois antes da solução visco-elástica ser expelida as cadeias de polímero partiram-se todas dada a elevada velocidade a que se sujeitou o fluido. No entanto, estes resultados estão de acordo com o que era de esperar na prática.

² São apenas apresentadas seis componentes do tensor uma vez que este é simétrico.

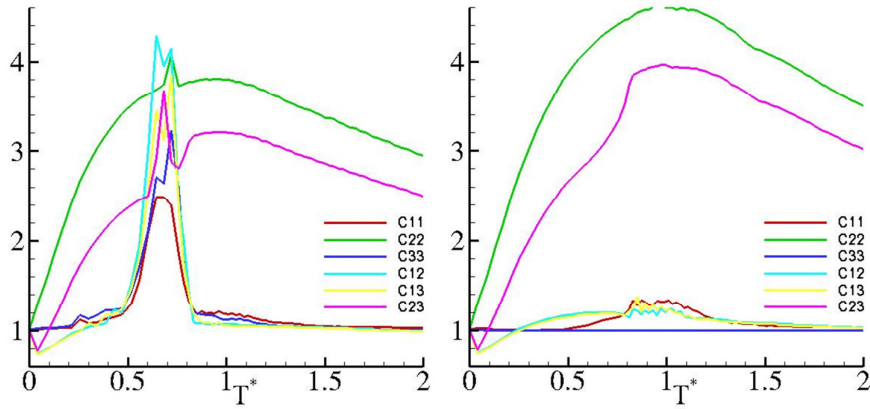


Fig. 7. Valores máximos (no domínio espacial em estudo) das componentes do tensor da conformação, ao longo do tempo (à esquerda sem acoplagem e à direita com acoplagem). Notar que não é apresentada toda a simulação, mas apenas a parte inicial que é a de maior relevância para a análise qualitativa aqui feita.

Outro aspecto importante a notar a partir da Fig. 7, é que o comprimento de extensão do polímero (dado por r , ver **Métodos Numéricos**) tem que ser menor que a extensão máxima possível do polímero (dada por L , ver **Métodos Numéricos** e Tab. 1). Uma vez que nestes "runs" $L = 100$, esta condição é respeitada em ambos os casos, o que à partida é um indício de que o programa está correcto, uma vez que é uma condição de física do polímero e que nada tem a ver com o tipo de escoamento ou condições em que o mesmo é ensaiado.

Apesar da sensibilidade ainda não ser apurada, é de notar que qualquer uma das componentes não toma valores negativos e que, como seria de esperar, as componentes não são simétricas. Tal como já foi referido nesta secção, a componente C_{33} , apesar de ser a 2D, não é nula pois é uma impossibilidade física que assim seja, mas é muito próxima de um em todo o domínio, que é justificado precisamente pelo facto de ser 2D. Notar que, no caso sem acoplagem, esta componente tomava valores muito diferentes de um (ver Fig. 7). Este é um indício de que a acoplagem está bem feita.

Nas Fig. 8 e 9, são apresentados os campos de solução de cada componente do tensor da conformação no domínio em estudo, no instante adimensionalizado 19.8, sem e com acoplagem, respectivamente.

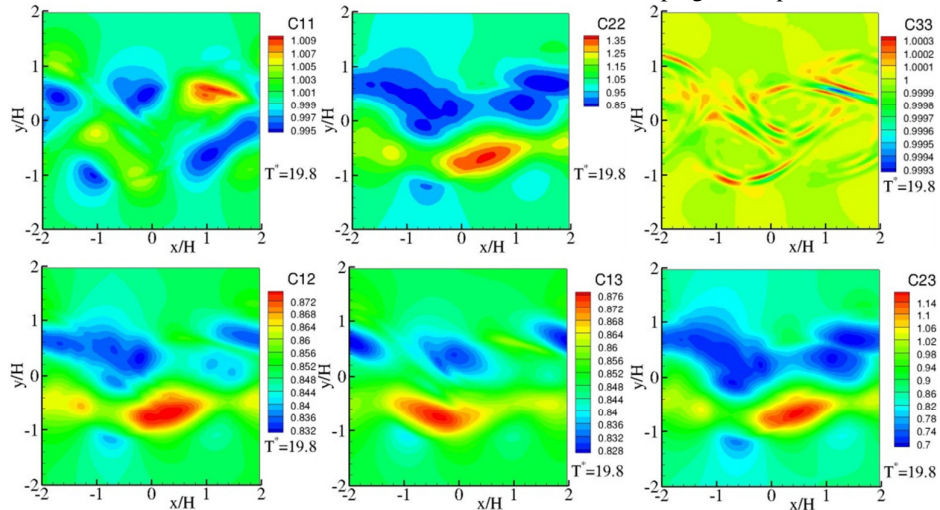


Fig. 8. Campos de solução de cada uma das componentes do tensor da conformação sem acoplagem, no domínio em estudo, no instante adimensionalizado 19.8.

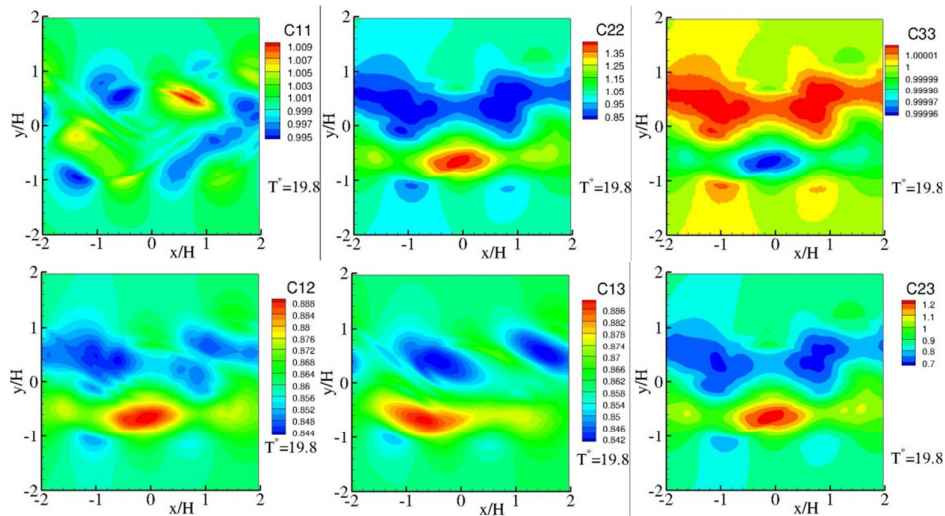


Fig. 9. Campos de solução de cada uma das componentes do tensor da conformação com acoplagem, no domínio em estudo, no instante adimensionalizado 19.8.

Por comparação das figuras acima, verifica-se que as soluções são semelhantes, o que é de esperar uma vez que o regime é laminar (ver **Introdução**). No entanto, há diferenças visíveis nomeadamente ao nível dos gradientes que são mais intensos no caso acoplado.

Usou-se para o efeito de verificação do código a solução analítica do escoamento de Couette (ver [7]). No entanto, uma vez que o código utilizado é pseudo-espectral, o campo de velocidade inicial tem que ser periódico e também as componentes do tensor da conformação o devem ser. Assim, o perfil de velocidade imposto inicialmente e congelado no tempo, durante a simulação, é aquele que é apresentado na Fig. 10.

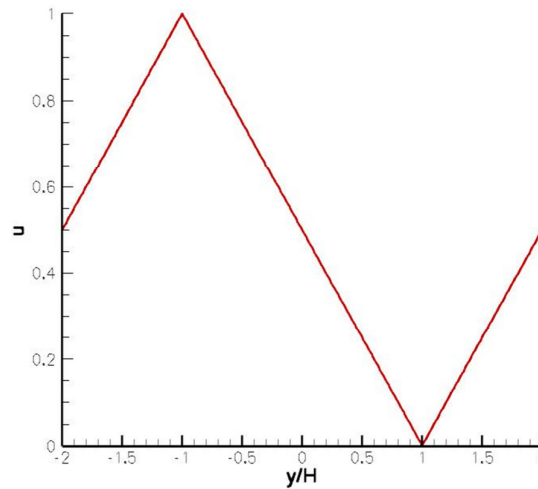


Fig. 10. Perfil de velocidade imposto inicialmente e congelado no tempo.

O campo de velocidade foi congelado à medida que a simulação decorria, i.e. o passo de actualização da discretização temporal feita através de RK foi anulado, de modo a fazer a solução do tensor da conformação convergir para a solução analítica. Como solução inicial para o tensor de conformação utilizou-se sempre o valor zero para todas as componentes.

De notar que o escoamento de Couette apenas se verifica na região central, logo é apenas nesta região que as soluções analítica e numérica são comparáveis. Em baixo apresentam-se as soluções analíticas para cada uma das componentes do tensor da conformação.

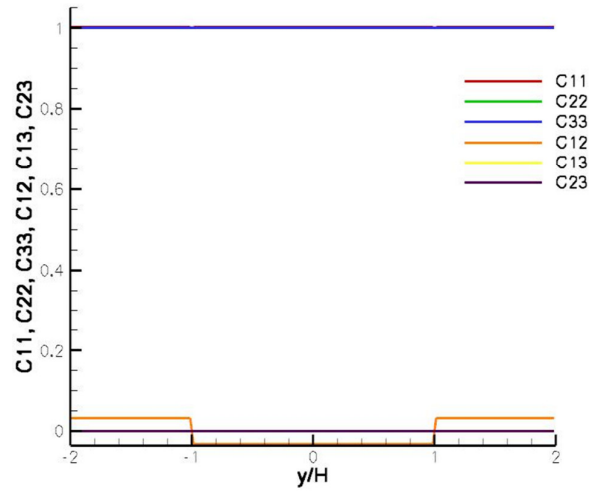


Fig. 11. Solução analítica para as seis componentes independentes do tensor da conformação (obtida de [7]). $L = 100$, $\tau = 0.1$ e $\beta = 0.9$.

Nas Fig. 12 e 13, são comparados os resultados obtidos para as componentes do tensor da conformação da diagonal e fora da diagonal, respectivamente.

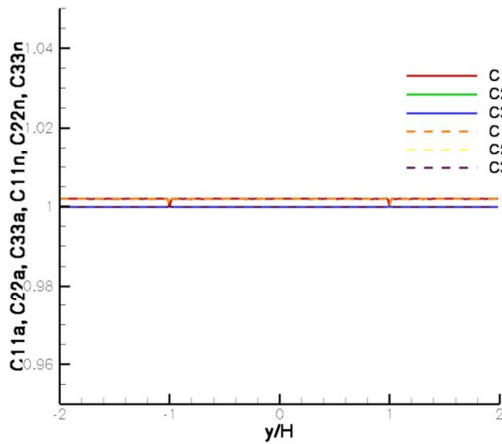


Fig. 12. Valores de C_{ii} analíticos e numéricos.

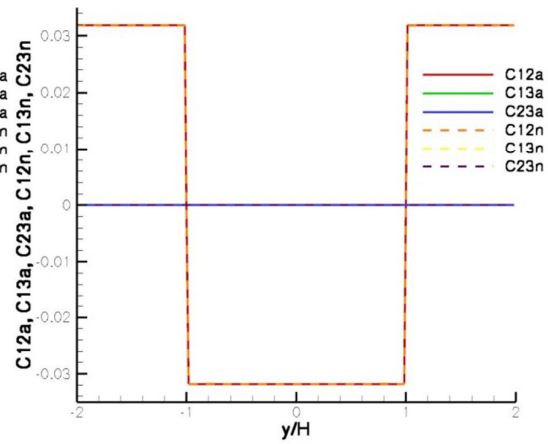


Fig. 13. Valores de C_{ij} analíticos e numéricos.

A Fig. 14 mostra um detalhe da Fig. 12, onde é possível perceber que a solução obtida numericamente segue *bem* a solução analítica.

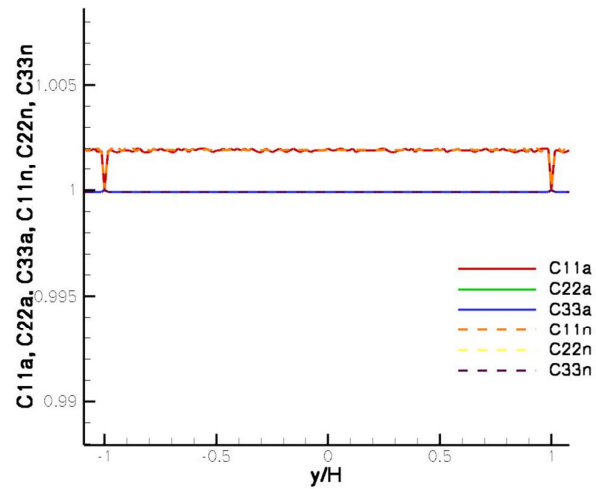


Fig. 14. Valores de C_{ii} analíticos e numéricos (detalhe da Fig. 13).

4 Conclusão e Trabalho Futuro

O trabalho desenvolvido, e apresentado ao longo deste artigo, inclui a implementação e acoplamento do modelo FENE-P a um código pseudo-espectral, verificação do código a duas dimensões com solução analítica disponível na literatura e a realização de "runs" para jato com variação dos parâmetros da simulação.

Como trabalho futuro, pretende-se estender o código existente, e utilizado como base para este artigo, a três dimensões de modo a estudar turbulência homogênea isotrópica. Pretende-se ainda perceber melhor a cascata de energia e a influência que as pequenas escalas têm nas grandes, quer no espaço físico quer no espaço de Fourier.

Referências

- [1] *Drag Reduction by Polymer Additives*, Diamond, P. *et al*, 1992, The MITRE Corporation, JASON Program Office A10, 7525 Colshire Drive, McLean, VA 22102
- [2] Annual Review of Fluid Mechanics, 2008, 40:235-56
- [3] *DNS study of decaying homogeneous isotropic turbulence with polymer additives*, W.-H. CAI, F.-. LI, H.-N. ZHANG, J. Fluid Mech., 2010, 1-23
- [4] *Numerical approach to simulating turbulent flow of a viscoelastic polymer solution*, T. Vaithianathan, Lance R. Collins, Journal of Computational Physics, 2003, 187, 1-21
- [5] *Turbulence models for viscoelastic fluids*, P. Resende, PhD Thesis Report, Faculdade de Engenharia do Porto, 2010
- [6] *Polymer-laden homogeneous shear-driven turbulent flow: a model for polymer drag reduction*, Lance R. Collins *et al*, J. Fluid Mech., 2010, 657, 189-226
- [7] *A low Reynolds number turbulence closure for viscoelastic fluids*, F.T. Pinho *et al*, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 2008, 154, 89-108
- [8] *Mecânica dos Fluidos Computacional*, Pereira, J.C.F., Volume 1, 2011, AEIST