

Verificação de um programa de computador para simulação de escoamentos viscoelásticos

Joana Malheiro*, Paulo J. Oliveira* e Fernando T. Pinho**

* Departamento de Engenharia Electromecânica

Universidade da Beira Interior

Calçada Fonte do Lameiro – Covilhã

Telf: +351 275 329952; e-mail: joanamouramalheiro@gmail.com, pjpo@ubi.pt

** Departamento de Engenharia Mecânica

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 Porto

Telf: +(351) 22 508 1597; e-mail: fpinho@fe.up.pt

Resumo — Neste trabalho foi investigada a aplicação de um código computacional para fluidos viscoelásticos quando estes são sujeitos a um escoamento pulsante. O problema considerado é aparentemente simples, dependente do tempo e de solução analítica conhecida. O escoamento é gerado por um gradiente de pressão oscilante periódico imposto a um escoamento Poiseuille constante entre duas placas infinitas paralelas. Os resultados foram obtidos para os modelos reológicos Oldroyd-B e UCM, para os quais foi avaliado o efeito do número de elasticidade (E), e expressos no tempo e no espaço. Observamos que a variação do número de elasticidade afecta a velocidade ao longo do tempo e através do canal, dependendo da razão de viscosidade do modelo. Dependendo das condições do escoamento, foi obtida boa concordância entre os resultados numéricos e analíticos, no entanto, em algumas situações foram necessários refinamentos da malha.

1. Introdução

Embora a solução de problemas não estacionários de escoamentos viscoelásticos seja de grande importância, quer por muitos escoamentos de interesse ocorrem em regime variável, quer devido à tendência dos sistemas não-newtonianos desenvolverem instabilidades ao longo do tempo, existe uma lacuna de casos teste capazes de avaliar o comportamento numérico dos códigos existentes. No trabalho de Duarte *et al* [1], que deu origem à presente investigação, foi verificado que o escoamento pulsante de fluidos viscoelásticos era vantajoso relativamente ao “start-up” para avaliar os códigos existentes pois: (i) é periódico, por isso, menos sensível às condições iniciais e os resultados numéricos podem ser verificados a cada período; (ii) não geram “choques” que dão origem a descontinuidades do gradiente de velocidade; e (iii) o controlo do erro de discretização e razão de convergência é melhor conseguido. No entanto, em Duarte *et al* [1] o escoamento pulsante foi estudado apenas para $E = 1$. No presente trabalho, o código numérico de simulação foi aplicado a um escoamento pulsante resultante da aplicação

de um gradiente de pressão que varia sinusoidalmente no tempo sobre um escoamento de Poiseuille constante entre duas placas infinitas paralelas. Os resultados numéricos e analíticos foram obtidos para dois modelos reológicos viscoelásticos (Oldroyd-B e UCM) e foram comparados para diferentes valores de elasticidade, $E = 0.01, 0.1, 1, 10$ e 100 .

Para estudar o efeito da elasticidade, em escoamento pulsante de fluidos não-newtonianos, foi necessário diminuir o tamanho dos passos no tempo quando se aumentava a elasticidade devido à elevada frequência esperada e observada para valores elevados de E .

A velocidade foi analisada no tempo (velocidade no plano central do canal) e no espaço (perfis transversais de velocidade) para diferentes valores de elasticidade e os erros de discretização correspondentes foram avaliados.

2. Equações de Governo

Em CFD (Computational Fluid Dynamics) a simulação numérica requer a solução simultânea de três equações: a equação da continuidade, a equação do movimento e a equação constitutiva. A equação da continuidade e do momento linear, na ausência de forças gravitacionais são expressas por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{e} \quad \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \eta_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (1)$$

onde \mathbf{u} é o vector de velocidade local de componentes u e v que correspondem às coordenadas cartesianas x e y , respectivamente, para um problema bi-dimensional, ∇p é o gradiente de pressão, η_s viscosidade do solvente, e $\boldsymbol{\tau}$ o tensor da tensão elástica. A forma geral da equação constitutiva, para os modelos viscoelásticos considerados, pode ser escrita como:

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

onde f e f' são funções de invariantes de τ que tomam o valor de $f = f' = 1$ para os modelos UCM e Oldroyd-B,

Do tensor da taxa de deformação, $\overset{\vee}{\boldsymbol{\tau}}$ é a derivada convectiva superior do tensor das tensões, η_p é a viscosidade do soluto polimérico e λ é o tempo de relaxação. As viscosidades do solvente e do soluto polimérico estão relacionadas:

$$\eta_0 = \eta_s + \eta_p \text{ e } \beta = \frac{\eta_s}{\eta_0} = \frac{\lambda_r}{\lambda} \quad (3)$$

onde η_0 é o coeficiente de viscosidade total, λ_r o tempo de retardação do fluido e β define a contribuição da viscosidade do solvente, caracterizando a natureza elástica do fluido, conjuntamente com o tempo de relaxação, λ . Nas equações (1) e (2), quando $\lambda = 0$ a equação constitutiva Newtoniana é recuperada com viscosidade η_0 . Para o fluido UCM a viscosidade do solvente é zero ($\eta_s = 0 \Leftrightarrow \beta = 0$), i.e., tem apenas a contribuição da viscosidade polimérica, sendo desprovido de qualquer termo difusivo explícito na equação da quantidade de movimento. O modelo Oldroyd-B, que tem a contribuição das viscosidades de solvente e do polímero em diferentes proporções ($0 < \beta < 1$) torna-se uma combinação linear dos modelos UCM ($\beta = 0$) e Newtoniano ($\beta = 1$). No presente problema, que envolve o escoamento em canal plano em condições completamente desenvolvidas, sujeito a um gradiente de pressão sinusoidal:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} = K_s + K_o \cos(\omega t) \quad (4)$$

a equação da continuidade é automaticamente satisfeita, a equação do momento linear reduz-se a:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{dp}{dx} + \eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \quad (5)$$

e a equação constitutiva para a componente de corte da tensão passa a ser escrita como:

$$\tau_{xy} + \lambda \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} = \eta_p \frac{\partial u}{\partial y} \quad (6)$$

Na Eq.(4) ρK_o é a amplitude do gradiente de pressão oscilante, ω é a frequência angular da oscilação correspondendo a um período $T = 2\pi / \omega$, e a magnitude do gradiente de pressão estacionário é ρK_s . São consideradas condições de não-escorregamento junto às paredes do canal, localizadas a $y = \pm h$ onde h é metade da altura total do canal,

$$u(y = \pm h, t) = 0, \text{ para } t > 0 \quad (7)$$

e o escoamento inicia-se sob condições quiescentes,

$$u(y, t = 0) = 0, \text{ para } -h \leq y \leq +h \quad (8)$$

Para a resolução do sistema de equações todas as variáveis foram usadas na forma adimensional,

$$\begin{aligned} t &\equiv t/T, \quad y \equiv y/h \\ u &\equiv u/\bar{u}_s \text{ onde } \bar{u}_s = \rho K_s h^2 / 3\eta_0 \\ \tau_{xy} &\equiv \tau_{xy} / \eta_0 \bar{u}_s / h \end{aligned} \quad (9)$$

Os grupos adimensionais mais importantes são o número de elasticidade, o número de Womersley e a razão do gradiente de pressão,

$$E = \frac{\lambda \eta_0}{\rho h^2}, \quad \alpha = h \sqrt{\frac{\omega \rho}{\eta_0}} \text{ e } \frac{K_o}{K_s} \quad (10)$$

A solução analítica para a velocidade é dada em Duarte *et al* [1] e será usada para comparar com os resultados numéricos obtidos,

$$u_n(y, t) = \frac{3}{2}(1 - y^2) + \frac{3K_o}{\alpha^2 K_s} \operatorname{Re} \left\{ i \left[\frac{\cosh(Zy)}{\cosh(Z)} - 1 \right] \exp(2\pi i t) \right\} \quad (11)$$

$$\text{onde } Z = \alpha \left(i \frac{1 + i\alpha^2 E}{1 + i\beta\alpha^2 E} \right)^{1/2}.$$

O erro de discretização é baseado na norma Euclideana aplicada à velocidade axial, avaliada quer por integração na secção transversal do canal ou como valor médio num período:

$$e(t) = \sqrt{\frac{1}{NY} \sum_i (u_{Ay}(y_i, t) - u_{th}(y_i, t))^2} \text{ ou } e = \frac{1}{N_t} \sum_{\text{period}} e(t) \quad (12)$$

Onde u_{Ay} é a solução numérica numa malha com NY volumes de controlo com espaçamento $\Delta y = 1/NY$ e N_t é o número total de passos no tempo num período, com $\Delta t = 1/N_t$.

2. Método Numérico

Foi usado um método implícito de volumes-finitos. As equações de governo foram integradas no espaço num volume de controlo através do método de diferenças centradas e no tempo em pequenos passo no tempo através do método dos três níveis temporais de forma a obter um sistema de equações algébricas linearizadas. Ambos os métodos são de segunda ordem e são aplicados em malha com espaçamento uniforme na direcção de y , onde as variáveis dependentes estão localizadas no centro do volume de controlo. A equação algébrica linearizada apresenta a seguinte forma geral,

$$a_p \phi_p^{n+1} = a_N \phi_N^{n+1} + a_S \phi_S^{n+1} + b \quad (13)$$

onde $\phi = u$ ou τ_{xy} , a_p é o coeficiente do centro do volume de controlo da célula em questão, a_N e a_S são os coeficientes do volume de controlo nas fronteiras norte e sul, respectivamente, b é o termo fonte que incorpora todos

os termos que não estão incluídos nos coeficientes e o índice superior n denota os níveis de tempo. Este sistema tri-diagonal de equações foi resolvido com o algoritmo para matrizes tridiagonais TDMA.

2. Resultados e Discussão

Os resultados obtidos são apresentados e discutidos nesta seção. Foram considerados dois modelos reológicos, Oldroyd-B e UCM, para os quais foi estudado o efeito da elasticidade no escoamento pulsante para $E = 0.01, 0.1, 1, 10$ e 100 . Os perfis de velocidade numéricos e analíticos foram apresentados no tempo e no espaço e comparados, tendo em atenção o refinamento da malha, os erros de discretização e convergência. Os valores da frequência adimensional ($\alpha = 4.864$) e da razão do gradiente de pressão ($K_0/K_S = 2.587$) são fixos [1]. Por ser esperada uma resposta de elevada frequência para valores elevados de elasticidade, foram usados diferentes passos no tempo para os diferentes valores de E . Assim, para $E = 0.01, 0.1$ e 1 foi usado $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$; para $E = 10$ foi $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ e para $E = 100$ o passo no tempo usado foi $\Delta t = 2 \times 10^{-5}$. Para melhorar a precisão dos resultados numéricos obtidos em determinadas condições de elasticidade foram utilizadas seis malhas diferentes com 100, 200, 400, 800, 1000 e 2000 volumes de controlo, i.e., com espaçamentos de $\Delta y = 0.02, 0.01, 0.005, 0.0025, 0.002$ e 0.001 (para um domínio no espaço de $y = -1$ a $y = +1$). Os erros de discretização foram calculados apenas quando o escoamento em regime oscilatório se encontrava completamente estabelecido.

A. Início do escoamento pulsante

O tempo necessário para o estabelecimento do escoamento dos fluidos Oldroyd-B e UCM é grandemente influenciado pelo número de elasticidade. O estado de escoamento completamente desenvolvido é alcançado apenas para valores muito elevados de tempo adimensional, este comportamento é ilustrado na Fig.1 onde a evolução da velocidade no plano central para os fluidos Oldroyd-B com $\beta = 0.01$ e UCM são apresentadas em função do tempo. Além disso a amplitude e o número de oscilações no arranque do escoamento aumentam significativamente com a elasticidade. Comparando modelos de fluidos com $\beta = 0.01$ e 0 , Fig.1 b) vê-se que a diminuição de β leva a oscilações com maiores amplitudes e consequentemente maior tempo até atingir o escoamento completamente desenvolvido. Estas oscilações de baixa frequência são originadas por uma frente de onda que oscila de parede a parede através do canal no início do escoamento.

B. Velocidade no plano central do canal

Os resultados apresentados nesta seção e nas seguintes são para escoamento completamente desenvolvido obtidos depois de fazer correr a simulação durante vários ciclos até que o ciclo fosse a repetição do anterior. Na Fig.2 é apresentada a evolução da velocidade no plano central durante um ciclo para diferentes valores de elasticidade (E

$= 0.01, 0.1, 1, 10$ e 100) usando os modelos reológicos considerados. Nos fluidos viscoelásticos, à medida que a

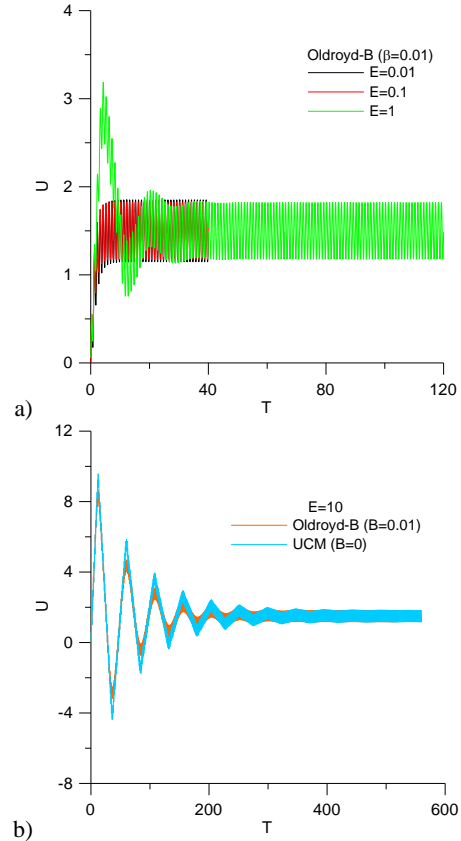


Fig. 1. Evolução da velocidade da linha central ao longo do tempo durante escoamento pulsante: a) para Oldroyd-B ($\beta = 0.01$) para números de elasticidade diferentes ($E = 0.01, 0.1$ e 1); b) para Oldroyd-B ($\beta = 0.01$) e UCM ($\beta = 0$) para $E = 10$

razão da viscosidade de solvente é reduzida o efeito da elasticidade torna-se visível. Independentemente do valor de β , para $E = 0.01$ todos os fluidos apresentam igual evolução da velocidade. Como consequência do aumento da elasticidade para $E = 0.1$ ocorre uma diferença em fase, que é observada em todos os modelos. Quando $E = 1$ o efeito da elasticidade passa a depender de β . Assim, embora o fluido Oldroyd-B com $\beta = 0.01$ (Fig.2 a) não seja praticamente influenciado por E (a velocidade apresenta praticamente a mesma evolução para $E = 0.01, 1, 10$ e 100) para $\beta = 0.001$ (Fig.2 b) a principal diferença é o aumento das oscilações em amplitude quando $E = 1$. Observando o fluido UCM (Fig.2 c) a velocidade no plano central para $E = 1$ é diferente em fase e maior em amplitude do que para menores valores de E , tendo, no entanto, um comportamento próximo ao apresentado pelo fluido Oldroyd-B ($\beta = 0.001$). Já para $E = 10$ e 100 mostra uma redução e um aumento significativo respectivamente em termos de amplitude das oscilações. Para o fluido Oldroyd-B ($\beta = 0.01$) independentemente do número de elasticidade obteve-se boa concordância entre os resultados numéricos e as soluções analíticas. Quando β é diminuído para 0.001 não se observou concordância entre os resultados apenas para $E = 1$. No entanto, para o fluido UCM em que $\beta = 0$ foi obtida concordância entre os resultados numérico e analíticos apenas para valores de E baixos (0.01 e 0.1) com a malha mais grossa ($\Delta y = 1 \times 10^{-2}$). Nas situações em que a concordância não foi obtida

com esta malha procedeu-se ao seu refinamento, obtendo-se resultados em perfeita concordância usando malha de espaçamento $\Delta y = 1 \times 10^{-3}$.

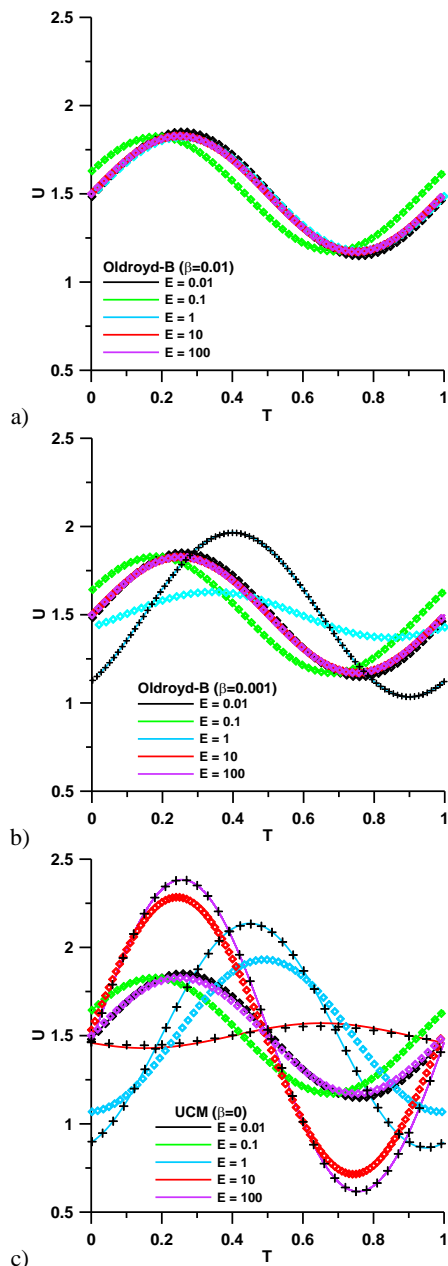


Fig. 2. Evolução da velocidade na linha central ao longo de um período durante escoamento pulsante: a) e b) Oldroyd-B ($\beta = 0.01$ e 0.001); e c) UCM ($\beta = 0$) para diferentes números de elasticidade. Previsões numéricas com $\Delta y = 1 \times 10^{-2}$ (símbolos coloridos), $\Delta y = 1 \times 10^{-3}$ (cruzeiros pretos) e soluções analíticas (linhas).

C. Perfis de velocidade no espaço

Na Fig.3 está ilustrado o efeito da elasticidade nos perfis de velocidade para os modelos Oldroyd-B ($\beta = 0.01$ e 0.001) e UCM ($\beta = 0$) para um tempo angular $\omega t = 0^\circ$. Pelos resultados obtidos verifica-se que à medida que a razão de viscosidade é diminuída a influência do número de elasticidade aumenta. A ausência de oscilações para $E = 0.01$ e a presença de oscilações suaves para $E = 0.1$ é um comportamento geral observado nos modelos de fluidos

viscoelásticos. O fluido Oldroyd-B ($\beta = 0.01$) (Fig.3 a)) apresenta, para $E = 1$, oscilações visíveis, em termos de amplitude e frequência, relativamente a menores valores de E , e para $E = 10$ e 100 aparecem pequenas oscilações junto à parede. No modelo Oldroyd-B, para $\beta = 0.001$ (Fig.3b)) as oscilações para $E = 1$ aumentam em termos de amplitude e para $E = 10$ e 100 as oscilações junto à parede propagam-se até uma distância maior das paredes, relativamente ao modelo Oldroyd-B ($\beta = 0.01$) (Fig.3 a)). Considerando o fluido UCM (Fig.3 c) e d)) as principais diferenças residem no aumento da amplitude das oscilações para $E = 1$ (Fig.3 c)), enquanto para $E = 10$ e 100 (Fig.3 d)) as oscilações, em vez de se concentrarem junto à parede, propagam-se ao longo de toda a secção transversal do canal aumentando significativamente a sua frequência, embora com muito menores amplitudes.

Os perfis de velocidade foram também obtidos para quarto instantes no tempo durante um período oscilatório com tempos angulares $\omega t = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ e 270° (Fig.4). De uma forma geral, os modelos Oldroyd-B revelam um aumento inicial e depois uma redução das oscilações à medida que o número de elasticidade é aumentado de 0.01 a 100 , apresentando maiores oscilações para $E = 1$. Já o modelo UCM ($\beta = 0$) apresenta uma evolução diferente que é ilustrada na Fig.4. Os perfis de velocidade para $E = 0.01$ (Fig.4 a)) não apresenta oscilações tal como acontece com os fluidos Newtonianos [1], mas quando o número de elasticidade é aumentado para 0.1 aparecem suaves oscilações ao longo do canal. Para estes dois valores de E a influência do valor de β não se faz notar. Para $E = 1$ a propagação dos movimentos oscilante estão claramente espalhados ao longo da secção transversal do canal apresentando elevada amplitude e uma frequência bem estabelecida (4-5 ciclos). Este comportamento é em muito semelhante ao apresentado pelos modelos Oldroyd-B. Quando $E = 10$, enquanto que para os modelos Oldroyd-B as oscilações não se estendem por toda a secção transversal do canal mas estão restringidas a uma região junto à parede do canal, no fluido UCM as oscilações propagam-se por toda a secção transversal do canal. Além disso, a figura mostra claramente que são necessárias malhas mais finas para números de elasticidade iguais a 1 e 10 de forma a conseguir reproduzir numericamente os perfis teóricos: enquanto 200 volumes de controlo ($\Delta y = 0.01$) são suficientes para $E = 0.01$ e 0.1 , para $E = 1$ e 10 são necessários pelo menos 2000 volumes de controlo ($\Delta y = 0.001$).

D. Erros de discretização e Convergência do erro

A distribuição do erro de discretização ao longo de um ciclo foi calculado para seis malhas uniformes usando os diferentes valores de E . Para o valor mais baixo de elasticidade os erros revelaram um paralelismo regular, com uma separação constante à medida que os espaçamentos da malha são diminuídos segundo as $\Delta y_1 = \Delta y_2/2$, que é usual em métodos de segunda ordem precisos, e a magnitude do erro aumenta com o número de elasticidade até $E = 1$, a partir do qual volta a diminuir para os modelos Oldroyd-B. Além disso, enquanto que para $E = 0.01$ o erro é menor que 10^{-3} em todas as malhas, para $E = 10$ o erro apenas é menor do que 10^{-3} quando é usado na

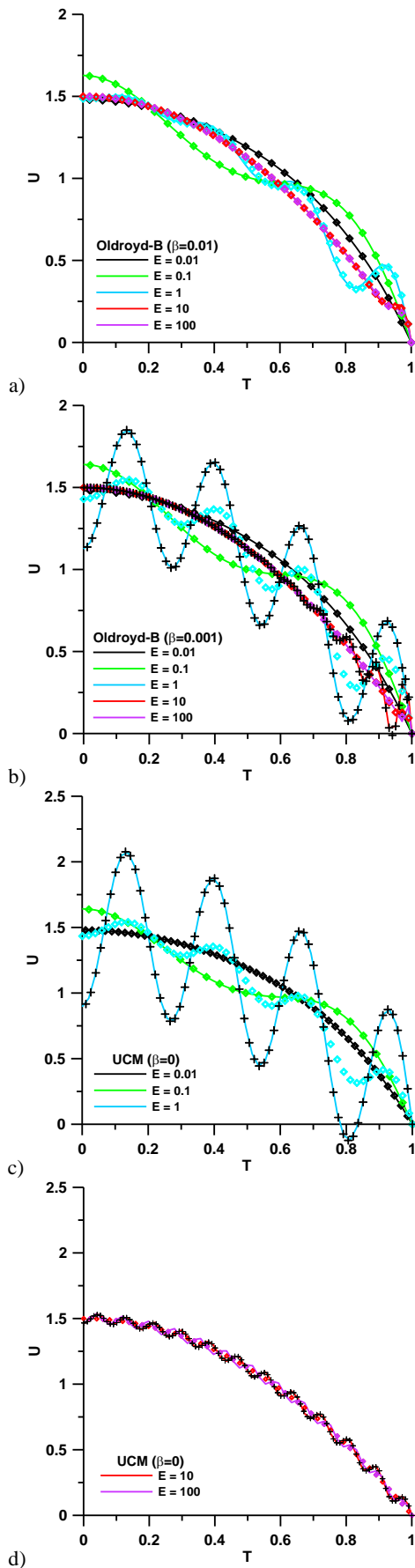


Fig. 3. Perfis de velocidade a $\omega t = 0^\circ$ em regime oscilatório dos fluidos: a) e b) Oldroyd-B ($\beta = 0.01$ e 0.001), e c) e d) UCM ($\beta = 0$). Previsões numéricas com $\Delta y = 1 \times 10^{-2}$ (símbolos coloridos), $\Delta y = 1 \times 10^{-3}$ (cruzes pretas) e soluções analíticas (linhas).

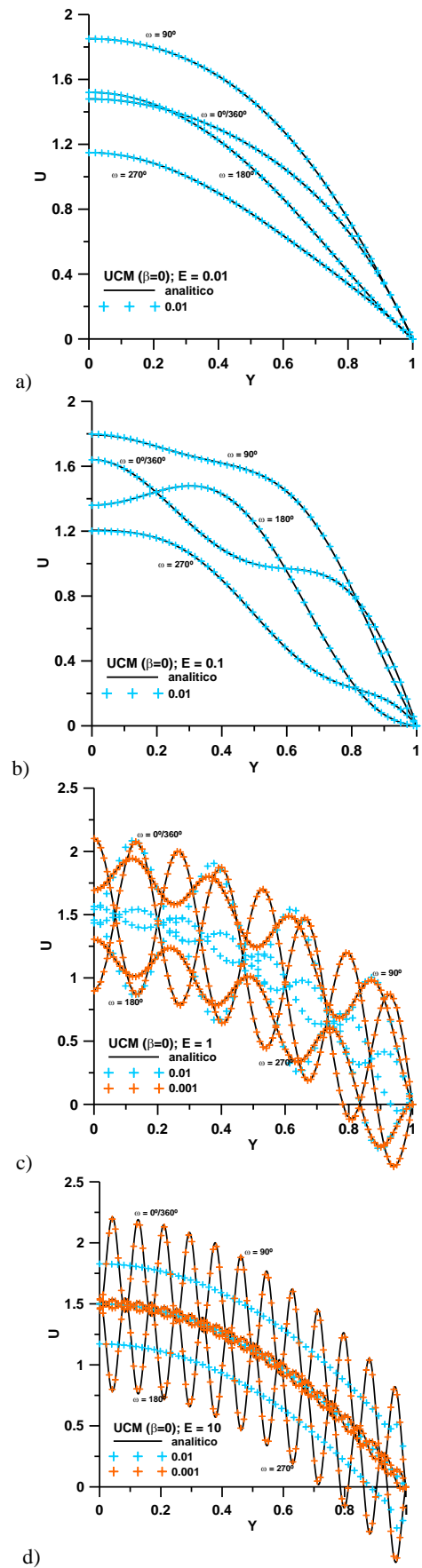


Fig. 4. Resultados numéricos (símbolos) e analíticos (linhas) dos perfis de velocidade do fluido UCM ($\beta = 0$) em regime oscilatório durante um ciclo para diferentes valores de E. Os resultados numéricos foram obtidos com espaçamentos de $\Delta y = 1 \times 10^{-2}$ (azul) e $\Delta y = 1 \times 10^{-3}$ (laranja).

malha o espaçamento $\Delta y = 1 \times 10^{-3}$. A razão de convergência do erro médio num ciclo calculado pela Eq.(12) obtida para os diferentes modelos para diferentes valores de elasticidade num período são ilustrados na Fig.5 como símbolos tal como as respectivas linhas de tendência, obtidas pela eq. da lei de potências. Os gráficos da Fig.5 mostram que a magnitude do erro diminui com o refinamento da malha para todas as situações, apresentando, no entanto numa razão de convergência de $p = 2.01$ apenas quando $E \leq 1$ de acordo com a segunda ordem do método numérico aplicado. Quando $E = 10$ a ordem de convergência diminui para aproximadamente $p = 1.7$ para o modelo Oldroyd-B e para $p = 1.5$ para o UCM. Verifica-se também que para todos os fluidos a magnitude do erro aumenta à medida que E aumenta até $E = 1$ diminuindo, no entanto, para valores superiores a 1. O erro aumenta também com a diminuição de β .

3. Conclusões

O problema de escoamento pulsante iniciado por Duarte *et al* [1] é aqui estendido para vários valores de elasticidade. A análise de escoamentos de fluidos viscoelásticos começou com a avaliação do escoamento durante o regime transiente até que o escoamento completamente desenvolvido fosse atingido. Aqui, ao aumentar o número de elasticidade, foi necessário mais tempo para atingir o escoamento completamente desenvolvido e oscilações com maior comprimento de onda do que o imposto pelo gradiente de pressão sinusoidal, aumentando significativamente em amplitude e frequência. Foi também mostrado que à medida que β tende para zero as oscilações da propagação de onda também aumentam em frequência e amplitude. Depois, a influência de E foi analisada durante um período através da observação da evolução da velocidade no plano central do canal. À medida que β tende para zero o valor de E , nomeadamente para $E \geq 1$, tende a ter maior importância na evolução da velocidade. Observou-se também que para o modelo Oldroyd-B apenas se obteve boa concordância entre os resultados numéricos e analíticos com malhas $\Delta y = 0.01$. Por outro lado, para o fluido UCM foi necessário aplicar malhas mais refinadas ($\Delta y = 0.001$) para obter concordância entre os resultados, para valores $E \geq 1$. Os perfis de velocidade foram apresentados em metade do canal, primeiro para $\omega t = 0^\circ$ e depois em quatro momentos diferentes no tempo, ao longo de um período, variando E . Foi observado que à medida que a elasticidade aumenta de 0.01 para 1 ocorrem oscilações transversas, que aumentam em termos de amplitude até $E = 1$, e diminuem depois até $E = 100$. Em concordância com [1] foi observado que à medida que a elasticidade é aumentada e β é diminuído a precisão dos resultados numéricos deteriora-se, e por isso são necessários maiores refinamentos da malha e do passo no tempo para aumentar a precisão.

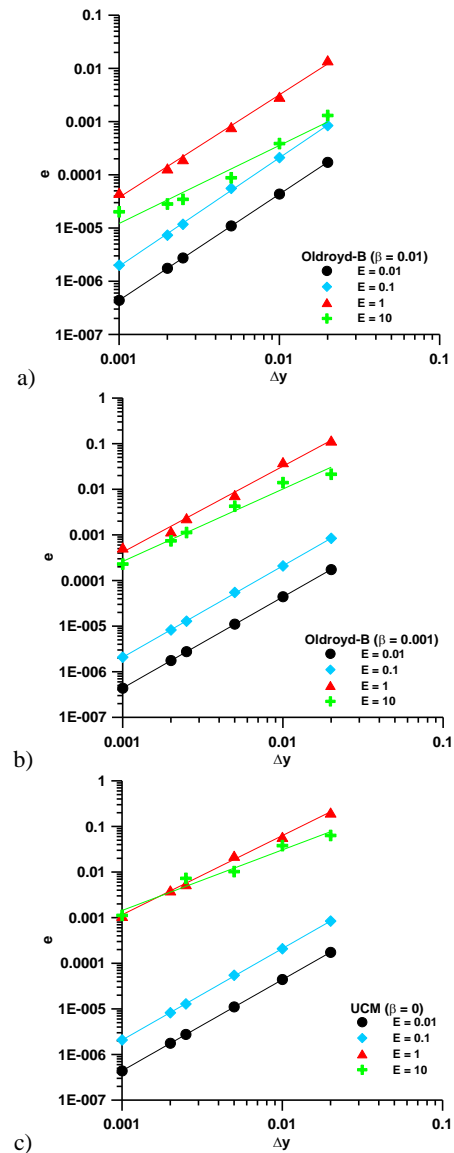


Fig .5. Gráficos de convergência para escoamento pulsante dos modelos de fluidos Oldroyd-B e UCM para valores diferentes de elasticidade.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à Fundação para a Ciência e Tecnologia pelo apoio financeiro através do projecto PTDC/EME-MFE/70186/2006.

Referências

- [1] A.S.R. Duarte, A.I.P. Miranda, P.J. Oliveira, Numerical and analytical modeling of unsteady viscoelastic flows: The start-up and pulsating test case problems, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 154: 153–169, 2008.