

# Desenvolvimento de uma Metodologia Numérica para Escoamentos Viscoelásticos Não-Isotérmicos

Cassio M. Oishi, Hemily M. Gentile,

Depto. de Matemática e Computação, FCT, UNESP,  
19060-900, Presidente Prudente, SP

E-mail: hemily.gentile@gmail.com, cassiooishi@gmail.com,

**Resumo:** Neste trabalho apresentamos uma metodologia para a simulação de escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos onde a viscosidade e o tempo de relaxação do fluido são dependentes da temperatura. O fluido viscoelástico é definido pela equação constitutiva Oldroyd-B onde os parâmetros dependentes da temperatura são modelados pela relação WLF (Williams-Landel-Ferry). A metodologia numérica empregada para resolver o modelo não-isotérmico é baseada no método MAC para escoamentos viscoelásticos via método de projeção. Nesta metodologia, as equações de Navier-Stokes e a equação constitutiva são discretizadas pelo método de diferenças finitas em uma malha deslocada. A implementação é feita em uma plataforma de programação de alto desempenho denominada FREEFLOW-2D para a simulação de escoamentos incompressíveis bidimensionais. A metodologia é validada pela simulação do fluido newtoniano em um canal formado por placas paralelas com diferentes malhas.

**Palavras-chave:** Escoamentos Não-Isotérmico, Relação WLF, Escoamento Viscoelástico, Equações de Navier-Stokes

## 1 Introdução

O frequente interesse na determinação dos efeitos da variação da temperatura, calor e elasticidade em um fluido, tem motivado o estudo dos escoamentos viscoelásticos não-isotérmicos [4, 5]. A modelagem matemática desses efeitos tem sido objeto de estudo em aplicações industriais, químicas, assim como no processamento de alimentos. Trabalhos recentes [2, 3] têm investigado sobre quais condições um fluido não-newtoniano e newtoniano influenciam as propriedades térmicas, bem como os parâmetros que controlam o fluido em tais condições. Neste trabalho, apresentamos o desenvolvimento de um método numérico para escoamentos de fluidos viscoelásticos não-isotérmicos.

As equações de que descrevem escoamentos incompressíveis, viscoelásticos e não-isotérmicos são as equações de conservação de massa, conservação de movimento e conservação de energia, que na forma dimensional conservativa são dadas, respectivamente, por:

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

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{Q}, \quad (3)$$

onde  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t))$  é o campo de velocidade,  $\rho$  é a densidade do fluido tratada como constante,  $t \geq 0$  o tempo,  $p = p(\mathbf{u}, t)$  a pressão,  $e$  a energia interna,  $\mathbf{q}$  o fluxo de calor e  $\mathbf{Q}$  o termo fonte de energia interna.

O tensor das tensões  $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t)$  é a soma de uma contribuição newtoniana  $\boldsymbol{\tau}_s$  e uma contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}_p$ , onde  $\boldsymbol{\tau}_s$  é definida por:

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\eta_s(T)\mathbf{D}, \quad (4)$$

sendo  $\mathbf{D} = 1/2[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T]$  o tensor taxa de deformação e  $\eta_s(T)$  é a viscosidade do solvente dependente da temperatura  $T$ . Substituindo (4) juntamente com a contribuição não newtoniana  $\boldsymbol{\tau}_p$  em (2), temos:

$$\rho \left( \frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \eta_s(T)\nabla^2\mathbf{u} + \boldsymbol{\tau}_p. \quad (5)$$

A contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}_p$  é dada pela equação constitutiva do modelo Oldroyd-B expressa por:

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda_1(T)\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = \eta_p(T) (\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T), \quad (6)$$

onde  $\lambda_1(T)$  denota o tempo de relaxação do fluido e  $\eta_p(T)$  a viscosidade do polímero, ambos dependentes da temperatura. A derivada convectiva  $\overset{\nabla}{\cdot}$  de  $\boldsymbol{\tau}_p$  é dada por:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = \frac{\partial\boldsymbol{\tau}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\tau}_p) - ((\nabla\mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_p \cdot \nabla\mathbf{u}). \quad (7)$$

Além disso, a viscosidade total  $\eta_0$  é definida como  $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ . A seguir, é desenvolvido o modelo termodinâmico a partir das equações apresentadas, como proposto em [4].

## 2 Modelo Termodinâmico

Considerando o calor específico  $c_p$  à pressão constante e substituindo o fluxo de calor  $\mathbf{q} = -k\nabla T$  na equação da energia (3), obtemos a equação da temperatura:

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) \right) = k\nabla^2 T + \mathbf{Q}. \quad (8)$$

O termo  $k\nabla^2 T$  representa a transferência de calor por condução devido à presença do gradiente da temperatura onde  $k$  é a condutividade térmica do fluido. Definimos  $\mathbf{Q}$ , o termo fonte de energia interna, como a soma de duas contribuições considerando a produção de calor interna [7]. Assim,  $\mathbf{Q}$  pode ser escrito como:

$$\mathbf{Q} = \boldsymbol{\tau}_s : \mathbf{D} + \alpha\boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha)\frac{Tr(\boldsymbol{\tau}_p)}{2\lambda_1(T)} \quad (9)$$

onde  $Tr(\boldsymbol{\tau}_p)$  é o traço da matriz  $\boldsymbol{\tau}_p$ ,  $\alpha$  é um coeficiente de energia particionada e a operação “:” denota o produto escalar duplo de dois tensores. Se  $\alpha = 0$  temos energia elástica pura e se  $\alpha = 1$  então temos elasticidade entrópica pura [5]. Assim, a equação da temperatura para um escoamento viscoelástico de um fluido Oldroyd-B é dada por:

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) \right) = -k\nabla^2 T + \boldsymbol{\tau}_s : \mathbf{D} + \alpha\boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha)\frac{Tr(\boldsymbol{\tau}_p)}{2\lambda_1(T)}. \quad (10)$$

Como em [4], o tempo de relaxação do fluido  $\lambda_1(T)$  e as viscosidades  $\eta_s(T)$  e  $\eta_p(T)$  dependentes da temperatura, são escritos como:

$$\lambda_1(T) = f_T \lambda(T_0), \tag{11}$$

$$\eta_s(T) = f_T \eta_s(T_0) \quad \eta_p(T) = f_T \eta_p(T_0), \tag{12}$$

onde  $T_0$  é a temperatura de referência e  $f_T$  é uma função obedecendo a relação WLF [5],

$$f_T = \exp\left(-\frac{C_1(T - T_0)}{C_2 + T - T_0}\right) \tag{13}$$

onde  $C_1$  e  $C_2$  são parâmetros desse modelo.

Definindo as escalas de grandeza para o comprimento  $L_0$ , velocidade  $U_0$ , viscosidade dinâmica  $\eta_0$ , densidade  $\rho_0$ , temperatura na parede  $T_w$  e  $T_0$ , definida anteriormente, a relação de variáveis dimensionais e adimensionais (acrescidas de \*), é dada por:

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L_0}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_0}, \quad t^* = \frac{tU_0}{L_0}, \quad p^* = \frac{p}{\rho_0 U_0^2}, \quad \boldsymbol{\tau}_p^* = \frac{\boldsymbol{\tau}_p}{\rho_0 U_0^2}, \quad T^* = \frac{T - T_0}{T_w - T_0}. \tag{14}$$

Assim, as equações (1), (5), (6) e (10) na forma adimensional e, omitindo por simplicidade \*, são dadas, respectivamente, por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + (1 - \omega_r(T))\nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p \tag{16}$$

$$\boldsymbol{\tau}_p + Wi(T)\boldsymbol{\tau}_p^\nabla = 2\frac{\omega_r(T)}{Re}\mathbf{D} \tag{17}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \frac{1}{Pe}\nabla^2 T + \frac{BrRe}{Pe}\left((2\eta_s(T))\mathbf{D} : \mathbf{D} + \alpha\boldsymbol{\tau}_p : \mathbf{D} + (1 - \alpha)\frac{Tr(\boldsymbol{\tau}_p)}{2Wi(T)}\right) \tag{18}$$

com

$$Wi(T) = Wi(T_0)f(T) \quad \text{e} \quad \omega_r(T) = \omega_r(T_0)f(T) \tag{19}$$

onde  $f(T)$  na forma adimensional é dada por:

$$f(T) = \exp\left(-\frac{c_1 T}{\frac{c_2}{(T_w - T_0)} + T}\right). \tag{20}$$

Os parâmetro adimensionais,

$$Re = \frac{\rho_0 U_0 L_0}{\eta_0} \quad Wi(T) = \frac{\lambda_1(T)U_0}{L_0} \quad Pe = \frac{\rho_0 U_0 L_0 c_p}{k} \quad Br = \frac{\eta_0 U_0^2}{k(T_w - T_0)} \quad \text{e} \quad \omega_r(T) = 1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1(T)}, \tag{21}$$

representam, respectivamente, o número de Reynolds, Weissenberg, Peclet, Brinkman e o parâmetro de retardação do fluido  $\omega_r$ , onde  $\lambda_2$  é o tempo de relaxação do fluido.

### 3 Metodologia Numérica

As equações (15) - (18) foram implementadas na plataforma FREEFLOW-2D em um modelo simplificado. A simplificação foi feita na equação (16) e (18) onde os termos  $\omega_r(T)$  e  $Wi(T)$  deixam de ser dependentes da temperatura para serem tratados como constantes [5].

A formulação numérica desse trabalho é baseada em métodos de projeção [6], cujo objetivo é desacoplar velocidade e pressão nas equações de Navier-Stokes resolvendo essas variáveis separadamente. A discretização é feita pelo método de diferenças finitas em uma malha deslocada com espaçamento uniforme  $\delta x = \delta y$ . As variáveis  $p$ ,  $\mathbf{S}$  e  $T$  são avaliadas no centro da célula, enquanto a velocidade  $\mathbf{u}$  na face da célula.

A integração temporal na equação da quantidade de movimento é feita pelo método de Euler implícito enquanto que na equação constitutiva e a equação da temperatura foi empregada o método de Runge-Kutta de 2ª ordem (RK2). Os termos convectivos foram discretizadas no espaço pelo esquema convectivo CUBISTA [1] e as derivadas espaciais por diferenças centrais.

O problema é aplicado para o escoamento *Poiseuille* em um canal com placas paralelas considerando condição inicial zero para a velocidade, pressão, contribuição não-newtoniana e temperatura. Na entrada do canal (injetor), a velocidade normal à parede é imposta, enquanto a velocidade tangencial é nula. Para a contribuição não-newtoniana, aplica-se a solução analítica [6], enquanto que para a temperatura é usada condição de Dirichlet na entrada do canal. Nos contornos rígidos é aplicada a condição de não-escorregamento para as componentes da velocidade, condição adiabática ou Dirichlet para a temperatura e a contribuição não-newtoniana  $\mathbf{S}$  é calculada por (17) com as simplificações com relação as condições da velocidade  $\mathbf{u}$  e da geometria do canal. Na saída do canal (ejetores), adota-se a condição homogênea de Neumann para a velocidade, a contribuição não-newtoniana e a temperatura.

#### 3.1 Algoritmo Computacional

Supondo que os campos de velocidade solenoidal e de pressão, bem como a temperatura e a contribuição não-newtoniana sejam conhecidos no tempo  $t = t_n$ , o ciclo computacional para o cálculo da solução em  $t = t_n + \delta t = t_{n+1}$ , simplificada, é dado por:

**Passo 1:** Aplica-se a primeira etapa de RK2 para  $\tilde{\tau}_p^{n+1}$  intermediário, ou seja, calcula-se a contribuição não-newtoniana por Euler Explícito em (17).

**Passo 2:** Cálculo de  $\tilde{T}^{n+1}$  pela primeira etapa de RK2 na equação da temperatura (18).

**Passo 3:** Cálculo da velocidade intermediária  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ , integrando (16) por Euler Implícito.

**Passo 4:** Cálculo de  $\psi^{n+1}$  pela solução da equação de Poisson

$$\nabla^2 \psi^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}, \tag{22}$$

com condições de contorno na fronteira rígida e injetores

$$\frac{\partial \psi^{n+1}}{\partial \vec{n}} = 0 \tag{23}$$

e nos ejtores  $\psi^{n+1} = 0$ .

**Passo 5:** Atualização da velocidade  $\mathbf{u}^n$  por  $\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \nabla \psi^{n+1}$ .

**Passo 6:** Cálculo da contribuição não-newtoniana  $\tau_p^{n+1}$  de forma semelhante à Regra do Trapezó na segunda etapa do método RK2.

**Passo 7:** Atualização das condições de fronteira e as propriedades físicas  $Wi(T)$  e  $\omega_r(T)$ .

**Passo 8:** Cálculo da Temperatura  $T^{n+1}$  pela segunda etapa do método RK2.

**Passo 9:** Atualização da pressão  $p^{n+1}$ .

**Passo 10:** Repetir o passo 7.

**Observação:** Os passos 3, 4, 5 e 9 pertencem ao método da projeção.

## 4 Resultados Preliminares

A verificação da metodologia numérica é feita pela simulação do escoamento em um canal formado por placas paralelas (*Poiseuille flow*) com dimensões  $5L \times 1L$ , onde  $L$  é uma escala de comprimento, passo temporal  $dt = 10^{-3}$ , passo espacial  $dx = dy = 0.025$ (M1) e  $0.05$ (M2). Além disso, os parâmetros utilizados são  $C1 = 15$  e  $C2 = 50$ ,  $\omega_r = \alpha = 0$ ,  $Wi = 0$ ,  $Pe = 10, 50$  e  $100$ ,  $Br = 10^4, 10^3$  e  $10^2$  e  $Re = 10^{-4}$ . Na entrada do canal a temperatura  $T = 1$  é imposta e nas fronteiras rígidas é usada a condição de Dirichlet com  $T = 0$ . A notação  $\omega_r = 0$  neste trabalho, deve ser interpretada como um fluido newtoniano.

Observamos que, com os parâmetros apresentados, a temperatura máxima atingida foi de  $T_{max} = 0.9413$  e a velocidade máxima foi  $u_{max} = 0.9991$ , ambas na malha M1. Os resultados foram avaliados em um corte vertical em  $x = 2.5L$  entre as placas paralelas no tempo  $t = 50s$ , onde praticamente representava a solução estacionária do problema. Na figura 1 é apresentada uma comparação entre as soluções da velocidade e temperatura nas duas malhas utilizadas nestes testes. Nota-se, que tanto para o campo da velocidade  $u$ , como para a temperatura  $T$ , os resultados numéricos apresentam convergência quando a malha é refinada. A simulação para o fluido newtoniano, tomando  $\omega_r = 0$ , é a mesma usada em [2]. Finalmente, apenas como uma ilustração, apresentamos a variação do perfil parabólico nas figuras (2(a)) e (2(b)), mostrando a influência dos parâmetros adimensionais nos valores da temperatura. Vale ressaltar que na figura (2(a)), observa-se que a temperatura sofre uma redução quando o número de Peclet é reduzido, enquanto na figura (2(b)), observa-se que não houve grande diminuição da temperatura com a diminuição do número de Brinkman.

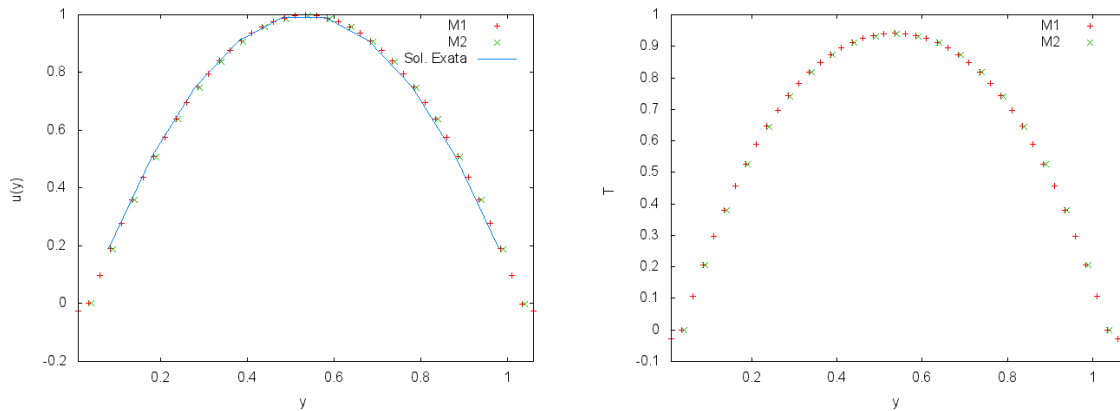


Figura 1: Comparação da solução numérica obtida com as malhas M1 e M2 com relação a velocidade e a temperatura.

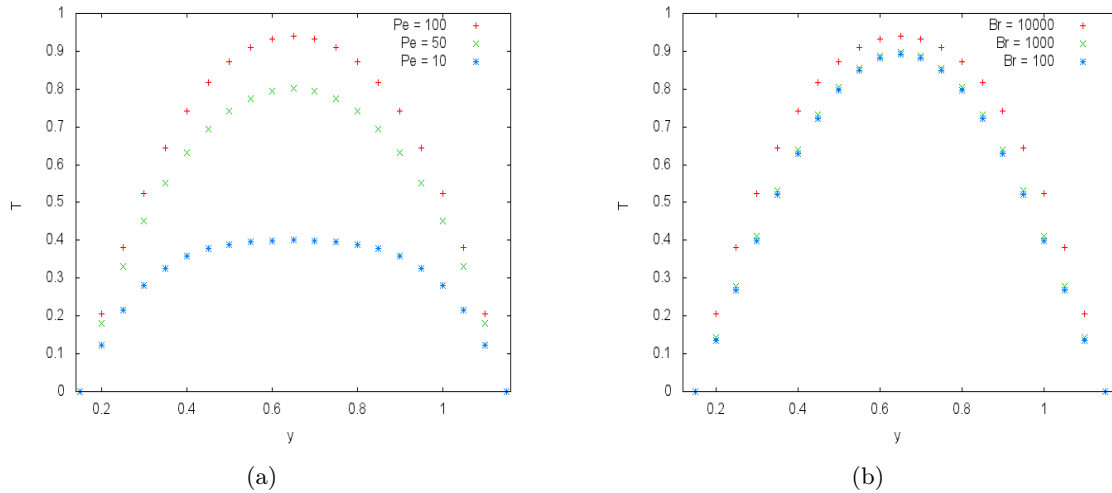


Figura 2: Variação da temperatura máxima com os parâmetros adimensionais. (a)  $Pe$  com  $Br = 10000$ , (b)  $Br$  com  $Pe = 100$ .

## 5 Conclusão

Neste trabalho apresentamos o desenvolvimento de um método numérico para o escoamento de fluidos viscoelásticos não-isotérmicos. Tendo em vista os resultados preliminares apresentados, observamos a convergência numérica da metodologia adotada. A variação dos parâmetros adimensionais sobre a contribuição newtoniana demonstrou a influência e controle sobre o aumento ou diminuição da temperatura no canal. Até o momento, foram realizadas simulações numéricas para um fluido newtoniano.

## Referências

- [1] M.A. Alves, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, A Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 41, (2003) 4775.
- [2] T. Chinyoka, Poiseuille Flow of Reactive Phan-Thien-Tanner Liquids in 1D Channel Flow, *J. Heat Transfer.*, 132, (2010) Issue 11, 111701.
- [3] T. Chinyoka, Effects of Fluid Viscoelasticity in Non-Isothermal Flows, Evaporation, Condensation and Heat transfer, *InTech*, DOI:10.5772/21299, (2011) 423-438.
- [4] F. Habla, A. Woitalka, S. Neuner, O. Hinrichsen, Development of a Methodology for Numerical Simulation of Non-Isothermal Viscoelastic Fluid Flows with Application to Axisymmetric 4 : 1 Contraction Flows, *Chemical Eng. J.*, 207-208, (2012) 772-784.
- [5] K. Kunisch, X. Marduel, Optimal Control of Non-Isothermal Viscoelastic Fluid Flow, *J. Non-Newtonian Fluid M.*, 88, (2000) 261301.
- [6] C. M. Oishi, F. P. Martins, M. F. Tomé, J. A. Cuminato, S. Mckee, Numerical Solution of the eXtended Pom-Pom Model for Viscoelastic Free Surface Flows, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, 166, (2011) 165-179.
- [7] P. Wapperom, M.A. Hulsen, J.P.P.M.V. der Zanden, A numerical Method for Steady and Non-Isothermal Viscoelastic Fluid for High Deborah and Peclet Numbers, *Rheol. Acta*, 37, (1998) 7388.