

APLICAÇÃO DO MODELO ALGÉBRICO PTT NA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS EM UM CANAL

DAIANE IGLESIA DOLCI*, GILCILENE SANCHEZ DE PAULO†

**Pós Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, FCT/UNESP
Presidente Prudente, São Paulo, Brasil*

†*Depto de Matemática e Computação, FCT/UNESP
Presidente Prudente, São Paulo, Brasil*

Emails: daia.dolci@gmail.com, gilcilene@fct.unesp.br

Abstract— This work presents the formulation of the algebraic model from the differential equation PTT (Phan-Thien-Tanner) as well the verification of numerical methodology for confined two-dimensional flows. This verification, important for computational fluid dynamics is performed by comparing the numerical solution with the analytical solution. The implementation and obtaining numerical solutions were made on a platform of high performance programming called FREEFLOW-2D. The numerical methodology used to solve the algebraic model PTT is based on GENSMAC extended for viscoelastic flows. This methodology uses finite difference technique on a staggered grid. The numerical results obtained are plausible, they indicate a good convergence of the method which reaches second order in space.

Keywords— Constitutive equation PTT, algebraic model, computational fluid dynamics.

Resumo— Neste trabalho apresenta-se a formulação do modelo algébrico a partir da equação diferencial PTT (Phan-Thien-Tanner) bem como a verificação da metodologia numérica para escoamentos confinados bidimensionais. Essa verificação, importante para a fluidodinâmica computacional, é realizada através da comparação da solução numérica com a solução analítica. A implementação e obtenção das soluções numéricas foram feitas em uma plataforma de programação de alto desempenho denominada FREEFLOW-2D. A metodologia numérica empregada para resolver o modelo algébrico PTT é baseada no método GENSMAC estendido para escoamentos viscoelásticos. Esta metodologia utiliza a discretização por diferenças finitas em uma malha deslocada. Os resultados numéricos obtidos são satisfatórios, indicando uma boa convergência do método e mostrando que ele atinge 2ª ordem no espaço.

Palavras-chave— Equação constitutiva PTT, modelo algébrico, fluidodinâmica computacional

1 Introdução

As equações básicas que descrevem escoamentos viscoelásticos, isotérmicos e incompressíveis são as equações da continuidade, da quantidade de movimento e para modelar a viscoelasticidade a equação constitutiva PTT, que na forma adimensionalizada são dadas, respectivamente, por

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

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{T}, \quad (2)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})\mathbf{T} + W_i \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2 \frac{(1-\beta)}{Re} \mathbf{S}, \quad (3)$$

onde \mathbf{u} é o vetor velocidade, p é a pressão, \mathbf{T} é o tensor extra-tensão de contribuição polimérica, $I_{\mathbf{T}} = T^{xx} + T^{yy}$ é a notação designada para o traço de \mathbf{T} , t é a variável temporal, \mathbf{S} é o tensor taxa de deformação expresso por

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t). \quad (4)$$

Os números adimensionais $Re = \frac{\rho UL}{\eta_0}$ e $W_i = \frac{\lambda U}{L}$ são os números de Reynolds e Weissenberg, respectivamente. As constantes L , U , ρ e λ são os valores de referência do comprimento, velocidade, densidade e do tempo de relaxação do fluido viscoelástico, respectivamente. O parâmetro $\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0}$

controla a contribuição do solvente Newtoniano, onde $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ viscosidade total do fluido à taxa nula de cisalhamento, η_s é a viscosidade do solvente e η_p é a viscosidade do polímero.

Neste trabalho considera-se $f(I_{\mathbf{T}})$ na forma linear, isto é,

$$f(I_{\mathbf{T}}) = 1 + \epsilon \frac{Re W_i}{(1-\beta)} I_{\mathbf{T}}, \quad (5)$$

onde parâmetro ϵ está relacionado com o comportamento elongacional do modelo.

O símbolo $(\overset{\nabla}{\cdot})$ representa a derivada convectiva, dada por

$$\overset{\nabla}{T} = \frac{DT}{Dt} - \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^t \cdot \mathbf{T}, \quad (6)$$

onde D/Dt é a derivada material.

A seguir é apresentado sucintamente o desenvolvimento do modelo algébrico PTT a partir da equação (3), como proposto em (Mompean, 2002).

2 Formulação do Modelo Algébrico PTT

A formulação do modelo algébrico para o tensor extra-tensão \mathbf{T} foi obtida originalmente a partir da equação constitutiva Oldroyd-B por Mompean et al.(?). Em seguida, no trabalho (Mompean, 2002) formulou-se um modelo algébrico a partir

da equação constitutiva não-linear PTT. A não linearidade do modelo PTT modificou levemente a formulação original, essencialmente considera-se $f(I_T)$ na equação (11).

Considere o tensor deviatório, definido por

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{T} - \frac{I_T}{3} \mathbf{I}, \quad (7)$$

onde esse tensor pode ser representado por um polinômio em função dos tensores taxa de deformação \mathbf{S} e taxa de rotação $\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^t)$ (ver (Pope, 1975)), dado por

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{\{\mathbf{\Gamma S}\}}{\{\mathbf{S}^2\}} \mathbf{S} + \frac{\{\mathbf{\Gamma WS}\}}{\{\mathbf{S}^2\} \{\mathbf{W}^2\}} (\mathbf{SW} - \mathbf{WS}) + \frac{6 \{\mathbf{\Gamma S}^2\}}{\{\mathbf{S}^2\}^2} \left(\mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right), \quad (8)$$

considerando escoamentos bidimensionais, onde os escalares $\{\mathbf{\Gamma S}\}$, $\{\mathbf{\Gamma WS}\}$, $\{\mathbf{S}^2\}$, $\{\mathbf{W}^2\}$ e $\{\mathbf{\Gamma S}^2\}$ são os traços dos tensores $\mathbf{\Gamma S}$, $\mathbf{\Gamma WS}$, \mathbf{S}^2 , \mathbf{W}^2 e $\mathbf{\Gamma S}^2$, respectivamente.

Os valores $\{\mathbf{\Gamma S}\}$, $\{\mathbf{\Gamma WS}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma S}^2\}$ podem ser calculados de maneira que a equação (8) torne-se explícita em $\mathbf{\Gamma}$. Para o cálculo desses escalares, trabalha-se primeiramente com a equação (3), reescrita em termos dos tensores \mathbf{S} e \mathbf{W} ,

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = -\frac{f(I_T)}{W_i} \mathbf{T} + 2 \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \mathbf{S} + (\mathbf{ST} + \mathbf{TS}) - (\mathbf{TW} - \mathbf{WT}). \quad (9)$$

Substituindo (7) em (9), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} &= -\frac{f(I_T)}{W_i} \mathbf{\Gamma} - \frac{f(I_T)}{W_i} \frac{I_T}{3} \mathbf{I} + 2 \frac{(1-\beta)}{Re W_i} \mathbf{S} \\ &\quad + (\mathbf{ST} + \mathbf{\Gamma S}) - (\mathbf{\Gamma W} - \mathbf{WT}) + \frac{2}{3} \mathbf{S} I_T \\ &\quad + \frac{D I_T}{Dt} \frac{1}{3} \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (10)$$

Note que a equação (10) depende de I_T , o qual pode ser obtido tomando-se o traço da equação (9). Assim, a equação de evolução do traço é dada por,

$$\frac{D I_T}{Dt} = -\frac{f(I_T)}{W_i} I_T + 2 \{\mathbf{\Gamma S}\}. \quad (11)$$

Substituindo (11) em (10), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} &= -\frac{f(I_T)}{W_i} \mathbf{\Gamma} + \left(\mathbf{ST} + \mathbf{\Gamma S} - \frac{2}{3} \{\mathbf{\Gamma S}\} \right) \\ &\quad - (\mathbf{\Gamma W} - \mathbf{WT}) + 2 \left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_T \right) \mathbf{S}. \end{aligned} \quad (12)$$

Para chegar ao modelo algébrico, duas hipóteses de pequena variação para o tensor deviatório $\mathbf{\Gamma}$ das componentes do tensor extra-tensão foram estudadas por Mompean e co-autores no trabalho (G. Mompean, 1998). Apenas uma delas garante uma modelagem consistente, essa hipótese assume

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = \frac{\mathbf{\Gamma}}{I_T} \frac{D I_T}{Dt}.$$

Desta forma, a equação (12) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\mathbf{\Gamma}}{I_T} 2 \{\mathbf{\Gamma S}\} + \left(\mathbf{ST} + \mathbf{\Gamma S} - \frac{2}{3} \{\mathbf{\Gamma S}\} \right) \\ &\quad - (\mathbf{\Gamma W} - \mathbf{WT}) + 2 \left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_T \right) \mathbf{S}. \end{aligned} \quad (13)$$

A partir da equação (13) obtém-se os valores $\{\mathbf{\Gamma S}\}$, $\{\mathbf{\Gamma WS}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma S}^2\}$ da seguinte forma: para determinar $\{\mathbf{\Gamma WS}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma S}^2\}$, multiplica-se a equação (13) por \mathbf{WS} e \mathbf{S}^2 , respectivamente, a seguir toma-se o traço, obtendo

$$\{\mathbf{\Gamma S}^2\} = -\frac{I_T}{6} \{\mathbf{S}^2\} \quad \text{e} \quad \{\mathbf{\Gamma WS}\} = -\frac{I_T}{2} \{\mathbf{W}^2\};$$

Para determinar $\{\mathbf{\Gamma S}\}$ basta multiplicar a equação (13) por \mathbf{S} e tomar o traço, obtendo

$$\{\mathbf{\Gamma S}\} = +\sqrt{\frac{I_T^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_T \right) I_T \{\mathbf{S}^2\}}. \quad (14)$$

Desta forma, a equação (8) pode ser reescrita por

$$\begin{aligned} \mathbf{\Gamma} &= \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \{\mathbf{\Gamma S}\} \mathbf{S} - \frac{1}{2} \frac{I_T}{\{\mathbf{S}^2\}} \times \\ &\quad \times \left[(\mathbf{SW} - \mathbf{WS}) - 2 \left(\mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right) \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Portanto, o modelo algébrico consiste em calcular a equação diferencial para o traço I_T dada por (11), resolver a equação algébrica (15) para $\mathbf{\Gamma}$ e por fim resolver a equação (7) para obtermos o tensor extra-tensão \mathbf{T} .

3 Metodologia Numérica

As equações da continuidade e da quantidade de movimento juntamente com o modelo algébrico PTT foram implementadas na plataforma FREEFLOW-2D. A metodologia utilizada nesta plataforma é uma extensão da metodologia GENSMAC (GENERALIZED SIMPLIFIED MARKER-AND-CELL), a qual é baseada em métodos de projeção (Chorin, 1968), cuja ideia central é desacoplar velocidade e pressão nas equações de Navier-Stokes e resolver essas variáveis separadamente incluindo, neste trabalho, o tratamento do traço do tensor I_T . As equações governantes são resolvidas pela técnica de diferenças finitas cuja discretização é feita em uma malha deslocada com células de dimensão $\delta x \times \delta y$.

Na integração temporal da equação de quantidade de movimento foi empregado o método de Euler implícito enquanto na equação de evolução para o I_T foi empregado o método de Runge-Kutta de 2ª ordem. Os termos convectivos foram

aproximados pelo método ‘upwind’ de alta ordem CUBISTA e as derivadas espaciais por diferenças centrais.

3.1 Algoritmo computacional

Supondo que o campo de velocidade u e v solenoidal, o traço do tensor extra-tensão I_T , a pressão p sejam conhecidos no tempo t^n . Considerando o modelo algébrico PTT para o cálculo do tensor extra-tensão \mathbf{T} , tem-se os seguintes passos computacionais:

Passo 1: Aplica-se a primeira etapa de RK2, isto é, calcula-se o traço do tensor extra-tensão \bar{I}_T^{n+1} por Euler explícito,

$$\frac{\bar{I}_T^{n+1} - I_T^n}{\delta t} = \mathbf{F}(\mathbf{u}^n, I_T^n, \{\mathbf{FS}\}^n), \quad (16)$$

onde

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}, I_T, \{\mathbf{FS}\}) = -\frac{\partial u I_T}{\partial x} - \frac{\partial v I_T}{\partial y} - \frac{f(I_T)}{W_i} I_T + 2 \{\mathbf{FS}\}, \quad (17)$$

Passo 2: Calcular o tensor deviatórico $\bar{\mathbf{\Gamma}}^{n+1}$ por (15).

Passo 3: Calcular o tensor extra-tensão $\bar{\mathbf{T}}^{n+1}$ por

$$\bar{\mathbf{T}}^{n+1} = \bar{\mathbf{\Gamma}}^{n+1} + \frac{1}{3} \bar{I}_T^{n+1} \mathbf{I}. \quad (18)$$

Passo 4: Calcular a velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$, integrando a equação de quantidade de movimento (2) por Euler implícito.

Passo 5: Resolve-se a equação de Poisson por

$$\nabla^2 \psi^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}. \quad (19)$$

Passo 6: Atualizar a velocidade \mathbf{u}^{n+1} por

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \nabla \psi^{n+1}. \quad (20)$$

Passo 7: Atualizar a pressão p^{n+1} pela equação

$$p^{n+1} = \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1}. \quad (21)$$

Passo 8: Calcular o traço do tensor extra-tensão I_T^{n+1} pela segunda etapa do método RK2, isto é,

$$\begin{aligned} \frac{I_T^{n+1} - I_T^n}{\delta t} &= \frac{1}{2} [\mathbf{F}(\mathbf{u}^n, I_T^n, \{\mathbf{FS}\}) \\ &\quad + \mathbf{F}(\mathbf{u}^{n+1}, \bar{I}_T^{n+1}, \{\mathbf{FS}\}^{n+1})] \end{aligned} \quad (22)$$

Passo 9: Atualizar o tensor deviatórico $\mathbf{\Gamma}^{n+1}$ por (15).

Passo 10: Calcular o tensor extra-tensão \mathbf{T}^{n+1} por

$$\mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{\Gamma}^{n+1} + \frac{1}{3} I_T^{n+1} \mathbf{I}. \quad (23)$$

4 Condições auxiliares

Para a formulação apresentada neste trabalho é necessário impor condições auxiliares para \mathbf{u} , p , \mathbf{T} e para I_T .

4.1 Condição inicial

Neste trabalho considera-se as seguintes condições iniciais:

$$\mathbf{u}(x, y, t_0) = \mathbf{0} \quad (24)$$

$$p(x, y, t_0) = 0 \quad (25)$$

$$\mathbf{T}(x, y, t_0) = \mathbf{0} \quad (26)$$

$$I_T(x, y, t_0) = 1.0 \times 10^{-12} \quad (27)$$

4.2 Condição de contorno

Na entrada do canal foram impostas as soluções analíticas para a componente de velocidade $u(y)$ e o tensor extra-tensão \mathbf{T} (D. O. A. Cruz, 2005). Em contornos rígidos foi aplicada a condição de não-escorregamento para o vetor velocidade ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$), I_T e \mathbf{T} são calculados, respectivamente, a partir da equação (11) e da equação (7) considerando as simplificações cabíveis com relação as condições da velocidade na geometria em questão. Na saída do canal adotada-se a condição homogênea de Neumann para a velocidade \mathbf{u} e o traço de \mathbf{T} , isto é,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial n} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial I_T}{\partial n} = 0.$$

Observação: a simplificação das equações do modelo algébrico para escoamentos totalmente desenvolvidos em um canal fornece um sistema de equações, cuja solução coincide com a solução analítica do modelo diferencial PTT que foi apresentada em (D. O. A. Cruz, 2005).

5 Verificação da Metodologia Numérica

A verificação da metodologia numérica é feita pela simulação do escoamento totalmente desenvolvido em um canal comparando os resultados numéricos com a solução analítica do problema.

A simulação do escoamento entre duas placas paralelas, tem os seguintes dados de entrada:

- Distância entre as placas: $L = 1m$;
- Comprimento das placas: $10L$;
- Números $Re = 0.5$ e $W_i = 0.2$.
- Parâmetro $\epsilon = 0.5$.
- Constante $\beta = 0.6$.
- Velocidade média do escoamento: $U = 1.0ms^{-1}$

As malhas espaciais utilizadas para essa verificação são:

- Malha Grossa (M1): 10×100 células ($\delta x = \delta y = 0.1$),
- Malha intermediária (M2): 20×200 células ($\delta x = \delta y = 0.05$),
- Malha fina (M3): 40×400 células ($\delta x = \delta y = 0.025$).

As Figuras 1, 2 e 3 descrevem respectivamente os perfis das componentes do tensor extra-tensão T^{xy} , T^{xx} e da componente de velocidade na direção- x , u .

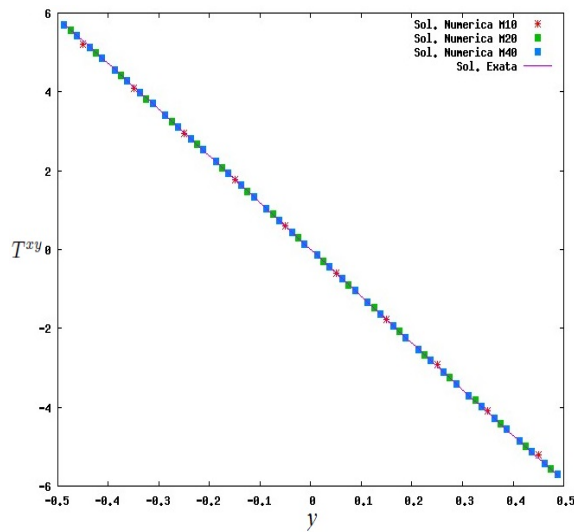


Figura 1: Comparação da solução numérica com a solução analítica da componente T^{xy} em $x = 5L$ e $t = 50s$.

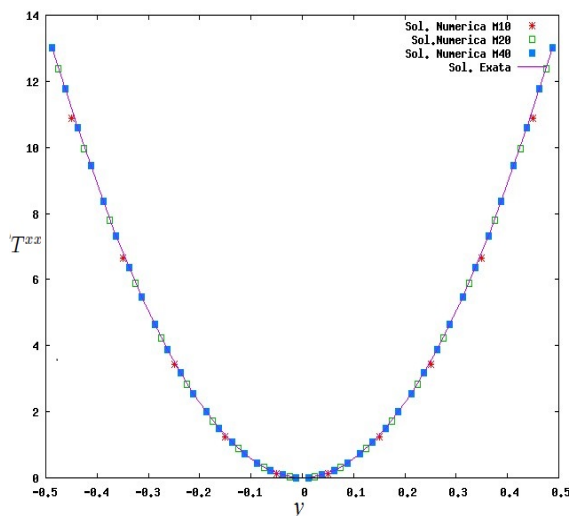


Figura 2: Comparação da solução numérica com a solução analítica da componente T^{xx} em $x = 5L$ e $t = 50s$.

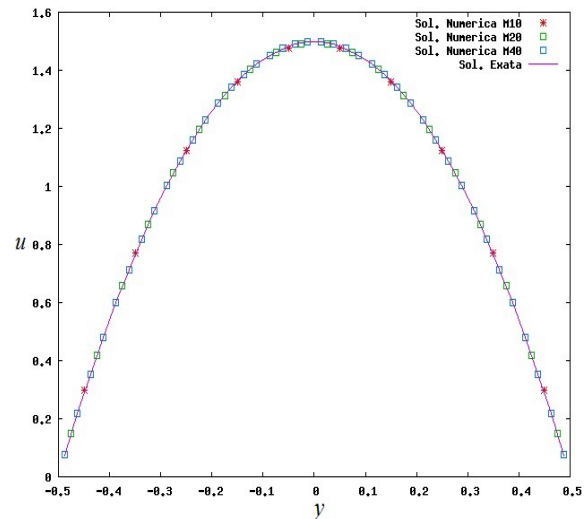


Figura 3: Comparação da solução numérica com a solução analítica da velocidade u em $x = 5L$ e $t = 50s$.

A análise da convergência do método numérico é feita através do cálculo dos erros relativos entre a solução numérica e a solução exata. O erro relativo foi calculado na norma L_1 , definida por:

$$E(SolNum) = \frac{\sum |SolEx - SolNum|}{\sum |SolEx|}. \quad (28)$$

No cálculo da ordem de convergência é utilizada a seguinte expressão:

$$O = \frac{\log\left(\frac{E_M}{E_{M/2}}\right)}{\log 2} \quad (29)$$

onde M é uma determinada malha espacial com espaçamento δx e $M/2$ a malha espacial com espaçamento $0.5\delta x$.

A Tabela 1 apresenta os valores do erro relativo calculado pela equação (28) e as Tabelas 2 e 3 apresentam a ordem de convergência do método numérico utilizando as malhas M1, M2 e M3.

Tabela 1: Erros entre a solução analítica e a solução numérica.

Erro	M1	M2	M3
$E(u(y))$	6.02×10^{-3}	1.59×10^{-3}	4.08×10^{-4}
$E(T^{xx})$	1.75×10^{-2}	4.50×10^{-3}	1.14×10^{-3}
$E(T^{xy})$	8.08×10^{-3}	2.09×10^{-3}	5.30×10^{-4}

Tabela 2: Ordem de convergência do modelo algébrico PTT usando a malha M1 e M2.

Variáveis	$O = \log\left(\frac{E_{M1}}{E_{M2}}\right) / \log 2$
$u(y)$	1.91
T^{xx}	1.96
T^{xy}	1.94

Tabela 3: Ordem de convergência do modelo algébrico PTT usando a malha M2 e M3.

Variáveis	$O = \log \left(\frac{E_{M2}}{E_{M3}} \right) / \log 2$
$u(y)$	1.97
T^{xx}	1.98
T^{xy}	1.98

6 Conclusão

Neste trabalho foi apresentado sucintamente a formulação do modelo algébrico PTT a partir da equação constitutiva diferencial, a metodologia numérica para simular um escoamento em um canal juntamente com as condições auxiliares.

A verificação da metodologia numérica, foi feita comparando a solução numérica do escoamento totalmente desenvolvido em um canal, considerando um corte transversal no meio do canal, com a solução analítica. Nos gráficos 1, 2 e 3 verificou-se que a solução numérica da velocidade u e das componentes T^{xy} e T^{xx} apresentam uma boa concordância com a solução exata do problema, além disso, nota-se pela Tabela 1 que o erro relativo tende a zero à medida que há um refinamento de malha, mostrando uma convergência da solução numérica, onde essa convergência é de ordem aproximadamente dois como mostrado nas Tabelas 2 e 3.

7 Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro das agências de fomento FAPESP (nº dos processos: 2012/09858-5, 2011/13930-0) e CNPq (nº do processo: 472514/2011-3).

Referências

- Chorin, A. (1968). *Numerical solution of the navier-stokes*, Mathematics of Computation 2.
- D. O. A. Cruz, F. T. P. (2005). Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a newtonian solvent contribution, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **132**.
- G. Mompean, T. Jongen, T. G. M. D. (1998). On algebraic extra-stress models for the simulation of viscoelastic flows, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* **79**: 28–35. DOI: [10.1016/S0377-0257\(98\)00111-6](https://doi.org/10.1016/S0377-0257(98)00111-6)
- Mompean, G. (2002). On predicting abrupt contraction flows with differential and algebraic viscoelastic models, *Computers and Fluids* **31**: 935–956. DOI: [10.1016/S0045-7930\(01\)00047-0](https://doi.org/10.1016/S0045-7930(01)00047-0)
- Pope, S. B. (1975). A more general effective-viscosity hypothesis, *Journal Fluid Mech* **72**.