

Simulação numérica de fluidos viscoelásticos com superfície livre utilizando o modelo integral K-BKZ

Juliana Bertoco, **Murilo Francisco Tomé,**

Depto de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP,

13566-590 , São Carlos, SP

E-mail: jubert@icmc.usp.br, murilo@icmc.usp.br,

Cassio Machiaveli Oishi,

Faculdade de Ciências e Tecnologia, UNESP,

19060-900, Presidente Prudente, SP

E-mail: oishi@fct.unesp.br,

Manoel Silvino Batalha de Araújo,

Faculdade de Matemática, UFPA,

66075-110 , Belém, PA

E-mail: silvino@ufpa.br.

Resumo: *Esse trabalho tem por objetivo apresentar um método numérico para resolver as equações governantes para escoamentos viscoelásticos, com superfícies livres em movimento, governados pela equação constitutiva integral K-BKZ. Considera-se escoamentos bidimensionais e um algoritmo para resolver as equações governantes, utilizando o método de diferenças finitas, é apresentado. A metodologia proposta é verificada comparando-se a solução numérica do escoamento totalmente desenvolvido em um canal. Resultados provenientes da simulação do problema conhecido como ‘jet-buckling’ são apresentados.*

Palavras-chave: *Modelo integral K-BKZ, diferenças finitas, escoamentos viscoelásticos, superfície livre.*

1 Introdução:

Escoamentos viscoelásticos são importantes em muitos processos industriais como por exemplo moldagem por injeção e processos de extrusão de perfis. Esses problemas são desafiantes porque o escoamento pode conter várias superfícies livres em movimento. Muitos pesquisadores tem trabalhado no desenvolvimento de técnicas numéricas capazes de simular escoamentos viscoelásticos com superfícies livres porém, a maioria dos modelos constitutivos estudados tem sido descritos por equações diferenciais parciais como por exemplo, escoamentos governados pelas equações constitutivas Oldroyd-B [16], Maxwell superior convectado (‘Upper-Convected-Maxwell’) (UCM) [8], entre outros. No entanto, os avanços tecnológicos na área de computação científica e o desenvolvimento de computadores mais rápidos têm motivado pesquisadores a empregar modelos reológicos mais sofisticados que empregam equações integrais ao invés de equações diferenciais parciais. Uma motivação nessa direção é que modelos integrais são reconhecidos por melhor aproximar as propriedades materiais de polímeros tais como HPDE [3] e LDPE [5], que são utilizados em indústrias de injeção. Entre os modelos integrais investigados, a equação constitutiva K-BKZ [2] tem sido considerada por muitos pesquisadores que tem desenvolvido métodos numéricos para simular escoamentos viscoelásticos. Uma discussão detalhada

da importância do modelo K-BKZ na simulação de escoamentos viscoelásticos e desenvolvimentos recentes desse modelo estão disponíveis nos artigos de Mitsoulis [7] e Tanner [13]. Nesse trabalho, considera-se um método numérico para simular escoamentos bidimensionais com superfícies livres governados pelo modelo K-BKZ. Resultados de verificação do método numérico bem como a simulação do fenômeno ‘jet-buckling’ são apresentados.

2 Equações Governantes

As equações que governam escoamentos incompressíveis de fluidos viscoelásticos são descritas pelas equações de conservação da massa e de conservação de quantidade de movimento dadas respectivamente por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{1}$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \tag{2}$$

nas quais \mathbf{u} é o vetor velocidade, ρ é a densidade, p é a pressão e \mathbf{g} é o campo gravitacional. O tensor de tensão extra $\boldsymbol{\tau}$ é descrito pelo modelo reológico integral K-BKZ [2] que pode ser expresso como

$$\boldsymbol{\tau} = \int_{-\infty}^t M(t-t') H(I_1, I_2) \mathbf{B}_{t'}(t) dt', \tag{3}$$

onde \mathbf{B} é o tensor de Finger,

$$H(I_1, I_2) = \frac{\alpha}{\alpha + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2}, \tag{4}$$

é a função de decaimento de Papanastasiou-Scriven-Macosko [10], α e β são parâmetros do fluido e I_1 e I_2 denotam o primeiro e segundo invariantes definidos por

$$I_1 = \text{tr}(\mathbf{B}), \quad I_2 = \frac{1}{2} \text{tr}[I_1^2 - \text{tr}(\mathbf{B}^2)]. \tag{5}$$

As equações (3) e (4) são conhecidas como modelo K-BKZ-PSM. A função $M(t-t')$ é chamada função memória e definida por

$$M(t-t') = \sum_{k=1}^{m_1} \frac{a_k}{\lambda_k} e^{-\left(\frac{t-t'}{\lambda_k}\right)}, \tag{6}$$

em que λ_k são tempos de relaxação, a_k são módulos de relaxamento e m_1 é o número de módulos de relaxação do polímero. Essas constantes são encontradas a partir de dados experimentais de acordo com a teoria de viscoelasticidade linear. O número de modos depende da massa fundida de polímero, mas geralmente 4 a 8 modos são suficientes para capturar dados viscoelásticos lineares enquanto que para soluções de polímeros 2 a 3 modos são suficientes para descrever o fluido [14].

O método de *campos de deformação* [6] será utilizado para o tratamento do tensor de Finger, o qual é obtido pela seguinte equação de convecção

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}_{t_i}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{B}_{t_i}(\mathbf{x}, t) = [\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)]^T \cdot \mathbf{B}_{t_i}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{B}_{t_i}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \tag{7}$$

3 Método numérico

Vamos considerar escoamentos cartesianos bidimensionais com superfícies livres. Nesse caso, as equações (1)-(3) podem ser escritas na forma adimensional como (ver [15])

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{8}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y} + \frac{1}{Fr^2} g_x, \tag{9}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y} + \frac{1}{Fr^2} g_y. \tag{10}$$

Nas equações (9) e (10), $\Phi^{xx}, \Phi^{xy}, \Phi^{yy}$ são as componentes do tensor não-newtoniano Φ obtido pela seguinte transformação EVSS

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{Re} \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \boldsymbol{\Phi}, \quad \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T. \tag{11}$$

Logo, $\Phi^{xx}, \Phi^{xy}, \Phi^{yy}$ são obtidas por meio das equações

$$\Phi^{xx} = \tau^{xx} - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad \Phi^{xy} = \tau^{xy} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \Phi^{yy} = \tau^{yy} - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right), \tag{12}$$

nas quais,

$$\tau^{xx} = \int_{-\infty}^t \sum_{k=0}^{m1} \frac{a_k}{Wi \lambda_k} e^{-\frac{t-t'}{Wi \lambda_k}} \frac{\alpha}{\alpha - 3 + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2} B_{t'}^{xx}(t) dt', \tag{13}$$

$$\tau^{xy} = \int_{-\infty}^t \sum_{k=0}^{m1} \frac{a_k}{Wi \lambda_k} e^{-\frac{t-t'}{Wi \lambda_k}} \frac{\alpha}{\alpha - 3 + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2} B_{t'}^{xy}(t) dt', \tag{14}$$

$$\tau^{yy} = \int_{-\infty}^t \sum_{k=0}^{m1} \frac{a_k}{Wi \lambda_k} e^{-\frac{t-t'}{Wi \lambda_k}} \frac{\alpha}{\alpha - 3 + \beta I_1 + (1 - \beta) I_2} B_{t'}^{yy}(t) dt'. \tag{15}$$

Nas equações acima, $Re = \frac{\rho U L}{\eta_0}$, $Fr = \frac{U}{\sqrt{Lg}}$, $Wi = \lambda_{ref} \frac{U}{L}$ denotam os números de Reynolds, Froude e Wissenberg, respectivamente. $L, U, \eta_0, g, \lambda_{ref}$ denotam, respectivamente, comprimento característico, velocidade característica, viscosidade do fluido, constante gravitacional e tempo de relaxação do fluido.

As componentes do tensor de Finger \mathbf{B} são calculadas pelas equações (ver eq. (7))

$$\frac{\partial}{\partial t} B_{t'}^{xx} = -\frac{\partial}{\partial x} (u B_{t'}^{xx}) - \frac{\partial}{\partial y} (v B_{t'}^{xx}) + 2 \left[\frac{\partial u}{\partial x} B_{t'}^{xx} + \frac{\partial u}{\partial y} B_{t'}^{xy} \right], \tag{16}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} B_{t'}^{xy} = -\frac{\partial}{\partial x} (u B_{t'}^{xy}) - \frac{\partial}{\partial y} (v B_{t'}^{xy}) + \frac{\partial u}{\partial y} B_{t'}^{yy} + \frac{\partial v}{\partial x} B_{t'}^{xx}, \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} B_{t'}^{yy} = -\frac{\partial}{\partial x} (u B_{t'}^{yy}) - \frac{\partial}{\partial y} (v B_{t'}^{yy}) + 2 \left[\frac{\partial v}{\partial x} B_{t'}^{xy} + \frac{\partial v}{\partial y} B_{t'}^{yy} \right]. \tag{18}$$

As equações (8)-(18) são resolvidas por uma variante do método das partículas marcadoras introduzido por Amsden e Harlow [1] que utiliza o método de diferenças finitas em uma malha deslocada. As componentes do vetor velocidade são posicionadas nas faces laterais da célula enquanto que as outras variáveis são localizadas no centro da célula. Para representar a superfície livre será utilizada a técnica apresentada por Tomé et al. [17], na qual a superfície do fluido é constituída por um conjunto de partículas marcadoras que se movem com a velocidade local. As soluções $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$, $p(\mathbf{x}, t_{n+1})$ e $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ no tempo $t_{n+1} = t + \delta t$ são obtidas em duas etapas: inicialmente, usando os valores de $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t)$, a velocidade e pressão são calculados no tempo t_{n+1} utilizando um método de diferenças finitas implícito proposto por Oishi et al [9]. Para maiores detalhes ver Tomé et al [15]. Na segunda etapa, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ é utilizada para calcular $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t_{n+1})$, como mostrado a seguir.

3.1 Cálculo do tensor extra tensão $\tau(\mathbf{x}, t_{n+1})$

Para calcular o tensor extra tensão $\tau(\mathbf{x}, t_{n+1})$ seguimos a metodologia apresentada por Tomé et al. [15], como segue. Sejam t'_j ($N + 2$)-pontos no intervalo $[0, t_{n+1}]$, com $t'_0 = 0$ e $t'_{N+1} = t_{n+1}$. Então a equação constitutiva (3) pode ser escrita na forma (para detalhes, ver Tomé et al. [15])

$$\tau(t_{n+1}) = \int_{-\infty}^0 M(t_{n+1} - t'(0))H(I_1, I_2)\mathbf{B}_{t'}(0)dt' + \sum_{j=0}^{\frac{N-2}{2}} \int_{t'_{2j}}^{t'_{2j+2}} M(t - t')H(I_1, I_2)\mathbf{B}_{t'}(t_{n+1})dt', \tag{19}$$

onde N é um número par. Para $t' < 0$, $\mathbf{B}_{t'}(t_{n+1}) = \mathbf{B}_{(0)}(t_{n+1})$ é assumido constante e portanto, a primeira integral reduz-se a

$$\int_{-\infty}^0 M(t - t'_0)H(I_1, I_2)\mathbf{B}_{(0)}(t_{n+1})dt' \tag{20}$$

a qual pode ser resolvida exatamente. Com relação às integrais nos intervalos $[t_{2j}, t_{2j+2}]$ na equação (19), utilizamos uma fórmula de quadratura de segunda ordem (para maiores detalhes ver [15]).

Um item ainda não resolvido do método *campos de deformação* é como os pontos de integração $0 \leq t'_0 < t'_1 < \dots < t'_N < t'_{N+1} \leq t_{n+1}$ são distribuídos no intervalo $[0, t_{n+1}]$. É conhecido que a metodologia utilizada para definir esses pontos pode afetar a precisão dos resultados, especialmente em escoamentos complexos. Se os pontos t'_j forem colocados igualmente espaçados, sabe-se que a qualidade dos resultados deteriora a medida que o espaçamento entre os pontos aumenta. Nesse trabalho, adotamos uma metodologia ‘ad hoc’ na discretização do intervalo $[0, t_{n+1}]$, na qual os pontos t'_j são obtidos por uma progressão geométrica. Considera-se escoamentos não-estacionários com superfícies livres em que os nós de integração t'_j são calculados no tempo t_{n+1} como segue:

1. Faça $t'_0 = 0$ e $t'_{N+1} = t_{n+1}$;
2. Faça $t'_{N+1-j} = t'_{N+1} - q^j$, $j = 1, 2, \dots, N$, onde $q = (t_{n+1}/dt)^{1/(N+1)}$.

4 Resultados numéricos

A técnica numérica apresentada na Seção 3 foi aplicada para simular o escoamento em um canal bidimensional de largura $L = 0.01\text{m}$ e comprimento $10L$. Na entrada do canal impôs-se um perfil de velocidade adimensional dado por $u(y/L) = -4(y/L - 0.5)^2 + 1$. Os demais dados utilizados na simulação foram: velocidade de escala $U = 0.167\text{ms}^{-1}$, número de campos de deformação $N = 100$ e os dados do fluido K-BKZ denominado S1 [11] conforme especificado na Tabela 1.

$\rho = 801.5 \text{ kg/m}^3, \alpha = 10.0, \beta = 0.7, \lambda_{ref} = 0.06\text{s}, \eta_0 = 1.424\text{Pa.s}$			
k	λ_k [s]	a_k [Pa]	η_k [Pa.s]
1	0.6855	0.058352	0.0400
2	0.1396	1.664756	0.2324
3	0.0389	14.560411	0.5664
4	0.0059	99.152542	0.5850

Tabela 1: Dados do *FLUIDO S1* (ver [11]) utilizado na simulação do escoamento em um canal.

Na simulação desse escoamento obteve-se $Re = 0.93$ e $Wi = 1$. Para verificar a independência da malha, o escoamento foi simulado utilizando as malhas I (100×10), II (200×20) e III (400×40) até $t = 100\text{s}$ e espera-se que nesse tempo o estado estacionário tenha sido atingido. Os resultados das simulações numéricas obtidas nas três malhas numa seção transversal do canal em $x = 5L$

(meio do canal) estão mostrados na Figura 1 onde pode-se observar uma boa concordância com as soluções obtidas nas três malhas.

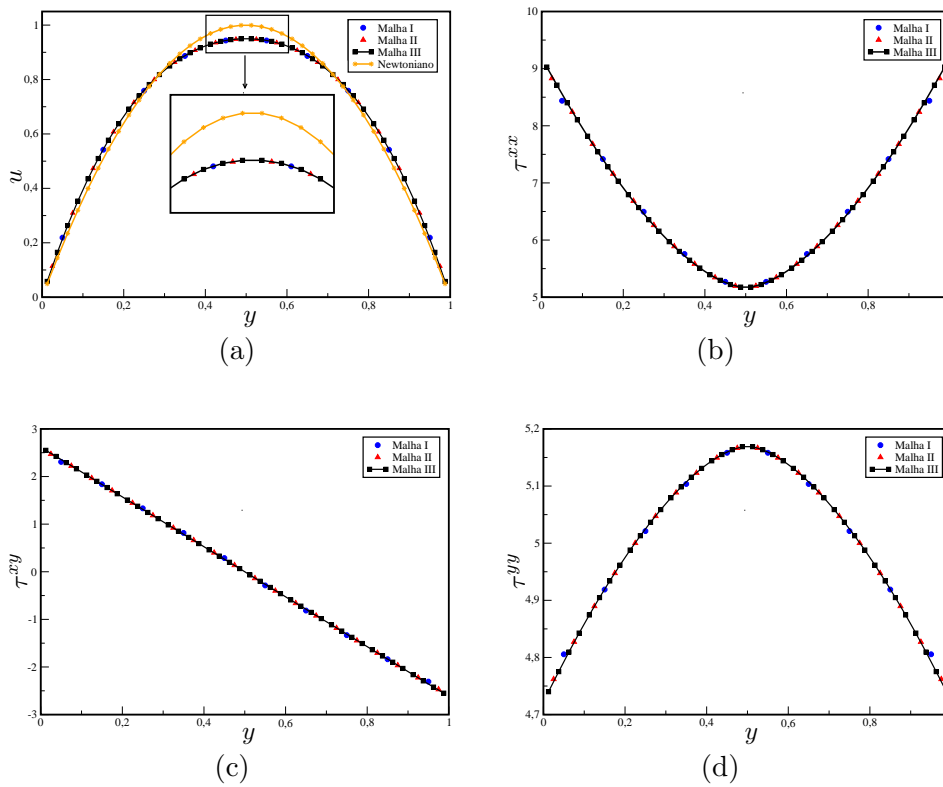


Figura 1: Simulação do escoamento totalmente desenvolvido no canal de um fluido K-BKZ usando as malhas I, II, III. (a) Velocidade $u(y)$; (b) τ^{xx} ; (c) τ^{xy} ; (d) τ^{yy} .

Como aplicação da técnica numérica, simulou-se o problema conhecido como ‘jet buckling’. O escoamento proveniente de um jato incidindo em uma placa rígida tem aplicação em muitos processos industriais como por exemplo enchimento de containeres.

$\rho = 880 \text{ kg/m}^3, \alpha = 25286, \beta = 0.1, \lambda_{ref} = 0.14, \eta_0 = 9.79$		
λ_k	a_k	$\eta_k = \lambda_k * a_k$
$1.12 \times 10^{-4} \text{ s}$	$6.67 \times 10^4 \text{ Pa}$	7.470 Pa.s
$4.12 \times 10^{-2} \text{ s}$	$1.83 \times 10^1 \text{ Pa}$	0.754 Pa.s
$8.64 \times 10^{-1} \text{ s}$	$1.83 \times 10^0 \text{ Pa}$	1.581 Pa.s

Tabela 2: Dados do *FLUIDO B* (ver Mitsoulis [7]).

Esse problema tem sido estudado por muitos pesquisadores [12] e sabe-se que após a incidência do jato sobre a placa rígida, o fenômeno de ‘jet buckling’ pode ocorrer. Para simular este problema considerou-se o *FLUIDO B* conforme definido na Tabela 2 e foram realizadas várias simulações nas quais variou-se a velocidade no injetor. Um domínio computacional de $10 \times 15 \text{ cm}^2$, e um espaçamento $\delta x = \delta y = 1 \text{ mm}$ foram utilizados. Os valores da velocidade U , do diâmetro do jato D , da altura do jato H , o número de pontos N e os respectivos Re , Wi e Fr são mostrados na Tabela 3. De acordo com as condições de Cruickshank [4], um jato Newtoniano deve apresentar ‘jet buckling’ se $Re < 0.56$ e $H/D > 10$. Logo, nessas simulações o jato Newtoniano deverá apresentar ‘jet buckling’. Para o jato contendo fluido K-BKZ ainda não existe nenhuma análise sobre a predição de ‘jet buckling’. De fato, os resultados dessas simulações com $U = 0.2, 0.4$ mostraram que ambos os jatos, newtoniano e viscoelástico, apresentaram o efeito ‘jet buckling’. No entanto, para a velocidade $U = 0.6$ (ver Figura 2) somente

o jato modelado pela equação K-BKZ apresentou ‘jet buckling’, que acreditamos ser devido ao efeito da elasticidade do fluido.

$D = 1 \text{ cm}, H = 15 \text{ cm}, H/D = 15, N = 100$			
$U \text{ (ms}^{-1}\text{)}$	Re	Wi	Fr
0.2	0.179	2.8	0.60
0.4	0.359	5.6	1.27
0.6	0.539	8.4	1.91

Tabela 3: Dados utilizados na simulação do ‘jet buckling’.

A análise apresentada por Cruickshank e Munson é baseada em resultados experimentais e portanto pode não ser muito precisa, o que justifica o fato do jato Newtoniano com $Re = 0.539$ não apresentar ‘jet buckling’ visto que $Re = 0.539$ está próximo da fronteira entre a ocorrência ou não deste efeito. Uma segunda justificativa baseia-se no fato de que simulações numéricas podem também apresentar erros de precisão. O importante, neste caso, é evidenciar que o jato simulado com o modelo integral K-BKZ, exposto às mesmas condições que o jato Newtoniano, apresentou o efeito de ‘jet buckling’, diferentemente do ocorrido no caso Newtoniano.

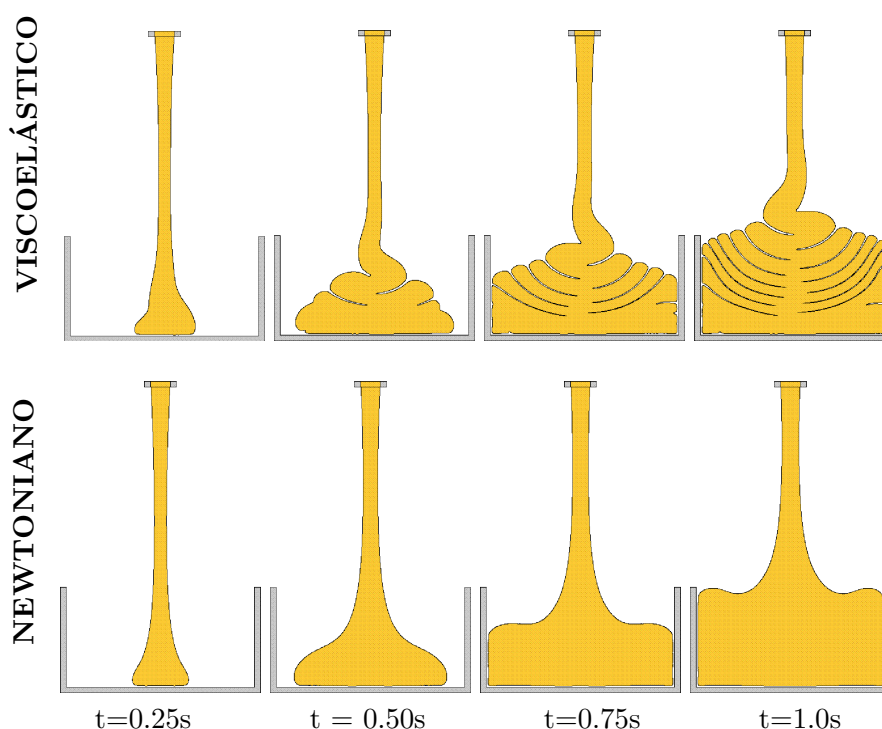


Figura 2: Simulação de ‘jet buckling’ de FLUIDO B com $U = 0.6\text{ms}^{-1}$ ($Re = 0.53, Wi = 8.4, Fr = 1.91$). Visualização do escoamento em vários tempos.

5 Conclusão

O método numérico apresentado neste trabalho mostrou-se capaz de simular escoamentos complexos que envolvem superfícies livres em movimento comuns em indústrias de polímeros. Simulou-se o problema de um jato incidindo em placa plana para vários valores dos números de Reynolds e Weissenberg. Os resultados mostraram que efeitos de viscoelasticidade modelados pela equação constitutiva integral K-BKZ podem conduzir o jato a apresentar o efeito de ‘jet buckling’.

6 Agradecimentos

Agradecimento à Capes Processo DS-5633919/D pelo suporte financeiro.

Referências

- [1] A.A. Amsden ,F.H. Harlow, A simplified mac technique for incompressible fluid flow calculations, *Journal of Computational Physics*, 6 (1970) 322-325.
- [2] B. Bernstein, E. A. Kearsley, L.J. Zapas, A study of stress relaxation with finite strain, *Journal of Rheology*, 7 (1963) 391.
- [3] M.J. Crochet, A. Goublomme, Numerical prediction of extrudate swell of a high-density polyethylene: further results, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 47 (1993) 281-287.
- [4] J.O. Cruickshank, B.R. Munson, Viscous fluid buckling of plane and axisymmetric jets, *Journal of Fluid Mechanics*, 113 (1981) 221-239.
- [5] santa casa S. Dupont, M.J. Crochet, The vortex growth of a KBKZ fluid in an abrupt contraction, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29 (1988) 81-91.
- [6] M.A. Hulsen, E. Peters, B.V.D Brule, A new approach to the deformation fields method for solving complex flows using integral constitutive equations, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 98 (2001) 201-221.
- [7] E. Mitsoulis, 50 years of the K-BKZ constitutive relation for polymers, *Polymer Science*, Article ID 952379, 2013.
- [8] G. Mompean, L. Thais, M.F. Tomé, A. Castelo, Numerical prediction of three-dimensional time-dependent viscoelastic extrudate swell using differential and algebraic models, *Computers and Fluids*, 44 (2011) 68-78.
- [9] 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, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 166 (2011) 165-179.
- [10] A.C. Papanastasiou, L.E. Scriven, C.W. Macosko, An integral constitutive equation for mixed flows: viscoelastic characterization, *Journal of Rheology*, 27 (1983) 387.
- [11] L. M. Quinzani, R.C. Armstrong,R. A. Brown, Birefringence and laser-doppler velocimetry (LDV) studies of viscoelastic flow throught a planar contraction, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 52 (1994) 1-36.
- [12] N.M. Ribe, A general theory of the dynamics of thin viscous jets, *Journal of Fluid Mechanics*, 457 (2002) 255-283.
- [13] R.I. Tanner, From a to (BK)Z in constitutive relations, *Journal of Rheology*, 32 (1988) 673-702.
- [14] R.I. Tanner, “Engineering rheology”. Oxford University Press, 2000.
- [15] M.F. Tomé, M.S. Araujo, M.A. Alves, F.T. Pinho, Numerical simulation of viscoelastic flows using integral models: a finite difference approach, *Journal of Computational Physics*, 227 (2008) 4207-4243.
- [16] M.F. Tomé, A. Castelo, V.G. Ferreira, S McKee, A finite difference technique for solving the Oldroyd-B model for 3D-unsteady free surface flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 154 (2008) 179-206.
- [17] M.F. Tomé, A. Castelo, J. Murakami, J.A. Cuminato, R. Minghim, M.C.F. Oliveira, N. Mangiavacchi, S. McKee Numerical simulation of axisymmetric free surface flows, *Journal of Computational Physics*, 157 (2000) 441-472 .