

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Desenvolvimento de um Método de Volumes
Finitos de Alta Ordem para a Simulação de
Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos**

Dissertação de Mestrado

André Rodrigues Muniz

**PORTO ALEGRE
2003**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Desenvolvimento de um Método de Volumes Finitos de Alta Ordem para a Simulação de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos

André Rodrigues Muniz

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Área de concentração: Projeto, Simulação, Controle e Otimização de Processos Químicos e Biotecnológicos

Orientadores:

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo

Porto Alegre

2003

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Desenvolvimento de um Método de Volumes Finitos de Alta Ordem para a Simulação de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos*, elaborada por André Rodrigues Muniz, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli

Profa. Dra. Lígia Damasceno Ferreira Marczak

Profa. Dra. Roberta Chasse Vieira

“Um sonho que se sonha só, é só um sonho que se sonha só,
mas sonho que se sonha junto é realidade”

Raul Seixas

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente a minha família, principalmente a minha mãe, pelo apoio, incentivo e carinho que sempre me deu, e a quem devo tudo o que sou.

Agradecer também a minha namorada, por tudo que fez e que faz por mim, além do grande incentivo e força que me passou durante a realização deste trabalho, especialmente na reta final.

Agradecer aos meus amigos, em especial aos que foram meus colegas de mestrado e me acompanham desde os primeiros semestres do curso de graduação, por serem muito mais que amigos, serem irmãos.

E como não poderia deixar de ser, para os grandes mestres que me orientaram neste trabalho, fica a gratidão de seu eterno aprendiz.

Resumo

O uso da mecânica de fluidos computacional no estudo de processos envolvendo o escoamento de fluidos poliméricos está cada vez mais presente nas indústrias de transformação de polímeros. Um código computacional voltado a esta função, para que possa ser aplicado com sucesso, deve levar a previsões mais próximas possível da realidade (modelagem), de uma forma relativamente rápida e eficiente (simulação). Em relação à etapa de modelagem, o ponto chave é a seleção de uma equação constitutiva que represente bem as características reológicas do fluido, dentre as diversas opções existentes.

Para a etapa de simulação, ou seja, a resolução numérica das equações do modelo, existem diversas metodologias encontradas na literatura, cada qual com suas vantagens e desvantagens. Neste tópico se enquadra o trabalho em questão, que propõe uma nova metodologia para a resolução das equações governantes do escoamento de fluidos viscoelásticos. Esta se baseia no método dos volumes finitos, usando o arranjo co-localizado para as variáveis do problema, e na utilização de aproximações de alta ordem para os fluxos médios lineares e não-lineares e para outros termos não lineares que surgem da discretização das equações constitutivas. Nesta metodologia, trabalha-se com os valores médios das variáveis nos volumes durante todo o processo de resolução, sendo que os valores pontuais são obtidos ao final do procedimento via deconvolução. A solução do sistema de equações não lineares, resultante da discretização das equações, é feita de forma simultânea, usando o método de Newton.

São mostrados então, resultados da aplicação da metodologia proposta em problemas envolvendo escoamentos de fluidos newtonianos e fluidos viscoelásticos. Para descrever o comportamento reológico destes últimos, são usadas duas equações constitutivas, que são o modelo de Oldroyd-B e o modelo de Phan-Thien-Tanner Simplificado. Por estes resultados pode-se ver que a metodologia é muito promissora, apresentando algumas vantagens frente às metodologias convencionais em volumes finitos. A implementação atual da metodologia desenvolvida está restrita a malhas uniformes e, conseqüentemente, soluções para problemas com geometrias complexas, que necessitam de refinamento localizado da malha, foram obtidas somente para baixos números de Weissenberg, devido a limitação do custo computacional. Esta restrição pode ser contornada, tornando o seu uso competitivo.

Abstract

Computational Fluid Dynamics (CFD) is widely used by polymer processing industries in order to evaluate polymeric fluid flows. A successful computational code must provide reliable predictions (modeling) in a fast and efficient way (simulation). In the modeling phase, the key point is the choice of an appropriate constitutive equation.

To solve the model equations, a large number of methodologies was found in the literature, each one having advantages and disadvantages. The present work proposes a new methodology to solve the governing equations of viscoelastic fluid flows. It is based on the finite volume method with collocated arrangement of the variables, using high order approximations to linear and nonlinear average fluxes in the interfaces and in the nonlinear terms obtained from the discretization of the constitutive equations. In this methodology, the average values of the variable in the volumes are used during the resolution, and the punctual values are recovered in the post-processing step by deconvolution of the average values. The nonlinear system resulting from the discretization of the equations are solved simultaneously, using the Newton's method.

The methodology is used to solve some Newtonian and viscoelastic flows, and the results obtained are showed. The Oldroyd-B and Simplified Phan-Thien-Tanner models are used to describe the rheological behavior of the viscoelastic fluid. According to the results, it can be seen that the methodology is promising, having some advantages compared with the conventional methodologies based on the finite volume method. The actual implementation of the developed methodology is restricted to uniform meshes and, consequently, solutions for problems with complex geometries, which require a localized mesh refinement, were obtained only for low Weissenberg numbers, due to computational cost limitation. This restriction can be outlined, and so, the methodology can become competitive.

Sumário

| | |
|--|------------|
| Capítulo 1 Introdução | 1 |
| 1.1. Fluidos Poliméricos | 1 |
| 1.2. Funções Materiais | 4 |
| 1.3. Dinâmica de Fluidos Computacional e fluidos poliméricos | 7 |
| 1.4. Estrutura da Dissertação | 8 |
| Capítulo 2 Fundamentos e Revisão Bibliográfica | 11 |
| 2.1. Modelo Matemático | 11 |
| 2.2. Equações constitutivas para fluidos poliméricos | 12 |
| 2.2.1. Fluido Newtoniano Generalizado (FNG) | 13 |
| 2.2.2. Fluido viscoelástico linear (FVL) | 14 |
| 2.2.3. Fluido viscoelástico não linear – Modelos diferenciais | 15 |
| 2.2.4. Fluido viscoelástico não-linear – Modelos integrais | 19 |
| 2.2.5. Seleção de uma equação constitutiva | 21 |
| 2.3. Metodologia para resolução numérica do problema | 22 |
| 2.3.1. Discretização do espaço e arranjo das variáveis | 23 |
| 2.3.2. Discretização das equações | 25 |
| 2.3.3. Aproximação dos fluxos médios: metodologia convencional | 27 |
| 2.3.4. Aproximação dos fluxos médios: metodologia de alta ordem baseada em valores médios | 31 |
| 2.3.5. Solução das equações discretizadas | 33 |
| 2.4. Revisão Bibliográfica | 35 |
| 2.5. Proposta da dissertação | 38 |
| Capítulo 3 Modelo Matemático | 41 |
| 3.1. Equações do modelo | 41 |
| 3.2. Condições de contorno | 44 |
| 3.2.1. Entrada de massa | 44 |
| 3.2.2. Saída de massa | 45 |
| 3.2.3. Parede (não-deslizamento) | 45 |
| 3.2.4. Simetria | 46 |
| 3.3. Adimensionalização das equações | 46 |
| Capítulo 4 Metodologia Numérica | 49 |
| 4.1. Discretização das equações | 49 |
| 4.2. Aproximação dos fluxos médios | 51 |
| 4.2.1. Metodologia convencional | 52 |
| 4.2.2. Metodologia de alta ordem – termos lineares | 53 |
| 4.2.3. Metodologia de alta ordem – termos não lineares | 57 |
| 4.3. Condições de contorno | 60 |
| 4.4. Solução das equações discretizadas | 61 |
| Capítulo 5 Resultados para Fluidos Newtonianos | 63 |
| 5.1. Escoamento “ <i>Slip-Stick</i> ” | 64 |
| 5.1.1. Acoplamento pressão-velocidade | 65 |
| 5.1.2. Curvas de nível | 70 |
| 5.1.3. Perfis na direção horizontal (x) | 72 |
| 5.1.4. Perfis na direção vertical (y) | 79 |
| 5.2. Escoamento “ <i>Stick-Slip</i> ” | 82 |
| 5.2.1. Curvas de nível | 83 |
| 5.2.2. Perfis na direção horizontal (x) | 84 |
| 5.2.3. Perfis na direção vertical (y) | 87 |
| 5.3. Escoamento em cavidade quadrada | 90 |
| 5.3.1. Curvas de nível para $Re = 400$ | 91 |
| 5.3.2. Comparações das velocidades máximas nas linhas centrais horizontal e vertical para $Re = 100$ | 93 |
| 5.3.3. Comparações dos perfis centrais para $Re = 400$ | 95 |
| 5.4. Conclusões | 98 |
| Capítulo 6 Resultados para Fluidos Viscoelásticos | 101 |
| 6.1. Escoamento “ <i>Stick-Slip</i> ” | 102 |
| 6.1.1. Perfis desenvolvidos | 102 |
| 6.1.2. Efeito dos parâmetros das equações constitutivas | 104 |

| | | |
|---|---|------------|
| 6.1.3. | Dificuldade na obtenção de soluções em altos números de Weissenberg | 109 |
| 6.2. | Escoamento em contração plana | 111 |
| 6.2.1. | Aproximações junto à contração..... | 112 |
| 6.2.2. | Comparações para diferentes números de Weissenberg | 115 |
| 6.3. | Conclusões | 118 |
| Capítulo 7 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros..... | | 119 |
| 7.1. | Conclusões e sugestões | 119 |
| Referências Bibliográficas..... | | 123 |
| Apêndice 1. Obtenção do esquema de Lagrange de 3ª ordem | | 131 |
| Ap1.1 | Definições | 131 |
| Ap1.2 | Obtenção dos coeficientes da aproximação..... | 132 |
| Apêndice 2. Erros de truncamento para os esquemas de alta ordem..... | | 135 |
| Ap2.1 | Esquema Lagrange de 3ª ordem..... | 135 |
| Ap2.2 | Esquema Lagrange de 4ª ordem..... | 136 |
| Ap2.3 | Esquema Padé de 4ª ordem..... | 136 |
| Apêndice 3. Deconvolução dos valores médios | | 137 |
| Ap3.1 | Deconvolução de 3ª ordem..... | 138 |
| Ap3.2 | Deconvolução de 4ª ordem..... | 139 |

Lista de Figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1.1. Experimento de "rod-climbing". A esquerda pode-se ver o comportamento de um fluido polimérico e a direita o de um fluido newtoniano (Tanner, 1985)..... | 4 |
| Figura 1.2. Curvas típicas para viscosidade em função da taxa de deformação para fluidos poliméricos (neste caso, polietileno de baixa densidade), sob diferentes temperaturas (Bird et al., 1987)..... | 6 |
| Figura 2.1. Arranjos (a) co-localizado e (b) desencontrado para as variáveis v_x , v_y e p | 24 |
| Figura 2.2. Volume elementar genérico e notação dos índices relativos às interfaces e pontos centrais..... | 25 |
| Figura 3.1. Representação do contorno genérico com as direções normal e tangente..... | 44 |
| Figura 4.1. Volume elementar genérico e notação dos índices relativos às interfaces e aos pontos centrais..... | 49 |
| Figura 4.2. Representação dos volumes e das interfaces nas quais são feitas as aproximações dos valores médios, juntamente com os índices correspondentes..... | 52 |
| Figura 5.1. Representação esquemática do escoamento "slip-stick"..... | 64 |
| Figura 5.2. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, sendo usados os valores no centro dos volumes e nas interfaces, usando uma malha 30×10 | 66 |
| Figura 5.3. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, para solução obtida com o esquema CDS e CDS com dissipação, usando os valores no centro dos volumes..... | 68 |
| Figura 5.4. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, obtido com esquema CDS puro e CDS com dissipação para $f_d = 0.001$ e $f_d = 0.01$ | 68 |
| Figura 5.5. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.05$, obtidos com esquema CDS puro e CDS com dissipação para $f_d = 0.001$, $f_d = 0.01$ e $f_d = 0.1$ | 69 |
| Figura 5.6. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, obtido com o esquema QUICK, comparado com o obtido pelo esquema CDS com dissipação ($f_d = 0.005$)..... | 70 |
| Figura 5.7. Curvas de nível para função corrente no escoamento "slip-stick" ($L = 10$, $H = 1$)..... | 71 |
| Figura 5.8. Curvas de nível para velocidade v_x no escoamento "slip-stick" ($L = 10$, $H = 1$)..... | 71 |
| Figura 5.9. Curvas de nível para velocidade v_y no escoamento "slip-stick" ($L = 10$, $H = 1$)..... | 71 |
| Figura 5.10. Curvas de nível para a pressão no escoamento "slip-stick" ($L = 10$, $H = 1$)..... | 72 |
| Figura 5.11. Perfil de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60×20 | 73 |
| Figura 5.12. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60×20 | 73 |
| Figura 5.13. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60×20 | 74 |
| Figura 5.14. Perfis de tensões t_{xx} , t_{yy} , e t_{xy} na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60×20 | 74 |
| Figura 5.15. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema QUICK..... | 75 |
| Figura 5.16. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema QUICK e com o QUICK/CDS na região próxima à singularidade..... | 75 |
| Figura 5.17. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, obtido com o esquema QUICK e com o QUICK/CDS na região próxima a singularidade para diferentes malhas..... | 76 |
| Figura 5.18. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema LAG34 e com o LAG34/CDS em pontos próximos à singularidade..... | 76 |
| Figura 5.19. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, obtido com o esquema LAG34 e com o LAG34/CDS em pontos próximos à singularidade, para diferentes malhas..... | 77 |
| Figura 5.20. Perfis de velocidade v_y (a) e v_x (b) na direção horizontal em $y = 0.95$, obtidos com o esquema LAG34, usando dois pontos e mais a interface em $x = 0$, e somente dois pontos com esquema CDS..... | 78 |
| Figura 5.21. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema LAG34 e com o LAG34/CDS na região próxima à singularidade, sendo usado para este último, diferentes números de pontos com aproximação de 2ª ordem..... | 78 |
| Figura 5.22. Perfil de velocidade v_y na direção vertical em $x = 0.6667$, obtido com o esquema LAG34/CDS, com diferentes números de pontos de aproximação de baixa ordem..... | 79 |
| Figura 5.23. Perfis de velocidade v_y em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas LAG34/CDS e QUICK/CDS para diferentes tamanhos de malha..... | 80 |
| Figura 5.24. Perfis de velocidade v_x em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas LAG34/CDS e QUICK/CDS para diferentes tamanhos de malha..... | 80 |
| Figura 5.25. Perfis de pressão em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas LAG34/CDS e QUICK/CDS para diferentes tamanhos de malha..... | 81 |
| Figura 5.26. Representação esquemática do escoamento "stick-slip"..... | 82 |
| Figura 5.27. Curvas de nível para função corrente no escoamento "stick-slip" ($L = 10$, $H = 1$)..... | 83 |

| | |
|---|-----|
| Figura 5.28. Curvas de nível para velocidade v_x no escoamento “stick-slip” ($L = 10, H = 1$). | 83 |
| Figura 5.29. Curvas de nível para velocidade v_y no escoamento “stick-slip” ($L = 10, H = 1$). | 84 |
| Figura 5.30. Curvas de nível para pressão no escoamento “stick-slip” ($L = 10, H = 1$). | 84 |
| Figura 5.31. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 85 |
| Figura 5.32. Perfis de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 85 |
| Figura 5.33. Perfis de pressão na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 86 |
| Figura 5.34. Perfis de tensão τ_{xx} , τ_{yy} , τ_{xy} e na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos a partir do campo de velocidades calculado. | 86 |
| Figura 5.35. Perfis de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, para a região próxima a singularidade, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 87 |
| Figura 5.36. Perfis de velocidade v_x na direção vertical em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 88 |
| Figura 5.37. Perfis de velocidade v_y na direção vertical em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 88 |
| Figura 5.38. Perfis de pressão na direção vertical em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 89 |
| Figura 5.39. Perfis de velocidade v_y na direção vertical em $x = 0.6667$, para a região próxima a $y = 0.6$ (região de máximo) obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha. | 89 |
| Figura 5.40. Representação esquemática do escoamento em cavidade quadrada. | 90 |
| Figura 5.41. Curvas de nível para função corrente no escoamento em cavidade ($Re = 400$). | 91 |
| Figura 5.42. Curvas de nível para velocidade v_x no escoamento em cavidade ($Re = 400$). | 92 |
| Figura 5.43. Curvas de nível para velocidade v_y no escoamento em cavidade ($Re = 400$). | 92 |
| Figura 5.44. Curvas de nível para pressão no escoamento em cavidade ($Re = 400$). | 93 |
| Figura 5.45. Perfil de velocidade v_x vertical central (a) e perfil de velocidade v_y horizontal central (b) para $Re = 400$. | 95 |
| Figura 5.46. Perfis de velocidade v_x vertical central obtidos com os esquemas LAG44 e PADE44 para diferentes tamanhos de malha, próximo a $y = 0.3$ (região de velocidade máxima em módulo). | 96 |
| Figura 5.47. Perfis de velocidade v_y horizontal central obtidos com os esquemas LAG44 e PADE44 para diferentes tamanhos de malha, próximo a $x = 0.25$ (região de velocidade máxima). | 96 |
| Figura 5.48. Perfis de velocidade v_y horizontal central obtidos com os esquemas LAG44 e PADE44 para diferentes tamanhos de malha, próximo a $x = 0.85$ (região de velocidade mínima). | 97 |
| Figura 6.1. Perfis de tensão normal τ_{xx} no escoamento plenamente desenvolvido para diferentes números de Weissenberg, usando o modelo de Oldroyd-B. | 103 |
| Figura 6.2. Perfis de tensão normal τ_{xx} no escoamento plenamente desenvolvido para número de Weissenberg iguais a 0.1 e 1, usando o modelo de Oldroyd-B. | 103 |
| Figura 6.3. Perfis de tensão normal τ_{xx} no escoamento plenamente desenvolvido para número de Weissenberg igual a 10 e para diferentes valores de η_E , usando o modelo de Oldroyd-B. | 104 |
| Figura 6.4. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1 e para diferentes valores de η_E , referente ao modelo de Oldroyd-B. | 105 |
| Figura 6.5. Perfil horizontal de velocidade v_x , para $y = 0.95$, $We = 0.1$ e diferentes valores de η_E , referente ao modelo de Oldroyd-B. | 105 |
| Figura 6.6. Mesmo perfil apresentado na Figura 6.5, com destaque na região da saída das placas, próximo a singularidade. | 106 |
| Figura 6.7. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para $We = 0.1$ e para diferentes valores de ϵ , referente ao modelo de Phan-Thien-Tanner. | 106 |
| Figura 6.8. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1 e para diferentes valores de ϵ , referente ao modelo de Phan-Thien-Tanner. | 107 |
| Figura 6.9. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1, usando os modelos de Oldroyd-B e SPTT ($\epsilon = 0.25$). | 108 |
| Figura 6.10. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1, usando o modelo de Oldroyd-B ($\eta_E = 0.5$), para malhas 36×10 e 60×10 . | 108 |
| Figura 6.11. Perfis de tensão τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$ para diferentes números de Weissenberg, usando o modelo de Oldroyd-B ($\eta_E = 0.5$). | 110 |
| Figura 6.12. Mesmos perfis da Figura 6.11, destacado na região anterior à singularidade. | 110 |
| Figura 6.13. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.95$ para diferentes números de Weissenberg, usando o modelo de Oldroyd-B ($\eta_E = 0.5$). | 111 |

| | |
|--|-----|
| Figura 6.14. Mesmos perfis da Figura 6.13, destacados na região anterior à singularidade..... | 111 |
| Figura 6.15. Representação esquemática do escoamento em contração plana..... | 112 |
| Figura 6.16. Perfis de velocidade v_y na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS..... | 113 |
| Figura 6.17. Perfis de tensão normal t_{xx} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS..... | 114 |
| Figura 6.18. Perfis de tensão normal t_{yy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS..... | 114 |
| Figura 6.19. Perfis de tensão de cisalhamento t_{xy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS..... | 114 |
| Figura 6.20. Perfis de tensão normal t_{xx} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para diferentes números de Weissenberg..... | 115 |
| Figura 6.21. Perfis de tensão normal t_{yy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para diferentes números de Weissenberg..... | 116 |
| Figura 6.22. Perfis de tensão de cisalhamento t_{xy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para diferentes números de Weissenberg..... | 116 |
| Figura 6.23. Mesmos perfis da Figura 6.20, destacados na região próxima à contração..... | 117 |
| Figura 6.24. Mesmos perfis da Figura 6.22, destacados na região próxima à contração..... | 117 |
| Figura Ap3.1. Representação de um volume elementar genérico, com os índices referentes às interfaces e centros dos volumes..... | 137 |

Lista de Tabelas

| | |
|---|-----|
| Tabela 5.1. Tempos computacionais relativos para obtenção da solução em diferentes malhas, tendo Nvar variáveis em cada malha, com o uso dos esquemas LAG34 e QUICK..... | 81 |
| Tabela 5.2. Valores das velocidades mínimas e máximas (v_x min, v_y min, v_y max) nas linhas centrais e coordenadas (y min, x min, x max) correspondentes, para trabalhos da literatura. | 94 |
| Tabela 5.3. Valores das velocidades mínimas e máximas (v_x min, v_y min, v_y max) nas linhas centrais e coordenadas (y min, x min, x max) correspondentes, obtidos com o esquema LAG44. | 94 |
| Tabela 5.4. Valores das velocidades mínimas e máximas (v_x min, v_y min, v_y max) nas linhas centrais e coordenadas (y min, x min, x max) correspondentes, obtidos com o esquema PADE44..... | 95 |
| Tabela Ap2.1. Erros de truncamento para o esquema de Lagrange de 3ª ordem. | 135 |
| Tabela Ap2.2. Erros de truncamento para o esquema de Lagrange de 4ª ordem. | 136 |
| Tabela Ap2.3. Erros de truncamento para o esquema de Pade de 4ª ordem..... | 136 |

Capítulo 1 Introdução

1.1. Fluidos Poliméricos

Os materiais poliméricos têm ocupado cada vez mais espaço no dia a dia das pessoas. Devido às suas diversas características, estes têm sido empregados para os mais diversos fins, como fabricação de embalagens, utensílios domésticos, eletro-eletrônicos e até mesmo em aplicações mais complexas, como na criação de órgãos artificiais e na produção de artefatos na indústria aeroespacial. Os polímeros sintéticos têm substituído materiais convencionais, tais como metais, madeira e vidro em muitas aplicações, devido a sua combinação de características: baixo peso, baixo custo, facilidade de processamento e propriedades mecânicas.

Existe uma grande variedade de processos de transformação de polímeros, ou seja, operações que transformam a matéria-prima (a resina virgem) em produtos finais para consumo. Como exemplos tem-se a extrusão, moldagem por injeção, moldagem por sopro, termoformagem, entre muitos outros, sendo cada um destes processos adequado à produção de um determinado tipo de produto. O que há de comum na grande maioria destes processos é uma etapa na qual o material, originalmente no estado sólido, é fundido (ou no caso de polímeros amorfos, plastificado), possibilitando assim que tome uma nova forma.

Polímeros fundidos e soluções poliméricas, ou generalizando, fluidos poliméricos, apresentam um comportamento mais complexo que os fluidos de baixo peso molecular, sendo classificados como fluidos não-newtonianos. Para o estudo, avaliação e entendimento de qualquer processo no qual o escoamento deste tipo de fluido seja de fundamental importância, é necessário conhecer este comportamento e, em muitos casos, saber representá-lo de uma forma quantitativa, por meio de equações matemáticas. Exemplos de situações onde isto ocorre é na caracterização de polímeros pela obtenção de medidas reológicas e na modelagem, simulação e otimização de processos que envolvam o escoamento de fluidos poliméricos.

Um material, a princípio, pode apresentar dois tipos de respostas frente à aplicação de uma tensão de cisalhamento. Alguns materiais, tipicamente na forma sólida, sofrem deformações finitas sob ação de uma tensão, retomando sua forma original com a remoção desta. Estes materiais apresentam assim, o que se chama de propriedades elásticas.

Outro tipo de material, no qual se enquadram os fluidos de baixo peso molecular, deforma-se continuamente sob a ação de uma tensão de cisalhamento, sendo que com a remoção desta, o material mantém a forma final atingida. Este tipo de material apresenta assim, o que se chama de comportamento viscoso.

Os fluidos poliméricos apresentam uma combinação das duas características citadas acima, ou seja, propriedades viscosas e elásticas, sendo chamados por isso, de fluidos viscoelásticos. Este comportamento é a característica mais marcante dos fluidos poliméricos, e pode ser facilmente observado a partir de diversos experimentos.

Um destes experimentos consiste em submeter um fluido polimérico à uma taxa de deformação constante, esperar que se atinja o estado estacionário, e em um dado instante de tempo, cessar o movimento. Caso tivéssemos um fluido newtoniano, a tensão em todo o fluido cairia instantaneamente a zero. Para um fluido polimérico verifica-se que ao final do movimento, a tensão no fluido terá um valor finito, e decairá exponencialmente ao longo do tempo, apresentando assim, o que se chama de memória. Este fenômeno se deve às tensões geradas no escoamento devido ao estiramento e alinhamento das cadeias do polímero ao longo das linhas de corrente, que tendem a retornar a uma configuração de menor energia com o decorrer do tempo.

Este processo transiente de relaxação de tensões possui um tempo característico, chamado de tempo de relaxação. Deste tempo característico decorre um número adimensional de fundamental importância para escoamentos de fluidos viscoelásticos, que é o número de Deborah (De), definido pela razão entre o tempo de relaxação do polímero, λ , e um tempo característico do escoamento, t_C :

$$De = \frac{\lambda}{t_C} \quad (1.1)$$

Analisando esta definição, verifica-se que quanto maior este número, mais pronunciado é o efeito elástico, e que para fluidos newtonianos, $De = 0$.

O tempo característico do escoamento é dependente da geometria onde este ocorre. Por exemplo, no escoamento em um duto de seção circular, o tempo característico é dado por $t_C = R/\langle v \rangle$, onde R é o raio do duto e $\langle v \rangle$ é a velocidade média, sendo este tempo correspondente à inversa da taxa de deformação característica do escoamento $\dot{\gamma}_C = \langle v \rangle/R$.

Na verdade, não existe um único tempo de relaxação para um polímero, mas sim um espectro de relaxação, o que significa que existem cadeias de diferentes tamanhos e conformações, cada qual com seu tempo de relaxação característico. Na definição do número

de Deborah, o tempo de relaxação característico usado pode ser o maior ou o que tem maior importância dentro do espectro, sendo este último a escolha mais adequada do ponto de vista físico.

Outro número adimensional de significado equivalente ao número de Deborah é o número de Weissenberg (We), que é definido pelo produto entre o tempo de relaxação do polímero λ e uma taxa de deformação característica, γ_C .

$$We = \lambda\gamma_C \quad (1.2)$$

Este número surge naturalmente na adimensionalização das equações constitutivas para fluidos viscoelásticos, assim como o número de Reynolds surge na adimensionalização da equação de conservação de quantidade de movimento. Do ponto de vista da definição, não há diferença entre os números de Deborah e Weissenberg. O número de Deborah geralmente é aplicado em problemas transientes, onde há processos de crescimento e relaxação de tensões. Já o número de Weissenberg é usado em problemas estacionários, e pode ser encarado como uma razão entre as tensões elásticas e as tensões viscosas no escoamento (Tucker III, 1989).

Além da viscoelasticidade, uma outra característica reológica dos fluidos poliméricos, e talvez a mais conhecida, é possuir uma viscosidade dependente da taxa de deformação aplicada sobre o material, também conhecida como viscosidade não-newtoniana. Baseado no comportamento da dependência da viscosidade com a taxa de deformação, os fluidos poliméricos, na sua grande maioria, são classificados como fluidos pseudoplásticos (*shear-thinning*), nos quais a viscosidade diminui com a taxa de deformação.

Outra característica marcante destes fluidos, que decorre da viscoelasticidade, é a presença de diferenças de tensões normais em escoamentos por cisalhamento. Em adição às tensões de cisalhamento, estes fluidos apresentam tensões extras ao longo das linhas de corrente, que derivam do estiramento e alinhamento das cadeias poliméricas ao longo das linhas de corrente. Um experimento clássico que permite visualizar este comportamento consiste em submeter dois recipientes, um deles contendo um fluido newtoniano e outro contendo um fluido polimérico, a agitação por meio de um eixo rotatório imerso no fluido. No recipiente contendo o fluido newtoniano, se formará uma depressão junto ao eixo do agitador, devido à força centrífuga. Já para um fluido polimérico, o resultado é contrastante e impressionante. O fluido sobe junto ao eixo do agitador, na direção oposta a esperada. Na Figura 1.1, pode-se visualizar estas duas situações.

Em Bird et al. (1987) e Macosko (1994), pode-se encontrar uma série de experimentos que permitem visualizar diferentes efeitos decorrentes das características reológicas que os fluidos poliméricos apresentam.

O comportamento reológico dos fluidos poliméricos se deve basicamente à sua constituição química. Estes materiais são constituídos por longas cadeias, que podem ser lineares ou ramificadas, com pesos moleculares típicos entre 10000 a 1000000 g/mol. Estas cadeias geralmente estão entrelaçadas, formando estruturas complexas, que apresentam a capacidade de serem modificadas sob a ação de uma tensão, podendo retomar uma posição

atingida em um passado recente após a remoção desta. O número de conformações que podem ser atingidas é algo inimaginável, devido ao grande comprimento e disposição espacial das cadeias de polímero.

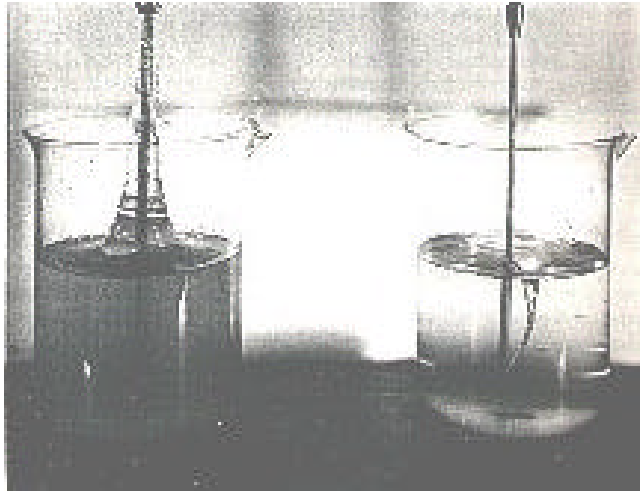


Figura 1.1. Experimento de "rod-climbing". A esquerda pode-se ver o comportamento de um fluido polimérico e a direita o de um fluido newtoniano (Tanner, 1985)

1.2. Funções Materiais

Muitos parâmetros podem influir nas características do escoamento de um fluido. Estes podem ser propriedades físicas do fluido ou parâmetros dependentes de características do movimento, tal como tensão aplicada, velocidade nos contornos, dimensões da geometria, etc.

Dentre o primeiro caso, destaca-se a viscosidade. No caso de fluidos newtonianos, esta propriedade é constante para uma dada pressão e temperatura, e é definida como uma constante material. Sua definição vem da lei da viscosidade de Newton, dada a seguir:

$$\tau_{yx} = \eta \dot{\gamma}_{yx} \quad (1.3)$$

onde τ_{yx} é a tensão de cisalhamento e $\dot{\gamma}_{yx}$ é a taxa de deformação. Os sub-índices x e y , correspondem às direções características do escoamento, sendo x a direção de movimento do escoamento e y a direção de variação do perfil de velocidade.

No caso de fluidos poliméricos, não se pode definir, ou ainda, medir constantes materiais para caracterizar um escoamento (exceto a massa específica), visto que as propriedades do fluido são funções de variáveis tais como a taxa de deformação, tempo, entre

outras. Desta forma, é mais correto definir-se as propriedades físicas dos fluidos poliméricos não como constantes, mas sim como funções materiais.

As funções materiais para fluidos poliméricos podem ser classificadas em duas grandes classes: funções materiais para escoamentos por cisalhamento e funções materiais para escoamentos livres de cisalhamento. Estas funções materiais podem ser dependentes do tempo (em escoamentos transientes) ou não (em escoamentos estacionários). Uma completa apresentação destas funções materiais pode ser encontrada em Bird et al. (1987).

A função material mais conhecida para fluidos poliméricos, característica de escoamentos por cisalhamento, é a viscosidade não-newtoniana $\mathbf{h} = \mathbf{h}(\dot{\mathbf{g}})$, que é definida de forma análoga à definição de viscosidade para fluidos newtonianos.

$$\tau_{yx} = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{yx} \quad (1.4)$$

Para escoamentos por cisalhamento, outras funções materiais de grande interesse são os coeficientes de tensões normais $\Psi_1 = \Psi_1(\dot{\gamma})$ e $\Psi_2 = \Psi_2(\dot{\gamma})$, que relacionam as diferenças de tensões normais $t_{xx} - t_{yy}$ e $t_{yy} - t_{zz}$ no escoamento com a taxa de deformação:

$$N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy} = \Psi_1(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{yx}^2 \quad (1.5)$$

$$N_2 = \tau_{yy} - \tau_{zz} = \Psi_2(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{yx}^2 \quad (1.6)$$

Esta diferença de tensões normais é a responsável pelo fenômeno visualizado na Figura 1.1.

Destas três funções materiais, a viscosidade é a mais fácil de se determinar experimentalmente. Para muitas aplicações de engenharia, esta é a propriedade mais importante dos fluidos poliméricos. Como já citado, estes fluidos são pseudoplásticos, isto é, sua viscosidade diminui com a taxa de deformação aplicada. Sob baixas taxas de deformação, o fluido tem um comportamento newtoniano, tal que a viscosidade nesta região é chamada de “viscosidade a deformação nula” (*zero-shear-rate viscosity*). Aumentando a taxa de deformação, atinge-se um dado valor limite no qual a viscosidade começa a diminuir com o aumento desta. Este valor limite é próprio de cada material, sendo dependente da sua distribuição de pesos moleculares. Este comportamento pode ser visto nas curvas típicas de viscosidade mostradas na Figura 1.2, para diferentes temperaturas, sendo que a viscosidade diminui com o aumento de temperatura, analogamente ao que ocorre com os fluidos de baixo peso molecular no estado líquido em geral.

O primeiro coeficiente de tensões normais tem o mesmo comportamento da viscosidade frente a taxa de deformação. Este parâmetro tem um valor sempre positivo, exceto raras exceções. O segundo coeficiente de tensões normais é mais difícil de ser medido

experimentalmente, e conhece-se pouco sobre valores experimentais deste parâmetro. Sabe-se que este é menor que Ψ_1 em módulo e que sempre é negativo (Bird et al., 1987, Macosko, 1994). Estes dois coeficientes são nulos para fluidos newtonianos.

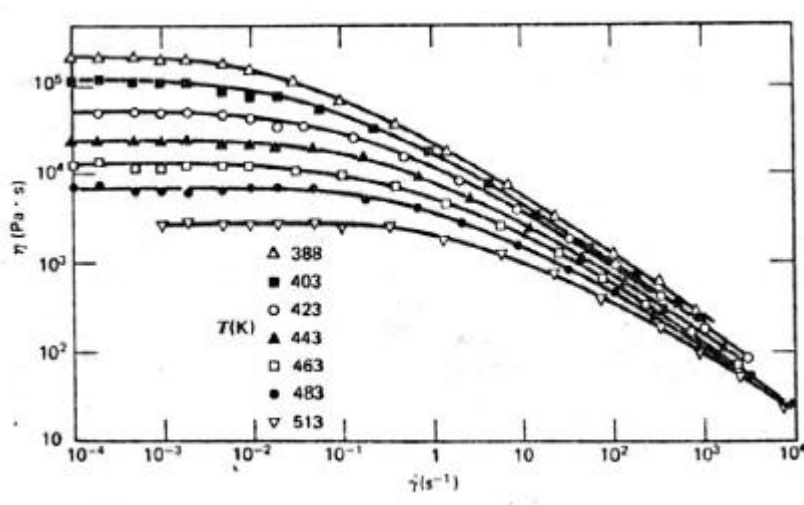


Figura 1.2. Curvas típicas para viscosidade em função da taxa de deformação para fluidos poliméricos (neste caso, polietileno de baixa densidade), sob diferentes temperaturas (Bird et al., 1987).

Em escoamentos livres de cisalhamento, tais como ocorre no processo de produção de filmes por sopro, também podem ser definidas funções materiais. Para escoamentos estacionários, definem-se duas funções viscosidade h_1 e h_2 , que são relacionadas às diferenças de tensões normais:

$$\tau_{zz} - \tau_{xx} = \eta_1(\dot{\epsilon}, b) \dot{\epsilon} \quad (1.7)$$

$$\tau_{yy} - \tau_{xx} = \eta_2(\dot{\epsilon}, b) \dot{\epsilon} \quad (1.8)$$

onde $\dot{\epsilon}$ é a taxa de alongação e b é um parâmetro que define o tipo de escoamento. Por exemplo, em um escoamento alongacional, tem-se $b = 0$; em um escoamento alongacional planar tem-se $b = 1$. Uma descrição destes e outros escoamentos pode ser vista em Bird et al. (1987).

Para $b = 0$, em um escoamento estacionário, tem-se que $h_2 = 0$, e h_1 é definida como a viscosidade alongacional, também chamada de viscosidade extensional. Sob baixas taxas de alongação, esta viscosidade alongacional é constante, e é igual a três vezes a viscosidade à deformação nula para escoamentos por cisalhamento. Com o aumento da taxa de alongação, esta viscosidade aumenta, sendo este comportamento observado para a maioria dos polímeros, sendo que em alguns casos, se tem um comportamento inverso, como para o polietileno de alta densidade, por exemplo (Bird et al., 1987).

1.3. Dinâmica de Fluidos Computacional e fluidos poliméricos

A dinâmica de fluidos computacional, ou CFD (Computational Fluid Dynamics), aplicada à fluidos poliméricos é uma ferramenta que pode ser utilizada para os mais diversos fins na indústria de transformação de polímeros. Pode ser usado, por exemplo, no projeto de equipamentos de processamento de polímeros, evitando a necessidade de execução de experimentos e criação de protótipos em escala de bancada, tarefas que consomem tempo e envolvem altos investimentos. Pode-se também, determinar condições ótimas de operação para equipamentos já existentes, buscando o aumento de produção e/ou melhoria da qualidade do produto.

Outra aplicação possível é no desenvolvimento de novas tecnologias e processos de transformação. Enfim, as possibilidades de uso deste tipo de ferramenta são muitas, e a tendência é que as indústrias de transformação comecem a utilizá-la cada vez mais nos próximos anos em suas atividades.

Para que o emprego desta ferramenta tenha sucesso, é necessário que ela seja confiável, ou seja, represente da melhor forma possível o fenômeno físico. Para garantir esta condição deve-se focar dois aspectos fundamentais.

Em primeiro lugar, deve-se ter um modelo matemático que seja capaz de representar adequadamente a situação a ser estudada. Este consiste nas equações de conservação, em uma equação constitutiva mecânica e condições de contorno. Em relação às equações de conservação praticamente não há problemas, visto que estas já são bem consolidadas. Quanto às condições de contorno, devem ser mais próximas possíveis da situação real, visto que em muitas vezes se tornam necessárias aproximações, que se não forem realistas, levam a resultados errôneos.

O ponto crucial com relação ao modelo matemático é a equação constitutiva mecânica a ser usada. Esta equação estabelece a relação entre o campo de tensões e o campo de velocidades (relação tensão-deformação). Esta relação deve representar adequadamente as características reológicas apresentadas pelo fluido em estudo, que no caso de fluidos poliméricos, foram descritas no item anterior. Existe uma grande variedade de equações constitutivas para estes fluidos, das formas mais simples às mais complexas. Porém, nenhuma destas consegue contemplar toda a gama de características reológicas apresentadas pelos fluidos poliméricos. Não existe uma equação multi-propósito, ou seja, uma equação constitutiva que se aplique a todos os casos, e a seleção de uma equação depende de muitos fatores, os quais são discutidos no capítulo a seguir.

O outro aspecto fundamental, e não de menor importância, é a metodologia de solução das equações. Uma vez obtidas as equações do modelo, estas devem ser então resolvidas. Na grande maioria dos casos, o modelo final consiste em uma ou mais equações diferenciais parciais, sendo que em poucos casos, onde são feitas muitas aproximações, se consegue obter

uma solução analítica. Desta forma se torna necessário obter uma solução aproximada por meio de um método numérico. Este método numérico deve conduzir à uma solução com boa precisão, não consumindo muito tempo e recursos computacionais. Além disso, deve apresentar uma boa robustez e versatilidade. Resumindo, o método deve ter o melhor balanço possível entre estas propriedades, e estar de acordo com os objetivos a serem alcançados pelo seu uso.

1.4. Estrutura da Dissertação

O ponto chave deste trabalho é a utilização da dinâmica de fluidos computacional na solução de problemas envolvendo o escoamento de fluidos poliméricos. Mais especificamente, é proposta uma metodologia numérica para a resolução das equações diferenciais parciais do modelo, baseado no método dos volumes finitos com arranjo colocalizado para as variáveis, usando aproximações de alta ordem para os fluxos médios. São tratados escoamentos incompressíveis e isotérmicos de fluidos newtonianos e não-newtonianos. A estrutura do trabalho, dividido em 7 capítulos, é descrita nos parágrafos a seguir.

No Capítulo 2 são apresentados os pontos fundamentais para a realização do trabalho. A primeira parte enfoca a modelagem do problema, ou seja, as equações a serem resolvidas e os diferentes tipos de equações constitutivas que podem ser utilizadas, assim como características, vantagens e desvantagens de cada grupo. A segunda parte enfoca o procedimento de resolução numérica das equações do modelo, abrangendo todas as etapas, ou seja, discretização, aproximação das variáveis e resolução do sistema de equações algébricas resultante. É dada maior ênfase ao método dos volumes finitos, que é o método usado neste trabalho.

Ainda neste capítulo, é feita uma revisão bibliográfica referente a trabalhos relativos à simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos, destacando a utilização de modelos diferenciais, no qual se enquadra a equação constitutiva a ser utilizada no trabalho. Baseado nesta revisão, é apresentada a proposta e justificativa do trabalho, buscando mostrar quais as vantagens que o uso da metodologia proposta pode trazer.

No Capítulo 3 é descrito em detalhe o modelo matemático, ou seja, as equações a serem resolvidas para os problemas que são tratados nos capítulos subsequentes. O procedimento de adimensionalização das equações também é tratado neste capítulo.

No Capítulo 4 é detalhada a metodologia numérica proposta, enfocando todos os aspectos, dando destaque às aproximações de alta ordem usadas, que é o diferencial deste trabalho em relação aos métodos convencionais.

Nos capítulos subseqüentes são apresentados os resultados obtidos com a metodologia proposta. No Capítulo 5, são tratados problemas envolvendo o escoamento de fluidos newtonianos, mais especificamente, o escoamento de entrada em placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”), o escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”) e o escoamento em cavidade quadrada sob ação de uma placa deslizante (“*lid-driven*”).

No Capítulo 6, são mostrados resultados para fluidos viscoelásticos para dois problemas, que são o escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”) e o escoamento em uma contração plana.

Por fim, no Capítulo 7, são apresentadas as conclusões tiradas neste trabalho e algumas sugestões para trabalhos futuros.

De modo a esclarecer melhor alguns tópicos tratados nos capítulos citados, constam no final do trabalho três apêndices. O Apêndice 1 trata do processo de obtenção das funções de interpolação de alta ordem a serem usadas no trabalho, englobando todos os passos do procedimento. O Apêndice 2 apresenta os erros de truncamento para todas as funções de interpolação de alta ordem apresentadas. Por fim, o Apêndice 3 mostra as equações usadas para a obtenção de valores pontuais ao final do procedimento numérico a partir dos valores médios, via deconvolução.

Capítulo 2 Fundamentos e Revisão Bibliográfica

Neste capítulo são focados todos os fundamentos relativos à modelagem e à simulação de escoamentos de fluidos. Referente à modelagem, são apresentadas as equações que governam o escoamento de fluidos, assim como os diferentes tipos de equações constitutivas mecânicas usadas para descrever o comportamento reológico dos fluidos poliméricos.

Na seqüência, é tratada a etapa de resolução numérica das equações do modelo, usando o método dos volumes finitos. Cada passo deste procedimento é mostrado, e sua aplicação é ilustrada usando uma equação que possui a forma generalizada das equações de transporte, para duas dimensões, em coordenadas cartesianas.

Por fim, é feita uma revisão bibliográfica dos trabalhos na área da simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, dando maior enfoque ao uso de modelos diferenciais e ao emprego do método dos volumes finitos, visto que o presente trabalho se baseia nestes dois aspectos.

2.1. Modelo Matemático

Neste trabalho são considerados apenas escoamentos incompressíveis e isotérmicos de fluidos. Deste modo, o sistema de equações que descreve matematicamente este tipo de escoamento é composto pelas equações de conservação de massa, de conservação de quantidade de movimento linear e por uma equação constitutiva mecânica que descreva a relação entre tensão e deformação. O modelo, além destas equações, deve contemplar ainda as condições de contorno (e iniciais, no caso de problemas transientes) que devem ser satisfeitas pela solução.

As equações a serem resolvidas são mostradas a seguir, utilizando notação vetorial.

Conservação de massa para escoamento incompressível (equação da continuidade):

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \quad (2.1)$$

Conservação de quantidade de movimento linear (equação do movimento):

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} \underline{v} \right) = \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}} - \underline{\nabla} p + \rho \underline{g} \quad (2.2)$$

onde \underline{v} é o vetor velocidade, $\underline{\underline{\tau}}$ é o tensor das tensões, p é a pressão, ρ é a massa específica e \underline{g} a aceleração gravitacional.

Para completar o sistema de equações do modelo necessita-se de uma equação constitutiva. Para fluidos newtonianos, esta equação consiste em uma generalização da Lei da viscosidade de Newton (1.3), para qualquer tipo de escoamento e geometria

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \underline{\underline{\dot{\gamma}}} - \frac{2}{3} \mu \underline{\underline{\nabla}} \cdot \underline{v} \quad (2.3)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica e $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}$ é o tensor taxa de deformação. Neste caso, a viscosidade é constante, não variando com a deformação sofrida pelo fluido. Para fluidos incompressíveis, esta equação reduz-se a:

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \quad (2.4)$$

Como visto no Capítulo 1, fluidos poliméricos possuem um comportamento reológico bem distinto do apresentado por fluidos newtonianos, de modo que a equação dada por (2.3) não pode ser aplicada para estes fluidos. Portanto, para que as características reológicas dos fluidos poliméricos sejam levadas em conta, devem ser utilizadas equações constitutivas apropriadas, assunto a ser explorado no próximo item.

2.2. Equações constitutivas para fluidos poliméricos

Existe um grande número de equações constitutivas mecânicas, que buscam descrever o comportamento reológico dos fluidos poliméricos, pelo menos em parte. Estas equações podem ser enquadradas em diferentes grupos de acordo com a sua forma do ponto de vista matemático e sua capacidade de predição de determinadas funções materiais. São

apresentados a seguir diferentes grupos de equações constitutivas para fluidos poliméricos, e para cada um destes, suas características principais, o tipo de funções materiais preditas e os exemplos mais conhecidos e utilizados na literatura.

2.2.1. Fluido Newtoniano Generalizado (FNG)

Consiste na generalização do modelo de fluido newtoniano para fluidos nos quais a viscosidade é uma função da magnitude do tensor taxa de deformação $\underline{\dot{\gamma}}$.

$$\underline{\tau} = \eta(\dot{\gamma}) \underline{\dot{\gamma}} \quad (2.5)$$

sendo a magnitude $\dot{\gamma}$ dada por

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \sum_i \sum_j \dot{\gamma}_{ij} \dot{\gamma}_{ji}} \quad (2.6)$$

Os modelos para $\eta(\dot{\gamma})$ são empíricos, e uma grande variedade pode ser encontrada na literatura, visto que este modelo é aplicado também a outros tipos de fluidos que apresentam viscosidade dependente da taxa de deformação, como por exemplo, alimentos, suspensões, fluidos biológicos (sangue, por exemplo) entre outros.

O modelo mais simples e mais conhecido para a viscosidade dependente da taxa de deformação é a Lei da Potência (Ostwald, 1925, de Waele, 1923), dada por:

$$\mathbf{h} = m \dot{\mathbf{g}}^{n-1} \quad (2.7)$$

onde m e n são parâmetros dependentes do fluido. Este modelo, por ter uma forma simples, permite a obtenção de soluções analíticas para uma grande variedade de escoamentos destes fluidos.

Outro modelo muito usado é o de Carreau-Yasuda (Carreau, 1968, Yasuda et al., 1981), o qual descreve bem a viscosidade para uma ampla faixa de taxa de deformação.

$$\frac{\eta - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = \left[1 + (\lambda \dot{\gamma})^a \right]^{\frac{n-1}{a}} \quad (2.8)$$

onde a viscosidade a baixas deformações \underline{h}_0 , a viscosidade em altas taxas de deformação \underline{h}_∞ , a constante de tempo \underline{I} , e as constantes n e a são parâmetros característicos do fluido. O modelo original de Carreau considera $a = 2$, sendo este parâmetro introduzido na equação por Yasuda (Bird et al., 1987).

O modelo de fluido newtoniano generalizado tem a deficiência de não predizer os efeitos elásticos característicos dos fluidos poliméricos. Este tem validade apenas para escoamentos estacionários por cisalhamento puro e em taxas de deformação elevadas, dependendo da equação usada para a viscosidade. Devido a estas características e a sua simplicidade, este modelo é muito utilizado em aplicações industriais (estudo de processos de extrusão e injeção), onde os efeitos da viscosidade não-newtoniana têm grande importância no escoamento.

2.2.2. Fluido viscoelástico linear (FVL)

O modelo mais simples para fluido viscoelástico, ou seja, que contempla o caráter viscoso e elástico de um fluido em uma única equação é o modelo para fluido viscoelástico linear.

A primeira equação desenvolvida para descrever o comportamento viscoelástico linear, foi o Modelo de Maxwell (Maxwell, 1867). Esta pode ser encarada como uma combinação das equações de Hooke para sólido elástico e de Newton para a viscosidade, lembrando que ambas são lineares em relação à tensão, na deformação e taxa de deformação, respectivamente:

$$\underline{\tau} + \lambda \frac{\partial \underline{\tau}}{\partial t} = \eta_0 \dot{\underline{\gamma}} \quad (2.9)$$

onde \underline{h}_0 é a viscosidade a taxa de deformação nula e λ uma constante de tempo chamada de tempo de relaxação, que é um tempo característico relacionado à relaxação das tensões nas cadeias poliméricas. Note que, para $\lambda = 0$, recai-se na lei de Newton para a viscosidade.

Este modelo também pode ser escrito na forma integral:

$$\underline{\tau}(t) = \int_{-\infty}^t \left[\frac{\eta_0}{\lambda} e^{-(t-t')/\lambda} \right] \dot{\underline{\gamma}}(t') dt' \quad (2.10)$$

O modelo para fluido viscoelástico linear generalizado é dado por:

$$\underline{\tau}(t) = \int_{-\infty}^t G(t-t') \dot{\underline{\gamma}}(t') dt' \quad (2.11)$$

ou ainda, por:

$$\underline{\underline{\tau}}(t) = - \int_{-\infty}^t \underline{\underline{M}}(t-t') \underline{\underline{\gamma}}(t') dt' \quad (2.12)$$

onde $G(t-t')$ é chamado de módulo de relaxação e $M(t-t')$ é chamada de função memória.

Pode-se ver, por esta forma, que o integrando da tensão depende do produto de dois fatores de naturezas diferentes: um depende da natureza do escoamento ($\dot{\underline{\underline{g}}}(t)$) e outro depende apenas do fluido. As funções $G(t-t')$ e $M(t-t')$ são funções que decrescem monotonicamente, apresentando uma característica de decaimento, ou melhor, relaxação. Para o modelo de Maxwell, equação (2.10), podemos ver que o módulo de relaxação é dado por:

$$G(t-t') = \left[\frac{\eta_0}{\lambda} e^{-(t-t')/\lambda} \right] \quad (2.13)$$

Este modelo contém apenas um modo de relaxação. Para que um maior número de modos de relaxação sejam levados em conta, se utiliza uma função $G(t-t')$ que contemple esta característica, como por exemplo, o modelo de Maxwell generalizado:

$$G(t-t') = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\eta_k}{\lambda_k} e^{-(t-t')/\lambda_k} \quad (2.14)$$

O modelo para fluido viscoelástico linear é válido apenas para pequenas deformações, sendo utilizado no estudo de funções materiais na região de viscoelasticidade linear (escoamentos transientes e estacionários). Estas funções materiais têm estreita relação com a estrutura molecular, sendo que daí decorre a importância deste modelo. Além disso, estas equações são o ponto de partida para o estudo dos modelos viscoelásticos não lineares. Alguns modelos não lineares são generalizações do modelo linear, buscando apresentar uma melhor predição frente a fenômenos físicos, visto que o último não consegue descrever efeitos não lineares, como viscosidade dependente da taxa de deformação e diferença de tensões normais.

2.2.3. Fluido viscoelástico não linear – Modelos diferenciais

Os modelos para fluido viscoelástico não linear permitem descrever, ao menos qualitativamente e em parte, efeitos elásticos e características não lineares, como diferenças de tensões normais e viscosidade não-newtoniana. Existe uma grande variedade de modelos, sendo que cada um é capaz de prever um determinado conjunto de fenômenos, apresentando deficiências em outros. Do ponto de vista matemático, podem se enquadrar em dois grupos:

modelos diferenciais, os quais são descritos por equações diferenciais, e modelos integrais, que são dados por equações integrais. O primeiro grupo é apresentado nesta seção, sendo que os modelos integrais são tratados na seção 2.2.4.

Os modelos diferenciais podem ser obtidos a partir do modelo para fluido viscoelástico linear, na sua forma diferencial. As modificações realizadas consistem na substituição das derivadas em relação ao tempo pela derivada convectiva no tempo e/ou na inclusão de termos não-lineares e parâmetros nas equações. Estes podem também ser derivados a partir da teoria cinética, sendo estes modelos mais satisfatórios em relação a representar o comportamento reológico destes materiais. Alguns dos modelos que são mostrados na seqüência, como o modelo de Oldroyd-B (Oldroyd, 1950), o de Giesekus (Giesekus, 1982) e o de Phan-Thien-Tanner (Phan-Thien, Tanner, 1977), podem ser derivados a partir dos conceitos da teoria cinética.

A definição para a derivada convectiva no tempo do tensor das tensões é dada por:

$$\underline{\underline{\tau}}_{(1)} = \frac{D}{Dt} \underline{\underline{\tau}} - \left\{ \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}}^T \cdot \underline{\underline{\tau}} \right\} - \left\{ \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}} \right\} \quad (2.15)$$

Generalizando, para a derivada convectiva de ordem $n+1$ do tensor das tensões, tem-se:

$$\underline{\underline{\tau}}_{(n+1)} = \frac{D}{Dt} \underline{\underline{\tau}}_{(n)} - \left\{ \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}}^T \cdot \underline{\underline{\tau}}_{(n)} \right\} - \left\{ \underline{\underline{\tau}}_{(n)} \cdot \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}} \right\} \quad (2.16)$$

A definição desta derivada parte do princípio que tensões são produzidas somente quando há deformação do material, e não por simples rotação (Bird et al., 1987, Macosko, 1994).

Estes modelos não estão limitados a pequenas deformações como é o caso do modelo de fluido viscoelástico linear. São modelos mais realísticos, que permitem obter, no mínimo, informações qualitativas em relação a efeitos viscoelásticos lineares e não-lineares em diversos escoamentos, dos mais simples aos mais complexos. Dependendo do modelo usado, pode-se chegar a boa concordância das funções materiais preditas com os valores reais, determinados experimentalmente.

O modelo diferencial mais conhecido e o mais simples, que combina efeitos transientes e não-linearidades, é o modelo UCM (Upper-Convected-Maxwell) (Oldroyd, 1950), obtido pela generalização do modelo de Maxwell que descreve a viscoelasticidade linear, sendo dado pela equação a seguir.

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda \underline{\underline{\tau}}_{(1)} = \eta_0 \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (2.17)$$

As constantes desta equação tem o mesmo significado do modelo linear correspondente. Para pequenas deformações, os termos não lineares desaparecem e a derivada

convectiva se reduz à derivada substantiva e, conseqüentemente, chega-se ao modelo de Maxwell linear.

Outro modelo muito conhecido é o de Oldroyd-B (Oldroyd, 1950), também obtido por generalização do modelo correspondente para fluido viscoelástico linear, no caso, o modelo de Jeffreys.

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda_1 \underline{\underline{\tau}}_{(1)} = \eta_0 \left(\underline{\underline{\dot{\gamma}}} + \lambda_2 \underline{\underline{\dot{\gamma}}}_{(2)} \right) \quad (2.18)$$

sendo $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}_{(2)}$ a derivada convectiva de ordem 2 do tensor da taxa de deformação e λ_2 um segundo tempo de relaxação.

Estes dois modelos são capazes de prever escoamentos transientes e efeitos elásticos, porém preveem viscosidade e coeficientes de tensões normais constantes (independentes da taxa de deformação) e viscosidade elongacional infinita sob determinadas taxas de elongação finitas.

A inclusão de termos não-lineares permite que os modelos também representem estas características, como por exemplo o modelo de White-Metzner (White e Metzner, 1963), que é uma modificação do modelo UCM. É inserida na equação, uma dependência da viscosidade com a magnitude do tensor da taxa de deformação, de forma análoga ao modelo para fluido newtoniano generalizado.

$$\underline{\underline{\tau}} + \frac{\eta(\dot{\gamma})}{G} \underline{\underline{\tau}}_{(1)} = \eta(\dot{\gamma}) \underline{\underline{\dot{\gamma}}} \quad (2.19)$$

onde G é o módulo elástico. A vantagem deste modelo é ser simples e prever razoavelmente a dependência da viscosidade com a taxa de deformação e o primeiro coeficiente de tensões normais. Não é recomendado para escoamentos livres de cisalhamento, já que pode levar a viscosidades elongacionais infinitas, fato ocorrido também no modelo UCM e de Oldroyd-B.

Alguns modelos diferenciais podem ser escritos em uma forma tal que a tensão é encarada como uma soma de duas contribuições, uma newtoniana e uma polimérica. Esta forma também surge naturalmente a partir da teoria cinética para soluções poliméricas concentradas e polímeros fundidos (Bird et al., 1987). Pensando de outra maneira, se tem uma superposição da contribuição do solvente e do polímero no tensor das tensões.

Desta forma, tem-se para o tensor das tensões:

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_N + \underline{\underline{\tau}}_P \quad (2.20)$$

onde $\underline{\underline{\tau}}_N$ corresponde à contribuição newtoniana e $\underline{\underline{\tau}}_P$ à contribuição polimérica. O termo $\underline{\underline{\tau}}_N$ é dado por:

$$\underline{\underline{\tau}}_N = \eta_N \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (2.21)$$

onde $\underline{\underline{h}}_N$ é a contribuição newtoniana para a viscosidade.

Já $\underline{\underline{\tau}}_P$ é dado de acordo com o modelo escolhido. Para o modelo de Oldroyd-B, mostrado anteriormente é dado pela equação (2.18), tem-se a seguinte equação:

$$\underline{\underline{\tau}}_P + \lambda \underline{\underline{\tau}}_{P(1)} = \eta_P \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (2.22)$$

onde a constante $\underline{\underline{h}}_P$ é a contribuição do polímero para a viscosidade e λ é o tempo de relaxação.

Outro modelo bem conhecido, e que traz predições mais realísticas comparado aos anteriores, é o de Giesekus (Giesekus, 1982), que se caracteriza por apresentar termos não lineares dados pelos produtos entre o tensor das tensões. Este é dado pela seguinte equação:

$$\underline{\underline{\tau}}_P + \lambda \underline{\underline{\tau}}_{P(1)} - \alpha \frac{\lambda}{\eta_P} \{ \underline{\underline{\tau}}_P \cdot \underline{\underline{\tau}}_P \} = \eta_P \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (2.23)$$

A constante α é chamada de fator de mobilidade, e está associada com o movimento browniano e arraste hidrodinâmico das moléculas de polímero no meio (Bird et al., 1987). Com este modelo se obtém melhores resultados para escoamentos por cisalhamento, comparado aos mostrados anteriormente, porém, não traz bons resultados em escoamentos livres de cisalhamento (Bird et al., 1987, Macosko, 1994).

Um modelo muito usado em simulações numéricas é o de Phan-Thien-Tanner (Phan-Thien e Tanner, 1977), também chamado de PTT. Este modelo é obtido a partir da teoria de rede de soluções concentradas e polímeros fundidos (“*Network theory of concentrated solutions and melts*”) (Bird et al., 1987). Na sua forma simplificada, chamada de SPTT, que é a mais usada, é dada por

$$\left(1 + \frac{\varepsilon \lambda}{\eta_P} tr(\underline{\underline{\tau}}_P) \right) \underline{\underline{\tau}}_P + \lambda \underline{\underline{\tau}}_{P(1)} = \eta_P \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (2.24)$$

onde $tr(\underline{\underline{\tau}}_P)$ é o traço do tensor $\underline{\underline{\tau}}_P$, que leva em conta a energia elástica da rede e ε é uma constante relacionada a taxa de destruição da viscosidade extensional (Azaiez et al., 1996). Este modelo traz bons resultados para uma grande variedade de escoamentos, porém pode apresentar soluções espúrias em alguns escoamentos, tal como no crescimento de tensões (Macosko, 1994). Além disso, no caso modificado, prediz a segunda diferença de tensões normais igual a zero.

Uma listagem mais completa de modelos para fluido viscoelástico não-linear, com uma maior abordagem, e até mesmo, comparações entre eles, podem ser encontrados em Bird et al. (1987), Macosko (1994) e Larson (1988).

O que se pode notar nos modelos diferenciais é que quanto maior a complexidade do modelo, melhor a sua característica preditiva, porém maior o número de parâmetros. Estes podem ser estimados a partir de experimentos reológicos lineares e não lineares.

Os modelos diferenciais não descrevem muito bem a viscoelasticidade linear, mesmo que este seja o ponto de partida para o desenvolvimento destes modelos. Isto se deve ao fato do modelo ter apenas um tempo de relaxação. Este problema pode ser contornado reformulando a equação passando-a para a forma integral, de forma a incluir mais de uma constante de tempo. A outra opção é realizar uma superposição de modelos, cada qual com uma constante de tempo característica (multi-modos), e tomando a tensão como a soma das contribuições de cada modo. Esta última opção não é muito atraente, pois o número de equações e de variáveis do problema aumenta consideravelmente, tornando inviável a obtenção de soluções numéricas.

2.2.4. Fluido viscoelástico não-linear – Modelos integrais

Estes modelos, assim como os diferenciais, são obtidos a partir da modificação do modelo para viscoelasticidade linear, porém são escritos na forma de uma equação integral.

Os modelos conhecidos como “quasi-lineares” consistem na modificação do modelo linear através da substituição do tensor da deformação infinitesimal $\mathbf{g}(t, t')$ por um dos tensores da deformação relativa, definidos por (Bird et al., 1987):

$$\mathbf{g}_{[0]ij}(r, t, t') = \mathbf{d}_{ij} - \sum_m \frac{\partial x_i}{\partial x'_m} \frac{\partial x_j}{\partial x'_m}, \quad \mathbf{g}^{[0]ij}(r, t, t') = -\mathbf{d}_{ij} + \sum_m \frac{\partial x'_m}{\partial x_i} \frac{\partial x'_m}{\partial x_j} \quad (2.25)$$

onde $r = r(x_1, x_2, x_3)$ é a posição de uma partícula de fluido em um tempo t , t' é um instante de tempo anterior a t e δ_{ij} é o operador delta de Kroenecker.

De acordo com diferentes teorias moleculares e comparações com experimentos, a forma mais apropriada ao uso nos modelos diferenciais é a $\underline{\underline{\gamma}}_{[0]}(t, t')$ (Bird et al., 1987). O significado do uso deste tensor é análogo ao significado do uso da derivada convectiva em modelos diferenciais.

Assim, a forma geral para os modelos integrais quasi-lineares é a seguinte:

$$\underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^t M(t-t') \underline{\underline{\gamma}}_{=[0]}(t, t') dt' \quad (2.26)$$

Onde $M(t-t')$ é a função memória. No limite para pequenos gradientes de deslocamento, a equação se torna igual ao modelo viscoelástico linear. A função memória caracteriza cada tipo de modelo, assim como no caso linear. O modelo de Lodge (Lodge, 1964), que é o mais simples, e análogo ao modelo UCM na forma diferencial, é dado por:

$$M(t-t') = \frac{\eta_0}{\lambda^2} \exp\left[-\frac{t-t'}{\lambda}\right] \quad (2.27)$$

Este modelo corresponde ainda à forma não-linear do modelo de Maxwell para viscoelasticidade linear, dado por (2.10). Suas limitações são as mesmas do seu correspondente na forma diferencial.

Para chegar a modelos não lineares, basta introduzir não linearidades na equação (2.26), como por exemplo invariantes do tensor da deformação de Finger (Bird et al. 1987) na função memória, produtos do termo $\underline{\underline{\gamma}}_{=[0]}(t, t')$, entre outras possibilidades.

Um exemplo, e um dos mais conhecidos, é a equação K-BKZ fatorizada (Kaye, 1962, Bernstein, Kearsley e Zapas, 1963), do qual se derivam diversos modelos. Nestes modelos, a função memória é fatorada por um termo dependente do tempo e um termo dependente da deformação. Dois exemplos são mostrados a seguir. O primeiro é o modelo de Wagner (Wagner, 1979) e o segundo é o modelo PSM (Papanastasiou-Scriven-Macosko), de Papanastasiou et al. (1983).

$$\underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^t \left[\sum_k \frac{a_k}{\lambda_k} e^{-(t-t')/\lambda_k} \right] e^{-\alpha(\beta I_{C^{-1}} + (1-\beta)I_C - 3)^{0.5}} C^{-1}(t') dt' \quad (2.28)$$

$$\underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^t \left[\sum_k \frac{a_k}{\lambda_k} e^{-(t-t')/\lambda_k} \right] \frac{\alpha}{(\alpha-3) + \beta I_{C^{-1}} + (1-\beta)I_C} C^{-1}(t') dt' \quad (2.29)$$

onde a_k e I_k são o coeficiente de módulo de relaxação e o tempo de relaxação do modo k , onde k é um número inteiro finito, α e β são constantes materiais, I_C e $I_{C^{-1}}$ são os primeiros invariantes do tensor de Cauchy-Green C e de sua inversa, o tensor da deformação de Finger C^{-1} , respectivamente. A definição e o significado destes tensores, que são relacionados com o tensor da deformação relativa, podem ser encontrados em Macosko (1994) e Bird et al. (1987).

Estes modelos se caracterizam por incluir a viscoelasticidade linear completamente e têm grande aplicação na simulação de escoamentos viscoelásticos e na determinação de funções materiais. Estes modelos geralmente apresentam melhores previsões quantitativas comparados aos modelos diferenciais, e são mais completos em relação ao número e tipos de funções materiais preditas. Porém, não são perfeitos, pois não predizem corretamente algumas

funções materiais, e alguns modelos, para alguns experimentos, levam a resultados incoerentes do ponto de vista físico. Do ponto de vista numérico, obter soluções com modelos integrais é uma tarefa mais difícil comparado aos modelos diferenciais, porém, levam a melhores resultados.

2.2.5. Seleção de uma equação constitutiva

Foram apresentados, nas seções anteriores, os diferentes grupos de equações constitutivas, e pôde-se ver que nenhuma equação consegue descrever todo o comportamento reológico dos fluidos poliméricos adequadamente. Ou seja, não existe uma equação constitutiva multi-propósito, que permita prever seguramente qualquer uma das características reológicas do fluido e que possa ser empregada em qualquer situação. Existem sim, diferentes tipos de equação, sendo capazes de prever apenas um limitado conjunto de propriedades. Em geral, quanto maior a complexidade de um modelo, maior o número de propriedades previstas, e melhor a qualidade dos resultados obtidos. Porém, o esforço matemático necessário para a resolução do problema aumenta consideravelmente.

Portanto, a escolha de uma equação constitutiva na resolução de um dado problema deve levar em conta todos estes fatores: qual o tipo de função material a ser prevista ou o tipo de função material de maior importância no processo; necessidade da obtenção de resultados qualitativos ou quantitativos; precisão requerida nas previsões; tratamento numérico das equações e esforço computacional requerido para a resolução.

Neste trabalho, são usadas duas equações constitutivas diferenciais. Uma delas é o modelo de Oldroyd-B, e o outro, o modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado. Estes foram escolhidos pelo fato de serem dois dos mais usados na literatura em simulações numéricas. Além do mais, o modelo de Phan-Thien-Tanner é um dos que trazem melhores resultados dentre os modelos diferenciais. Outro motivo, é que estes modelos contém em suas equações os termos não lineares mais comuns que aparecem em modelos diferenciais em geral, de modo que a metodologia a ser desenvolvida seja de fácil extensão ao uso de outras equações constitutivas pertencentes a este grupo.

2.3. Metodologia para resolução numérica do problema

Como visto no início deste capítulo, o modelo matemático consiste nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento ((2.1) e (2.2)) e uma equação constitutiva, escolhida dentre as diversas opções mostradas no item 2.2. Deve ser resolvido assim, um sistema de equações diferenciais parciais não lineares, tal que a solução satisfaça as condições de contorno impostas.

A obtenção de soluções analíticas para estas equações é, na maioria dos casos, impossível ou impraticável, sendo possível apenas para situações onde são feitas diversas aproximações. Para os demais casos se torna necessária a aplicação de um método numérico para a resolução das equações.

Uma vez definido o sistema de equações a ser resolvido, o primeiro passo no procedimento de resolução numérica deste problema é a discretização do domínio e das equações diferenciais. Em outras palavras, as equações diferenciais são aproximadas por um sistema de equações algébricas (simulação estacionária) ou de equações algébrico-diferenciais (simulação transiente), sendo estas localizadas em um conjunto de pontos ou regiões discretas no espaço e no tempo, compondo o que se chama de malha computacional.

O passo seguinte é então a resolução do sistema de equações gerado, obtendo assim os valores para as variáveis nas regiões ou pontos discretos criados pela discretização do espaço ao longo do tempo.

De posse desta solução, pode-se fazer uma análise do problema estudado através do tratamento dos dados e do uso de ferramentas gráficas. No primeiro caso, pode-se citar cálculo de vazões e taxas de transferência, cálculo da função corrente e da vorticidade, forças sobre corpos (arraste, sustentação, etc), entre muitos outros exemplos. No segundo caso, construção de gráficos de curvas ou superfícies de nível, perfis em diferentes regiões do domínio, gráficos animados em problemas transientes, entre outros.

Existem diversos métodos para a discretização de equações diferenciais parciais. Os mais conhecidos e usados em CFD são o método das diferenças finitas, método dos volumes finitos, método dos elementos finitos e método espectral (Maliska, 1995, Ferziger e Peric, 1999, Fletcher, 1988). Cada um destes métodos possui suas vantagens, desvantagens e possibilidades de aplicação, sendo assim difícil afirmar se um deles é melhor que os outros. Neste trabalho, a opção foi pelo método dos volumes finitos, devido às suas características, que são discutidas na seqüência.

O método dos volumes finitos é amplamente usado em Dinâmica de Fluidos Computacional para a solução de problemas de escoamentos compressíveis e incompressíveis, para fluidos newtonianos e não-newtonianos (Patankar, 1980, Maliska, 1995, Ferziger e Peric, 1999). O sucesso deste método se deve à sua característica de manter a conservação das propriedades em nível de volumes elementares, sua robustez, versatilidade e relativa

facilidade de implementação computacional. Pode ser empregado em geometrias simples, com malhas ortogonais e mesmo em geometrias complexas, com malhas não-ortogonais, utilizando a técnica de coordenadas generalizadas. Muitos pacotes comerciais utilizam volumes finitos, como por exemplo o CFX 4 (AEA Technology, 2003) e o Phoenix (CHAM, 2003).

A relação direta do método de discretização com o conceito físico de conservação das propriedades no volume faz com que este seja fácil de ser entendido e assimilado, comparado ao método dos elementos finitos, por exemplo. Deve-se a isto o grande sucesso e utilização deste método por engenheiros em diversas áreas (Versteeg e Malalasekera, 1996, Ferziger e Peric, 1999).

A vantagem principal do método dos volumes finitos em relação à diferenças finitas é o fato do primeiro manter a conservação das propriedades em cada volume. Ainda em comparação a diferenças finitas, o método dos volumes finitos requer um esforço maior para obtenção das funções de interpolação quando se utiliza esquemas de mais alta ordem, especialmente em três dimensões. Isto se deve à necessidade de dois níveis de aproximação no método dos volumes finitos: integração e interpolação.

Nas seções a seguir são melhores exploradas as etapas da metodologia numérica, focada no método dos volumes finitos: discretização, aproximação dos fluxos médios e resolução do sistema de equações resultante.

Para exemplificação da metodologia, é usada a equação (2.30), cuja forma é uma generalização das equações de transporte (massa, quantidade de movimento, energia, etc.). A equação abaixo é válida para um escoamento bidimensional, em coordenadas cartesianas (x , y) e em estado estacionário:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (2.30)$$

onde f é a variável dependente, que pode ser a velocidade (conservação de quantidade de movimento) ou a temperatura (conservação de energia), por exemplo, ρ é a massa específica e Γ é uma propriedade de transporte.

2.3.1. Discretização do espaço e arranjo das variáveis

Para a aplicação do método dos volumes finitos, deve-se primeiro dividir o domínio em um determinado número de volumes elementares ou volumes de controle, ou seja, criar uma malha computacional. Neste trabalho, são usadas somente malhas cartesianas. Deve-se definir então o arranjo das variáveis no volume, ou seja, a localização destas nos volumes.

Existem dois tipos de arranjos usados. Um deles é o arranjo co-localizado, no qual todas as variáveis do problema estão localizadas no centro dos volumes. O outro é o arranjo desencontrado, no qual duas ou mais variáveis estão localizadas em posições diferentes do volume. Para exemplificar os dois arranjos, usamos o problema de escoamento de um fluido newtoniano em duas dimensões, no qual tem-se as duas componentes da velocidade e a pressão como variáveis dependentes. A ilustração destes arranjos são mostrados na Figura 2.1.

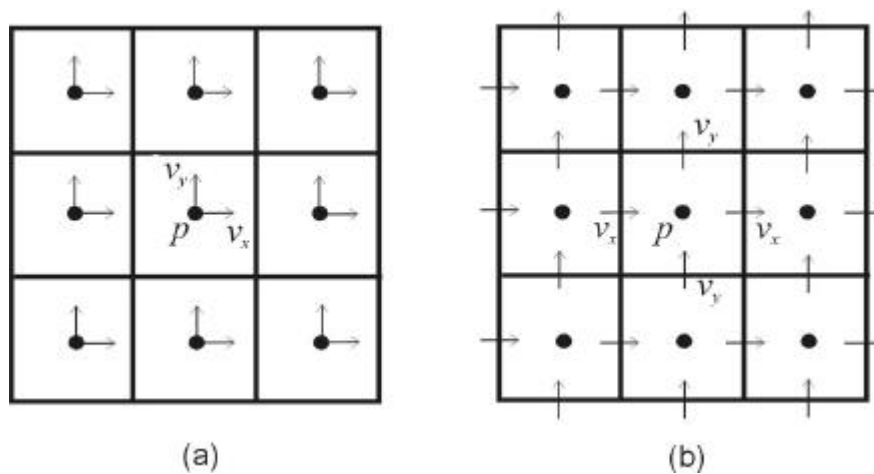


Figura 2.1. Arranjos (a) co-localizado e (b) desencontrado para as variáveis v_x , v_y e p .

A opção natural é o uso do arranjo co-localizado, porém, uma prática comum é utilizar uma malha desencontrada na qual a pressão é localizada no centro do volume e as velocidades nas interfaces do volume.

O uso do arranjo desencontrado foi muito usado durante anos no método de volumes finitos devido ao trabalho pioneiro de Patankar (1980), o qual defendia a idéia de que soluções oscilatórias para a pressão podem ocorrer usando o arranjo co-localizado. Esta possível dificuldade pode ser contornada usando a técnica conhecida por interpolação de momento, idéia desenvolvida por Rhie e Chow (1982), e posteriormente aperfeiçoada por outros autores (Majundar, 1988, Miller and Schmidt, 1988). O método de interpolação de momento consiste em fazer com que a velocidade nas interfaces, necessárias para o cálculo dos fluxos advectivos nestas, dependa das pressões nos volumes vizinhos, “imitando” o arranjo desencontrado. Desta forma, as velocidades nas interfaces são calculadas a partir de uma equação que satisfaça esta condição, obtida a partir das equações de conservação de quantidade de movimento.

Com o arranjo co-localizado, o uso de coordenadas generalizadas se torna mais simplificado, podendo-se estender mais facilmente o uso do método dos volumes finitos a problemas em geometrias mais complexas. A implementação de condições de contorno se torna relativamente mais simples, pois não há problemas de “meios-volumes” próximos ao

contorno. Além do mais, o emprego de técnicas de malhas múltiplas (*multigrid*) só se tornam viáveis usando este tipo de arranjo (Peric et al., 1988).

Outro exemplo de uso do arranjo desencontrado surge na resolução de problemas envolvendo o escoamento de um fluido não-newtoniano, no qual as componentes do tensor das tensões são tomadas como variáveis. Problema similar ao que ocorre com o acoplamento pressão-velocidade pode ocorrer com o acoplamento tensão-velocidade, causando assim, a ocorrência de perfis oscilatórios. Para evitar este problema, as tensões e as velocidades são localizadas em pontos diferentes, assim como é feito para a pressão. Pode-se usar uma metodologia análoga à interpolação de momento para contornar estes problemas com o uso do arranjo co-localizado, como pode ser visto em Oliveira et al. (1998).

Neste trabalho é adotado o arranjo co-localizado, devido aos motivos citados. Toda a abordagem daqui em diante é referente a este tipo de arranjo, apesar de muitos pontos serem análogos para ambos os arranjos.

2.3.2. Discretização das equações

O método dos volumes finitos se baseia na aplicação das leis de conservação em nível de volumes elementares do domínio a ser estudado. Desta forma, o domínio deve então ser dividido em volumes, sendo que para cada um destes são obtidas equações de conservação, que se apresentam na forma de equações algébricas (simulação estacionária) ou equações algébrico-diferenciais ordinárias (simulação dinâmica), e não mais equações diferenciais parciais. Estas equações formam um sistema que deve então ser resolvido para se obter os valores das variáveis desejadas em cada volume.

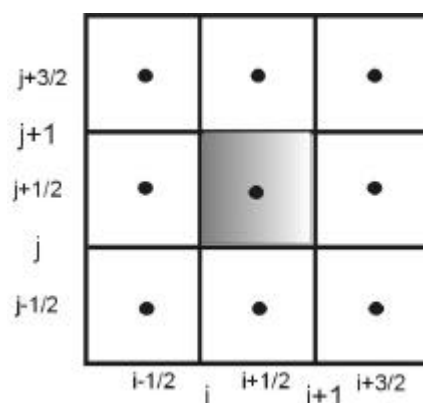


Figura 2.2. Volume elementar genérico e notação dos índices relativos às interfaces e pontos centrais.

A princípio, o conceito de volume se aplica a uma forma em três dimensões. Porém, quando for tratado do método dos volumes finitos, seja em uma ou duas dimensões, as divisões da região discretizada serão sempre tratadas como volumes finitos.

Para ilustrar a etapa de discretização, considere a equação (2.30), a ser discretizada para o volume finito mostrado em destaque na Figura 2.2. A equação de conservação para o volume é obtida partindo da equação na forma diferencial, e integrando-a no volume elementar considerado:

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x \phi) dx dy + \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y \phi) dx dy = \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy \quad (2.31)$$

A resolução das integrais conduz à uma expressão contendo as taxas de transferência advectiva e difusiva nas interfaces. As taxas de transferência nas interfaces i e j do volume considerado na Figura 2.2, paralelas à y e à x , respectivamente, são definidos como:

$$\Delta y \bar{f}^y \Big|_i = \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x_i, y + \alpha) d\alpha \quad (2.32)$$

$$\Delta x \bar{f}^x \Big|_j = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x + \alpha, y_j) d\alpha \quad (2.33)$$

onde $f = \rho v_\xi \phi$ para o transporte advectivo e $f = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi}$ para o transporte difusivo da propriedade ϕ , nas interfaces ortogonais a uma dada direção ξ . As grandezas dadas por $\bar{f}^y \Big|_i$ e $\bar{f}^x \Big|_j$ correspondem aos fluxos médios de f nas interfaces i e j .

De acordo com estas definições, a equação (2.31) pode ser escrita como:

$$\left[\left(\overline{\rho v_x \phi}^y \right)_{i+1} - \left(\overline{\rho v_x \phi}^y \right)_i \right] \Delta y + \left[\left(\overline{\rho v_y \phi}^x \right)_{j+1} - \left(\overline{\rho v_y \phi}^x \right)_j \right] \Delta x = \left[\left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}}^y \right)_{i+1} - \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}}^y \right)_i \right] \Delta y + \left[\left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}}^x \right)_{j+1} - \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}}^x \right)_j \right] \Delta x \quad (2.34)$$

Desta forma, a expressão resultante contém as taxas de transferência advectivas $F_{A(k)} = \left(\overline{\rho v_\xi \phi}^\eta \right)_k \Delta \eta$ e difusivas $F_{D(k)} = \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi}}^\eta \right)_k \Delta \eta$ na interface k , sendo \mathbf{h} a direção paralela e \mathbf{x} a direção ortogonal à interface. A equação (2.34) pode ser rescrita então como:

$$\left[F_{A(i+1)} - F_{A(i)} \right] + \left[F_{A(j+1)} - F_{A(j)} \right] = \left[F_{D(i+1)} - F_{D(i)} \right] + \left[F_{D(j+1)} - F_{D(j)} \right] \quad (2.35)$$

A próxima etapa do método dos volumes finitos é determinar o valor destas taxas nas interfaces, que se resume na determinação dos fluxos médios nas interfaces. Para tanto, deve-se fazer duas aproximações: a primeira consiste em aproximar a integral correspondente ao fluxo médio em termos dos valores de f em um ou mais pontos na interface; na seqüência, os valores de f nestes pontos localizados nas faces devem ser aproximados em termos dos valores das variáveis no centro dos volumes.

Existem diferentes formas de se fazer estas aproximações, tanto para a primeira como para a segunda etapa. São mostradas nos itens a seguir, duas metodologias para as aproximações: a convencional, mais usada em trabalhos que usam o método dos volumes finitos, baseada em aproximações de baixa ordem para os fluxos médios, e uma proposta por Kobayashi (1999), baseada em aproximações de alta ordem para os mesmos fluxos.

2.3.3. Aproximação dos fluxos médios: metodologia convencional

A aproximação mais simples e também a mais usada, consiste em tomar o fluxo médio de f na interface i paralela a direção η como o valor do fluxo no ponto central da interface, sendo que esta é uma aproximação de 2ª ordem.

$$\bar{f}_i = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\eta_j}^{\eta_{j+1}} f d\eta \approx f_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} \quad (2.36)$$

onde $\bar{f}_i = (\overline{\rho v_\xi \phi})_i$ e $\bar{f}_i = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_i$ são, respectivamente, os fluxos advectivo e difusivo médios

na interface i , $f_k = (\rho v_\xi \phi)_k$ e $f_k = \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_k$ são, respectivamente, o valor do fluxo advectivo e difusivo no ponto k da interface i , sendo ξ a direção normal à interface i .

Para se obter uma aproximação de maior ordem na integração, pode-se usar a regra de Simpson, por exemplo, utilizando mais de dois pontos na aproximação. No exemplo abaixo, é feita uma aproximação deste tipo para o fluxo médio em uma fronteira i , utilizando o ponto central e os dois extremos da interface:

$$\bar{f}_i = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\eta_j}^{\eta_{j+1}} f d\eta \approx \frac{1}{6} \left(f_{\eta_{j+1}} + 4f_{\eta_{j+\frac{1}{2}}} + f_{\eta_j} \right) \quad (2.37)$$

Uma vez aproximada a integral, deve-se obter os valores para f_k em termos dos valores das variáveis no centro de um ou mais volumes vizinhos, sendo isto feito por funções de

interpolação. A definição para o valor médio no volume, centrado no volume, de acordo com volume elementar genérico da Figura 2.2, é a seguinte:

$$\bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta y \Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} \phi(x + \beta, y + \alpha) d\alpha d\beta \quad (2.38)$$

Geralmente, o valor da variável no ponto central é considerado igual ao valor médio desta no volume, ou seja, uma aproximação de 2ª ordem.

Os esquemas de interpolação mais utilizados no método dos volumes finitos consistem em aproximações de 1ª ou 2ª ordem para f_k , ou melhor, para as variáveis \mathbf{f} e suas derivadas, assumindo que o campo de velocidades v e as propriedades ρ e Γ são conhecidas em qualquer ponto do domínio. Estas aproximações são usadas juntamente com a aproximação (2.36) para a integral, ou seja, o valor médio na interface é igual ao valor no centro da interface.

Para exemplificar as funções de interpolação que são mostradas a seguir, é considerada a aproximação da variável \mathbf{f} em uma interface $i+1$, paralela à direção y , sendo v_x a velocidade na direção ortogonal à interface.

Os esquemas de interpolação mais simples são o de diferenças centrais de 2ª ordem (CDS – “*central differencing scheme*”) e o upwind (UDS – “*upwind differencing scheme*”) (Patankar, 1980, Maliska, 1995, Ferziger e Peric, 1999).

O esquema UDS consiste em tomar o valor da variável na interface igual ao valor da variável em um dos dois pontos vizinhos, dependendo da direção do escoamento.

$$\begin{cases} \bar{\phi}^y \Big|_{i+1} = \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} & v_x > 0 \\ \bar{\phi}^y \Big|_{i+1} = \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} & v_x < 0 \end{cases} \quad (2.39)$$

Este esquema é muito usado por ter a vantagem de garantir estabilidade incondicional no processo de solução, porém sua limitação é a baixa precisão na aproximação (1ª ordem) e o efeito de difusão numérica (Patankar, 1980, Ferziger e Peric, 1999), mais pronunciado em escoamentos na qual as linhas de corrente estão em uma direção oblíqua à malha.

Uma idéia natural é utilizar uma interpolação linear para obtenção do valor da variável na interface a partir dos valores nos nós vizinhos. Este esquema corresponde ao CDS e tem uma maior precisão (2ª ordem) quando comparado ao UDS, porém pode provocar oscilações na solução e instabilidade numérica em escoamentos dominados por convecção.

$$\bar{\phi}^y \Big|_{i+1} = \frac{1}{2} \left(\bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} + \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.40)$$

A partir deste dois esquemas pode ser gerado um esquema conhecido como híbrido (HDS – “*hybrid differencing scheme*”), no qual, dependendo do número de Reynolds (ou número de Peclet) do volume, é utilizado um ou outro esquema, aproveitando a característica de estabilidade do UDS e de maior precisão do CDS.

O esquema LUDS (“*Linear Upwind Differencing Scheme*”) (Ferziger e Peric, 1999), que é de 2ª ordem, também combina estas características (aproximação *upwind* + 2ª ordem), porém em uma única expressão, usando para tanto dois pontos à jusante ou à montante para a aproximação em uma face.

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\phi}^y|_{i+1} = \frac{1}{2} \left(3\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{1}{2}} - \bar{\phi}^{xy}|_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad v_x > 0 \\ \bar{\phi}^y|_{i+1} = \frac{1}{2} \left(3\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{3}{2}} - \bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{5}{2}} \right) \quad v_x < 0 \end{array} \right. \quad (2.41)$$

Outro esquema muito usado, que traz maior precisão, é o QUICK (“*Quadratic Upwind Interpolative Convection Kinematics*”) (Leonard, 1979), que é de 3ª ordem para malhas uniformes e, toma dois pontos à montante e um a jusante da interface na aproximação, ou vice-versa, dependendo da direção do escoamento.

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\phi}^y|_{i+1} = \frac{6}{8}\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{1}{2}} + \frac{3}{8}\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{3}{2}} - \frac{1}{8}\bar{\phi}^{xy}|_{i-\frac{1}{2}} \quad v_x > 0 \\ \bar{\phi}^y|_{i+1} = \frac{6}{8}\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{3}{2}} + \frac{3}{8}\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{8}\bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{5}{2}} \quad v_x < 0 \end{array} \right. \quad (2.42)$$

Porém, se a aproximação feita para o valor médio na interface é de 2ª ordem, a precisão global do método fica de 2ª ordem, sendo que a diferença entre os resultados obtidos com o uso deste esquema e outro de 2ª ordem citado acima é pequena. Pode-se conseguir uma maior precisão levando em conta também aproximação de termos na direção transversal, como visto em Arampatzis e Assimacopoulos (1994). O número de pontos nodais envolvidos na aproximação é bem maior devido aos termos de derivadas cruzadas que surgem na aproximação de maior ordem. Neste trabalho são mostrados problemas onde o erro relativo entre os resultados para a aproximação convencional e a proposta diferem em até 9%, sendo esta última a melhor.

Apesar dos esquemas LUDS e QUICK melhorarem a precisão dos resultados, trazem problemas de convergência e de estabilidade, resultando na formação de oscilações irreais e “*overshoots*” na solução para determinadas situações (Versteeg e Malalasekera, 1996). É possível que o valor da variável na interface seja maior que nos pontos usados na aproximação, gerando soluções não limitadas. Para aliviar estes efeitos, foram criados esquemas de interpolação chamados de HRS (“*High Resolution Schemes*”), que levam em conta um critério de estabilidade, chamado de CBC (“*Convection Boundedness Criterion*”), criado por Gaskell e Lau (1988). Este tipo de esquema de interpolação tem a característica de

combinar diferentes esquemas em um só, de modo a obedecer o critério citado, evitando assim, a obtenção de soluções com “overshoot” e mantendo a precisão dos esquemas originais. Exemplos destes esquemas, são o SMART (Gaskell e Lau, 1988) e o MINMOD (Harten, 1983). O primeiro aproveita a estabilidade incondicional do UDS e a maior precisão apresentada pelo QUICK, já o segundo, combina as qualidades do UDS, o CDS e do LUDS, respeitando o critério CBC. Estes esquemas levam a uma melhor precisão e qualidade dos resultados, eliminando os inconvenientes trazidos pelos esquemas originais, porém a ordem de aproximação permanece a mesma dos esquemas originais. Outro critério usado para criação de esquemas HRS, praticamente equivalente ao CBC e muito usado na literatura, é o TVD (“*Total Variation Diminishing*”), introduzido por Harten (1983).

Ainda em relação à esquemas de interpolação que evitam a formação de soluções com oscilações em regiões de grande variação, deve-se citar os esquemas ENO (“*Essentially Non-Oscillatory*”) (Harten et al., 1987), usados amplamente no método de diferenças finitas, aplicado em especial à simulação de escoamentos compressíveis. São esquemas de alta ordem, baseados na proposição de diferentes conjuntos de pontos (“stencils”) para aproximação das variáveis, e seleção daquele que evite a utilização de pontos juntos à singularidades. Uma extensão dos esquemas ENO são os esquemas WENO (“*Weighted Essentially Non-Oscillatory*”) (Liu et al., 1994), que consistem em tomar a aproximação como uma combinação convexa das aproximações trazidas por cada um dos conjuntos de pontos possíveis, ao invés de selecionar apenas um conjunto dentre os demais.

Existem também esquemas que levam em conta o número de dimensões do problema, de modo a evitar os erros devido ao uso de esquemas unidimensionais em problemas bidimensionais. Um exemplo, dado por Raithby (1976), é o SUDS (Skew Upstream Differencing Scheme). Este esquema faz com que a interpolação esteja alinhada com a direção do vetor velocidade, e não com as linhas da malha. O inconveniente deste método é sua complexidade, devido as muitas possibilidades de direção e sentido do escoamento e necessidade de diversas interpolações. Além do mais, pode produzir oscilações na solução em malhas mais grosseiras, e devido a todos estes fatores, é pouco utilizado (Ferziger e Peric, 1999).

Para a aproximação dos fluxos difusivos médios (ou ainda, da derivada), geralmente se utiliza diferenças centrais de 2ª ordem:

$$\left. \frac{\partial \phi^y}{\partial x} \right|_{i+1} = \frac{1}{\Delta x} \left(\left. \bar{\phi}^{xy} \right|_{i+\frac{3}{2}} - \left. \bar{\phi}^{xy} \right|_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.43)$$

Esquemas de interpolação de ordem mais elevadas tem sido pouco exploradas no método dos volumes finitos. Um exemplo de esquema de 4ª ordem foi apresentado por Lilek e Peric (1995). Foram feitas comparações entre resultados obtidos com os esquemas UDS e CDS e o esquema de 4ª ordem proposto, usando integração de 2ª e de 4ª ordem na aproximação dos fluxos médios. Para manter a ordem global da aproximação, deve se usar uma aproximação da mesma ordem para a integral no cálculo dos fluxos médios. Para malhas

mais grosseiras, a solução obtida pelo esquema de 4ª ordem apresentou oscilações, e somente em malhas refinadas o esquema de 4ª ordem se mostrou superior.

Para finalizar, pode-se ver que, após aplicar os dois níveis de aproximações, ou seja, dos fluxos médios em termos dos valores das variáveis nas interfaces, e das variáveis nas interfaces em termos das variáveis nos centros dos volumes, as equações discretizadas passam a ser escritas em termos destas últimas.

2.3.4. Aproximação dos fluxos médios: metodologia de alta ordem baseada em valores médios

Uma outra alternativa para a determinação dos fluxos médios nas interfaces é dada por Kobayashi (1999). Estes são obtidos diretamente a partir dos valores médios nos volumes, sendo possível tomar aproximações de qualquer ordem.

Nesta metodologia, os fluxos médios podem ser aproximados por expressões do tipo:

$$\bar{\phi}^y \Big|_i = \sum_{k=0}^m a_k \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\left(k+\frac{1}{2}\right)\Delta x} + \sum_{k=0}^n b_k \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i-\left(k+\frac{1}{2}\right)\Delta x} \quad (2.44)$$

onde m e n dependem da ordem de aproximação desejada. Estes esquemas de interpolação de alta ordem são obtidos pelo seguinte procedimento.

Escolhida a ordem de aproximação, toma-se a expansão em série de Taylor para ϕ em torno de um ponto (x_0, y_0) , truncadas na mesma ordem. Esta aproximação é inserida nas expressões para os fluxos médios, dadas por (2.32), e na expressão para os valores médios nos volumes, dados por (2.38). Estas, por sua vez, são inseridas na função de interpolação, que tem a forma dada por (2.44). São igualados os termos de ambos lados da equação que contenham o mesmo fator comum, e obtém-se assim os valores dos coeficientes a_k e b_k da função de interpolação.

Estes esquemas são chamados neste trabalho de esquemas de interpolação de Lagrange. Os esquemas de interpolação deste tipo a serem usados são apresentados no Capítulo 4, e a metodologia de obtenção dos coeficientes para estes é ilustrada no Apêndice 1.

Durante todo o processo de resolução se trabalha com os valores médios das variáveis no centróide do volume, e não com os valores pontuais, como na metodologia convencional. Estes são obtidos a partir dos valores médios após o final da resolução, na etapa de pós-processamento, por um processo de deconvolução, descrito no Apêndice 3. Esta metodologia simplifica o método como um todo, pois reduz o número de pontos vizinhos na aproximação para uma dada ordem, comparando com esquemas convencionais, e evita a necessidade de

integrações para reconstrução polinomial, o que ocorreria com a utilização de valores pontuais (Kobayashi, 1999, Pereira et al., 2001).

Dentro desta metodologia, podem ser ainda utilizados esquemas compactos, também chamados de esquemas de interpolação de Padé. Os esquemas compactos de interpolação, que por natureza são de alta ordem, surgiram dentro do método de diferenças finitas, para a simulação de escoamentos turbulentos. Estes esquemas, comparados aos esquemas de interpolação tradicionais, levam a uma melhor representação de curtas escalas de comprimento, o que é desejado em simulações numéricas diretas (DNS) de escoamentos turbulentos (Lele, 1992). Esta é uma característica de métodos espectrais, porém, estes são limitados a geometrias e condições de contornos simples. O uso de esquemas compactos leva à uma resolução “tipo” espectral, sendo mais simples de se trabalhar, comparado aos métodos espectrais, e permitindo o uso de geometrias e condições de contorno mais complexas (Lele, 1992, Pirrozoli, 2002).

O interesse no uso deste esquema aumentou a partir do trabalho de Lele (1992), tendo crescido nos últimos anos. Porém, seu uso na metodologia de volumes finitos é ainda pouco explorado, sendo utilizado em problemas de eletromagnetismo por Gaitonde e Shang (1997) e em mecânica de fluidos por Pereira et al. (2001). Uma família de esquemas compactos de ordem par para uso no método dos volumes finitos é apresentada em Kobayashi (1999). Estes esquemas tem uma melhor resolução e melhor precisão global comparados aos esquemas na forma explícita, como os dados por (2.44), com a mesma ordem de precisão. Neste trabalho foi feito ainda um amplo estudo quanto à ordem de precisão, resolução espectral, condições de contorno e estabilidade para os dois tipos de esquema.

O esquema de interpolação compacto é dado por equações do tipo:

$$\sum_{k=1}^m a_k \bar{\phi} \Big|_{i-k\Delta x} + \bar{\phi} \Big|_i + \sum_{k=1}^m a_k \bar{\phi} \Big|_{i+k\Delta x} = \sum_{k=0}^n b_k \bar{\phi} \Big|_{i+\left(k+\frac{1}{2}\right)\Delta x} + \sum_{k=0}^n b_k \bar{\phi} \Big|_{i-\left(k+\frac{1}{2}\right)\Delta x} \quad (2.45)$$

Note que por esta forma geral se obtém apenas esquemas centrados, porém, podem ser obtidos também esquemas “*upwinded*”, ou seja, tomando a aproximação usando mais pontos por um lado do que pelo outro.

Como se tem relações implícitas entre os valores médios na interface e nos centros, para a determinação dos primeiros se necessita resolver um sistema de equações. Porém, pelo fato da matriz resultante apresentar uma estrutura de banda (tridiagonal ou pentadiagonal), não há maiores dificuldades para a resolução, podendo ser empregados métodos específicos que são rápidos e econômicos, como por exemplo o TDMA (“*Tri-Diagonal-Matrix-Algorithm*”) de Thomas (Patankar, 1980).

2.3.5. Solução das equações discretizadas

Após a discretização e aproximação dos fluxos médios, chega-se a um conjunto de equações, que ao serem resolvidas, permitem obter o valor das variáveis nos centros dos volumes, caso usada a metodologia convencional, ou o valor médio das variáveis nos volumes, caso seja usada a metodologia de alta ordem.

O sistema de equações algébricas resultantes é formado por equações não lineares. Pode-se seguir dois caminhos para a resolução deste sistema. Um deles consiste em linearizar as equações e usar um procedimento iterativo (iterações de Picard), no qual um ou mais sistemas de equações lineares são resolvidos a cada iteração, partindo de uma aproximação inicial até que seja obtida a convergência. O outro é aplicar o método de Newton na resolução do sistema não-linear. Em cada iteração deste método, se torna necessário também resolver sistemas de equações algébricas lineares.

Como pode-se ver, qualquer que seja o método utilizado, o ponto chave na resolução do sistema de equações é um eficiente método de solução de sistemas lineares. Estes métodos podem e devem aproveitar a estrutura da matriz das equações do sistema, que geralmente é esparsa, tornando o procedimento de solução mais eficiente. Para casos mais específicos, como matrizes com estrutura de banda, pode-se usar métodos direcionados, como o TDMA de Thomas (Patankar, 1980), típicos para matrizes tridiagonais e podendo ser estendido à matrizes pentadiagonais.

De um modo geral, tem-se duas classes de métodos para a resolução do sistema linear: métodos diretos e métodos iterativos.

Os métodos diretos são os que trabalham com a inversão da matriz completa, nos quais se enquadram a eliminação gaussiana e fatorizações (LU, Cholesky, etc.). Estes métodos são pouco usados em problemas de CFD por ter um custo computacional elevado, sendo proporcional a N^3 , onde N é o número de equações (e variáveis) do sistema.

Os métodos iterativos são baseados na aplicação de um procedimento sistemático, repetido diversas vezes, partindo de um chute inicial e conduzindo à solução desejada. Estes métodos são mais econômicos, pois requerem um número menor de operações e de memória computacional, sendo portanto amplamente usados em CFD, desde que sua convergência seja relativamente rápida. Exemplos são os métodos de Jacobi, Gauss-Seidel, sobre-relaxações sucessivas (uma variação do Gauss-Seidel) e métodos de minimização, como o método dos resíduos generalizado (GMRES), método do gradiente conjugado e seus derivados, tal como o CGSTAB (gradientes conjugados estabilizado), entre muitos outros.

Um outro ponto a ser analisado é a forma como o sistema de equações discretizadas proveniente de problemas de CFD é resolvido: de forma acoplada ou segregada.

No primeiro caso, todas as equações do sistema são resolvidas simultaneamente, o que pode ser feito a princípio de duas maneiras. Pode-se resolver o sistema não-linear diretamente por um método tipo Newton. Neste procedimento, o acoplamento entre as variáveis é garantido, não necessitando tratamento adicional algum, como a geração de novas equações a partir das equações do modelo, usada no procedimento segregado. A outra opção é usar um procedimento iterativo, no qual as equações são linearizadas em torno da solução da iteração anterior, sendo os coeficientes do sistema atualizados a cada iteração.

No procedimento segregado, como o nome já diz, cada sistema de equações é resolvido individualmente, em um processo iterativo, até que se obtenha a convergência. As equações são linearizadas, de forma que são resolvidos apenas sistemas de equações lineares a cada iteração. Na resolução de um sistema para obtenção de uma dada variável, são utilizados os últimos valores calculados das demais variáveis. Na resolução das equações e/ou na atualização das variáveis são usados fatores de relaxação, dos quais o desempenho do método é fortemente dependente. Nesta metodologia se enquadra ainda a formulação pseudo-transiente, no qual o termo dependente do tempo também é discretizado. As equações são resolvidas até que o estado estacionário seja atingido. Esta formulação é totalmente análoga a citada anteriormente, no qual a relaxação tem o papel do passo de tempo, ou seja “amortecer” o processo e conduzir a solução até a convergência.

Ainda em relação ao procedimento segregado, para escoamentos incompressíveis, que correspondem aos problemas a serem resolvidos neste trabalho, surge uma dificuldade adicional, que é a falta de uma equação no sistema para a obtenção da pressão de forma explícita. Esta variável aparece nas equações de quantidade de movimento, que são as quais se resolve para as velocidades, mas não aparece na equação que completa o modelo, que é a equação da continuidade. Para contornar este problema, geralmente obtém-se uma equação de Poisson para a pressão a partir da equação de conservação de massa e das equações do movimento. O objetivo é determinar um campo de pressões que inserido nas equações de conservação de movimento, leve a um campo de velocidades que satisfaça a conservação de massa. É nesta idéia que se baseiam os métodos implícitos de correção de pressão, amplamente utilizados na literatura com o método de volumes finitos. Os principais são o SIMPLE (Patankar e Spalding, 1972), e seus derivados, SIMPLER (Patankar, 1980) e SIMPLEC (Van Doormal e Raithby, 1984), e também o PRIME (Maliska, 1995) e o PISO (Issa, 1986).

A resolução do sistema de forma acoplada é a opção natural. É a metodologia mais robusta e adequada à problemas nos quais as não linearidades são de grande importância, o que é o caso dos problemas em questão, especialmente, quando se resolve equações constitutivas viscoelásticas diferenciais (Fortin e Fortin, 1990). Neste tipo de problema, a formulação segregada pode apresentar problemas de convergência, que são inerentes à sua própria natureza, de tratar de forma não acoplada as equações.

Porém, a metodologia de solução acoplada tem um maior custo computacional envolvido, quando comparado à metodologia segregada, o que fez com que por muitos anos, a última opção fosse usada pela grande maioria da comunidade científica que trabalha com CFD. Contudo, com as maiores capacidades de memória e velocidade de processamento dos

computadores atuais, mesmo em pequenas estações de trabalho, esta desvantagem pode ser menos importante.

Uma comparação entre as duas metodologias pode ser encontrada em Hanby et al., (1996), no qual cada uma se mostrou melhor para determinados problemas. Porém como o próprio trabalho afirma, esta comparação não é conclusiva em relação a decidir qual delas é a melhor, visto que o desempenho de cada uma depende muito do problema e de outros pontos característicos da metodologia. Estes pontos correspondem aos fatores de relaxação utilizados pela aproximação segregada, e no caso da acoplada, o método de solução dos sistemas lineares e escolha da matriz de pré-condicionamento.

2.4. Revisão Bibliográfica

Os primeiros trabalhos na simulação de fluidos viscoelásticos datam da segunda metade da década de 70, havendo um grande crescimento na década de 80. Os métodos numéricos mais utilizados nestes trabalhos são o método das diferenças finitas, método dos volumes finitos e o método dos elementos finitos.

O método das diferenças finitas foi o primeiro a ser empregado, nos trabalhos pioneiros de Crochet e Pilate (1976) e Perera e Walters (1977). Este método continuou a ser explorado nos anos seguintes (Davies et al., 1979, Cochrane et al., 1982, Choi, 1988), mas seu uso foi diminuindo, em favor do método dos elementos finitos e dos volumes finitos.

O método mais utilizado e mais explorado para a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos é o método dos elementos finitos, sendo que os primeiros trabalhos a utilizá-los foram os trabalhos de Kawahara e Takeuchi (1977), Caswell (1979), Crochet e Bezy (1979), Crochet e Keunings (1980) e Viriyayuthakorn e Caswell (1980). Algumas dificuldades foram encontradas nestes trabalhos, que consistiam em instabilidade numérica devido às aproximações usadas para os termos advectivos e na incapacidade de obtenção de soluções quando a elasticidade passa a ter maior importância, ou seja, em números de Weissenberg próximos da unidade. Nos anos subsequentes, passaram a ser usadas diferentes formulações, de modo a contornar os problemas encontrados citados acima. Uma revisão completa de todos os desenvolvimentos que foram feitos a partir destes trabalhos iniciais pode ser encontrada em Crochet et al. (1984) e Keunings (1989). Uma revisão mais atual, que contempla trabalhos em um período posterior a estas primeiras revisões, pode ser encontrada em Baaijens (1998). O desenvolvimento de novas metodologias em elementos finitos para aplicação em escoamentos de fluidos viscoelásticos é um assunto ainda muito explorado, porém não é discutido aqui, visto que este método não foi utilizado no trabalho em questão.

Após o uso dos métodos das diferenças finitas e elementos finitos terem se consolidado na área de simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos, uma nova alternativa passou a ser usada, no início da década de 90. Esta alternativa foi o método dos

volumes finitos, já consagrado nesta época dentro da dinâmica de fluidos computacional para fluidos newtonianos. Era natural que isto acontecesse, devido às diversas vantagens trazidas por este método comparado aos demais, assunto discutido em seções anteriores.

Os primeiros trabalhos usando o método dos volumes finitos (Hu e Joseph, 1990, Yoo e Na, 1991, Sasmal, 1995, Xue et al., 1995) tinham em comum a utilização de funções de interpolação de primeira ordem na aproximação do termo advectivo, a utilização do arranjo desencontrado e de métodos segregados baseados em equações de correção de pressão, como o SIMPLE (Patankar e Spalding, 1972) e o SIMPLER (Patankar, 1980).

Como visto neste capítulo, o arranjo co-localizado possui algumas vantagens em relação ao arranjo desencontrado. Este primeiro também foi empregado, como pode ser visto em Missirlis et al. (1998), utilizando a técnica de interpolação de momento para evitar o problema de oscilações na pressão trazida pelo uso deste tipo de arranjo.

As equações constitutivas usadas nos trabalhos com volumes finitos consistem em modelos diferenciais, tais como o UCM, Oldroyd-B e Phan-Thien-Tanner simplificado. O uso de modelos integrais é escasso, sendo que o único trabalho encontrado na literatura é de Luo (1996). Já no método dos elementos finitos, o uso de modelos integrais é bem mais disseminado.

O método dos volumes finitos passou a ganhar mais espaço, sendo que alguns autores que trabalhavam com este método e o método dos elementos finitos apontavam outras vantagens trazidas pelo método dos volumes finitos, além das já comentadas, que são maior estabilidade numérica, menor quantidade de memória requerida e menor tempo computacional, para soluções com mesma qualidade (Xue et al., 1995, 1999; Luo, 1996).

Geralmente são tratados problemas isotérmicos nos trabalhos citados. Uma metodologia usada para tratar também de problemas não-isotérmicos, com propriedades dependentes da temperatura segundo uma equação WLF (Williams-Landell-Ferry), é dada em Wachs e Clermont (2000).

A maioria dos trabalhos foi focada em geometrias bidimensionais, tais como contração plana e axissimétrica (Yoo e Na, 1991, Sasmal, 1995, Luo, 1996) e expansão plana (Darwish et al., 1992, Missirlis et al., 1998). Soluções para problemas tridimensionais foram obtidas por Xue et al. (1998, 1999), para escoamentos em contrações, na geometria “*stick-slip*” e sobre junções.

Nos trabalhos citados, foram usadas somente malhas ortogonais. Porém, grande parte dos problemas de interesse prático recaem em geometrias mais complexas, onde se torna inviável a utilização de malhas ortogonais. Para estes problemas, deve-se empregar malhas não-ortogonais, usando a técnica de coordenadas generalizadas, ou malhas não estruturadas (Fletcher, 1988, Tucker III, 1989, Maliska, 1995). O trabalho de Huang et al. (1996) foi o primeiro a levar em conta esta idéia, na solução de escoamentos de fluidos viscoelásticos entre cilindros rotativos excêntricos, usando para tanto, malhas estruturadas não-ortogonais.

Em Oliveira et al. (1998) é descrita uma metodologia baseada no arranjo co-localizado de variáveis e em malhas não-ortogonais, sendo utilizadas em diversas situações em trabalhos subsequentes (Oliveira, 2001, Alves et al., 2001). Nesta metodologia é utilizado o método SIMPLEC (Van Doormal e Raithby, 1984), baseado na correção de pressão, para resolução das equações discretizadas, e o método da interpolação de momento para evitar oscilações na pressão devido ao uso do arranjo desencontrado. São encontrados ainda problemas em relação ao acoplamento tensão-velocidade, similares aos trazidos pelo acoplamento pressão-velocidade com o uso do arranjo co-localizado. Para resolver este problema, é proposto um método análogo à interpolação de momento, para a determinação das tensões nas interfaces.

Os trabalhos iniciais, assim como muitos trabalhos posteriores, utilizam os esquemas de interpolação UDS (1ª ordem) e HDS (híbrido UDS+CDS de 2ª ordem). Estes esquemas garantem estabilidade, mas levam a resultados imprecisos, devido aos efeitos de difusão numérica, especialmente quando as linhas de corrente do escoamento não estão alinhadas com a malha. Para obter-se soluções confiáveis, e representar bem alguns detalhes de um escoamento, como por exemplo, formação de vórtices, deve-se usar malhas muito refinadas, consumindo assim, um maior tempo computacional.

Outra opção, de melhor qualidade, é a utilização de funções de interpolação de mais alta ordem (Leonard, 1979, Maliska, 1995, Ferziger e Peric, 1999). Isto pode ser visto nos trabalhos de Oliveira et al. (1998), Oliveira e Pinho (1999) e Oliveira (2001), no qual é utilizado o esquema LUDS. Entretanto, este esquema, assim como o QUICK, apesar de melhorar a precisão dos resultados, apresenta problemas de convergência e estabilidade, ocasionando a formação de oscilações irreais na solução (Versteeg e Malalasekera, 1996). Conforme discutido neste capítulo, o uso de esquemas de interpolação HRS (High Resolution Schemes) contorna estes problemas, ao levar em conta o critério de estabilidade CBC – Convection Boundedness Criterion (Gaskell e Lau, 1988) na interpolação, combinando diferentes esquemas convencionais. Esquemas deste tipo são o SMART (Gaskell e Lau, 1988) e o MINMOD (Harten, 1983), utilizados nos trabalhos de Darwish et al. (1992) e Alves et al. (2000, 2001). Para estes esquemas, são obtidas soluções mais precisas e de melhor qualidade, visto que as deficiências dos esquemas originais desaparecem, porém a ordem de aproximação permanece a mesma dos esquemas que o compõe. Isto pode ser visto, por exemplo, no trabalho de Alves et al. (2000), no qual é mostrado que o uso do esquema MINMOD leva a melhores resultados, comparado ao esquema LUDS, minimizando os problemas de convergência apresentados por este último e melhorando a precisão da solução.

Em Min et al. (2001) foi feito um estudo em relação ao uso de diferentes esquemas de interpolação na aproximação do termo advectivo, em simulações numéricas diretas (DNS – *Direct Numerical Simulations*) de escoamentos turbulentos de fluidos viscoelásticos. Foi verificado que uso de esquemas baseados em diferenças centrais (CDS e compacto de 4ª ordem), livres de difusão numérica, apresentam problemas de convergência, especialmente em números de Weissenberg mais elevados. Os esquemas UDS e AD (“*second-order artificial diffusion scheme*”) garantem estabilidade, mas levam a gradientes muito suavizados, perdendo precisão. Soluções irreais foram obtidas pelos esquemas LUDS e QUICK, devido aos problemas de soluções não-limitadas. O esquema que apresentou melhor desempenho foi o MCUD3 (“*modified third-order compact upwind scheme*”), que consiste em uma

modificação do esquema CUD3 (*“third-order compact upwind scheme”*) (Tolstykh e Lipavskii, 1998), pela introdução de um termo de difusão artificial. Este esquema conduziu a melhores soluções, mantendo a estabilidade, em relação aos demais testados.

Deve-se destacar ainda o uso de métodos híbridos volumes finitos/elementos finitos, que combinam os pontos fortes de cada método, como nos trabalhos de Sato e Richardson (1994), Wapperom e Webster (1998, 1999) e Aboubacar e Webster (2001).

Uma dificuldade presente em todos estes trabalhos, independente do método de discretização, do método iterativo de solução das equações e equações constitutivas utilizadas, é o conhecido HWNP (*“High Weissenberg Number Problem”*). Este consiste na dificuldade de obtenção de soluções em número de Weissenberg ou Deborah elevados (Keunings, 1986, Joseph, 1990). Estes números adimensionais foram definidos no Capítulo 1, sendo dados pela razão entre o tempo característico de relaxação do polímero e um tempo característico do escoamento, sendo que quanto maior este número, mais pronunciado é o efeito elástico.

Em todos os trabalhos é encontrado um valor crítico deste número adimensional, a partir do qual, se torna difícil ou mesmo impossível a obtenção da solução. Este número varia com o problema e com a metodologia numérica empregada. Deve ser citado, que de modo geral, tem-se conseguido atingir mais altos números de Weissenberg em trabalhos usando o método dos elementos finitos. Isto deve-se às diferentes formulações que tendem a estabilizar o método numérico, através do aumento do caráter elíptico da equação do movimento, como por exemplo o SU (*streamline-upwind*) de Marchal e Crochet (1987), o EEME (*explicitly elliptic momentum equation*), de King et al. (1988), o EVSS (*elastic-viscous split-stress*), de Rajagopalan et al. (1990) e o AVSS (*adaptive viscoelastic stress splitting*), de Sun et al. (1996). Isto provavelmente se deve também à forma como as equações aproximadas são resolvidas, ou seja, simultaneamente, o que é mais adequado para problemas onde há forte acoplamento entre as variáveis.

Não existe uma palavra final sobre as causas e soluções para o HWNP, sendo que as diferentes fontes causadoras possíveis são discutidas em Joseph (1990) e Keunings (1986, 1989).

2.5. Proposta da dissertação

Pode-se observar a partir da revisão mostrada acima, que o uso do método dos volumes finitos na simulação do escoamento de fluidos viscoelásticos tem ainda algo a melhorar. Este trabalho propõe então, uma nova metodologia para a resolução das equações governantes de escoamentos de fluidos viscoelásticos, baseada no método dos volumes finitos, usando o arranjo co-localizado de variáveis. São utilizadas equações constitutivas diferenciais, mais especificamente, os modelos de Oldroyd-B e de Phan-Thien-Tanner Simplificado, pelos motivos já citados.

Um dos pontos propostos é a utilização de uma metodologia de alta ordem nas aproximações dos fluxos difusivos e advectivos médios, apresentada no item 2.3.4. A utilização desta metodologia leva a uma melhor precisão dos resultados, possibilitando a utilização de malhas mais grosseiras, comparadas às usadas com outros esquemas, reduzindo assim o tempo computacional exigido. Como os esquemas de aproximação convencionais são de primeira ou segunda ordem, geralmente se necessita de malhas muito refinadas para captar determinadas características do escoamento, como recirculações, mudanças bruscas, entre outros, que são ainda mais reforçadas em presença de uma maior elasticidade do fluido.

É proposto também o uso de um método de solução simultânea das equações discretizadas, sendo que em muitos trabalhos, a dificuldade de convergência apresentada deve-se ao tipo de método numérico empregado para a solução das equações discretizadas, que se baseia na resolução segregada das equações, em um processo iterativo, usando um método para tratamento do acoplamento pressão-velocidade. Isto busca melhorar a convergência e a obtenção de soluções em números de Weissenberg mais elevados.

No capítulo seguinte, é mostrado o modelo matemático para os problemas que são tratados e, na seqüência, é descrita a metodologia numérica proposta para a resolução das equações do modelo. Nos capítulos subsequentes, são apresentados exemplos de aplicação desta metodologia, para escoamentos de fluidos newtonianos e fluidos viscoelásticos.

Capítulo 3 Modelo Matemático

O sistema de equações que descreve matematicamente o escoamento isotérmico e incompressível de um fluido é composto pelas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento linear e por uma equação constitutiva mecânica que descreva a relação entre tensão e deformação. O modelo, além destas equações, contempla ainda condições de contorno e iniciais que a solução deve satisfazer. As equações a serem resolvidas nos problemas mostrados neste trabalho são apresentadas a seguir e, posteriormente, os tipos de condições de contorno utilizadas. Ao final é descrito o procedimento de adimensionalização das equações e das variáveis.

3.1. Equações do modelo

As equações a serem resolvidas são as equações de conservação de massa e quantidade de movimento, mostradas respectivamente a seguir.

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \quad (3.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} \underline{v} \right) = -\underline{\nabla} p + \underline{\nabla} \cdot \underline{\tau} \quad (3.2)$$

onde ρ é a massa específica, \underline{v} é o vetor velocidade, $\underline{\tau}$ é o tensor das tensões e p é a pressão

Para um escoamento bidimensional, em estado estacionário, usando coordenadas cartesianas, têm-se as seguintes equações correspondentes:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad (3.3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \quad (3.4)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \quad (3.5)$$

sendo, que para um escoamento incompressível as equações (3.4) e (3.5) podem ser rescritas como:

$$\rho \frac{\partial v_x}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x} (v_x v_x) + \rho \frac{\partial}{\partial y} (v_y v_x) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \quad (3.6)$$

$$\rho \frac{\partial v_y}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x} (v_x v_y) + \rho \frac{\partial}{\partial y} (v_y v_y) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \quad (3.7)$$

As variáveis são as velocidades na direção x e y , dadas respectivamente por v_x e v_y , a pressão, dada por p , e os componentes do tensor das tensões $\underline{\underline{t}}_{xx}$, $\underline{\underline{t}}_{yy}$ (que são as tensões normais nas direções x e y , respectivamente) e $\underline{\underline{t}}_{xy}$ (que é a tensão de cisalhamento). Deve-se lembrar que, como $\underline{\underline{t}}$ é um tensor simétrico, $\underline{\underline{t}}_{xy} = \underline{\underline{t}}_{yx}$.

No caso onde se tem fluidos viscoelásticos, o tensor das tensões pode ser dividido em duas contribuições, uma newtoniana e uma polimérica:

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_N + \underline{\underline{\tau}}_P \quad (3.8)$$

sendo que a equação de conservação de movimento passa a ser escrita na seguinte forma:

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{\underline{v}}}{\partial t} + \underline{\underline{v}} \cdot \nabla \underline{\underline{v}} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}_N + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}_P \quad (3.9)$$

A contribuição newtoniana é dada por:

$$\underline{\underline{\tau}}_N = \eta_N \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (3.10)$$

Para fluidos newtonianos, a contribuição polimérica é igual a zero. Para fluidos viscoelásticos, esta é dada por uma equação constitutiva que represente adequadamente as suas características reológicas.

Esta formulação é usada por dois motivos. Um deles é que as próprias equações constitutivas podem ser escritas na forma dada por (3.8), como pôde ser visto no Capítulo 2. A outra, e a mais importante, é que a presença do termo da contribuição newtoniana, que é difusivo, estabiliza consideravelmente o procedimento de obtenção da solução. Resolver a

equação na forma (3.2) é muito difícil do ponto de vista numérico, e quase nunca é feita nos trabalhos encontrados na literatura.

De acordo com esta formulação, as equações (3.6) e (3.7) passam a ser escritas da seguinte forma:

$$\rho \frac{\partial v_x}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x}(v_x v_x) + \rho \frac{\partial}{\partial y}(v_y v_x) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \eta_N \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \tau_{xx}^P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}^P}{\partial y} \quad (3.11)$$

$$\rho \frac{\partial v_y}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x}(v_x v_y) + \rho \frac{\partial}{\partial y}(v_y v_y) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \eta_N \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \tau_{yy}^P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}^P}{\partial x} \quad (3.12)$$

Como visto no Capítulo 2, serão usados neste trabalho, os modelos de Oldroyd-B e Phan-Thien-Tanner simplificado (SPTT). Na forma vetorial, estes modelos são dados pela seguinte equação.

$$\underline{\underline{\tau}}_P + \lambda \underline{\underline{\tau}}_{P(1)} + \underline{\underline{\tau}}_P f(\underline{\underline{\tau}}_P) = \eta_P \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \quad (3.13)$$

sendo que, para o modelo de Oldroyd-B, tem-se:

$$f(\underline{\underline{\tau}}_P) = 0 \quad (3.14)$$

e para o modelo SPTT, tem-se

$$f(\underline{\underline{\tau}}_P) = \left(\frac{\lambda \varepsilon}{\eta_P} \text{tr}(\underline{\underline{\tau}}_P) \right) \quad (3.15)$$

Para o escoamento bidimensional, usando coordenadas cartesianas, temos três componentes para o tensor das tensões, e as três equações correspondentes para o modelo SPTT são as seguintes:

$$\left(1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_P} (\tau_{xx}^P + \tau_{yy}^P) \right) \tau_{xx}^P + \lambda \frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{xx}^P) + \lambda \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{xx}^P) - 2\lambda \tau_{xx}^P \frac{\partial v_x}{\partial x} - 2\lambda \tau_{xy}^P \frac{\partial v_x}{\partial y} = 2\eta_P \frac{\partial v_x}{\partial x} \quad (3.16)$$

$$\left(1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_P} (\tau_{xx}^P + \tau_{yy}^P) \right) \tau_{yy}^P + \lambda \frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{yy}^P) + \lambda \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{yy}^P) - 2\lambda \tau_{xy}^P \frac{\partial v_y}{\partial x} - 2\lambda \tau_{yy}^P \frac{\partial v_y}{\partial y} = 2\eta_P \frac{\partial v_y}{\partial y} \quad (3.17)$$

$$\left(1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_P} (\tau_{xx}^P + \tau_{yy}^P)\right) \tau_{xy}^P + \lambda \frac{\partial}{\partial x} (v_x \tau_{xy}^P) + \lambda \frac{\partial}{\partial y} (v_y \tau_{xy}^P) - \lambda \tau_{xx}^P \frac{\partial v_y}{\partial x} - \lambda \tau_{yy}^P \frac{\partial v_x}{\partial y} = \eta_P \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \quad (3.18)$$

As equações para o modelo de Oldroyd-B, são as mesmas dadas por (3.16), (3.17), e (3.18), tomando $\varepsilon = 0$.

3.2. Condições de contorno

Existe uma série de condições de contorno possíveis de ocorrer em problemas práticos, sendo que as mais comuns são mostradas a seguir. Para ilustrar cada uma delas, considere o contorno mostrado na Figura 3.1, sendo “n” a direção normal e “t” a direção tangente ao plano do contorno. A variável v_i corresponde à velocidade na direção i e τ_{ij} à tensão causada por uma força na direção i sobre a superfície normal à direção j .

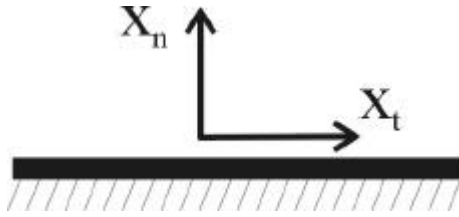


Figura 3.1. Representação do contorno genérico com as direções normal e tangente.

3.2.1. Entrada de massa

Em uma fronteira com entrada de massa tem-se conhecida a velocidade e as tensões em cada ponto a partir de um dado perfil conhecido. Então, os valores das variáveis no contorno podem ser dadas por

$$\{ v_t = 0; v_n = v_{cc}; \tau_{nn} = \tau_{ccnn}; \tau_{tt} = \tau_{cctt}; \tau_{nt} = \tau_{ccnt} \} \quad (3.19)$$

onde v_{cc} , τ_{ccnn} , τ_{cctt} e τ_{ccnt} são valores de velocidade e tensão conhecidos no contorno.

3.2.2. Saída de massa

Geralmente se considera que o escoamento está plenamente desenvolvido na saída (aproximação localmente parabólica). Deve-se buscar impor a fronteira do domínio em uma região na qual a condição citada seja assegurada. Desta forma, tem-se que as derivadas em relação à direção do escoamento são iguais a zero, e as velocidades e as tensões podem ser tomadas como o valor no centro do volume junto à fronteira ou extrapolado dos volumes internos.

$$\left\{ v_t = 0; v_n = v_{cc}; \frac{dv_t}{dn} = 0; \frac{dv_n}{dn} = 0; \tau_{nn} = \tau_{ccnn}; \tau_{tt} = \tau_{ccct}; \tau_{nt} = \tau_{ccnt} \right\} \quad (3.20)$$

onde v_{cc} , τ_{ccnn} , τ_{ccct} e τ_{ccnt} são valores de velocidade e tensão no contorno obtidos por uma dos caminhos citados acima.

3.2.3. Parede (não-deslizamento)

A condição imposta junto à uma parede é a de não-deslizamento. Portanto a velocidade na direção paralela à parede é igual à velocidade com que a parede se move; uma situação especial é onde a parede é fixa, e a velocidade é então nula. Sendo a parede impermeável, a velocidade na direção normal à parede é nula. As derivadas em relação à direção tangente é nula, e pela continuidade, a derivada da velocidade na direção normal em relação à direção normal também é nula.

$$\left\{ v_t = v_{parede}; v_n = 0; \frac{dv_t}{dn} = 0; \frac{dv_n}{dn} = 0; \frac{dv_n}{dn} = 0; \tau_{nn} = \tau_{ccnn}; \tau_{tt} = \tau_{ccct}; \tau_{nt} = \tau_{ccnt} \right\} \quad (3.21)$$

onde v_{parede} é a velocidade com que a parede se move (igual a zero para parede fixa), τ_{ccnn} , τ_{ccct} e τ_{ccnt} são valores de tensão no contorno obtidos ao impor as condições citadas acima na equação constitutiva. A derivada $\frac{dv_t}{dn}$ deve ser aproximada de acordo com a metodologia usada para a aproximação da derivada nos pontos internos, porém tomando pontos por apenas um lado.

3.2.4. Simetria

Em uma linha de simetria não há fluxo de massa, portanto, a velocidade na direção normal é nula. No processo de resolução numérica, as variáveis tal como a velocidade na outra direção, pressão e tensões normais são determinadas usando regras de reflexão em volumes simétricos fictícios. A tensão de cisalhamento é nula neste tipo de contorno.

$$\left\{ v_t = v_{cc}; v_n = 0; \frac{dv_t}{dn} = 0; \frac{dv_n}{dt} = 0; \tau_{nn} = \tau_{ccnn}; \tau_{tt} = \tau_{cctt}; \tau_{nt} = 0 \right\} \quad (3.22)$$

onde v_c , τ_{ccnn} e τ_{cctt} são valores de velocidade e tensão no contorno obtidos pelo método citado acima. A derivada $\frac{dv_n}{dn}$ deve ser aproximada de acordo com a metodologia usada para os pontos internos, porém por pontos de um só lado.

3.3. Adimensionalização das equações

As equações a serem resolvidas devem ser colocadas na forma adimensional, de modo que todas as variáveis tenham a mesma ordem de grandeza. Este procedimento, também chamado de escalonamento, traz uma série de vantagens. Uma delas é a introdução de números adimensionais que representam características importantes do problema, como é o caso do número de Reynolds em mecânica de fluidos, e o número de Weissenberg, em escoamentos de fluidos viscoelásticos. Neste caso, pode-se fazer comparações de um modo mais eficiente quando são variados parâmetros das equações, tal como propriedades físicas. Para exemplificar, considere um problema sob dado número de Reynolds, onde se pode ter diferentes combinações de valores de massa específica, viscosidade, velocidade e comprimento característico. Uma outra vantagem é evitar dificuldades numéricas na resolução das equações do problema, trazidas pela diferença de ordem de grandeza das variáveis. Em outras palavras, o escalonamento melhora o condicionamento da matriz formada pelo sistema de equações algébricas discretizadas, condição necessária para o sucesso na aplicação de métodos para solução de sistemas de equações algébricas.

A adimensionalização das variáveis é feita ao dividi-las por um valor característico, como pode-se ver abaixo.

$$x^* = \frac{x}{L}, y^* = \frac{y}{L}, \underline{\nabla}^* = \frac{\underline{\nabla}}{L}, v^* = \frac{v}{U}, \underline{t}^* = \frac{\underline{t}}{t_0}, \eta^* = \frac{\eta}{\eta_0}, p^* = \frac{p - p_0}{\Delta p_0} \quad (3.23)$$

onde L , U , τ_0 , η_0 , p_0 , Δp_0 são, respectivamente, o comprimento, velocidade, tensão, viscosidade, pressão e queda de pressão característicos. As variáveis adimensionalizadas são indicadas pelo superescrito “*”.

O valor característico para o comprimento é obtido a partir da geometria do problema. Para a velocidade, este é obtido pelas condições de contorno impostas.

Para a queda de pressão e tensão, os valores característicos são determinados a partir de alguns dos demais:

$$\Delta p_0 = \tau_0 = \eta_0 \frac{U}{L} \quad (3.24)$$

A pressão foi adimensionalizada não por seu valor absoluto, mas sim pela sua diferença, que tem um significado físico mais forte. O fator p_0 não altera a forma adimensionalizada das equações, visto que nas equações originais aparecem apenas as derivadas da pressão. Este é apenas um valor de referência, visto que na solução numérica de problemas envolvendo escoamentos incompressíveis não se tem sentido falar em pressões absolutas, apenas em pressões relativas.

Para viscosidade toma-se um valor típico, no caso de fluidos newtonianos o próprio valor da viscosidade. No caso dos fluidos viscoelásticos, este valor é dado pela soma das contribuições newtoniana e polimérica.

$$\eta_0 = \eta_N + \eta_P \quad (3.25)$$

Para fluidos viscoelásticos, surgem ainda duas viscosidades adimensionais, dadas por η_V e η_E :

$$\eta_V = \frac{\eta_N}{\eta_N + \eta_P} \quad (3.26)$$

$$\eta_E = \frac{\eta_P}{\eta_N + \eta_P} \quad (3.27)$$

Estas podem ser vistas como a fração da contribuição de cada parte (newtoniana e polimérica) na viscosidade, sendo que a seguinte relação é válida:

$$\eta_E + \eta_V = 1 \quad (3.28)$$

São introduzidos também números adimensionais característicos dos problemas. Na adimensionalização das equações do movimento, surge o número de Reynolds:

$$\text{Re} = \frac{rUL}{h_0} \quad (3.29)$$

Na adimensionalização de equações constitutivas viscoelásticas, surge o número de Weissenberg:

$$We = \frac{\lambda U}{L} \quad (3.30)$$

Deste modo, ao aplicar as mudanças de variável citadas acima nas equações de conservação, chega-se às seguintes equações adimensionalizadas, a partir de (3.3), (3.11) e (3.12) respectivamente:

$$\frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} = 0 \quad (3.31)$$

$$\text{Re} \left[\frac{\partial v_x^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* v_x^*) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* v_x^*) \right] = -\frac{\partial P^*}{\partial x^*} + (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial^2 v_x^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 v_x^*}{\partial y^{*2}} \right) + \frac{\partial \tau_{xx}^{P^*}}{\partial x^*} + \frac{\partial \tau_{xy}^{P^*}}{\partial y^*} \quad (3.32)$$

$$\text{Re} \left[\frac{\partial v_y^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* v_y^*) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* v_y^*) \right] = -\frac{\partial P^*}{\partial y^*} + (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial^2 v_y^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 v_y^*}{\partial y^{*2}} \right) + \frac{\partial \tau_{yy}^{P^*}}{\partial y^*} + \frac{\partial \tau_{xy}^{P^*}}{\partial x^*} \quad (3.33)$$

Já a partir das componentes da equação constitutiva PTT, dadas por (3.16), (3.17) e (3.18), chegam-se as seguintes equações, que são as mesmas para o modelo de Oldroyd-B, ao fazer $\varepsilon = 0$:

$$\left(1 + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} (\tau_{xx}^{P^*} + \tau_{yy}^{P^*}) \right) \tau_{xx}^{P^*} + We \left[\frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* \tau_{xx}^{P^*}) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* \tau_{xx}^{P^*}) - 2\tau_{xx}^{P^*} \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} - 2\tau_{xy}^{P^*} \frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} \right] = 2\eta_E^* \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} \quad (3.34)$$

$$\left(1 + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} (\tau_{xx}^{P^*} + \tau_{yy}^{P^*}) \right) \tau_{yy}^{P^*} + We \left[\frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* \tau_{yy}^{P^*}) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* \tau_{yy}^{P^*}) - 2\tau_{xy}^{P^*} \frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} - 2\tau_{yy}^{P^*} \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} \right] = 2\eta_E^* \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} \quad (3.35)$$

$$\left(1 + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} (\tau_{xx}^{P^*} + \tau_{yy}^{P^*}) \right) \tau_{xy}^{P^*} + We \left[\frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* \tau_{xy}^{P^*}) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* \tau_{xy}^{P^*}) - \tau_{xx}^{P^*} \frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} - \tau_{yy}^{P^*} \frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} \right] = \eta_E^* \left(\frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} \right) \quad (3.36)$$

Daqui em diante, serão tratadas apenas as equações adimensionalizadas, sendo omitidos os superescritos “*”, por questão de facilidade. Os componentes da contribuição polimérica do tensor das tensões, dados por τ_{ij}^P , serão tratados apenas por τ_{ij} , pela mesma razão.

Capítulo 4 Metodologia Numérica

No Capítulo 2 foi descrita a metodologia básica para a resolução numérica das equações governantes do escoamento de fluidos. Neste capítulo é detalhada a metodologia proposta, em todos seus aspectos, e que é empregada nos exemplos de aplicação nos capítulos subsequentes.

4.1. Discretização das equações

As equações a serem resolvidas, na forma adimensional, foram mostradas no Capítulo 3, mais especificamente no item 3.3. Nesta seção, é descrita a etapa de discretização destas equações, usando o método dos volumes finitos. O arranjo utilizado para as variáveis nos volumes de controle é o arranjo co-localizado, pelas razões já discutidas no Capítulo 2.

A discretização é feita para o volume elementar destacado na Figura 4.1.

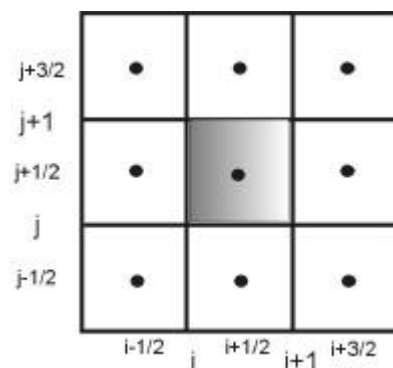


Figura 4.1. Volume elementar genérico e notação dos índices relativos às interfaces e aos pontos centrais

Assim, a partir da discretização da equação de conservação de massa e das equações de conservação de quantidade de movimento nas direções x e y , dadas por (3.27), (3.28) e (3.29), têm-se as seguintes equações discretizadas:

$$\left(\overline{v_x^y} \Big|_{i+1} - \overline{v_x^y} \Big|_i \right) \Delta y + \left(\overline{v_y^x} \Big|_{j+1} - \overline{v_y^x} \Big|_j \right) \Delta x = 0 \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} & \left(\text{Re} \overline{v_x v_x^y} \Big|_{i+1} - \text{Re} \overline{v_x v_x^y} \Big|_i \right) \Delta y + \left(\text{Re} \overline{v_y v_x^x} \Big|_{j+1} - \text{Re} \overline{v_y v_x^x} \Big|_j \right) \Delta x = - \left(\overline{P^y} \Big|_{i+1} - \overline{P^y} \Big|_i \right) \Delta y + \\ & (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial \overline{v_x^y}}{\partial x} \Big|_{i+1} - \frac{\partial \overline{v_x^y}}{\partial x} \Big|_i \right) \Delta y + (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial \overline{v_x^x}}{\partial y} \Big|_{j+1} - \frac{\partial \overline{v_x^x}}{\partial y} \Big|_j \right) \Delta x + \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} & \left(\overline{\tau_{xx}^y} \Big|_{i+1} - \overline{\tau_{xx}^y} \Big|_i \right) \Delta y + \left(\overline{\tau_{xy}^x} \Big|_{j+1} - \overline{\tau_{xy}^x} \Big|_j \right) \Delta x \\ & \left(\text{Re} \overline{v_x v_y^y} \Big|_{i+1} - \text{Re} \overline{v_x v_y^y} \Big|_i \right) \Delta y + \left(\text{Re} \overline{v_y v_y^x} \Big|_{j+1} - \text{Re} \overline{v_y v_y^x} \Big|_j \right) \Delta x = - \left(\overline{P^x} \Big|_{j+1} - \overline{P^x} \Big|_j \right) \Delta x \\ & (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial \overline{v_y^y}}{\partial x} \Big|_{i+1} - \frac{\partial \overline{v_y^y}}{\partial x} \Big|_i \right) \Delta y + (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial \overline{v_y^x}}{\partial y} \Big|_{j+1} - \frac{\partial \overline{v_y^x}}{\partial y} \Big|_j \right) \Delta x + \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\left(\overline{\tau_{yy}^x} \Big|_{j+1} - \overline{\tau_{yy}^x} \Big|_j \right) \Delta x + \left(\overline{\tau_{xy}^y} \Big|_{i+1} - \overline{\tau_{xy}^y} \Big|_i \right) \Delta y$$

Para as equações constitutivas a serem empregadas, ou seja, o modelo SPTT e Oldroyd-B, que são dadas por (3.30), (3.31) e (3.32), sendo $\varepsilon = 0$ para o modelo de Oldroyd-B, tem-se as seguintes equações discretizadas:

$$\begin{aligned} & \overline{\tau_{xx}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} \left(\overline{\tau_{xx} \tau_{xx}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \overline{\tau_{yy} \tau_{xx}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y \right) + \\ & We \left(\overline{v_x \tau_{xx}^y} \Big|_{i+1} - \overline{v_x \tau_{xx}^y} \Big|_i \right) \Delta y + We \left(\overline{v_y \tau_{xx}^x} \Big|_{j+1} - \overline{v_y \tau_{xx}^x} \Big|_j \right) \Delta x - \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$2We \tau_{xx} \frac{\partial \overline{v_x^{xy}}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y - 2We \tau_{xy} \frac{\partial \overline{v_x^{xy}}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y = 2\eta_E \left(\overline{v_x^y} \Big|_{i+1} - \overline{v_x^y} \Big|_i \right) \Delta y$$

$$\begin{aligned}
& \overline{\tau_{yy}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} \left(\overline{\tau_{xx} \tau_{yy}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \overline{\tau_{yy} \tau_{yy}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y \right) + \\
& We \left(\overline{v_x \tau_{yy}^y} \Big|_{i+1} - \overline{v_x \tau_{yy}^y} \Big|_i \right) \Delta y + We \left(\overline{v_y \tau_{yy}^x} \Big|_{j+1} - \overline{v_y \tau_{yy}^x} \Big|_j \right) \Delta x - \\
& 2We \tau_{xy} \frac{\partial v_y}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y - 2We \tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y = 2\eta_E \left(\overline{v_y^x} \Big|_{j+1} - \overline{v_y^x} \Big|_j \right) \Delta x
\end{aligned} \tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}
& \overline{\tau_{xy}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} \left(\overline{\tau_{xx} \tau_{xy}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \overline{\tau_{yy} \tau_{xy}^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y \right) + \\
& We \left(\overline{v_x \tau_{xy}^y} \Big|_{i+1} - \overline{v_x \tau_{xy}^y} \Big|_i \right) \Delta y + We \left(\overline{v_y \tau_{xy}^x} \Big|_{j+1} - \overline{v_y \tau_{xy}^x} \Big|_j \right) \Delta x - \\
& We \tau_{xx} \frac{\partial v_y}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y - We \tau_{yy} \frac{\partial v_x}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y = \\
& \eta_E \left[\left(\overline{v_x^x} \Big|_{j+1} - \overline{v_x^x} \Big|_j \right) \Delta x + \left(\overline{v_y^y} \Big|_{i+1} - \overline{v_y^y} \Big|_i \right) \Delta y \right]
\end{aligned} \tag{4.6}$$

4.2. Aproximação dos fluxos médios

Pode-se ver que as equações discretizadas consistem em expressões que contêm os valores dos fluxos médios nas interfaces e dos valores médios de produtos de variáveis nos volumes. O passo seguinte no procedimento, é expressar estes em termos do valor das variáveis nos volumes, por meio de funções de interpolação.

São usadas neste trabalho as duas metodologias citadas no Capítulo 2: a metodologia convencional e a metodologia de alta ordem baseada nos valores médios. No item 4.2.1 são mostrados os esquemas de interpolação convencionais, usados para comparação com os esquemas de alta ordem derivados no item 4.2.2 e 4.2.3.

Para a exemplificação dos esquemas, são consideradas aproximações para uma interface genérica i paralela a uma direção y e perpendicular à direção do escoamento, que é dada por x , assim como em interfaces no contorno e próximas a este. São consideradas também aproximações para o volume centrado em $i-1/2$. Uma representação de uma fileira de volumes na direção x , contendo os índices referentes às interfaces e aos volumes, usados nos esquemas é dada na Figura 4.2.

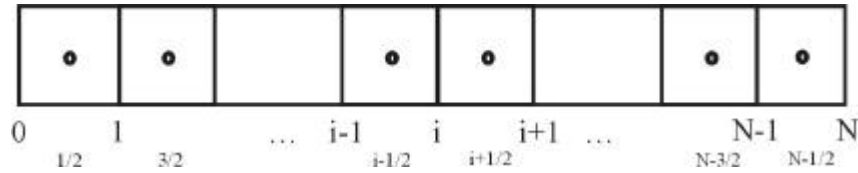


Figura 4.2. Representação dos volumes e das interfaces nas quais são feitas as aproximações dos valores médios, juntamente com os índices correspondentes

Na notação para os fluxos médios e valores médios nos volumes, foram omitidos os índices para a direção y , visto que são considerados apenas aproximações na direção x , sendo que estas não necessitam de pontos na direção ortogonal. Já para aproximações não lineares, assunto discutido no item 4.2.3, como se necessita de informações na direção y , os índices correspondentes a esta direção são mostrados.

4.2.1. Metodologia convencional

Neste caso, é utilizada a aproximação de que o valor do fluxo médio na interface é igual ao valor deste no ponto médio da interface, e de que o valor de uma variável no ponto central do volume é o valor médio no volume (ambas aproximações de 2^a ordem).

Para aproximação dos termos $\bar{\phi}^x|_k$, são utilizados neste trabalho dois esquemas de interpolação convencionais, que foram descritos anteriormente: o esquema CDS e o esquema QUICK, dados respectivamente pelas expressões a seguir.

$$\bar{\phi}^y|_i = \frac{1}{2} \left(\bar{\phi}^{xy}|_{i-\frac{1}{2}} + \bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (4.7)$$

$$\begin{cases} \bar{\phi}^y|_i = -\frac{1}{8} \bar{\phi}^{xy}|_{i-\frac{3}{2}} + \frac{6}{8} \bar{\phi}^{xy}|_{i-\frac{1}{2}} + \frac{3}{8} \bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{1}{2}} & v_x > 0 \\ \bar{\phi}^y|_i = -\frac{1}{8} \bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{3}{2}} + \frac{6}{8} \bar{\phi}^{xy}|_{i+\frac{1}{2}} + \frac{3}{8} \bar{\phi}^{xy}|_{i-\frac{1}{2}} & v_x < 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Para a aproximação dos fluxos difusivos (derivadas), utiliza-se diferenças centrais de 2^a ordem.

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} - \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (4.9)$$

O termo convectivo não-linear $\overline{\phi_1 \phi_2}^\xi \Big|_k$ é linearizado da forma $\overline{\phi_1}^\xi \Big|_k \overline{\phi_2}^\xi \Big|_k$, usando para a aproximação de cada um destes termos a mesma função de interpolação, que é uma das citadas acima.

Para os termos correspondentes aos valores médios dos produtos de variáveis no volume, faz-se um procedimento análogo, ou seja, $\overline{\phi_1 \phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$ é aproximado por $\overline{\phi_1}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \overline{\phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$, sendo cada um destes últimos aproximados pelo valor no centro do volume (aproximação de 2ª ordem).

4.2.2. Metodologia de alta ordem – termos lineares

Neste item, são apresentados os esquemas obtidos pela metodologia de alta ordem baseada em valores médios, dada em Kobayashi (1999), para a aproximação dos fluxos advectivos e difusivos nas interfaces. São mostrados esquemas de interpolação de Lagrange de 3ª ordem e de 4ª ordem e esquemas compactos de 4ª ordem. Algumas funções para estes dois últimos tipos são mostrados também em Kobayashi (1999) e Pereira et al. (2001).

O procedimento de obtenção dos coeficientes das funções de interpolação já foi comentado no Capítulo 2. No Apêndice 1, este procedimento é mostrado de uma forma detalhada, na obtenção dos coeficientes para o esquema Lagrange de 3ª ordem, sendo que para a obtenção dos demais, o procedimento é totalmente análogo.

Para o esquema de 3ª ordem, são tomados, para a aproximação do fluxo advectivo médio em uma interface, o valor médio em dois volumes a montante e um a jusante da interface, de acordo com a direção do escoamento, de modo a ter expressões do tipo:

$$\begin{cases} \overline{\phi}^y \Big|_i = a \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{3}{2}} + b \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} + c \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} + O(h^3) & v_x > 0 \\ \overline{\phi}^y \Big|_i = a \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} + b \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} + c \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} + O(h^3) & v_x < 0 \end{cases} \quad (4.10)$$

Aplicando a metodologia citada, determinam-se os coeficientes a , b e c , que são iguais nas duas situações, e a expressão resultante é dada por:

$$\begin{cases} \overline{\phi}^y \Big|_i = -\frac{1}{6} \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{3}{2}} + \frac{5}{6} \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} + \frac{1}{3} \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} + O(h^3) & v_x > 0 \\ \overline{\phi}^y \Big|_i = -\frac{1}{6} \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} + \frac{5}{6} \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{3} \overline{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} + O(h^3) & v_x < 0 \end{cases} \quad (4.11)$$

Em alguns casos se torna necessário obter os valores médios nas interfaces dos contornos, como por exemplo, a pressão em um contorno onde esta não é especificada. Assim, para os contornos $i = 0$ (leste) e $i = N$ (oeste), de acordo com a Figura 4.2, tem-se:

$$\bar{\phi}^y \Big|_0 = \frac{11}{6} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} - \frac{7}{6} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} + \frac{1}{3} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} + O(h^3) \quad (4.12)$$

$$\bar{\phi}^y \Big|_N = \frac{11}{6} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} - \frac{7}{6} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{3} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} + O(h^3) \quad (4.13)$$

Note que, se o escoamento ocorrer no sentido leste-oeste ($v_x > 0$), no ponto $i = 1$ a aproximação correspondente dada na equação (4.11) não pode ser feita, visto que não existiria o segundo volume à montante da interface. Fato análogo ocorre em $i = N-1$ quando se tem $v_x < 0$. Para se fazer a aproximação nesta interface, pode-se usar a expressão equivalente à direção oposta à do escoamento. Porém, isto pode trazer problemas de estabilidade na obtenção da solução. Uma melhor alternativa seria fazer uma aproximação levando em conta o valor no contorno, que faria o papel do segundo ponto anterior a interface. As expressões correspondentes a esta alternativa, para as interfaces $i = 1$ e $i = N-1$ são dadas logo abaixo.

$$\bar{\phi}^y \Big|_1 = -\frac{1}{2} \bar{\phi}^y \Big|_0 + \frac{5}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} + O(h^3) \quad (4.14)$$

$$\bar{\phi}^y \Big|_{N-1} = -\frac{1}{2} \bar{\phi}^y \Big|_N + \frac{5}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} + O(h^3) \quad (4.15)$$

Para a aproximação do fluxo advectivo médio, pode-se usar também um esquema de 4ª ordem. Para os pontos internos, utilizam-se nas aproximações, dois volumes para cada lado da interface. A aproximação é centrada de modo que os coeficientes sejam simétricos em relação aos volumes, sendo dada por:

$$\bar{\phi}^y \Big|_i = -\frac{1}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} + O(h^4) \quad (4.16)$$

Nas interfaces vizinhas aos contornos, esta aproximação não pode ser feita, pois faltaria um volume em um dos lados. Nestas interfaces, o esquema utiliza 4 volumes, porém um volume por um lado e três volumes pelo outro, como pode ser visto nas aproximações para $i = 1$ e $i = N-1$:

$$\bar{\phi}^y \Big|_1 = \frac{1}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} + \frac{13}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} - \frac{5}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} + \frac{1}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{7}{2}} + O(h^4) \quad (4.17)$$

$$\bar{\phi}^y \Big|_{N-1} = \frac{1}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} + \frac{13}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} - \frac{5}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} + \frac{1}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{7}{2}} + O(h^4) \quad (4.18)$$

No contorno, são tomados quatro volumes próximos para a aproximação. Para os contornos em $i = 0$ e $i = N$, as funções de interpolação são dadas por:

$$\bar{\phi}^y \Big|_0 = \frac{25}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} - \frac{23}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} + \frac{13}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} - \frac{1}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{7}{2}} + O(h^4) \quad (4.19)$$

$$\bar{\phi}^y \Big|_N = \frac{25}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} - \frac{23}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} + \frac{13}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} - \frac{1}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{7}{2}} + O(h^4) \quad (4.20)$$

Para a aproximação dos fluxos difusivos médios, são utilizados esquemas centrados de 4ª ordem, cuja forma é análoga à dos esquemas nas aproximações dos fluxos advectivos médios. Para os pontos internos, tem-se a seguinte função:

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{5}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} - \frac{5}{4} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} + \frac{1}{12} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i-\frac{3}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.21)$$

Para os pontos próximos aos contornos, ou seja, em $i = 1$ e $i = N-1$, onde a aproximação dada acima não se aplica, têm-se as seguintes expressões:

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_1 = \frac{1}{\Delta x} \left(-\frac{5}{3} \bar{\phi}^{xy} \Big|_1 - \frac{1}{2} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} + \frac{23}{9} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} - \frac{4}{9} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} + \frac{1}{18} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{7}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_{N-1} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{5}{3} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-1} + \frac{1}{2} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} - \frac{23}{9} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} + \frac{4}{9} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} - \frac{1}{18} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{7}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.23)$$

Note que as aproximações levam em conta o valor do fluxo advectivo na mesma interface. Para a aproximação nos contornos, tem-se expressões semelhantes, que também fazem uso do valor do fluxo advectivo médio na própria interface.

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_0 = \frac{1}{\Delta x} \left(-\frac{25}{6} \bar{\phi}^{xy} \Big|_0 + \frac{415}{72} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} - \frac{161}{72} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} + \frac{55}{72} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} - \frac{1}{8} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{7}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_N = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{25}{6} \bar{\phi}^{xy} \Big|_N - \frac{415}{72} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} + \frac{161}{72} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} - \frac{55}{72} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} + \frac{1}{8} \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{7}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.25)$$

Nas aproximações dos fluxos advectivos e difusivos médios, podem ser usados também esquemas compactos, que como visto no Capítulo 2, consistem em relações implícitas entre os valores dos fluxos médios nas interfaces, aproximados pelos valores médios nos volumes.

Para a aproximação do fluxo advectivo médio, usando este tipo de esquema, tem-se a seguinte expressão:

$$\frac{1}{4}\bar{\phi}^y \Big|_{i-1} + \bar{\phi}^y \Big|_i + \frac{1}{4}\bar{\phi}^y \Big|_{i+1} = \frac{3}{4} \left(\bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} + \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.26)$$

Note que o valor da variável na face i é calculada a partir dos valores nas faces vizinhas $i+1$ e $i-1$, e dos valores médios nos volumes adjacentes.

Nas interfaces junto aos contornos, a função de interpolação leva em conta o valor em uma interface vizinha, como é visto abaixo, nas aproximações em $i = 0$ e $i = N$.

$$\bar{\phi}^y \Big|_0 + 3\bar{\phi}^y \Big|_1 = \frac{1}{6} \left(17\bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} + 8\bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} - \bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.27)$$

$$\bar{\phi}^y \Big|_N + 3\bar{\phi}^y \Big|_{N-1} = \frac{1}{6} \left(17\bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} + 8\bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} - \bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.28)$$

Para a aproximação dos fluxos difusivos médios, tem-se uma expressão análoga à dos fluxos advectivos médios:

$$\frac{1}{10} \frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_{i-1} + \frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_i + \frac{1}{10} \frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_{i+1} = \frac{1}{\Delta x} \frac{6}{5} \left(\bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} - \bar{\phi}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.29)$$

As aproximações no contorno, além de usarem o valor médio na interface vizinha, utilizam também o valor do fluxo advectivo na própria interface:

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_0 + 6 \frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_1 = \frac{1}{\Delta x} \frac{1}{18} \left(-30\bar{\phi}^y \Big|_0 - 89\bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{1}{2}} + 127\bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{3}{2}} - 8\bar{\phi}^{xy} \Big|_{\frac{5}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_N + 6 \frac{\partial \bar{\phi}^y}{\partial x} \Big|_{N-1} = \frac{1}{\Delta x} \frac{1}{18} \left(30\bar{\phi}^y \Big|_N + 89\bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{1}{2}} - 127\bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{3}{2}} + 8\bar{\phi}^{xy} \Big|_{N-\frac{5}{2}} \right) + O(h^4) \quad (4.31)$$

Como pode-se ver nos esquemas compactos, os valores nas interfaces são dados por relações implícitas, sendo que estes são obtidos pela resolução de sistemas de equações. Afortunadamente, estes sistemas têm a forma tridiagonal e podem ser resolvidos fácil e rapidamente por um método específico, como neste caso, o TDMA de Thomas. Em problemas multidimensionais, as linhas e colunas podem ser resolvidas uma a uma, pelo fato da aproximação não necessitar de valores em volumes na direção ortogonal à face. Deste modo, estas equações devem ser resolvidas juntamente com as equações de conservação discretizadas. Com isto, o tempo computacional exigido no procedimento de resolução utilizando um esquema compacto de interpolação é maior se comparado aos esquemas convencionais, que consistem apenas em relações explícitas entre o valor nas interfaces e os valores nodais.

Além do mais, o uso de esquemas compactos, devido a sua característica de dependência global, como no método espectral, leva à necessidade da inversão de matrizes densas, aumentando o custo computacional na resolução do problema. Para os esquemas de interpolação de Lagrange, as matrizes a serem invertidas são esparsas, sendo que, ao aplicar um método adequado à este tipo de matriz, o esforço computacional exigido é muito inferior ao necessário para as matrizes cheias obtidas com o uso do esquema compacto.

Deve-se citar ainda que os esquemas compactos possuem uma melhor qualidade de aproximação comparados aos esquemas Lagrange, sendo que comparações neste sentido, entre estes dois tipos, para esquemas de ordem par (4^a , 6^a , 12^a), podem ser encontrados em Kobayashi et al. (1999).

Os termos de truncamento para todas as funções de interpolação mostradas neste item são dadas no Apêndice 2.

4.2.3. Metodologia de alta ordem – termos não lineares

No item anterior, foram apresentados esquemas de 3^a e 4^a ordem, tipo Lagrange e Pade, para a aproximação dos fluxos advectivos e difusivos médios, sendo todos estes termos lineares. Neste item são apresentadas as aproximações para os termos não lineares que surgem na discretização das equações.

Na equação de conservação de quantidade de movimento na direção x , surge por exemplo, o termo advectivo $\overline{v_x v_x}^y \Big|_i$, entre outros similares. Na equação constitutiva, aparecem muitos termos não-lineares, como por exemplo, na equação para a componente τ_{xx} do tensor das tensões, os termos $\overline{v_x \tau_{xx}}^y \Big|_i$, $\overline{\tau_{xx} \tau_{xx}}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$ e $\overline{\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x}}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$.

Para estes tipos de termos, a aproximação é um pouco mais elaborada. A idéia básica é análoga à da aproximação pela metodologia convencional, que consiste em tomar a aproximação $\overline{\phi_1 \phi_2}^\xi \Big|_k$ em uma interface, pelo produto das aproximações de cada termo, ou seja $\overline{\phi_1}^\xi \Big|_k \overline{\phi_2}^\xi \Big|_k$. Ou ainda, aproximar a média do produto de variáveis no volume $\overline{\phi_1 \phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$, pelo produto das médias, ou seja, $\overline{\phi_1}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \overline{\phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$.

Porém, se comparadas as expansões em séries de Taylor para as aproximações, como por exemplo, entre $\overline{\phi_1 \phi_2}^\xi \Big|_k$ e $\overline{\phi_1}^\xi \Big|_k \overline{\phi_2}^\xi \Big|_k$, pode-se ver que há uma diferença correspondente a termos de 2ª ordem, sendo então esta a ordem de aproximação, independente da ordem usada na aproximação de cada um dos termos. Deste modo, se forem usados esquemas de alta ordem na aproximação dos fluxos médios lineares, se necessita de uma aproximação de maior ordem para estes termos não-lineares, para manter assim a ordem global desejada na aproximação.

Tem-se então, nas equações discretizadas mostradas no item 4.1, dois tipos genéricos de aproximações para os termos não lineares, que são os seguintes:

$$\overline{\phi_1 \phi_2}^y \Big|_i = \overline{\phi_1}^y \Big|_i \overline{\phi_2}^y \Big|_i + O(h^2) \quad (4.32)$$

$$\overline{\phi_1 \phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \overline{\phi_1}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \overline{\phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + O(h^2) \quad (4.33)$$

A partir das comparações entre as expansões em série de Taylor das aproximações dos termos do dois lados das equações (4.32) e (4.33), são determinados os termos de 2ª ordem. Truncando as aproximações em 4ª ordem, tem-se as seguintes expressões:

$$\overline{\phi_1 \phi_2}^\xi \Big|_i = \overline{\phi_1}^\xi \Big|_i \overline{\phi_2}^\xi \Big|_i + \frac{\Delta y^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) + O(h^4) \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \overline{\phi_1 \phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} &= \overline{\phi_1}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \overline{\phi_2}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial x} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) + \\ &\frac{\Delta y^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) + O(h^4) \end{aligned} \quad (4.35)$$

onde x_0 e y_0 são os pontos no qual é tomada a expansão em série de Taylor.

A idéia então, é obter uma aproximação para estes termos de 2ª ordem que resultam da diferença entre as aproximações, de modo que se tenha uma precisão de 4ª ordem. Esta

metodologia foi introduzida por Pereira et al. (2001), para aproximação dos termos advectivos da equação do movimento, como $\overline{v_x v_x^y} \Big|_k$ e $\overline{v_y v_x^x} \Big|_k$, por exemplo. Neste item, é feita uma abordagem para aproximações de termos não lineares de uma forma mais geral.

Deve-se buscar então, uma aproximação para os termos $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$ e $\left(\frac{\partial \phi_2}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$,

no caso do fluxo não linear médio na interface, onde (x_0, y_0) corresponde ao ponto médio da interface. Para as médias nos volumes, devem ser tomadas aproximações para os termos $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$, $\left(\frac{\partial \phi_2}{\partial x} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$, $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$ e $\left(\frac{\partial \phi_2}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$, onde (x_0, y_0) é o ponto correspondente ao centróide do volume.

Para tanto, utilizam-se os valores médios em volumes vizinhos ou fluxos médios nas interfaces vizinhas. Para manter a ordem das demais aproximações, pode-se utilizar uma aproximação de 2^a ordem.

Para a aproximação do termo $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right)$ na interface i , tem-se a seguinte expressão:

$$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) = \left(a \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} + b \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + c \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} + d \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \right) \quad (4.36)$$

Para a derivada de \mathbf{f}_2 , a aproximação é análoga. Com o mesmo procedimento aplicado na determinação dos coeficientes para a aproximação dos fluxos lineares, já descrito anteriormente, a aproximação (4.36) fica igual a:

$$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \Big|_{(x_0, y_0)} \right) = \left(\frac{1}{4} \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} \right) \quad (4.37)$$

Desta forma, a aproximação para o termo não linear dado por (4.34) fica igual a:

$$\begin{aligned} \overline{\phi_1 \phi_2^y} \Big|_{i+1} &= \overline{\phi_1^y} \Big|_{i+1} \overline{\phi_2^y} \Big|_{i+1} + \frac{1}{192} \left(\overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} - \overline{\phi_1^{xy}} \Big|_{i+\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} \right) \\ &\left(\overline{\phi_2^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \overline{\phi_2^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \overline{\phi_2^{xy}} \Big|_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} - \overline{\phi_2^{xy}} \Big|_{i+\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} \right) + O(h^4) \end{aligned} \quad (4.38)$$

Note que se as variáveis não variam ao longo da direção y , a correção dada não é necessária, sendo $\overline{\phi_1 \phi_2^\xi} \Big|_k = \overline{\phi_1^\xi} \Big|_k \overline{\phi_2^\xi} \Big|_k$.

Para os termos necessários à aproximação dos termos não lineares médios nos volumes, o procedimento de obtenção é totalmente análogo, ou seja, são obtidas as aproximações para as derivadas de ϕ_1 e ϕ_2 no ponto (x_0, y_0) , e inseridas em (4.35).

4.3. Condições de contorno

Um ponto importante na etapa de aproximação das equações é a imposição das condições de contorno. Os tipos de condição de contorno que são encontradas nos exemplos mostrados nos capítulos seguintes foram mostrados no Capítulo 3. O modo como estas condições são impostas é tratado neste item.

Em contornos onde tem-se os fluxos advectivos e/ou difusivos especificados, como por exemplo, as velocidades em uma parede fixa ou em uma fronteira com entrada de massa, os valores conhecidos são inseridos diretamente na equação discretizada.

Em contornos onde não são conhecidos os valores de determinadas variáveis, como por exemplo a pressão, ou a velocidade em uma linha de simetria tangente à direção da velocidade, o valor das variáveis são extrapolados a partir de volumes internos usando algum dos esquema mostrados no item 4.2. As derivadas (fluxos difusivos), quando não conhecidas, também são calculadas de forma análoga.

A imposição de condição de contorno de pressão em escoamentos incompressíveis é algo que deve ser comentado. A princípio, só há sentido falar em diferenças de pressão, e não no valor absoluto desta no domínio. Porém, o valor da pressão pode ser especificado em algum ponto do domínio, de modo que a pressão nos demais pontos sejam relativas a este valor. Na metodologia que foi empregada, quando foram resolvidos problemas envolvendo entrada e saída de massa, teve-se problemas de convergência devido à dificuldade de estabelecer um nível de pressão. Para contornar esta dificuldade nestes problemas, a pressão em uma das interfaces no contorno de saída de massa foi especificada, o que resolveu de forma total o problema. Em escoamentos onde estes tipos de condição de contorno inexistiam, não houveram problemas em relação a este assunto.

As equações constitutivas têm característica hiperbólica, sendo que em escoamentos com entrada de massa em um dos contornos, condições para as componentes do tensor das tensões são impostas apenas nesta fronteira. Geralmente se tem um perfil uniforme ou correspondente ao do escoamento plenamente desenvolvido. Neste último caso, os perfis são obtidos a partir das próprias equações constitutivas e da equação de conservação de quantidade de movimento. Para o modelo de Oldroyd-B, estes podem ser obtidos analiticamente. Já para o modelo de Phan-Thien-Tanner, por ser mais complexo, os perfis são obtidos numericamente, ao se resolver o problema de escoamento em placas paralelas e tomar o perfil completamente desenvolvido na saída das placas. Como condições de contorno na entrada deste escoamento, utiliza-se os perfis correspondentes ao modelo de Oldroyd.

4.4. Solução das equações discretizadas

Feita a discretização das equações e as aproximações dos fluxos médios nas interfaces, chega-se a um sistema de equações algébricas não lineares (simulação estacionária), que ao ser resolvido, traz como resultado o valor médio das variáveis nos volumes. Pelos motivos citados no Capítulo 2, as equações serão resolvidas simultaneamente, ou seja de forma acoplada.

Para tanto, é utilizado o método de Newton. Este método consiste em obter o valor de x , solução de um sistema dado por $F(x) = 0$, através de um processo iterativo, na seguinte forma:

$$J(x^k)\delta x = -F(x^k) \quad (4.39)$$

$$x^{k+1} = x^k + \delta x \quad (4.40)$$

onde x^k é o vetor das incógnitas na iteração k e $J(x^k)$ é a matriz Jacobiana do sistema avaliada em x^k . Esta matriz é calculada via perturbação por diferenças finitas, sendo mantida fixa por um determinado número de iterações.

Note que em cada iteração é necessário resolver um sistema de equações lineares, para a determinação do vetor correção δx . Neste trabalho, estes sistemas foram resolvidos por um método direto, mais especificamente, por fatoração LU.

O critério de convergência usado foi o seguinte:

$$\frac{\rho_k}{1-\rho_k} \|x^k - x^{k-1}\|_w < 0.33 \quad (4.41)$$

onde

$$\|x\|_w = \sqrt{\frac{1}{N} \sum \left(\frac{x_i}{w_i} \right)^2} \quad (4.42)$$

sendo w_i o vetor peso, dependente da tolerância absoluta $atol$ e relativa $rtol$ usadas:

$$w_i = rtol \left| \tilde{x}_i \right| + atol \quad (4.43)$$

onde \tilde{x}_i é um valor representativo de x_i . Os valores usados para as tolerâncias foram $atol = rtol = 1 \times 10^{-8}$. A taxa de convergência r_k , tal que $0 < r_k < 1$, é definida por:

$$\rho_k \approx \left(\frac{\|x^k - x^{k-1}\|_w}{\|x^1 - x^0\|_w} \right)^{1/k} \quad (4.44)$$

Para finalizar, há um comentário que deve ser feito. Como dito no Capítulo 2, métodos diretos são pouco usados em problemas de mecânica de fluidos computacional, pelo fato de terem um custo computacional maior. A opção de utilizar um método direto neste trabalho deveu-se à disponibilidade de um código computacional já existente, visto que o foco principal do trabalho é a metodologia para discretização e aproximação das equações. Desta forma, como será visto mais adiante, o ponto chave para tornar a metodologia apresentada competitiva com as demais existentes, em relação ao esforço computacional necessário, será um eficiente método para solução dos sistemas lineares, como por exemplo, um método iterativo com pré-condicionamento.

Capítulo 5 Resultados para Fluidos Newtonianos

Neste capítulo são apresentados alguns resultados para escoamentos de fluidos newtonianos, com o objetivo de testar a metodologia apresentada no capítulo anterior. São feitas comparações entre os diferentes esquemas de interpolação citados no capítulo anterior. Três problemas clássicos em dinâmica de fluidos computacional são estudados:

- escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”) ou escoamento de entrada;
- escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”);
- escoamento em uma cavidade quadrada sob ação de uma placa deslizante no topo (“*lid-driven*”).

Estes escoamentos, apesar de serem simples, trazem diversas dificuldades numéricas na obtenção de soluções, como é visto mais adiante. Devido a isto, estes são considerados problemas “*benchmark*” para testes de metodologias numéricas e esquemas de interpolação.

Muitos aspectos da metodologia são avaliados, utilizando estes três problemas como exemplos. No item 5.1 são apresentados resultados para o problema do escoamento “*slip-stick*”, em 5.2, o mesmo para o problema do escoamento “*stick-slip*”, e finalmente em 5.3 para o escoamento em cavidade quadrada.

5.1. Escoamento “*Slip-Stick*”

Este problema consiste no escoamento de um fluido entre duas placas paralelas (“*stick*”) precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip*”), onde há condição de deslizamento nos contornos. Este problema tem como característica principal a presença de uma singularidade junto à parede na entrada das placas (junção *slip-stick*), no qual a tensão seria teoricamente infinita. A condição de contorno muda bruscamente, e a aproximação das variáveis nesta região é dificultada, especialmente pela presença de saltos nos perfis das variáveis.

Uma representação esquemática da geometria deste escoamento é mostrada na Figura 5.1.

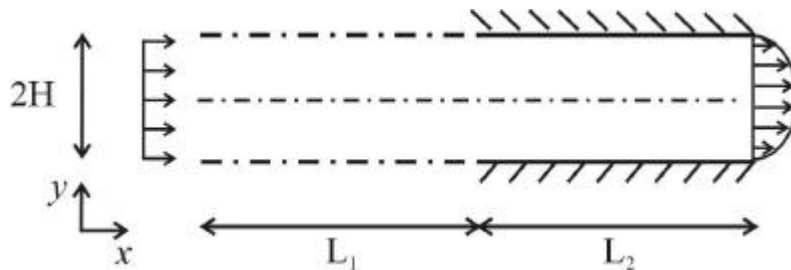


Figura 5.1. Representação esquemática do escoamento “slip-stick”.

Para reduzir o tamanho da malha, utiliza-se condição de simetria na seção horizontal central, trabalhando-se assim com apenas metade do domínio. Na seção anterior à entrada das placas, as condições de contorno nas linhas paralelas à direção x são de deslizamento, ou seja, uma condição de simetria. Junto à parede é usada a condição de não deslizamento. Na entrada é especificado um perfil de velocidades uniforme, e na saída uma condição de escoamento localmente parabólica.

Nos testes e comparações mostrados na seqüência, foi considerado um escoamento sob número de Reynolds igual a 10, comprimento horizontal antes da singularidade $L_1 = 3$, comprimento horizontal após a singularidade $L_2 = 7$ e comprimento na direção vertical $H = 1$. O comprimento característico é dado pela altura do canal H e a velocidade característica pelo valor da velocidade média na entrada do domínio.

As posições x e y adimensionais são tomadas a partir do ponto sobre a linha de simetria horizontal ($y = 0$) e da entrada das placas ($x = 0$). No contorno superior tem-se $y = 1$, e posições x negativas são referentes a pontos antes da entrada das placas.

As malhas utilizadas, todas uniformemente espaçadas, são coincidentes com a linha de entrada junto à singularidade. Os tamanhos utilizados foram de 30×10 (número de volumes na direção x e y , respectivamente), 30×20 , 60×10 , 60×20 e 60×40 .

São obtidas soluções utilizando diferentes funções de interpolação, dentre as apresentadas no Capítulo 4. O objetivo é verificar a qualidade da aproximação para os diferentes esquemas, sendo que neste problema é dado um enfoque especial às funções de 3ª ordem (QUICK e Lagrange).

Juntamente com o uso do esquema QUICK ou CDS para as aproximações dos fluxos advectivos médios, é usada diferença central de 2ª ordem na aproximação dos fluxos difusivos médios. É tomada aproximação de 2ª ordem também para os termos não-lineares, para os valores médios nas interfaces e para os valores médios nos volumes.

Outro conjunto de aproximações usado, fundamentado na metodologia de alta ordem baseado em valores médios, consiste em usar o esquema Lagrange de 3ª ordem para a aproximação dos fluxos advectivos médios e o esquema Lagrange de 4ª ordem para os fluxos difusivos. Para os termos não lineares, utiliza-se aproximação de 4ª ordem conforme mostrado no item 4.2.3 (Capítulo 4). Nos próximos itens, este conjunto de aproximações é chamado de esquema LAG34.

É mostrada na seqüência, uma descrição dos resultados obtidos na solução deste problema, divididos em diferentes tópicos.

5.1.1. Acoplamento pressão-velocidade

Como visto no Capítulo 2, é usado neste trabalho o arranjo co-localizado de variáveis, que pode levar a soluções oscilatórias devido à falta de acoplamento entre a pressão e a velocidade em cada volume. Este problema pode ocorrer quando se utiliza uma aproximação de diferenças centrais de 2ª ordem para a pressão nas equações do movimento. Outra causa deste fenômeno é o possível mau condicionamento da matriz resultante do sistema de equações. Para exemplificar, considere a aproximação do termo referente ao gradiente de pressão na equação do movimento para a direção x :

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial P}{\partial x} dx dy = - \frac{\left(\bar{P}^y \Big|_{i+1} - \bar{P}^y \Big|_i \right)}{\Delta x} \Delta y \Delta x \quad (5.1)$$

Sendo que as aproximações (2ª ordem) para a pressão nas interfaces são dadas por:

$$\bar{P}^y \Big|_{i+1} = \frac{1}{2} \left(\bar{P}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} + \bar{P}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} \right), \quad \bar{P}^y \Big|_i = \frac{1}{2} \left(\bar{P}^{xy} \Big|_{i+\frac{1}{2}} + \bar{P}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.2)$$

Inserindo as aproximações dadas em (5.2) no termo (5.1), chega-se a:

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial P}{\partial x} dx dy \approx \frac{1}{2} \left(\bar{P}^{xy} \Big|_{i+\frac{3}{2}} - \bar{P}^{xy} \Big|_{i-\frac{1}{2}} \right) \Delta y \quad (5.3)$$

Pode-se ver então que a aproximação do gradiente de pressão no volume independe da pressão no próprio, e esta falta de dependência é a causa da obtenção de um campo de pressões oscilatório (em zigue-zague). Este campo de pressão é percebido pelos volumes como um campo de pressões constante, sendo que a pressão nas interfaces se mantém constante.

Para visualizar este efeito, foi utilizado na aproximação das variáveis o esquema de diferenças centrais de 2ª ordem, e o perfil de pressão ao longo da direção x , em $y = 0.05$ (volumes próximos a linha de simetria) é mostrado na Figura 5.2. São apresentadas duas curvas: uma para a pressão no centro dos volumes e outro para a pressão nas interfaces. A malha utilizada é de 30×10 .

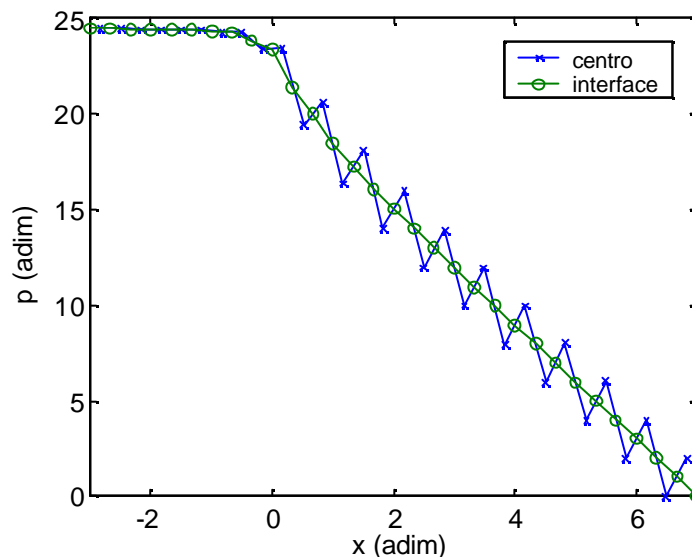


Figura 5.2. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, sendo usados os valores no centro dos volumes e nas interfaces, usando uma malha 30×10 .

Note que os valores nas interfaces seriam os corretos, pois levam a um perfil de pressão suave antes da singularidade e linear na região correspondente ao escoamento entre as placas. A queda de pressão calculada a partir dos valores nas interfaces é a real, e esta é que é usada na aproximação da equação do movimento na direção x . O valor da pressão em cada volume não influi, gerando assim, um campo de pressão oscilatório que satisfaz as equações discretizadas.

Para evitar este problema, tradicionalmente se usa o arranjo desencontrado, sendo que neste caso, o fenômeno não ocorre. Porém, para o uso do arranjo co-localizado, o qual tem muitas vantagens sobre o desencontrado (ver Capítulo 2), deve-se utilizar uma técnica adicional para contornar este problema. A mais usada é conhecida como método da interpolação de momento (Rhie e Chow, 1982), que consiste em adicionar à aproximação das

velocidades nas interfaces um termo de correção, que força a dependência da velocidade na interface com a pressão dos volumes vizinhos, analogamente ao que ocorre no arranjo desencontrado. Esta correção para a velocidade é obtida a partir das equações do movimento discretizadas, e um exemplo de aproximação para a velocidade v_x em uma interface i normal à direção x , é dado a seguir:

$$\overline{v_x^y} \Big|_i = \overline{v_x^y} \Big|_i^M + \overline{v_x^y} \Big|_i^C \quad (5.4)$$

A aproximação é dada pela soma de uma aproximação a partir dos valores médios das variáveis nos volumes, que pode ser qualquer uma das citadas no Capítulo 2 (geralmente UDS, CDS ou QUICK), dada por $\overline{v_x^y} \Big|_i^M$, e um termo de correção, $\overline{v_x^y} \Big|_i^C$, que depende das pressões médias nos volumes e das pressões médias nas interfaces. Este termo tem a seguinte forma:

$$\overline{v_x^y} \Big|_i^C = f_{d1} \left(\overline{P^y} \Big|_{i+1} - \overline{P^y} \Big|_i \right) + f_{d2} \left(\overline{P^y} \Big|_i - \overline{P^y} \Big|_{i-1} \right) - f_{d3} \left(\overline{P^{xy}} \Big|_{i+\frac{1}{2}} - \overline{P^{xy}} \Big|_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.5)$$

Onde os termos f_{di} dependem das dimensões do volume e dos coeficientes das equações discretizadas, escritas na forma geral usada para a solução segregada das equações por um método baseado em correção de pressão como o SIMPLE ou SIMPLEC.

Usando esta idéia, pode-se resolver o problema de oscilações na pressão, usando a metodologia em questão. Para tanto, na aproximação dos termos de velocidade $\overline{v_x^y} \Big|_i$ e $\overline{v_y^x} \Big|_j$, presentes nas equações discretizadas, usa-se uma expressão idêntica à (5.4), sendo a correção dada por (5.5), no qual os fatores f_{di} são empíricos, sendo $f_{d1} = f_{d2} = f_{d3} = f_d$.

Para verificar a eficiência desta técnica, é mostrado na Figura 5.3 o mesmo perfil de pressão dado na Figura 5.2, que é obtido com o esquema CDS, e o perfil obtido com o uso do esquema CDS com dissipação, que corresponde ao emprego da técnica citada acima. Note que com o uso do esquema CDS com dissipação, o perfil de pressão se torna suave, não ocorrendo os problemas de oscilação.

Na metodologia convencional de volumes finitos os fatores f_{di} vêm das próprias equações discretizadas, o que torna o procedimento mais robusto. No caso da metodologia em questão, como já dito, utiliza-se um valor empírico, que deve ser baixo, fazendo com que a aproximação tenha a menor influência possível do termo de correção. Em outras palavras, a correção não deve afetar significativamente o perfil que seria obtido teoricamente com o esquema de interpolação original, aplicado para $\overline{v_x^y} \Big|_i^M$. Note que para um perfil constante ou linear a correção dada por (5.5) é igual a zero, independente de f_d , afetando a aproximação somente durante a convergência, fazendo apenas o seu papel de evitar a formação de soluções oscilatórias.

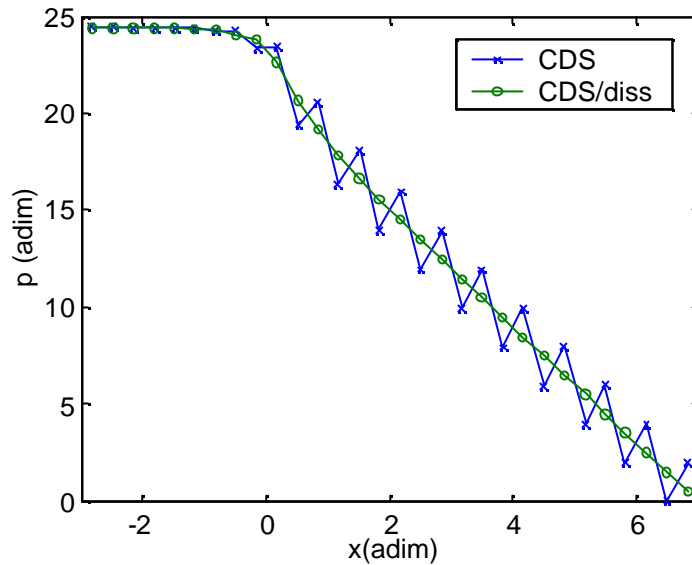


Figura 5.3. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, para solução obtida com o esquema CDS e CDS com dissipação, usando os valores no centro dos volumes.

Porém, este fator deve ter um valor limite, tal que com o uso de um valor inferior, não se consegue evitar a ocorrência de soluções oscilatórias. Ou seja, deve-se buscar um ponto ótimo entre manter a precisão e eficiência na remoção de oscilações. Na Figura 5.4 são mostrados diversos perfis de pressão horizontais para $y = 0.05$, obtidos para valores de f_d iguais a 0 (CDS puro), 0.01 e 0.001.

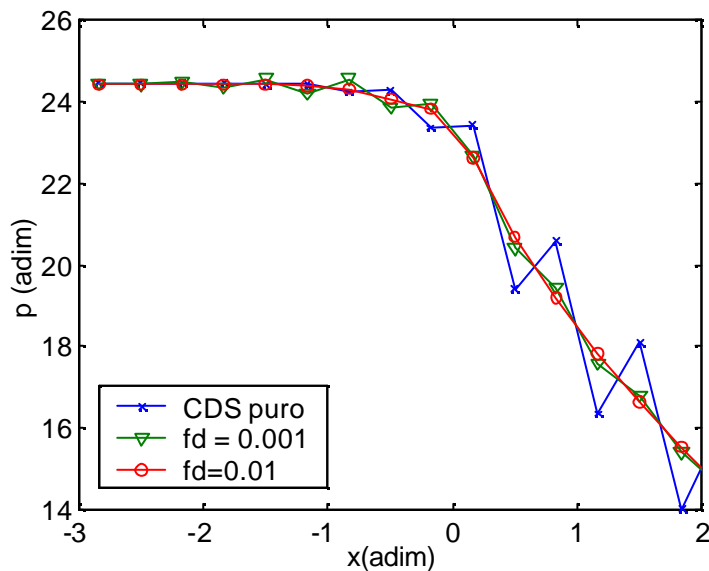


Figura 5.4. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.05$, obtido com esquema CDS puro e CDS com dissipação para $f_d = 0.001$ e $f_d = 0.01$.

Pode-se ver que para um valor muito baixo ($f_d = 0.001$) não se consegue evitar a formação de uma solução oscilatória, mesmo que a amplitude seja menor comparada a trazida pelo uso do esquema CDS puro ($f_d = 0$). Para $f_d = 0.01$ se consegue estabilizar a solução, e o perfil obtido é suave. Porém excedendo-se muito este valor, a solução perde em precisão

devido à alta dissipação incorporada na aproximação. Para ilustrar este ponto, são mostrados na Figura 5.5 perfis de velocidade v_x na direção x , em $y = 0.05$, para diferentes valores de f_d .

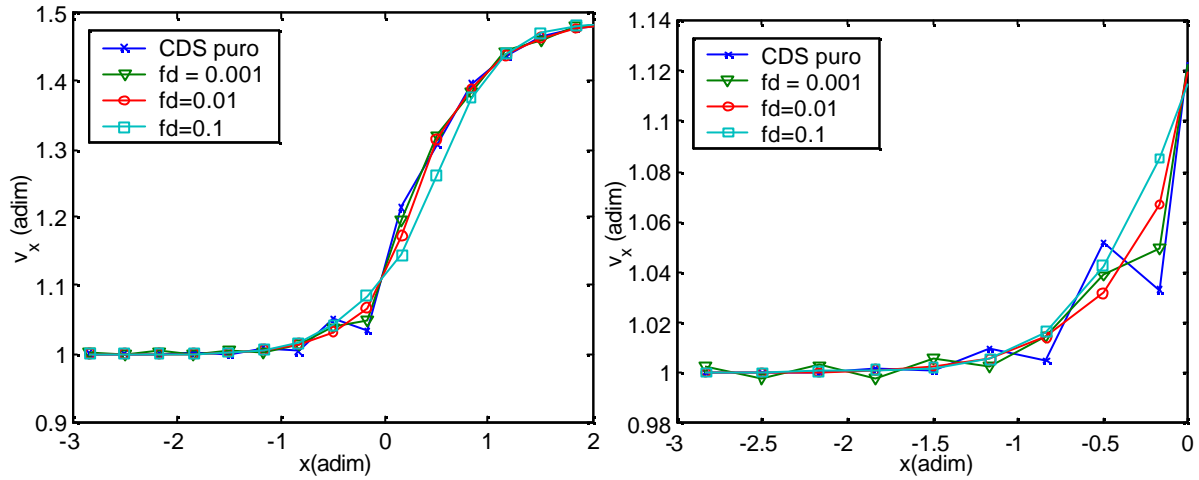


Figura 5.5. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.05$, obtidos com esquema CDS puro e CDS com dissipação para $f_d = 0.001$, $f_d = 0.01$ e $f_d = 0.1$.

Pode-se notar que com um fator f_d muito alto a solução desvia consideravelmente da solução que seria a correta, apesar de evitar a formação de oscilações, devido ao fato da introdução da dissipação diminuir a ordem do esquema de interpolação.

Deve-se lembrar ainda, que a técnica de interpolação de momento é usada quando utiliza-se um método segregado baseado em uma equação para correção de pressão (SIMPLE, SIMPLEC, etc.). Portanto, independente da aproximação usada na determinação dos fluxos advectivos, será incorporada uma dissipação, correspondente ao termo de correção, que diminui a precisão da solução, e o uso de esquemas de alta ordem com esta metodologia perde o sentido. Este é um motivo pelo qual este método de solução não poderia ser usado neste trabalho, cujo foco é a utilização de aproximações de alta ordem.

Para finalizar, deve-se citar que estes problemas ocorreram também para outros esquemas de aproximação que são centrados. Ou seja, para o esquema tipo Lagrange de 4ª ordem e Padé (compacto) de 4ª ordem este fenômeno também ocorreu.

Usando esquemas de ordem ímpar, ou seja esquemas “upwinded”, tais como o QUICK e o esquema de Lagrange de 3ª ordem, este fenômeno não ocorre. Na literatura, encontram-se muitos trabalhos que utilizam o esquema QUICK para a aproximação das variáveis do problema, exceto a pressão, sendo que neste caso o problema de soluções oscilatórias pode ocorrer, sendo necessário o uso da técnica de interpolação de momento. Porém, se o esquema de interpolação de ordem ímpar for usado também para a pressão, o problema da falta de acoplamento entre a pressão e a velocidade desaparece, sendo que a queda de pressão em um dado volume dependerá da pressão neste também.

Na Figura 5.6 pode ser vista a solução para o mesmo perfil de pressão apresentado nos exemplos anteriores, obtido com o uso do esquema QUICK na aproximação das variáveis. O

mesmo resultado é também obtido com o uso do esquema Lagrange de 3ª ordem na aproximação das variáveis.

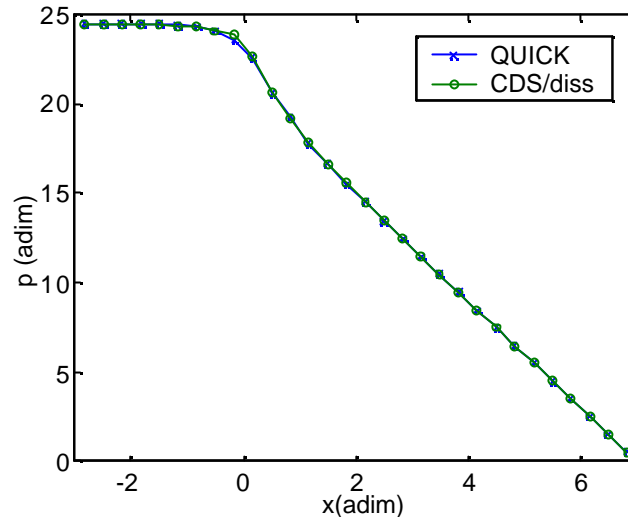


Figura 5.6. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0,05$, obtido com o esquema QUICK, comparado com o obtido pelo esquema CDS com dissipação ($f_d = 0.005$).

Deste modo, são usados daqui para frente somente os esquemas de ordem ímpar, por não precisarem de técnica adicional para evitar problemas de oscilação de pressão e terem maior ordem de aproximação, resultando em soluções de maior precisão se comparadas às obtidas pelo esquema CDS.

5.1.2. Curvas de nível

Neste item são apresentados gráficos no qual mostram-se as curvas de nível para o escoamento em questão. Estas foram obtidas, em uma malha 60x20, com o esquema híbrido LAG34/CDS, que consiste na aplicação do esquema CDS nas aproximações em regiões de grande variação das variáveis, ou seja, junto à singularidade, e do esquema LAG34 no restante do domínio. O motivo desta diferenciação será descrito mais adiante. São mostradas então, na seqüência, da Figura 5.7 até a Figura 5.10, as curvas de nível para a função corrente, velocidade na direção x , velocidade na direção y e pressão.

A partir destes gráficos pode-se ter uma idéia mais geral das características do escoamento. Observando a Figura 5.7, pode-se ver que antes da entrada das placas, as linhas de corrente são paralelas ao eixo x , sendo que, junto à junção simetria-parede, há mudanças bruscas na direção do escoamento. Em uma distância mais afastada, as linhas de corrente se tornam paralelas novamente, indicando que o escoamento está desenvolvido.

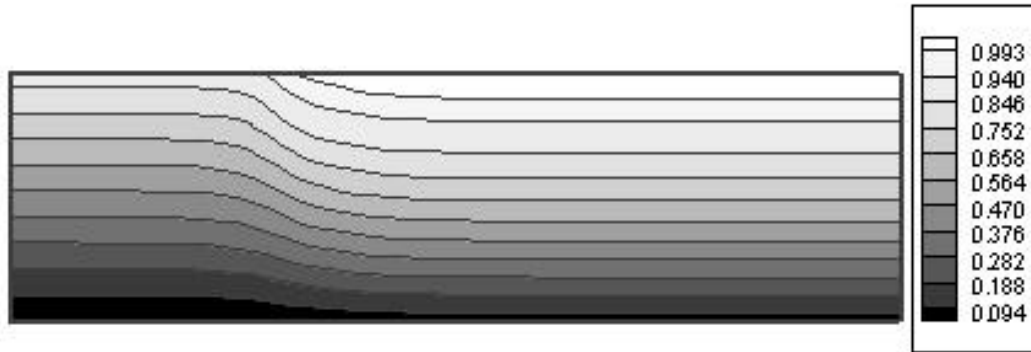


Figura 5.7. Curvas de nível para função corrente no escoamento “*slip-stick*” ($L = 10$, $H = 1$).

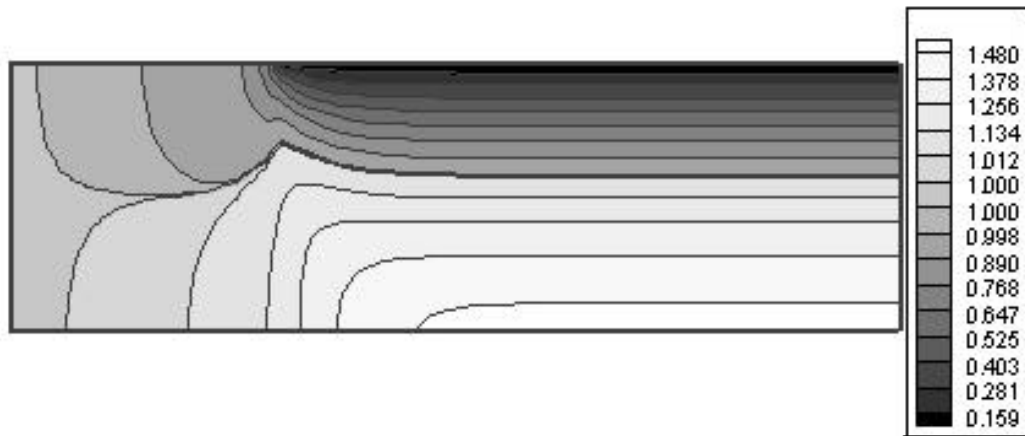


Figura 5.8. Curvas de nível para velocidade v_x no escoamento “*slip-stick*” ($L = 10$, $H = 1$).

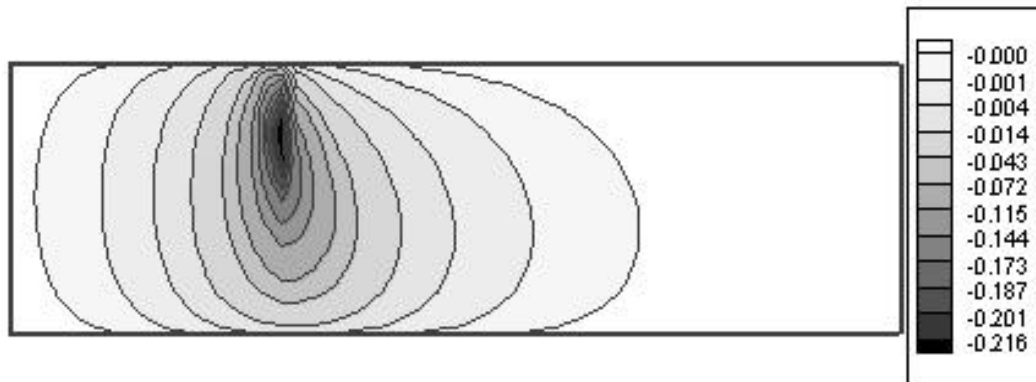


Figura 5.9. Curvas de nível para velocidade v_y no escoamento “*slip-stick*” ($L = 10$, $H = 1$).

Pelas curvas de nível para as velocidades, Figura 5.8 e Figura 5.9, pode-se ver que na região próxima a singularidade há mudanças severas de velocidade, em ambas as direções. No caso da velocidade v_x , há uma transição do valor 1 para 0, que é a velocidade junto a parede. Em regiões mais afastadas as linhas de velocidade v_x se tornam paralelas e v_y vai a zero, o que indica que o escoamento está plenamente desenvolvido.

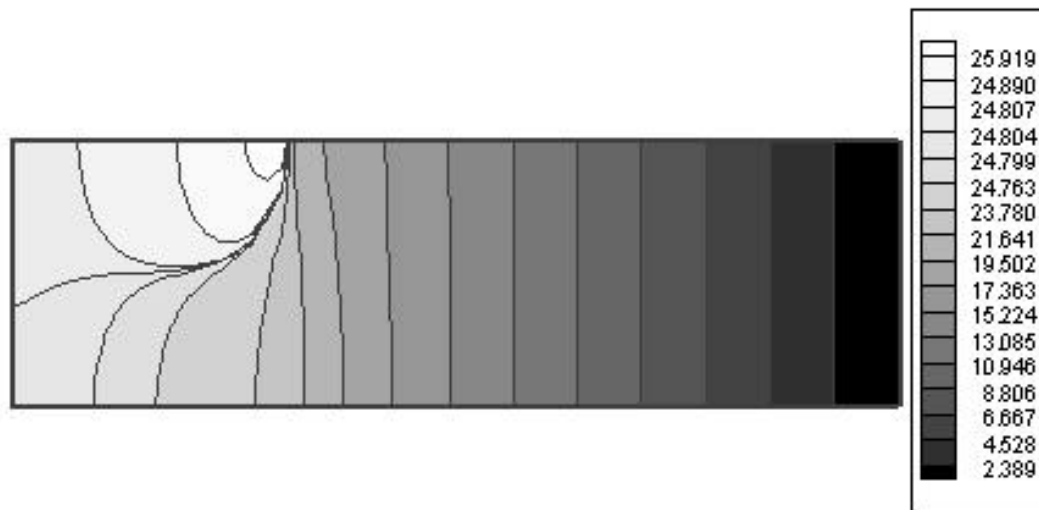


Figura 5.10. Curvas de nível para a pressão no escoamento “*slip-stick*” ($L = 10$, $H = 1$).

Pelas curvas de pressão, vistas na Figura 5.10, pode-se ver que na singularidade ocorre o valor de pressão máximo, sendo que na região posterior a esta, a queda de pressão é linear, não sentindo mais a influência da entrada.

5.1.3. Perfis na direção horizontal (x)

São mostrados nas figuras seguintes (Figura 5.11 a Figura 5.14), perfis de diferentes variáveis para uma linha horizontal em $y = 0.975$, obtidos com a metodologia em questão. Neste caso, foi usado o esquema LAG34 com redução da ordem de aproximação junto à singularidade (LAG34/CDS), em uma malha 60×20 . O motivo de usar uma aproximação de mais baixa ordem em pontos próximos a esta região é um dos principais assuntos neste item, sendo discutido mais adiante.

Os perfis de tensões mostrados na Figura 5.14, são obtidos a partir do campo de velocidades, baseado na Lei de viscosidade de Newton.

Nos perfis mostrados na Figura 5.11 a Figura 5.14, pode-se ver que há uma mudança brusca nas variáveis logo após a singularidade na junção entre a parede e a superfície livre, o que também pode ser visto nas curvas de nível apresentadas no item anterior, e que traz algumas dificuldades nas aproximações.

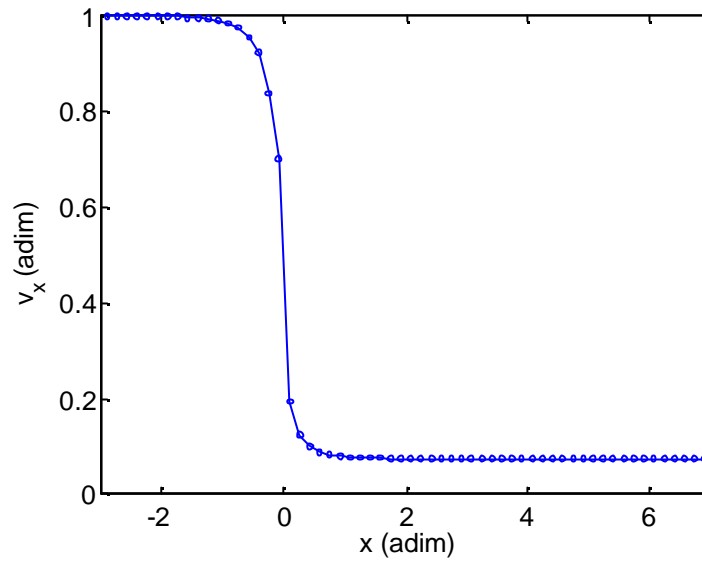


Figura 5.11. Perfil de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60x20.

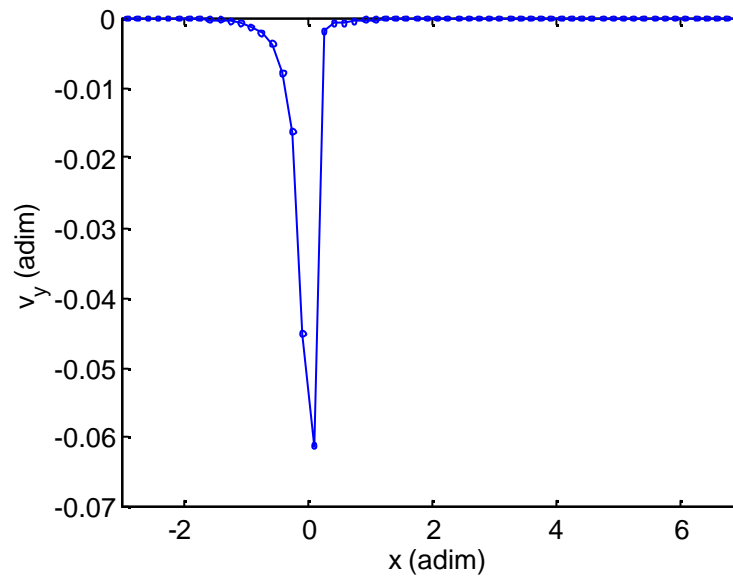


Figura 5.12. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60x20.

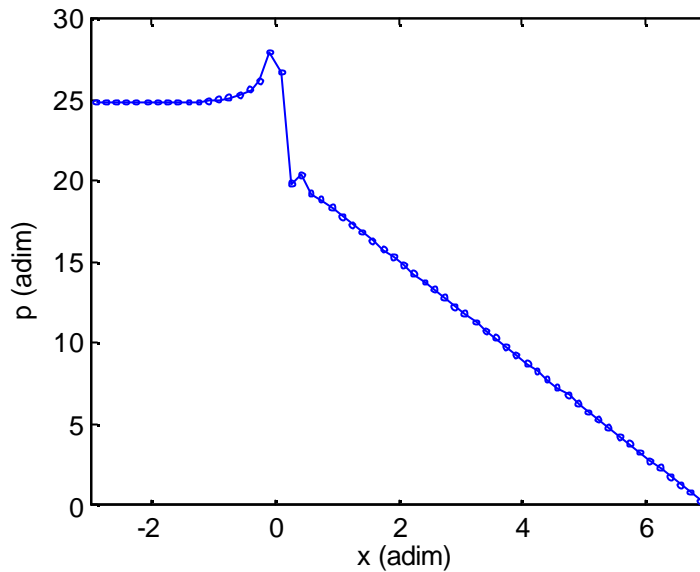


Figura 5.13. Perfil de pressão na direção horizontal em $y = 0.975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60×20 .

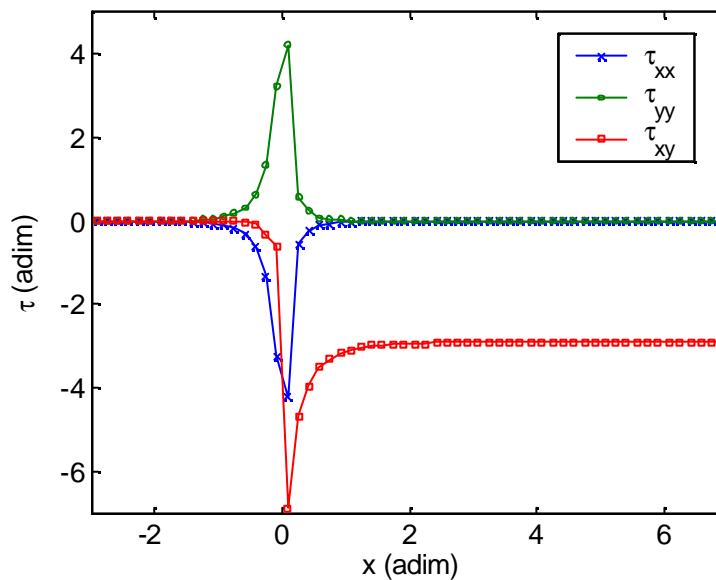


Figura 5.14. Perfis de tensões τ_{xx} , τ_{yy} , e τ_{xy} na direção horizontal em $y = 0,975$, obtido com o esquema LAG34/CDS em um malha 60×20 .

Como foi citado no Capítulo 2, o esquema QUICK pode levar a soluções não limitadas na aproximação de uma solução que apresenta mudanças severas, que se caracteriza pela presença de um “overshoot” nos perfis obtidos junto a singularidade. No problema em questão, isto ocorre para o perfil da velocidade v_y na direção horizontal, em regiões próximas à junção, como pode-se ver no perfil de v_y em $y = 0.95$, mostrado na Figura 5.15.

Note que a solução apresenta um “overshoot”, característico de aproximações de funções com descontinuidade por funções de alta ordem, tal como o QUICK. Se é desejado utilizar esquemas de maior ordem na aproximação das variáveis, pode-se evitar este problema

por dois caminhos: o natural seria refinar a malha nesta região, porém, isto pode ser inconveniente por aumentar o número de pontos e conseqüentemente o custo computacional.

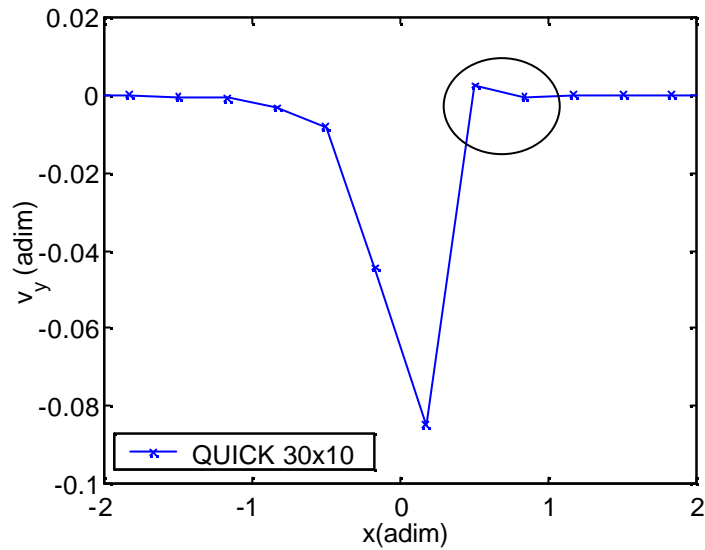


Figura 5.15. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema QUICK.

A outra opção é usar um esquema de menor ordem na aproximação das variáveis na região próxima a singularidade, evitando com isto a formação destes picos. Por exemplo, se utilizarmos uma aproximação por diferenças centrais de 2ª ordem (CDS) ou upwind de 1ª ordem (UDS) nos volumes próximos à junção, e pelo esquema QUICK no restante, verifica-se que este problema desaparece, como pode ser visto na Figura 5.16. Nesta figura são mostrados os perfis de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtidos com o uso do esquema QUICK, e com o QUICK com CDS na região próxima à singularidade, sendo este último chamado de esquema QUICK/CDS.

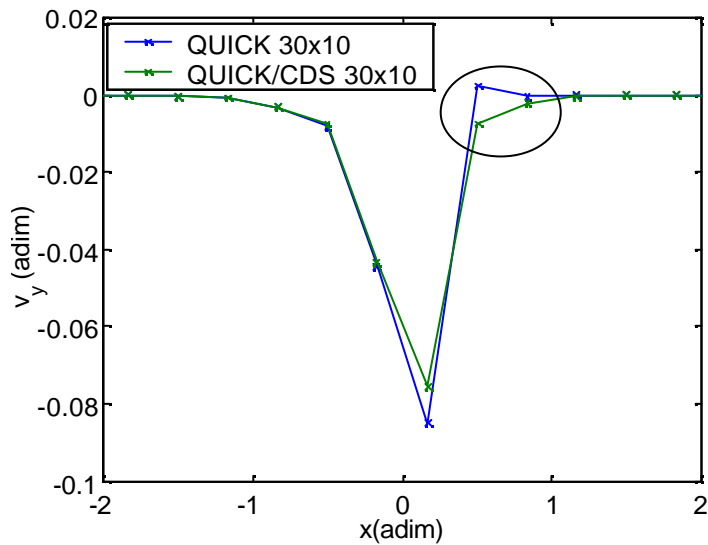


Figura 5.16. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema QUICK e com o QUICK/CDS na região próxima à singularidade.

Porém, como é reduzida a ordem de aproximação, obviamente a precisão da solução não seria a ideal. Para exemplificar, são mostrados na Figura 5.17, os perfis de velocidade v_y para a linha horizontal em $y = 0.9$ obtidos em diferentes malhas, sendo este ponto um pouco mais afastado da parede, onde já não ocorre problema de “overshoot”.

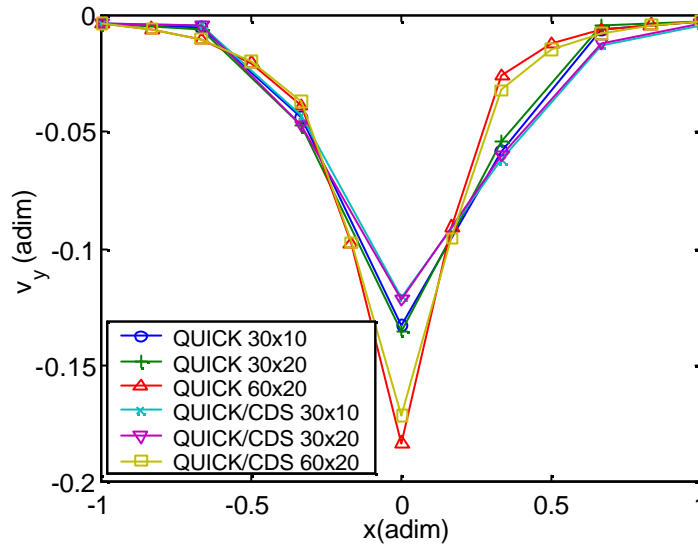


Figura 5.17. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, obtido com o esquema QUICK e com o QUICK/CDS na região próxima a singularidade para diferentes malhas.

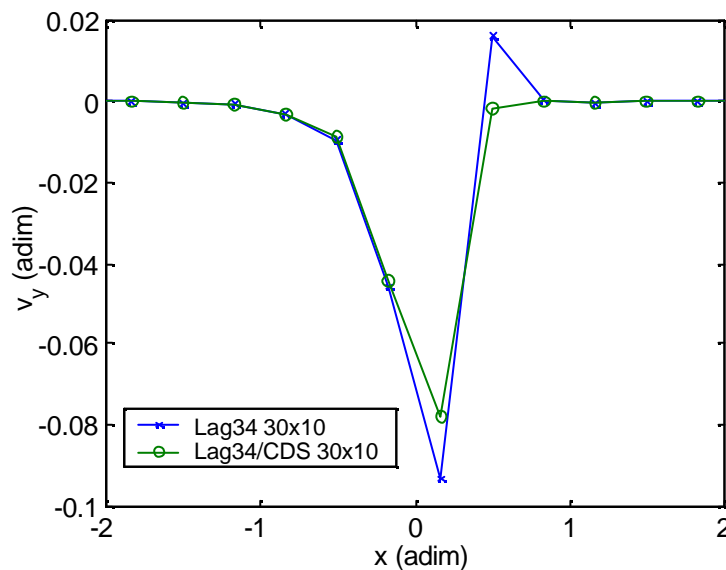


Figura 5.18. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema LAG34 e com o LAG34/CDS em pontos próximos à singularidade.

Tudo o que foi dito é válido também para o esquema LAG34. Com o uso deste esquema, se chegam a soluções não limitadas, e o emprego de um esquema de menor ordem na região próxima à junção também resolve o problema, a exemplo do esquema QUICK. Isto pode ser visto na Figura 5.18, que corresponde ao mesmo perfil mostrado na Figura 5.15 (obtido com o esquema QUICK), agora obtido com o uso do esquema de LAG34, aplicando o

esquema CDS nos volumes próximos à junção, sendo neste caso, chamado de esquema LAG34/CDS.

E, como não poderia deixar de ser, o uso de um esquema de baixa ordem diminui também a precisão da aproximação. Na Figura 5.19 são comparadas as soluções obtidas com e sem o uso de uma aproximação de 2ª ordem (CDS) nos pontos próximos à singularidade, para o perfil de v_y em $y = 0.9$, onde já não há ocorrência de “*overshoots*”, para diferentes tamanhos de malha.

Os pontos nas interfaces nos quais foram usados a aproximação de menor ordem estão localizados à direita da interface junto a singularidade. A própria interface não foi usada, pelo fato de não trazer bons resultados, pois suaviza o pico em v_y e torna instável o perfil de velocidade v_x , como pode-se ver na Figura 5.20. São mostrados os perfis de velocidade v_x e v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, para uma situação onde se toma um ponto na própria interface junto à singularidade e mais dois pontos a direita e outra onde apenas se toma os dois pontos à direita para aproximação com CDS, sendo no restante aplicado o esquema LAG34.

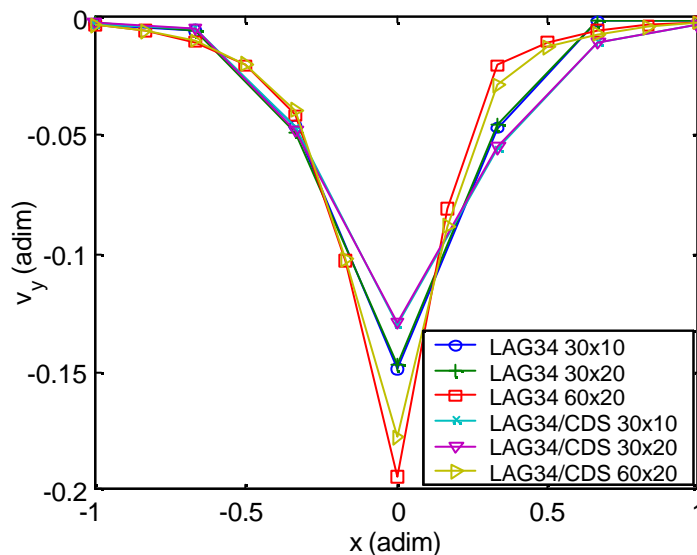


Figura 5.19. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, obtido com o esquema LAG34 e com o LAG34/CDS em pontos próximos à singularidade, para diferentes malhas.

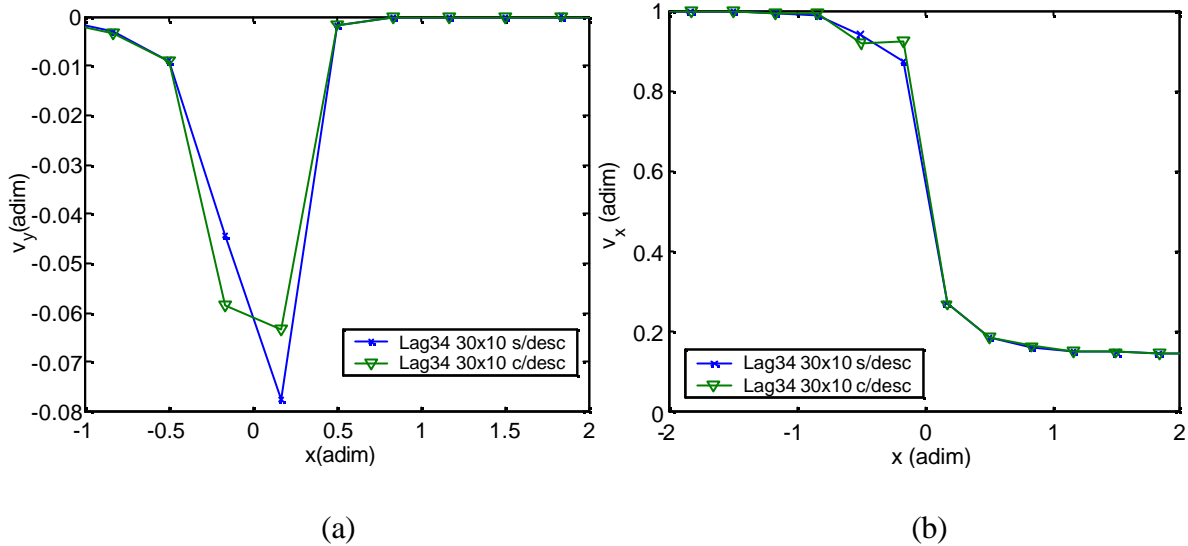


Figura 5.20. Perfis de velocidade v_y (a) e v_x (b) na direção horizontal em $y = 0.95$, obtidos com o esquema LAG34, usando dois pontos e mais a interface em $x = 0$, e somente dois pontos com esquema CDS.

Obviamente, para uma mesma malha, quanto maior o número de pontos usado pelo esquema de baixa ordem, mais difícil a ocorrência de “*overshoots*”, porém, menor precisão do resultado obtido, pois se usa em uma maior região a aproximação de mais baixa ordem. Deste modo, deve-se usar um número de pontos que busque o compromisso entre resolver o problema de formação de oscilação e obter a aproximação com a melhor precisão possível. Por exemplo, usando uma malha 60×10 , e usando 2, 4 ou 6 pontos com aproximação de 2ª ordem se consegue evitar o problema, como pode-se ver ao traçar o perfil de velocidade v_y ao longo da linha horizontal $y = 0.95$, dado na Figura 5.21:

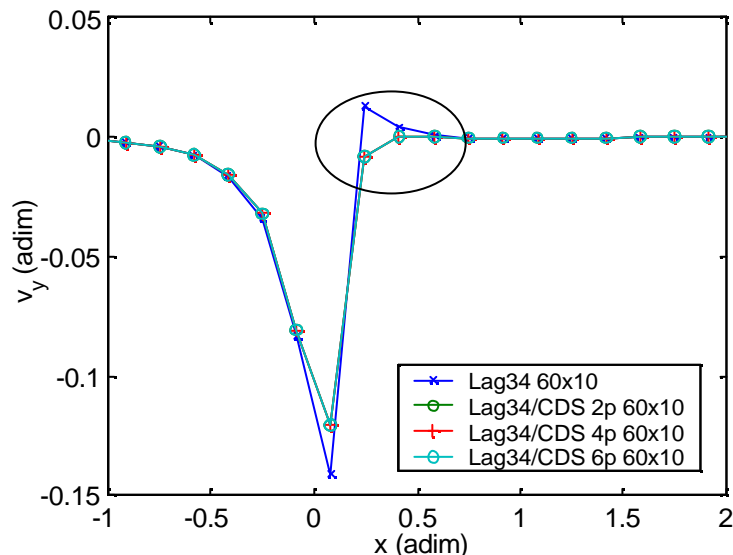


Figura 5.21. Perfil de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.95$, obtido com o esquema LAG34 e com o LAG34/CDS na região próxima à singularidade, sendo usado para este último, diferentes números de pontos com aproximação de 2ª ordem .

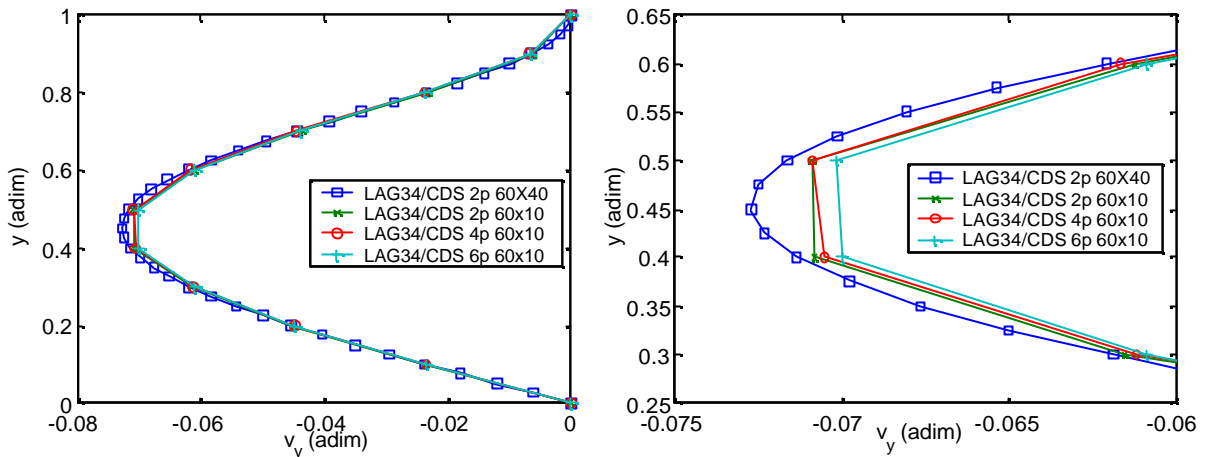


Figura 5.22. Perfil de velocidade v_y na direção vertical em $x = 0.6667$, obtido com o esquema LAG34/CDS, com diferentes números de pontos de aproximação de baixa ordem.

Ao analisar o perfil de velocidade v_y em uma linha vertical após a singularidade, mais especificamente em $x = 0.6667$, onde praticamente já não há influência desta, verifica-se que quanto maior a região de uso do esquema de ordem inferior, mais se perde em precisão. Para tanto na Figura 5.22, são comparados os perfis correspondentes ao uso de 2, 4 e 6 pontos de baixa ordem após a descontinuidade em uma malha 60×10 com o perfil obtido em uma malha 60×40 e 2 pontos de baixa ordem. Pode-se ver que quanto menor o número de pontos usando o esquema de baixa ordem, melhor a precisão do resultado, comparando com a solução em malha mais refinada. Deste modo, deve-se evitar o uso de aproximações de baixa ordem em regiões onde não é necessário.

Para concluir este tópico, deve-se citar que deve ser usado um critério confiável no qual se possa saber em quais volumes serão usadas uma aproximação de menor ordem, de modo a obter a melhor solução possível, sem a presença de oscilações. Este critério pode ser o CBC, definido por Gaskell e Lau (1988), já comentado no Capítulo 2. Neste trabalho, o objetivo é de apenas verificar que a produção de soluções não limitadas com o uso dos esquemas de interpolação usados pode ser evitada com o emprego desta técnica. Um esquema tipo HRS (High-Resolution-Scheme) pode então ser derivado a partir destas idéias, sendo isto objeto de um estudo futuro.

5.1.4. Perfis na direção vertical (y)

O objetivo neste item é a comparação dos esquemas QUICK e Lagrange de 3ª ordem, com uso de diferenças centrais de segunda ordem em pontos próximos a singularidade (QUICK/CDS e LAG34/CDS), levando em conta à precisão dos resultados e o esforço computacional necessário. Para tanto, são apresentados os perfis de v_x , v_y e p , obtidos para diferentes tamanhos de malha. Perfis de velocidade v_y na linha vertical dada por $x = 0.6667$ são mostrados na Figura 5.23. Perfis de velocidade v_x e de pressão na mesma linha, são

mostrados na Figura 5.24 e na Figura 5.25, respectivamente. Os perfis são apresentados de duas maneiras: o mostrado no lado esquerdo corresponde à curva completa, e o do lado direito, uma ampliação em uma região importante da curva de modo a visualizar melhor a precisão de cada solução dada.

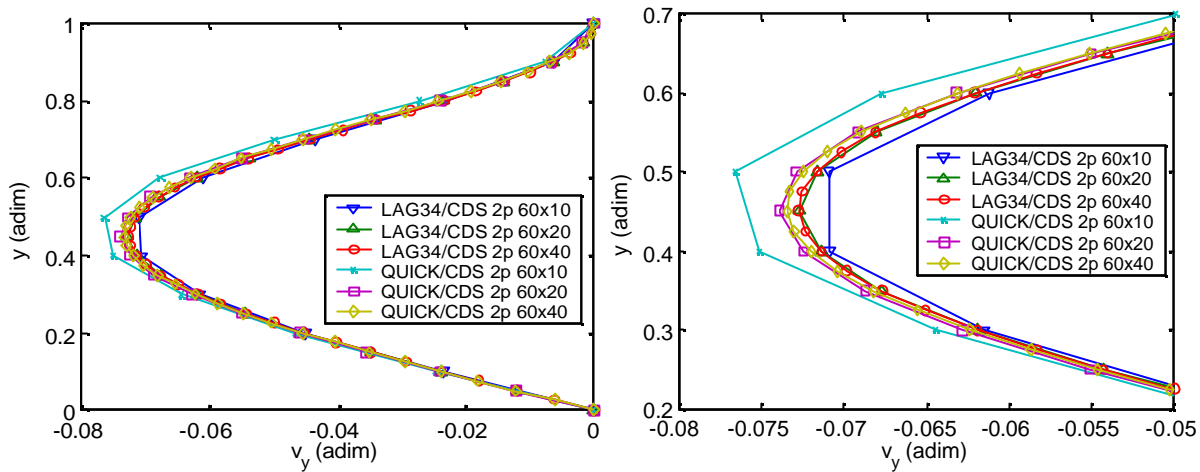


Figura 5.23. Perfis de velocidade v_y em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas LAG34/CDS e QUICK/CDS para diferentes tamanhos de malha.

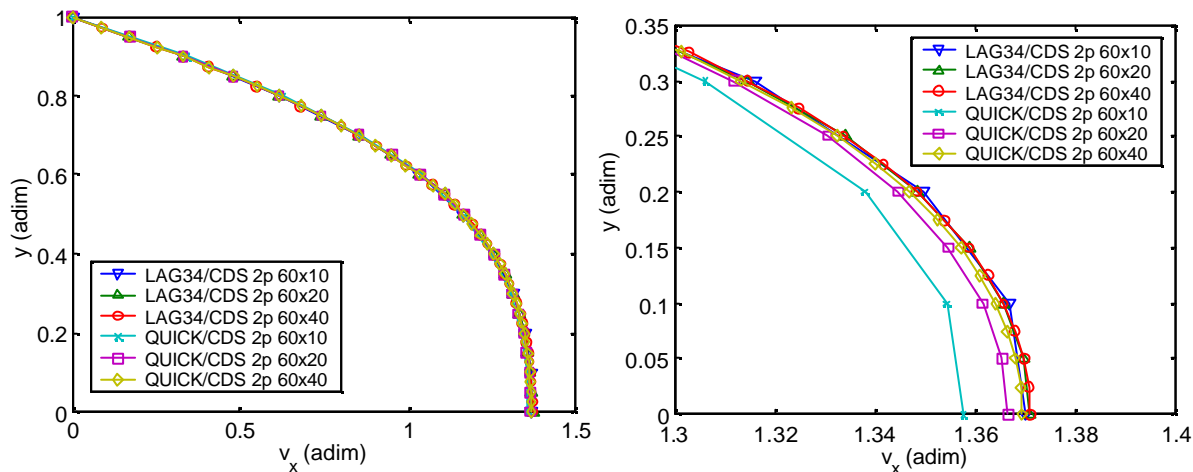


Figura 5.24. Perfis de velocidade v_x em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas LAG34/CDS e QUICK/CDS para diferentes tamanhos de malha.

Pode-se ver nestas figuras que com o esquema LAG34/CDS, a solução na malha 60×20 é praticamente a mesma obtida na malha 60×40 . As soluções obtidas com o QUICK/CDS, tendem às obtidas com o esquema LAG34/CDS na medida em que se refina a malha, sendo que mesmo com uma malha 60×40 não se consegue a mesma solução obtida em uma malha 60×20 com o LAG34/CDS. Isto era de se esperar, visto que a aproximação para o LAG34/CDS é de maior ordem comparado ao QUICK/CDS, tanto na aproximação dos fluxos advectivos quanto difusivos.

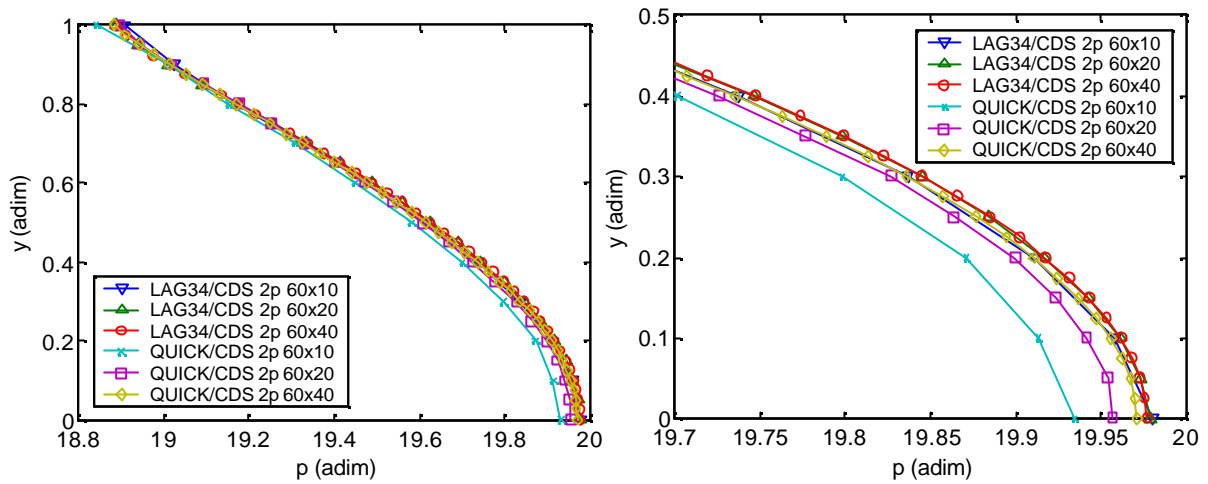


Figura 5.25. Perfis de pressão em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas LAG34/CDS e QUICK/CDS para diferentes tamanhos de malha.

Em relação aos tempos computacionais exigidos, praticamente não houve diferença entre o uso de um ou outro esquema para um dado tamanho de malha, sendo assim, o esquema LAG34 é mais indicado para o uso na resolução dos problemas. Deve-se citar que, em alguns casos, o tempo computacional exigido com o uso do esquema LAG34 foi consideravelmente menor. Se levar em conta o fato de que para se obter um resultado da mesma precisão do obtido com o esquema LAG34, com o esquema QUICK, é necessário uma malha mais refinada, então a superioridade deste primeiro é ainda mais explicitada. Na Tabela 5.1 são mostrados os tempos computacionais para a obtenção da solução em diferentes malhas, com o uso dos esquemas LAG34 e QUICK. Estes tempos foram adimensionalizados pelo tempo levado pela resolução em uma malha 30×10 com o esquema QUICK, que foi de 7s. O computador usado nas simulações foi um PC Pentium 4 1.7MHz.

Tabela 5.1. Tempos computacionais relativos para obtenção da solução em diferentes malhas, tendo Nvar variáveis em cada malha, com o uso dos esquemas LAG34 e QUICK

| Malha | Nvar | t_{LAG34} | t_{QUICK} |
|----------------|------|-------------|-------------|
| 30×10 | 900 | 1.1 | 1.0 |
| 60×10 | 1800 | 4.0 | 3.9 |
| 30×20 | 1800 | 7.0 | 8.4 |
| 60×20 | 3600 | 24.1 | 34.5 |
| 60×40 | 7200 | 151.4 | 230.8 |

Pode-se ver que nas malhas mais grosseiras os tempos são praticamente idênticos. Nas malhas mais refinadas, o tempo com o uso do QUICK é maior devido ao fato de requerer um número maior de iterações do método de Newton. Estes tempos são consideravelmente elevados, e se devem ao fato de ser usado um método direto para solução dos sistemas lineares.

5.2. Escoamento “*Stick-Slip*”

Este problema é similar ao tratado anteriormente, sendo que o escoamento ocorreria no sentido contrário, ou seja, o fluido escoava entre duas placas paralelas (“*stick*”) e subitamente encontra uma superfície livre de cisalhamento (“*slip*”). As dificuldades se repetem neste problema. Uma representação esquemática da geometria é mostrada na Figura 5.26

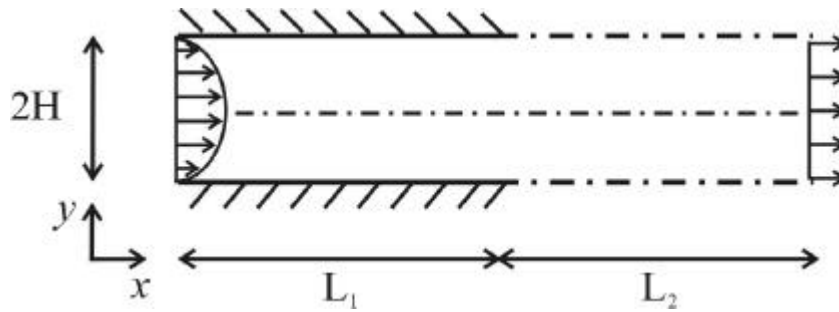


Figura 5.26. Representação esquemática do escoamento “stick-slip”.

A característica principal deste escoamento é análoga à do escoamento “*slip-stick*”, ou seja, há a presença de uma singularidade na saída das placas, caracterizada pela brusca mudança de condição de contorno.

As condições de contorno usadas são totalmente análogas às do problema anterior, exceto a condição de entrada, que neste caso corresponde ao perfil de velocidade para escoamento plenamente desenvolvido. O comprimento horizontal antes da singularidade é dado por $L_1 = 3$, o comprimento horizontal após a singularidade é $L_2 = 7$ e o comprimento na direção vertical é $H = 1$. Os valores característicos para a adimensionalização das equações e variáveis são os mesmos do problema anterior. Foi considerado um número de Reynolds igual a 10.

Analogamente ao problema anterior, as posições x e y adimensionais são tomadas a partir do ponto sobre a linha de simetria horizontal ($y = 0$) e da saída das placas ($x = 0$). No contorno superior tem-se $y = 1$.

Foram utilizadas malhas uniformemente espaçadas, em diferentes tamanhos: 30×10 (número de volumes na direção x e y , respectivamente), 30×20 , 60×10 , 60×20 e 60×40 .

Os conjuntos de aproximações usados foram os mesmos do problema anterior. Neste item, apresenta-se os resultados obtidos com a metodologia e comparar novamente o desempenho do uso dos esquemas.

5.2.1. Curvas de nível

As curvas de nível das variáveis para este problema, são mostradas na seqüência, da Figura 5.27 até a Figura 5.30. Estas foram obtidas com o esquema LAG34 em uma malha 60x10.

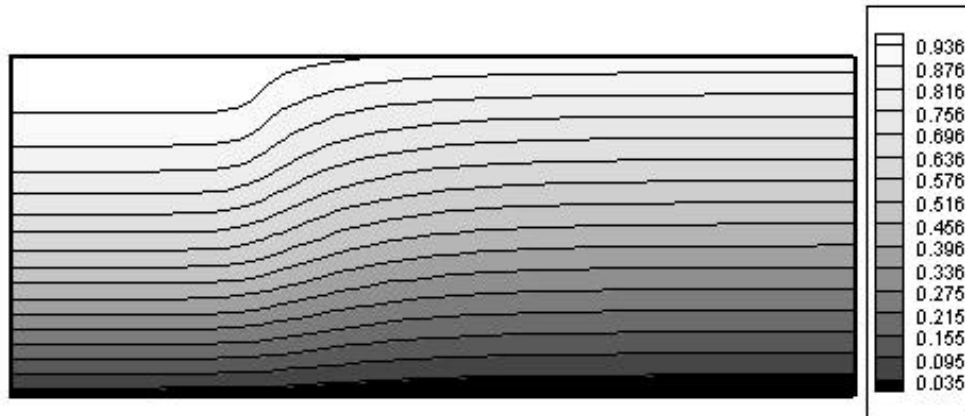


Figura 5.27. Curvas de nível para função corrente no escoamento “stick-slip” ($L = 10$, $H = 1$).

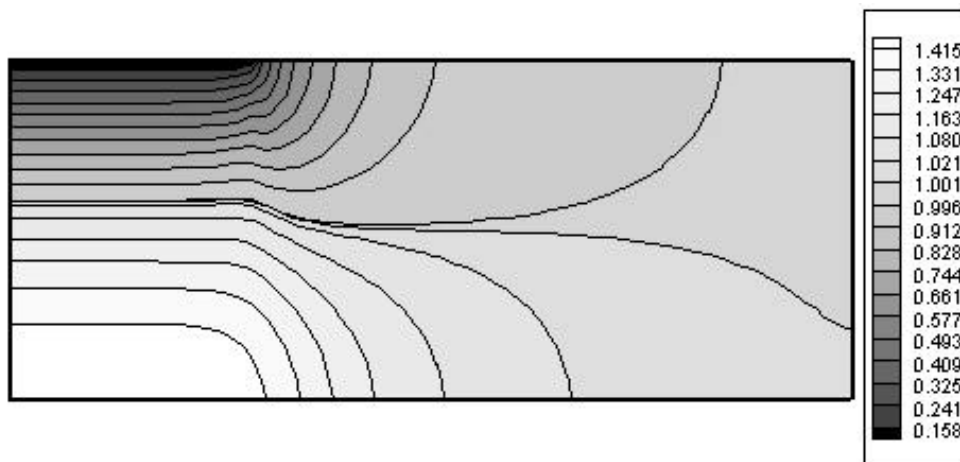


Figura 5.28. Curvas de nível para velocidade v_x no escoamento “stick-slip” ($L = 10$, $H = 1$).

A partir destas figuras, pode-se visualizar as características principais do escoamento. Pela função corrente, pode-se ver que após a saída das placas o fluido tende a se distribuir de forma uniforme, devido a imposição da condição de deslizamento (simetria) nos dois contornos.

Nas curvas de velocidade v_x , dadas na Figura 5.28, há uma mudança brusca junto à junção, visto que a velocidade é extremamente baixa junto à parede, e ao encontrar a superfície livre tende a aumentar significativamente. Para v_y , (Figura 5.29), percebe-se que também há uma mudança repentina junto à singularidade, o que reflete a distribuição do fluido na seção posterior a esta.

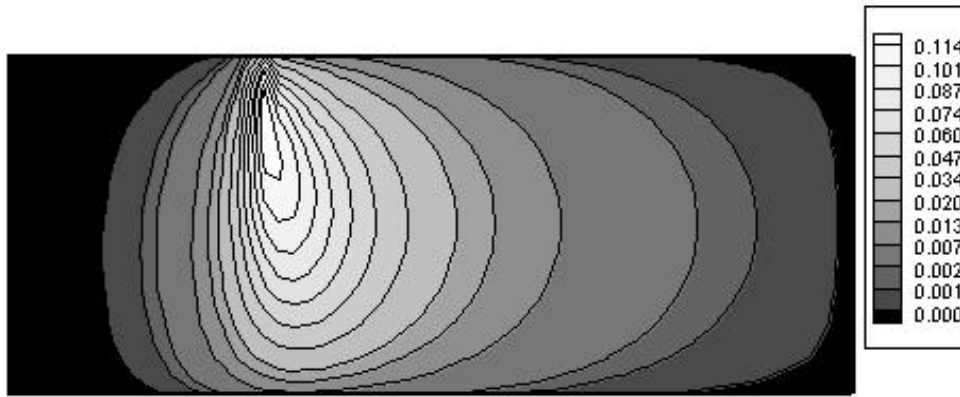


Figura 5.29. Curvas de nível para velocidade v_y no escoamento “*stick-slip*” ($L = 10$, $H = 1$).

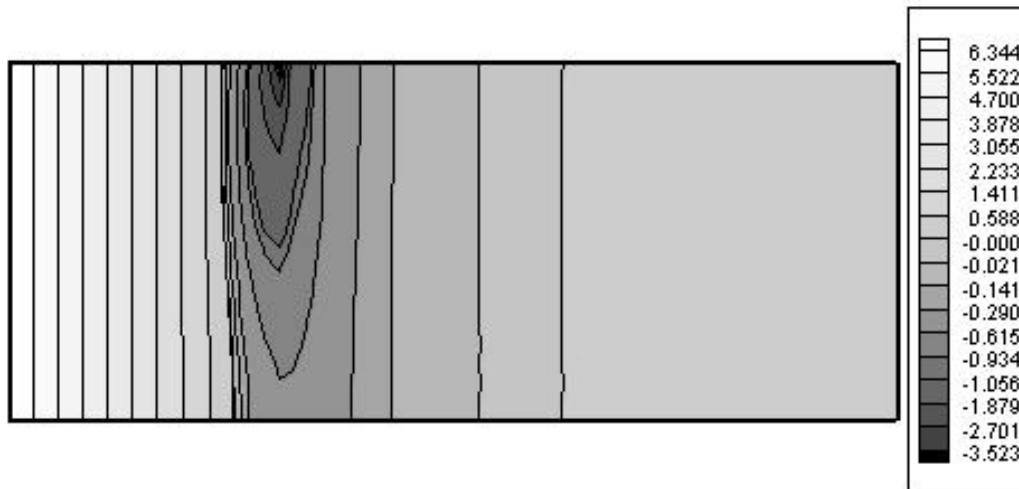


Figura 5.30. Curvas de nível para pressão no escoamento “*stick-slip*” ($L = 10$, $H = 1$).

Para a pressão, cujas curvas são mostradas na Figura 5.30, há uma significativa queda próximo a junção, sendo que esta tende a aumentar um pouco após o fluido passar por esta região, até atingir um valor constante.

5.2.2. Perfis na direção horizontal (x)

Nas seqüência, da Figura 5.31 até a Figura 5.34 são mostrados alguns perfis de variáveis na direção horizontal, para $y = 0.9$, obtidos com os dois esquemas em questão e diferentes tamanhos de malhas.

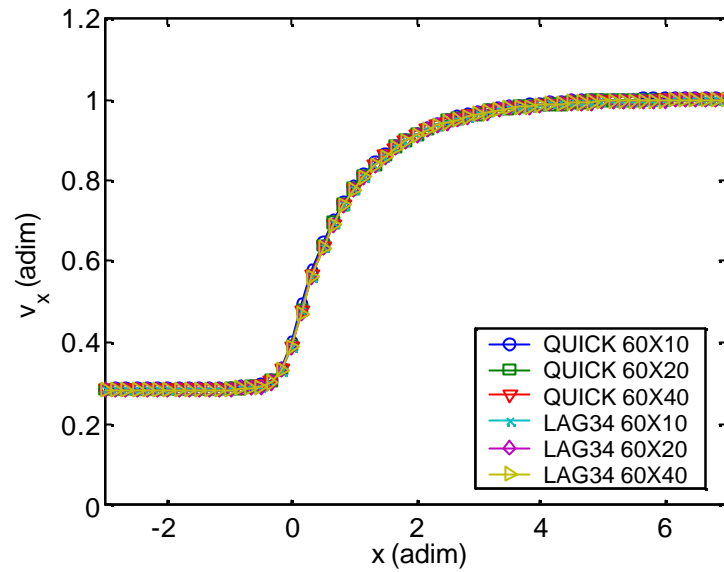


Figura 5.31. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

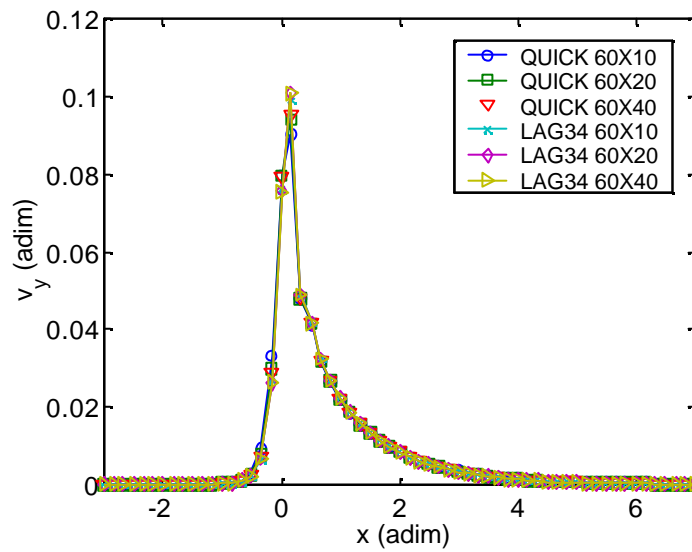


Figura 5.32. Perfis de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

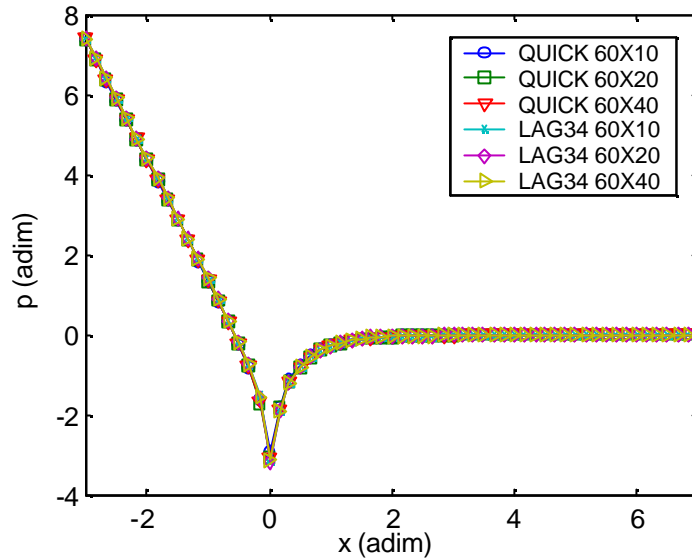


Figura 5.33. Perfis de pressão na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

Nestes gráficos pode-se ver que há variações severas junto à região de transição, semelhante ao que ocorre no problema anterior, e como já visto nas curvas de nível mostrada no item anterior.

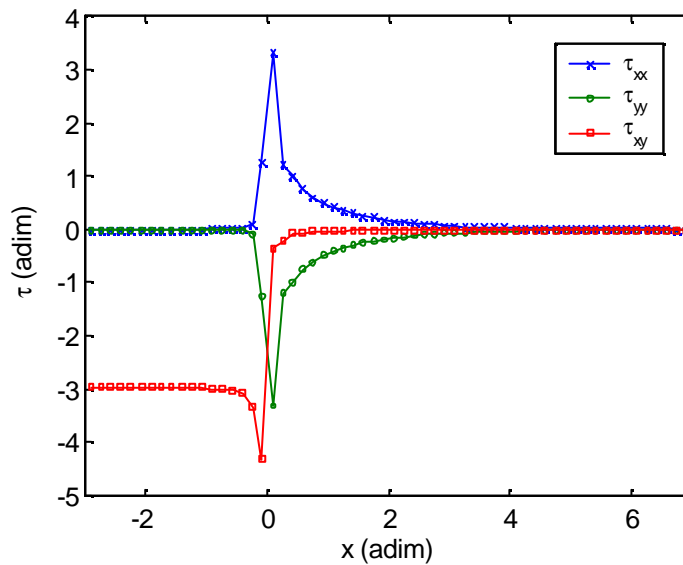


Figura 5.34. Perfis de tensão τ_{xx} , τ_{yy} , τ_{xy} e na direção horizontal em $y = 0.9$, obtidos a partir do campo de velocidades calculado.

Os resultados obtidos pelos esquemas usados são muito semelhantes entre si. Porém, a análise mais detalhada, nas regiões de maior variação, mostra que há diferenças quanto às aproximações. Para exemplificar, é mostrada na figura seguinte, o mesmo perfil mostrado na Figura 5.32, para a velocidade v_y , porém focado na região próxima a singularidade.

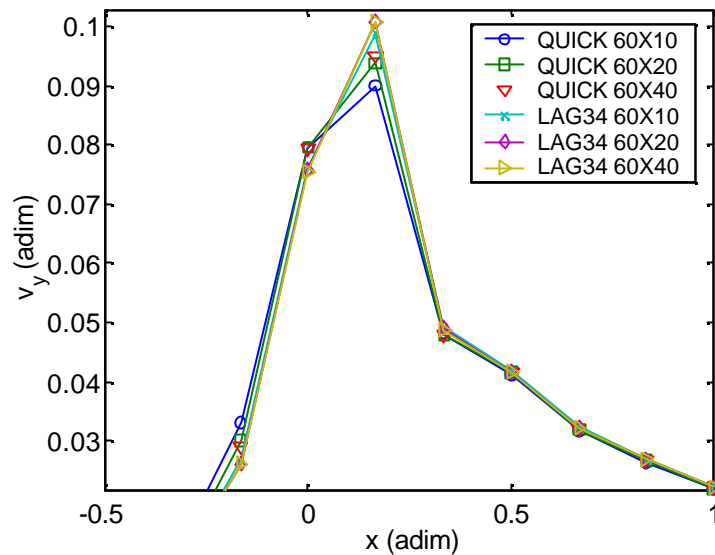


Figura 5.35. Perfis de velocidade v_y na direção horizontal em $y = 0.9$, para a região próxima a singularidade, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

Pode-se ver que, ao contrário do que poderia se pensar visualizando a Figura 5.32, há diferença entre os resultados obtidos para cada esquema. As soluções obtidas com o esquema LAG34 são quase os mesmos para as malhas estudadas, enquanto para as soluções obtidas com o esquema QUICK, pode-se observar que, com o refinamento da malha, a solução tende à solução obtida com o esquema LAG34.

Em relação ao escoamento “*slip-stick*”, há uma diferença a ser considerada nos resultados, que é a ausência de “*overshoot*” ou “*undershoot*” nas soluções. Desta forma não foi necessário utilizar aproximação de ordem reduzida na região junto à singularidade. Mesmo assim foram obtidos resultados com esta técnica, e verificou-se que as soluções são praticamente as mesmas, sendo melhores com o uso do esquema original na forma pura.

5.2.3. Perfis na direção vertical (y)

Como visto nos resultados mostrados até agora, o esquema LAG34 tem se mostrado superior em relação ao esquema QUICK. Esta superioridade é ressaltada ao observar os resultados obtidos para os perfis na direção vertical para as diferentes variáveis, dados da Figura 5.36 até a Figura 5.38.

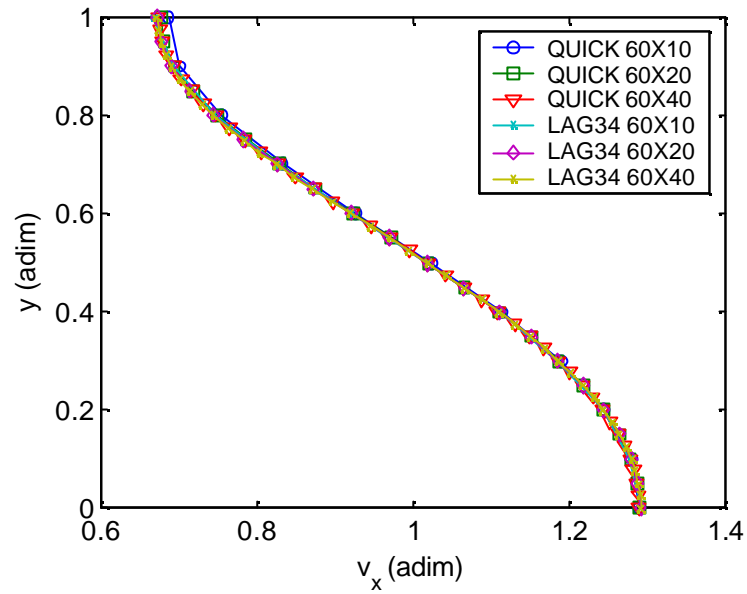


Figura 5.36. Perfis de velocidade v_x na direção vertical em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

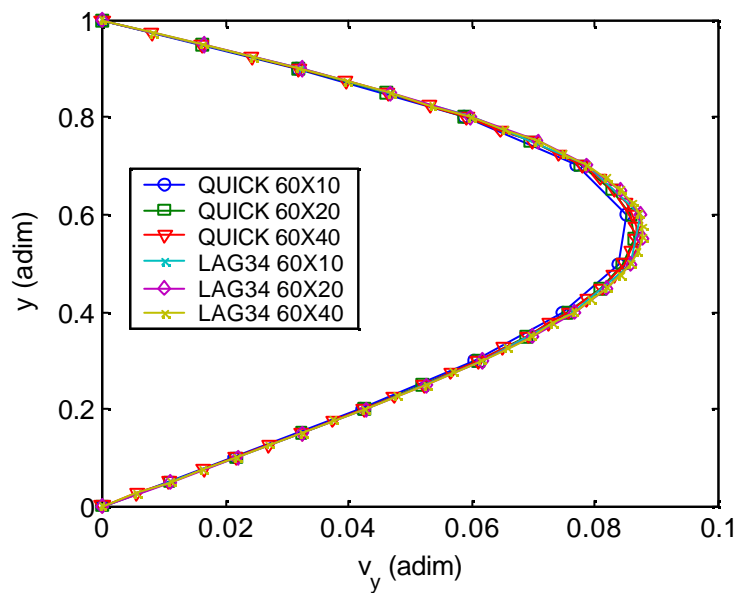


Figura 5.37. Perfis de velocidade v_y na direção vertical em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

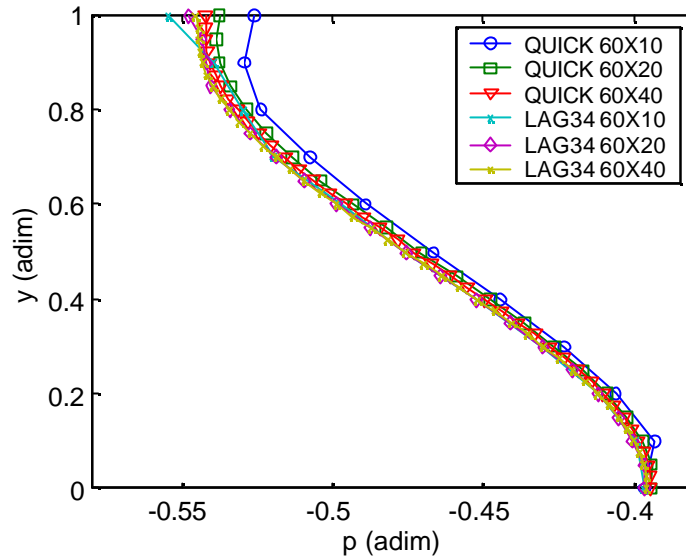


Figura 5.38. Perfis de pressão na direção vertical em $x = 0.6667$, obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

Como no item anterior, fica difícil ressaltar as diferenças entre as soluções obtidas. Para ter uma melhor visualização da diferença entre as soluções, é mostrada na Figura 5.39, apenas a região de máximo do perfil de velocidade v_y que é dado na Figura 5.37.

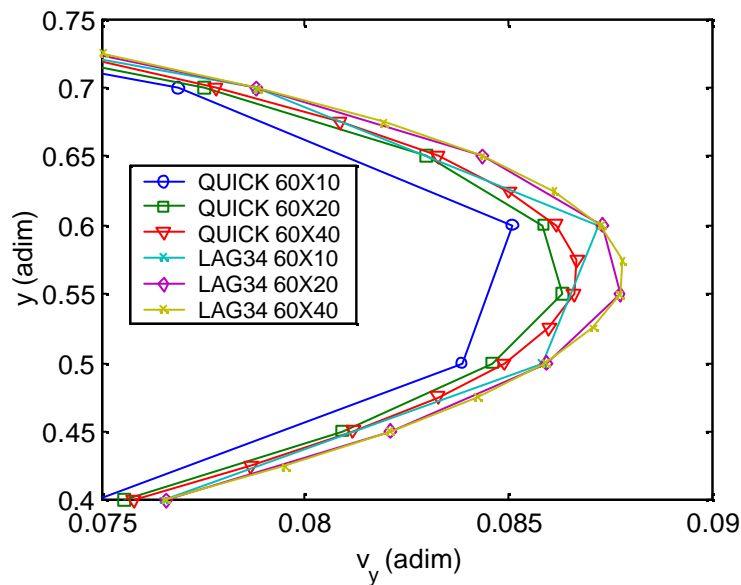


Figura 5.39. Perfis de velocidade v_y na direção vertical em $x = 0.6667$, para a região próxima a $y = 0.6$ (região de máximo) obtidos com os esquemas QUICK e LAG34 em diferentes tamanhos de malha.

Pode-se ver que as soluções obtidas com o esquema LAG34 são praticamente independentes da malha utilizada. Já as soluções obtidas com o esquema QUICK não têm a mesma qualidade, e se aproximam da solução dada pelo esquema LAG34 de acordo com o aumento do número de pontos na direção y .

Os tempos computacionais utilizados nas simulações, foi da mesma ordem de grandeza que os utilizados na resolução do problema anterior (escoamento “*slip-stick*”), para uma mesma malha.

5.3. Escoamento em cavidade quadrada

O escoamento em uma cavidade quadrada sob ação de uma placa deslizante no topo, conhecido na literatura como “*lid-driven*”, se caracteriza pela grande recirculação de fluido e pela formação de vórtices nas extremidades, especialmente sob números de Reynolds mais elevados. Uma representação esquemática da geometria deste escoamento é mostrada na Figura 5.40.

São aplicadas condição de não deslizamento em todos os contornos, sendo a velocidade nula em todas as paredes, exceto na placa que desliza a uma velocidade constante V .

Os comprimentos nas direção x e y , são iguais e dados por $L = 1$, sendo este o próprio comprimento característico. A velocidade característica é dada pela velocidade V com qual a placa superior se move.

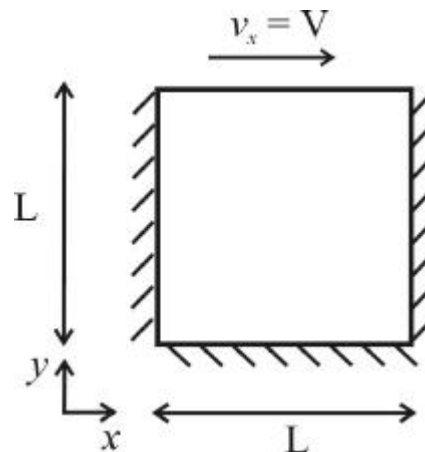


Figura 5.40. Representação esquemática do escoamento em cavidade quadrada.

São utilizadas diferentes malhas, uniformemente espaçadas, com o mesmo número de volumes nas duas direções. Os tamanhos utilizados foram de 10x10, 20x20, 30x30, 40x40 e 50x50.

O objetivo deste problema é comparar as soluções obtidas com o uso dos esquemas de 4ª ordem de Lagrange (LAG44) e de Padé (PADE44) para aproximação dos fluxos advectivos e difusivos. Desta forma, é usada nos dois casos a metodologia de alta ordem baseada nos

valores médios, e para a aproximação dos termos não lineares a aproximação de alta ordem apresentada no item 4.2.3.

Para traçar os perfis, foi usado um número maior de pontos em relação aos usados na aproximação, sendo estes valores obtidos pelo processo de deconvolução descrito no Apêndice 3, para uma precisão de 4ª ordem.

5.3.1. Curvas de nível para $Re = 400$

Em primeiro lugar, são mostradas as curvas de nível para a função corrente, velocidades na direção x e y e pressão, para o escoamento em cavidade com um número de Reynolds igual a 400. Foi usada uma malha 40x40 e o esquema LAG44 para a obtenção das soluções. Estas são dadas na seqüência, da Figura 5.41 até a Figura 5.44.

Nas curvas de nível para a função corrente, pode-se observar o padrão do escoamento na geometria em questão. O fluido sofre recirculação na cavidade sob a ação da placa superior, no sentido horário. Há formação de dois vórtices secundários nas extremidades inferiores, sendo o do canto direito o de maior intensidade.

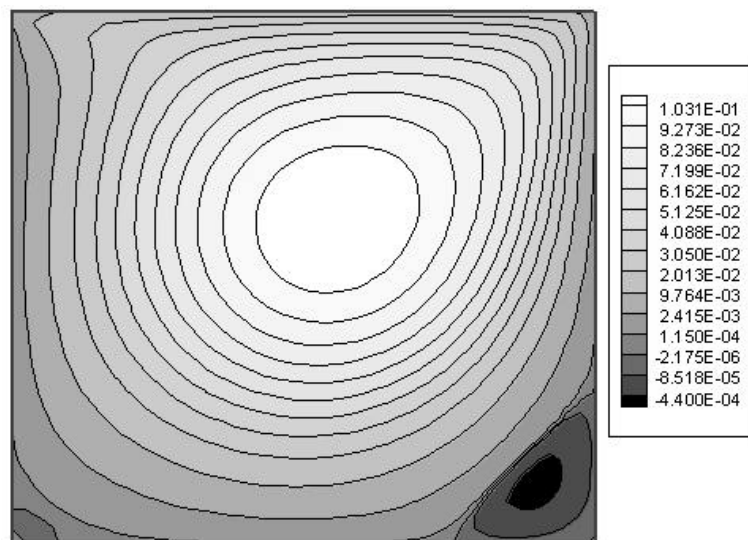


Figura 5.41. Curvas de nível para função corrente no escoamento em cavidade ($Re = 400$).

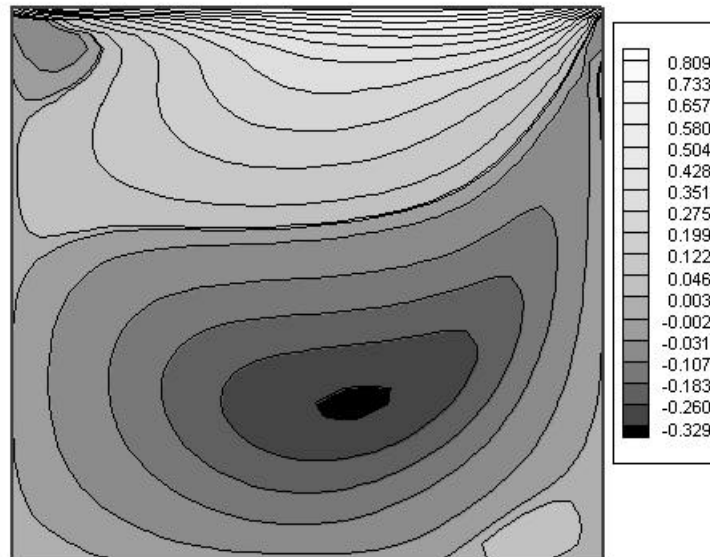


Figura 5.42. Curvas de nível para velocidade v_x no escoamento em cavidade ($Re = 400$).

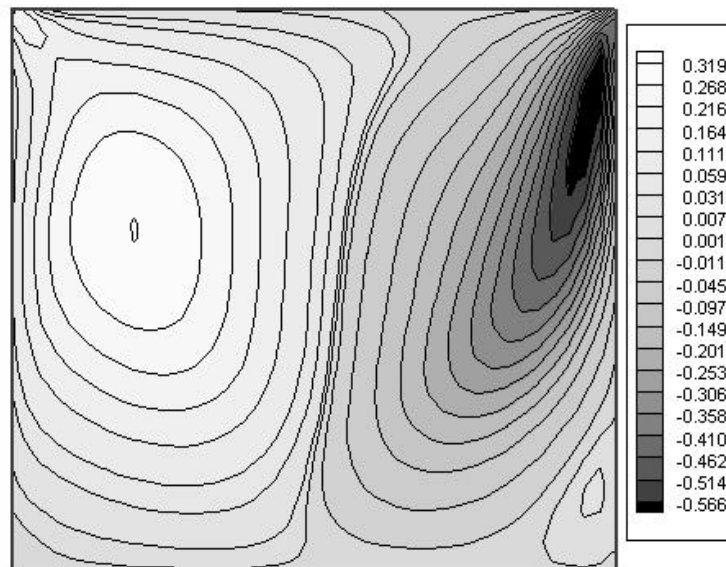


Figura 5.43. Curvas de nível para velocidade v_y no escoamento em cavidade ($Re = 400$).

Analisando as curvas para a velocidade v_x , verifica-se que há duas regiões de maior valor em módulo. Uma delas, próxima à placa que se move, e a outra logo abaixo a linha central, no sentido oposto ao da placa, refletindo o movimento de circulação de fluido que ocorre.

Fato similar ocorre para a velocidade v_y , onde cada um dos valores máximos em módulo se dão em diferentes lados da cavidade divididos por uma linha vertical central. Para a velocidade na direção positiva (no eixo y) tem-se o lado esquerdo, e para a direção negativa, o lado direito.

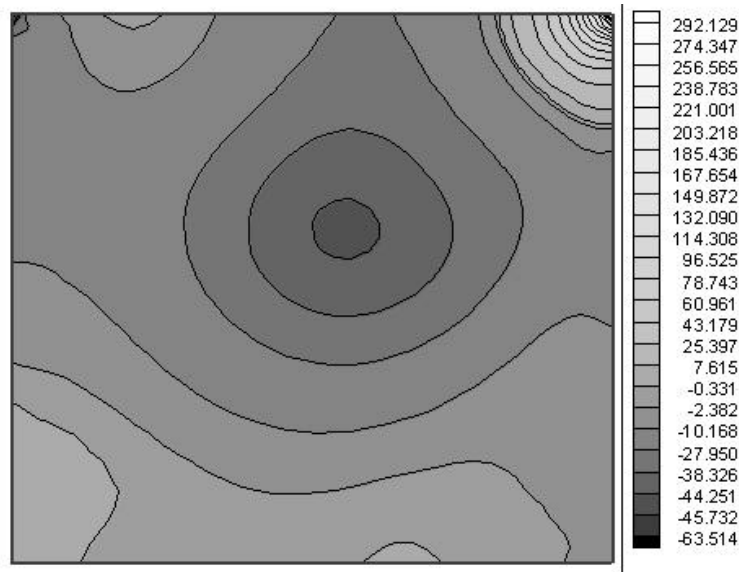


Figura 5.44. Curvas de nível para pressão no escoamento em cavidade ($Re = 400$).

Pode-se ver assim que os perfis de velocidades v_x e v_y nestas regiões são representativos na caracterização do escoamento. Deste modo, costuma-se utilizar na literatura, o perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x = 0.5$) e o perfil de v_y na linha horizontal central ($y = 0.5$) para testar metodologias numéricas e efetuar comparações entre soluções obtidas.

Outro tipo de comparação que pode ser feita é baseada no valor destas velocidades mínimas e/ou máximas, assim como no valor das coordenadas x e y no ponto onde este máximo/mínimo ocorre.

Comparações nestes estilos, baseadas na metodologia em questão, são mostradas nos itens seguintes.

5.3.2. **Comparações das velocidades máximas nas linhas centrais horizontal e vertical para $Re = 100$**

Neste item são feitas comparações entre soluções obtidas pela metodologia em questão e soluções obtidas por outros autores, que usam metodologias diferentes e também diferentes tipos de malha, para um número de Reynolds igual a 100.

Para esta comparação, são usados os resultados de Botella e Peyret (1998), o qual usa um método (espectral) de colocação de Chebyshev; de Ghia et al. (1982), que usa o método de diferenças finitas e uma técnica “*multigrid*”; de Deng et al. (1994), que usa o método dos volumes finitos; de Bruneau e Jouron (1990).

Na Tabela 5.2 são mostrados os resultados da literatura, referentes às referências citadas acima, para a velocidade mínima v_x na linha vertical central e o ponto correspondente no eixo y , e para as velocidades v_y máxima e mínima na linha horizontal central, e os pontos correspondentes no eixo x . São citadas também o tamanho das malhas utilizadas para a obtenção das soluções.

Os resultados obtidos com a metodologia em questão, são mostrados então na Tabela 5.3 para o esquema LAG44 e na Tabela 5.4 para o esquema PADE44.

Pode-se ver que as soluções obtidas pela metodologia estão mais próximas das soluções apresentada por Botella e Peyret (1998), que usa uma metodologia de alta precisão, baseada em um método espectral, e às soluções apresentadas por Deng et al. (1998), obtidas por extrapolação de Richardson. Comparados aos resultados obtidos por Ghia et al. (1982) e por Bruneau e Jouron (1990), pode-se ver que as soluções obtidas são melhores, mesmo em malhas muito mais grosseiras comparadas às usadas por estes (129x129), considerando a solução dada por Botella e Peyret (1998) a mais correta.

Tabela 5.2. Valores das velocidades mínimas e máximas (v_x min, v_y min, v_y max) nas linhas centrais e coordenadas (y min, x min, x max) correspondentes, para trabalhos da literatura.

| | Botella | Ghia | Bruneau | Deng |
|-----------|--------------------|---------|---------|---------------------|
| malha | 48x48 ¹ | 129x129 | 129x129 | extrap ² |
| y min | 0.4581 | 0.4531 | 0.4531 | - |
| v_x min | -0.2140 | -0.2109 | -0.2106 | 0.2141 |
| x min | 0.8104 | 0.8047 | 0.8125 | - |
| v_y min | -0.2538 | -0.2453 | -0.2521 | -0.2540 |
| x max | 0.2370 | 0.2344 | 0.2344 | - |
| v_y max | 0.1796 | 0.1753 | 0.1786 | 0.1795 |

¹ o resultado foi obtido com malhas de diferentes tamanhos, sendo com uma malha 48x48 se obtém a mesma qualidade de uma malha 96x96, e com 32x32 se consegue uma solução quase idêntica a estas. ² resultado obtido por extrapolação de Richardson.

Tabela 5.3. Valores das velocidades mínimas e máximas (v_x min, v_y min, v_y max) nas linhas centrais e coordenadas (y min, x min, x max) correspondentes, obtidos com o esquema LAG44.

| LAG 44 | 20x20 | 30x30 | 40x40 | 50x50 |
|-----------|---------|---------|---------|---------|
| y min | 0.4562 | 0.4583 | 0.4578 | 0.4575 |
| v_x min | -0.2129 | -0.2136 | -0.2138 | -0.2139 |
| x min | 0.8094 | 0.8104 | 0.8109 | 0.8100 |
| v_y min | -0.2526 | -0.2536 | -0.2537 | -0.2537 |
| x max | 0.2344 | 0.2375 | 0.2375 | 0.2375 |
| v_y max | 0.1798 | 0.1794 | 0.1794 | 0.1794 |

Tabela 5.4. Valores das velocidades mínimas e máximas (v_x min, v_y min, v_y max) nas linhas centrais e coordenadas (y min, x min, x max) correspondentes, obtidos com o esquema PADE44

| PADE 44 | 20x20 | 30x30 | 40x40 |
|-----------|---------|---------|---------|
| y min | 0.4562 | 0.4583 | 0.4578 |
| v_x min | -0.2144 | -0.2143 | -0.2142 |
| x min | 0.8094 | 0.8104 | 0.8109 |
| v_y min | -0.2534 | -0.2541 | -0.2540 |
| x max | 0.2344 | 0.2375 | 0.2375 |
| v_y max | 0.1808 | 0.1801 | 0.1798 |

Comparando as soluções obtidas pelos dois esquemas usados, pode-se ver que são de mesma qualidade, sendo os valores obtidos, muito próximos entre si. Um dos esquemas leva a um melhor resultado que o outro em alguma(s) das aproximações, e vice-versa. No próximo item, pode-se ver que com o aumento do número de Reynolds, começam a surgir diferenças entre as aproximações com os distintos esquemas.

5.3.3. Comparações dos perfis centrais para $Re = 400$

Neste item são comparados os perfis vertical central de velocidade v_x e horizontal central de velocidade v_y , obtidos com os esquemas PADE44 e LAG44, para um número de Reynolds igual a 400. De forma a ilustrar as soluções obtidas, são mostrados os perfis de forma completa na Figura 5.45, para qual se utilizou uma malha 40x40 e o esquema PADE44.

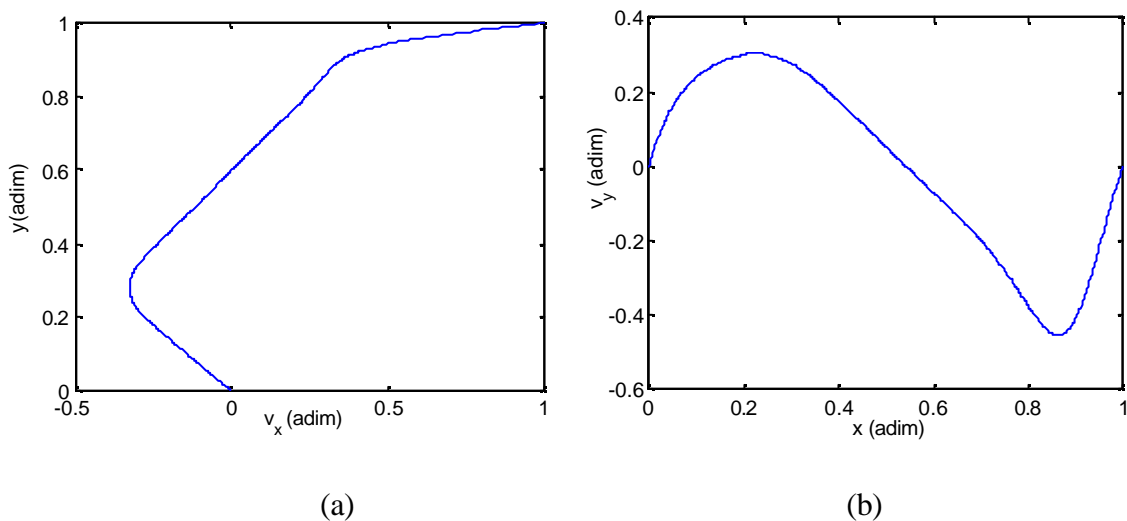


Figura 5.45. Perfil de velocidade v_x vertical central (a) e perfil de velocidade v_y horizontal central (b) para $Re = 400$.

Não foram traçados perfis obtidos com os diferentes tamanhos de malha porque, visualizando-os como um todo, não trazem muita informação em relação à precisão obtida, como pôde ser visto nos exemplos apresentados no item 5.2. Na seqüência são mostradas comparações entre as soluções obtidas a partir de uma ampliação nas regiões de velocidades máximas e mínimas (ou máximas no sentido negativo). As diferentes soluções obtidas para o perfil vertical central de v_x são mostradas na Figura 5.46, destacando a região de velocidade máxima em módulo. É feito o mesmo para o perfil horizontal central de v_y , destacados nas regiões de velocidade máxima e mínima, na Figura 5.47 e na Figura 5.48, respectivamente.

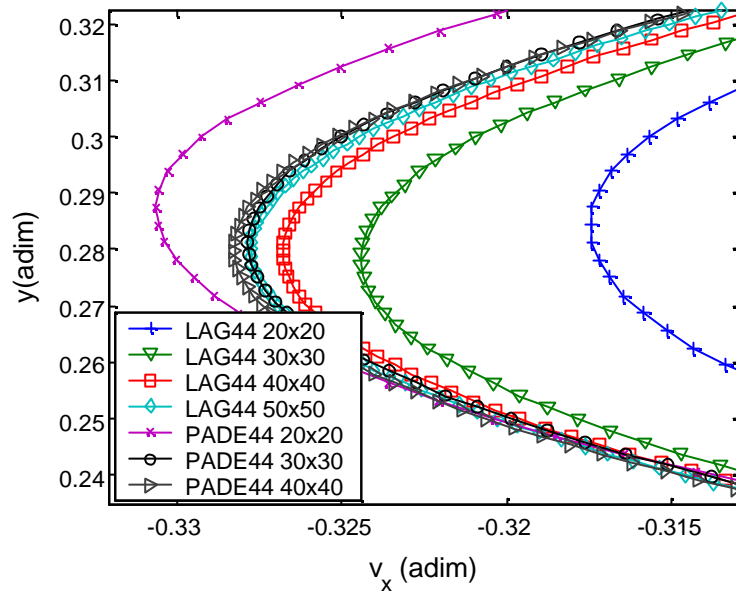


Figura 5.46. Perfis de velocidade v_x vertical central obtidos com os esquemas LAG44 e PADE44 para diferentes malhas, próximo a $y = 0.3$ (região de máximo).

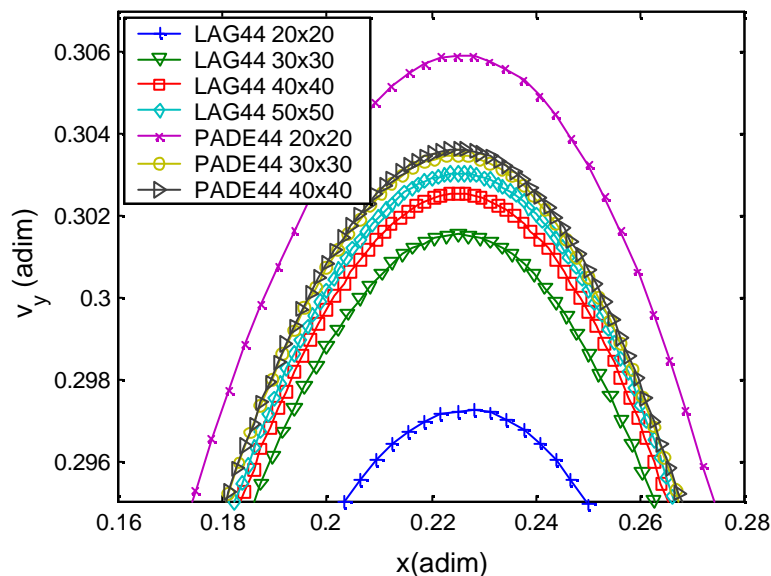


Figura 5.47. Perfis de velocidade v_y horizontal central obtidos com os esquemas LAG44 e PADE44 para diferentes malhas, próximo a $x = 0.25$ (região de máximo).

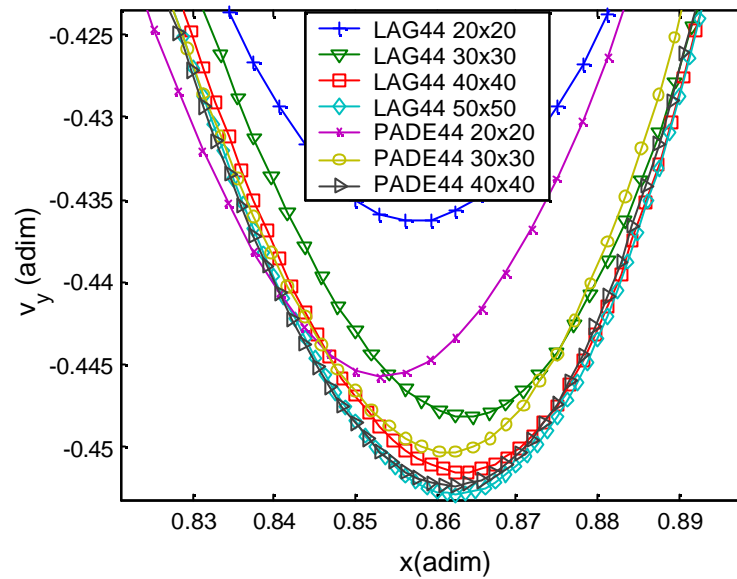


Figura 5.48. Perfis de velocidade v_y horizontal central obtidos com os esquemas LAG44 e PADE44 para diferentes tamanhos de malha, próximo a $x = 0.85$ (região de velocidade mínima).

Pode-se ver por estes resultados, que o esquema PADE44 leva a soluções muito similares em malhas 30x30 e 40x40. Ao observar a solução dada por uma malha 20x20, percebe-se que com o refinamento da malha a solução avança rapidamente em direção a solução correta.

Com o esquema LAG44, as soluções obtidas tendem à solução obtida com o esquema PADE44, sendo que a aproximação melhora com o refinamento da malha, porém mesmo com uma malha 50x50 não se consegue chegar à solução obtida em uma malha 30x30 com o esquema PADE44.

No entanto, a grande desvantagem do esquema PADE44 é o alto tempo computacional necessário na resolução das equações, pelo fato de se trabalhar com matrizes densas. O esquema LAG44 resulta em uma matriz esparsa com dominância diagonal, sendo desta forma necessário menor esforço computacional comparado a situação citada acima.

Para se ter uma idéia, a razão entre os tempos necessários para a obtenção da solução com o esquema PADE44 em uma malha 30x30 e com o esquema LAG44 em uma malha 50x50 é de 4, ou seja, a aplicação do esquema PADE44 leva a tempos computacionais muito maiores. Assim, se levarmos em conta os dois aspectos, tempo computacional e precisão, o uso do esquema LAG44 se mostra mais vantajoso.

Porém, pode-se investir na melhoria do método numérico quando usar o esquema compacto, de modo a melhorar a eficiência da aplicação deste. Um exemplo é aplicação de um método iterativo com pré-condicionamento, de modo a tornar mais rápida a solução do sistema linear.

5.4. Conclusões

Neste capítulo foram resolvidos três problemas usando a metodologia descrita no capítulo anterior. A partir dos resultados obtidos, foi possível tirar muitas conclusões.

O primeiro ponto estudado foi a ocorrência de soluções oscilatórias para a pressão, fato que ocorre com o uso do arranjo desencontrado. Foi visto que isto ocorre somente quando se usa esquemas centrados na aproximação das variáveis. Para solucionar este problema foi proposta a utilização de um esquema de ordem ímpar na aproximação das variáveis, e foi verificado que as soluções obtidas são totalmente isentas destas oscilações.

Pelos dois primeiros problemas pode-se ver que o uso da metodologia baseada em valores médios, com o esquema de Lagrange de 3^a ordem na aproximação dos fluxos advectivos médios e com o de Lagrange de 4^a ordem na aproximação dos fluxos difusivos médios, foi muito superior em relação à qualidade das soluções obtidas, comparado a metodologia convencional, na qual, para se exemplificar, utilizou-se o esquema QUICK na aproximação dos fluxos advectivos médios e de diferenças centrais de 2^a ordem na aproximação dos fluxos difusivos médios. Isso era esperado, pelo fato de se ter aproximações de maior ordem, porém o que foi verificado é que o tempo computacional para a obtenção das soluções é praticamente equivalente, considerando uma mesma malha. Se for comparada soluções de mesma qualidade, na qual se necessita de uma malha mais refinada com o uso da metodologia convencional, o uso da metodologia de alta ordem se mostra ainda melhor.

No escoamento “*slip-stick*”, verificou-se que houve problemas em relação à aproximação das variáveis junto à descontinuidade, o que é comum quando se empregam esquemas de alta ordem na aproximação das variáveis. Para evitar isto, foi proposta a utilização de um esquema de menor ordem em pontos próximos à singularidade, e verificou-se que este problema foi resolvido. Verificou-se também que o número de pontos usados deve buscar o equilíbrio, entre evitar a formação de soluções oscilatórias e obter a solução com a maior precisão possível, ou seja, usando o número mínimo possível de pontos com redução de ordem na aproximação. Para tanto, é recomendado a utilização de um critério para a definição de quando usar ou não o esquema de menor ordem. Este critério pode ser o CBC de Gaskell e Lau (1988), e baseado neste, pode-se criar um esquema tipo HRS envolvendo a metodologia citada.

Para o escoamento “*stick-slip*” este problema não ocorreu, conseguindo-se boas soluções sem a necessidade de empregar a técnica citada acima.

Desta forma, é recomendada a utilização da metodologia de alta ordem, mais especificamente com o esquema LAG34, na resolução do escoamento de fluidos newtonianos, devido as vantagens trazidas, mostradas neste capítulo. No capítulo seguinte, esta metodologia é empregada na resolução de problemas envolvendo o escoamento de fluidos viscoelásticos.

O problema do escoamento em cavidade serviu para comparar a metodologia de alta ordem com resultados da literatura, obtidos por diferentes métodos. O que se concluiu é que os resultados apresentam boa concordância com os apresentados por Botella e Peyret (1998), que usaram um método espectral de colocação de Chebyshev, ou seja, um método de alta precisão, em diferentes malhas e com os apresentados por Deng et al.(1994), que utilizou um método de volumes finitos e a técnica de extrapolação de Richardson para obtenção dos valores. Considerando que estas soluções são as mais corretas, as soluções obtidas em uma malha 30x30 foram muito superiores às obtidas por Ghia et al. (1982) e Bruneau e Jouron (1990), ambas usando uma malha 129x129.

Este problema foi usado também para comparar os esquemas de Lagrange de 4ª ordem e de Padé de 4ª ordem na aproximação dos fluxos advectivos e difusivos médios. Para o problema em $Re = 100$ não houveram diferenças significativas entre os resultados obtidos. Para um número de Reynolds mais elevado, como se viu para $Re = 400$, o esquema de Padé se mostrou superior ao Lagrange, sendo que a solução obtida em uma malha 30x30 com o esquema Padé se mostrou superior à solução obtida em uma malha 50x50 com o esquema Lagrange. Porém, o uso do esquema Padé tem o inconveniente de aumentar consideravelmente o tempo computacional, o que torna praticamente inviável a sua aplicação na solução de problemas em malhas mais refinadas, a não ser que se utilize um método iterativo com pré-condicionamento, que torne a resolução dos sistemas lineares das equações discretizadas mais eficiente.

Capítulo 6 Resultados para Fluidos Viscoelásticos

No capítulo anterior foram mostrados resultados para problemas envolvendo fluidos newtonianos em duas geometrias distintas. Foi possível avaliar muitos aspectos da metodologia, e as conclusões tiradas foram apresentadas ao final do capítulo.

Baseado nestes resultados, é proposta a utilização do esquema LAG34 nas aproximações para os problemas envolvendo escoamentos de fluidos viscoelásticos. Relembrando, o esquema LAG34 corresponde ao uso do esquema de Lagrange de 3ª ordem para aproximação dos fluxos advectivos e Lagrange de 4ª ordem para aproximação dos fluxos difusivos. É usada ainda a metodologia de aproximação dos termos não lineares descrita no item 4.2.3, sendo que estes passam a ter grande importância nos problemas deste capítulo.

São mostrados então, neste capítulo, resultados para escoamentos de fluidos viscoelásticos, utilizando a metodologia proposta. Como já dito, são usadas duas equações constitutivas, que são o modelo de Oldroyd-B e o modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado (SPTT).

Os problemas estudados foram o escoamento de saída de placas paralelas para superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”), sendo os resultados apresentados no item 6.1, e o escoamento em uma contração plana, tratado no item 6.2. Ao final, são mostradas as conclusões tiradas referentes a estes problemas.

Neste capítulo, quando se fala em tensões, representadas pelas componentes τ_{ij} do tensor das tensões, na verdade se refere apenas à contribuição polimérica na tensão total, dada por τ_{ij}^P , visto que estas são variáveis dependentes do problema.

6.1. Escoamento “*Stick-Slip*”

A descrição deste problema foi feita no item 5.2, visto que este foi estudado também para fluidos newtonianos. Este pode ser encarado como uma primeira aproximação do processo de extrusão, no qual o fluido escoo por uma matriz, saindo desta para uma superfície livre. Porém, como é sabido, para fluidos poliméricos ocorre um fenômeno chamado de inchamento do extrudado (“*die-swell*”), no qual a seção vertical do escoamento aumenta em tamanho após a saída da matriz, devido à elasticidade do fluido. No problema em questão, este fenômeno não é levado em conta, mas existem muitos trabalhos na literatura que resolvem este problema (seção de inchamento) juntamente com o escoamento que precede a saída.

Como visto no capítulo anterior, este problema apresenta dificuldades na sua resolução numérica, que consiste na aproximação das variáveis na região próxima à singularidade. No caso de fluidos viscoelásticos, este problema é mais grave ainda, visto que as componentes do tensor das tensões poliméricas passam a ser variáveis dependentes, e devem então ser aproximadas. Estas tensões apresentam altos valores, em especial nas regiões próximas à singularidade e, além disso, os gradientes também são muito severos nesta região, sendo estas características tão mais acentuadas quanto maior a elasticidade do fluido, refletidas pelo número de Weissenberg.

6.1.1. Perfis desenvolvidos

Antes de resolver o problema em questão, foi resolvido o escoamento na parte da geometria referente apenas à região anterior à singularidade, que é o escoamento entre placas paralelas, usando o modelo de Oldroyd-B. O objetivo era verificar a qualidade da aproximação de alta ordem do perfil de tensões desenvolvido.

Para o fluido de Oldroyd-B, o perfil de tensão normal τ_{xx} é uma equação de 2º grau no comprimento, e é dependente do número de Weissenberg, o que não ocorre para os perfis de tensão de cisalhamento e velocidade na direção x . Deste modo, este foi calculado para diferentes números de Weissenberg e, para qualquer valor usado, foi obtido o perfil exato. Na Figura 6.1. são mostrados alguns perfis obtidos, considerando a viscosidade $\eta_E = 0.5$ na equação constitutiva.

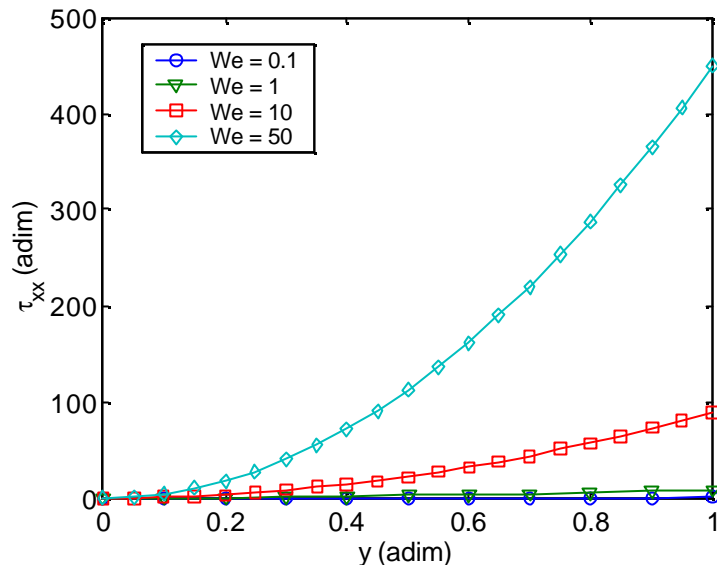


Figura 6.1. Perfis de tensão normal τ_{xx} no escoamento plenamente desenvolvido para diferentes números de Weissenberg, usando o modelo de Oldroyd-B.

Pode-se ver que quanto maior o número de Weissenberg, maior o valor da tensão, assim como o seu gradiente na direção y . Para visualizar melhor os perfis para mais baixos We , são mostrados apenas estes na Figura 6.2.

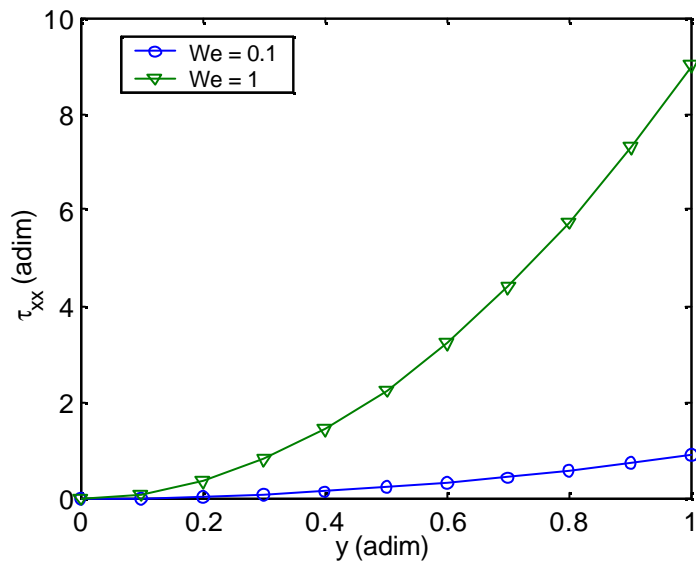


Figura 6.2. Perfis de tensão normal τ_{xx} no escoamento plenamente desenvolvido para número de Weissenberg iguais a 0.1 e 1, usando o modelo de Oldroyd-B.

Estes perfis são também afetados pelo valor da viscosidade η_E , que reflete a contribuição polimérica na viscosidade do fluido, sendo que quanto maior este valor, mais acentuada é a característica elástica e, portanto, maior a tensão. Para visualizar este efeito, são mostrados na Figura 6.3 os perfis obtidos para diferentes valores deste parâmetro, considerando $We = 10$.

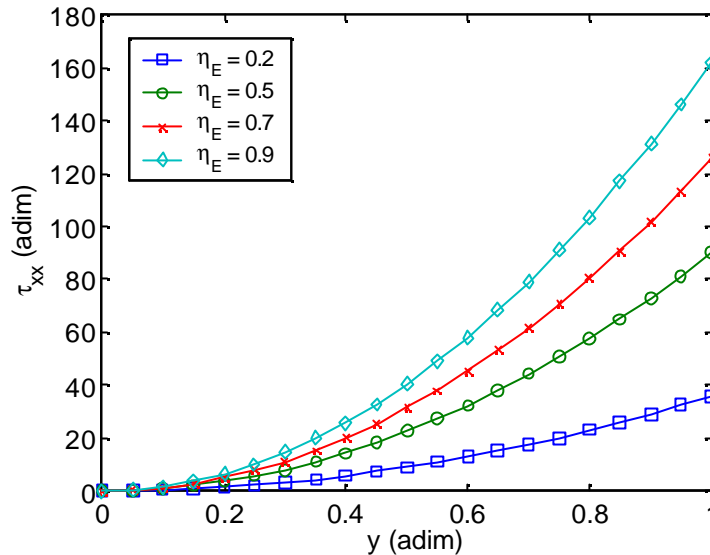


Figura 6.3. Perfis de tensão normal τ_{xx} no escoamento plenamente desenvolvido para número de Weissenberg igual a 10 e para diferentes valores de η_E , usando o modelo de Oldroyd-B.

Para o modelo SPTT verifica-se comportamento totalmente análogo, sendo os perfis obtidos muito semelhantes a estes. Uma diferença a ser citada é a dependência da velocidade v_x e da tensão de cisalhamento com o número de Weissenberg, o que não ocorre para o modelo de Oldroyd-B. Isto se deve ao fato da viscosidade ser constante para o modelo de Oldroyd-B, e ser dependente do campo de velocidades para o modelo SPTT.

6.1.2. Efeito dos parâmetros das equações constitutivas

Neste item são verificados os efeitos dos parâmetros das equações constitutivas usadas nas soluções obtidas para o escoamento “*stick-slip*”, assim como são feitas comparações entre as soluções para cada modelo. Para tanto, a geometria considerada possui comprimentos anterior e posterior a singularidade iguais a 6 e altura do canal igual a 1. O número de Reynolds usado é igual a 0.1, o número de Weissenberg é igual a 0.1 e a malha utilizada é de 36×10 .

Na Figura 6.4, são verificados os efeitos do parâmetro η_E do modelo de Oldroyd-B no perfil de tensão τ_{xx} ao longo da linha horizontal em $y = 0.95$. Verifica-se que quanto maior η_E , maior é o valor da tensão na região de escoamento entre placas paralelas, o que pode ser visto também nos perfis mostrados na Figura 6.3 (para $We = 10$). Verifica-se ainda que quanto maior este parâmetro, maior o pico de tensão, sendo que a razão entre o valor no pico e o valor no escoamento desenvolvido, se mantém praticamente constante para todas as situações, em torno de 2.6.

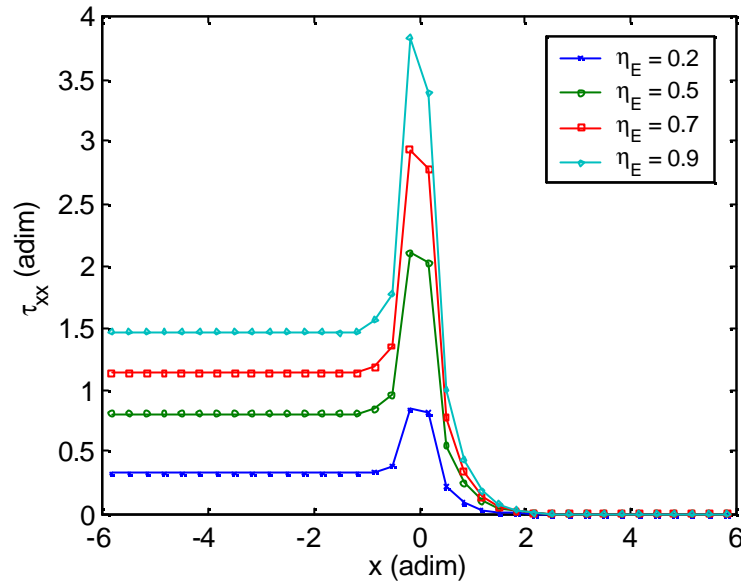


Figura 6.4. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1 e para diferentes valores de η_E , referente ao modelo de Oldroyd-B.

Outro ponto a ser analisado é, que quanto maior o valor de η_E , mais difícil se torna as aproximações das variáveis, visto que mais pronunciado é o efeito elástico. Para observar esta influência, é mostrado na Figura 6.5 o perfil de velocidade v_x horizontal para $y = 0.95$, obtidos para diferentes valores de η_E , e na Figura 6.6 o mesmo com destaque na região de saída das placas.

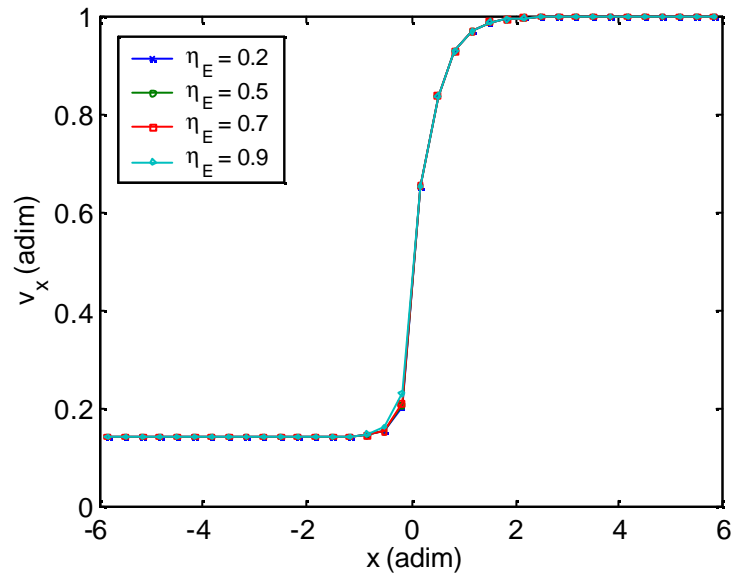


Figura 6.5. Perfil horizontal de velocidade v_x , para $y = 0.95$, $We = 0.1$ e diferentes valores de η_E , referente ao modelo de Oldroyd-B.

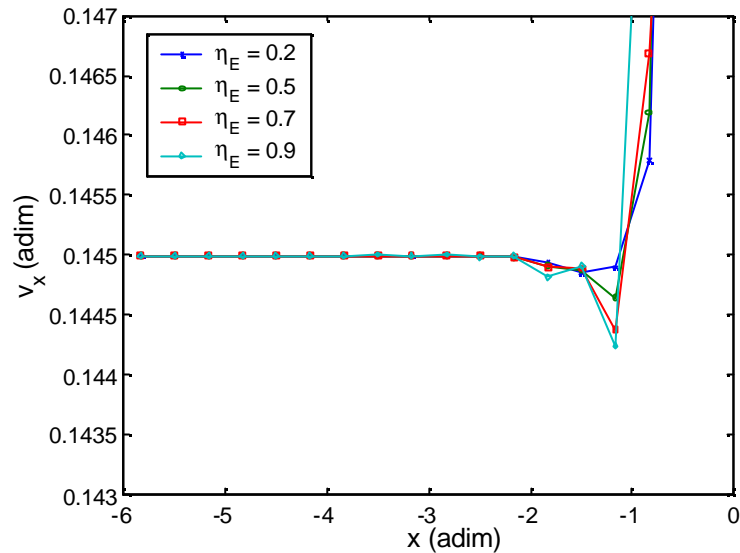


Figura 6.6. Mesmo perfil apresentado na Figura 6.5, com destaque na região da saída das placas, próximo a singularidade.

Pode-se ver que quanto maior o valor do parâmetro, mais difícil se torna a aproximação, surgindo as oscilações (“undershoots”) características da aproximação de alta ordem na região próxima a singularidade. Após esta região, o perfil não apresenta problemas de estabilidade.

O modelo de Phan-Thien-Tanner contém o mesmo parâmetro η_E , inclusive com o mesmo significado, e os resultados com a variação deste são totalmente análogos. Porém, este modelo contém também o parâmetro ε . Para verificar a influência deste no perfil de tensão normal τ_{xx} horizontal, são mostrados na Figura 6.7, estes perfis obtidos para diferentes valores do parâmetro ε , sendo $\eta_E = 0.5$.

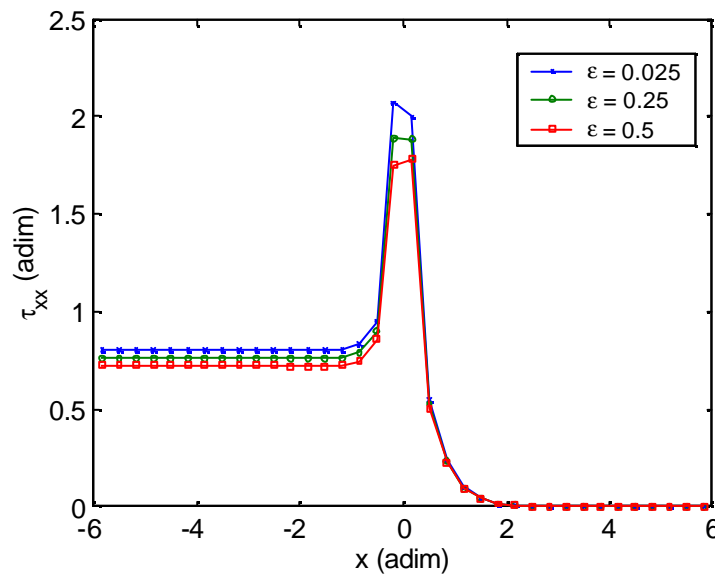


Figura 6.7. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para $We = 0.1$ e para diferentes valores de ε , referente ao modelo de Phan-Thien-Tanner.

Pode-se ver que com o aumento deste parâmetro, a intensidade do pico diminui, sendo que o valor da tensão no escoamento desenvolvido também é menor quanto maior o valor do parâmetro. A razão entre o valor da tensão no pico e na região de escoamento desenvolvido também diminui com o aumento do parâmetro.

O valor de ε também influi no perfil de velocidades na direção x . Para verificar, é mostrado na Figura 6.8 o perfil de velocidade v_x na direção horizontal destacado na região próxima à singularidade. No restante do domínio, o perfil apresenta a mesma tendência observada na Figura 6.5, que corresponde ao fluido Oldroyd-B.

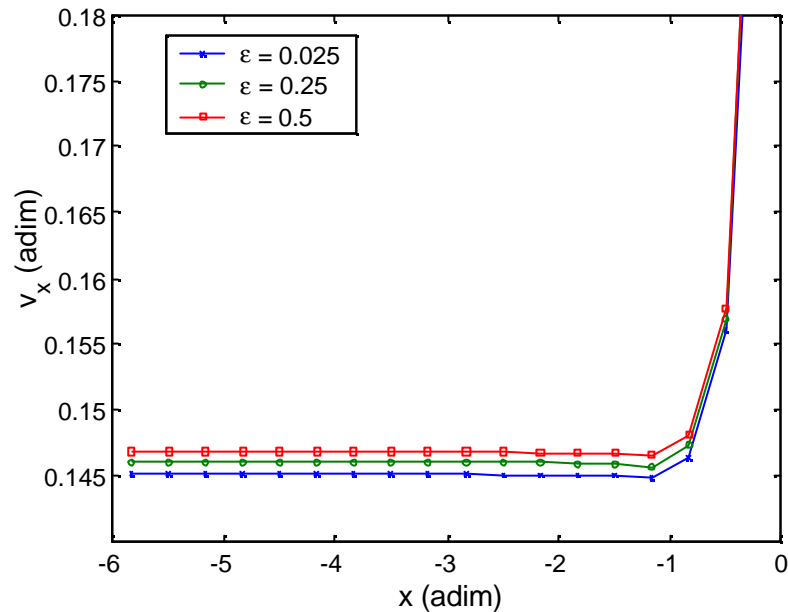


Figura 6.8. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1 e para diferentes valores de ε , referente ao modelo de Phan-Thien-Tanner.

Comparando o perfil de tensão τ_{xx} na direção horizontal, para os dois modelos, pode-se verificar que há diferenças entre eles. O perfil previsto pelo modelo SPTT apresenta um pico menor, assim como menor tensão na região de escoamento desenvolvido, para um mesmo valor de η_E . Deve-se lembrar que o modelo de Oldroyd-B pode ser encarado como um limite do modelo SPTT para $\varepsilon = 0$, sendo que o aumento deste parâmetro suaviza o pico conforme visto na Figura 6.7. Para visualizar estas diferenças, são mostrados na Figura 6.9, os perfis obtidos para os dois modelos para $\eta_E = 0.5$.

Pode-se ver que quanto maior o número de Weissenberg, maior a diferença entre os picos previstos pelos modelos, e este é o motivo pelo qual se consegue obter soluções em maiores números de Weissenberg usando o modelo SPTT do que com o modelo de Oldroyd-B.

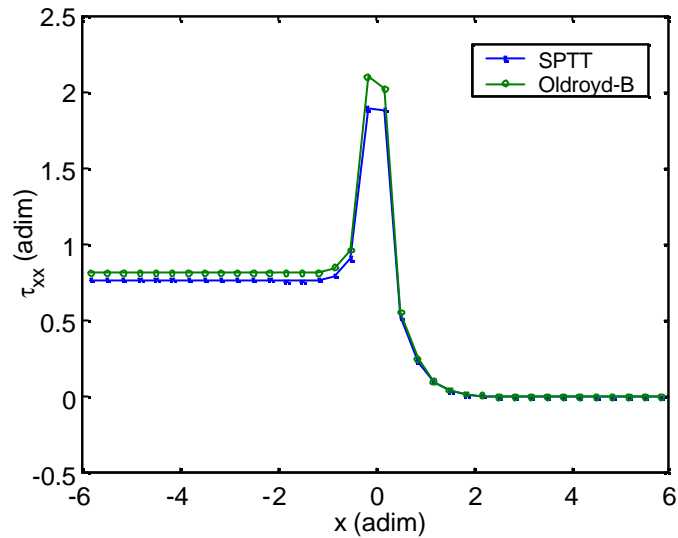


Figura 6.9. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1, usando os modelos de Oldroyd-B e SPTT ($\epsilon = 0.25$).

Outro ponto a ser ressaltado é que a altura do pico, obviamente é dependente do refinamento da malha junto à singularidade. Para verificar isto, foi obtido o perfil de tensão τ_{xx} , com o modelo de Oldroyd-B para uma malha 60×10 e comparado ao perfil obtido por uma malha 36×10 , sendo os dois perfis mostrados na Figura 6.10.

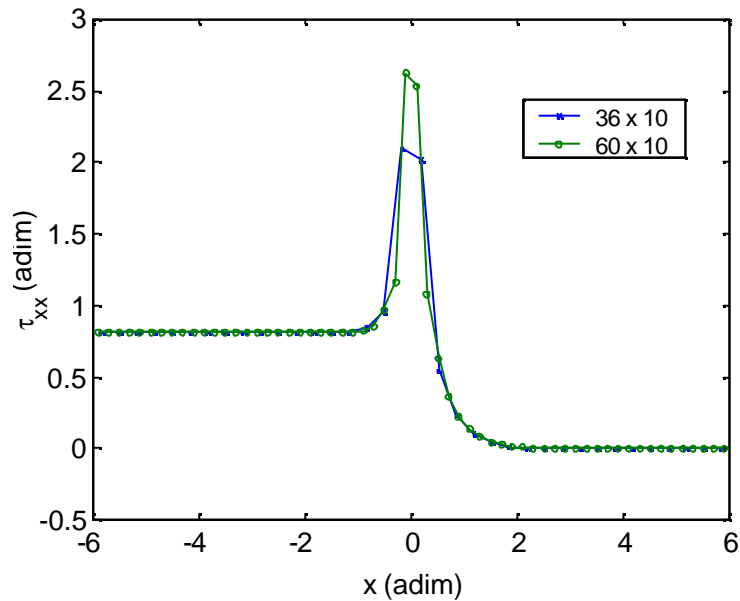


Figura 6.10. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$, para número de Weissenberg igual a 0.1, usando o modelo de Oldroyd-B ($\eta_E = 0.5$), para malhas 36×10 e 60×10 .

6.1.3. Dificuldade na obtenção de soluções em altos números de Weissenberg

Pôde-se notar que nos exemplos utilizados até agora, excetuando-se o simples escoamento entre placas paralelas, foi considerado um número de Weissenberg baixo. Verificou-se, no item 6.1.1, ou mais especificamente, na Figura 6.1, que quanto maior este número adimensional, maiores as tensões no fluido e, também, maior o gradiente. No escoamento em questão, esta característica fica ainda mais acentuada, devido aos saltos nos perfis de tensões junto à singularidade. Para capturar-se bem estes saltos, e evitar a propagação de oscilações devido a erros nas aproximações, deve-se utilizar malhas muito refinadas junto a esta região, como muitas encontradas na literatura (Esselaoui et al. 2000, Moatassime e Jouron, 2001). Estas malhas geralmente são de espaçamento variável, sendo mais concentradas na região junto à singularidade.

Desta forma, pelo modo que foi implementada a metodologia, a obtenção de soluções a altos números de Weissenberg tem um elevado custo computacional. Os esquemas foram desenvolvidos para espaçamento uniforme, de modo que para se obter uma malha refinada junto a singularidade, deve-se refinar todo o restante da malha. Com isto o número de variáveis fica muito grande, de modo que o custo computacional para solução dos sistemas lineares de equações discretizadas torna-se proibitivo.

Isto não quer dizer que a metodologia não sirva para resolução de escoamentos a maiores We , pois os inconvenientes citados acima podem ser facilmente contornados. Por exemplo, pode-se derivar esquemas de aproximação para malhas de tamanho variável, baseados no mesmo princípio dos desenvolvidos neste trabalho. Pode-se ainda melhorar o desempenho da etapa de resolução do sistema de equações discretizadas, pelo emprego de um método iterativo com um pré-condicionamento eficiente na resolução dos sistemas lineares, ou pelo cálculo da matriz Jacobiana de forma analítica, visto que esta é calculada atualmente por perturbações, o que acarreta um maior custo computacional.

Na literatura, o número de Weissenberg máximo obtido neste problema é variável para cada caso. Como exemplos, tem-se $We_{max} = 17$ em Essaloui et al. (2000) e $We_{max} = 10$ em Moatassime e Jouron (2001), ambos com o uso do modelo SPTT. As malhas usadas são mostradas em cada trabalho, tendo em comum o espaçamento variável e alta concentração de pontos próximos a região de interesse.

Para $We = 0.1$ e $Re = 0.1$, conseguiram-se boas soluções, como pôde ser visto nos exemplos mostrados no item 6.1.2. Com o aumento deste, a solução passou a apresentar oscilações na parte anterior à singularidade, sendo que na região posterior não houve problemas. Verificou-se que com o aumento do comprimento da região anterior, há uma melhora da solução, porém não suficiente para resolver o problema, apenas suavizando os efeitos de oscilação. Isto provavelmente deve-se ao maior amortecimento das oscilações provenientes do pico no perfil, quando se tem maiores comprimentos.

Desta forma, são mostrados na Figura 6.11, os perfis de tensão τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$ para diferentes números de Weissenberg, obtidos com o modelo de Oldroyd-B e $\eta_E = 0.5$, para um número de Reynolds igual a 1. O comprimento anterior a singularidade é de 12, e posterior igual a 8, e a malha usada é de 40×10 . Deve-se citar, que as oscilações na solução, como as presentes neste caso, em $We = 0.25$, ocorreram da mesma forma para $We = 0.2$, quando se tinha um comprimento anterior à singularidade igual a 6.

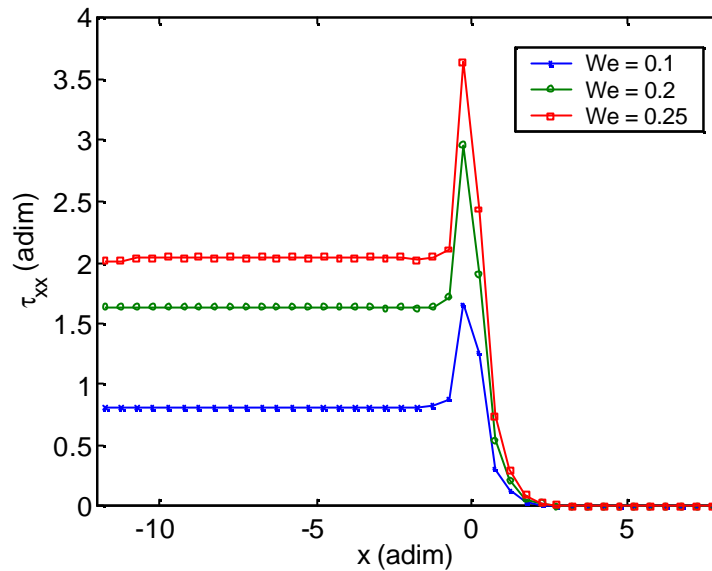


Figura 6.11. Perfis de tensão τ_{xx} na direção horizontal em $y = 0.95$ para diferentes números de Weissenberg, usando o modelo de Oldroyd-B ($\eta_E = 0.5$).

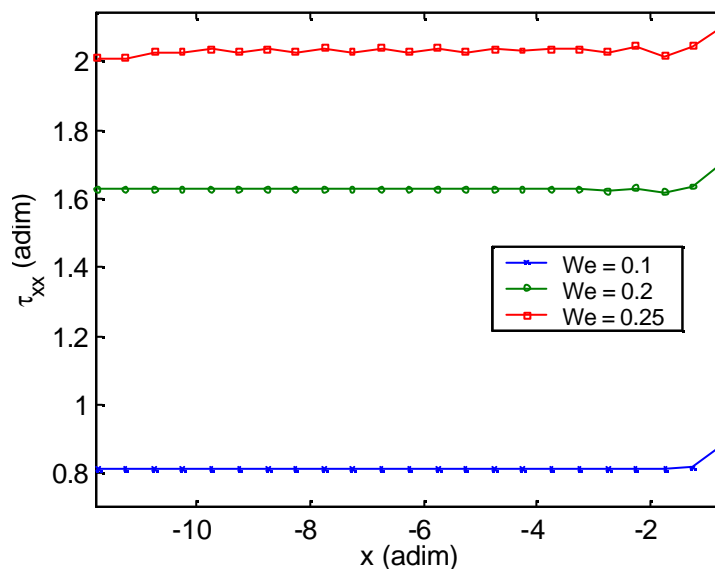


Figura 6.12. Mesmos perfis da Figura 6.11, destacado na região anterior à singularidade.

Pela Figura 6.11, verifica-se que em $We = 0.25$ surgem oscilações na solução, o que não ocorre para $We = 0.1$. Para $We = 0.2$, estas oscilações começam a surgir, porém com uma menor intensidade. Para conferir melhor este comportamento, os perfis mostrados na Figura 6.11 são destacados na região anterior a singularidade na Figura 6.12.

Estas oscilações também ocorrem para as demais variáveis do problema. Para exemplificar, são mostrados na Figura 6.13 os perfis de velocidade v_x na mesma linha horizontal, para os diferentes valores de We . Na Figura 6.14 é destacada a região anterior à singularidade, de modo a verificar melhor a presença das oscilações.

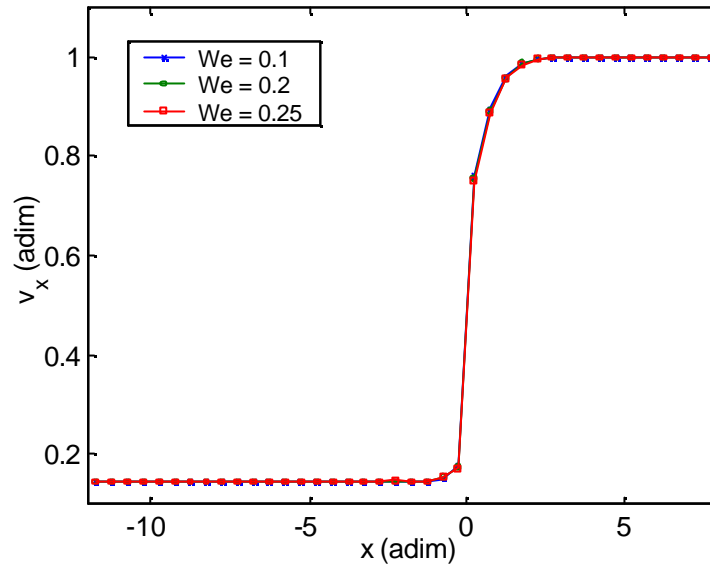


Figura 6.13. Perfis de velocidade v_x na direção horizontal em $y = 0.95$ para diferentes números de Weissenberg, usando o modelo de Oldroyd-B ($\eta_E = 0.5$).

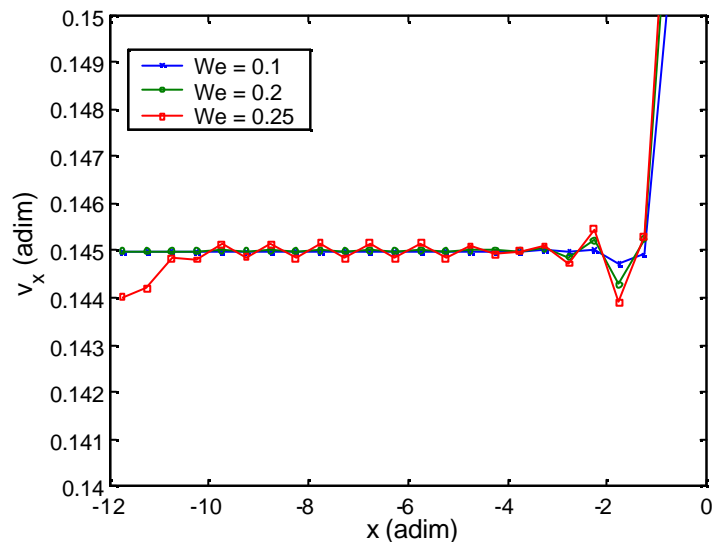


Figura 6.14. Mesmos perfis da Figura 6.13, destacados na região anterior à singularidade.

Da mesma forma que para a tensão, verifica-se que a solução em $We = 0.25$ apresenta oscilações na solução, assim como em $We = 0.2$, porém em menor intensidade. Para $We = 0.1$ a solução é livre de oscilações.

6.2. escoamento em contração plana

Este problema consiste no escoamento de um fluido em um duto retangular de profundidade infinita, que sofre uma súbita diminuição da seção vertical. Uma representação da geometria deste escoamento é mostrada na Figura 6.15.

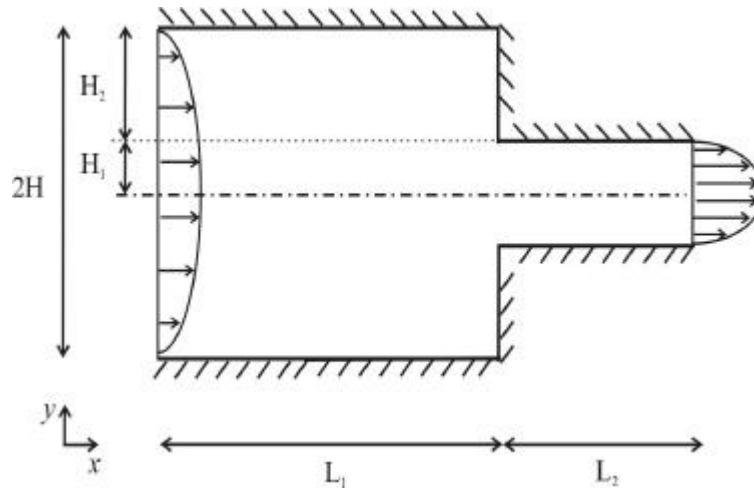


Figura 6.15. Representação esquemática do escoamento em contração plana.

Contrações súbitas como esta são características de diversas geometrias encontradas em processos de transformação de polímeros, tais como na extrusão e na injeção.

São aplicadas condições de simetria na seção horizontal central, sendo necessário trabalhar apenas com metade do domínio. Nas paredes se impõem a condição de não deslizamento, ou seja, velocidades nulas. Na entrada, são impostos perfis de velocidade v_x e de tensões para escoamento plenamente desenvolvido. Na saída, se considera escoamento localmente parabólico.

Para os resultados que serão mostrados a seguir, foi considerado um comprimento anterior à contração $L_1 = 20$ e posterior $L_2 = 15$. A altura do canal antes da contração é de $H = 3$, sendo a altura do canal após esta dada por $H_1 = 2$, ou seja, tem-se uma razão de contração 3:2. O número de Reynolds considerado foi de 0.1, e foram usados diversos números de Weissenberg, entre 0.1 e 0.7. Foi usado o modelo de Oldroyd-B, com $\eta_E = 0.25$.

A malha usada foi de 35x15, igualmente espaçada, sendo que na região anterior à contração tem-se uma malha 20x15 e na posterior uma malha 15x10.

6.2.1. Aproximações junto à contração

A região do escoamento próxima à contração é caracterizada pela presença de altos gradientes para as variáveis, especialmente para as componentes do tensor das tensões. Deste modo, as dificuldades encontradas nos problemas anteriores, para fluidos newtonianos e viscoelásticos, repetem-se neste caso.

As soluções encontradas com o uso do esquema LAG34 caracterizaram-se pela presença de “overshoots” e “undershoots” para os perfis, na região próxima à contração. Foi natural então, tentar utilizar um esquema de baixa ordem (CDS) nos pontos que se localizam nesta região crítica, e como ocorreu no problema do escoamento “*slip-stick*”, para fluidos newtonianos (no item 5.1), isto resolve o problema.

Assim são mostradas na seqüência, da Figura 6.16 a Figura 6.19, os perfis para velocidade v_y e para as tensões τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{xy} , na direção horizontal, em $y = 1.9$, obtidos pelo esquema LAG34 e pelo esquema LAG34/CDS. Em cada figura, se tem no lado esquerdo uma visão completa do perfil em questão, sendo destacada a região onde ocorrem as oscilações e, no lado direito, apenas uma ampliação desta região.

Pode-se ver que em todas as situações mostradas, as soluções obtidas com o esquema LAG34 apresentaram oscilações, que são características de aproximações de alta ordem em perfis com mudanças súbitas. Ao aplicar um esquema de menor ordem, que foi o CDS, em dois pontos à direita da contração, para a aproximação das variáveis, verifica-se que este problema é resolvido. Porém, como já dito no capítulo anterior, o ideal seria aplicar um critério confiável para decidir em quais pontos se usaria a aproximação de menor ordem, conseguindo assim obter a solução com a melhor precisão possível.

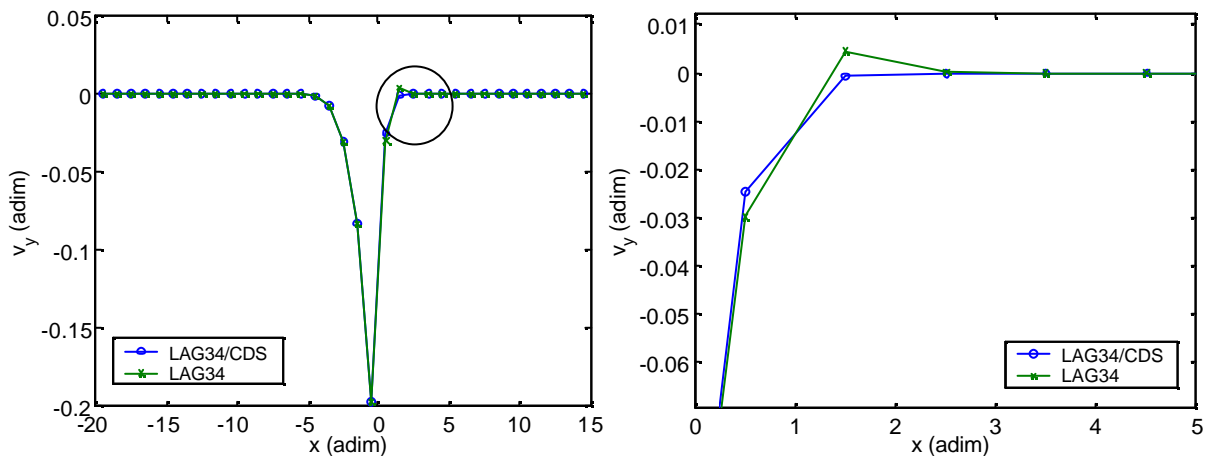


Figura 6.16. Perfis de velocidade v_y na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS.

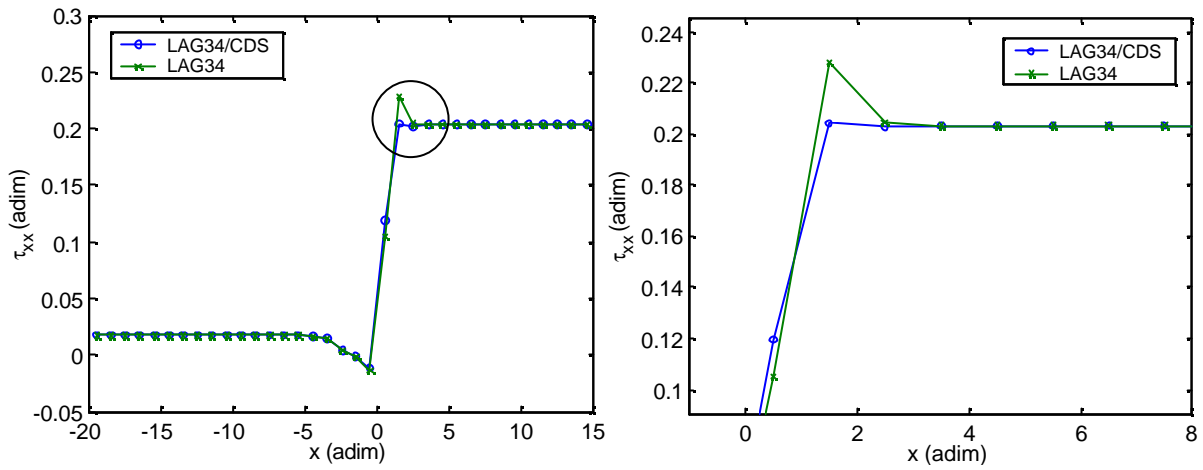


Figura 6.17. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS.

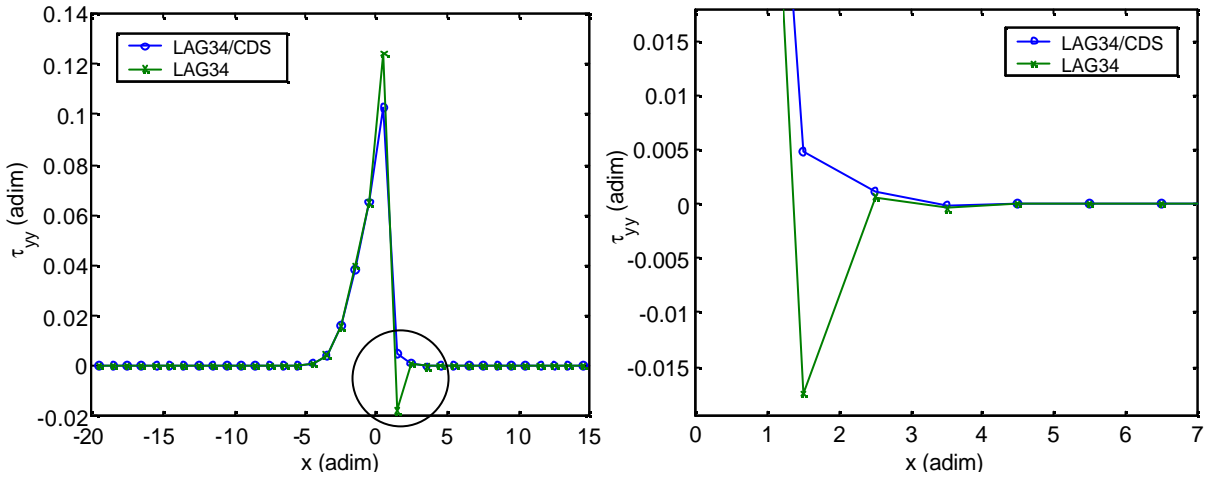


Figura 6.18. Perfis de tensão normal τ_{yy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS.

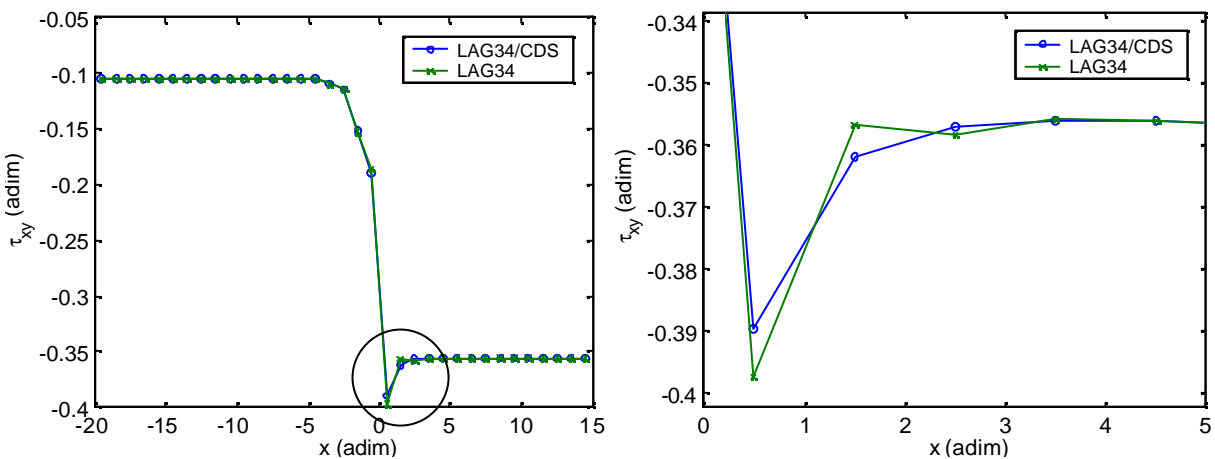


Figura 6.19. Perfis de tensão de cisalhamento τ_{xy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para $We = 0.2$, usando os esquemas LAG34 e LAG34/CDS.

6.2.2. Comparações para diferentes números de Weissenberg

Houve dificuldade na obtenção de soluções a números de Weissenberg mais altos, de forma análoga à ocorrida para o problema anterior. No caso estudado, as soluções para $We = 0.2$ mostraram-se de boa qualidade, e em $We = 0.5$, começam a surgir oscilações, porém não muito significativas. Para $We = 0.7$ a solução apresenta muitas oscilações, e não foram buscadas soluções a valores mais altos.

Para visualizar os efeitos do aumento do número de Weissenberg nas soluções, são mostrados, da Figura 6.20 à Figura 6.22, os perfis horizontais de tensões em $y = 1.9$, obtidos pelo esquema LAG34/CDS.

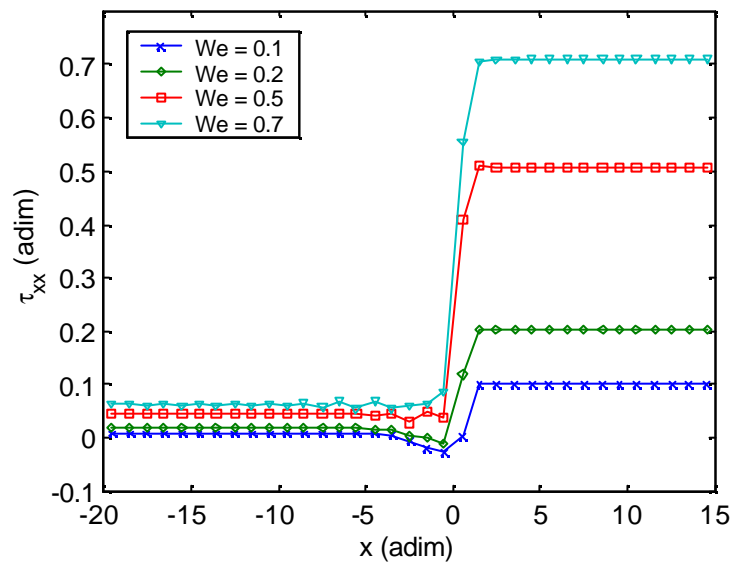


Figura 6.20. Perfis de tensão normal τ_{xx} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para diferentes números de Weissenberg.

Pode-se ver, na Figura 6.20, que quanto maior o número de Weissenberg, maior a variação na tensão normal τ_{xx} , e mais difícil torna-se a aproximação. As soluções para $We = 0.1$ e $We = 0.2$ são isentas de oscilações, porém em $We = 0.5$, começam a surgir oscilações, e em $We = 0.7$, estas são muito mais pronunciadas. Para visualizar melhor a presença destas oscilações, a região próxima à contração do perfil mostrado na Figura 6.20, é mostrada na Figura 6.23.

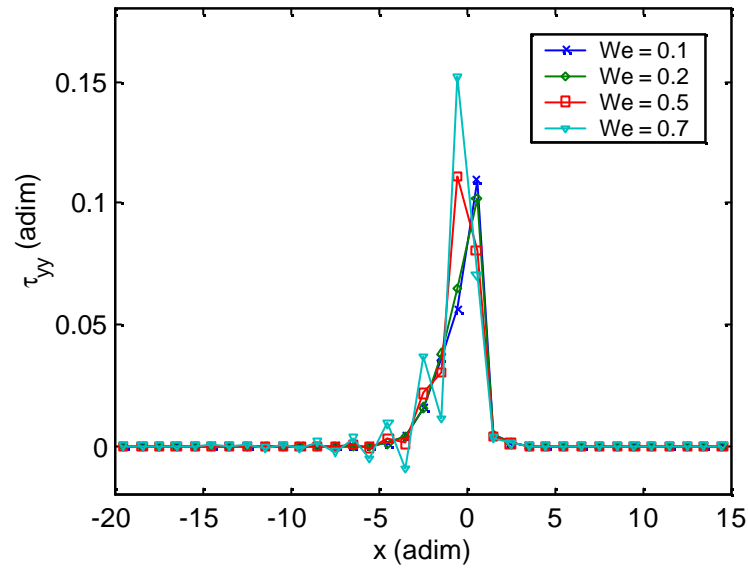


Figura 6.21. Perfis de tensão normal τ_{yy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para diferentes números de Weissenberg.

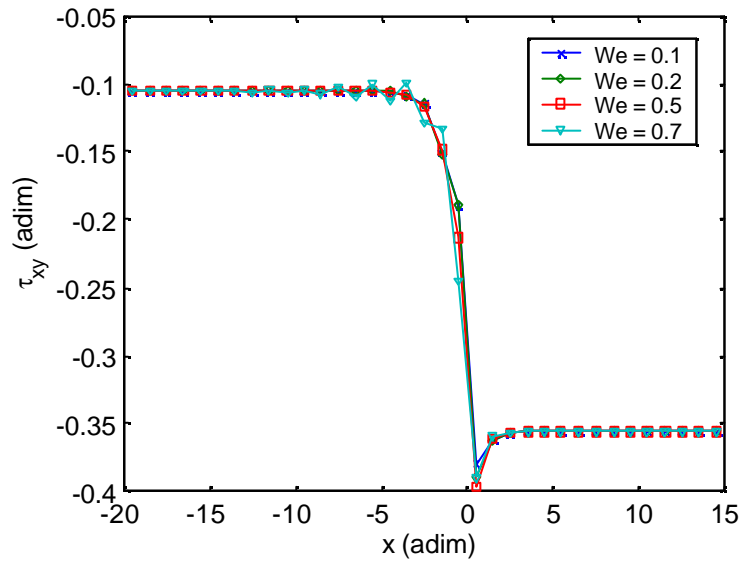


Figura 6.22. Perfis de tensão de cisalhamento τ_{xy} na direção horizontal, em $y = 1.9$, para diferentes números de Weissenberg.

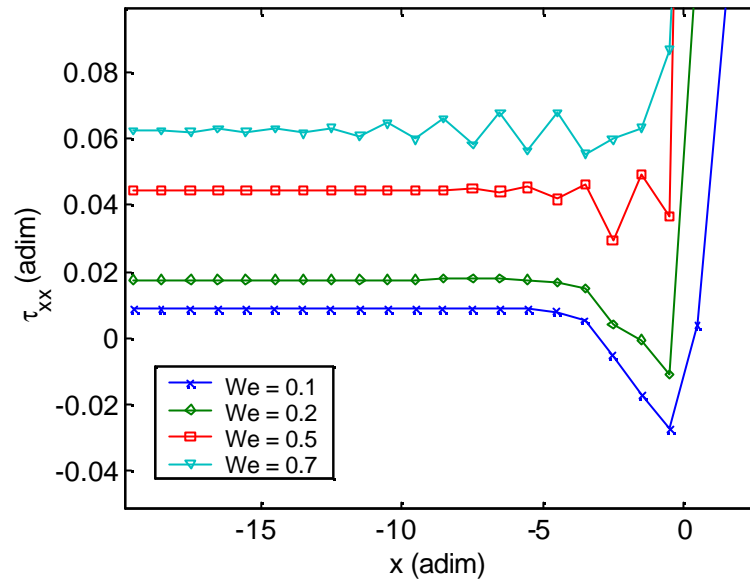


Figura 6.23. Mesmos perfis da Figura 6.20, destacados na região próxima à contração.

Comportamento totalmente análogo é verificado para os perfis das demais componentes do tensor das tensões. Na Figura 6.21, correspondente à tensão normal τ_{yy} , nem é necessário tomar um aumento da região próxima da contração para verificar a presença das oscilações. Para o perfil da tensão de cisalhamento τ_{xy} , é mostrado na Figura 6.24, o perfil na região anterior a contração, o qual é mostrado de forma completa na Figura 6.22.

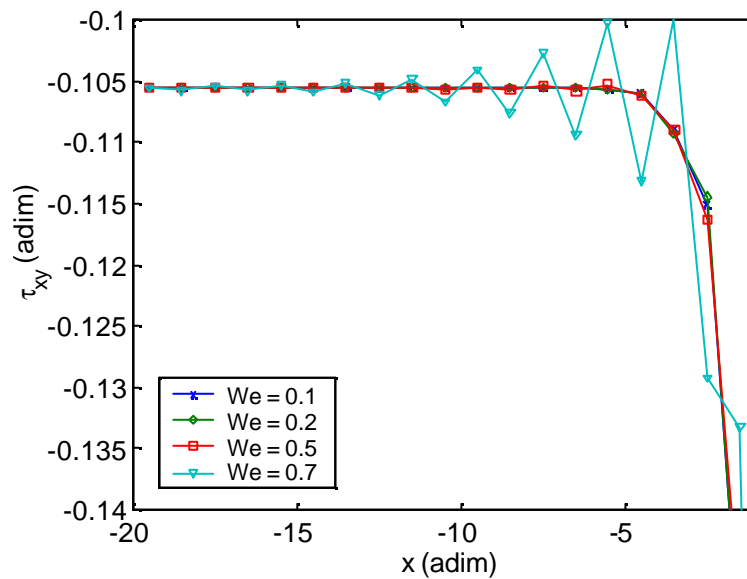


Figura 6.24. Mesmos perfis da Figura 6.22, destacados na região próxima à contração.

Para finalizar, deve-se citar que para as demais variáveis do problema teve-se o mesmo comportamento. Para maiores números de Weissenberg, deve ser aumentado também o comprimento anterior e posterior a contração, para que na região de entrada e saída, sejam satisfeitas as condições de escoamento plenamente desenvolvido.

A dificuldade de obtenção da solução em maiores We pode ser contornada ao concentrar pontos da malha na região próxima à contração. Como já comentado no problema anterior, pelo modo como foi implementada a metodologia, para se fazer um refinamento da malha na região próxima a contração, obrigatoriamente deve-se refinar todo o restante da malha, pelo fato dos esquemas estarem restritos a espaçamento uniforme. Com isto, o número de variáveis é muito grande, tornando inviável a resolução do problema. Soluções para este impedimentos também já foram discutidas no problema anterior.

6.3. Conclusões

Neste capítulo, foram mostrados exemplos de aplicação da metodologia proposta neste trabalho para a solução de escoamentos de fluidos viscoelásticos. As soluções obtidas para baixos números de Weissenberg foram plenamente satisfatórias para os problemas estudados.

Porém, teve-se dificuldades na obtenção de soluções para valores de We mais elevados, sendo que os problemas estudados se caracterizavam pela presença de altos gradientes das variáveis em algumas regiões, que são mais acentuados com o aumento da elasticidade do fluido. Para tornar possível a obtenção de soluções nestas situações, deve-se utilizar malhas com espaçamento variável, sendo mais concentradas nas regiões de maior variação das variáveis.

Porém, a implementação da metodologia usada foi baseada em aproximações para malhas com espaçamento uniforme. Assim, se for utilizado um número de pontos adequado para uma boa aproximação nas regiões críticas, por conseqüência, o número de volumes em todo o domínio irá aumentar. Com isto se torna computacionalmente proibitiva a solução do sistema de equações resultante.

Para contornar esta dificuldade, podem ser obtidos esquemas de interpolação para malhas com espaçamento variável, baseadas nas mesmas idéias apresentadas neste trabalho. Além disso, para melhorar a eficiência da resolução do sistema de equações, pode-se empregar métodos iterativos na resolução dos sistemas lineares, juntamente com o uso de uma matriz de pré-condicionamento adequada. Outra melhoria consiste em calcular a matriz jacobiana de forma analítica, visto que nos exemplos mostrados, esta matriz é calculada via perturbação das variáveis.

Finalmente, a implementação realizada neste trabalho poderia ser aproveitada em um esquema de blocos múltiplos, ou multiblocos (Maliska, 1995), onde o domínio é dividido em sub-domínios (ou blocos), cada qual com uma malha uniforme, mas com espaçamentos diferentes para cada um. Para tanto, bastaria implementar o equacionamento de conexão entre os blocos que compõe o domínio. Isto permitiria também a utilização da metodologia em geometrias mais complexas.

Capítulo 7 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

7.1. Conclusões e sugestões

Foi proposta neste trabalho, uma nova metodologia para a solução das equações governantes do escoamento de fluidos viscoelásticos, usando equações constitutivas diferenciais. Esta é baseada no método dos volumes finitos, usando arranjo co-localizado para as variáveis, e na utilização de aproximações de alta ordem para os fluxos médios lineares e não-lineares, assim como para outros termos não lineares que surgem da discretização das equações constitutivas. Nesta metodologia, trabalha-se com os valores médios das variáveis nos volumes durante todo o processo de resolução, sendo que, se necessário, valores pontuais são obtidos ao final do procedimento via deconvolução. O sistema de equações não lineares resultante da discretização é resolvido de forma simultânea pelo método de Newton, não necessitando de equação adicional para a pressão.

Foram utilizadas duas equações constitutivas diferenciais neste trabalho, que são o modelo de Oldroyd-B e o modelo de Phan-Thien-Tanner Simplificado. Esta opção se deu pelo fato que muitos trabalhos na literatura utilizam estes modelos e, principalmente, pelo fato destes modelos apresentarem, nas suas equações, diferentes tipos de termos não lineares comum a outros modelos, que devem ser aproximados pela metodologia, de modo que a implementação de outras equações constitutivas seja direta.

No Capítulo 5 foram mostrados alguns resultados da metodologia para escoamentos de fluidos newtonianos. Como é usado o arranjo co-localizado, pode haver a presença de oscilações para a pressão na solução. Isso foi contornado ao empregar um esquema de ordem ímpar na aproximações das variáveis, evitando a falta da dependência do gradiente de pressão no volume com a pressão no próprio, que é a causa do problema citado. Por este motivo, decidiu-se usar o esquema de Lagrange de 3ª ordem na aproximação dos fluxos advectivos médios. Para os fluxos difusivos, foi empregado o esquema de Lagrange de 4ª ordem. Para os

termos não lineares, também utiliza-se uma aproximação de 4ª ordem, para manter a ordem global de aproximação. Este conjunto de aproximações foi chamado de esquema LAG34, sendo empregado na resolução de dois problemas, que foram o escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento, também conhecido como “*slip-stick*” e o escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento, chamado de “*stick-slip*”.

No escoamento “*stick-slip*” a metodologia se mostrou eficiente, sendo feitas comparações entre soluções obtidas pelo esquema LAG34 com as obtidas pelo uso do esquema QUICK na aproximação dos fluxos advectivos e CDS na aproximação dos fluxos difusivos. O esquema LAG34 se mostrou superior em relação à qualidade de aproximação para uma dada malha, sendo que o tempo computacional necessário para os dois casos é praticamente o mesmo. Se considerar que para obter-se soluções de mesma qualidade necessita-se de uma malha mais refinada com o esquema QUICK, então a metodologia apresentada torna-se muito superior.

No escoamento “*slip-stick*” foi verificado o mesmo comportamento em relação à qualidade de aproximação, porém, foram obtidas soluções com saltos (“*overshoots*”) na região próxima a singularidade, sendo esta uma característica de aproximações de alta ordem para este tipo de problema. Verificou-se que este problema pode ser contornado ao utilizar uma aproximação de menor ordem, por exemplo, diferenças centrais de 2ª ordem, em pontos próximos a esta região. O esquema resultante foi chamado de LAG34/CDS, sendo que os saltos na solução desaparecem com o uso deste. O número de pontos usados na aproximação de baixa ordem deve ser mínimo, para que tenha a melhor precisão possível para a solução. Foi verificado, na resolução deste problema, a perda de qualidade da solução com o aumento do número de pontos com aproximação de baixa ordem. Portanto, fica a sugestão de criar um esquema que obedeça a um critério confiável que determine a utilização de um ou outro tipo de aproximação em cada volume. Este critério pode ser o CBC, usado em alguns esquemas tipo HRS, como o SMART (Gaskell e Lau, 1988). Outra sugestão, com o objetivo de obter soluções livres de oscilações, é o uso dos esquemas de alta ordem propostos neste trabalho para a criação de um esquema tipo ENO ou WENO (Liu et al., 1994).

Para confrontar os resultados obtidos com a metodologia baseada em valores médios com resultados da literatura, foi resolvido ainda, para fluidos newtonianos, o escoamento em uma cavidade quadrada. Este problema também foi usado para comparar os resultados apresentados por esquemas de 4ª ordem na aproximação dos fluxos advectivos e difusivos, que são os esquemas de Lagrange (LAG44) e Padé (PADE44). Sob um número de Reynolds igual a 100, ambos os esquemas levaram a soluções de mesma qualidade, e se mostraram superiores a alguns trabalhos da literatura, mesmo em malhas relativamente grosseiras comparadas às usadas por estes últimos. Estes resultados se equiparam aos obtidos por um método espectral, mostrado em Botella e Peyret (1998). O problema foi resolvido também para um número de Reynolds igual a 400. Verificou-se que o esquema PADE44 é superior em relação ao LAG44 em relação a qualidade de aproximação, sendo necessárias malhas mais refinadas para se obter soluções de mesma qualidade com este último. O inconveniente do uso do PADE44 é o fato de ter que se trabalhar com matrizes densas, consumindo um tempo computacional muito alto em malhas mais refinadas. Este problema pode ser minimizado ao

se empregar um método iterativo com pré-condicionamento na solução dos sistemas lineares, tornando o uso deste esquema muito mais competitivo.

Visto que o esquema LAG34 obteve êxito na sua aplicação à escoamentos de fluidos newtonianos, este foi empregado também para problemas envolvendo o escoamento de fluidos viscoelásticos, sendo que a aproximação dos termos não lineares passam a ter maior importância neste caso. Foram estudados dois problemas, que são o escoamento “*stick-slip*” e o escoamento em contração plana.

Em ambos os problemas, as soluções obtidas para baixos números de Weissenberg foram muito boas, mesmo na presença de grandes gradientes na solução, como os que surgem na região próxima à singularidade, no primeiro problema, e na região próxima a contração, para o segundo problema.

Porém, com o aumento do número de Weissenberg, os gradientes nestas regiões crescem consideravelmente, sendo que se torna necessário utilizar malhas mais refinadas junto a estas. Como a metodologia foi baseada em malhas com espaçamento uniforme, um refinamento junto a estas regiões implica no refinamento de toda a malha, e isto leva a necessidade de elevados tempos computacionais, tornando impraticável esta opção. Para solucionar este problema, e possibilitar a obtenção de soluções em maiores números de Weissenberg, pode-se recorrer a duas alternativas. Uma delas é desenvolver esquemas de alta ordem para malhas com espaçamento variável, baseadas nas mesma idéias apresentadas neste trabalho. A outra é usar a técnica de multiblocos (Maliska, 1995), onde divide-se o domínio em blocos, cada qual com uma malha com espaçamento uniforme, sendo o problema resolvido para cada bloco, estabelecendo um equacionamento de conexão entre os diversos blocos.

Não há dúvidas de que a metodologia apresentada é muito promissora. Porém, vários pontos podem ser melhorados na metodologia, além dos já citados, em especial na parte referente a resolução das equações discretizadas. Esta é feita de forma simultânea, por um método de Newton, sendo que a etapa que tem maior influência no desempenho do método é a resolução dos sistemas lineares. O uso de um método iterativo, como o GMRES (Saad e Schultz, 1986), por exemplo, com um pré-condicionamento adequado, na solução destes, tornará a metodologia competitiva com as que usam a solução segregada das equações, que é mais econômica do ponto de vista computacional, porém, menos robusta em problemas não lineares.

Outra sugestão para trabalhos futuros é a utilização de técnicas para aumentar a característica elíptica das equações de conservação de quantidade de movimento, quando se resolve problemas para fluidos viscoelásticos. Estas técnicas, que são mais disseminadas dentro do método dos elementos finitos, como por exemplo o EVSS de Rajagopalan et al., (1990) e o AVSS, de Sun et al., (1996), permitem a obtenção de soluções sob maiores números de Weissenberg.

Referências Bibliográficas

- ABOUBACAR, M.; WEBSTER, M.F., “A cell-vertex finite volume/element method on triangles for abrupt contraction viscoelastic flows”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 98, pp. 83–106, 2001.
- ALVES, M.A.; PINHO, F.T.; OLIVEIRA, P.J., “Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 93, pp. 287–314, 2000.
- ALVES, M.A.; PINHO, F.T.; OLIVEIRA, P.J., “The flow of viscoelastic fluids past a cylinder: finite-volume high-resolution methods”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 97, pp. 207–232, 2001.
- ARAMPATZIS, G.; ASSIMACOPOULOS, D., “Treatment of numerical diffusion in strong convective flows”. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 18, pp. 313–331, 1994.
- BAAIJENS, F.P.T., “Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 79, pp. 361–385, 1998.
- BERNSTEIN, B.; KEARSLEY, E.A.; ZAPAS, L.J., *Trans. Soc. rheol.*, 7, pp. 391–410, 1963.
- BIRD, R.B.; ARMSTRONG R.C.; HASSAGER, O., “Dynamics of Polymeric Liquids Vol. 1, Fluid Mechanics”, John Wiley, 1987.
- BRUNEAU, C-H.; JOURON, C., “An efficient scheme for solving steady incompressible Navier-Stokes equations”. *Journal of Computational Physics*, 89, pp. 389–413, 1990.
- CARREAU, P.J., Ph.D Thesis, University of Wisconsin, Madison, 1968.

- CASWELL, B., "Finite element method for fluids with memory". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 5, p. 199, 1979.
- CFX (<http://www.software.aeat.com/cfx/default.asp>. Consulta em 10/02/2002.
- CHOI, H. C.; SONG, J. H.; YOO, J. Y., "Numerical simulation of the planar contraction flow of a Giesekus fluid". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29, pp. 341-379, 1988.
- COCHRANE, T.; WALTERS, K.; WEBSTER, M. F., "Newtonian and non-Newtonian flow near a re-entrant corner". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 10, pp. 95- 114, 1982.
- CROCHET, M. J.; BEZY, M., "Numerical solution for the flow of viscoelastic fluids". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 5, pp. 201-218, 1979.
- CROCHET, M. J.; KEUNINGS, R., "Die swell of a maxwell fluid: numerical prediction". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 7, pp. 199-212, 1980.
- CROCHET, M.J.; DAVIES, A.R.; WALTERS, K., "Numerical Simulation of non-Newtonian Flow", Elsevier, Amsterdam, 1984.
- CROCHET, M.J.; PILATE, G., "Plane flow of a fluid of second grade through a contraction". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1, pp. 247-258, 1976.
- D. ESSELAOUI; RAMADANE, A.; ZINE, A.M., "Decoupled approach for the problem of viscoelastic fluid flow of PTT model I: continuous stresses". *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190, pp. 543-560, 2000.
- DARWISH, M.S.; WHITEMAN, J.R.; BEVIS, M.J.; "Numerical modelling of viscoelastic liquids using a finite-volume method". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 45, pp. 311-337, 1992.
- DAVIES, A. R.; WALTERS, K.; WEBSTER, M. F., "Long range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry: Part 3: moving boundaries". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 4, pp. 325-344, 1979.
- DE WAELE, A.. *Oil Color Chem. Assoc. J.*, 6, pp.33-88, 1923.
- DENG, G. B.; PIQUET, J.; QUEUTEY, P.; VISONNEAU, M., "Incompressible Flow calculations with a consistent physical interpolation finite volume approach". *Computers and Fluids*, 23, pp. 1029 - 1047 , 1994.
- FERZIGER, J.H.; PERIC M., "Computational Methods for Fluid Dynamics", Springer, Berlin, 1999.

- FLETCHER, C.A.J., “Computational Techniques for Fluid Dynamics, Vol I, Fundamental and General techniques”, Springer-Verlag, 1988.
- FLETCHER, C.A.J., “Computational Techniques for Fluid Dynamics, Vol II, Specific techniques for different flow categories”, Springer-Verlag, 1988.
- FORTIN A.; FORTIN, M., “A preconditioned generalized minimal residual algorithm for the numerical solution of viscoelastic fluid flows”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 36, pp. 277-288, 1990.
- GAITONDE, D.; SHANG, J. S., “Optimized Compact-Difference-Based Finite-Volume Schemes for Linear Wave Phenomena”. *Journal of Computational Physics*, 138, pp. 617–643, 1997.
- GASKELL, P.H.; LAU, A.K.C., “Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm”. *Int. J. Num. Methods Fluids*, 8, pp. 617-641, 1988.
- GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. T., “High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method”. *Journal of Computational Physics*, 48, pp. 387 – 411, 1982.
- GIESEKUS, H.. “A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 11, pp. 69- 109, 1982.
- HANBY, R.F.; SILVESTER, D.J.; CHEW, J.W., “A comparison of coupled and segregated iterative solution techniques for incompressible swirling flow”. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* , 22, pp. 353-373, 1996.
- HARTEN, A.. J. , “High Resolution Schemes for hyperbolic conservation laws, *J. Computational Physics*, 49, pp. 357–393, 1983.
- HARTEN, A.; ENQUIST, B.; OSHER, S.; CHAKRAVARTHY, S., *J. Computational Physics*, 71, pp. 231, 1987.
- HU, H.H.; JOSEPH, D.D., “Numerical simulation of viscoelastic flow past a cylinder”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 37, pp. 347–377, 1990.
- HUANG, X.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R.I., “Viscoelastic flow between eccentric rotating cylinders: unstructured control volume method”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 64, pp. 71, 1996.
- ISSA, R.I., “Solution of the implicit discretised fluid flow equations by operator-splitting”. *J. Computational. Physics*, 63, pp. 40-65, 1986.

- JOHNSON JR., M. W.; SEGALMAN, D., "A model for viscoelastic fluid behavior which allows non-affine deformation". *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2, pp. 255-270, 1977.
- JOSEPH, D. D. "Fluid Dynamics of Viscoelastic Liquids", Springer Verlag, 1990.
- KAWAHARA, M.; TAKEUCHI, N., "Mixed Finite element method for analysis of viscoelastic fluid flow". *Comput. Fluids*, 5, pp. 33-45, 1977.
- KAYE, A, College of Aeronautics, Cranford, U.K., note n° 134, 1962.
- KEUNINGS, R., "On the high Weissenberg number problem". *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 20, p. 209-226, 1986.
- KEUNINGS, R., "Simulation of viscoelastic flow (Chapter 9), In *Fundamentals of computer modeling for polymer processing*", Hanser Publishers, New York, 1989.
- KING, R.C.; APELIAN, M.R.; ARMSTRONG, R.C.; BROWN, R.A., "Numerically stable finite element techniques for viscoelastic calculations in smooth and singular geometries", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29, pp. 147-216, 1988.
- KOBAYASHI, M.H., "On a class of Padé Finite Volume methods". *Journal of Computational Physics*, 156, pp. 137-180, 1999.
- LARSON, R.G., "Constitutive equations for polymer melts and solutions". Butterworths, Boston, 1988.
- LELE, S. K., "Compact finite difference schemes with spectral-like resolution". *Journal of Computational Physics*, 103, pp. 16-42, 1992.
- LEONARD, B.P., "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation". *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 19 pp. 59-98, 1979.
- LEONOV, A.I., *Rheological Acta*, 15, p.85, 1976.
- LILEK, Z.; PERIC, M., "A fourth-order finite volume method with colocated variable arrangement". *Computers & Fluids*, 24, 3, pp. 239-252, 1995.
- LIU, X.; OSHER, S.; CHAN, T., "Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes". *Journal of Computational Physics*, 115, pp. 200-212, 1994.
- LODGE, A.S., "Elastic liquids". Academic Press, New York, 1964.

- LUO, X.L., “A control volume approach for integral viscoelastic models and its application to contraction flow of polymer melts. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*”, 64, pp. 173-189, 1996.
- MACOSKO, C., “Rheology: Principles, Measurements and Applications”, VCH Publishers, 1994.
- MAJUMDAR, S., “Role of under-relaxation in momentum interpolation for calculation of flow with non-staggered grids”. *Numer. Heat Transfer*, 13, pp. 125–132, 1988.
- MALISKA, C.R., “Transferência de Calor e Mecânica dos fluidos computacional”, LTC editora, 1995.
- MAPLESOFT, www.maplesoft.com, 2002.
- MARCHAL, J.M.; CROCHET, M.J., “A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow”, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 26, pp. 77-114, 1987.
- MAXWELL, J.C., *Phil. Trans. Roy. Soc.*, A157, pp.49-88, 1867.
- MILLER, T.F.; SCHIMIDT, F.W., “Use of a pressure-weighted interpolation method for the solution of incompressible Navier-Stokes equations on a non-staggered grid system”. *Numerical Heat Transfer*, 14, pp. 213-233, 1988.
- MIN, T.; YOO, J.Y.; CHOI, H., “Effect of spatial discretization on numerical solutions of viscoelastic fluid flows”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 100, pp. 27-47, 2001.
- MISSIRLIS, K.A.; ASSIMACOPOULOS, D.; MITSOULIS, E., “A finite volume approach in the simulation of viscoelastic expansion flows”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 78, pp. 91–118, 1998.
- MOATASSIME, H.A; JOURON, C. “A multigrid method for solving steady viscoelastic fluid flow”. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190 ,pp. 4061-4080, 2001.
- OLDROYD, J.G.. *Proc. Roy. Soc.*, A200, 523-541, 1950.
- OLIVEIRA, P. J., “Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: vortex shedding behind cylinder”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 101, pp. 113–137, 2001.
- OLIVEIRA, P.J.; PINHO, F.T., “Plane contraction flows of upper convected Maxwell and Phan-Thien-Tanner fluids as predicted by a finite-volume method”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 88, pp. 63–88, 1999.

- OLIVEIRA, P.J.; PINHO, F.T.; PINTO, G.A., “Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 79, pp. 1–43, 1998.
- OSTWALD, W., *Kolloid-Z.*, 36, pp. 99-117, 1925.
- PAPANASTASIOU, A. C.; SCRIVEN, L. E.; MACOSKO, C. W., “An Integral Constitutive Equation for Mixed Flows: Viscoelastic Characterization”. *Journal of Rheology*, 27(4), pp. 387-410, 1983.
- PATANKAR, S.V., “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, McGraw-Hill, New York, 1980.
- PATANKAR, S.V.; SPALDING, D.B., “A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows”. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15, p.1787, 1972.
- PEREIRA, J.M.C.; KOBAYASHI, M.H.; PEREIRA, J.C.F., “A fourth-order-accurate finite volume compact method for the incompressible Navier-Stokes solutions”. *Journal of Computational Physics*, 167, pp. 217-243, 2001.
- PERERA, M.G.N.; WALTERS, K., “Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. Part I. Flows associated with L-shaped and T-shaped geometries”. *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2, pp. 49–81, 1977.
- PERIC, M.; KESSLER, R.; SCHEURER, G., “Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and collocated grids”. *Computers & Fluids*, 16(4), pp. 389-403, 1988.
- PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. I., “A new constitutive equation derived from network theory”. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2, pp. 353-365, 1977.
- PHOENICS (http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_info/phover.htm.. consulta em 10/02/2002.
- PIRROZZOLI, S., “Conservative Hybrid Compact-WENO Schemes for Shock-Turbulence Interaction”. *Journal of Computational Physics*, 178, pp. 81–117, 2002.
- RAITHBY, G. D., “Skew Upstream Differencing Schemes for problems involving fluid flow”. *Comp. Meth. Applied Mech. Eng.*, 9, pp.153-164, 1976.
- RAJAGOPALAN, D.; ARMSTRONG, R.C.; BROWN, R.A., “Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a Newtonian viscosity”, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 36, pp. 159-192, 1990.

- RHIE, C.M.; CHOW, W.L., "A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation", ALAA 82 p. 998, 1982.
- SAAD, Y.; SCHULTZ, M.H., "GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems". SIAM J. Sci. Stat. Comp., 7, pp. 856-869, 1986.
- SASMAL, G.P., "A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction". J. Non-Newtonian Fluid Mechanics, 56, p. 15-47, 1995.
- SATO, T.; RICHARDSON, S.M., "Explicit numerical simulation of time-dependent viscoelastic flow problems by a finite element/finite volume method". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 51, pp. 249-275, 1994.
- SUN, J.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R.I., "An adaptive viscoelastic stress splitting scheme and its applications: AVSS/SI and AVSS/SUPG" Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 65, pp. 75-91, 1996.
- TANNER, R.I., "Engineering Rheology". Oxford University Press, Oxford, 1985.
- TOLSTYKH, A.I.; LIPAVSKII, M.V., "On performance of method with third- and fifth-order compact upwind differencing". Journal of Computational Physics, 140, p. 205, 1998.
- TUCKER III, C.L., "Fundamentals of computer modeling for polymer processing", Hanser Publishers, New York, 1989.
- VAN DOORMAL, J.P.; RAITHBY, G.D., "Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows". Num. Heat Transfer ,7, 147-163, 1984.
- VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W., "An introduction to computational fluid dynamics – The finite volume method", Longman Group Ltd, 1996.
- VIRIYAYUTHAKORN, M.; CASWELL, B., "Finite element simulation of viscoelastic flow", Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 6, pp. 245-267, 1980.
- WACHS, A.; CLERMONT, J.R., "Non-isothermal viscoelastic flow computations in an axisymmetric contraction at high Weissenberg numbers by a finite volume method". J. Non-Newtonian Fluid Mechanics, 95, pp. 147-184, 2000.
- WAGNER, M.H., Rheological Acta, 18, pp.33-50, 1979.
- WAPPEROM, P.; WEBSTER, M.F., "A second-order hybrid finite element/volume method for viscoelastic flows". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 79, pp. 405-431, 1998.

- WAPPEROM, P.; WEBSTER, M.F., "Simulation for viscoelastic flow by a finite volume/element method". *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 180, pp. 281-304, 1999.
- WHITE, J.L.; METZNER, A. B., *J. Applied Polymer Science*, 7, pp.1867-1889, 1963.
- XUE, S.-C.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R.I., "Numerical study of secondary flows of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method". *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 59, p. 192, 1995.
- XUE, S.-C.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R.I., "Three dimensional numerical simulations of viscoelastic flows through planar contractions". *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 74, pp. 195-245, 1998.
- XUE, S.-C.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R.I., "Three-dimensional numerical simulations of viscoelastic flows - predictability and accuracy", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 180, pp. 305-331, 1999.
- YASUDA, K., Ph.D Thesis, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, 1979.
- YOO, J.Y.; Y. NA, "A numerical study of the planar contraction flow of viscoelastic fluids using the SIMPLER algorithm". *J. Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 39, p. 89, 1991.

Apêndice 1. Obtenção do esquema de Lagrange de 3ª ordem

Ap1.1 Definições

Foram mostrados no capítulo 4, diversos esquemas de interpolação de 3ª e 4ª ordem baseados na relação entre fluxos médios e valores médios nos volumes. No capítulo 2 foi explicado o procedimento para obtenção destes esquemas. Neste apêndice, é apresentado um exemplo, de modo a tornar mais clara esta metodologia. O caso mostrado é o esquema Lagrange de 3ª ordem, para aproximação dos fluxos advectivos médios em interfaces internas e em interfaces no contorno.

Todo o procedimento mostrado abaixo foi feito com o uso do software Maple V (Maplesoft, 2003), que consiste em um sistema de computação algébrica.

Antes de apresentar o procedimento, devem ser esclarecidos alguns pontos em relação à sintaxe do Maple. Para cada comando de entrada, é retornada uma saída. Neste apêndice, as entradas estão escritas em negrito, e a expressão subsequente é a saída correspondente a cada entrada.

Os termos $D[i](u)(x,y)$, como escritos nas entradas, ou como no formato de saída, $D_i(u)(x,y)$, correspondem à derivada da função $u(x,y)$ em relação a variável x , caso $i = 1$, ou a variável y , caso $i = 2$. Para exemplificar, o termo $D[1](u)(x,y)$ é equivalente a $\frac{\partial}{\partial x} u(x, y)$.

Derivadas de maior ordem $D[i,j,k,...](u)(x,y)$ são tomadas de forma análoga, sendo que $i,j,k,..$ podem ser iguais a 1 ou 2. Por exemplo, o termo $D[1,1,2](u)(x,y)$ é equivalente a $\frac{\partial}{\partial x^2 \partial y} u(x, y)$.

Ap1.2 Obtenção dos coeficientes da aproximação

O passo inicial do procedimento é tomar uma expansão em série de Taylor da função $u(x,y)$, que é função a ser aproximada nas interfaces.

Desta forma, a expansão em série de Taylor para uma função $u(x,y)$ em torno de um ponto (x_0,y_0) , truncada em termos de 4ª ordem é definida abaixo.

$$\begin{aligned} TTS := & (x,y) \rightarrow u(x_0,y_0) + (x-x_0) * D[1](u)(x_0,y_0) + (y-y_0) * D[2](u)(x_0,y_0) + (x-x_0) * (y-y_0) * D[1,2](u)(x_0,y_0) + 1/2 * (x-x_0)^2 * D[1,1](u)(x_0,y_0) + 1/2 * (y-y_0)^2 * D[2,2](u)(x_0,y_0) + 1/2 * (x-x_0) * (y-y_0) * D[1,2](u)(x_0,y_0) + 1/2 * (x-x_0) * (y-y_0)^2 * D[1,2,2](u)(x_0,y_0) + 1/6 * (x-x_0)^3 * D[1,1,1](u)(x_0,y_0) + 1/6 * (y-y_0)^3 * D[2,2,2](u)(x_0,y_0); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} TTS := & (x,y) \rightarrow u(x_0,y_0) + (x-x_0) D_1(u)(x_0,y_0) + (y-y_0) D_2(u)(x_0,y_0) + (x-x_0)(y-y_0) D_{1,2}(u)(x_0,y_0) + \frac{1}{2}(x-x_0)^2 D_{1,1}(u)(x_0,y_0) \\ & + \frac{1}{2}(y-y_0)^2 D_{2,2}(u)(x_0,y_0) + \frac{1}{2}(x-x_0)^2 (y-y_0) D_{1,1,2}(u)(x_0,y_0) + \frac{1}{2}(x-x_0)(y-y_0)^2 D_{1,2,2}(u)(x_0,y_0) + \frac{1}{6}(x-x_0)^3 D_{1,1,1}(u)(x_0,y_0) \\ & + \frac{1}{6}(y-y_0)^3 D_{2,2,2}(u)(x_0,y_0) \end{aligned}$$

Deve ser calculada então, o fluxo médio de $u(x,y)$ em uma interface i , de acordo com sua definição dada por (2.32), usando a aproximação em série de Taylor de $u(x,y)$. Este fluxo médio é definido então pela variável **medfC**:

$$\text{medfC} := \text{expand}(1/DY * \text{int}(TTS(x_0,y_0+\text{eta}), \text{eta} = -DY/2..DY/2));$$

$$\text{medfC} := u(x_0,y_0) + \frac{1}{24} DY^2 D_{2,2}(u)(x_0,y_0)$$

Usando esta expansão, podem ser calculadas também os valores médios de $u(x,y)$ nos volumes vizinhos, a partir da definição de média no volume dada por (2.38). Estes valores médios são definidos nas variáveis **medvi**, onde $\mathbf{i} = \mathbf{L}$ para o primeiro volume a esquerda, $\mathbf{i} = \mathbf{LL}$ para o segundo volume à esquerda e assim por diante, $\mathbf{i} = \mathbf{R}$ para o primeiro volume a direita, $\mathbf{i} = \mathbf{RR}$ para o segundo volume à direita e assim por diante.

$$\text{medvL} := \text{expand}(1/(DX*DY) * \text{int}(\text{int}(TTS(x_0+zeta,y_0+\text{eta}), \text{eta} = -DY/2..DY/2), zeta = -DX..0));$$

$$\begin{aligned} \text{medvL} := & -\frac{1}{24} DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0,y_0) + \frac{1}{6} DX^2 D_{1,1}(u)(x_0,y_0) - \frac{1}{48} DX DY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0,y_0) - \frac{1}{2} DX D_1(u)(x_0,y_0) + u(x_0,y_0) + \frac{1}{24} DY^2 D_{2,2}(u)(x_0,y_0) \end{aligned}$$

$$\text{medvLL} := \text{expand}(1/(DX*DY) * \text{int}(\text{int}(TTS(x_0+zeta,y_0+\text{eta}), \text{eta} = -DY/2..DY/2), zeta = -2*DX..-DX));$$

$$\begin{aligned} \text{medvLL} := & -\frac{5}{8} DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0,y_0) + \frac{7}{6} DX^2 D_{1,1}(u)(x_0,y_0) - \frac{1}{16} DX DY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0,y_0) - \frac{3}{2} DX D_1(u)(x_0,y_0) + u(x_0,y_0) + \frac{1}{24} DY^2 D_{2,2}(u)(x_0,y_0) \end{aligned}$$

$$\text{medvLLL} := \text{expand}(1/(DX*DY) * \text{int}(\text{int}(TTS(x_0+zeta,y_0+\text{eta}), \text{eta} = -DY/2..DY/2), zeta = -3*DX..-2*DX));$$

$$\begin{aligned} \text{medvLLL} := & -\frac{65}{24} DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0,y_0) + \frac{19}{6} DX^2 D_{1,1}(u)(x_0,y_0) - \frac{5}{48} DX DY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0,y_0) - \frac{5}{2} DX D_1(u)(x_0,y_0) + u(x_0,y_0) + \frac{1}{24} DY^2 D_{2,2}(u)(x_0,y_0) \end{aligned}$$

$$\text{medvR} := \text{expand}(1/(DX*DY) * \text{int}(\text{int}(TTS(x_0+zeta,y_0+\text{eta}), \text{eta} = -DY/2..DY/2), zeta = 0..DX));$$

$$\text{medvR} := \frac{1}{24}DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{6}DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{48}DXDY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{2}DXD_1(u)(x_0, y_0) + u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0)$$

$$\text{medvRR} := \text{expand}(1/(DX*DY)*\text{int}(\text{int}(\text{TTS}(x_0+zeta,y_0+eta), eta=-DY/2..DY/2), zeta=DX..2*DX));$$

$$\text{medvRR} := \frac{5}{8}DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{7}{6}DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{16}DXDY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{3}{2}DXD_1(u)(x_0, y_0) + u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0)$$

$$\text{medvRRR} := \text{expand}(1/(DX*DY)*\text{int}(\text{int}(\text{TTS}(x_0+zeta,y_0+eta), eta=-DY/2..DY/2), zeta=2*DX..3*DX));$$

$$\text{medvRRR} := \frac{65}{24}DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{19}{6}DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{5}{48}DXDY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{5}{2}DXD_1(u)(x_0, y_0) + u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0)$$

A partir destas definições de fluxo médio e valor médio nos volumes, pode-se obter os coeficientes do esquema de interpolação desejado. Neste caso, deseja-se obter os coeficientes para o esquema Lagrange de 3ª ordem. Para começar, considere a aproximação dos fluxos advectivos médios nas interfaces internas.

Neste esquema, o fluxo médio na interface é relacionado com os valores médios nos dois volumes à esquerda e no volume à direita. Desta forma, a partir das definições destes termos, pode-se escrever:

$$\text{eqf} := \text{expand}(\text{medfC} = a*\text{medvLL} + b*\text{medvL} + c*\text{medvR});$$

$$\begin{aligned} \text{eqf} := & u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) - \frac{5}{8}a DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{7}{6}a DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) - \frac{1}{16}a DXDY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0, y_0) \\ & - \frac{3}{2}a DXD_1(u)(x_0, y_0) + a u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}a DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) - \frac{1}{24}b DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{6}b DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) \\ & - \frac{1}{48}b DXDY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0, y_0) - \frac{1}{2}b DXD_1(u)(x_0, y_0) + b u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}b DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{24}c DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) \\ & + \frac{1}{6}c DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{48}c DXDY^2 D_{1,2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{2}c DXD_1(u)(x_0, y_0) + c u(x_0, y_0) + \frac{1}{24}c DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) \end{aligned}$$

onde a , b e c são os coeficientes do esquema. Para determina-los, basta tomar os termos comuns nos dois lados da equação, e resolver o sistema resultante:

$$\text{eqf1} := \text{expand}(\text{coeff}(\text{lhs}(\text{eqf}), (u)(x_0, y_0)) = \text{coeff}(\text{rhs}(\text{eqf}), (u)(x_0, y_0)));$$

$$\text{eqf1} := 1 = a + b + c$$

$$\text{eqf2} := \text{expand}(\text{coeff}(\text{lhs}(\text{eqf}), D[1](u)(x_0, y_0))/DX^2 = \text{coeff}(\text{rhs}(\text{eqf}), D[1](u)(x_0, y_0))/DX^2);$$

$$\text{eqf2} := 0 = -3a - b + c$$

$$\text{eqf3} := \text{expand}(\text{coeff}(\text{lhs}(\text{eqf}), D[1,1](u)(x_0, y_0))/DX^2*6 = \text{coeff}(\text{rhs}(\text{eqf}), D[1,1](u)(x_0, y_0))/DX^2*6);$$

$$\text{eqf3} := 0 = 7a + b + c$$

$$\text{sol} := \text{solve}(\{\text{eqf1}, \text{eqf2}, \text{eqf3}\}, \{a, b, c\});$$

$$\text{sol} := \{b = \frac{5}{6}, c = \frac{1}{3}, a = -\frac{1}{6}\}$$

O esquema resultante é dado pela equação (4.8). O termo de truncamento da aproximação é dado por:

$$\text{subs}(\text{sol}, \text{rhs}(\text{eqf}) - \text{lhs}(\text{eqf}));$$

$$\frac{1}{12}DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0)$$

O outro caso se refere à determinação do fluxo médio na interface a partir do valor médio dos volumes próximos a esta. Para uma interface localizada próxima ao contorno oeste, tem-se então:

eqf:=expand(medvC=a*medvR+b*medvRR+c*medvRRR);

$$\begin{aligned} \text{eqf} := & u(x_0, y_0) + \frac{1}{24} DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) = \frac{1}{24} a DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{6} a DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{1}{48} a DX DY^2 D_{1,2}(u)(x_0, y_0) \\ & + \frac{1}{2} a DX D_1(u)(x_0, y_0) + a u(x_0, y_0) + \frac{1}{24} a DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{5}{8} b DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{7}{6} b DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) \\ & + \frac{1}{16} b DX DY^2 D_{1,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{3}{2} b DX D_1(u)(x_0, y_0) + b u(x_0, y_0) + \frac{1}{24} b DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{65}{24} c DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0) \\ & + \frac{19}{6} c DX^2 D_{1,1}(u)(x_0, y_0) + \frac{5}{48} c DX DY^2 D_{1,2}(u)(x_0, y_0) + \frac{5}{2} c DX D_1(u)(x_0, y_0) + c u(x_0, y_0) + \frac{1}{24} c DY^2 D_{2,2}(u)(x_0, y_0) \end{aligned}$$

Tomando os termos comuns nos dois lados da equação, e resolvendo o sistema resultante, chega-se ao valor dos coeficientes a , b e c .

eqf1:=expand(coeff(lhs(eqf),(u)(x0,y0))=coeff(rhs(eqf),(u)(x0,y0)));

$$\text{eqf1} := 1 = a + b + c$$

eqf2:=expand(coeff(lhs(eqf),D[1](u)(x0,y0))/DX*2=coeff(rhs(eqf),D[1](u)(x0,y0))/DX*2);

$$\text{eqf2} := 0 = a + 3b + 5c$$

eqf3:=expand(coeff(lhs(eqf),D[1,1](u)(x0,y0))/DX^2*6=coeff(rhs(eqf),D[1,1](u)(x0,y0))/DX^2*6);

$$\text{eqf3} := 0 = a + 7b + 19c$$

sol:=solve({eqf1,eqf2,eqf3},{a,b,c});

$$\text{sol} := \left\{ c = \frac{1}{3}, a = \frac{11}{6}, b = \frac{-7}{6} \right\}$$

O esquema resultante é dado pela equação (4.9). O termo de truncamento é dado por:

subs(sol,rhs(eqf)-lhs(eqf));

$$\frac{1}{4} DX^3 D_{1,1,1}(u)(x_0, y_0)$$

Para as demais aproximações o procedimento é totalmente equivalente, e deve-se ter somente o cuidado de pegar as expansões em série de Taylor nas interfaces e volumes corretos.

Apêndice 2. Erros de truncamento para os esquemas de alta ordem

Neste apêndice são mostrados os erros de truncamento dos esquemas de interpolação de alta ordem mostrados no capítulo 4. O modo como eles são obtidos pode ser visto no apêndice 1.

Para cada esquema, são mostrados os erros de truncamento, o tipo de aproximação correspondente, e o número da equação encontrada no capítulo 4 referente ao esquema em questão.

Quando se tratar da aproximação dos fluxos difusivos, esta informação é explicitada. Caso contrário, subentenda-se que o esquema se refere à aproximação dos fluxos advectivos médios.

Ap2.1 Esquema Lagrange de 3^a ordem

Tabela Ap2.1. Erros de truncamento para o esquema de Lagrange de 3^a ordem.

| Tipo de Aproximação | Erro de truncamento |
|---|---|
| pontos internos – upwinded, (4.8); pontos internos - downwinded*, (4.8). | $\frac{1}{12} \Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ |
| contorno oeste, (4.9); contorno leste*, (4.10). | $\frac{1}{4} \Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ |
| próximo ao contorno oeste, (4.11); próximo ao contorno leste*, (4.12). | $\frac{1}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ |

* o erro de truncamento é dado pelo mesmo mostrado, porem com sinal trocado.

Ap2.2 Esquema Lagrange de 4ª ordem

Tabela Ap2.2. Erros de truncamento para o esquema de Lagrange de 4ª ordem.

| Tipo de Aproximação | Erro de truncamento |
|---|---|
| pontos internos, (4.13). | $-\frac{1}{30} \Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ |
| próximo ao contorno oeste, (4.14); próximo ao contorno leste, (4.15). | $\frac{1}{20} \Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ |
| contorno oeste, (4.16); contorno leste, (4.17). | $-\frac{1}{5} \Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ |
| Fluxo difusivo, internos, (4.18); próximos ao contorno oeste, (4.19); próximos ao contorno leste (4.20); contorno oeste (4.21); contorno leste (4.22). | $-\frac{1}{1920} \Delta x^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x \partial y^4}$ |

Ap2.3 Esquema Padé de 4ª ordem

Tabela Ap2.3. Erros de truncamento para o esquema de Pade de 4ª ordem.

| Tipo de Aproximação | Erro de truncamento |
|--|---|
| pontos internos, (4.23). | $-\frac{1}{120} \Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ |
| contorno oeste, (4.24); contorno leste, (4.25). | $-\frac{1}{20} \Delta x^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ |
| Fluxo difusivo, pontos internos, (4.26). | $-\frac{1}{1600} \Delta y^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x \partial y^4} - \frac{1}{240} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^5 u}{\partial x^3 \partial y^2} - \frac{1}{120} \Delta x^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x^5}$ |
| Fluxo difusivo, contorno oeste, (4.27); contorno leste, (4.28). | $-\frac{7}{1920} \Delta y^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x \partial y^4} - \frac{1}{8} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^5 u}{\partial x^3 \partial y^2} - \frac{1}{4} \Delta x^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x^5}$ |

Apêndice 3. Deconvolução dos valores médios

Neste apêndice, são mostradas as equações para a deconvolução dos valores médios, que são obtidos ao final da resolução numérica, quando usada a metodologia de alta ordem baseada em valores médios.

A idéia deste procedimento é determinar o valor das variáveis nos vértices dos volumes a partir dos valores médios nas interfaces vizinhas ao ponto em questão. Por exemplo, para a determinação do valor de uma variável ϕ em um ponto (i, j) , com uma precisão de 4ª ordem, pode-se tomar os valores médios nas interfaces cujo centro é dado por $(i-1/2, j)$, $(i-3/2, j)$, $(i+1/2, j)$ e $(i+3/2, j)$. Note que foram usados valores em interfaces na direção horizontal; porém, o mesmo pode ser feito para interfaces na direção vertical.

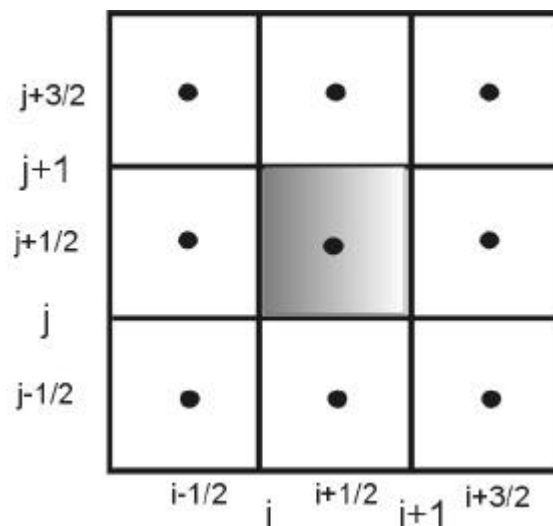


Figura Ap3.1. Representação de um volume elementar genérico, com os índices referentes às interfaces e centros dos volumes

A metodologia para obtenção das equações para determinação dos valores pontuais é totalmente análoga à usada para obtenção dos esquemas de interpolação de alta ordem (Apêndice 1). As equações obtidas para 3ª e 4ª ordem são mostradas na seqüência.

Ap3.1. Deconvolução de 3ª ordem

Para manter a coerência com os esquemas de interpolação usados, os pontos usados na aproximação também são dependentes da direção do escoamento. Desta forma, busca-se equações do tipo:

$$\begin{cases} \phi|_i = a\bar{\phi}|_{i-\frac{3}{2}} + b\bar{\phi}|_{i-\frac{1}{2}} + c\bar{\phi}|_{i+\frac{1}{2}} & v_x > 0 \\ \phi|_i = a\bar{\phi}|_{i+\frac{3}{2}} + b\bar{\phi}|_{i+\frac{1}{2}} + c\bar{\phi}|_{i-\frac{1}{2}} & v_x < 0 \end{cases} \quad (\text{Ap3.1})$$

Através da metodologia já citada, chega-se às seguintes equações:

$$\begin{cases} \phi|_i = -\frac{1}{6}\bar{\phi}|_{i-\frac{3}{2}} + \frac{5}{6}\bar{\phi}|_{i-\frac{1}{2}} + \frac{1}{3}\bar{\phi}|_{i+\frac{1}{2}} & v_x > 0 \\ \phi|_i = -\frac{1}{6}\bar{\phi}|_{i+\frac{3}{2}} + \frac{5}{6}\bar{\phi}|_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{3}\bar{\phi}|_{i-\frac{1}{2}} & v_x < 0 \end{cases} \quad (\text{Ap3.2})$$

Nos pontos de contorno, tem-se equações similares:

$$\begin{aligned} \phi|_0 &= \frac{11}{6}\bar{\phi}|_{\frac{1}{2}} - \frac{7}{6}\bar{\phi}|_{\frac{3}{2}} + \frac{1}{3}\bar{\phi}|_{\frac{5}{2}} \\ \phi|_N &= \frac{11}{6}\bar{\phi}|_{N-\frac{1}{2}} - \frac{7}{6}\bar{\phi}|_{N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{3}\bar{\phi}|_{N-\frac{5}{2}} \end{aligned} \quad (\text{Ap3.3})$$

Na determinação dos valores pontuais em pontos próximos ao contorno, no qual faltaria um ponto na aproximação, de acordo com a direção do escoamento, pode-se usar as seguintes expressões:

$$\phi|_1 = -\frac{1}{2}\phi|_0 + \frac{5}{4}\bar{\phi}|_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{4}\bar{\phi}|_{\frac{3}{2}} \quad (\text{Ap3.4})$$

$$\phi|_{N-1} = -\frac{1}{2}\phi|_N + \frac{5}{4}\bar{\phi}|_{N-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4}\bar{\phi}|_{N-\frac{3}{2}} \quad (\text{Ap3.5})$$

Ap3.2. Deconvolução de 4ª ordem

Para manter a precisão de 4ª ordem quando usado o esquema de Lagrange ou de Padé de 4ª ordem, utiliza-se as seguintes expressões para obtenção dos valores pontuais, também com 4ª ordem de precisão.

Para os pontos internos, tem-se:

$$\phi|_i = -\frac{1}{12}\bar{\phi}|_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}\bar{\phi}|_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}\bar{\phi}|_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}\bar{\phi}|_{i+\frac{3}{2}} \quad (\text{Ap3.6})$$

Para os pontos próximos ao contorno, tem-se equações do tipo:

$$\phi|_1 = \frac{1}{4}\bar{\phi}|_{\frac{1}{2}} + \frac{13}{12}\bar{\phi}|_{\frac{3}{2}} - \frac{5}{12}\bar{\phi}|_{\frac{5}{2}} + \frac{1}{12}\bar{\phi}|_{\frac{7}{2}} \quad (\text{Ap3.7})$$

$$\phi|_{N-1} = \frac{1}{4}\bar{\phi}|_{N-\frac{1}{2}} + \frac{13}{12}\bar{\phi}|_{N-\frac{3}{2}} - \frac{5}{12}\bar{\phi}|_{N-\frac{5}{2}} + \frac{1}{12}\bar{\phi}|_{N-\frac{7}{2}} \quad (\text{Ap3.8})$$

Para os pontos no contorno, as equações são dadas por:

$$\phi|_0 = \frac{25}{12}\bar{\phi}|_{\frac{1}{2}} - \frac{23}{12}\bar{\phi}|_{\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}\bar{\phi}|_{\frac{5}{2}} - \frac{1}{4}\bar{\phi}|_{\frac{7}{2}} \quad (\text{Ap3.9})$$

$$\phi|_N = \frac{25}{12}\bar{\phi}|_{N-\frac{1}{2}} - \frac{23}{12}\bar{\phi}|_{N-\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}\bar{\phi}|_{N-\frac{5}{2}} - \frac{1}{4}\bar{\phi}|_{N-\frac{7}{2}} \quad (\text{Ap3.10})$$