

Resumo

A presente tese tem como objectivo o estudo teórico, experimental e numérico do escoamento de fluidos viscoelásticos em condições de regime laminar.

Do ponto de vista teórico analisam-se os escoamentos de Couette e de Poiseuille de um fluido viscoelástico descrito pelo modelo PTT. São deduzidas as soluções analíticas para os perfis transversais das diversas variáveis, em condições de escoamento completamente desenvolvido. Demonstra-se a possibilidade de ocorrência de instabilidades, identificando-se as condições críticas para o escoamento de Poiseuille, que estão relacionadas com a ocorrência de um máximo na curva da tensão de corte em função da taxa de deformação, para o escoamento reométrico de Couette. Este estudo também providencia as equações necessárias para implementação das condições fronteira nas paredes, para utilização no programa de simulação.

Em termos numéricos, implementam-se diversos esquemas de alta resolução clássicos, para a discretização dos termos convectivos das equações constitutivas, num procedimento de cálculo baseado no método dos volumes finitos. A simulação numérica do escoamento de referência de um fluido UCM numa contracção plana 4:1 permite confirmar a elevada estabilidade dos métodos de alta resolução. A simulação do escoamento de referência dos fluidos UCM e Oldroyd-B, em torno de um cilindro confinado entre duas placas planas, demonstra a elevada precisão da metodologia desenvolvida, apresentando-se soluções de referência com precisão equivalente à obtida com métodos de elementos finitos. A principal vantagem do método dos volumes finitos reside numa redução significativa dos recursos computacionais, em particular em termos de memória necessária.

Para valores elevados da elasticidade do escoamento verifica-se que os métodos de alta resolução clássicos apresentam algumas dificuldades de convergência iterativa. Para colmatar esta limitação propõe-se um novo esquema de alta resolução, denominado CUBISTA, que possui propriedades de convergência iterativa melhoradas, aliadas a uma elevada precisão numérica. O esquema CUBISTA é aplicado ao estudo numérico do escoamento dos fluidos Oldroyd-B e PTT numa contracção plana 4:1, obtendo-se soluções com precisão claramente superior às existentes na literatura, numa gama mais alargada de valores do número de Débora. Em particular, para a versão exponencial do modelo PTT são obtidas soluções numéricas de elevada precisão para valores do número de Débora superiores a 10000.

Apresentam-se resultados experimentais de visualização do escoamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos numa contracção quadrada tridimensional 4:1, e numa expansão quadrada tridimensional 1:4, usando uma técnica de iluminação com luz laser e fotografia de elevado tempo de exposição.

Demonstra-se experimentalmente, e confirma-se por simulação numérica, que a elasticidade e a inércia conduzem a efeitos opostos, quer para o escoamento na contracção, quer na expansão. Para valores elevados da elasticidade verifica-se uma inversão no sentido do escoamento, no interior da recirculação junto ao plano de contracção. Esta observação experimental é confirmada numericamente, usando um modelo PTT multimodo, reproduzindo-se com precisão as visualizações do padrão de escoamento.

Palavras-chave: Fluidos viscoelásticos; Simulação numérica; Soluções analíticas; Visualização do escoamento; Reologia Computacional; Método dos Volumes Finitos; Métodos de alta resolução; CUBISTA; Fluidos de Boger; Contracção plana 4:1; Equações constitutivas diferenciais; Modelos UCM, Oldroyd-B e PTT.

Abstract

Laminar flow of viscoelastic fluids: numerical, theoretical and experimental analysis.

The main objective of the present thesis is to investigate laminar flows of viscoelastic fluids, using theoretical, experimental and numerical approaches.

The Couette and Poiseuille flows of PTT fluids are studied theoretically, and analytical solutions are derived for the transverse profiles of the relevant variables, under fully developed flow conditions. The possibility of occurrence of flow instabilities is demonstrated, and critical conditions are identified. It is demonstrated that the Poiseuille flow instability is related to the existence of a maximum in the shear stress *vs.* shear rate curve, for the Couette flow.

In terms of computational techniques, several classical high resolution schemes for the discretization of the convective terms of the constitutive equations are implemented in a finite volume method. The numerical simulation of the benchmark 4:1 planar contraction flow of UCM fluids confirms the boundedness property of these high resolution schemes, leading to enhanced stability of the solution algorithm. The second benchmark problem considered, the flow of UCM and Oldroyd-B fluids past a cylinder in a channel, demonstrates the high accuracy of the methodology developed, with similar degree of accuracy as that yielded by state of the art numerical *h-p* finite-element methods. The main advantage of the present finite volume method resides in a significant reduction of computational resources, mainly in terms of required memory.

For high elasticity values it is found that classical high resolution schemes can lead to iterative convergence difficulties. To avoid this limitation, a new high resolution scheme is proposed and it is demonstrated that this new scheme (CUBISTA) possesses enhanced convergence properties and high numerical accuracy. CUBISTA is then used for the numerical simulation of the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. Existing numerical solutions for this benchmark problem are highly inaccurate and the present work provides accurate solutions for a wider range of elasticity conditions, particularly in the case of the exponential version of the PTT model, for which Deborah numbers in excess of 10000 are achieved.

Flow visualizations are presented for Newtonian and viscoelastic fluids in two configurations: a 3D 4:1 square/square contraction and a 3D 1:4 square/square expansion. Streakline photography is used to visualize the flow patterns on the centreplane of the square ducts. The flow visualizations and the numerical results show that elasticity and inertia have opposite effects on the flow pattern, both for contraction and expansion flows. A new experimental finding is that elasticity leads to an inversion of the flow patterns within the recirculation zones for the 3D contraction flow. This is confirmed by numerical simulations with a multimode version of the PTT model, which is able to reproduce reasonably well the main characteristics of the observed viscoelastic flow patterns.

Keywords: Viscoelastic fluids; Numerical simulation; Analytical solutions; Flow visualization; Computational Rheology; Finite Volume Method; CUBISTA; Boger fluids; 4:1 planar contraction; Differential constitutive equations; UCM, Oldroyd-B and PTT models.