

Análise Numérica de Escoamentos Viscoelásticos com Singularidades

Irineu Lopes Palhares Junior

IMD/UFRN,
irineu.palhares@imd.ufrn.br

metrópole
DIGITAL



Sumário

- 1 Motivação
- 2 Objetivos
- 3 Equações governantes
- 4 Resultados assintóticos
- 5 Método numérico
- 6 Resultados numéricos
- 7 Considerações finais



Motivação

Escoamentos envolvendo singularidades representam um desafio na área de mecânica dos fluidos computacional, uma vez que este tipo de escoamento dificulta o cálculo das propriedades (velocidade, pressão, tensões, etc.) de maneira acurada, ou ainda prejudica o processo de simulação numérica introduzindo instabilidades, que eventualmente levam à descontinuidade da simulação. Além disso, as dificuldades associadas à problemas com singularidades são ainda maiores para escoamentos viscoelásticos, uma vez que estes modificam o comportamento e estrutura matemática do problema.



Objetivos

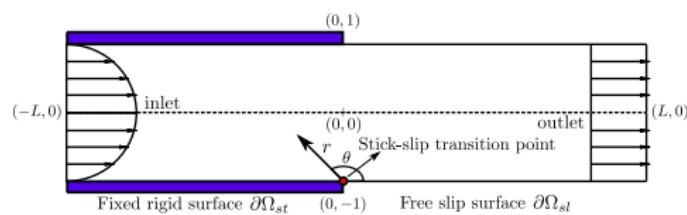
Os principais objetivos deste estudo são:

- Entender o comportamento de escoamentos viscoelásticos próximos à singularidade a partir da análise assintótica.
- Verificar numericamente os resultados assintóticos, ao redor da singularidade, disponíveis na literatura.
- Usar o conhecimento assintótico para melhoria dos métodos numéricos.

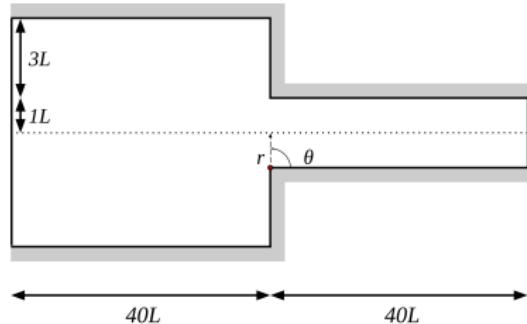


Problemas analisados

Os problemas analisados neste trabalho são: *stick-slip* e contração 4:1. Ambos possuem singularidades em um ou mais pontos do domínio.



Stick-slip



Contração 4:1

Figura 1: Geometria dos escoamentos *stick-slip* e contração 4:1.



Camadas limites

Além da singularidade, estes escoamentos possuem camadas limites.

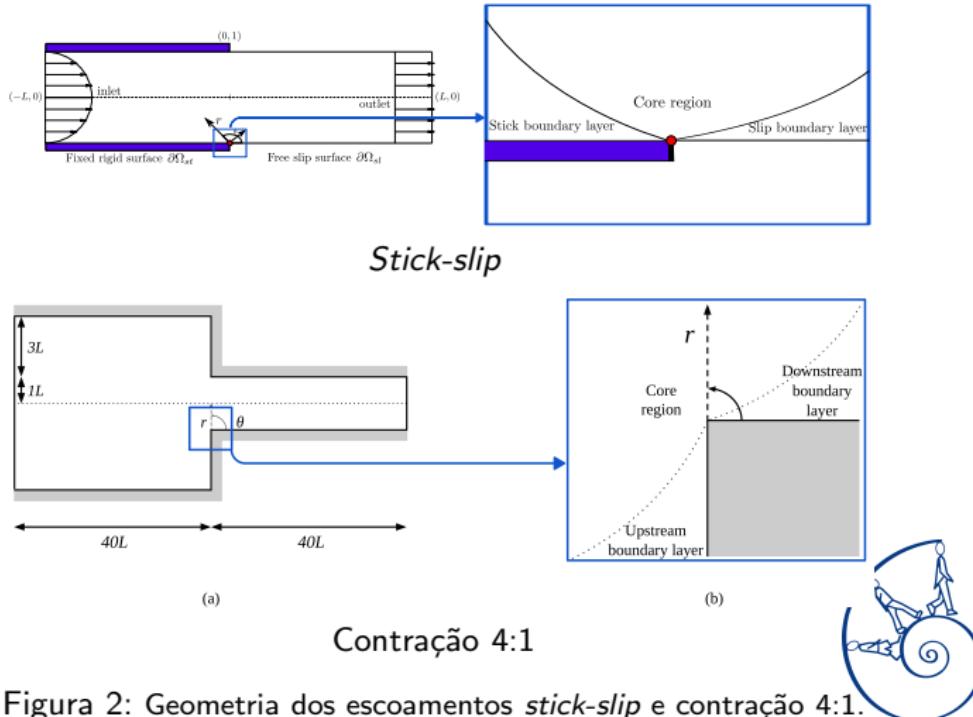


Figura 2: Geometria dos escoamentos *stick-slip* e contração 4:1.

Equações governantes

As equações que governam um escoamento incompressível e isotérmico, equações do movimento e da continuidade, são dadas, respectivamente por

$$Re \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) = -\nabla p + \beta \nabla^2 v + \nabla \cdot T^P, \quad \nabla \cdot v = 0, \quad (1)$$

onde v é o campo de velocidade, p a pressão, T^P o tensor da contribuição viscoelástica, Re o número de Reynolds e β a razão entre as viscosidades do solvente e total.



Equação constitutiva: formulação cartesiana (CSF)

Além disso, como estamos trabalhando com um escoamento viscoelástico, precisamos da equação constitutiva para o tensor T^P .

Assim, a equação constitutiva para um escoamento viscoelástico, na sua forma adimensional, é dada por

$$T^P + Wi \left(\overset{\triangledown}{T^P} + \frac{\kappa}{(1-\beta)} f(T^P) \right) = 2(1-\beta) D, \quad (2)$$

onde $D = \frac{1}{2}(\nabla v + (\nabla v)^T)$ é o tensor taxa de deformação e

$\overset{\triangledown}{T^P} = \frac{\partial T^P}{\partial t} + (v \cdot \nabla) T^P - (\nabla v) T^P - T^P (\nabla v)^T$ a derivada convectada superior de T^P .



Modelos constitutivos

A partir da função f , podemos definir qual o fluido viscoelástico será usado:

$$f(T^P) = \begin{cases} 0, & \text{Oldroyd-B} \\ \operatorname{tr}(T^P) T^P, & \text{PTT,} \\ (T^P)^2, & \text{Giesekus,} \end{cases} \quad (3)$$

onde $\operatorname{tr}(T^P)$ representa o traço da matriz T^P .



Considerações sobre a dominância do tensor Newtoniano

A região externa à camada limite é definida como sendo à região próxima à singularidade, mas longe das superfícies. Nesta região assumimos que o tensor dominante é o Newtoniano, isto é,

$$T^s \gg T^P, \text{ para } r \rightarrow 0, \quad (4)$$

onde $T^s = 2\beta D$ e o tensor das tensões $T = T^s + T^P$ pode ser aproximado por

$$T \sim T^s. \quad (5)$$

A aproximação (5) é válida para os modelos PTT e Giesekus, porém é incorreta para o modelo Oldroyd-B, onde o tensor dominante na região externa à camada limite é o polimérico.



Solução *stretching*

A partir da hipótese (5), temos que a equação constitutiva do tensor polimérico pode ser escrita como

$$\overset{\nabla}{T}^P = 0, \quad (6)$$

cuja solução, chamada de solução *stretching*, é dada por [7]

$$T^P = \lambda(\psi) vv^T, \quad (7)$$

onde λ é uma função da função de corrente ψ .



Expansão natural do tensor

Uma outra forma de se calcular a contribuição viscoelástica do escoamento é por meio da formulação natural do tensor [1]. Para isto, decomponemos o tensor T^P da seguinte forma:

$$T^P = \frac{(1 - \beta)}{Wi} \left(\lambda \mathbf{v} \mathbf{v}^T + \mu (\mathbf{v} \mathbf{w}^T + \mathbf{w} \mathbf{v}^T) + \nu \mathbf{w} \mathbf{w}^T - I \right), \quad (8)$$

com $\mathbf{v} = (u, v)^T$ e $\mathbf{w} = \frac{1}{|\mathbf{v}|^2} (-v, u)^T$.



Equação constitutiva: formulação natural (NSF)

Na sequência, substituímos a equação (8) em (2), resultando no seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} \text{Wi} \left[\frac{\partial \lambda}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \lambda + \frac{2}{|\mathbf{v}|^2} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \left(\lambda \mathbf{u} + \mu \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|^2} \right) + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \left(\lambda \mathbf{v} - \mu \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{v}|^2} \right) \right) + 2\mu \nabla \cdot \mathbf{w} \right] + \\ \left(\lambda - \frac{1}{|\mathbf{v}|^2} \right) + \kappa \left[\left(\lambda - \frac{1}{|\mathbf{v}|^2} \right)^2 |\mathbf{v}|^2 + \frac{\mu^2}{|\mathbf{v}|^2} \right] = 0, \\ \text{Wi} \left[\frac{\partial \mu}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mu + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \left(-\lambda \mathbf{v} + \nu \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|^4} \right) + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \left(\mathbf{u} \lambda - \nu \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{v}|^4} \right) + \nu \nabla \cdot \mathbf{w} \right] + \mu \\ + \kappa \left(\lambda |\mathbf{v}|^2 - 2 + \frac{\nu}{|\mathbf{v}|^2} \right) \mu = 0, \\ \text{Wi} \left[\frac{\partial \nu}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \nu - 2 \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \left(\nu \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{v}|^2} + \mu \mathbf{v} \right) + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \left(\nu \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|^2} - \mu \mathbf{u} \right) \right) \right] + (\nu - |\mathbf{v}|^2) \\ + \kappa \left[(\nu - |\mathbf{v}|^2)^2 \frac{1}{|\mathbf{v}|^2} + \mu^2 |\mathbf{v}|^2 \right] = 0. \end{aligned} \tag{9}$$



Solução Newtoniana

Com base nos trabalhos de Dean e Montagnon [3], Michael e Moffat [4] e Richardson [8], podemos escrever as soluções assintóticas para um campo de velocidade Newtoniano, em termos da função de corrente ψ , como

$$\psi = C_0 r^{n+1} f_0(\theta) \text{ para } r \rightarrow 0, \quad (10)$$

onde

$$f_0 = \begin{cases} 2 \sin(n\theta) \sin \theta, & S.S. \\ \frac{1}{2n} \left[\frac{\cos((1-n)(\theta - 3\pi/4))}{\cos((1-n)(3\pi/4))} - \frac{\cos((1-n)(\theta + 3\pi/4))}{\cos((1+n)(3\pi/4))} \right], & C. 4:1. \end{cases} \quad (11)$$

e

$$n = \begin{cases} \frac{1}{2}, & Stick-slip \\ 0.5445, & Contração 4:1. \end{cases} \quad (12)$$



Resumo das informações assintóticas

Na Tabela 1 são apresentados os resultados assintóticos das grandezas do escoamento para os problemas *stick-slip* e contração 4:1.

Tabela 1: Resultados assintóticos do escoamento para $r \rightarrow 0$.

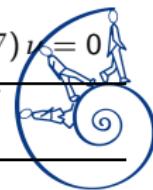
Stick-slip							
Model	v	∇v	T^P	Stick e Slip B.L.	λ	μ	ν
Oldroyd-B			$r^{-\frac{4}{5}}$	$r^{\frac{3}{2}}$ e r^2	$-\frac{9}{5}$	$-\frac{3}{10}$	$\frac{6}{5}$
PTT	$r^{\frac{1}{2}}$	$r^{-\frac{1}{2}}$	$r^{-\frac{4}{11}}$	$r^{\frac{7}{6}}$ e $r^{\frac{23}{20}}$	$r^{-\frac{15}{11}}$	$r^{-\frac{3}{22}}$	$r^{\frac{12}{11}}$
Giesekus			$r^{-\frac{5}{16}}$	$r^{\frac{5}{4}}$ e $r^{\frac{17}{14}}$	$r^{-\frac{21}{16}}$	$r^{0.0}$	$r^{\frac{21}{16}}$
Contração 4:1							
Model	v	∇v	T^P	B.L. thickness	λ	μ	ν
PTT	$r^{0.5445}$	$r^{-0.4555}$	$r^{-0.3286}$	$r^{1.1518}$	$r^{-1.4176}$	$r^{-0.1268}$	$r^{1.1638}$
Giesekus			$r^{-0.2796}$	$r^{1.2278}$	$r^{-1.3686}$	$r^{0.0}$	$r^{1.3686}$



Equações de camada limite - Contração 4:1

Tabela 2: Boundary layer equations according to the stress formulation, viscoelastic model and regions.

Formulation	Downstream & Upstream BL	Core
CSF	$\text{Wi} \left[\nabla^{\top} T^P_{11} + \frac{\kappa}{1-\beta} g_{11} \right] = 0$	
	$\text{Wi} \left[\nabla^{\top} T^P_{12} + \frac{\kappa}{1-\beta} g_{12} \right] = 2(1-\beta)D_{12}$	$\nabla^{\top} T^P = 0$
	$\text{Wi} \left[\nabla^{\top} T^P_{22} + \frac{\kappa}{1-\beta} g_{22} \right] = 2(1-\beta)D_{22}$	
	$g_{11} \sim (T^P_{11})^2 \quad g_{12} \sim T^P_{11} T^P_{12} \quad g_{22} \sim \begin{cases} T^P_{11} T^P_{22}, \\ (T^P_{12})^2 + \frac{(1-\beta)^2}{\text{Wi}^2} \frac{(\kappa-1)}{\kappa}, \end{cases}$	PTT G
NSF	$\text{Wi}[(v \cdot \nabla) \lambda + 2\mu \nabla \cdot w] + \kappa g_\lambda = 0$	$(v \cdot \nabla) \lambda = 0$
	$\text{Wi}[(v \cdot \nabla) \mu + \nu \nabla \cdot w] + \kappa g_\mu = 0$	$(v \cdot \nabla) \mu = 0$
NSF	$\text{Wi}[(v \cdot \nabla) \nu] + \kappa g_\nu = \begin{cases} 0, & \text{PTT} \\ v ^2, & \text{G} \end{cases}$	$(v \cdot \nabla) \nu = 0$
	$g_\lambda \sim \lambda^2 v ^2 \quad g_\mu \sim \lambda \mu v ^2 \quad g_\nu \sim \begin{cases} \lambda v ^2 (\nu - v ^2), \\ (\mu^2 + \frac{\kappa-1}{\kappa}) v ^2, \end{cases}$	PTT G



Método numérico

Para a verificação dos resultados assintóticos (slopes e camadas limite), foram usados **duas metodologias**:

- I) Integração numérica das equações constitutivas ao longo de uma linha de corrente. Estratégia esta que chamaremos de *Simplified*.
- II) Solução numérica de todo o conjunto de equações (momento, continuidade e constitutiva), que chamaremos de *Full*.



Integração ao longo de linhas de corrente

Para a integração das equações constitutivas ao longo de linhas de corrente, reduzimos os sistemas de equações diferenciais parciais em equações ordinárias, isto é,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{v_\theta}{r} \frac{dT_{rr}^P}{d\theta} - 2T_{rr} \frac{\partial v_r}{\partial r} - 2 \frac{T_{r\theta}}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{T_{rr}^P}{Wi} + \frac{\kappa}{(1-\beta)} f_{rr} = 2 \frac{(1-\beta)}{Wi} \frac{\partial v_r}{\partial r}, \\ \frac{v_\theta}{r} \frac{dT_{r\theta}^P}{d\theta} + T_{rr}^P \left(\frac{v_\theta}{r} - \frac{\partial v_\theta}{\partial r} \right) - \frac{T_{\theta\theta}^P}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{T_{r\theta}^P}{Wi} + \frac{\kappa}{(1-\beta)} f_{r\theta} = \frac{(1-\beta)}{Wi} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta}{r} \right), \\ \frac{v_\theta}{r} \frac{dT_{\theta\theta}^P}{d\theta} + 2T_{r\theta}^P \left(\frac{v_\theta}{r} - \frac{\partial v_\theta}{\partial r} \right) - 2T_{\theta\theta}^P \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right) + \frac{T_{\theta\theta}^P}{Wi} + \frac{\kappa}{(1-\beta)} f_{\theta\theta} = \\ = 2 \frac{1-\beta}{Wi} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right). \end{array} \right. \quad (13)$$

Note que,

$$r = \left(\frac{\psi}{C_0 f_0(\theta)} \right)^{\frac{1}{n+1}} \quad (14)$$



Integração de todo o conjunto de equações

A metodologia usada para discretizar as equações (1)–(9), é o método de diferenças finitas para malhas deslocadas (*staggered grid*). Nesta, utiliza-se uma decomposição do campo de velocidade v , afim de desacoplar velocidade e pressão, baseado na decomposição de Helmholtz-Hodge

$$v = \tilde{v} + \nabla\phi, \quad (15)$$

resultando em uma passo adicional ao método numérico que é a solução de uma equação de Poisson para a correção da velocidade. Para mais informações sobre a metodologia numérica usada neste trabalho, veja o seguinte artigo de Evans et al. [2].



Algoritmo numérico

De maneira resumida, apresentamos abaixo a sequência dos passos:

1 Cálculo de \tilde{v}^{m+1} através da equação do movimento;

2 Resolve a equação de Poisson para ϕ^{m+1}

$$\nabla^2 \phi^{m+1} = \nabla \cdot \tilde{v}^{m+1}; \quad (16)$$

3 Atualiza o campo de velocidade v^{m+1}

$$v^{m+1} = \tilde{v}^{m+1} - \nabla \phi^{m+1}; \quad (17)$$

4 Estimativa da pressão, através da equação

$$p^{m+1} = p^m + \frac{Re}{\Delta t} \phi^{m+1}; \quad (18)$$

5 Cálculo de $(T^P)^{m+1}$ através das formulações CSF ou NSF.



Ilustração das camadas limites e linhas de corrente

A Figura abaixo ilustra a passagem de algumas linhas de corrente ao redor da singularidade dos problemas *stick-slip* e contração 4:1, respectivamente.

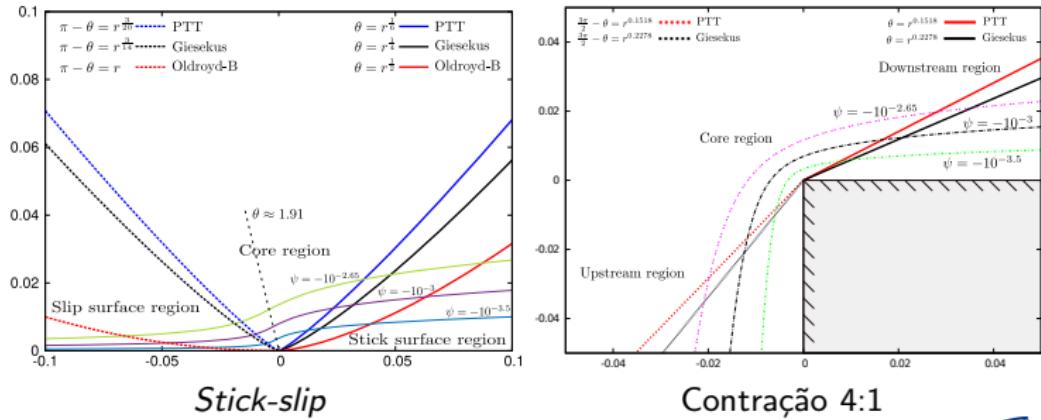


Figura 3: Linhas de corrente.

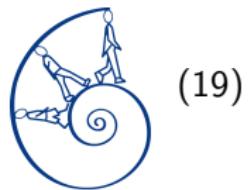


Parâmetros usados nas simulações

Os parâmetros usados nas simulações foram:

$$\text{Stick - slip : } \begin{cases} Wi = 1; \\ Re = 0.01; \\ \kappa = 0.1; \\ \text{Malhas}(\Delta x_{min}) : M_1(5 \times 10^{-4}), M_2(10^{-4}) \text{ e } M_3(5 \times 10^{-5}); \\ \beta = 1/2 \end{cases}$$

$$\text{Contração 4:1 : } \begin{cases} Wi = 1, 10, 100, 1000, 10000; \\ Re = 0.01; \\ \kappa = 0.25; \\ \text{Malha}(\Delta x_{min}) : M_1(10^{-4}); \\ \beta = 1/2; \end{cases}$$



(19)

Resultados com o código *Simplified* e *stick-slip*

Comportamento das tensões T_{rr}^P , $T_{r\theta}^P$ e $T_{\theta\theta}^P$ ao longo da linha de corrente $\psi = 10^{-6}$ para o problema *stick-slip*

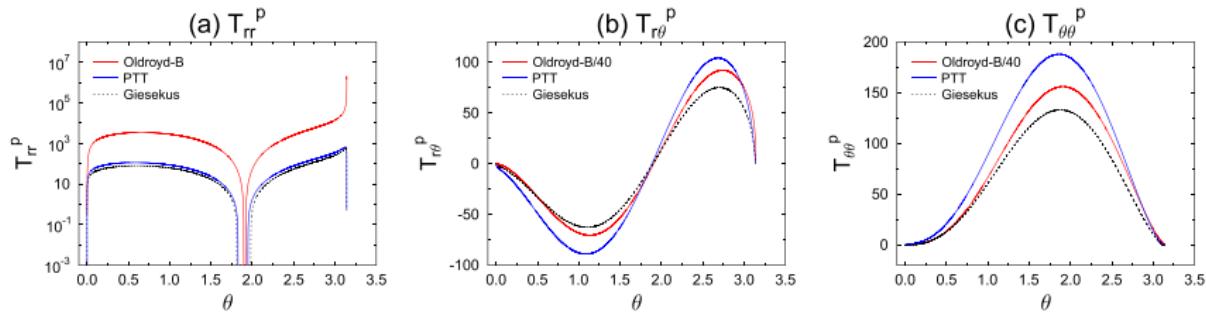


Figura 4: Tensões ao longo da linha de corrente $\psi = 10^{-6}$.



Resultados com o código *Simplified* e *stick-slip*

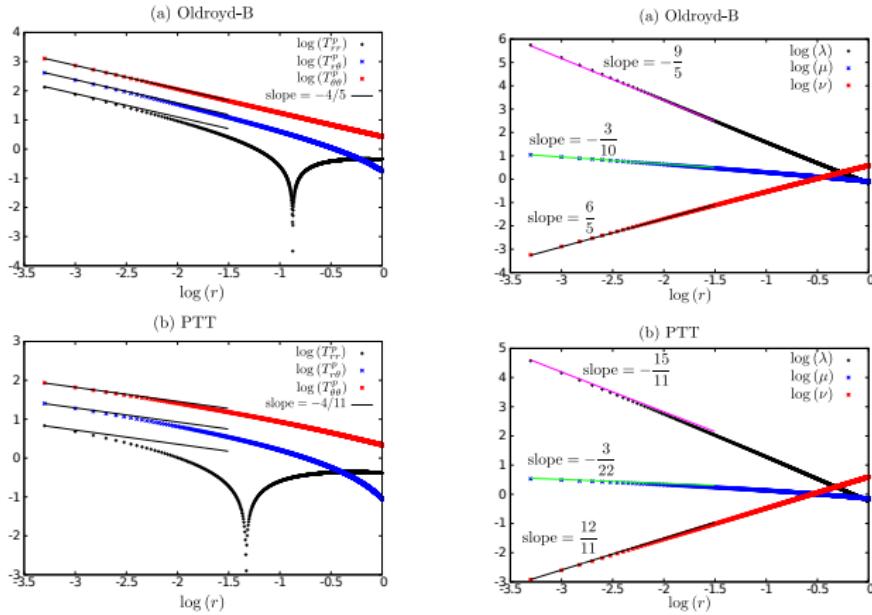


Figura 5: Verificação numérica das inclinações usando a integração ao longo de linhas de corrente.



Resultados com o código *Simplified* e *stick-slip*

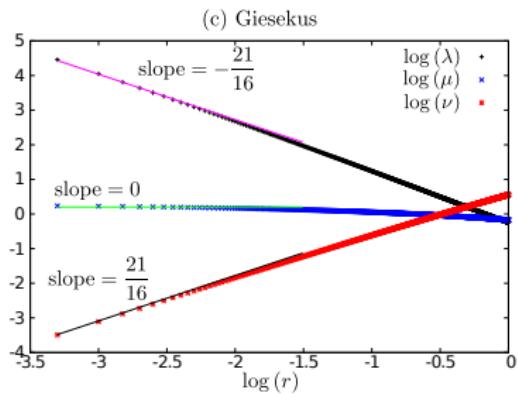
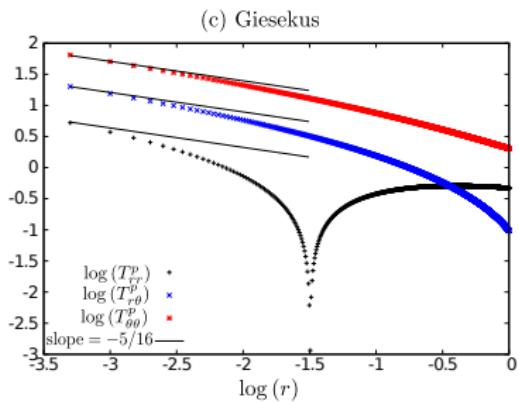


Figura 6: Verificação numérica das inclinações usando a integração ao longo de linhas de corrente.



Resultados com o código *Full* e *stick-slip*

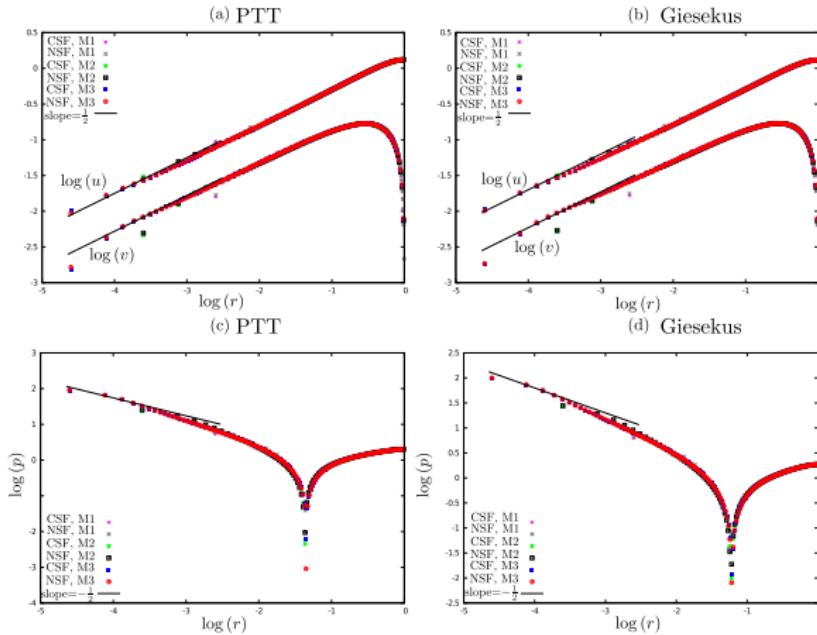


Figura 7: Verificação numérica das inclinações usando a integração de todo o conjunto de equações. PTT: (a) e (c); Giesekus: (b) e (d).

Resultados com o código *Full* e *stick-slip*

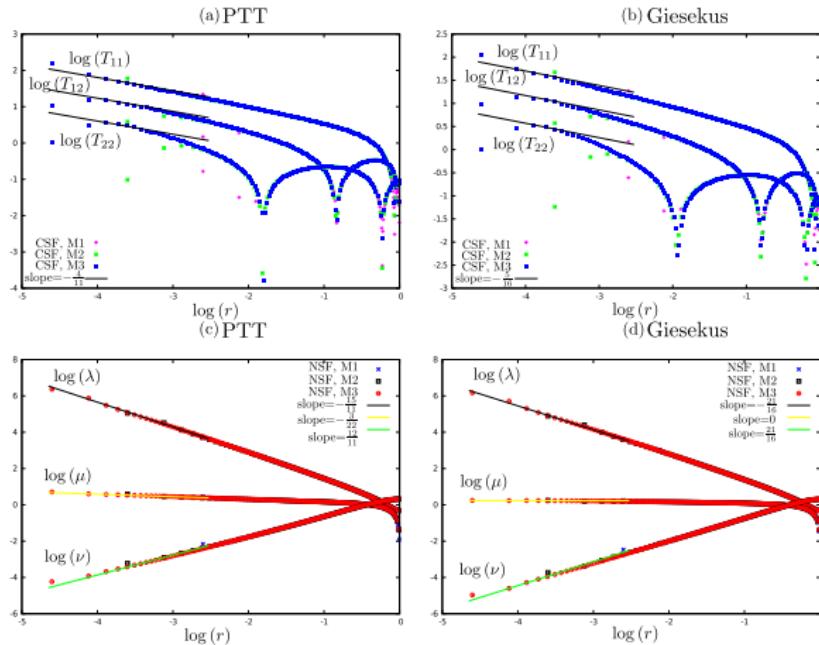


Figura 8: Verificação numérica das inclinações usando a integração de todo o conjunto de equações. PTT: (a) e (c); Giesekus: (b) e (d).

Resultados com o código *Full* e contração 4:1

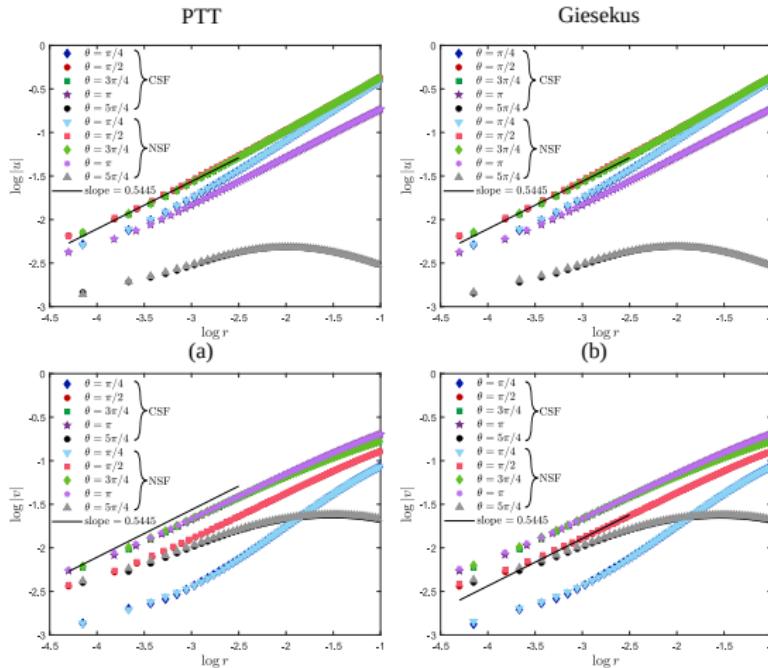


Figura 9: Verificação assintótica das componentes da velocidade u e v para o problema da contração 4:1.

Resultados com o código *Full* e contração 4:1

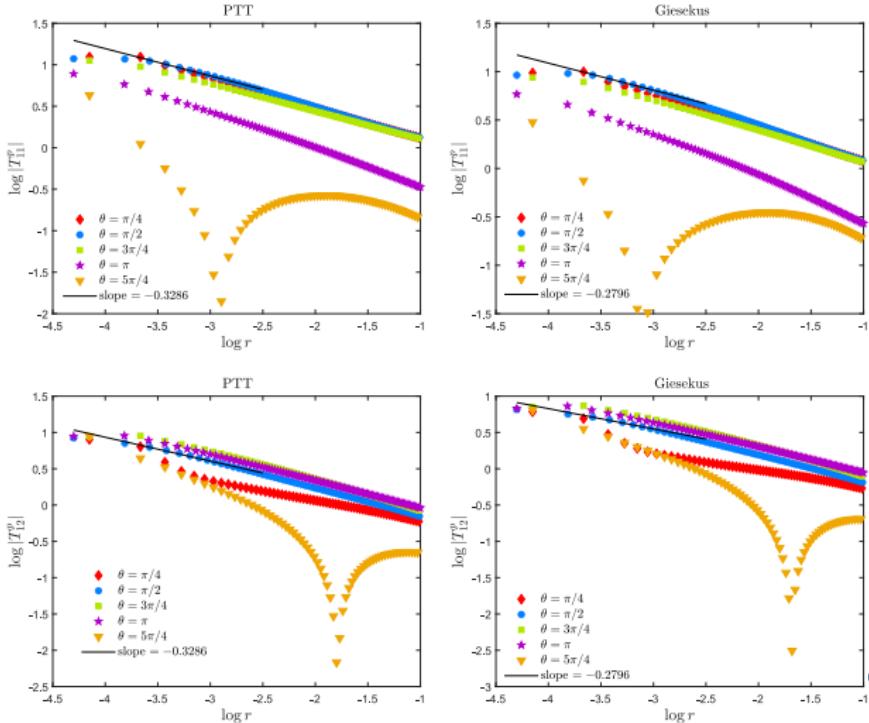


Figura 10: Numerical behaviour of the stress components along different radial distances $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi$ and $\frac{5\pi}{4}$ with $Wi = 1$.

Resultados com o código *Full* e **contração 4:1**

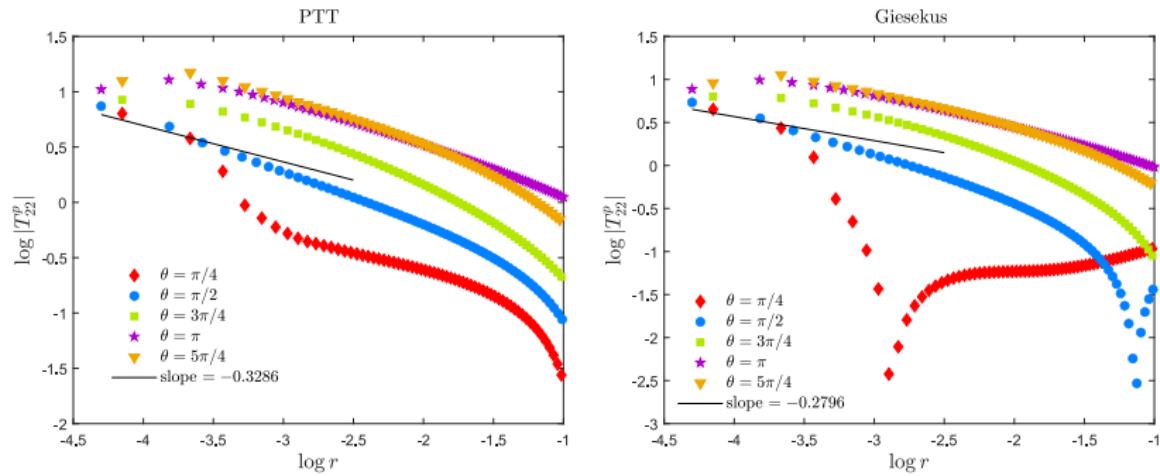


Figura 11: Numerical behaviour of the stress components along different radial distances $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi$ and $\frac{5\pi}{4}$ with $Wi = 1$.



Resultados com o código *Full* e contração 4:1

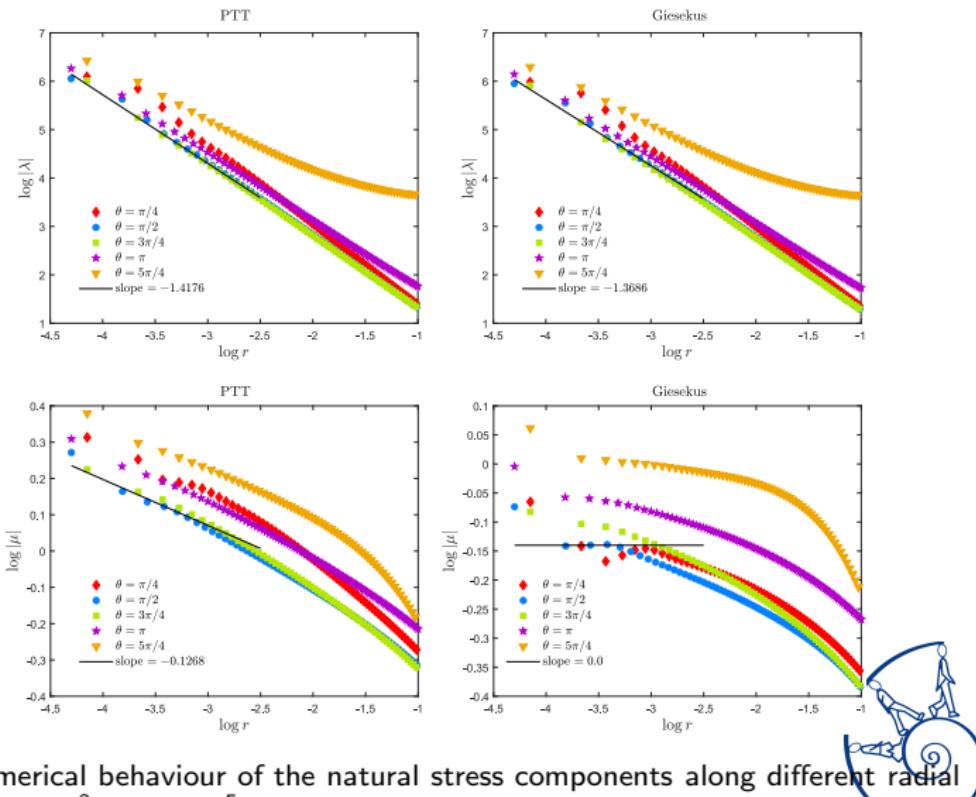


Figura 12: Numerical behaviour of the natural stress components along different radial distances $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi$ and $\frac{5\pi}{4}$ with $Wi = 1$.

Resultados com o código *Full* e contração 4:1

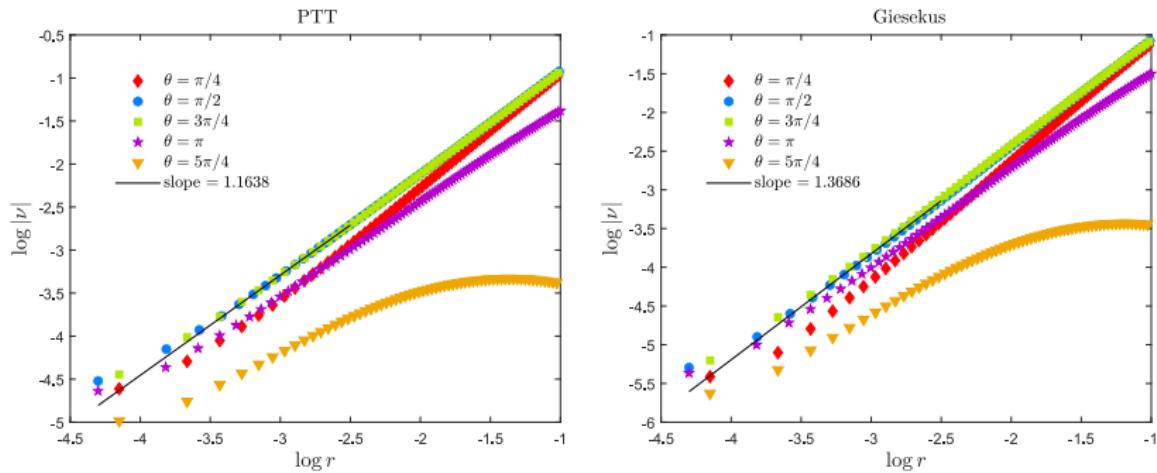


Figura 13: Numerical behaviour of the natural stress components along different radial distances $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{4}, \pi$ and $\frac{5\pi}{4}$ with $Wi = 1$.



Resultados com o código *Full* e contração 4:1

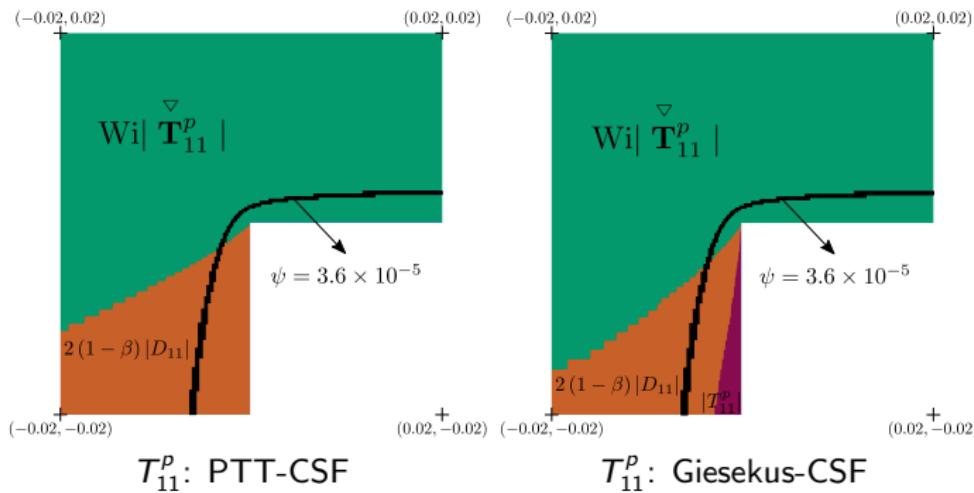


Figura 14: Dominant terms using the CSF with $\text{Wi} = 1$.



Resultados com o código *Full* e contração 4:1

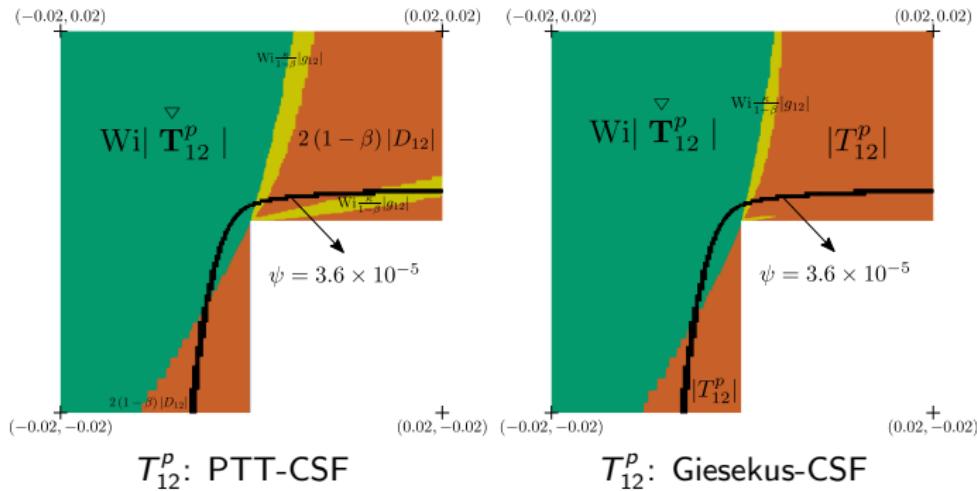


Figura 15: Dominant terms using the CSF with $Wi = 1$.



Resultados com o código *Full* e contração 4:1

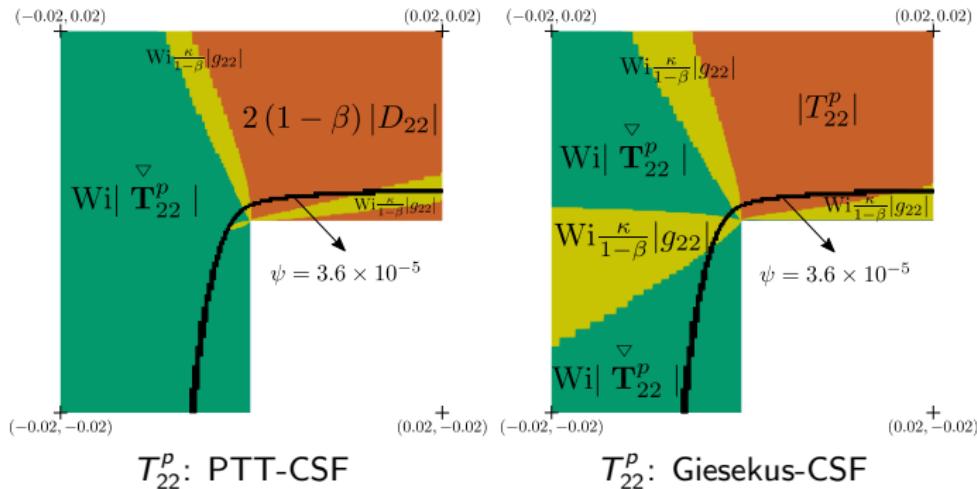


Figura 16: Dominant terms using the CSF with $\text{Wi} = 1$.



Resultados com o código *Full* e contração 4:1

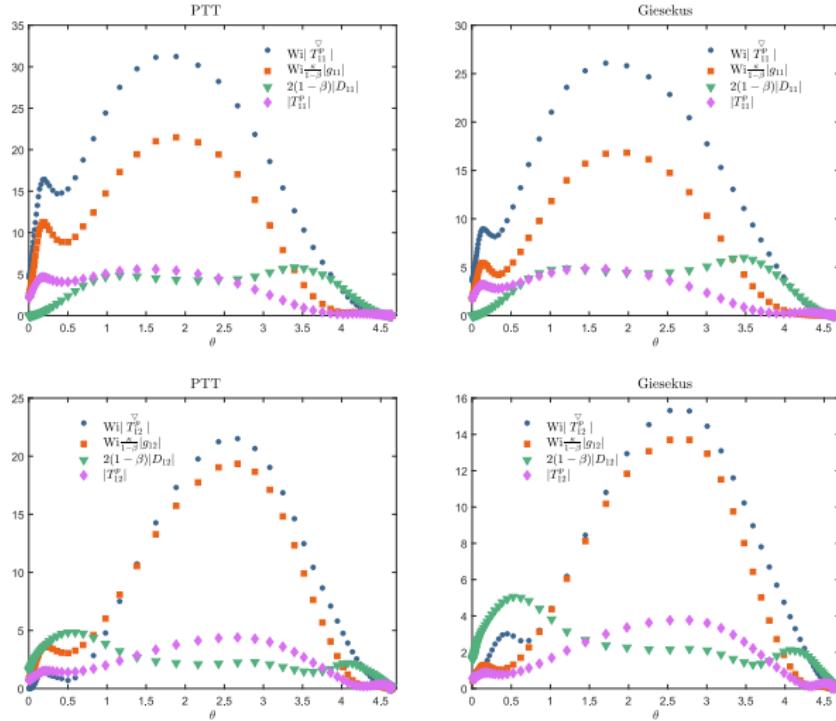


Figura 17: Profile of the dominant terms in the constitutive equations (CSF) along the streamline 3.6×10^{-5} with $Wi = 1$.

Resultados com o código *Full* e **contração 4:1**

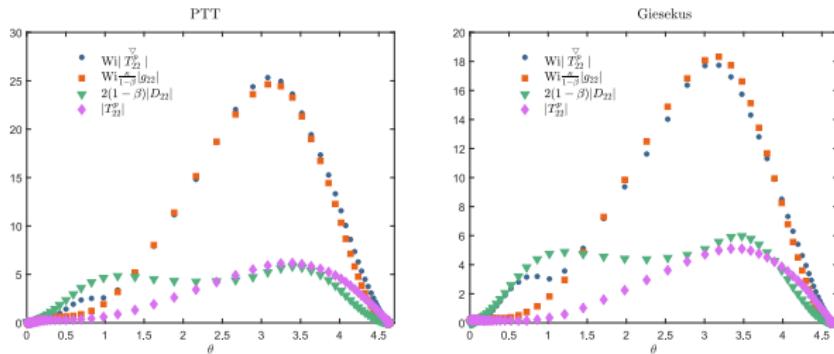


Figura 18: Profile of the dominant terms in the constitutive equations (CSF) along the streamline 3.6×10^{-5} with $Wi = 1$.



Resultados com o código *Full* e contração 4:1

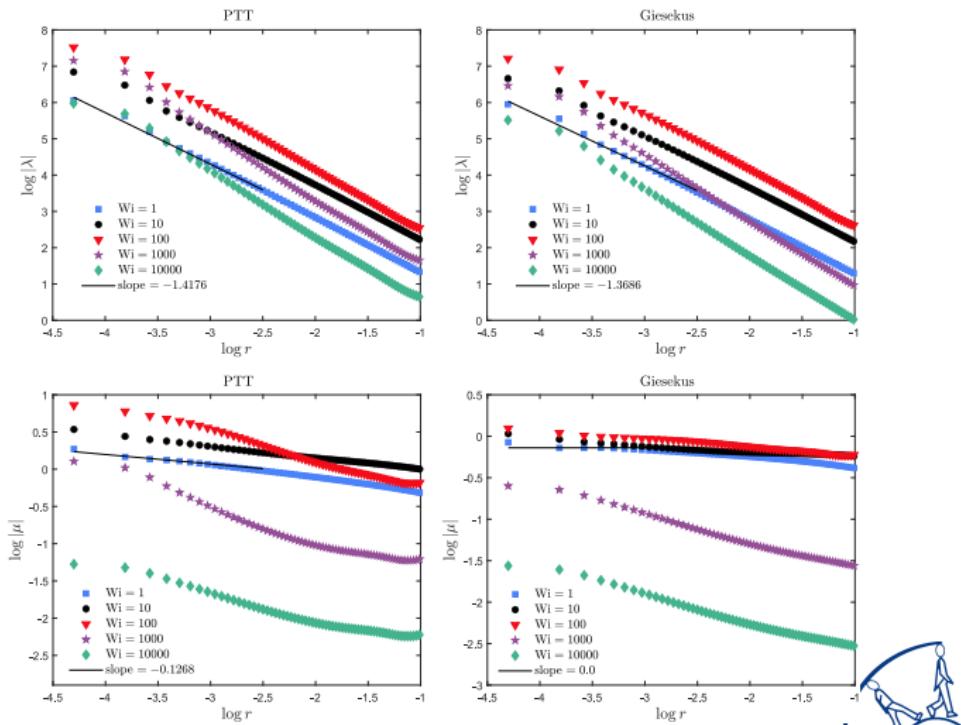


Figura 19: Asymptotic behaviour of the natural stress variables for different values of $Wi = 1, 10, 100, 1000, 10000$.

Resultados com o código *Full* e contração 4:1

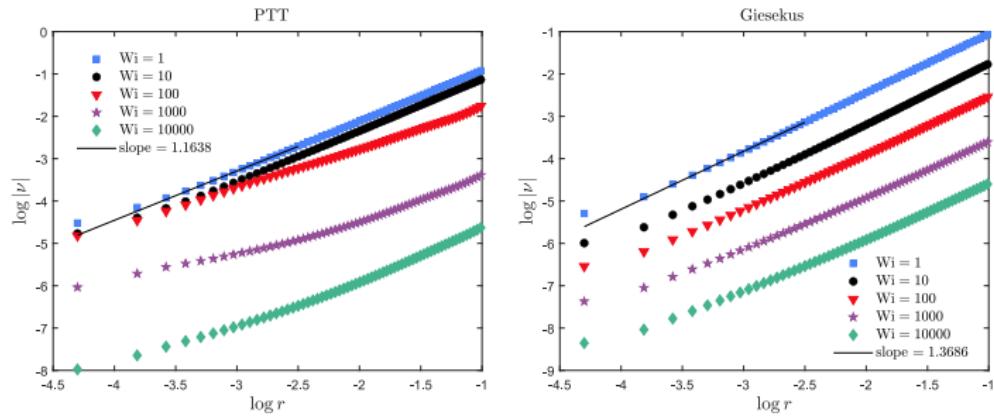


Figura 20: Asymptotic behaviour of the natural stress variables for different values of $Wi = 1, 10, 100, 1000, 10000$.



Considerações finais

Os resultados numéricos apresentados neste trabalho demonstraram boa concordância com os resultados assintóticos. Especialmente para as variáveis naturais e a pressão com o uso da formulação NSF. Em adição, esta verificação estabelece a conexão entre os resultados numéricos e assintóticos, viabilizando a combinação de metodologias/formulações assintóticas e numéricas. Assim, os próximos passos desta pesquisa são:

- I) Inserir o conhecimento assintótico ao código numérico
- II) Uso das equações de camada limite no código numérico
- III) Estudo do Problema de Alto Número de Weissenberg (HWNP) com a formulação NSF.
- IV) Estudo assintótico da contração e *stick-slip* com os modelos FENE-P e FENE-CR.



- [1] M. Renardy, How to integrate the upper convected Maxwell (UCM) stresses near a singularity (and maybe elsewhere, too). *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 52(1) (1994) 91-95.
- [2] J.D. Evans, H. L. Fran  a, C. M. Oishi, Application of the natural stress formulation for solving unsteady viscoelastic contraction flows, *Journal of Computational Physics*. 388 (2019) 462-489.
- [3] W.R. Dean, P.E. Montagnon, On the steady motion of viscous liquid in a corner, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 45 (1949) 389-394.
- [4] H.K. Moffatt, Viscous and resistive eddies near a sharp corner, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 18 (1964) 1-18.
- [5] J. D. Evans. Re-entrant corner behaviour of the PTT fluid with a solvent viscosity. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 165 (2010) 527-537.
- [6] J. D. Evans. Re-entrant corner behaviour of the Giesekus fluid with a solvent viscosity. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 165 (2010) 538-543.



- [7] M. Renardy. The stresses of an upper convected Maxwell fluid in a Newtonian velocity field near a re-entrant corner. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 50 (1993) 127–134.
- [8] S. Richardson. A ‘stick-slip’ problem related to the motion of a free jet at low Reynolds numbers. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 67 (1970) 477-489.

