

A METODOLOGIA DOS VOLUMES FINITOS APLICADA À REOLOGIA COMPUTACIONAL: I- INTRODUÇÃO

F. T. Pinho^(a) and P. J. Oliveira^(a)

- (a) Centro de Estudos de Fenómenos de Transporte, DEMEGI, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Rua Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal
- (b) Departamento de Engenharia Electromecânica, Universidade da Beira Interior Rua Marquês D'Ávila e Bolama, 6200 Covilhã, Portugal

e-mails: fpinho@fe.up.pt, pjpo@ubi.pt

* - A correspondência pode ser enviada para qualquer dos autores

Palavras-Chave: Reologia Computacional, Volumes Finitos

Sumário: O cálculo numérico de escoamentos e outros fenómenos de transporte envolvendo fluidos não-Newtonianos é cada vez mais frequente, constituindo um método muito poderoso de projecto e diagnóstico em engenharia. Por razões históricas, os métodos de cálculo numérico usados em Reologia Computacional, nome por que é conhecida esta área quando estão envolvidos fluidos viscoelásticos de elevada viscosidade, baseiam-se sobretudo na metodologia dos elementos finitos, mas esta tem elevados custos computacionais quando comparada com a metodologia dos volumes finitos. O método dos volumes finitos tem uma grande tradição na Mecânica dos Fluidos clássica e por outro lado é menos exigente em recursos computacionais, sendo por isso uma alternativa viável e interessante no âmbito da Reologia Computacional. Só nos últimos 5 anos se assistiu a um franco desenvolvimento na aplicação dos volumes finitos à Reologia Computacional, mas não está ainda disponível um texto que englobe o conhecimento existente sobre esta técnica. Achamos pois que esta seria a altura de iniciar um conjunto de textos sobre a aplicação da metodologia dos volumes finitos à Reologia Computacional, a apresentar nesta revista, e que constituirão o embrião de uma obra a editar futuramente.

Este primeiro artigo começa por enquadrar a metodologia dos volumes finitos na perspectiva da Reologia Computacional, enunciando alguns dos desenvolvimentos mais relevantes. As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia, que devem ser resolvidas num problema de cálculo numérico de fluidos não-Newtonianos, são formuladas na Secção 3, e o artigo encerra com a apresentação de alguns modelos constitutivos reológicos tipo para fluidos viscoinelásticos e viscoelásticos.

1. INTRODUÇÃO

1.1. Metodologias de cálculo numérico

Uma grande variedade de metodologias é utilizada no cálculo de escoamentos, mas quando analisado na perspectiva dos métodos usados na discretização das equações diferenciais somos conduzidos a três grandes grupos, a saber: o método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos e o método dos volumes finitos. O primeiro grupo é o mais antigo, mas na sua forma pura é hoje pouco utilizado pois não verifica a conservação das quantidades físicas. No entanto, as diferenças finitas são usadas em combinação com uma metodologia que obriga à conservação das quantidades físicas, como é o método dos volumes finitos, que tem como ponto de partida a forma integral das equações de conservação.

O método dos elementos finitos também pode assegurar a conservação das quantidades físicas, distinguindo-se dos volumes finitos no facto de, naquele, as equações serem multiplicadas por uma factor de ponderação antes da sua integração. No método dos elementos finitos a solução de uma equação é aproximada por uma função em cada um dos elementos do domínio de cálculo, a qual é então substituída na equação de conservação. A procura da solução consiste em derivar essa equação em ordem a cada valor nodal e em requerer que essas derivadas sejam nulas para daí se encontrarem os parâmetros da função ajustada inicialmente. Se a equação a resolver fôr previamente colocada na forma integral então o método, designado por CVFEM (método dos elementos finitos com volume de controle no inglês), assegurará a conservação da quantidade física em questão.

No método dos volumes finitos as equações diferenciais são obrigatoriamente integradas em cada volume de controlo da malha de cálculo, por forma a assegurar a conservação das grandezas físicas, procedendo-se então à discretização das equações. As equações integrais são discretizadas com diferenças finitas a substituir as derivadas, dando assim origem a um conjunto de equações algébricas onde as incógnitas são os valores nodais das várias propriedades físicas. A resolução dos sistemas de equações algébricos por métodos numéricos conduz à solução sob a forma de valores das grandezas nos nós da malha.

Cada metodologia tem, naturalmente, as suas vantagens e desvantagens, e ao longo do tempo foram sendo criadas estratégias que visaram colmatar as respectivas deficiências. Desde os anos 60 que a literatura abunda em obras que focam ambas as estratégias no contexto da Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor com fluidos Newtonianos: para os elementos finitos temos, por exemplo, Zinkiewicz [1], Girault e Raviart [2], Fletcher [3] e Hirsch [4], entre outros, e para os volumes finitos o trabalho clássico de Patankar [5], para além dos mais recentes livros de Versteeg e Malalasekera [6] e Ferziger e Perić [7]. No que diz respeito aos métodos numéricos usados com fluidos não-Newtonianos destacamos, sobretudo por razões históricas, a obra de Crochet et al [8] mas os desenvolvimentos dos últimos 15 anos não estão de facto contidos em nenhuma obra de referência, nem mesmo para elementos finitos. Aqui é necessário consultar uma série de artigos recentes (por exemplo, Marchal e Crochet [9], Fortin e Fortin [10] e Sun et al [11], entre outros) ou então o capítulo 7 da obra de Huilgol e Phan-Thien [12].

De qualquer das formas é assente que, se a metodologia dos elementos finitos é mais versátil geometricamente, e por isso atractiva para geometrias muito complexas, por outro requer um esforço computacional elevado devido ao aparecimento de matrizes sem banda definida. Por outro lado, os volumes finitos são de fácil adaptação a diferentes configurações, apresentam um menor esforço computacional e de memória devido ao aparecimento de matrizes em banda, para além de assegurar facilmente a conservação das quantidades e serem mais transparentes as implicações físicas das modificações implementadas.

As vantagens dos volumes finitos relativamente aos elementos finitos, em termos de requerimentos de memória e capacidade computacional, aumentam quando se trata de fluidos viscoelásticos por via do aumento do número de equações a resolver. Esta é aliás uma realidade reconhecida pelos investigadores que desenvolveram trabalhos seguindo ambas as filosofias (Phan-Thien e Tanner em vários dos seus trabalhos: por exemplo, Huang et al [13] e Fan et al [14]). No entanto, os recentes desenvolvimentos de volumes finitos para malhas não-estruturadas darão também a estes alguma das vantagens de índole geométrica tradicionalmente inerentes aos elementos finitos. Apesar das suas vantagens, os volumes finitos têm tido uma aplicação limitada no cálculo de escoamentos de fluidos viscoelásticos e só na última década alguns grupos de investigação começaram a dedicar um esforço significativo ao desenvolvimento de estratégias adequadas ao tratamento de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Este estado de coisas tem uma origem provável no facto de um número

elevado de investigadores no campo da Reologia Computacional ter um experiência anterior em Mecânica dos Sólidos, onde imperam os elementos finitos, e não na Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) clássica onde os volumes finitos se usam mais frequentemente. Note-se ainda a este propósito, que os elementos finitos sempre deram mais problemas no tratamento de escoamentos em regime turbulento, caso mais frequente do CFD clássico, situação que contudo não se coloca na Reologia Computacional onde os escoamentos são invariavelmente em regime laminar.

1.2. Breve perspectiva histórica dos volumes finitos em Reologia Computacional

Um dos primeiros trabalhos numéricos utilizando volumes finitos com fluidos viscoelásticos foi a investigação do escoamento em torno de um cilindro circular de fluidos convectivos superiores de Maxwell (UCM-upper convected Maxwell) por Hu e Joseph [15]. Neste trabalho utilizaram-se malhas ortogonais desfasadas e o algoritmo SIMPLER foi adaptado ao cálculo dos componentes do tensor das tensões. Contudo, os termos inerciais da equação da quantidade de movimento foram desprezados porque os cálculos se limitaram a escoamentos de muito baixo número de Reynolds, tendo-se atingido a convergência para números de Weissenberg até 10.

Os termos inerciais são indispensáveis ao cálculo de escoamentos que não sejam de baixo número de Reynolds, mas a sua inclusão pode ter consequências adversas na convergência iterativa de métodos desenvolvidos para escoamentos com fraca advecção (baixo número de Reynolds). É por isso importante desenvolver metodologias de cálculo que considerem à partida a existência da inércia por forma a generalizar os métodos de cálculo, como fez Yoo e Na [16] nos seus estudos de escoamentos em contrações súbitas. Apesar deste progresso Yoo e Na só consideraram esquemas de interpolação de primeira ordem para os termos convectivos, que são conhecidos da Mecânica dos Fluidos Computacional Clássica (Leschziner [17]) por introduzirem graves problemas de difusão numérica quando o escoamento não se encontra alinhado com a malha. Este problema foi indentificado há muito tempo (Patankar [5]) e pode ser observado na Figura 1 que mostra a evolução de um escalar ϕ num escoamento oblíquo à malha para uma situação de convecção pura (difusão molecular nula). No caso da figura utiliza-se o método de discretização de montante, que é de primeira ordem, conhecido também por UDS (upwind difference scheme) para diferentes malhas e os resultados são comparados com a solução exacta. Como se observa, mesmo numa malha fina com 200 células de lado, o esquema UDS resulta num grau de difusão numérica que não é desprezável

O uso de malhas deslocadas foi a prática utilizada por Yoo e Na, bem como por outros autores que nos anos seguintes utilizaram os volumes finitos com fluidos viscoelásticos (Gervang e Larsen [18]; Sasmal [19] e Xue et al [20,21]). As malhas desfasadas para quantidades escalares e velocidades facilitam o acoplamento dos campos de pressão e velocidade, como discutido por Patankar [5] que apresenta algumas técnicas para efectivar essa ligação. Contudo, a sua utilização com malhas de forma genérica para representar geometrias complexas coloca enormes dificuldades e grande dispêndio de recursos computacionais. As geometrias industriais não são geralmente simples e por isso prefere-se o uso de malhas não-ortogonais colocadas, devendo ser esta a filosofia a presidir ao desenvolvimento de um método moderno de cálculo.

Este é um problema que foi resolvido na metodologia dos volumes finitos do CFD clássico e exemplifica bem o distanciamento entre essa disciplina e a Reologia Computacional. A Reologia Computacional parece utilizar métodos que foram já desenvolvidos pelo CFD clássico em finais dos anos 80 não havendo, com algumas excepções, uma transferência de

"know-how" suficientemente rápido em questões tão importantes como o acoplamento pressão-velocidade para malhas colocadas, a marcha no tempo, ou o uso de malhas colocadas não ortogonais. É necessário adoptar rapidamente esses métodos e estudar as alterações que devem ser consideradas na previsão de escoamentos de fluidos viscoelásticos com volumes finitos.

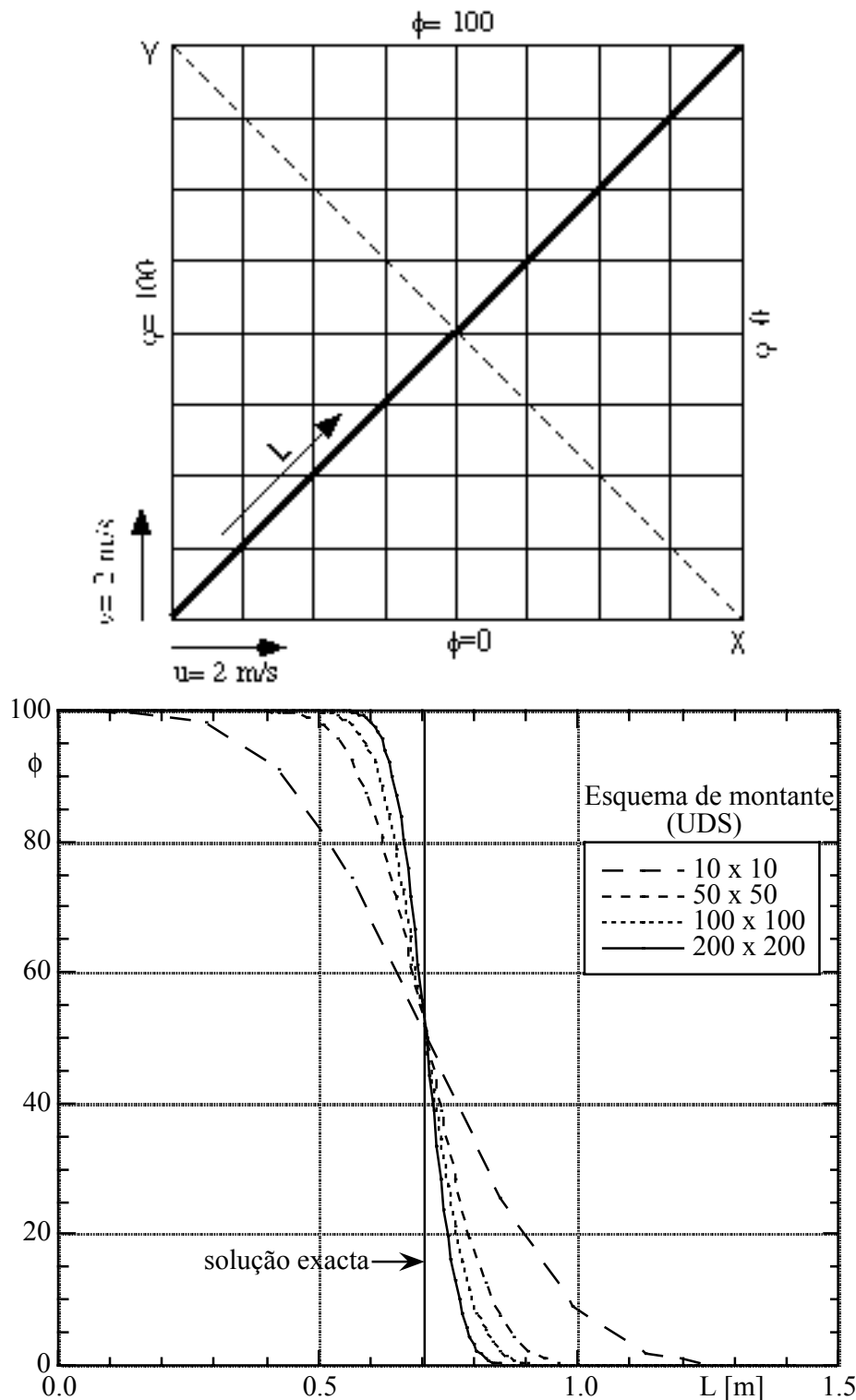


Figura 1 - Efeito do refinamento da malha sobre a difusão numérica quando o esquema de discretização é o esquema de primeira ordem de montante (UDS). O perfil de ϕ é obtido no plano marcado a tracejado na parte superior da figura. L é a distância ao longo da diagonal.

Isto foi reconhecido, por exemplo, por Huang et al [13], que usaram métodos não-estruturados baseados na formulação mista elementos finitos/ volumes finitos (CVFEM) para prever o escoamento de fluidos de Phan-Thien—Tanner em chumaceiras. Contudo, a formulação do método de cálculo apresentado nesse trabalho carecia ainda da generalidade e elegância que hoje em dia transparece nas obras que expõem os métodos do mesmo tipo utilizados em CFD, que estão fortemente baseados em malhas colocadas (Ferziger e Perić [7]).

Desde meados da década de 90 que a nossa equipa tem trabalhado em Reologia Computacional, tentando adaptar os métodos de volumes finitos correntes em CFD. Assim, em 1998 Oliveira, Pinho e Pinto [22] apresentaram um método de cálculo baseado em malhas colocadas não-ortogonais para a solução das equações de transporte e reológica completas, incluindo a componente transiente, embora os cálculos apresentados dissessem apenas respeito a escoamentos em regime permanente. O recurso a malhas colocadas levou assim à contribuição mais importante do artigo, que foi o desenvolvimento de um método de acoplamento entre os campos de tensão, pressão e velocidade. Ao utilizar malhas colocadas não-ortogonais foi assim possível prever, com facilidade, escoamentos em geometrias não-ortogonais de que é exemplo o campo de tensões axial normal (τ_{xx}) em torno de um cilindro na Figura 2.

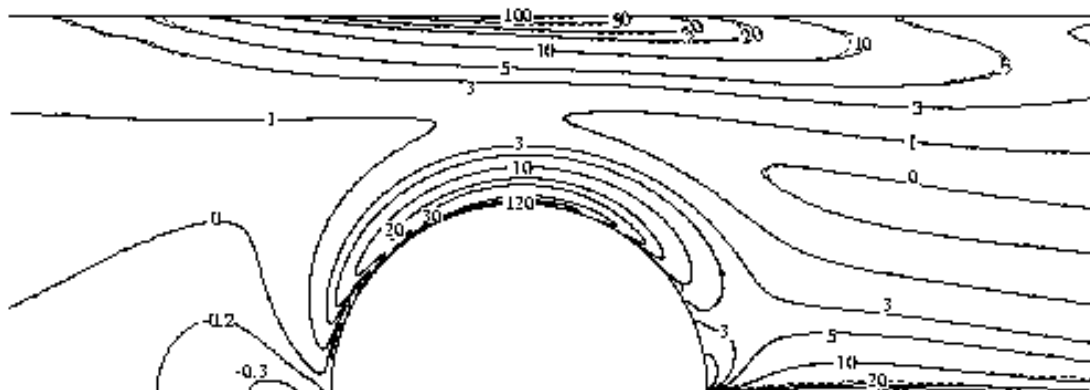


Figura 2 - Isolinhas da tensão normal axial (τ_{xx}) no escoamento de um fluido de Oldroyd-B em torno de um cilindro para $De= 0.9$ (De Alves et al, 2001).

O acoplamento dos campos de tensão, pressão e velocidade é um dos aspectos fundamentais do método de volumes finitos, e também dos métodos baseados nos elementos finitos, e o assunto foi novamente abordado em Oliveira e Pinho [23] onde se apresentou uma variante do método de interpolação desenvolvido anteriormente. Aspectos relacionados com a precisão dos cálculos foram o tema dos trabalhos seguintes (Oliveira e Pinho [24]), que usaram esquemas de interpolação de segunda ordem para os termos convectivos das equações das tensões (LUDS-esquema linear de montante e CDS- esquema de diferenças centradas), e assim chegamos aos desenvolvimentos mais recentes onde se deu um salto qualitativo muito importante quer ao nível da precisão do cálculo quer da convergência iterativa por recurso aos chamados métodos de alta resolução (Alves et al [25]). Estes últimos desenvolvimentos já permitiram obter resultados com o mesmo nível de precisão dos métodos mais avançados baseados em elementos finitos (Alves et al [26]), bem como atingir convergência iterativa a níveis próximos daqueles (medidos pelo número de Weissenberg máximo a que ocorre divergência). Isso está bem ilustrado na Figura 3 onde se compara o coeficiente de arrasto do escoamento em torno de um cilindro obtido por diferentes métodos de elementos e volumes finitos. Por razões discutidas em Fan et al [14] os valores considerados mais precisos são os

menores, e a Figura 3 mostra claramente que os volumes finitos conseguem o mesmo nível de precisão das metodologias de elementos finitos mais recentes.

Já mencionamos que os volumes finitos são também usados em combinação com a metodologia dos elementos finitos para assegurar a conservação das quantidades físicas como foi inicialmente efectuado por Baliga e Patankar [27]. No âmbito da Reologia Computacional essa combinação tem sido concretizada, por exemplo, por Wapperom e Webster [28] e Phan-Thien/ Dou [29,30].

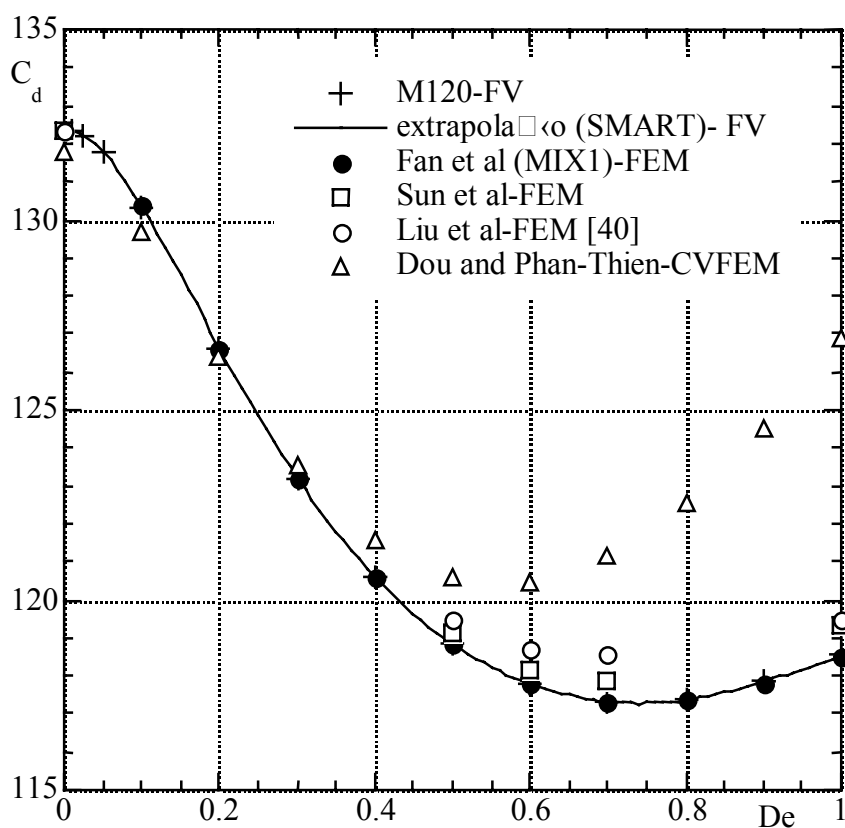


Figura 3 - Coeficiente de arrasto para o escoamento de um fluido de Oldroyd-B em torno de um cilindro. FV- Volumes finitos (nosso trabalho); FEM- elementos finitos; CVFEM elementos finitos com volume de controlo.

Parece ser assim hoje indiscutível que, na Reologia Computacional, os volumes finitos estão a atingir a maturidade ao serem capazes de performances idênticas às conseguidas com os elementos finitos. Naturalmente, que o menor número de investigadores activos nos volumes finitos significa uma menor taxa de desenvolvimento da metodologia, mas os últimos desenvolvimentos sugerem já que a investigação neste campo se concentrará, a breve prazo, noutros aspectos relevantes, como sendo a extensão da metodologia de cálculo em FV a problemas envolvendo transferência de calor ou escoamentos com superfície livre, ambos essenciais para estudos de extrusão, a extensão a modelos multi-modo, a modelos integrais e aos novos modelos de base molecular, como são os modelos FENE-P ou Pom-Pom. Para além disso serão necessários mais progressos na aplicação de malhas não-estruturadas em FV para a Reologia Computacional. Que os volumes finitos têm um futuro promissor é também a opinião de Phan-Thien e seus colaboradores, que melhor que ninguém são capazes de fazer este julgamento uma vez que têm experiência nos dois campos. Vejam-se assim os seus trabalhos mais recentes na área dos volumes finitos (Huang et al [13], Dou e Phan-Thien [29]) e FEM (Fan et al [14]).

Antes de terminar esta introdução merecem destaque duas outras referências ao cálculo de escoamentos de fluidos não-Newtonianos. Quando estes não apresentam elasticidade, mas somente características viscosas, o método dos volumes finitos tem já alguma tradição (Shin e Cho [31]) pois o cálculo de escoamentos de fluidos puramente viscosos de viscosidade variável é então em tudo semelhante ao cálculo de escoamentos turbulentos de fluidos não-Newtonianos, sendo por isso imediata a adaptação dos códigos clássicos, como veremos no próximo capítulo desta série.

O cálculo de escoamentos turbulentos de fluidos não-Newtonianos viscoelásticos é, por outro lado, um assunto pouco compreendido, onde as dificuldades se encontram actualmente ao nível da modelação da turbulência e não nos aspectos numéricos. Este tema será abordado num dos últimos artigos desta série dedicado a tópicos especiais.

De seguida apresentam-se as equações de conservação a resolver num problema de Reologia Computacional e a Secção 3 descreve os principais tipos de equações constitutivas reológicas a resolver pelo método dos volumes finitos.

2. EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO FUNDAMENTAIS

Em Reologia Computacional o cálculo numérico de um escoamento passa sempre, pelo menos, pela resolução de duas equações de conservação e uma equação de estado. As equações de conservação são as da massa e da quantidade de movimento e a equação de estado é a equação constitutiva reológica. Se para além disso o problema envolver variações de temperatura haverá que juntar a este conjunto uma equação de conservação da energia e, se estivermos perante um problema de extrusão pode haver uma equação de transporte de um escalar relacionado com a posição de uma superfície livre, dependendo da metodologia seguida. Além disso pode ser necessária a resolução de uma equação constitutiva térmica, mas conhecendo-se ainda muito pouco da ligação entre a cinética molecular e a equação constitutiva térmica (Bird e Curtiss [32]), é prática corrente a adopção da lei de Fourier da condução, que aparece implicitamente na equação da energia. É também esta a filosofia que aqui adoptaremos.

2.1. Equação da conservação da massa

A equação de conservação da massa é escrita em notação indicial como

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

onde u_i representa a componente do vector velocidade no sistema Cartesiano x_i . Esta será a notação a usar ao longo deste texto aplicando-se a regra da soma de índices de Einstein (desenvolvimento de um termo numa soma quando nesse termo há índices iguais) o que significa que podemos expandir a Eq. (1) em

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

i.e., as direcções 1, 2 e 3 identificam-se com x , y e z onde as componentes de velocidade são, respectivamente u , v , e w . Para uma explicação mais desenvolvida de álgebra tensorial o leitor poderá consultar as obras de Sedov [33] e os Apêndices de Bird et al [34].

Uma vez que os fluidos não-Newtonianos são líquidos e estes são considerados incompressíveis, a equação da conservação da massa apresenta-se já numa forma simplificada relativamente à formulação mais geral para qualquer tipo de fluido, por ex. gases.

2.2. Equação de conservação da quantidade de movimento

A equação de conservação de quantidade de movimento para um fluido genérico apresenta-se em muitos textos (ex. Bird et al, [34]) como

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3)$$

Esta é uma equação vectorial para a componente u_i de velocidade. Na Eq. (3) t representa o tempo, p a pressão, ρ a massa específica do fluido e τ_{ij} a componente ij da parte do tensor das tensões relacionada com o movimento e que é dada pela equação constitutiva reológica.

2.3. Equação de conservação da energia

A energia é uma grandeza escalar que vamos aqui começar por representar pelo símbolo ϕ , uma vez que a equação de conservação da energia é semelhante à equação de conservação de outras quantidades escalares, como sejam a fracção mássica de uma determinada espécie química. Uma equação de balanço de uma espécie química será necessária se, por exemplo, o cálculo envolver reacção química entre dois ou mais fluidos. As vantagens desta generalização serão melhor compreendidas no segundo artigo desta série.

Uma equação de conservação de uma quantidade escalar pode escrever-se como

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \quad (4)$$

onde Γ representa a difusividade molecular do escalar ϕ e ρ a massa específica do fluido.

O termo S , designado por fonte, engloba todos os outros termos que até podem ser, ou não, convectivos ou difusivos. No caso de ϕ ser a energia interna, podemos reescrever a Eq. (4) como uma equação para a temperatura

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho c u_i T) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_i \quad (5)$$

onde k é agora a condutibilidade térmica e c o calor específico. Na Eq. (5) extraiu-se do termo fonte a dissipação viscosa, segundo termo do membro da direita, que é importante para fluidos muito viscosos, como é o caso da generalidade dos fluidos viscoelásticos relevantes em Reologia Computacional: nas aplicações de engenharia envolvendo fluidos elásticos é frequente a dissipação viscosa ser responsável por mais de 50% da energia total fornecida ao fluido. Quanto a S_i , ele pode representar, por exemplo, uma geração interna de calor que num fluido viscoelástico pode ter origem numa reacção química exotérmica durante o escoamento.

3. MODELOS CONSTITUTIVOS REOLÓGICOS TÍPICOS

A equação constitutiva reológica relaciona o campo de tensões com o campo cinemático das deformações e taxas de deformação. Aqui iremos distinguir duas grandes famílias de modelos, a saber: os modelos explícitos e os modelos implícitos na tensão. Esta distinção é não só importante de um ponto de vista físico, pois efeitos de elasticidade do fluido implicam frequentemente um modelo implícito (exceptuam-se os modelos que resultam de expansões

de movimento retardado, como o modelo de segunda ordem), mas também na perspectiva da metodologia a adoptar para resolução numérica dos problemas.

No primeiro grupo dos modelos explícitos é ainda conveniente considerar os modelos explícitos do tipo Newtoniano generalizado e os restantes modelos que aí não se enquadram. Finalmente, e ainda por razões numéricas, nos modelos Newtonianos generalizados devemos distinguir aqueles que não têm tensão de cedência dos modelos com tensão de cedência.

No segundo grupo dos modelos implícitos convém fazer a distinção entre modelos diferenciais e integrais. No primeiro caso, que será o principal a ser considerado neste trabalho, a equação constitutiva é uma equação às derivadas parciais da tensão; no segundo caso as equações são do tipo integral, incluindo o integrando tensões e deformações avaliados ao longo da história anterior a que esteve sujeito cada elemento de fluido.

3.1. Modelos explícitos na tensão

O modelo explícito na tensão mais simples é o do fluido Newtoniano cuja equação constitutiva reológica é dada pela Eq. (6), sendo aí o tensor das tensões dito desviatório pois tem traço nulo e a pressão na Eq. (3) identifica-se com a pressão termodinâmica. Note-se que para se chegar à Eq. (6) se utiliza a hipótese de Stokes na derivação da equação constitutiva (Schlichting [35]). No entanto, mesmo sem essa hipótese, e uma vez que o fluido é incompressível, mantém-se válida a equação constitutiva pois o divergente do vector velocidade é nulo (Eq. 1). Há contudo implicações numéricas de se manter o termo do divergente na equação constitutiva, como se verá futuramente, daí o termos optado por deixar o termo na equação.

$$\tau_{ij} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (6)$$

Na Eq. (6) o parâmetro η é a viscosidade do fluido (esta notação é adoptada em reologia em lugar do habitual μ).

O modelo explícito na tensão de grau de complexidade imediatamente superior é o do fluido dito Newtoniano Generalizado, cuja equação constitutiva se escreve como

$$\tau_{ij} = \eta(\dot{\gamma}) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (7)$$

Neste modelo a viscosidade viscométrica é agora uma função de invariantes do tensor taxa de deformação \mathbf{D} , de que o exemplo mais conhecido é a lei de potência da viscosidade ou modelo de Ostwald-De Waele em que

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (8)$$

sendo o invariante $\dot{\gamma} \equiv \sqrt{2\text{tr}\mathbf{D}^2}$, com o tensor taxa de deformação \mathbf{D} a ser definido como

$$D_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (9)$$

Na Eq. (8) k e n representam os índices de consistência e de lei de potência, respectivamente. No modelo Newtoniano generalizado outras funções possíveis para $\eta(\dot{\gamma})$, por exemplo, o modelo de viscosidade de Carreau

$$\eta(\dot{\gamma}) = (\eta_0 - \eta_\infty) \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} + \eta_\infty \quad (10)$$

onde η_0 , η_∞ , λ e n são parâmetros, de Carreau simplificado

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^2 \right]^{\frac{n-1}{2}} \quad (11)$$

de Sisko,

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 + K \dot{\gamma}^{n-1} \quad (12)$$

ou Cross

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + \frac{\eta_0 - \eta_\infty}{1 + \alpha \dot{\gamma}^n} \quad (13)$$

entre outros.

Do ponto de vista numérico a metodologia é independente da função viscosidade adoptada pois todas elas são tratadas de uma forma semelhante à formulação Newtoniana com viscosidade variável desde que o fluido não apresente tensão de cedência, como iremos ver num próximo artigo. Exceptua-se somente a necessidade de inicialização do campo de viscosidades moleculares quando o modelo de viscosidade adoptado é a lei de potência para evitar o aparecimento de uma singularidade matemática sempre que $\dot{\gamma} = 0$.

Se o fluido Newtoniano generalizado possuir uma tensão de cedência haverá necessidade de um tratamento numérico especial. Os modelos Newtonianos Generalizados sem tensão de cedência caracterizam-se por apresentarem taxas de deformação desde que as tensões aplicadas sejam não-nulas, mas há materiais que apresentam características intermédias de sólido e fluido, escoando-se somente quando as tensões aplicadas excedem um determinado valor a que se chama tensão de cedência τ_Y . Nos fluidos com tensão de cedência a viscosidade será então infinita sempre que $\tau < \tau_Y$ o que pode introduzir problemas numéricos em várias regiões do escoamento.

O modelo com tensão de cedência mais simples é o do fluido de Bingham em que a viscosidade é dada pela equação

$$\eta(\dot{\gamma}) = \mu + \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} \quad (14)$$

e outros modelos de viscosidade típicos de fluidos com tensão de cedência são o modelo de Herschel-Bulkley, que combina o modelo de Bingham com o da lei de potência

$$\eta(\dot{\gamma}) = K \dot{\gamma}^{n-1} + \frac{\tau_Y}{\dot{\gamma}} \quad (15)$$

ou o modelo de Casson

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \quad \text{com} \quad \sqrt{\tau} = \sqrt{\tau_Y} + \sqrt{\mu_\infty \dot{\gamma}} \quad (16)$$

Ainda no domínio dos modelos explícitos na tensão, mas agora para fluidos viscoelásticos, temos um modelo simples que só deve ser considerado em escoamentos do tipo viscométrico, mas que nesse caso permite chegar a resultados precisos (Bird et al [34]). Trata-se do modelo de Criminale-Eriksen-Filbey (CEF)

$$\tau_{ij} = 2\eta(\dot{\gamma})D_{ij} + 4[\Psi_1(\dot{\gamma}) + \Psi_2(\dot{\gamma})]D_{ik}D_{kj} - \Psi_1(\dot{\gamma})\frac{\mathcal{D}D_{ij}}{\mathcal{D}t} \quad (17)$$

onde $\mathcal{D}/\mathcal{D}t$ é a derivada de Jaumann que se define como

$$\frac{\mathcal{D}D_{ij}}{\mathcal{D}t} \equiv \frac{\partial D_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial D_{ij}}{\partial x_k} + (\Omega_{ik}D_{kj} - D_{ik}\Omega_{kj}) \quad (18)$$

O tensor vorticidade Ω_{ij} é definidos por

$$\Omega_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (19)$$

Outros modelos explícitos para fluidos viscoelásticos podem ser obtidos a partir da Eq. (17) anulando alguns coeficientes e tornando outros constantes, como é o caso do fluido de segunda ordem ou da equação de Reiner-Rivlin.

3.2. Modelos implícitos na tensão

Os modelos viscoelásticos mais frequentes e realistas são do tipo implícito, e neste grupo o modelo mais simples é o modelo convectivo superior de Maxwell (UCM- Upper convected Maxwell) que é dado pela equação

$$\tau_{ij} + \lambda \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} \right) = \eta_p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \left(\tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (20)$$

onde λ representa um tempo de relaxação. O modelo UCM apresenta uma viscosidade viscométrica constante e uma primeira diferença de tensão normal (N_1) não nula, mas a segunda diferença de tensões normais (N_2) é nula.

Embora o modelo UCM seja simples do ponto de vista reológico ele é o modelo numericamente mais problemático devido à tendência para induzir tensões normais muito elevadas. Esse facto, conjuntamente com a existência de uma singularidade no modelo com a viscosidade elongacional a tender para infinito quando a taxa de deformação tende para $1/(2\lambda)$, conduz a que, do ponto de vista numérico, o modelo seja bastante complicado e origine frequentemente a divergência dos métodos de cálculo. Por esta razão é usual o estudo numérico de escoamentos com o modelo UCM aquando do desenvolvimento de métodos de cálculo numérico: uma metodologia robusta no cálculo de escoamentos de fluidos UCM é um metodologia robusta com qualquer outra equação constitutiva reológica, que seja capaz de prever o mesmo tipo de propriedades reológicas.

O modelo viscoelástico imediatamente mais complexo é o modelo de Oldroyd-B definido pelas equações dadas em seguida, e que se caracteriza por representar uma combinação dum solvente Newtoniano com uma molécula polimérica obedecendo a um modelo UCM

$$\tau_{ij} = \eta_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \tau_{ijP} \quad (21-a)$$

$$\tau_{ijP} + \lambda \left(\frac{\partial \tau_{ijP}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ijP}}{\partial x_k} \right) = \eta_p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \left(\tau_{jkP} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \tau_{ikP} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (21-b)$$

O modelo de Oldroyd-B, à semelhança do modelo UCM, prevê $N_2 = 0$ e também sofre da singularidade na viscosidade alongacional, mas tende a ser de convergência mais fácil, embora não muito. Esta característica depende essencialmente da razão de viscosidades $\eta_s/(\eta_s + \eta_p)$; quanto maior fôr esta, mais facilitada vem a convergência iterativa.

Outros modelos relevantes são, por exemplo, os modelos de Phan-Thien—Tanner (PTT), de Giesekus e de White-Metzner, entre outros, podendo o leitor interessado ter uma perspectiva mais geral das suas propriedades e comportamento consultando as obras de Larson [36], Bird et al [34,37] e mais recentemente Larson [38] e Tanner [39]. Interessa-nos no entanto salientar desde já um aspecto fundamental da reologia destes fluidos que tem implicações numéricas, actualmente ainda em investigação. Por exemplo, o modelo de Phan-Thien—Tanner, que é dado pela Eq. (22)

$$f(\tau_{kk})\tau_{ij} + \lambda \left[\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \xi (\tau_{jk} D_{ik} + \tau_{ik} D_{jk}) \right] = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (22)$$

possui dois parâmetros novos, ε e ξ , e a função $f()$ é em rigor uma função exponencial do traço do tensor das tensões

$$f(\tau_{kk}) = \exp\left(\frac{\varepsilon \lambda}{\eta} \tau_{kk}\right) \quad (23-a)$$

que por vezes pode ser linearizada numa forma alternativa

$$f(\tau_{kk}) = 1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta} \tau_{kk} \quad (23-b)$$

Nestas funções, ε é um parâmetro que limita a viscosidade alongacional, a qual é proporcional ao inverso de ε . Quanto ao parâmetro ξ , ele contabiliza o deslizamento entre a rede molecular e o meio contínuo. Quer este modelo, quer o modelo de Giesekus da Eq. (24)

$$\tau_{ij} + \lambda \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) + \frac{\alpha \lambda}{\eta} \tau_{ik} \tau_{kj} = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (24)$$

caracterizam-se pelo facto de preverem tensões normais perpendiculares junto a uma parede sólida, de que resulta uma segunda diferença de tensões normal (N_2) não-nula. Estas tensões normais originam alguns problemas no acoplamento tensão-velocidade-pressão ausentes do cálculo de escoamentos com fluidos onde as mesmas não existam. De facto, já o modelo simplificado do PTT (SPTT) da Eq. (24), que se obtém fazendo $\xi = 0$,

$$f(\tau_{kk})\tau_{ij} + \lambda \left(\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) = \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (24)$$

apresenta $\tau_{yy} = 0$ e $N_2 = 0$, e embora reologicamente mais complicado que os modelos de UCM e Oldroyd-B, a sua solução não apresenta qualquer problema do ponto de vista numérico. De facto, qualquer modelo reológico que preveja um comportamento espessante regressivo na viscosidade, como é o caso do SPTT, tende a comportar-se melhor numericamente.

Haveria ainda a considerar outros modelos diferenciais como, por exemplo, os modelos de Gordon-Schowalter, Johnson-Segalman, Bird-DeAguiar, Acierno et al, ou os modelos de Oldroyd de 4, 6 e 8 constantes, mas essa descrição teria aqui pouco interesse. Já os modelos

de base estrutural, como são os casos dos modelos de FENE-P ou pom-pom, estes apresentam como originalidade o facto de terem uma equação diferencial na conformação molecular (\mathbf{A}), que é depois relacionada algebricamente com a tensão. O modelo FENE-P, segundo Bird et al [37], é descrito pelo seguinte conjunto de equações

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta_p}{\lambda} [f(\mathbf{A})\mathbf{A} - \mathbf{I}] \quad (25-a)$$

com

$$f(\mathbf{A})\mathbf{A} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \mathbf{I} \quad \text{e} \quad f(\mathbf{A}) = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}\mathbf{A}} \quad (25-b)$$

onde L é um parâmetro relacionado com a extensibilidade da molécula e o triângulo invertido denota a derivada convectiva superior de Maxwell.

Este modelo também exhibe uma viscosidade espessante regressiva e tem sido conotado como sendo de fácil trato numérico. No entanto, apresenta $\tau_{yy} \neq 0$ junto a uma parede, e portanto o problema numérico mencionado acima pode ocorrer dificultando a obtenção de soluções com o método dos volumes finitos. Esta é uma questão que não foi ainda estudada.

O leitor deve estar atento para à possibilidade de aparecerem novos modelos que coloquem desafios numéricos, ie, cuja resolução pelos métodos utilizados a dada altura não seja possível, havendo que desenvolver novas estratégias numéricas/algóritmicas.

Finalmente, e ainda no campo dos modelos diferenciais viscoelásticos, temos também de considerar os modelos do tipo multimodo

$$\tau_{ij} = \sum_k \tau_{ij_k} \quad (26)$$

onde a tensão para cada modo τ_{ij_k} obedece agora a uma determinada equação constitutiva, por exemplo UCM, Oldroyd-B, PTT ou outro. Um modelo multi-modo é pois um somatório de várias equações do mesmo tipo onde a diferença entre os modos resulta dos diferentes valores numéricos para os parâmetros λ , η , ε e ξ ou outros. Do ponto de vista numérico as dificuldades são inerentes às de um único modo e por isso a diferença é fundamentalmente uma questão de recursos computacionais que crescem enormemente com o número de modos utilizados. Por exemplo, o cálculo do escoamento numa contracção súbita de um fluido UCM na malha 2 de Alves et al [25] requeria uma capacidade de armazenamento em memória igual a 1.3 MB mas se o mesmo escoamento fosse previsto por um modelo de 4 modos a estimativa de memória cresceria para 2.0 MB.

REFERÊNCIAS

- [1] Zinkiewicz, OC1977. *The Finite Element Method*. McGraw-Hill, New York.
- [2] Girault, V e Raviart, P-A 1986. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*. Springer Verlag, Berlim.
- [3] Fletcher, CAJ 1991. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, Volumes I e II, Springer Verlag, Berlim.
- [4] Hirsch, C 1991. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Volumes I e II, John Wiley, Nova Iorque.
- [5] Patankar, SV 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, Nova Iorque.

- [6] Versteeg, HK e Malalasekera, W 1995. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method*. Longman, Harlow.
- [7] Ferziger, JH e Perić, M 1996. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 1ª edição, Berlim.
- [8] Crochet, MJ, Davies, AR e Walters, K 1984. *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*, Elsevier, Amsterdão.
- [9] Marchal, JM e Crochet, MJ 1987. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 26, 77-114.
- [10] Fortin, M e Fortin, A 1989. A new approach for the FEM simulation of viscoelastic flows, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 32, 295-310.
- [11] Sun, J, Smith, MD, Armstrong, RC e Brown, RA 1999. Finite element method for viscoelastic flows based on the discrete adaptive viscoelastic stress splitting and the discontinuous Galerkin method: DAVSS-G/DG. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 86, 281-307.
- [12] Huilgol, RR e Phan-Thien, N. 1997. *Fluid Mechanics of Viscoelasticity*. Elsevier, Amsterdão.
- [13] Huang, X, Phan-Thien, N e Tanner, RI 1996. Viscoelastic flow between eccentric rotating cylinders: unstructured control volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 64, 71-92.
- [14] Fan, Y, Tanner, RI e Phan-Thien, N 1999. Galerkin/least-square finite-element methods for steady viscoelastic flows. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 84, 233-256.
- [15] Hu, HH e Joseph, DD 1990. Numerical Simulation of Viscoelastic Flow Past a Cylinder. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 37, 347-377.
- [16] Yoo, JY e Na, Y 1991. A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the SIMPLER algorithm. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 39, 89-106.
- [17] Leschziner, MA 1980. Practical evaluation of three finite-difference schemes for the computation of steady-state recirculating flows. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 23, 293-312.
- [18] Gervang, B e Larsen, PS 1991. Secondary flows in straight ducts of rectangular cross section. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 39, 217-237.
- [19] Sasmal, GP 1995. A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 56, 15-47.
- [20] Xue, S-C, Phan-Thien, N e Tanner, RI 1995. Numerical study of secondary flows of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 59, 191-213.
- [21] Xue, S-C, Phan-Thien, N e Tanner, RI 1998. Numerical investigations of Lagrangian unsteady extensional flows of viscoelastic fluids in 3-D rectangular ducts with sudden contractions. *Rheol. Acta.*, 37, 158-169.
- [22] Oliveira PJ, Pinho, FT e Pinto, GA 1998. Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 79, 1-43.

- [23] Oliveira, PJ e Pinho, FT 1999a. Numerical procedure for the computation of fluid flow with arbitrary stress-strain relationships. *Num. Heat Transfer, Part B*, 35, 295-315.
- [24] Oliveira, PJ e Pinho, FT 1999b. Plane contraction flows of upper convected Maxwell and Phan-Thien—Tanner fluids as predicted by a finite-volume method. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 88, 63-88.
- [25] Alves, MA, Pinho, FT e Oliveira, PJ 2000. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 93, 287-314.
- [26] Alves, MA, Pinho, FT e Oliveira, PJ 2001. The flow of viscoelastic fluids past a cylinder: finite-volume high-resolution methods. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 97, 205-230.
- [27] B. R. Baliga and S. V. Patankar 1980. A new finite-element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer*, 3, pp 393-409.
- [28] Wapperom, P, Webster, MF 1999. Simulation for viscoelastic flow by a finite volume/element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 180, 281-304.
- [29] Dou, H-S e Phan-Thien, N 1999a. The flow of an Oldroyd-B fluid past a cylinder in a channel: adaptive viscosity vorticity (DAVSS-omega) formulation. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 87, 47-73.
- [30] Phan-Thien, N e Dou, H-S 1999b. Viscoelastic flow past a cylinder: drag coefficient. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 180, 243-266.
- [31] Shin, S e Cho, YI 1994. Laminar heat transfer in a rectangular duct with a non-Newtonian fluid with temperature-dependent viscosity. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 37, 19-30.
- [32] Bird, RB e Curtiss, CF 1998. Thermoviscoelasticity: continuum-molecular connections. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 79, 255-259.
- [33] Sedov, L.- I. 1971. *A course in continuum mechanics*. Vol. 1, Walters- Noordhoff Publishers, Gröningen, Holanda
- [34] Bird, RB, Armstrong, RC e Hassager, O 1987a. *Dynamics of Polymeric Liquids. Volume 1: Fluid Mechanics*, Wiley, Nova Iorque.
- [35] Schlichting, H 1968. *Boundary-layer theory* . McGraw-Hill, Nova Iorque.
- [36] Larson, RG 1988. *Constitutive equations for polymer melts and solutions*. Butterworths, Boston.
- [37] Bird, RB, Armstrong, RC e Hassager, O 1987b. *Dynamics of Polymeric Liquids. Volume 2: Kinetic Theory*, Wiley, Nova Iorque.
- [38] Larson, RG 1999. *The structure and rheology of complex fluids*. Oxford University Press, Oxford
- [39] Tanner RI 2000. *Engineering Rheology*, 2ª edição, Oxford Eng. Science Series 52, Oxford University Press, New York.
- [40] Liu, AW, Bornside, DE, Armstrong, RC e Brown, RA 1998. Viscoelastic flow of polymer solutions around a periodic, linear array of cylinders: comparisons of predictions for microstructure and flow fields. *J. Non-Newton. Fluid Mech.*, 77, 153-190.