

Método de elementos de frontera multi-dominio para problemas no newtonianos y no isotérmicos

Whady F. Flórez Farid Chejne Henry Power

Resumen

En este artículo se presenta un método de elementos de frontera BEM basado en la técnica de subdominios para la solución de problemas de flujo de fluidos no newtonianos incluyendo los efectos térmicos y de disipación viscosa. Las integrales de volumen que surgen a partir de los términos no lineales se convierten en integrales de frontera equivalentes mediante el método de reciprocidad dual multi-dominio MD-DRM en cada subregión. Para la aproximación de las variables se utilizan splines de placa plana aumentados como funciones de interpolación. La formulación numérica iterativa se logra considerando el material como dividido en pequeños elementos y en cada uno de ellos se aplica una fórmula de representación integral para las velocidades y temperaturas, la cual se discretiza mediante elementos de frontera lineales. El sistema final de ecuaciones algebraicas no lineales se soluciona mediante un método de Newton modificado. Los ejemplos numéricos presentados incluyen problemas no newtonianos con disipación viscosa y viscosidad dependiente de la temperatura.

Palabras y frases claves: Elementos de frontera, fluidos no newtonianos, fluidos no isotérmicos

1. Introducción

El objetivo principal de este trabajo es presentar el uso del método de reciprocidad dual multi-dominio (MD-DRM) para la solución numérica de problemas de flujo no newtoniano con efectos de disipación viscosa y con una viscosidad dependiente de la rapidez de deformación y de la temperatura. Para los líquidos con alta viscosidad y baja conductividad térmica tales como la mayoría de los polímeros, la disipación viscosa no puede despreciarse debido a que esta tiene una fuerte influencia sobre el campo de temperatura el cual a su vez afecta las propiedades termofísicas del fluido. Este fenómeno es especialmente relevante en la industria de polímeros. Por ejemplo en los procesos de extrusión e inyección el fluido es forzado a través de canales donde se observa una alta generación de calor cerca de las paredes.

El comportamiento de los fluidos no newtonianos es altamente dependiente de las variaciones de viscosidad en el dominio, las cuales son causadas por la rapidez de deformación y la temperatura. La mayoría de los

polímeros tienen una viscosidad que es una función decreciente de la rapidez de deformación, característica que se conoce como adelgazamiento por corte (shear thinning)[1]. La viscosidad de un fluido no newtoniano inelástico puede calcularse en términos de la rapidez de deformación mediante varios modelos matemáticos tales como el modelo de ley de potencias o el modelo de Carreau. De otro lado, la viscosidad de los polímeros fundidos cambia drásticamente con la temperatura. Por ejemplo un cambio de 1 % en la temperatura puede causar un cambio de al menos 25 % en la viscosidad. Este efecto puede calcularse ya sea mediante la ley de Andrade [1], o la ecuación WLF [1, 17]. Debido a que la viscosidad de los fluidos no newtonianos depende tanto de la rapidez de deformación como de la temperatura, se concluye que los modelos matemáticos que gobiernan el flujo del fluido son no-lineales aún en el caso cuando se desprecian los efectos de inercia i.e. número de Reynolds bajo. Este tipo de procesos de flujo requiere técnicas de solución sofisticadas.

La aplicación del método de elementos de frontera BEM a problemas no newtonianos y no lineales requiere encontrar una solución fundamental del sistema de ecuaciones que gobiernan el fenómeno. Sin embargo, debido a que no es posible conocer tal solución fundamental para un modelo general, se hace necesario agrupar todos los términos no lineales en un término de pseudo-fuerza de cuerpo lo cual conlleva a ciertas integrales de dominio o volumen que pueden evaluarse usando integración por celdas (Cell-BEM) [3]. Aunque este método es efectivo y general, hace que el BEM pierda su carácter de frontera únicamente y es un esquema que consume mucho más tiempo de cómputo que otras técnicas de dominio como las diferencias finitas FDM y los elementos finitos FEM. El costo computacional de la integración por celdas depende principalmente del hecho que la solución en cada punto interno y en cada punto de frontera requiere la evaluación de todas las integrales de frontera lo cual origina a su vez un sistema matricial denso.

Se han desarrollado unos cuantos métodos para convertir las integrales de dominio en integrales de frontera equivalentes. Entre estos, el método de Reciprocidad Dual DRM [18] y el método de las soluciones particulares PIT [4] son los más populares. Ambas de estas técnicas se han vuelto muy atractivas en años recientes debido a los avances en interpolación multidimensional con funciones radiales RBF utilizadas en estas técnicas. Tanto el DRM como PIT aproximan los términos no lineales y no homogéneos de una ecuación diferencial parcial como una serie de funciones vectoriales de interpolación, las cuales se definen sobre un conjunto de nodos internos y nodos de superficie. Estas funciones de interpolación conducen a una

solución particular del problema la cual puede usarse conjuntamente con las identidades de Green para transformar las integrales de dominio en integrales de frontera. Como en el método de la integración por celdas, en los dos métodos únicamente de frontera mencionados anteriormente, la evaluación de las funciones en cada nodo necesita el valor de todas las integrales de frontera lo cual produce nuevamente un sistema matricial muy denso.

Recientemente, Popov y Power [20] encontraron que la aproximación DRM del potencial interno de un problema no lineal de convección difusión, puede ser mejorado sustancialmente mediante el esquema de descomposición del dominio. La idea de Popov y Power de usar partición del dominio para mejorar la precisión del DRM, fue inspirada por el trabajo de Kansa y Carlson [12] sobre aproximación de datos con funciones radiales. Kansa y Carlson observaron que la mejor aproximación se obtiene cuando el dominio original se parte en subdominios conectados. Popov y Power [20] notaron que la aproximación DRM en los problemas no lineales puede también mejorarse cuando el dominio original se divide en subdominios más pequeños. En cada subregión la formulación BEM del problema se aplica por separado. Las integrales de dominio correspondientes, que resultan de la aplicación de la formulación BEM, se transforman en integrales de frontera a lo largo del contorno de las subregiones mediante el método DRM. El nivel de precisión deseado de este esquema se logra refinando el tamaño de los subdominios. Cuando el número de subdominios es grande esta técnica se denomina método de reciprocidad dual multidominio MD-DRM, y la forma discreta de las ecuaciones integrales del problema está dada por un sistema matricial por bandas.

El método MD-DRM ha sido aplicado recientemente con éxito por Flórez y Power [10] a la solución de problemas no newtonianos isotérmicos y a las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible con número de Reynolds moderadamente altos ($Re = 1000$) [11]. En el presente trabajo se mostrará como el método MD-DRM puede extenderse a problemas no isotérmicos más generales que incluyen términos de disipación viscosa y con la solución acoplada del balance de masa, las ecuaciones de momentum y la ecuación de conservación de energía.

Solo unos cuantos trabajos aparecen en la literatura acerca de la solución BEM de problemas de flujo no newtoniano. Phan-Thien [19] propuso una solución BEM de las ecuaciones de momentum no homogéneas, basado en el método de soluciones particulares y funciones de interpolación radiales para los términos no lineales. Davies [5] usó la técnica de pseudo-fuerza de cuerpo e integración por celdas para modelar polímeros y optimizar

equipos de mezclado. Davies también señaló que la aplicación del DRM en el dominio completo no produce resultados precisos especialmente cuando hay altos gradientes de velocidad.

La integración por celdas en el BEM combinada con técnicas de subdominios, tales como el método del elemento de Green [26], han sido aplicadas conjuntamente con una formulación velocidad-vorticidad para modelar flujos no newtonianos en cavidades cerradas (Skerget y Samec [25]). Así como en otros trabajos previos realizados por Skerget [24] para las ecuaciones de Navier-Stokes, la formulación integral conserva las integrales de dominio sin ninguna simplificación adicional. Además, Skerget y colaboradores nunca consideraron el caso de condiciones de frontera con presión conocida el cual ocurre frecuentemente en procesos de dinámica de fluidos y que puede resolverse fácilmente mediante el uso de una formulación integral directa en términos de velocidades y tracciones tal como la formulación que se presenta en esta investigación.

En las secciones siguientes, se introduce la solución MD-DRM de las ecuaciones acopladas de continuidad, momentum y energía para fluidos no newtonianos con efectos de disipación viscosa de calor. Además de la eficiencia y precisión del método numérico propuesto, el MD-DRM tiene la ventaja de una interpolación robusta con las funciones radiales provenientes del DRM. Estas funciones, debido a su carácter de suavidad o minimización del ruido, garantizan una alta precisión al aproximar las derivadas de las variables [15]. Esta propiedad de la interpolación del DRM permite una evaluación muy precisa de las derivadas de la velocidad y la temperatura en forma directa y a partir de la solución del sistema matricial, sin ninguna complicación o esfuerzo adicional.

Los resultados que se presentan en esta investigación sugieren que la formulación multidominio del método de elementos de frontera para problema no newtonianos y no isotérmicos, produce resultados muy precisos aun para aquellos casos con elevado gradiente de viscosidad que son difíciles de resolver mediante otros métodos numéricos convencionales.

2. Modelo matemático para fluidos no newtonianos y no isotérmicos

El sistema de ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía para estado estacionario, de un flujo no isotérmico de un fluido incompresible, incluyendo disipación viscosa, está dado en notación tensorial por

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad x \in \Omega \quad (1)$$

$$-\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\eta \varepsilon_{ij}) = \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad x \in \Omega \quad (2)$$

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \sigma_{ij} \varepsilon_{ji} = \rho C_p u_j \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad x \in \Omega \quad (3)$$

con condiciones de frontera

$$u_i = u_{i0}, \quad x \in \Gamma_u \quad (4)$$

$$t_i = \sigma_{ij} n_j = t_{i0}, \quad x \in \Gamma_t \quad (5)$$

$$T = T_0, \quad x \in \Gamma_T \quad (6)$$

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial n} = q_0, \quad x \in \Gamma_q \quad (7)$$

donde $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ es el tensor de rapidez de deformación; σ_{ij} es el tensor de esfuerzos total; u_i es el vector velocidad; t_i es el vector de tracción; n_i es el vector unitario normal a la frontera $\Gamma = \Gamma_u + \Gamma_t = \Gamma_T + \Gamma_q$ del volumen Ω ; T es la temperatura del fluido en cualquier punto; p la presión y q el flujo de calor. Las propiedades termofísicas son: ρ la densidad del fluido, η la viscosidad la cual es función de la temperatura y de la rapidez de deformación generalizada, k es la conductividad térmica, C_p la capacidad calorífica y β es el coeficiente de expansión térmica. El término $\sigma_{ij} \varepsilon_{ji}$ en la ec.(3) es el incremento irreversible de energía por unidad de volumen debido a la disipación viscosa o en otras palabras, la degradación de la energía mecánica en energía térmica.

Para expresar este problema en términos de una perturbación a un flujo newtoniano base, el tensor de esfuerzo total se descompone en una parte newtoniana y un componente no lineal como sigue,

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + \eta_N \varepsilon_{ij} + \tau_{ij}^{(e)} \quad (8)$$

donde η_N es una viscosidad constante arbitraria que puede ser la viscosidad correspondiente a una rapidez de deformación muy baja; y $\tau_{ij}^{(e)}$ representa los efectos no newtonianos en el tensor de deformación. Para fluidos newtonianos generalizados los términos no lineales son:

$$\tau_{ij}^{(e)}(\dot{\gamma}) = (\eta - \eta_N) \varepsilon_{ij} \quad (9)$$

donde la viscosidad real η es función de la magnitud del tensor de deformación $\dot{\gamma}$ dado por

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ji}} \quad (10)$$

y de la temperatura. Con la formulación presentada en la ec.(8) la ecuación de momentum ec.(2) puede escribirse como

$$-\frac{\partial p}{\partial x_i} + \eta_N \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}^{(e)}}{\partial x_j} = \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad x \in \Omega \quad (11)$$

La viscosidad de la mayoría de los fluidos no newtonianos como los polímeros usualmente decrece con la rapidez de deformación generalizada $\dot{\gamma}$, fenómeno conocido como adelgazamiento por corte. Para un fluido newtoniano la viscosidad toma un valor constante, μ i.e.

$$\eta(\dot{\gamma}) = \mu = \text{constante} \quad (12)$$

De otro lado, las expresión más comúnmente usada para la viscosidad de un fluido no newtoniano es la ley de potencias o el modelo de Ostwald-de-Waele [1],

$$\eta(\dot{\gamma}) = K\dot{\gamma}^{n-1} \quad (13)$$

donde K es el índice de consistencia y $n \in [0, 1]$ es el índice de ley de potencias.

Existen otros modelos semi-empíricos para describir el comportamiento de los fluidos no newtonianos. A continuación mencionamos dos de ellos. El modelo de Carreau [1]

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_\infty + \frac{\eta_0 - \eta_\infty}{[1 + (\lambda\dot{\gamma})^2]^{(1-n)/2}} \quad (14)$$

con cuatro parámetros que pueden ajustarse a datos experimentales: el tiempo característico λ , una viscosidad constante η_∞ correspondiente a una alta rapidez de deformación, la viscosidad η_0 correspondiente a una rapidez de deformación muy baja y el índice n de la ley de potencias.

El modelo de tangente hiperbólica [1]

$$\eta(\dot{\gamma}) = A - B \tanh\left(\frac{\dot{\gamma}}{k}\right)^n \quad (15)$$

donde los parámetros A, B, k y n se obtienen mediante ajuste de datos experimentales.

Los modelos anteriores dan cuenta del efecto de la rapidez de deformación sobre la viscosidad. Sin embargo la viscosidad real también depende de la temperatura a través de la ley de Andrade [17] de la forma

$$\eta = \eta(\dot{\gamma}) e^{\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \quad (16)$$

donde E es la energía de activación del fluido, R es la constante universal del gas y $\eta(\dot{\gamma})$ es la viscosidad evaluada a la temperatura de referencia T_0 .

2.1. Formulación integral multi-dominio

En el método BEM multi-dominio, el dominio original se divide en subregiones más pequeñas o elementos de dominio, cada uno de ellos encerrado por un cierto número de elementos de frontera. La solución de las ecuaciones diferenciales parciales (1)-(3) en cada subdominio está dada en términos de la formula de representación integral correspondiente. Además, los elementos de dominio adyacentes tienen que acoplarse de acuerdo con unas condiciones de compatibilidad o continuidad para todas las variables como velocidad, tracciones, temperaturas y flujos de calor.

A partir de la representación integral de la ec.(2) deducida en [13], se encuentra que la i -ésima componente del campo de velocidad en un punto x de la n -ésima subregión Ω_n limitada por el contorno Γ_n es

$$c_{ik} u_i(x) = \int_{\Gamma_n} K_{kj}(x, y) u_j(y) d\Gamma_y - \int_{\Gamma_n} U_i^k(x, y) t_i^N(y) d\Gamma_y - \int_{\Omega_n} U_i^k(x, y) g_i(y) d\Omega_y \quad (17)$$

para $n = 1, 2, \dots, M$ donde M es el número total de subregiones.

En las ecuaciones anteriores t_i^N es la componente i de la tracción Newtoniana base asociada con el campo de flujo $(\vec{u}, p)$, i.e. $t_i^N(y) = (-p\delta_{ij} + \eta_N \varepsilon_{ij}) n_j(y)$. El núcleo $U_i^k(x, y)$ es la componente i del campo de velocidad de la solución fundamental para las ecuaciones de Stokes (stokestlet), localizado en el punto y y orientado en la dirección k ,

$$U_i^k(x, y) = -\frac{1}{4\pi\eta_N} \left[\ln \left(\frac{1}{r} \right) \delta_{ik} + \frac{(x_i - y_i)(x_k - y_k)}{r^2} \right] \quad (18)$$

donde r es la distancia desde cualquier punto y a otro punto de campo x , i.e. $r = |x - y|$, y

$$\begin{aligned} K_{kj}(x, y) &= \sigma'_{ij}(u^k(x, y), q^k(x, y)) n_j(y) \\ &= \left(q^k(x, y) \delta_{ij} + \eta_N \left(\frac{\partial U_i^k(x, y)}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j^k(x, y)}{\partial x_i} \right) \right) n_j(y) \\ &= -\frac{1}{\pi r} \frac{(x_i - y_i)(x_k - y_k)(x_j - y_j)}{r^3} n_j \end{aligned} \quad (19)$$

es la tracción correspondiente al campo de flujo. Los coeficientes c_{ik} toman valores entre δ_{ik} y 0, siendo igual a $c_{ik} = 1/2\delta_{ik}$ para fronteras suaves, e igual a $c_{ik} = \delta_{ik}$ para puntos en el interior de Ω_n .

De manera similar, la representación integral para la ecuación de conservación la energía (ec.(3)) puede obtenerse aplicando el segundo teorema de Green para una función escalar [22], y dicha representación es:

$$cT(x) = \int_{\Gamma_n} H(x, y)T(y)d\Gamma_y - \int_{\Gamma_n} G(x, y)q(y)d\Gamma_y - \int_{\Omega_n} G(x, y)h(y)d\Omega_y \quad (20)$$

donde

$$q(x) = k \frac{\partial T}{\partial n} \quad (21)$$

y G, H son la solución fundamental y su derivada normal a lo largo de la trayectoria de integración [22], i.e.

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi k} \log r \quad (22)$$

$$H(x, y) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \log r}{\partial n_y} \quad (23)$$

El sistema final de ecuaciones se completa ensamblando las ecuaciones integrales ec.(17) para cada elemento de dominio, usando el criterio de equilibrio de tracciones y la condición de compatibilidad para las velocidades en las interfaces comunes entre subregiones. i.e $u_i^{(+)} = u_i^{(-)}$ y $\sigma_{ij}^{(+)} n_j + \sigma_{ij}^{(-)} n_j = 0$ [11].

De manera similar, las ecuaciones integrales ec.(20) deben ser ensambladas usando el criterio de continuidad del campo de temperatura y la condición de balance de flujo de calor en las interfaces i.e. $T_i^{(+)} = T_i^{(-)}$ y $\left. \frac{\partial T}{\partial x_j} n_j \right|^{(+)} + \left. \frac{\partial T}{\partial x_j} n_j \right|^{(-)} = 0$.

Las integrales de dominio en las expresiones (17) y (20) dan cuenta de todos los términos no lineales en las ecuaciones diferenciales parciales originales (3) y (11), i.e.

$$g_i = \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{(e)}}{\partial x_j} \quad (24)$$

$$h = \rho C_p u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sigma_{ij} \varepsilon_{ji} \quad (25)$$

Tal como se explicó en nuestros artículos previos [9, 10, 7, 8], los términos no lineales que aparecen dentro de las integrales de dominio en

las ecuaciones (17) y (20) pueden ser aproximados mediante una serie de soluciones particulares y funciones de interpolación especiales. Para expresar la integral de dominio en la ecuación (17) en términos de integrales de frontera equivalentes, se presenta la aproximación de reciprocidad dual DRM.

La idea básica consiste en expandir el término $g_i(x)$ mediante funciones de interpolación en cada subregión i.e.

$$g_i(x) = \sum_{m=1}^{N+A} f^m(x) \alpha_l^m \delta_{il} \quad (26)$$

Los coeficientes α_l^m son incógnitas que deben determinarse mediante colocación en un conjunto de N nodos. En esta investigación se utilizarán $A = 3$ función globales adicionales del conjunto $\{1, x_1, x_2\}$.

Un spline radial aumentado (RBF) consiste de una serie de funciones radiales mas algunas funciones de interpolación globales adicionales [16]. El RBF usado en este trabajo es el spline de placa plana (thin-plate spline):

$$f^m(x) = f(r(x, y^m)) = r^2 \log r \quad m = 1, \dots, N \quad (27)$$

donde $r = |x - y^m|$ es la distancia euclidiana entre el punto de campo x y el punto de colocación y^m . Aunque muchas funciones RBF diferentes son presentadas y discutidas en la literatura [6], el spline de placa plana tiene características optimas que lo convierten en la opción más recomendada [6].

La ecuación (26) se aplica en cada uno de los N nodos para generar $2N$ ecuaciones lineales con $2(N+A)$ incógnitas, y por lo tanto se necesitan $2A$ condiciones adicionales las cuales básicamente garantizan un interpolante óptimo [6]. Estas relaciones adicionales son:

$$\sum_{j=1}^N \alpha_l^j \delta_{il} = \sum_{j=1}^N x_1^j \alpha_l^j \delta_{il} = \sum_{j=1}^N x_2^j \alpha_l^j \delta_{il} \quad (28)$$

donde x^j representa el vector posición del nodo de colocación j -ésimo. En forma similar, en la ecuación de energía ec.(20) el término convectivo y el término de disipación viscosa puede aproximarse como

$$h(x) = \sum_{m=1}^{N+A} f^m(x) \beta^m \quad (29)$$

A continuación se define un campo de flujo auxiliar $(\hat{U}_i^{lm}(x), \hat{p}^{lm}(x))$ [21] el cual es solución de las siguientes ecuaciones:

$$\eta_N \frac{\partial^2 \hat{U}_i^{lm}(x)}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \hat{p}^{lm}(x)}{\partial x_i} = f^m(x) \delta_{il} \quad (30)$$

$$\frac{\partial \hat{U}_i^{lm}(x)}{\partial x_i} = 0$$

y además un campo de temperatura auxiliar que satisface la siguiente ecuación de Poisson,

$$k \frac{\partial^2 \hat{T}^m(x)}{\partial x_j \partial x_j} = f^m(x) \quad (31)$$

En este punto podemos aplicar las identidades de Green a ambos campos auxiliares, el de velocidad y el de temperatura, para obtener unas fórmulas de representación integral solo en términos de integrales de frontera [22], así

$$\begin{aligned} & c_{kj}(x)u_k(x) - \int_{\Gamma} t_{kj}(x,y)u_j(y)d\Gamma_y + \int_{\Gamma} u_i^k(x,y)t_j(y)d\Gamma_y = \\ & \sum_{m=1}^{N+L+A} \alpha_i^m \{ c_{kj}(x)\hat{U}_k^{lm}(x) - \int_{\Gamma} t_{kj}(x,y)\hat{U}_k^{lm}(y)d\Gamma_y + \int_{\Gamma} u_i^k(x,y)\hat{t}_j^m(y)d\Gamma_y \} \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} & c(x)T(x) - \int_{\Gamma} T^*(x,y)q(y)d\Gamma_y + \int_{\Gamma} q^*(x,y)T(y)d\Gamma_y = \\ & \sum_{m=1}^N \beta^m \{ c(x)\hat{T}_m(x) - \int_{\Gamma} u^*(x,y)\hat{q}_m(y)d\Gamma_y + \int_{\Gamma} q^*(x,y)\hat{T}_m(y)d\Gamma_y \} \end{aligned} \quad (33)$$

donde $\hat{q}^m = \partial \hat{T}^m / \partial n$.

Por razones de brevedad no se presentan aquí las soluciones particulares de las ecuaciones (30)-(31) las han sido presentadas en publicaciones anteriores [16].

2.2. Discretización de las ecuaciones integrales

Para la solución numérica del problema, la superficie Γ_n de cada subregión o elemento de dominio puede discretizarse mediante elementos de frontera lineales isoparamétricos. A lo largo de cada elemento las integrales se calculan en términos de los valores nodales de la velocidad y las tracciones y usando funciones lineales de interpolación. De esta forma las ecuaciones (32) y (33) se pueden escribir en forma matricial como:

$$(c\mathbf{u})_i - \mathbf{K}_{ik}\mathbf{u}_k + \mathbf{L}_{ik}\mathbf{t}_k^N = \sum_{m=1}^{N+P} \alpha_j (\mathbf{K}_{ik}\hat{\mathbf{t}}_{kj} - \mathbf{L}_{ik}\hat{\mathbf{u}}_{kj} + (c\hat{\mathbf{u}}_j)) \quad (34)$$

$$(c\mathbf{T})_i - \mathbf{H}_{ik}\mathbf{T}_k + \mathbf{G}_{ik}\mathbf{q}_k = \sum_{m=1}^{N+P} \beta_j (\mathbf{H}_{ik}\hat{\mathbf{T}}_{kj} - \mathbf{G}_{ik}\hat{\mathbf{q}}_{kj} + (c\hat{\mathbf{T}})_j) \quad (35)$$

donde $\mathbf{H}_{ik}$, $\mathbf{G}_{ik}$, $\mathbf{K}_{ik}$ y $\mathbf{L}_{ik}$ son las matrices de influencia estándar que resultan de la integración en los elementos de frontera, el índice i representa los nodos de colocación, k los nodos en los elementos de integración y j los puntos de colocación para el DRM. En el caso presente, estas matrices resultan de la integración sobre los cuatro elementos de frontera que forman cada uno de los subdominios.

Para encontrar el valor de los coeficientes α_l^m y β_j de las ecuaciones (34) y (35), podemos aplicar las ecuaciones (26) y (29) en cada uno de los N nodos de colocación seleccionados. En esta forma se obtiene los dos sistemas de ecuaciones siguientes:

$$\mathbf{F}\alpha = \mathbf{g} \quad (36)$$

$$\mathbf{F}\beta = \mathbf{h} \quad (37)$$

las cuales pueden invertirse para obtener los valores de las incógnitas, es decir,

$$\alpha = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{g} \quad (38)$$

$$\beta = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{h} \quad (39)$$

Michelli [15] demostró que para el caso cuando todos los nodos son distintos, la matriz resultante de cualquier interpolación radial como la explicada anteriormente es siempre regular y tiene inversa.

Cuando las ecuaciones integrales discretas para cada elemento de dominio (34) y (35) se juntan, el sistema final de ecuaciones escrito en notación matricial es:

$$\mathbf{K}\mathbf{u} - \mathbf{L}\mathbf{t} = (\mathbf{K}\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{L}\hat{\mathbf{t}})\alpha \quad (40)$$

$$\mathbf{H}\mathbf{T} - \mathbf{G}\mathbf{q} = (\mathbf{H}\hat{\mathbf{T}} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{q}})\beta \quad (41)$$

Como se explicó en la sección los coeficientes desconocidos α y β se determinan por colocación en los elementos de frontera de cada subdominio. De acuerdo con las aproximaciones explicadas en Sec.1.1, el vector α se expresa en términos de velocidades y temperaturas en los nodos de colocación, y el vector β puede expresarse en términos de las temperaturas nodales únicamente. Por lo tanto, las ecuaciones (40) y (41) son sistemas no lineales acoplados a través de varios términos que dependen de la temperatura. Cada uno de los sistemas de ecuaciones (40) y (41) para el dominio completo puede resolverse usando el método de Newton-Raphson combinado con un algoritmo de minimización global con el propósito de reducir el error en cada iteración [23].

Para dar cuenta del acoplamiento entre las ecuaciones de momentum y energía se ha usado iteración directa. La velocidad en el término advectivo

de la ecuación de energía se considera como una variable conocida de una solución previa de las ecuaciones de momentum obtenida mediante el método de Newton. De la misma forma, en cada iteración los términos dependientes de la temperatura en las ecuaciones de momentum pueden ser conocidos a partir de una solución previa de la ecuación de energía. Mayores detalles del algoritmo iterativo se muestran en la figura 1.

Para fluidos con viscosidad variable, existe un problema adicional en la iteración numérica. En la solución multidominio de problemas no newtonianos existirán subdominios donde la viscosidad permanece casi constante y otras regiones con gradientes mayores donde la viscosidad cambia ostensiblemente. Estas diferencias entre subregiones pueden hacer que la función residual del método iterativo tenga regiones planas de mínimos locales o valles donde el proceso de iteración se estanca. Adicionalmente, el método de reciprocidad dual para el caso no newtoniano se basa en la formulación de perturbación dada en ec.(11), de modo que cuando la viscosidad constante η_N que se asume está muy lejos del valor real η , el método de Newton no progresa adecuadamente a menos que la solución inicial para las iteraciones esté muy cerca de la solución verdadera. Para mejorar estos problemas, se diseñó un algoritmo predictor corrector en el cual se resuelve una secuencia de problemas lineales para obtener un mejor valor inicial para comenzar las iteraciones no lineales. En la etapa predictoria se asume una viscosidad constante en cada subdominio igual a la viscosidad promedio de los nodos de la frontera del subdominio. Este valor promedio se corrige posteriormente en la etapa correctora del proceso, cuando el sistema original de ecuaciones no lineales se resuelve mediante el método de Newton hasta alcanzar convergencia. Si el método de Newton se detiene en un mínimo local, el paso predictor puede realizarse una vez más pero empezando en el mínimo local, y así sucesivamente. Para más detalles acerca del método predictor corrector desarrollado en esta investigación se recomienda revisar la referencia [27].

2.3. Resultados numéricos

Varios problemas no isotérmicos con disipación viscosa han sido resueltos mediante el método MD-DRM. Los resultados muestran la eficiencia del método de elementos de frontera multidominio para modelar flujos no newtonianos y no isotérmicos muy complejos considerando con efectos de disipación viscosa de calor.

Flujo de Couette no isotérmico con disipación viscosa

En este ejemplo consideramos el flujo de un fluido no Newtoniano incompresible confinado entre dos cilindros concéntricos como se ilustra en la figura 2. A medida que el cilindro interior rota, cada celda de fluido fricciona las celdas adyacentes. La fricción de capas adyacentes de fluido produce calor, es decir, la energía mecánica se degrada y se convierte en energía térmica. La magnitud del efecto de disipación viscosa depende del gradiente de velocidad local. Las superficies de ambos cilindros se mantienen a una misma temperatura $T = T_0$. La geometría es definida por los radios $R_1 = 1$ m; $R_2 = 5$ m.

Para la solución numérica mediante MD-DRM se utilizó la malla de 400 elementos de dominio que se muestra en la figura 3. El modelo matemático para este ejemplo consiste de la ecuación de continuidad, las ecuaciones de momentum y la ecuación de energía i.e.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (42)$$

$$-\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\eta \varepsilon_{ij}) = 0 \quad (43)$$

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x_j \partial x_j} + \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = 0 \quad (44)$$

Hay tres casos posibles dependiendo de si la viscosidad cambia con la temperatura solamente, con la rapidez de deformación, o si la viscosidad cambia con ambas variables.

Caso I. La viscosidad no cambia con la temperatura $\eta = \eta(\dot{\gamma})$.

Para un fluido de ley de potencias cuya viscosidad solo cambia con la rapidez de deformación, el modelo reológico está dado en la ec.(13) en términos de dos constantes $K = 1$ Pa.sⁿ (el coeficiente de consistencia) y n (el índice de ley de potencias). Los resultados numéricos de la temperatura para algunos valores del parámetro n pueden observarse en la figura 4. Estos resultados han sido comparados con la solución analítica obtenida según [2] mediante integración directa de las ecuaciones de momentum y energía. En todos los casos el error numérico es menor de 0,5 %. Las figuras 5 y 6 muestran el perfil de velocidad y de viscosidad respectivamente. Observe que la viscosidad aumenta rápidamente en la región donde la rapidez de deformación es baja, es decir en la región cerca al cilindro externo donde existe un bajo gradiente de velocidad especialmente cuando el índice de ley de potencias n es pequeño. También es

importante resaltar la alta precisión del método MD-DRM para predecir las derivadas de la velocidad, debido a que la viscosidad depende en forma no trivial de estas derivadas (ec.(13)), una buena aproximación de estas se manifiesta en un valor bastante exacto de la viscosidad como se observa en la figura 6. Por esta razón puede concluirse que el método MD-DRM puede aproximar con alta precisión no solo los valores del potencial (velocidad) sino también los flujos (gradientes de velocidad) y cualquier otra variable que dependa de ellos, lo cual es una ventaja frente a los métodos numéricos convencionales como elementos finitos y volúmenes finitos que necesitarían mallas mucho mas densas que las utilizadas en esta investigación para alcanzar el mismo nivel de precisión.

Caso II. La viscosidad depende solo de la temperatura $\eta = \eta(T)$.

En este caso hemos considerado que la viscosidad es constante (fluido newtoniano) y que el aumento de temperatura en el fluido ocasiona variaciones de la viscosidad las cuales a su vez afectan el perfil de velocidad. Las ecuaciones de momentum y energía están acopladas y deben resolverse iterativamente para cada punto del sistema. La expresión para la viscosidad en este caso es la siguiente (ver ec.(16))

$$\eta = \eta_0 e^{\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \quad (45)$$

con $\eta_0 = 1 \text{ Pa.s}$. El perfil de temperatura para valores diferentes de la energía de activación E se presentan en la figura 7, y las variaciones de viscosidad y velocidad a través del dominio pueden observarse en las figuras 8 y 9. Debido al acoplamiento entre las ecuaciones de momentum y energía las cuales son ecuaciones diferenciales no lineales, los resultados MD-DRM que se presentan aquí solo pueden compararse con una solución numérica mediante diferencias finitas y el método de tres etapas de Lobatto el cual es básicamente un método de colocación (Para mayor detalle ver [14][23]).

Caso III. La viscosidad depende tanto de la rapidez de deformación y la temperatura $\eta = \eta(\dot{\gamma}, T)$. Este es el caso más complejo donde los efectos de la rapidez de deformación y la temperatura afectan el valor de la viscosidad, i.e.

$$\eta = K \dot{\gamma}^{n-1} e^{\frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \quad (46)$$

En este caso, las ecuaciones acopladas de momentum y energía son extremadamente no lineales, por lo tanto la solución numérica obtenida

mediante MD-DRM será comparada con una solución numérica obtenida mediante diferencias finitas [14]. La figura 10 muestra el perfil de temperatura para dos valores diferentes del índice de ley de potencias n de un fluido no newtoniano con una energía de activación $E = 10^7 \text{ J / mol}$. Tal como puede observarse en esta figura, los resultados del MD-DRM están muy cercanos a la solución de prueba con una diferencia menor que 1 %. Las figuras 11 y 12 muestran los perfiles de viscosidad y velocidad para este ejemplo.

2.4. Conclusiones

En este artículo se ha explicado un método nuevo de elementos de frontera con reciprocidad dual y multi-dominios, el cual se ha aplicado por primera vez para la solución de problemas no newtonianos y no isotérmicos incluyendo los efectos de disipación viscosa. La técnica multi-dominio es esencialmente un método de partición en el cual el dominio completo se divide en subregiones más pequeñas. En cada subregión o elemento de dominio se aplican fórmulas integrales para el campo de flujo y la temperatura, y entre subregiones adyacentes también se imponen condiciones de continuidad o compatibilidad adicionales. Las integrales de dominio se transforman en integrales de frontera mediante el método de reciprocidad dual DRM en términos de las funciones de interpolación más eficientes reportadas en la literatura matemática. A pesar de las mallas relativamente poco densas usadas en este trabajo y de los elementos de frontera lineales simples, los resultados muestran convergencia y alta precisión.

A pesar de que en el método numérico propuesto de reciprocidad dual multi dominio MD-DRM existen elementos internos y una malla, no debe considerarse como un método de dominio ya que todas las integrales de volumen se convierten en integrales de frontera en cada celda o elemento y por lo tanto el método multi-dominio preserva el carácter de frontera único del método de elementos de frontera BEM.

Los diferentes ejemplos numéricos presentados prueban la versatilidad y eficiencia del esquema numérico propuesto para la solución de problemas de flujo no lineales. En el presente artículo también se ha extendido la capacidad del método MD-DRM para el caso de problemas no isotérmicos y no newtonianos los cuales no habían sido resueltos anteriormente usando la técnica de reciprocidad dual tradicional.

Referencias

- [1] J.F. Agassant, P. Avenas, J.Ph. Sergent, and P.J. Carreau. *Polymer Processing: Principles and Modeling*. Hanser Publishers, New York, 1991.
- [2] R.B. Bird, W. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, New York, 1960.
- [3] C.A. Brebbia and J. Dominguez. *Boundary Elements An Introductory Course*. Computational Mechanics Publications, Southampton, 1992.
- [4] C.A. Brebbia, J. Telles, and L.C. Wrobel. *Boundary Element Techniques*. Springer Verlag, Berlin, New York, 1984.
- [5] B.A. Davis. Investigation of non-linear flows in polymer mixing using the boundary integral method ph.d. thesis. Technical report, University of Wisconsin-Madison, Department of Mechanical EngineeringDepartment of Mechanical Engineering, 1995.
- [6] J. Duchon. Splines minimizing rotation invariant seminorms in sobolev spaces. In W.Schempp and K.Zeller, editors, *Constructive Theory of Functions in Several Variables*. Springer Verlag, Berlin, 1976.
- [7] H Florez, W.F.andPower. Multi-domain dual reciprocity bem approach for the navier-stokes system of equations. *Comm. in num. meth. in engng.*, 16, 2000.
- [8] H.andChejne F. Florez, W.F.andPower. Conservative interpolation for the boundary integral solution of the navier-stokes equations. *Computational mechanics*, 25, 2000.
- [9] W.F. Florez and H. Power. Drm multi-domain mass conservative interpolation approach for the bem solution of the navier-stokes equations. *Computers and mathematics with applications*, Submitted for publication, 2000.
- [10] W.F. Florez and H. Power. Comparison between continuous and discontinuous boundary elements in the multidomain dual reciprocity method for the solution of the navier-stokes equations. *Engineering analysis with boundary elements*, 25:57–69, 2001.
- [11] W.F. Florez and H. Power. Multi-domain dual reciprocity for the solution of inelastic non-newtonian problems. *Computational mechanics*, 27:396–411, 2001.
- [12] E.J. Kansa and R.E Carlson. Radial basis functions: A class of grip-free, scattered data approximations. *Computational Fluid Dynamics Journal*, 3(4):479–496, 1995.
- [13] O.A. Ladyzhenskaya. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*. Gordon and Breach, New York, 1963.

- [14] MATLAB. Matlab the language of technical computing ver.6. Technical report, Mathworks Inc.
- [15] C.A. Micchelli. Interpolation of scattered data: Distance matrices and conditionally positive definite functions. *Const. Approx.*, 2:11–22, 1986.
- [16] H. Mingo, R.andPower. The drm subdomain decomposition approach for two-dimensional thermal convection flow problems. *Engng. An. with boundary elements*, 24:121–127, 2000.
- [17] T.A. Osswald and G. Menges. *Materials Science of Polymers for Engineers*. Hanser Publishers, Munich, 1995.
- [18] P. Partridge and B. Sensale. Hybrid approximation functions in the dual reciprocity boundary element method. *Comm. Num. Meth. Eng.*, 13:83–94, 1997.
- [19] N. Phan Thien. Applications of boundary element methods in non-newtonian fluid mechanics. In *B.E. Applications in Fluid Mechanics*. Computational Mechanics Publications, 1995.
- [20] V. Popov and H. Power. The drm-md integral equation method for the numerical solution of convection-diffusion equation. In *Boundary Element Research in Europe*, pages 67–81. Computational Mechanics Publications, Southampton, 1999.
- [21] H. Power and P.W. Partridge. The use of stokes fundamental solution for the boundary only formulation of the three-dimensional navier-stokes equations for moderate reynolds numbers. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 37:1825–1840, 1994.
- [22] H. Power and L.C. Wrobel. *Boundary Integral Methods in Fluid Mechanics*. Computational Mechanics Publications, Southampton, 1995.
- [23] W.H. Press, S.A. Teulkolski, B.P. Flannery, and W.T. Vetterling. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, Cambridge U.K., 1992.
- [24] L. Skerget and M. Hribersek. Iterative methods in solving naviers-stokes equations by the boundary element method. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 39:115–139, 1996.
- [25] L Skerget and N. Samec. Bem for non-newtonian flow. *Engineering analysis with boundary elements*, 23(5-6):435–443, 1999.
- [26] A.E. Taigbenu. The green element method. In *Int. J. numer. methods in eng.*, pages 2241–2263, 1995.
- [27] W.F. Florez. *Multi-Domain Dual Reciprocity for Non-Linear Flow Problems Ph.D. thesis*. Ph.d. thesis., University of Wales, 2000.

Dirección de los autores: Whady F. Flórez Instituto de Energia y termodinámica, U.P.B keogh@geo.net.co — Farid Chejne Facultad de minas, Universidad Nacional fchejne@unalmed.edu.co — Henry Power Department of mechanical Engineering, University of Nottingham.

This information is Copyright© 1999 Personal TeX, Inc. All Rights Reserved.

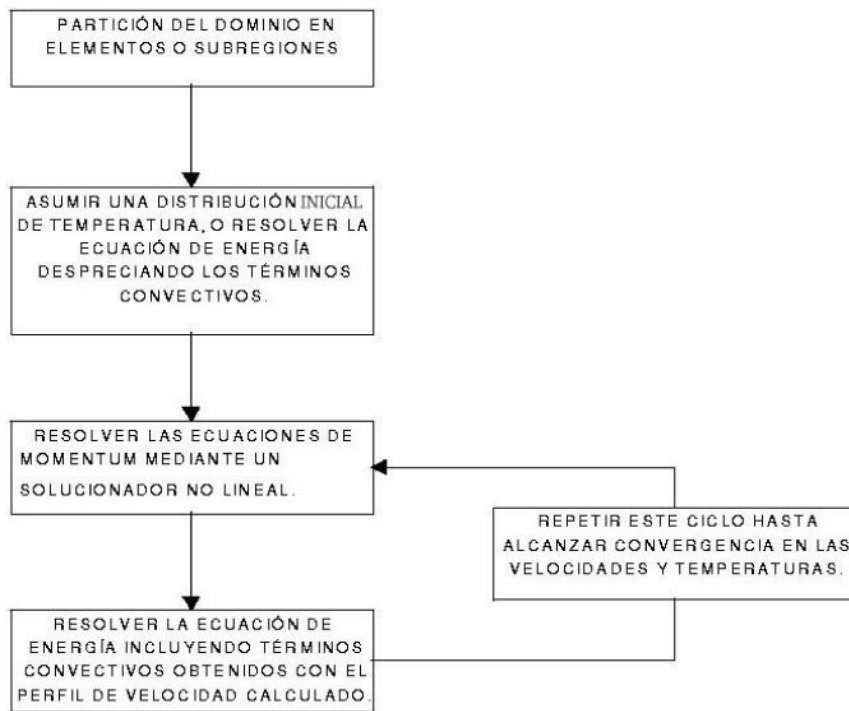


Figura 1: Algoritmo iterativo para el acople de las ecuaciones de momentum y energía.

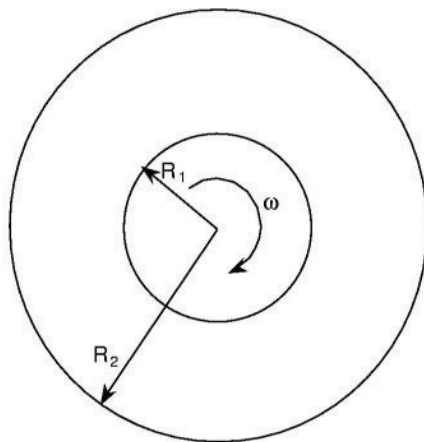


Figura 2: Flujo de Couette con generación viscosa de calor.

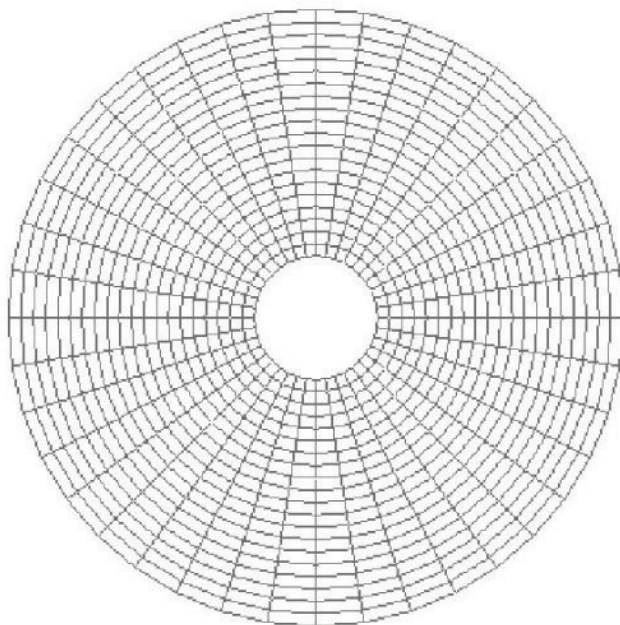


Figura 3: Malla uniforme 20×20 de elementos para la solución MD-DRM del problema de Couette

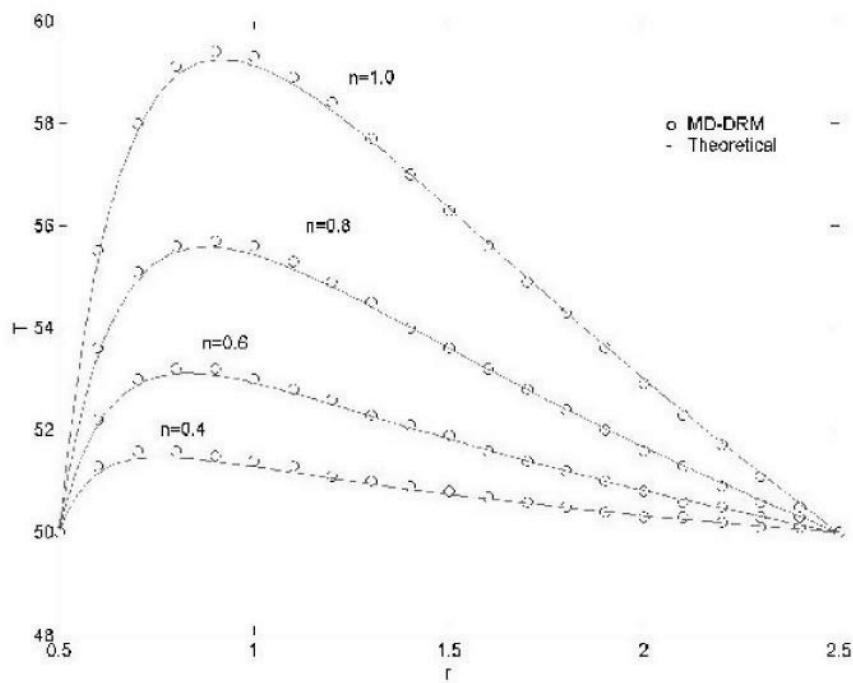


Figura 4: Variación de la temperatura con el radio para el flujo de Couette de un fluido de ley de potencias con viscosidad dependiente solamente de la deformación.

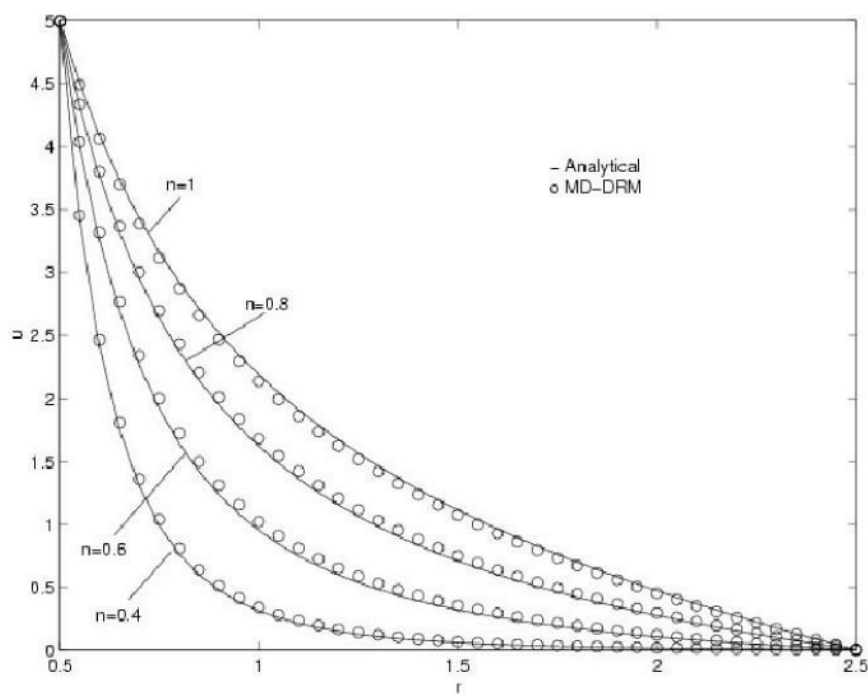


Figura 5: Perfil de velocidad para el flujo de Couette de un fluido de ley de potencias con viscosidad dependiente solamente de la deformación

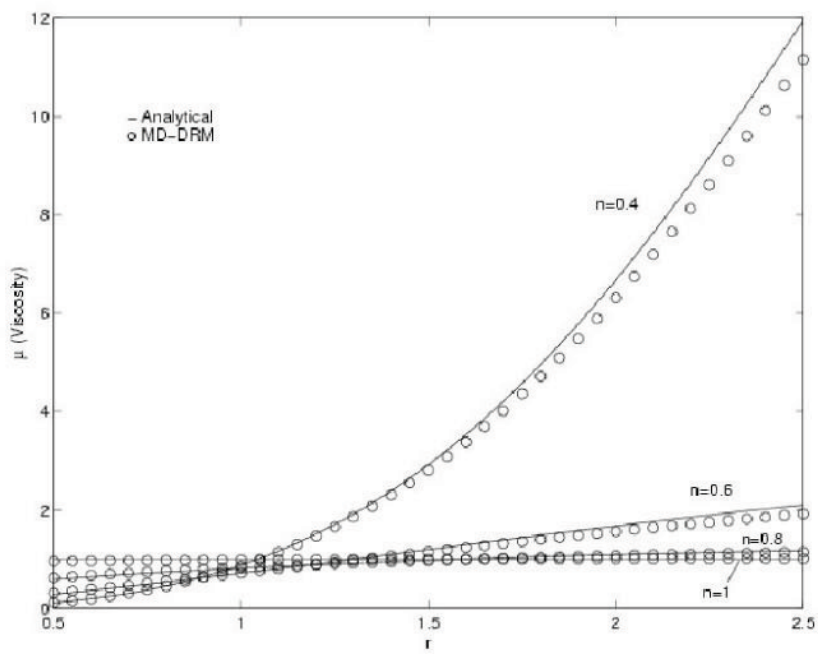


Figura 6: Perfil de viscosidad para el flujo de Couette de un fluido de ley de potencias con viscosidad dependiente solamente de la deformación.

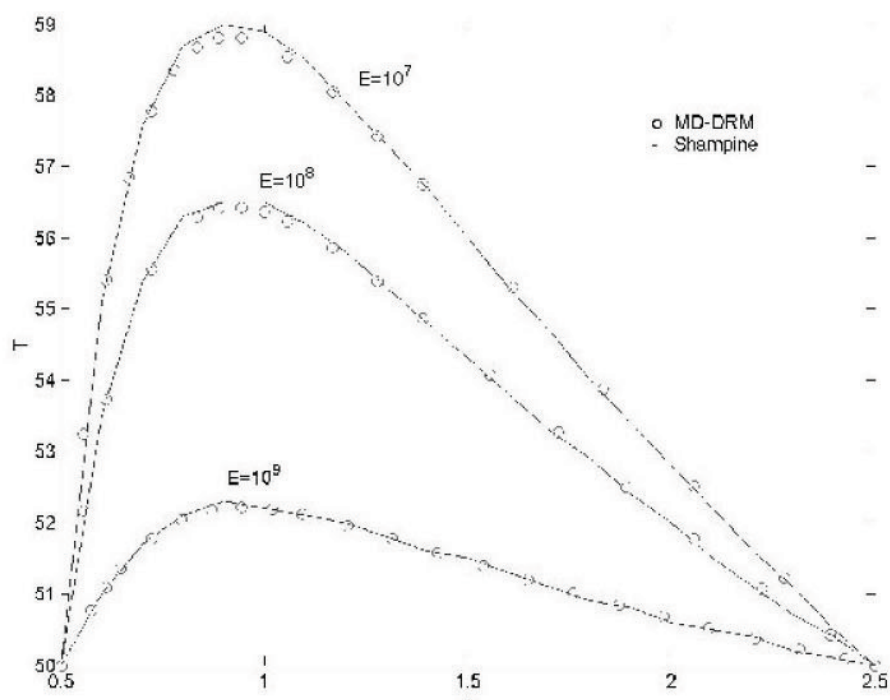


Figura 7: Resultados para el flujo de Couette con viscosidad dependiente solamente de la temperatura.

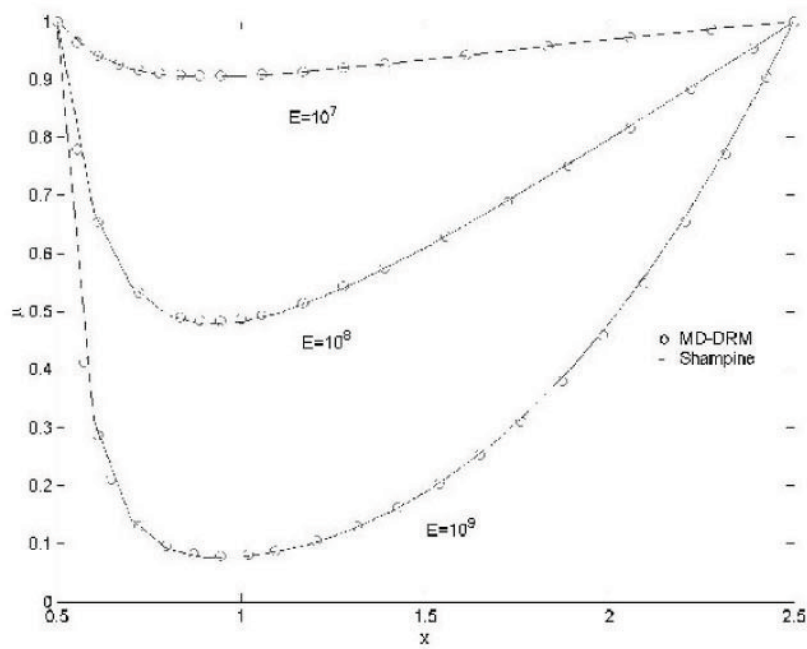


Figura 8: Perfiles de viscosidad para el problema de Couette con una viscosidad que solo depende de la temperatura.

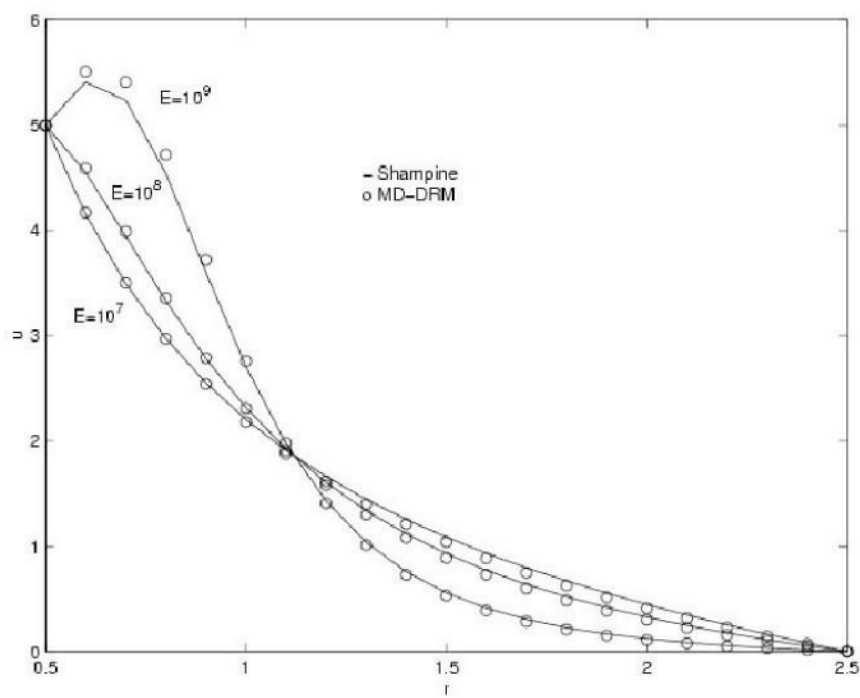


Figura 9: Perfiles de velocidad para el problema de Couette con una viscosidad que solo depende de la temperatura.

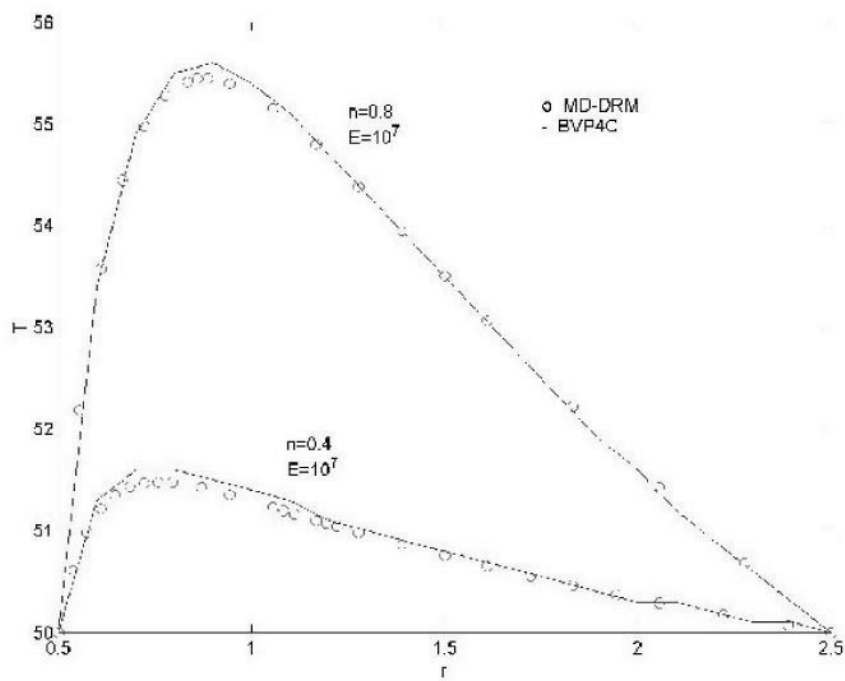


Figura 10: Perfiles de temperatura para diferentes valores del índice de ley de potencias , y para el caso en el que la viscosidad depende de la temperatura y de la rapidez de deformación.

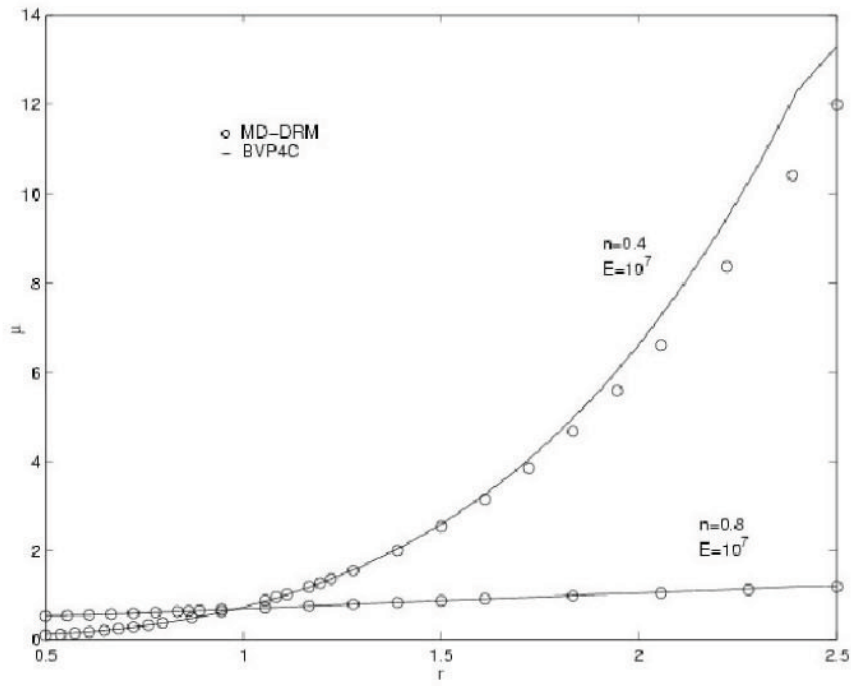


Figura 11: Perfiles de viscosidad para diferentes valores del índice de ley de potencias, y para el caso en el que la viscosidad depende de la temperatura y de la rapidez de deformación

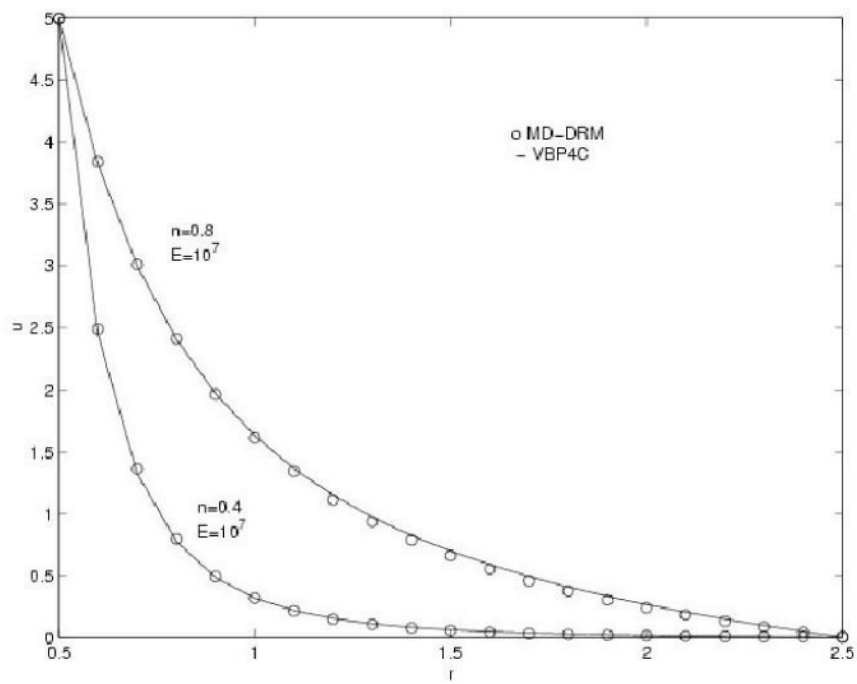


Figura 12: Perfiles de velocidad para diferentes valores del índice de ley de potencias, y para el caso en el que la viscosidad depende de la temperatura y de la rapidez de deformación