SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito: 22.09.2003

Assinatura: Anna Távila Dorcio

**GENSMAC-SOF: um método numérico
para simular escoamentos incompressíveis
de fluidos de segunda ordem**

José Laércio Dorcio

Orientador: Prof. Dr. Murilo Francisco Tomé

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências de Computação e Matemática Computacional.

USP – São Carlos
Setembro/2003

A Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Murilo Francisco Tomé

Prof. Dr. Antonio Castelo Filho

Profa. Dra. Mônica Feijó Naccache

No germinar da vida e no florescer da intellectualidade, sempre e sempre uma estrela dentro do âmago de cada criatura irá brilhar cada vez mais forte por um mundo de paz e harmonia, mesmo que no apogeu da escuridão...

Aos Meus Pais

Agradecimentos

Principalmente a Deus e a meus pais Nair Vasques Doricio e Dalvo Doricio pela ajuda e incentivo em todos os momentos.

Ao meu orientador Prof. Dr. Murilo F. Tomé pelo incentivo, amizade e colaboração durante a realização desse trabalho.

Em especial aos professores, Dr. Roberto R. Paterlini, Dr. Adalberto P. Bergamasco e Dr. José Alberto Cuminato, e aos meus amigos Renato Hallal, Isaias Torres, Robson T. S. de Oliveira Jr., Luís Felipe, Gerson F. Silva, Marcelo (Japa), Toninho e Venezuela pela amizade, colaboração, incentivo e momentos de descontração.

Aos demais professores e amigos da USP e da UFSCar.

Resumo

Esse trabalho apresenta um método numérico para simular escoamentos visco-elásticos com superfícies livres de fluidos de Segunda Ordem. As equações governantes são resolvidas através de uma técnica de diferenças finitas em uma malha diferenciada baseada em um método similar ao SMAC (*Simplified-Marker-And-Cell*). Partículas marcadoras são utilizadas para representar a superfície livre do fluido. Detalhes completos para a aproximação das tensões na superfície livre são dados. São apresentados resultados numéricos demonstrando a capacidade desta nova técnica para resolver escoamentos visco-elásticos com superfícies livres de fluidos de Segunda Ordem para vários problemas. Fornecemos resultados numéricos sobre a simulação do inchamento do extrudado e sobre a contração 4 : 1. Além disso, são apresentados resultados referentes à validação e convergência do método numérico desenvolvido nesse trabalho.

Abstract

This work is concerned with the numerical simulation of viscoelastic free surface flows of a Second Order fluid. The governing equations are solved by a finite difference technique based on a SMAC(*Simplified-Marker-And-Cell*) type method. A staggered grid is employed and marker particles are used to represent the fluid free surface. Full details for the approximation of the free surface stress conditions are given. Numerical results demonstrating the capabilities of this new technique in solving viscoelastic free surface flows of a Second Order fluid are presented for a number of problems involving transient free surface flows. In particular, the numerical simulation of the extrudate swell and the flow on a 4 : 1 contraction are presented for various values of the Deborah number. In addition, validation and convergence results are given.

Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Abstract	iv
Sumário	v
Lista de Símbolos	vii
Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
1 Introdução	1
1.1 Aspectos Gerais	1
1.2 Organização da Tese	3
2 Equações Governantes	4
2.1 Equações Governantes em Coordenadas Cartesianas	6
2.2 Forma Adimensional das Equações Governantes	8
2.3 Condições de Contorno para Injetores, Ejetores e Contornos Rígidos	9
2.4 Condições de Contorno nas Superfícies Livres	10
3 Método Numérico	11
3.1 GENSMAC-SOF	11
3.2 Algoritmo Computacional	13

SUMÁRIO

4	Discretização das Equações	15
4.1	Domínio Computacional	15
4.2	Discretização das Equações Governantes	16
4.2.1	Cálculo das Derivadas do Tensor não-Newtoniano	18
4.2.2	Discretização do Tensor não-Newtoniano	20
4.3	Discretização dos Termos Convectivos	21
4.4	Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre	25
4.5	Controle do Passo no Tempo	29
4.6	Movimento das Partículas	30
5	Validação do Método Numérico	31
5.1	Validação no Canal	31
6	Resultados Numéricos	42
6.1	Contração 4 : 1	43
6.2	Inchamento do Extrudado	49
7	Conclusões e Recomendações	57
	Referências Bibliográficas	58
	Anexo A: Métodos de Runge-Kutta	i
	Anexo B: Linhas de Corrente	iv
	Anexo C: Ambiente FreeFlow	vii

Lista de Símbolos

Símbolo	Descrição
u	vetor velocidade
x	vetor posição
$\underline{g}$	vetor de aceleração gravitacional
$\underline{n}$	vetor normal unitário
$\underline{u}_n$	componente normal do vetor velocidade
$\underline{u}_t$	componente tangencial do vetor velocidade
$\underline{x}_n$	componente normal do vetor posição
$\underline{x}_t$	componente tangencial do vetor posição
$\underline{\underline{\pi}}$	tensor de tensão total
$\underline{\underline{\tau}}$	tensor de tensão extra
$\underline{\underline{d}}$	tensor taxa de deformação
$\underline{\underline{d}}_n$	tensor taxa de deformação de ordem n
$\underline{\underline{\Phi}}$	tensor de tensão não-Newtoniano
$\underline{\underline{I}}$	tensor unitário
u	componente do vetor velocidade na direção x
v	componente do vetor velocidade na direção y
g_x	componente do vetor aceleração gravitacional direção x
g_y	componente do vetor aceleração gravitacional direção y
ρ	massa específica do fluido
p	pressão relativa
η_0	viscosidade dinâmica inicial do fluido
η	viscosidade dinâmica do fluido

Lista de Símbolos

Símbolo	Descrição
λ_2	primeiro parâmetro reológico não-Newtoniano SOF
λ_1	segundo parâmetro reológico não-Newtoniano SOF
Ψ_1	primeiro coeficiente de diferença de tensões normais
Ψ_2	segundo coeficiente de diferença de tensões normais
$N1$	primeira diferença de tensões normais
$N2$	segunda diferença de tensões normais
τ_{xx} e τ_{yy}	tensão extra normal
τ_{xy}	tensão extra cisalhante
d_{xx} e d_{yy}	taxa de deformação normal
d_{xy}	taxa de deformação cisalhante
Φ_{xx} e Φ_{yy}	tensão não-Newtoniana normal
Φ_{xy}	tensão não-Newtoniana cisalhante
U	valor de referência para a velocidade
L	valor de referência para o comprimento
g	constante gravitacional
Re	número de Reynolds
De	número de Deborah
Fr	número de Froude
t	variável temporal
$\tilde{\mathbf{u}}$	vetor velocidade intermediária
δx	largura da célula na direção do eixo x
δy	largura da célula na direção do eixo y
δt	tamanho do passo no tempo
S_R	parâmetro adimensional para die swell
S_r	taxa de inchamento para o die swell
∇	operador gradiente
$\nabla \cdot$	operador divergente
$\nabla \times$	operador rotacional
∇^2	operador laplaciano

Lista de Símbolos

Símbolo	Descrição
$\frac{D}{Dt}$	operador derivada substancial
$()^T$	operador transposta de um tensor
ζ	fator de controle do passo no tempo

Lista de Figuras

4.1	Célula Computacional.	15
4.2	Domínio Computacional.	16
4.3	Três configurações de células para o cálculo de $\frac{\partial \phi^{xy}}{\partial y}$	18
4.4	Três configurações de células para o cálculo de $\frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y}$	19
4.5	Três configurações de células para $\frac{\partial u}{\partial y}$	20
4.6	Estêncil utilizado para calcular ϕ_A e ϕ_B	22
4.7	Células de superfície livre com apenas uma face em contato com uma célula vazia.	25
4.8	Células de superfície livre com duas faces adjacentes em contato com células vazias.	27
5.1	Descrição do modelo computacional para a canal-2D.	31
5.2	Resultados numéricos para a componente u em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s. . .	34
5.3	Resultados numéricos para a componente v em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s. . .	34
5.4	Resultados numéricos para o tensor τ^{xx} em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.	35
5.5	Resultados numéricos para o tensor τ^{xy} em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.	35
5.6	Resultados numéricos para o tensor τ^{yy} em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.	36
5.7	Resultados numéricos para $N1$ em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.	36
5.8	Resultados na malha M_1 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5$ cm. .	37
5.9	Resultados na malha M_1 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 15.0$ cm. .	37
5.10	Resultados na malha M_2 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5$ cm. .	38
5.11	Resultados na malha M_2 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 15.0$ cm. .	38
5.12	Resultados na malha M_3 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5$ cm. .	39
5.13	Resultados na malha M_3 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 15.0$ cm. .	39

LISTA DE FIGURAS

6.1	Modelo para a simulação da contração 4 : 1.	43
6.2	Resultados numéricos: $Re = 1.0$ e $De = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ e 1.4	44
6.3	Resultados numéricos: $Re = 0.1$ e $De = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ e 1.4	45
6.4	Componente da velocidade u para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2	46
6.5	Componente da velocidade v para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2	47
6.6	Tensão τ^{xx} para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2	47
6.7	Tensão τ^{xy} para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2	47
6.8	Tensão τ^{yy} para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2	48
6.9	Diferença de tensão normal $N1$: $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2	48
6.10	Modelo para a simulação do inchamento do extrudado.	49
6.11	Componente u em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6	50
6.12	Componente v em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6	51
6.13	Componente τ^{xx} em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6	52
6.14	Componente τ^{xy} em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6	53
6.15	Componente τ^{yy} em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6	54
6.16	Diferença de tensão normal $N1$ em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6	55
6.17	Taxa de inchamento do problema de inchamento do extrudado	56
1	Esquema para o cálculo da função de corrente	v

Lista de Tabelas

5.1	Erro relativo para verificar a convergência do método numérico.	40
5.2	Ordem de convergência do método numérico.	41

1

Introdução

1.1 Aspectos Gerais

O estudo de métodos numéricos para simular fenômenos que envolvam o escoamento de fluidos com ou sem troca de calor tem se intensificado após o surgimento dos computadores digitais a partir dos anos de 1950. Com o avanço da informática a simulação de fenômenos complicados tem se tornado cada vez mais eficiente permitindo a implementação de métodos numéricos para simular escoamentos cuja equação constitutiva é altamente não linear.

Muitos líquidos na natureza e na indústria não podem ser descritos eficientemente através dos modelos de fluidos viscosos e lineares, tais como os modelos Newtoniano e Newtoniano Generalizado, devido à presença de diferença de tensões normais e aos efeitos não lineares que esses modelos são incapazes de prever. Para resolver esse problema foram desenvolvidas novas equações constitutivas capazes de prever essas informações. Dentre essas equações constitutivas podemos destacar o modelo linear de Maxwell, o modelo de Jeffreys, o modelo convectivo de Maxwell, os modelos para fluidos ordenados, entre outros, conferir Bird et al. [1987]. Podemos classificar essas equações constitutivas nos seguintes grupos: Newtoniano, Newtoniano Generalizado, Visco-elástico linear, Visco-elástico não-linear.

A principal vantagem dos fluidos Newtonianos e Newtonianos generalizados é que esses modelos descrevem eficientemente os efeitos viscosos, porém os efeitos elásticos não

1. Introdução

podem ser descritos por esses modelos. Esse problema foi resolvido através dos modelos visco-elásticos lineares que são capazes de descrever esses efeitos elásticos. Um exemplo de modelo visco-elástico linear é o modelo linear de Maxwell. Apesar dos modelos visco-elásticos lineares descreverem os efeitos elásticos, eles são incapazes de descrever os efeitos não-lineares produzidos pela diferença de tensões normais. Uma tentativa para resolver esse problema foi o desenvolvimento dos modelos visco-elásticos não-lineares, cujo marco foi os modelos para fluidos ordenados, tal como fluidos de Segunda e Terceira Ordem, conforme Bird et al. [1987]. Esses modelos são capazes de descrever com precisão os efeitos não-lineares em escoamentos onde o tensor taxa de deformação e suas derivadas no tempo são pequenos, contudo não podem descrever os efeitos de relaxação de tensões, conforme Bird et al. [1987] e Gast et al. [1999].

Recentemente, o grupo de pesquisa em Matemática Aplicada do ICMC-USP de São Carlos desenvolveu um ambiente de simulação de escoamentos incompressíveis com superfícies livres denominado FreeFlow-2D, conferir Oliveira [1999]. Atualmente, o ambiente de simulação FreeFlow-2D permite a simulação dos seguintes tipos de escoamentos bidimensionais¹: Newtoniano, Newtoniano Generalizado (incluindo Bingham, Power-Law e Cross-Model) e Oldroyd-B. O objetivo desse trabalho é desenvolver um método numérico para simular escoamentos bidimensionais de fluidos de Segunda Ordem e implementá-lo no ambiente FreeFlow-2D. O método desenvolvido pode ser aplicado a escoamentos confinados e escoamentos com superfícies livres. As equações governantes são resolvidas através da técnica de diferenças finitas sobre uma malha diferenciada baseada em um método similar ao método SMAC(*Simplified-Marker-And-Cell*), conferir Amsden et al. [1970]. Para validar o método numérico são apresentadas três simulações: a simulação do escoamento em um canal bidimensional, a simulação do inchamento do extrudado, conferir Mitsoulis [1999] e Liang e Özetkin [1999], e a simulação da contração 4 : 1 para escoamentos confinados, conferir Nigen e Walters [2002]. O primeiro problema é utilizado para validar quantitativamente o método numérico e os últimos dois problemas são utilizados para validar o método numérico qualitativamente, devido à ação dos efeitos elásticos nesses problemas. Apresentaremos também resultados referentes à convergência do método numérico.

¹ Para mais detalhes sobre o ambiente de simulação FreeFlow-2D, consultar anexo C no final dessa tese.

1.2 Organização da Tese

O desenvolvimento desse trabalho segue a descrição abaixo.

- Capítulo 1: Introdução e organização desse trabalho.
- Capítulo 2: As equações governantes na forma dimensional e adimensional para escoamentos incompressíveis de fluidos de Segunda Ordem são apresentadas juntamente com as condições de contorno.
- Capítulo 3: Apresentamos um método numérico para resolver escoamentos de fluidos de Segunda Ordem.
- Capítulo 4: Discretizamos, em detalhes, as equações governantes através do método de diferenças finitas em uma malha diferenciada.
- Capítulo 5: A fase de validação do método numérico será discutida. Apresentaremos os resultados do escoamento em um canal.
- Capítulo 6: Os resultados numéricos para a contração 4 : 1 e para o problema de inchamento do extrudado são apresentados.
- Capítulo 7: Apresentamos as conclusões desse trabalho e as recomendações para trabalhos futuros.

2

Equações Governantes

As equações governantes para escoamento incompressível em regime laminar, transiente e isotérmico são a equação de conservação de quantidade de movimento e a equação de conservação de massa¹ que podem ser escritas respectivamente como:

$$\rho \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t} \underline{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}} + \rho \underline{g} \, , \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0 \, , \quad (2.2)$$

onde ρ é a massa específica do fluido, $\underline{g}$ é o vetor de aceleração gravitacional, $\underline{u}(x, t)$ é o campo de velocidades, $p(\underline{x}, t)$ é o campo de pressão e $\underline{\underline{\tau}}}(\underline{x}, t)$ é o tensor de tensão extra. Todavia, é necessário uma equação constitutiva para calcular $\underline{\underline{\tau}}}$, que define a classe do escoamento. Para escoamentos Newtonianos a equação constitutiva é:

$$\underline{\underline{\tau}}} = \eta_0 \underline{\underline{d}} \, , \quad (2.3)$$

onde η_0 é a constante que representa o coeficiente de viscosidade² do fluido e $\underline{\underline{d}}$ é o tensor taxa de deformação definido por:

$$\underline{\underline{d}} = \nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T \, , \quad (2.4)$$

¹ Alguns autores denominam a equação de conservação de quantidade de movimento e a equação de conservação de massa como equação de momentum e equação da continuidade, respectivamente. ² O coeficiente de viscosidade também é conhecido na literatura como viscosidade dinâmica.

2. Equações Governantes

O trabalho desenvolvido objetiva resolver escoamentos incompressíveis de fluidos de Segunda Ordem (SOF). A equação constitutiva para o modelo SOF se origina do truncamento do modelo de Expansão em Movimento-Retardado (EMR) nos termos de segunda ordem, ver Bird et al. [1987]. O modelo EMR expressa o tensor de tensão extra como um polinômio em relação aos tensores taxa de deformação de ordem n , definidos pela fórmula recursiva (2.5).

$$\begin{aligned}\underline{\underline{d}}_1 &= \underline{\underline{d}} , \\ \underline{\underline{d}}_{n+1} &= \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t} \underline{\underline{d}}_n - \left[(\nabla \underline{u})^T \cdot \underline{\underline{d}}_n + \underline{\underline{d}}_n \cdot \nabla \underline{u} \right] .\end{aligned}\tag{2.5}$$

A equação constitutiva EMR¹ expandida até os termos de terceira ordem é dada pela equação (2.6), onde b_1 , b_2 , b_{11} , etc. são denominados parâmetros materiais do fluido

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\tau}} &= b_1 \underline{\underline{d}}_1 + b_2 \underline{\underline{d}}_2 + b_{11} \left(\underline{\underline{d}}_1 \cdot \underline{\underline{d}}_1 \right) + b_3 \underline{\underline{d}}_3 + \\ &\quad b_{12} \left(\underline{\underline{d}}_1 \cdot \underline{\underline{d}}_2 + \underline{\underline{d}}_2 \cdot \underline{\underline{d}}_1 \right) + b_{111} \left(\underline{\underline{d}}_1 : \underline{\underline{d}}_1 \right) \underline{\underline{d}}_1 + \dots\end{aligned}\tag{2.6}$$

conforme Bird et al. [1987]. Ao truncá-la nos termos de primeira ordem obtemos a equação constitutiva para fluidos Newtonianos. Analogamente, ao truncá-la nos termos de segunda ordem obtemos a equação constitutiva para fluidos de Segunda Ordem e assim sucessivamente são obtidos os fluidos ordenados. Para simplificar a notação, vamos escrever a equação constitutiva SOF utilizando o esquema Oldroyd-8 conforme apresentado em Bird et al. [1987]. Fazendo $b_1 = \eta_0$, $b_2 = \eta_0 \lambda_2$, $b_{11} = \eta_0 \lambda_4$ na equação (2.6) e considerando somente os termos de segunda ordem obtemos:

$$\underline{\underline{\tau}} = \eta_0 \underline{\underline{d}} + \eta_0 \lambda_4 \left(\underline{\underline{d}} \cdot \underline{\underline{d}} \right) + \eta_0 \lambda_2 \underline{\underline{d}}_2 ,\tag{2.7}$$

onde η_0 , λ_2 e λ_4 são constantes definidas como a viscosidade dinâmica inicial, o primeiro parâmetro reológico relacionado à primeira diferença de tensões normais e o segundo

¹ As equações constitutivas geradas a partir do truncamento do modelo EMR são conhecidas como equações constitutivas para fluidos ordenados, conforme Bird et al. [1987].

2. Equações Governantes

parâmetro reológico do fluido relacionado à segunda diferença de tensões normais respectivamente. O parâmetro η_0 está relacionado aos efeitos viscosos e os parâmetros λ_2 e λ_4 estão relacionados aos efeitos de diferença de tensões normais.

Quando o escoamento é cisalhante em regime permanente, as funções materiais para o modelo SOF, conforme Bird et al. [1987], são dadas por:

$$\eta = \frac{\tau_{12}}{d_{12}} = \eta_0, \quad (2.8)$$

$$\Psi_1 = \frac{N_1}{d_{12}^2} = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{d_{12}^2} = -2\eta_0\lambda_2, \quad (2.9)$$

$$\Psi_2 = \frac{N_2}{d_{12}^2} = \frac{\tau_{22} - \tau_{33}}{d_{12}^2} = \eta_0\lambda_4, \quad (2.10)$$

onde N_1 e N_2 são a primeira e a segunda diferenças de tensões normais, Ψ_1 e Ψ_2 são o primeiro e o segundo coeficientes de diferença de tensões normais.

2.1 Equações Governantes em Coordenadas Cartesianas

Nesse trabalho consideraremos escoamentos bidimensionais com superfícies livres em coordenadas cartesianas. Nesse sistema de coordenadas, utilizaremos as seguintes definições para o gradiente do vetor $\underline{u}$ e para o tensor taxa de deformação $\underline{\underline{d}}$:

$$\nabla \underline{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \quad e \quad \underline{\underline{d}} = \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Utilizando as definições acima e a equação da conservação de massa, o tensor $\underline{\underline{d}} \cdot \underline{\underline{d}}$ é dado por:

$$\underline{\underline{d}} \cdot \underline{\underline{d}} = \begin{bmatrix} 4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 & 0 \\ 0 & 4\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

e os tensores $(\nabla \underline{u})^T \underline{\underline{d}}$ e $\underline{\underline{d}} \nabla \underline{u}$ são dados por:

2. Equações Governantes

$$(\nabla \underline{u})^T \underline{d} = \begin{bmatrix} 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \\ 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \end{bmatrix}, \quad (2.13)$$

$$\underline{d} \nabla \underline{u} = \begin{bmatrix} 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} \\ 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Utilizando (2.11)-(2.14), as componentes da equação constitutiva (2.7) podem ser escritas na forma:

$$\tau^{xx} = \eta_0 (d^{xx} + \Phi^{xx}), \quad (2.15)$$

$$\tau^{xy} = \eta_0 (d^{xy} + \Phi^{xy}), \quad (2.16)$$

$$\tau^{yy} = \eta_0 (d^{yy} + \Phi^{yy}), \quad (2.17)$$

onde as componentes do tensor taxa de deformação são dadas por:

$$d^{xx} = 2 \frac{\partial u}{\partial x}, \quad d^{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad d^{yy} = 2 \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (2.18)$$

e as componentes do tensor $\underline{\Phi}$ são:

$$\Phi^{xx} = \eta_0 \lambda_4 \left[4 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right] - \eta_0 \lambda_2 \left[-\frac{\mathcal{D}d^{xx}}{\mathcal{D}t} + 4 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right], \quad (2.19)$$

$$\Phi^{xy} = -2\eta_0 \lambda_2 \left(-\frac{\mathcal{D}d^{xy}}{\mathcal{D}t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (2.20)$$

$$\Phi^{yy} = \eta_0 \lambda_4 \left[4 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right] - \eta_0 \lambda_2 \left[-\frac{\mathcal{D}d^{yy}}{\mathcal{D}t} + 4 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]. \quad (2.21)$$

Assumiremos que $\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t} \underline{d} = 0$. De acordo com Bird et al. [1987], o segundo coeficiente de diferença de tensões normais é, em módulo, bem menor que o primeiro, em geral, $|\lambda_4| \approx |\frac{1}{10} \lambda_2|$. Considerando esse fato e que o escoamento é bidimensional, nós podemos assumir que $\lambda_4 = 0$. Utilizando as hipóteses acima, as componentes do tensor $\underline{\Phi}$ se reduzem a:

$$\Phi^{xx} = -\eta_0 \lambda_2 \left[4 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right], \quad (2.22)$$

$$\Phi^{xy} = -2\eta_0 \lambda_2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (2.23)$$

$$\Phi^{yy} = -\eta_0 \lambda_2 \left[4 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]. \quad (2.24)$$

2. Equações Governantes

Introduzindo as equações (2.15)-(2.17) na equação de quantidade de movimento (2.1) e fazendo uso da equação de conservação de massa (2.2) obtemos:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \Phi^{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \Phi^{xy} \right) + \underline{g}_x, \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \Phi^{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \Phi^{yy} \right) + \underline{g}_y, \quad (2.26)$$

A equação de conservação de massa (2.2) em coordenadas cartesianas é dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.27)$$

2.2 Forma Adimensional das Equações Governantes

Para adimensionar as equações governantes vamos utilizar os valores de referência U , L e g para a velocidade, para o comprimento e para o campo gravitacional, respectivamente. As seguintes variáveis adimensionais são utilizadas:

$$u = U\bar{u}, \quad v = U\bar{v}, \quad x = L\bar{x}, \quad y = L\bar{y}, \quad t = \frac{L}{U}\bar{t}, \quad \underline{g} = g\bar{g}, \quad p = \rho U^2 \bar{p}. \quad (2.28)$$

Utilizando (2.28), a equação de conservação de quantidade de movimento toma a seguinte forma adimensional¹:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \Phi^{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \Phi^{xy} \right) + \frac{\underline{g}_x}{Fr^2}, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \Phi^{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \Phi^{yy} \right) + \frac{\underline{g}_y}{Fr^2}, \quad (2.30)$$

que pode se escrita na forma vetorial abaixo:

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} = -\nabla p + \underline{N}(\underline{u}), \quad (2.31)$$

onde $\underline{N}(\underline{u})$ tem como componentes:

$$N_1 = -\frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi^{xx}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi^{xy}}{\partial y^2} \right) + \frac{\underline{g}_x}{Fr^2}, \quad (2.32)$$

$$N_2 = -\frac{\partial uv}{\partial x} - \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi^{xy}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi^{yy}}{\partial y^2} \right) + \frac{\underline{g}_y}{Fr^2}. \quad (2.33)$$

¹ As barras foram omitidas de cima das variáveis para simplificação de notação.

2. Equações Governantes

As componentes da equação constitutiva tomam a seguinte forma:

$$\tau^{xx} = \frac{1}{Re} (d^{xx} + \Phi^{xx}) , \quad (2.34)$$

$$\tau^{xy} = \frac{1}{Re} (d^{xy} + \Phi^{xy}) , \quad (2.35)$$

$$\tau^{yy} = \frac{1}{Re} (d^{yy} + \Phi^{yy}) . \quad (2.36)$$

A equação de conservação de massa toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 . \quad (2.37)$$

Nas equações (2.34)-(2.36) as componentes do tensor taxa de deformação $\underline{d}$ e do tensor não-Newtoniano $\underline{\Phi}$ são dadas por:

$$d^{xx} = 2 \frac{\partial u}{\partial x} , \quad d^{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} , \quad d^{yy} = 2 \frac{\partial v}{\partial y} , \quad (2.38)$$

$$\Phi^{xx} = -De \left[4 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] , \quad (2.39)$$

$$\Phi^{xy} = -2De \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right) , \quad (2.40)$$

$$\Phi^{yy} = -De \left[4 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] . \quad (2.41)$$

onde $Re = \frac{\rho U L}{\eta_0}$, $De = \frac{\lambda_2 U}{L}$ e $Fr = \frac{U}{\sqrt{g L}}$ são o número de Reynolds, o número de Deborah e o número de Froude, respectivamente.

2.3 Condições de Contorno para Injetores, Ejetores e Contornos Rígidos

A condição de contorno utilizada para a velocidade é a condição de não-eskorregamento $\underline{u}(\underline{x}, t) = 0$ nos contornos rígidos. Se considerarmos contornos rígidos paralelos ao eixo x , temos:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.42)$$

Introduzindo as derivadas (2.42) nas equações constitutivas (2.34)-(2.36), a condição de contorno para a componente Φ^{xy} do tensor não-Newtoniano $\underline{\Phi}$ é dada por $\Phi^{xy} = 0$.

Na fronteira de injeção utilizamos as seguintes condições de contorno para a velocidade: $\underline{u}_n = f(y)$ e $\underline{u}_t = 0$, onde $\underline{u}_n$ e $\underline{u}_t$ denotam a velocidade normal e a velocidade tangencial ao injetor, respectivamente. Por exemplo, considerando uma fronteira de injeção paralela ao eixo x , temos:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.43)$$

Introduzindo as derivadas (2.43) nas equações constitutivas, obtemos $\Phi^{xy} = 0$ na fronteira de injeção.

Nas fronteiras de ejeção utilizamos a condição $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ e $p(\underline{x}, t) = 0$. Nesse caso, pode ser mostrado que a componente Φ^{xy} é dada por $\Phi^{xy} = 0$.

2.4 Condições de Contorno nas Superfícies Livres

As condições de contorno aplicadas nas superfícies livres são as seguintes:

$$\underline{n} \cdot \underline{\pi} \cdot \underline{n} = 0, \quad (2.44)$$

$$\underline{m} \cdot \underline{\pi} \cdot \underline{n} = 0, \quad (2.45)$$

onde $\underline{n} = (n_x, n_y)$ e $\underline{m} = (-n_y, n_x)$ são os vetores unitários normal e tangencial à superfície livre respectivamente, $\underline{\pi} = -p\underline{I} + \underline{\tau}$ é o tensor de tensão total e $\underline{I}$ é o tensor unitário.

Utilizando o fato que $\underline{n}$ e $\underline{m}$ são unitários e ortogonais, as condições (2.44) e (2.45) podem ser escritas como:

$$p - \frac{1}{Re} [\Phi^{xx}n_x^2 + \Phi^{yy}n_y^2 + 2n_xn_y(\Phi^{xy} + d^{xy})] = 0, \quad (2.46)$$

$$(d^{xx} - d^{yy} + \Phi^{xx} - \Phi^{yy})n_xn_y + (d^{xy} + \Phi^{xy})(n_x^2 - n_y^2) = 0. \quad (2.47)$$

3

Método Numérico

3.1 GENSMAC-SOF

Para resolver as equações (2.29), (2.30), (2.37) e (2.39)-(2.41) vamos utilizar uma metodologia similar àquela apresentada por Tomé et al. [1996].

Suponhamos que são conhecidas as velocidades $\underline{u}(\underline{x}, t_n)$ e a pressão $p(\underline{x}, t_n)$ iniciais, e também as condições de contorno para a velocidade e para a pressão. A velocidade $\underline{u}(\underline{x}, t_{n+1})$ e a pressão $p(\underline{x}, t_{n+1})$, onde $t_{n+1} = t_n + \delta t$, são calculadas como segue.

Consideramos uma pressão inicial que satisfaz a equação da pressão na superfície livre (2.46). Seja $\tilde{p}(\underline{x}, t_n) = p(\underline{x}, t_n)$, então calculamos um campo de velocidade intermediária $\tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t_{n+1})$ através da equação abaixo:

$$\frac{\partial \tilde{\underline{u}}}{\partial t} = -\nabla \tilde{p} + \underline{N}(\underline{u}) , \quad (3.1)$$

onde $\underline{N}(\underline{u})$ é dada por (2.32) e (2.33) e a velocidade $\tilde{\underline{u}}$ satisfaz as condições de contorno apropriadas para a velocidade $\underline{u}$. Subtraindo a equação (3.1) da equação (2.31) obtemos:

$$\frac{\partial (\underline{u} - \tilde{\underline{u}})}{\partial t} = -\nabla (p - \tilde{p}) . \quad (3.2)$$

Aplicando o rotacional em ambos os lados desta equação obtemos:

$$\nabla \times \left[\frac{\partial (\underline{u} - \tilde{\underline{u}})}{\partial t} \right] = 0 ,$$

3. Método Numérico

e permutando os operadores obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\nabla \times (\underline{u} - \underline{\tilde{u}})] = 0 . \quad (3.3)$$

Da equação (3.3) podemos concluir que $\nabla \times (\underline{u} - \underline{\tilde{u}}) = f(\underline{x})$ para algum $f(\underline{x})$ com $t \in [t_n, t_{n+1}]$. Como $\underline{u} = \underline{\tilde{u}}$ em $t = t_n$ temos $\nabla \times \underline{u} = \nabla \times \underline{\tilde{u}}$ em $t = t_n$. Portanto $f(\underline{x}) = 0$.

Decorrente deste fato, $\nabla \times (\underline{u} - \underline{\tilde{u}}) = 0$ para $t \in [t_n, t_{n+1}]$, mostrando que a vorticidade associada à $\underline{u}(\underline{x}, t_{n+1})$ e $\underline{\tilde{u}}(\underline{x}, t_{n+1})$ são as mesmas. Porém $\underline{\tilde{u}}(\underline{x}, t_{n+1})$ não satisfaz $\nabla \cdot \underline{\tilde{u}} = 0$. Seja $\psi(\underline{x}, t_{n+1})$ uma função escalar tal que:

$$\underline{u}(\underline{x}, t_{n+1}) - \underline{\tilde{u}}(\underline{x}, t_{n+1}) = -\nabla \psi(\underline{x}, t_{n+1}) . \quad (3.4)$$

Aplicando o divergente a ambos os lados da equação (3.4) e impondo conservação de massa para $\underline{u}(\underline{x}, t_{n+1})$, obtemos:

$$\nabla^2 \psi(\underline{x}, t_{n+1}) = \nabla \cdot \underline{\tilde{u}}(\underline{x}, t_{n+1}) . \quad (3.5)$$

As condições de fronteira adequadas para a equação (3.5) são:

$$\psi = 0 , \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \underline{n}} = 0 , \quad (3.7)$$

com (3.6) aplicada em superfícies livres e com (3.7) aplicada nos contornos rígidos.

Substituindo (3.4) em (3.2) obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (-\nabla \psi(\underline{x}, t_{n+1})) = -\nabla (p(\underline{x}, t_{n+1}) - \tilde{p}(\underline{x}, t_{n+1})) ,$$

implicando em:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi(\underline{x}, t_{n+1})) = p(\underline{x}, t_{n+1}) - \tilde{p}(\underline{x}, t_{n+1}) .$$

Ao discretizarmos a equação acima através de diferenças progressivas no tempo obtemos:

$$\frac{\psi(\underline{x}, t_{n+1}) - \psi(\underline{x}, t_n)}{\delta t} = p(\underline{x}, t_{n+1}) - \tilde{p}(\underline{x}, t_{n+1}) , \quad (3.8)$$

onde δt é o passo no tempo. Como $\underline{u}(\underline{x}, t_n) = \tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t_n)$, então através de (3.4) vemos que $\nabla \psi(\underline{x}, t_n) = 0$. Decorrente desse fato, $\psi(\underline{x}, t_n)$ é constante. Considerando $\psi(\underline{x}, t_n) = 0$ em (3.8), obtemos a equação para a pressão:

$$p = \tilde{p} + \frac{\psi(\underline{x}, t_{n+1})}{\delta t} . \quad (3.9)$$

3.2 Algoritmo Computacional

Passo 1: Seja $n = 0$ e $\tilde{p}(\mathbf{x}, t_0)$ um campo de pressão inicial que satisfaz a condição de contorno para a pressão na superfície livre. Esse campo de pressão é calculado de forma que a equação (2.44) seja satisfeita na superfície livre.

Passo 2: Calculamos $\Phi^{xx}(\underline{x}, t_n)$, $\Phi^{xy}(\underline{x}, t_n)$ e $\Phi^{yy}(\underline{x}, t_n)$ explicitamente através das equações (2.39)-(2.41).

Passo 3: Utilizando os tensores calculados anteriormente, a velocidade intermediária $\tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t_{n+1})$ é calculada através das seguintes equações:

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left(\nabla^2 u + \frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y} \right) + \frac{g_x}{Fr^2} , \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left(\nabla^2 v + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y} \right) + \frac{g_y}{Fr^2} . \quad (3.11)$$

As equações diferenciais ordinárias (3.10) e (3.11) são resolvidas utilizando métodos de Runge-Kutta explícitos¹.

Passo 4: Resolvemos a equação de Poisson abaixo para determinarmos $\psi(\underline{x}, t_{n+1})$:

$$\nabla^2 \psi(\underline{x}, t_{n+1}) = \nabla \cdot \tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t_{n+1}) . \quad (3.12)$$

¹ Nesse trabalho, utilizamos métodos de Runge-Kutta de ordem 1 (Euler), de ordem 2, 3 e 4, descritos no anexo A.

3. Método Numérico

Passo 5: Calculamos a velocidade final $\underline{u}(\underline{x}, t_{n+1})$ através da equação:

$$\underline{u}(\underline{x}, t_{n+1}) = \tilde{\underline{u}}(\underline{x}, t_{n+1}) - \nabla \psi(\underline{x}, t_{n+1}) . \quad (3.13)$$

Passo 6: A pressão é calculada por meio da seguinte equação:

$$p(\underline{x}, t_{n+1}) = \tilde{p}(\underline{x}, t_n) + \frac{\psi(\underline{x}, t_{n+1})}{\delta t} . \quad (3.14)$$

Passo 7: Atualizamos a posição das partículas marcadoras. Essas partículas são geradas nos injetores sendo injetadas para dentro do domínio para representar o fluido, fornecendo meios de visualização do escoamento e obtenção da orientação da superfície livre. As partículas marcadoras são movidas para suas novas posições através da solução das seguintes equações pelo método de Euler explícito:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = u \quad e \quad \frac{\partial y}{\partial t} = v . \quad (3.15)$$

Passo 8: Se $t_{n+1} < t_{final}$ fazemos $n = n + 1$ e voltamos ao passo 1, caso contrário terminamos o algoritmo.

4

Discretização das Equações

4.1 Domínio Computacional

Para resolvermos as equações (2.39)-(2.41), (3.10), (3.11), (3.12), (3.13) e (3.14), utilizamos o método de diferenças finitas em uma malha diferenciada¹, cuja pressão e tensão são calculadas no centro da célula e as componentes da velocidade nos pontos médios de cada aresta, conforme podemos observar na figura (4.1).

Figura 4.1: Célula Computacional.

Como o fluido está em movimento, precisamos identificar o fluido e a posição da superfície livre na malha, para isso, as células da malha são classificadas como segue:

¹ Esse tipo de malha foi escolhido por permitir um melhor acoplamento entre a velocidade e a pressão, foi introduzida por Harlow e Welsh [1965].

4. Discretização das Equações

1. VAZIA (E): São células que não contém fluido.
2. CHEIA (sigla: F): São células que estão cheias de fluido. Essas células não possuem faces em contato com faces de células vazias.
3. SUPERFICIE (S): São células que contém fluido e possuem pelo menos uma face em contato com uma face de célula vazia.
4. INJETOR (I): São células que definem a fronteira de injeção.
5. EJETOR (O): São células que definem a fronteira de ejeção.
6. CONTORNO (B): São células que definem a localização da fronteira rígida.

A figura (4.2) mostra uma configuração de células em uma malha computacional, nela podemos observar todos os tipos de células e sua distribuição definindo o domínio do fluido.

Figura 4.2: Domínio Computacional.

4.2 Discretização das Equações Governantes

Para discretizarmos as equações de quantidade de movimento intermediárias (3.10) e (3.11) vamos utilizar a aproximação por diferenças centrais para as derivadas espaciais

4. Discretização das Equações

e a aproximação por diferenças progressivas para as derivadas temporais. A equação de quantidade de movimento (3.10) é discretizada no ponto $(i + \frac{1}{2}, j)$ das células, enquanto que a equação (3.11) é discretizada no ponto $(i, j + \frac{1}{2})$. Procedendo dessa forma, a equação de quantidade de movimento intermediária (3.10) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^n + \delta t & \left[- \left(\frac{\tilde{p}_{i+1,j} - \tilde{p}_{i,j}}{\delta x} \right) - CONV(u)|_{i+\frac{1}{2},j} + \right. \\ & \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x^2} \right) + \\ & \left. \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\delta y^2} + \frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \right) \right] + \frac{g_x}{Fr^2}. \end{aligned}$$

Procedendo de forma análoga, a discretização da equação de quantidade de movimento intermediária (3.11) é dada por:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \delta t & \left[- \left(\frac{\tilde{p}_{i,j+1} - \tilde{p}_{i,j}}{\delta y} \right) - CONV(v)|_{i,j+\frac{1}{2}} + \right. \\ & \frac{1}{Re} \left(\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} \right) + \\ & \left. \frac{1}{Re} \left(\frac{v_{i,j+\frac{3}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y^2} + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \right) \right] + \frac{g_y}{Fr^2}. \end{aligned}$$

onde

$$CONV(u)|_{i+\frac{1}{2},j} = \left(\frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \quad e \quad CONV(v)|_{i,j+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} \right) \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}, \quad (4.1)$$

As derivadas do tensor não-Newtoniano $\frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x}$, $\frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y}$, $\frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial x}$ e $\frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y}$ são discutidas na sessão [4.2.1] e os termos convectivos (4.1) são tratados na sessão [4.3].

A equação de Poisson (3.12) é discretizada utilizando-se o operador laplaciano discreto com 5 pontos:

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\delta y^2} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}. \quad (4.2)$$

Pode-se mostrar que a equação (4.2) corresponde a um sistema linear positivo definido e pentadiagonal para $\psi_{i,j}$. Para resolver esse sistema linear, empregamos o método dos gradientes conjugados como implementado em Tomé et al. [1994].

4. Discretização das Equações

A velocidade final é obtida discretizando-se a equação (3.13) nos respectivos nós:

$$u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\delta x}, \quad (4.3)$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\delta y}. \quad (4.4)$$

O campo de pressão é obtido discretizando-se a equação (3.14) no centro das células:

$$p_{i,j} = \tilde{p}_{i,j} + \frac{\psi_{i,j}}{\delta t}. \quad (4.5)$$

4.2.1 Cálculo das Derivadas do Tensor não-Newtoniano

A derivada $\frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x}$ é calculada no ponto $(i+\frac{1}{2}, j)$ através da aproximação por diferenças centrais, conforme a equação (4.6). A derivada $\frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y}$ é calculada no ponto $(i, j+\frac{1}{2})$ das células de forma análoga, conforme a equação (4.7).

$$\left. \frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\Phi_{i+1,j}^{xx} - \Phi_{i,j}^{xx}}{\delta x}. \quad (4.6)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{\Phi_{i,j+1}^{yy} - \Phi_{i,j}^{yy}}{\delta y}. \quad (4.7)$$

F/S	F/S	O/E	O/E	F/S	F/S
F/Sij	F/S	F/Sij	F/S	F/Sij	F/S
F/S	F/S	F/S	F/S	O/E	O/E

Figura 4.3: Três configurações de células para o cálculo de $\frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y}$.

A derivada $\frac{\partial}{\partial y} \Phi^{xy}$ é calculada no ponto $(i+\frac{1}{2}, j)$ das células. Três casos são analisados, conforme figura (4.3). No primeiro caso, utilizamos a aproximação por diferenças centrais, conforme a equação (4.8), no segundo caso utilizamos a aproximação por diferenças regressivas, conforme a equação (4.9) e no terceiro caso utilizamos a aproximação por diferenças progressivas, conforme a equação (4.10).

4. Discretização das Equações

- Primeiro caso:

$$\left. \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\Phi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} - \Phi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy}}{\delta y}, \quad (4.8)$$

$$\Phi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{\Phi_{i,j}^{xy} + \Phi_{i+1,j}^{xy} + \Phi_{i,j+1}^{xy} + \Phi_{i+1,j+1}^{xy}}{4},$$

$$\Phi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{\Phi_{i,j}^{xy} + \Phi_{i+1,j}^{xy} + \Phi_{i,j-1}^{xy} + \Phi_{i+1,j-1}^{xy}}{4}.$$

- Segundo caso:

$$\left. \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\Phi_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} - \Phi_{i+\frac{1}{2},j-1}^{xy}}{\delta y}, \quad (4.9)$$

$$\Phi_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \frac{\Phi_{i,j}^{xy} + \Phi_{i+1,j}^{xy}}{2} \quad e \quad \Phi_{i+\frac{1}{2},j-1}^{xy} = \frac{\Phi_{i,j-1}^{xy} + \Phi_{i+1,j-1}^{xy}}{2}.$$

- Terceiro caso:

$$\left. \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\Phi_{i+\frac{1}{2},j+1}^{xy} - \Phi_{i+\frac{1}{2},j}^{xy}}{\delta y}, \quad (4.10)$$

$$\Phi_{i+\frac{1}{2},j+1}^{xy} = \frac{\Phi_{i,j+1}^{xy} + \Phi_{i+1,j+1}^{xy}}{2} \quad e \quad \Phi_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \frac{\Phi_{i,j}^{xy} + \Phi_{i+1,j}^{xy}}{2}.$$

Quando a célula (i, j) está em contato com células do injetor ou células do contorno rígido, de acordo com a figura (4.4), utilizamos a aproximação por diferenças centrais juntamente com as condições de contorno para Φ^{xy} estudadas na sessão [2.3].

F/S	F/S	B/I	B/I	F/S	F/S
F/Sij	F/S	F/Sij	F/S	F/Sij	F/S
F/S	F/S	F/S	F/S	B/I	B/I

Figura 4.4: Três configurações de células para o cálculo de $\frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y}$.

A derivada $\frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial x}$ é calculada no ponto $(i, j + \frac{1}{2})$ e é obtida de forma análoga.

4.2.2 Discretização do Tensor não-Newtoniano

As equações (2.39)-(2.41) são discretizadas no centro das células conforme podemos observar abaixo:

$$\begin{aligned}\Phi^{xx}\Big|_{i,j} &= -De \left[4 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \right)^2 + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right) \right] . \\ \Phi^{xy}\Big|_{i,j} &= -2De \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \right) . \\ \Phi^{yy}\Big|_{i,j} &= -De \left[4 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \right)^2 + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right) \right] .\end{aligned}$$

As derivadas na equação acima são aproximadas como segue. Para calcular a derivada $\frac{\partial u}{\partial x}$ utilizamos o esquema de diferenças centrais, conforme a equação (4.11). A derivada $\frac{\partial v}{\partial y}$ é calculada de forma análoga, conforme equação (4.12).

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} . \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} . \quad (4.12)$$

Figura 4.5: Três configurações de células para $\frac{\partial u}{\partial y}$

A derivada $\frac{\partial u}{\partial y}$ é calculada utilizando-se um esquema misto. Para o caso que a célula com índice (i, j) possui as faces $j + \frac{1}{2}$ e $j - \frac{1}{2}$ em contato com células cheias ou de superfície livre utilizamos o esquema diferenças centrais:

4. Discretização das Equações

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}, \quad (4.13)$$

$$u_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1} + u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{4},$$

$$u_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1} + u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{4}.$$

Quando a face $j + \frac{1}{2}$ não está em contato com células cheias ou de superfície livre utilizamos o esquema de diferenças regressivas:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\delta y}, \quad (4.14)$$

$$u_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{2} \quad \text{e} \quad u_{i,j-1} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{2}.$$

Por outro lado, se a face $j - \frac{1}{2}$ não estiver em contato com células cheias ou de superfície livre utilizamos o esquema de diferenças progressivas:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta y}, \quad (4.15)$$

$$u_{i,j+1} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1}}{2} \quad \text{e} \quad u_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{2}.$$

Para calcular a derivada $\frac{\partial v}{\partial x}$ procedemos de forma análoga ao cálculo da derivada $\frac{\partial u}{\partial y}$.

4.3 Discretização dos Termos Convectivos

A forma através da qual as derivadas convectivas nas equações de quantidade de movimento (3.10) e (3.11) são aproximadas requer uma atenção especial. Esses termos são responsáveis por muitos fenômenos complexos nos escoamentos e são os principais causadores de dificuldades numéricas nas simulações. Devido a esses fatores, várias técnicas de discretização têm sido desenvolvidas ao longo dos anos, conferir Varonos e Bergeles [1998]. No presente trabalho adotamos o esquema de alta ordem VONOS (*Variable Order Non-Oscillatory Scheme*), ver Varonos e Bergeles [1998].

A escolha do esquema VONOS para a discretização do termo convectivo é devido ao fato de que esquemas de alta ordem reduzem oscilações numéricas fisicamente incorretas

4. Discretização das Equações

ao mesmo tempo que minimiza os efeitos da difusão numérica artificial. Outros métodos como SMART, conferir Gaskell et al. [1988], e o esquema HLP (Hybrid Linear Parabolic Approximation), conferir Zhu [1992], poderiam ser utilizados.

Figura 4.6: Estêncil utilizado para calcular ϕ_A e ϕ_B .

Considerando a figura (4.6), onde V_A e V_B são as velocidades convectivas nos pontos P_A e P_B , respectivamente. Para calcularmos a derivada parcial da variável genérica ϕ em um ponto P_0 , por exemplo $\frac{\partial \phi}{\partial s}$, onde s é um dos eixos coordenados, podemos fazer a seguinte aproximação:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial s} \right|_{P_0} = \frac{\phi_B - \phi_A}{\Delta s}.$$

Os valores de ϕ_A e ϕ_B são obtidos em termos dos valores vizinhos, ϕ_{-2} , ϕ_{-1} , ϕ_0 , ϕ_1 , ϕ_2 e das direções das velocidades convectivas (V_A, V_B).

Esquema VONOS:

$$\text{se } V_B \geq 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_0, & \text{se } \hat{\phi}_0 \notin [0, 1] \\ 10\phi_0 - 9\phi_{-1}, & \text{se } \hat{\phi}_0 \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_1 + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_{-1}, & \text{se } \hat{\phi}_0 \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_0 - 0.5\phi_{-1}, & \text{se } \hat{\phi}_0 \in [1/2, 2/3) \\ \phi_1, & \text{se } \hat{\phi}_0 \in [2/3, 1] \end{cases}$$

$$\text{se } V_B < 0, \quad \phi_B = \begin{cases} \phi_1, & \text{se } \hat{\phi}_1 \notin [0, 1] \\ 10\phi_1 - 9\phi_2, & \text{se } \hat{\phi}_1 \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_1 - \frac{1}{8}\phi_2, & \text{se } \hat{\phi}_1 \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_1 - 0.5\phi_2, & \text{se } \hat{\phi}_1 \in [1/2, 2/3) \\ \phi_0, & \text{se } \hat{\phi}_1 \in [2/3, 1] \end{cases}$$

4. Discretização das Equações

$$\text{se } V_A \geq 0, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_{-1}, & \text{se } \widehat{\phi}_{-1} \notin [0, 1] \\ 10\phi_{-1} - 9\phi_{-2}, & \text{se } \widehat{\phi}_{-1} \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_{-1} - \frac{1}{8}\phi_{-2}, & \text{se } \widehat{\phi}_{-1} \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_{-1} - 0.5\phi_{-2}, & \text{se } \widehat{\phi}_{-1} \in [1/2, 2/3) \\ \phi_0, & \text{se } \widehat{\phi}_{-1} \in [2/3, 1] \end{cases}$$

$$\text{se } V_A < 0, \quad \phi_A = \begin{cases} \phi_0, & \text{se } \widehat{\phi}_0 \notin [0, 1] \\ 10\phi_0 - 9\phi_1, & \text{se } \widehat{\phi}_0 \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_{-1} + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_1, & \text{se } \widehat{\phi}_0 \in [3/74, 1/2) \\ 1.5\phi_0 - 0.5\phi_1, & \text{se } \widehat{\phi}_0 \in [1/2, 2/3) \\ \phi_{-1}, & \text{se } \widehat{\phi}_0 \in [2/3, 1] \end{cases}$$

onde $\widehat{\phi}_i$, $i=-1, 0, 1$, é definido em função das velocidades *upstream* (ϕ_U), *remote-upstream* (ϕ_R) e *downstream* (ϕ_D) no ponto P_A e P_B , isto é, de acordo com a direção da velocidade convectiva, e

$$\widehat{\phi}_i = \frac{\phi_U - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}.$$

Por exemplo, considerando o ponto P_A , como mostrado na figura (4.6), e supondo que a velocidade convectiva nesse ponto é positiva ($V_A > 0$), então os valores de ϕ_D , ϕ_U e ϕ_R são dados por ϕ_0 , ϕ_{-1} e ϕ_{-2} , respectivamente.

Para implementarmos as expressões acima consideramos o termo convectivo da equação (3.10) avaliado em $(i + \frac{1}{2}, j)$, dado por:

$$CONV(u)|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\partial u^2}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j}. \quad (4.16)$$

As derivadas da equação (4.16) podem ser aproximadas como segue:

$$\frac{\partial(uu)}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\hat{u}_{i+1,j}u_{i+1,j} - \hat{u}_{i,j}u_{i,j}}{\delta x}, \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial(uv)}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\hat{v}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \hat{v}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\delta y}, \quad (4.18)$$

onde $\hat{u}$ e $\hat{v}$ são as velocidades convectivas e podem ser obtidas pelas médias dos valores vizinhos. As velocidades transportadas são calculadas através do esquema convectivo

4. Discretização das Equações

VONOS. Logo, as velocidades $u_{i,j}$ e $u_{i+1,j}$ em (4.17) são obtidas de acordo com o seguinte procedimento. Seja $S_{i,j}$ definido abaixo:

$$S_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{se } \hat{u}_{i,j} \geq 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Aplicando o método VONOS à equação (4.17), obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{i+1,j} &= (1 - S_{i+1,j}) \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}} \right) + S_{i+1,j} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i+\frac{5}{2},j}}{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{5}{2},j}} \right) \\ u_{i+1,j} &= (1 - S_{i+1,j}) \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j} - 9u_{i-\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{3}{2},j} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [3/74, 1/2) \\ 1.5u_{i+\frac{1}{2},j} - 0.5u_{i-\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i+\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [2/3, 1] \end{cases} \\ &\quad + S_{i+1,j} \begin{cases} u_{i+\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{3}{2},j} - 9u_{i+\frac{5}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{6}{8}u_{i-\frac{3}{2},j} - \frac{1}{8}u_{i+\frac{5}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [3/74, 1/2) \\ 1.5u_{i+\frac{3}{2},j} - 0.5u_{i+\frac{5}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i+\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i+1,j} \in [2/3, 1] \end{cases} \\ \hat{\phi}_{i,j} &= (1 - S_{i,j}) \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{3}{2},j}}{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{3}{2},j}} \right) + S_{i,j} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{3}{2},j}}{u_{i-\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{3}{2},j}} \right) \\ u_{i,j} &= (1 - S_{i,j}) \begin{cases} u_{i-\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \notin [0, 1] \\ 10u_{i-\frac{1}{2},j} - 9u_{i-\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}u_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{6}{8}u_{i-\frac{1}{2},j} - \frac{1}{8}u_{i-\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [3/74, 1/2) \\ 1.5u_{i-\frac{1}{2},j} - 0.5u_{i-\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i+\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [2/3, 1] \end{cases} \\ &\quad + S_{i,j} \begin{cases} u_{i+\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \notin [0, 1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j} - 9u_{i+\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}u_{i-\frac{1}{2},j} + \frac{6}{8}u_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{8}u_{i+\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [3/74, 1/2) \\ 1.5u_{i-\frac{1}{2},j} - 0.5u_{i+\frac{3}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i-\frac{1}{2},j} & \text{se } \hat{\phi}_{i,j} \in [2/3, 1] \end{cases} \end{aligned}$$

As velocidades transportadas da equação (4.18) são obtidas de forma análoga ao procedimento acima.

4.4 Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre

As condições de contorno na superfície livre (2.46) e (2.47) podem ser escritas como:

$$p - \frac{1}{Re} [\Phi^{xx} n_x^2 + \Phi^{yy} n_y^2 + 2n_x n_y (\Phi^{xy} + d^{xy})] = 0 ,$$

$$(d^{xx} - d^{yy} + \Phi^{xx} - \Phi^{yy}) n_x n_y + (d^{xy} + \Phi^{xy}) (n_x^2 - n_y^2) = 0 .$$

Para aplicar essas condições, vamos supor que a malha é suficientemente fina de forma que a superfície livre do fluido intersecta as células da malha em duas faces. Nesse caso, podemos aproximar a superfície livre através de superfícies horizontais, verticais ou inclinadas 45° , como segue:

1. **Células de superfície livre com apenas uma face em contato com uma face de células vazias:** Nesse caso, assumimos que a superfície livre é horizontal ou vertical. O vetor normal nessas células toma a forma $\underline{n} = (\pm 1, 0)$ ou $\underline{n} = (0, \pm 1)$, de acordo com a figura (4.7).

Figura 4.7: Células de superfície livre com apenas uma face em contato com uma célula vazia.

As equações (2.46) e (2.47) nessas células se reduzem a:

$$p - \frac{1}{Re} (\Phi^{xx} n_x^2 + \Phi^{yy} n_y^2) = 0 , \quad (4.19)$$

$$d^{xy} + \Phi^{xy} = 0 . \quad (4.20)$$

4. Discretização das Equações

Considerando a figura (4.7a), observamos que ao calcular $\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}$ e $\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}$, utilizando (3.10) e (3.11), os valores de $u_{i+\frac{1}{2},j}$, $u_{i+1,j+\frac{1}{2}}$ e $\tilde{p}_{i,j}$ são necessários. Esses valores são obtidos como segue:

- A velocidade $u_{i+\frac{1}{2},j}$ é calculada através da equação da continuidade aplicada no centro da célula de superfície livre, que fornece:

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i-\frac{1}{2},j} - \frac{\delta x}{\delta y} \left(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \right). \quad (4.21)$$

- A velocidade $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$ é calculada aplicando a equação (4.20) na coordenada $(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})$ da malha, fornecendo:

$$v_{i+1,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} - \delta x \frac{\partial u}{\partial y} \bigg|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \frac{\left(1 - 2De \frac{\partial v}{\partial y} \bigg|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \right)}{\left(1 - 2De \frac{\partial u}{\partial x} \bigg|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \right)}, \quad (4.22)$$

onde as derivadas $\frac{\partial u}{\partial y}$, $\frac{\partial u}{\partial x}$ são avaliadas através de diferenças centrais e a derivada $\frac{\partial v}{\partial y}$ é avaliada através do esquema de diferenças regressivas.

- A pressão $\tilde{p}_{ij}$ é calculada através da equação (4.19) aplicada no ponto (i,j) , assim obtemos:

$$\tilde{p}_{ij} = \frac{1}{Re} \left(d^{xx}|_{i,j} + \Phi^{xx}|_{i,j} \right). \quad (4.23)$$

2. Células de superfície livre com duas faces adjacentes em contato com faces de células vazias: Nessas células, assumimos que a superfície livre faz um ângulo de 45° com os eixos coordenados. Nessas células, o vetor normal toma a forma $\underline{n} = \left(\pm \frac{\sqrt{2}}{2}, \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$. Por exemplo, se considerarmos a célula de superfície livre mostrada na figura (4.8a), tomamos $\underline{n} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$.

Figura 4.8: Células de superfície livre com duas faces adjacentes em contato com células vazias.

Nesse caso, as equações (2.46) e (2.47) tomam a forma:

$$\tilde{p} = \frac{1}{2 Re} (\Phi^{xx} + \Phi^{yy} + 2 \Phi^{xy} + 2 d^{xy}) , \quad (4.24)$$

$$d^{xx} - d^{yy} + \Phi^{xx} - \Phi^{yy} = 0 . \quad (4.25)$$

As velocidades $u_{i+\frac{1}{2},j}$, $v_{i,j+\frac{1}{2}}$ e $\tilde{p}_{i,j}$ são calculadas como segue:

- Utilizamos a equação (4.25) juntamente com a equação de conservação de massa (2.37) para calcular as velocidades $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}$. As equações (4.25) e (2.37) formam um sistema de segundo grau com duas equações a duas incógnitas, que pode ser resolvido através do método de substituição sob a hipótese de que $\delta x = \delta y$. Quando $\delta x \neq \delta y$ o sistema não linear gera quatro soluções, impossibilitando sua implementação computacional. Utilizando o vetor $\underline{u} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right)$ e simplificando as equações (4.25) e (2.37) obtemos o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} + De \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - De \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 &= 0 , \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0 , \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde as derivadas $\frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial v}{\partial y}$ são aproximadas através do método de diferenças centrais e as derivadas $\frac{\partial u}{\partial y}$ e $\frac{\partial v}{\partial x}$ são aproximadas através de diferenças regressivas.

4. Discretização das Equações

Resolvendo o sistema (4.26), obtemos os seguintes resultados para a velocidade:

$$\begin{aligned}
 u_{i+1/2,j} = & \frac{1}{2}((-6\omega_4 u_{i-1/2,j} - 36v_{i,j-1/2}^2 - 6\omega_1 u_{i-1/2,j} + 24v_{i-1,j+1/2} u_{i-1/2,j} \\
 & + 24v_{i-1,j-1/2} u_{i-1/2,j} - \omega_1^2 - 2\omega_1 \omega_4 + 8\omega_1 v_{i-1,j+1/2} + 8\omega_1 v_{i-1,j-1/2} - 12\omega_1 v_{i,j-1/2} \\
 & - \omega_4^2 + 8\omega_4 v_{i-1,j-1/2} + 8\omega_4 v_{i-1,j+1/2} - 12\omega_4 v_{i,j-1/2} - 16v_{i-1,j+1/2}^2 \\
 & - 32v_{i-1,j+1/2} v_{i-1,j-1/2} + 48v_{i-1,j+1/2} v_{i,j-1/2} - 16v_{i-1,j-1/2}^2 + 48v_{i-1,j-1/2} v_{i,j-1/2} + \omega_3^2 \\
 & + 2\omega_3 \omega_2 - 8\omega_3 u_{i+1/2,j-1} - 8\omega_3 u_{i-1/2,j-1} + 6\omega_3 u_{i-1/2,j} + \omega_2^2 - 8\omega_2 u_{i+1/2,j-1} \\
 & - 8\omega_2 u_{i-1/2,j-1} + 6\omega_2 u_{i-1/2,j} + 16u_{i-1/2,j-1}^2 + 32u_{i+1/2,j-1} u_{i-1/2,j-1} \\
 & - 24u_{i+1/2,j-1} u_{i-1/2,j} + 16u_{i-1/2,j-1}^2 - 24u_{i-1/2,j-1} u_{i-1/2,j} - 36u_{i-1/2,j} v_{i,j-1/2})De \\
 & + 32u_{i-1/2,j} dy) / ((-3\omega_4 - 3\omega_3 + 12u_{i-1/2,j-1} - 18v_{i,j-1/2} + 12v_{i-1,j-1/2} - 3\omega_2 \\
 & + 12v_{i-1,j-1/2} - 3\omega_1 + 12u_{i+1/2,j-1} - 18u_{i-1/2,j})De + 16dy) , \\
 \omega_1 = & v_{i-2,j+1/2} , \quad \omega_2 = u_{i-1/2,j-2} , \quad \omega_3 = u_{i+1/2,j-2} , \quad \omega_4 = v_{i-2,j-1/2} .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 v_{i,j+1/2} = & \frac{1}{2}((\omega_1^2 + 2\omega_1 \omega_4 - 8\omega_1 v_{i-1,j+1/2} - 8\omega_1 v_{i-1,j-1/2} + 6\omega_1 v_{i,j-1/2} + \omega_4^2 \\
 & - 8\omega_4 v_{i-1,j+1/2} - 8\omega_4 v_{i-1,j-1/2} + 6\omega_4 v_{i,j-1/2} + 16v_{i-1,j+1/2}^2 + 32v_{i-1,j+1/2} v_{i-1,j-1/2} \\
 & - 24v_{i-1,j+1/2} v_{i,j-1/2} + 16v_{i-1,j-1/2}^2 - 24v_{i-1,j-1/2} v_{i,j-1/2} - \omega_3^2 - 2\omega_3 \omega_2 \\
 & + 8\omega_3 u_{i+1/2,j-1} + 8\omega_3 u_{i-1/2,j-1} - 12\omega_3 u_{i-1/2,j} - 6\omega_3 v_{i,j-1/2} - \omega_2^2 + 8\omega_2 u_{i+1/2,j-1} \\
 & + 8\omega_2 u_{i-1/2,j-1} - 12\omega_2 u_{i-1/2,j} - 6\omega_2 v_{i,j-1/2} - 16u_{i+1/2,j-1}^2 - 32u_{i+1/2,j-1} u_{i-1/2,j-1} \\
 & + 48u_{i+1/2,j-1} u_{i-1/2,j} + 24u_{i+1/2,j-1} v_{i,j-1/2} - 16u_{i-1/2,j-1}^2 + 48u_{i-1/2,j-1} u_{i-1/2,j} \\
 & + 24u_{i-1/2,j-1} v_{i,j-1/2} - 36u_{i-1/2,j}^2 - 36u_{i-1/2,j} v_{i,j-1/2})De + 32v_{i,j-1/2} dy) / ((-3\omega_4 \\
 & - 3\omega_3 + 12u_{i-1/2,j-1} - 18v_{i,j-1/2} + 12v_{i-1,j+1/2} - 3\omega_2 + 12v_{i-1,j-1/2} - 3\omega_1 + 12u_{i+1/2,j-1} \\
 & - 18u_{i-1/2,j})De + 16dy) , \\
 \omega_1 = & v_{i-2,j+1/2} , \quad \omega_2 = u_{i-1/2,j-2} , \quad \omega_3 = u_{i+1/2,j-2} , \quad \omega_4 = v_{i-2,j-1/2} .
 \end{aligned}$$

- A pressão $\tilde{p}_{i,j}$ é calculada através da equação (4.25) aplicada no centro da célula de superfície livre. Considerando o caso (4.8a), temos:

$$\tilde{p}_{i,j} = \frac{1}{2Re} \cdot (\Phi^{xx}|_{i,j} + \Phi^{yy}|_{i,j} + 2\Phi^{xy}|_{i,j} + 2d^{xy}|_{i,j}) . \quad (4.27)$$

Para os outros casos da figura (4.8) procedemos de forma análoga.

3. Os casos que a célula de superfície possuem lados opostos em contato com lados de células vazias ou que possuem três ou quatro lados em contato com células vazias são considerados casos degenerados. Nesses casos, uma das velocidades é calculada em função das outras de forma que a equação da continuidade seja satisfeita e a pressão é dada por $\tilde{p} = 0$. Quando esses tipos de configuração de células aparece em um escoamento, isso indica que a malha de pontos deve ser refinada.

4.5 Controle do Passo no Tempo

Utilizamos um procedimento para calcular o tamanho do passo no tempo para todo ciclo computacional. Esse procedimento é baseado nas seguintes condições de estabilidade escritas na forma adimensional, conferir Tomé et al. [1994] ou Fortuna [2000]:

1. Nenhuma partícula deve cruzar mais de uma célula em um dado intervalo de tempo. Esse critério é conhecido como condição CFL. Assim, o valor de δt deve ser:

$$\delta t_1 < \min \left(\frac{\delta x}{|u|_{max}}, \frac{\delta y}{|v|_{max}} \right) , \quad (4.28)$$

onde $|u|_{max}$ e $|v|_{max}$ são as velocidades máximas, em módulo, nas direções x e y , respectivamente.

2. O termo difusivo da equação de quantidade de movimento exige que:

$$\delta t_2 < Re \frac{\delta x^2 \delta y^2}{2\delta x^2 + 2\delta y^2} . \quad (4.29)$$

O valor de δt adotado deve satisfazer, simultaneamente, as condições (4.28) e (4.29), portanto:

$$\delta t = \zeta \min (\delta t_1, \delta t_2) , \quad (4.30)$$

onde $0 < \zeta < 1$ é um fator de segurança. Para fluidos de Segunda Ordem usamos ζ no intervalo $(\frac{1}{20}, \frac{1}{2})$.

4.6 Movimento das Partículas

Utilizamos partículas marcadoras para representar o fluido. O objetivo principal dessas partículas é indicar a posição da superfície livre para determinar a configuração do fluido. As partículas são atualizadas no fim de cada passo no tempo fornecendo a dinâmica do movimento do fluido. A nova coordenada do fluido é encontrada resolvendo as seguintes equações através do método de Euler, conferir Ralston [1965]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = u \quad e \quad \frac{\partial y}{\partial t} = v .$$

As partículas são movidas de acordo com as seguintes equações:

$$\begin{aligned} x_p^{n+1} &= x_p^n + u_p \delta t^{n+1} , \\ y_p^{n+1} &= y_p^n + v_p \delta t^{n+1} . \end{aligned}$$

onde (x_p^n, y_p^n) , (x_p^{n+1}, y_p^{n+1}) e δt^{n+1} são a posição atual da partícula, a nova posição e o passo no tempo atual, respectivamente. As velocidades u_p e v_p são calculadas através de uma interpolação bilinear envolvendo as quatro velocidades u e v mais próximas.

5

Validação do Método Numérico

As equações de diferenças finitas descritas no capítulo anterior foram implementadas no sistema FreeFlow-2D¹ para que possa ser empregado na simulação numérica de escoamentos de fluidos de Segunda Ordem. Na sessão [5.1] apresentamos a simulação do escoamento em um canal bidimensional com o objetivo de validar a implementação do método numérico desenvolvido nesse trabalho.

5.1 Validação no Canal

Para validar o método numérico vamos considerar o escoamento em um canal, conforme mostra a figura (5.1).

Figura 5.1: Descrição do modelo computacional para a canal-2D.

No injetor, vamos utilizar o perfil de velocidades parabólico, dado por:

¹ Conferir anexo C.

5. Validação do Método Numérico

$$u(y) = u_0 - \frac{4u_0}{L^2} \left(y - \frac{L}{2} \right)^2 . \quad (5.1)$$

onde $u_0 = 1 \text{ m/s}$ é a velocidade no injetor, $L = 1 \text{ cm}$ é a largura do canal e $H = 15 \text{ cm}$ é o comprimento do canal. Substituindo u_0 e L na equação (5.1) obtemos o perfil de velocidade do injetor:

$$u(y) = -4y^2 + 4y . \quad (5.2)$$

A solução analítica para o perfil de velocidades no canal em regime permanente é dada pela pelas equações abaixo, de acordo com Fortuna [2000]:

$$u(y) = -\frac{1}{2\eta_0} \frac{\partial p}{\partial x} (yL - y^2) , \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -12 \frac{\eta_0}{L^3} \int_0^L u(y) dy . \quad (5.4)$$

Utilizando as equações (5.3) e (5.4) juntamente com o perfil de velocidades no injetor (5.1), verificamos que o perfil de velocidades no canal é dado pela equação (5.1).

Em regime permanente, as equações constitutivas (2.34), (2.35) e (2.36) se simplificam em:

$$\begin{aligned} \tau^{xx} &= -\frac{2De}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 , \\ \tau^{xy} &= \frac{1}{Re} \frac{\partial u}{\partial y} , \\ \tau^{yy} &= 0 . \end{aligned} \quad (5.5)$$

As equações (5.5) são as soluções analíticas para as componentes do tensor de tensão extra quando a velocidade u é calculada através da equação (5.1).

5. Validação do Método Numérico

Para simular o problema (5.1), vamos utilizar os seguintes dados:

Escala de comprimento $L = 0.01 \text{ m}$

Escala de velocidade $U = 1.0 \text{ m/s}$

Força de gravidade : $\underline{g}_x = \underline{g}_y = 0.0 \text{ m/s}^2$

Viscosidade $\eta/\rho = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$

Tolerância para a solução da equação de Poisson $= 10^{-8}$

Fator de controle de passo no tempo $\zeta = 0.08$

$\lambda_2 = 0.0045 \text{ s}$

Número de Reynolds $= 1.0$

Número de Deborah $= 0.45$

Para avaliar a convergência do método apresentado, vamos utilizar três malhas:

$M_1 \rightarrow \delta x = \delta y = 0.125 \text{ cm}$, (8 x 120) células;

$M_2 \rightarrow \delta x = \delta y = 0.0625 \text{ cm}$, (16 x 240) células;

$M_3 \rightarrow \delta x = \delta y = 0.03125 \text{ cm}$, (32 x 480) células.

O sistema FreeFlow-2D simulou esse problema, utilizando as três malhas, até atingir o estado estacionário. Os resultados apresentados nas figuras (5.2)-(5.7) correspondem à simulação na malha M_3 . A figura (5.2) mostra a distribuição de velocidade u no canal nos tempos $t = 0.1 \text{ s}$ e $t = 0.545 \text{ s}$. Podemos observar que no tempo $t = 0.545 \text{ s}$ as linhas de contorno estão paralelas mostrando que o estado estacionário foi atingido. As figuras (5.3)-(5.7) mostram, respectivamente, a configuração da velocidade v , da tensão normal τ^{xx} , da tensão cisalhante τ^{xy} , da tensão normal τ^{yy} e da primeira diferença de tensões normais $N1$. Pode-se observar que os valores de τ^{xx} e $N1$ estão bem próximos. A diferença entre τ^{xx} e $N1$ se deve ao fato que τ^{yy} não é nulo próximo ao injetor e à superfície livre, como pode ser observado na figura (5.6).

5. Validação do Método Numérico

Figura 5.2: Resultados numéricos para a componente u em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.

Figura 5.3: Resultados numéricos para a componente v em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.

5. Validação do Método Numérico

Figura 5.4: Resultados numéricos para o tensor τ^{xx} em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.

Figura 5.5: Resultados numéricos para o tensor τ^{xy} em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.

5. Validação do Método Numérico

Figura 5.6: Resultados numéricos para o tensor τ^{yy} em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.

Figura 5.7: Resultados numéricos para N1 em $t = 0.1$ s e $t = 0.545$ s.

5. Validação do Método Numérico

Nos gráficos das figuras (5.8)-(5.13) os resultados numéricos são representados pelos pontos discretos e os resultados analíticos, conforme as equações (5.1) e (5.5), pelas linhas contínuas. A componente da velocidade v e a componente da tensão τ^{yy} não foram inseridas no processo de validação pois ambas são nulas. Todos os resultados são adimensionais.

Os gráficos da figura (5.8) e da figura (5.9) correspondem ao corte do canal na direção y nas coordenadas $x = 7.5 \text{ cm}$ e $x = 15.0 \text{ cm}$ para a malha M_1 , respectivamente.

Figura 5.8: Resultados na malha M_1 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5 \text{ cm}$.

Figura 5.9: Resultados na malha M_1 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 15.0 \text{ cm}$.

5. Validação do Método Numérico

Os gráficos (5.10) e (5.11) correspondem aos resultados obtidos para a velocidade u e para a tensão nos planos $x = 7.5 \text{ cm}$ e $x = 15.0 \text{ cm}$ para a malha M_2 .

Figura 5.10: Resultados na malha M_2 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5 \text{ cm}$.

Figura 5.11: Resultados na malha M_2 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 15.0 \text{ cm}$.

5. Validação do Método Numérico

Os resultados obtidos para a malha M_3 no plano $x = 7.5 \text{ cm}$ podem ser observados nos gráficos da figura (5.12).

Figura 5.12: Resultados na malha M_3 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5 \text{ cm}$.

Abaixo seguem os resultados obtidos para a malha fina no plano $x = 15.0 \text{ cm}$.

Figura 5.13: Resultados na malha M_3 : velocidade u , componente τ^{xx} e τ^{xy} em $x = 7.5 \text{ cm}$.

5. Validação do Método Numérico

Podemos observar nos gráficos (5.8)-(5.13) que a velocidade u é bem aproximada pelo método numérico. Contudo, o valor das tensões τ^{xx} e τ^{xy} em células adjacentes às paredes do canal apresenta um erro significativo, esse erro aparece devido à utilização de métodos de primeira ordem para aproximar as derivadas nessas células. Porém, no meio do canal, podemos ver que a solução numérica concorda bem com a solução exata. Os gráficos (5.8)-(5.13) também mostram que, com o refinamento da malha, o erro cometido em células adjacentes ao contorno rígido decai, mostrando a convergência do método numérico.

No entanto, para demonstrarmos a convergência do método numérico, devemos calcular o erro relativo entre a solução numérica e a solução analítica. Utilizaremos as seguintes expressões, que correspondem à norma l_2 :

$$E_{vel} = \frac{\sum (u|_{ex} - u|_{num})^2}{\sum (u|_{ex})^2}, \quad E_{\tau^{xx}} = \frac{\sum (\tau^{xx}|_{ex} - \tau^{xx}|_{num})^2}{\sum (\tau^{xx}|_{ex})^2} \quad e \quad E_{\tau^{xy}} = \frac{\sum (\tau^{xy}|_{ex} - \tau^{xy}|_{num})^2}{\sum (\tau^{xy}|_{ex})^2}. \quad (5.6)$$

onde $|_{ex}$ é a solução exata e $|_{num}$ é a solução numérica.

Os erros obtidos utilizando as malhas M_1 , M_2 e M_3 , são mostrados na tabela (5.1).

Malha	E_{vel}	$E_{\tau^{xx}}$	$E_{\tau^{xy}}$
M_1	$7.95 \cdot 10^{-5}$	$6.92 \cdot 10^{-2}$	$1.56 \cdot 10^{-2}$
M_2	$5.51 \cdot 10^{-6}$	$9.52 \cdot 10^{-3}$	$1.74 \cdot 10^{-3}$
M_3	$3.55 \cdot 10^{-7}$	$1.22 \cdot 10^{-3}$	$2.02 \cdot 10^{-4}$

Tabela 5.1: Erro relativo para verificar a convergência do método numérico.

Os resultados na tabela (5.1) mostram que o erro relativo diminui, com o refinamento da malha, na velocidade e nas tensões. Esse comportamento mostra que o método numérico converge com o refinamento da malha.

A ordem de convergência será calculada através dos resultados obtidos nas três malhas. O espaçamento entre essas malhas segue a regra: $h_{i+1} = \frac{1}{2}h_i$, com $i = 1, 2$. Supondo que a ordem de convergência do método numérico pode ser dada pela expressão (5.7),

5. Validação do Método Numérico

$$S_{h_i}(\underline{x}_i, t) - S(\underline{x}_i, t) = \underline{c}h_i^n, \quad (5.7)$$

onde $\underline{c}$ é um vetor que não depende de h_i , $S_{h_i}(\underline{x}_i, t)$ é a solução aproximada e $S(\underline{x}_i, t)$ é a solução exata, podemos calcular:

$$\delta(S_{h_i}) = \|S_{h_i}(\underline{x}_i, t) - S(\underline{x}_i, t)\| = \|\underline{c}\|h_i^n, \quad (5.8)$$

$$\delta(S_{h_{i+1}}) = \|S_{h_{i+1}}(\underline{x}_i, t) - S(\underline{x}_i, t)\| = \|\underline{c}\|h_{i+1}^n. \quad (5.9)$$

Dividindo a equação (5.9) pela equação (5.8) e aplicando o logaritmo, obtemos as seguintes expressões para a ordem de convergência, utilizando as malhas M_1 , M_2 e M_3 :

$$n_1 = \frac{\log \frac{\delta(S_{M_2})}{\delta(S_{M_1})}}{\log \frac{1}{2}}, \quad (5.10)$$

$$n_2 = \frac{\log \frac{\delta(S_{M_3})}{\delta(S_{M_2})}}{\log \frac{1}{2}}. \quad (5.11)$$

Os resultados fornecidos por (5.10) e (5.11) são mostrados na tabela (5.2).

Equação utilizada	$O(u)$	$O(\tau^{xx})$	$O(\tau^{xy})$
Equação (5.10) com M_1 e M_2	1.969147	1.815898	1.973956
Equação (5.11) com M_2 e M_3	1.989068	1.920812	1.993293

Tabela 5.2: Ordem de convergência do método numérico.

Os resultados da tabela (5.2) constataam que os dados têm a mesma ordem de grandeza, além disso os resultados indicam que o método numérico converge aproximadamente com ordem $O(h^2)$. Portanto, o método numérico está quantitativamente validado para o problema de escoamento de fluido de Segunda Ordem em um canal com superfícies livres.

6

Resultados Numéricos

Com o objetivo de verificarmos os efeitos causados pela diferença de tensões normais em escoamentos do tipo SOF, analisaremos os resultados numéricos para a contração planar e para o problema de inchamento do extrudado, conferir trabalhos de Mitsoulis [1999], Gast et al. [1999], Nigen e Walters [2002] e Liang e Özetkin [1999]. Ademais, utilizaremos esses resultados para verificarmos a eficiência do método numérico em resolver qualitativamente os escoamentos com ou sem superfície livre.

Muitos trabalhos realizados sobre a contração detêm atenção especial ao tamanho dos vórtices formados próximos à parede. O tamanho dos vórtices depende principalmente da geometria utilizada, da elasticidade do fluido (quantificada pelo número de Deborah) e das propriedades reológicas do fluido. O estudo desse problema procederá com a análise sobre a formação desses vórtices em escoamentos de fluidos de Segunda Ordem.

No problema de inchamento do extrudado, a expansão do fluido ao deixar um orifício é ocasionada por dois fatores, segundo Gast et al. [1999]: o tamanho dessa expansão é determinado pelas condições do processo e pelas propriedades reológicas do fluido. As condições do processo incluem a geometria do problema, a taxa de fluxo de massa e a temperatura. As propriedades reológicas do fluido incluem a viscosidade, a densidade, a primeira e a segunda diferenças de tensões normais. Analisaremos a formação dessa expansão e compararemos os resultados com a teoria de Tanner, conferir Tanner [1970], e com o trabalho de Crochet e Keunings, conferir Crochet et al. [1982].

6.1 Contração 4 : 1

A figura (6.1) mostra o modelo e as medidas do domínio para a contração 4 : 1.

Figura 6.1: Modelo para a simulação da contração 4 : 1.

Os seguintes dados foram utilizados no sistema FreeFlow-2D para simular o problema da contração 4 : 1:

Escala de comprimento $L = 0.01 \text{ m}$

Escala de velocidade $U = 1.0 \text{ m/s}$

Força gravitacional : $\underline{g}_x = \underline{g}_y = 0.0 \text{ m/s}^2$

Viscosidades $\eta/\rho = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$ e $0.1 \text{ m}^2/\text{s}$

Tolerancia para a solução da equação de Poisson $= 10^{-8}$

Fator de controle de passo $\zeta = 0.5$

$\lambda_2 = 0.0, 0.002, 0.004, 0.006, 0.008, 0.01, 0.012$ e 0.014 s

Números de Reynolds $= 1.0$ e 0.1

Números de Deborah $= 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ e 1.4

Malha: $\delta x = \delta y = 0.125 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, 64 x 240 células

Os resultados mostrados nas figuras (6.2)-(6.3) estão representados através de linhas de corrente¹. Devido à propriedade de simetria da contração, apenas a metade superior do domínio é mostrada.

¹ O calculo das linhas de corrente pode ser consultado no anexo B.

6. Resultados Numéricos

Figura 6.2: Resultados numéricos: $Re = 1.0$ e $De = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ e 1.4

6. Resultados Numéricos

Figura 6.3: Resultados numéricos: $Re = 0.1$ e $De = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ e 1.4

6. Resultados Numéricos

Os resultados apresentados nas figuras (6.2) e (6.3) mostram que o tamanho do vórtice formado no canto da contração diminui com o aumento do número de Deborah e com a redução do número de Reynolds. Esse aumento foi previsto numericamente em Nigen e Walters [2002]. Essa redução do vórtice ocorre principalmente devido aos efeitos elásticos gerados pela diferença de tensões normais do modelo SOF.

Imediatamente após a contração podemos observar um efeito de instabilidade do escoamento SOF quando $De = 1.4$, tanto para $Re = 1.0$ quanto para $Re = 0.1$, ver figuras (6.2) e (6.3). Essa instabilidade pode ser observada nas oscilações formadas nas linhas de corrente no canal com diâmetro menor. Essas oscilações se propagam até o ejetor. A equação constitutiva para fluidos SOF modela bem escoamentos cujo tensor taxa de deformação e suas derivadas são pequenos, conforme Bird et al. [1987]. A partir de $De = 1.4$, a taxa de cisalhamento na quina juntamente com as tensões crescem rapidamente, infringindo a restrição para escoamentos SOF. Acreditamos que esse é o motivo ao qual a simulação numérica apresenta essas oscilações.

Os resultados nas figuras (6.4)-(6.9) são referentes aos campos de velocidades u e v e às tensões τ^{xx} , τ^{xy} e τ^{yy} , assim como para a primeira diferença de tensões normais $N1$ definida na equação (2.9), para $De = 0$ e $De = 1.2$ com $Re = 1.0$ em regime permanente.

Figura 6.4: Componente da velocidade u para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.5: Componente da velocidade v para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2 .

Figura 6.6: Tensão τ^{xx} para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2 .

Figura 6.7: Tensão τ^{xy} para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.8: Tensão τ^{yy} para $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2 .

Figura 6.9: Diferença de tensão normal $N1$: $Re = 1.0$ e $t = 2.0$ s com $De = 0$ e 1.2 .

6.2 Inchamento do Extrudado

O problema de inchamento do extrudado será resolvido utilizando um canal de comprimento 5.0 cm e largura 1.0 cm, para estabilizar a solução, de acordo com a figura (6.10).

Figura 6.10: Modelo para a simulação do inchamento do extrudado.

Para modelar o problema (6.10) utilizamos os seguintes dados:

Escala de comprimento $L = 0.01 \text{ m}$

Escala de velocidade $U = 1.0 \text{ m/s}$

Força gravitacional : $\underline{g}_x = \underline{g}_y = 0.0 \text{ m/s}^2$

Viscosidade $\eta/\rho = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$

Tolerância para a equação de Poisson $= 10^{-8}$

Fator de controle de passo $\zeta = 0.1$

Número de Reynolds $= 1.0$

Malha: $\delta x = \delta y = 0.625 \cdot 10^{-3} \text{ m}$, 48 x 624 células

No problema do inchamento do extrudado acima, o número de Frouden é 3.19 se considerarmos a força gravitacional, contudo para esse caso podemos desprezar o efeito da força gravitacional.

As figuras (6.11)-(6.16) mostram os resultados numéricos obtidos na simulação do problema de inchamento do extrudado para $Re = 1.0$ em regime permanente.

6. Resultados Numéricos

Figura 6.11: Componente u em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.12: Componente v em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.13: Componente τ_{xx} em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.14: Componente τ_{xy} em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.15: Componente τ_{yz} em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6 .

6. Resultados Numéricos

Figura 6.16: Diferença de tensão normal $N1$ em $t = 0.9$ s para $De = 0, 0.2, 0.4$ e 0.6 .

6. Resultados Numéricos

O inchamento do fluido ao deixar o canal no problema (6.10) será comparado com os trabalhos de Crochet et al. [1982] e com a Teoria de Tanner, conforme Tanner [1970]. Para realizarmos essa comparação é necessário utilizarmos o parâmetro adimensional S_R definido abaixo:

$$S_R = \frac{N_1}{2\tau^{xy}} = \frac{\tau^{xx} - \tau^{yy}}{2\tau^{xy}}.$$

Considerando o escoamento no canal completamente desenvolvido, o parâmetro S_R é dado por:

$$S_R = De \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Considerando a velocidade dada pela equação (5.2) na parede, $S_R = 4De$.

De acordo com a Teoria de Tanner, a taxa de inchamento $S_r = \frac{D_{max}}{L}$ (onde L é a largura do canal e D_{max} é a largura máxima que o jato atinge ao deixar o canal) é dada por:

$$S_r = \frac{D_{max}}{L} = 0.2 + \left(1 + \frac{(S_R)^2}{3}\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (6.1)$$

O gráfico (6.17) mostra os resultados obtidos para o problema de inchamento do extrudado comparado com a Teoria de Tanner e os dados de Crochet e Keunings:

Figura 6.17: Taxa de inchamento do problema de inchamento do extrudado

Conclusões e Recomendações

As simulações numéricas realizadas nesse trabalho indicaram a eficiência do método numérico desenvolvido ao simular escoamentos incompressíveis em regime laminar e isotérmico de fluidos de Segunda Ordem com ou sem superfícies livres. A validação no canal demonstrou que o método converge quadraticamente com o refinamento da malha de pontos. A simulação do escoamento através da contração 4 : 1 indicou a presença dos efeitos elásticos, previstos nos trabalhos de Nigen e Walters [2002], devido à redução do tamanho dos vórtices com o aumento do número de Deborah. O inchamento do jato, ao deixar o canal no problema do inchamento do extrudado, indicou a presença do efeito de tensão normal para problemas envolvendo superfícies livres. Esse efeito foi também relatado nos trabalhos de Mitsoulis [1999] e Liang e Özetkin [1999]. Além disso, os resultados concordaram com a teoria de Tanner e com o trabalho de Crochet e Keunings, conferir Crochet et al. [1982] e Tanner [1970]. O método numérico para escoamentos de fluidos de Segunda Ordem desenvolvido nesse trabalho consistiu em uma extensão do ambiente de simulação FreFlow-2D, ver Oliveira [1999].

Para o desenvolvimento de novos trabalhos, envolvendo escoamentos de fluidos de Segunda Ordem, pretendemos incluir um método numérico para implementar a derivada substancial do tensor taxa de deformação e também recomendamos o estudo de métodos de segunda ordem para aproximar as derivadas em pontos próximos aos contornos. Sugerimos a implementação de escoamentos axissimétricos e tridimensionais para fluidos de Segunda Ordem, além da implementação de um método para resolver escoamentos com troca de calor entre o fluido e o meio ambiente.

Referências Bibliográficas

- Acheson, D. J. (1990). *Elementary Fluid Dynamics*. Oxford University Press.
- Amsden, A. e Harlow, F. H. (1970). The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows. *Los Alamos Scientific Lab. Report LA-4370*.
- Armenio, V. (1997). The SMAC method: a numerical technique for calculating incompressible fluid flow. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 24:185–214.
- Batchelor, G. K. (1967). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge Univ. Press.
- Bird, R. B. Armstrong, R. C. e Hassager, O. (1987). *Dynamics of Polymeric Liquids*. John Wiley & Sons.
- Castelo, A. Tome, M. F. McKee, S. Cuminato, J. A. (2000). Freeflow: An Integrated Simulation System for Three-Dimensional Free Surface Flows, Computing and Visualization in Science. 2:199-210.
- Crochet, M. J. e Keunings, R. (1982). Finite element analysis of die-swell of a highly elastic fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 10:339–356.
- Crochet, M. J. e Walters, K. (1984). *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow*. Elsevier.
- Ferreira, V. G., Tomé, M. F., Mangiavacchi, N. Castelo, A., Cuminato, J. A., Fortuna, A. O., e McKee, S. (2002). High Order Upwinding and the Hydraulic Jump. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 39:549–583.
- Ferziger, J. H. e Peric, M. (1999). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer. Second Edition. Tokyo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Fletcher, C. A. J. (1991). *Computational Techniques for Fluid Dynamics: Vol. I e Vol. II*. Springer Verlag.
- Fortuna, A. O. (2000). *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. Edusp.
- Fox, R. W. e McDonald, A. T. (1995). *Introdução à Dinâmica dos Fluidos*. Livros Técnicos e Científicos.
- Gaskell, P. H. e Lau, A. K. C. (1988). Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 8:617-641.
- Gast, L. e Ellingson, W. (1999). Die swell measurements of second-order fluids: numerical experiments. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 29:1-18.
- Harlow, F. H. e Welsh, J. E. (1965). Numerical calculation of a time dependent viscous incompressible flow with free surface. *Phys. Fluids*, 8:2182-2189.
- Keunings, R. e Crochet, M. (1984). Numerical Simulation of the Flows of a Viscoelastic Fluid Through an Abrupt Contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 14:279-299.
- Liang, Y. e Özetkin, A. Neti, S. (1999). Dynamics of viscoelastic jets of polymeric liquid extrudate. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 81:105-132.
- Mitsoulis, E. (1999). Three-dimensional non-Newtonian computations of extrudate swell with the finite Element Method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 180:333-344.
- Nigen, S. e Walters, K. (2002). Viscoelastic contraction flows: comparison of axisymmetric and planar configurations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 102:343-359.
- Oliveira, J. (1999). Desenvolvimento de um Sistema de Simulação de Escoamentos de Fluidos com Superfícies Livres Bidimensionais. Dissertação de mestrado, ICMC/USP.
- Owens, R. G. e Phillips, T. N. (2002). *Computational Rheology*. Imperial College Press.
- Papanastasiou, T. C. (1994). *Applied fluid mechanics*. Prentice-Hall.
- Peyret, R. e Taylor, T. D. (1983). *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Phillips, T. N. e Williams, A. (1999). Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-Lagrangian finite volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 87:215–246.
- Pontes, J. (1999). Fenômenos de Transferência. Technical Report, COPPE/UFRJ.
- Purnode, B. e Crochet, M. (1987). Flows of polymer solutions through contractions. Part 1: flows of polyacrylamide solutions through planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 65:269–289.
- Ralston, A. (1965). A first course in numerical analysis. *McGraw-Hill*, Tokio.
- Ryan, M. E. e Dutta, A. (1981). A finite Difference simulation of Extrudate Swell. *Proc. 2nd. World Congr. Chem. Eng.*, VI:277–281.
- Tanner, R. I. (1970). A theory of die-swell. *Journal of Polymer Science*, 8:2067–2078.
- Tanner, R. I. e Walters, K. (1998). *Rheology: An Historical Perspective*. Elsevier.
- Tomé, M. F. (1993). GENSMAC: A Multiple Free Surface Fluid Flow Solver. Ph.d. thesis, University of Strthclyde.
- Tomé, M. F., Mangiavacchi, N. A., Cuminato, J. A., e Castelo, A. (2002). A Numerical Technique for Solving Unsteady Viscoelastic Free Surface Flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 106:61–106.
- Tomé, M. F., Duffy, B., e McKee, S. (1996). A Numerical Method for Solving Unsteady Non-Newtonian Free Surface Flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 62:9–34.
- Tomé, M. F. e McKee, S. (1994). GENSMAC: A Computational Marker-and-Cell Method for Free Surface Flows in General Domains. *Journal of Computational Physics*, 110(1):171–189.
- Varonos, A. e Bergeles, G. (1998). Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, 26:1–16.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Yoo, J. e Na, Y. (1991). A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the SIMPLER algorithm. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 30:89-106.
- Zhu, J. (1992). On the higher-order bounded discretization schemes for finite volume computations of incompressible flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 98:345-360.

Anexo A: Métodos de Runge-Kutta

Métodos de Runge-Kutta para Equações Diferenciais Ordinárias

Os Métodos de Runge-Kutta, conferir Ralston [1965], foram desenvolvidos para resolver numericamente as equações diferenciais ordinárias da forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial y}{\partial x} &= f(x, y) , \\ y(x_0) &= y_0 ,\end{aligned}$$

sob as hipóteses:

1. $f(x, y)$ é definida e contínua no intervalo $x_0 \leq x \leq b$, $-\infty < y < \infty$ com x_0 e b finitos.
2. Existe uma constante L tal que para qualquer $x \in [x_0, b]$ e quaisquer y e y^* tem-se:

$$|f(x, y) - f(x, y^*)| \leq L |y - y^*| .$$

Os Métodos de Runge-Kutta expressão a diferença entre os valores de y em x_{n+1} e x_n como:

$$y_{n+1} - y_n = \sum_{i=1}^m w_i k_i , \tag{1}$$

onde os w_i 's são constantes e

$$k_i = h_n f \left(x_n + \alpha_i h_n, \quad y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j \right) ,$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

com $h_n = x_{n+1} - x_n$ e $\alpha_1 = 0$.

Para Métodos de Runge-Kutta de até 4ª ordem, w_i , α_i e β_{ij} devem satisfazer as seguintes equações:

$$w_1 + w_2 + w_3 + w_4 = 1, \quad (2)$$

$$w_2\alpha_2 + w_3\alpha_3 + w_4\alpha_4 = \frac{1}{2}, \quad (3)$$

$$w_2\alpha_2^2 + w_3\alpha_3^2 + w_4\alpha_4^2 = \frac{1}{3}, \quad (4)$$

$$w_3\alpha_2\beta_{32} + w_4(\alpha_2\beta_{42} + \alpha_3\beta_{43}) = \frac{1}{6}, \quad (5)$$

$$w_2\alpha_2^3 + w_3\alpha_3^3 + w_4\alpha_4^3 = \frac{1}{4}, \quad (6)$$

$$w_3\alpha_2^2\beta_{32} + w_4(\alpha_2^2\beta_{42} + \alpha_3^2\beta_{43}) = \frac{1}{12}, \quad (7)$$

$$w_3\alpha_2\alpha_3\beta_{32} + w_4(\alpha_2\beta_{42} + \alpha_3\beta_{43})\alpha_4 = \frac{1}{8}, \quad (8)$$

$$w_4\alpha_2\beta_{32}\beta_{43} = \frac{1}{24}. \quad (9)$$

- Métodos de Segunda Ordem: Apresentaremos três métodos importantes de segunda ordem: aqueles em que $\alpha_2 = \frac{1}{2}$, $\frac{2}{3}$ e 1. Utilizando as equações (2)-(9) determinamos w_i e β_{ij} e substituindo-os na equação (1) temos:

$$y_{n+1} - y_n = h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}h_n f_n\right), \quad (10)$$

$$y_{n+1} - y_n = \frac{1}{4}h_n \left[f(x_n, y_n) + 3f\left(x_n + \frac{2}{3}h_n, y_n + \frac{2}{3}h_n f_n\right) \right], \quad (11)$$

$$y_{n+1} - y_n = \frac{1}{2}h_n [f(x_n, y_n) + f(x_n + h_n, y_n + h_n f_n)]. \quad (12)$$

- Dois métodos de Terceira Ordem:

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y_n &= \frac{2}{9}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{4}{9}k_3, \\ k_1 &= h_n f(x_n, y_n), \\ k_2 &= h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}k_1\right), \\ k_3 &= h_n f\left(x_n + \frac{3}{4}h_n, y_n + \frac{3}{4}k_2\right). \end{aligned} \quad (13)$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} - y_n &= \frac{1}{6} (k_1 + k_2 + k_3) , \\
 k_1 &= h_n f(x_n, y_n) , \\
 k_2 &= h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) , \\
 k_3 &= h_n f(x_n + h_n, y_n - k_1 + 2k_2) .
 \end{aligned} \tag{14}$$

- Dois métodos de Quarta Ordem:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} - y_n &= \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) , \\
 k_1 &= h_n f(x_n, y_n) , \\
 k_2 &= h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) , \\
 k_3 &= h_n f\left(x_n + \frac{1}{2}h_n, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) , \\
 k_4 &= h_n f(x_n + h_n, y_n + k_3) .
 \end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} - y_n &= 0.17476028k_1 - 0.55148053k_2 + 1.20553547k_3 + 0.17118478k_4 , \\
 k_1 &= h_n f(x_n, y_n) , \\
 k_2 &= h_n f(x_n + 0.4h_n, y_n + 0.4k_1) , \\
 k_3 &= h_n f(x_n + 0.45573726h_n, y_n + 0.29697760k_1 + 0.15875966k_2) , \\
 k_4 &= h_n f(x_n + h_n, y_n + 0.21810038k_1 - 3.05096470k_2 + 3.83286432k_3) .
 \end{aligned} \tag{16}$$

Anexo B: Linhas de Corrente

Cálculo das Linhas de Corrente

Para a visualização dos vórtices, no problema da contração planar, foi implementada a equação de função de corrente bidimensional. A relação entre a velocidade e a função de corrente² é definida por:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad e \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} . \quad (17)$$

A vorticidade é definida como:

$$\omega = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} . \quad (18)$$

Substituindo as definições (17) para u e v na definição da vorticidade (18), obtemos:

$$\omega = \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} . \quad (19)$$

A equação de corrente e vorticidade é discretizada no centro das células cheias. Assumindo que $\delta x = \delta y$ obtemos:

$$-\psi_{i-1,j} - \psi_{i,j-1} + 4\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j} - \psi_{i,j+1} = -\delta x^2 \omega_{i,j} . \quad (20)$$

² Utilizamos a notação de sinais de acordo com Fortuna [2000].

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

A aplicação da equação (20) sobre a malha resulta em um sistema linear da forma $\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b}$. Onde $\underline{\underline{A}}$ é uma matriz simétrica definida positiva, $\underline{x}$ é o vetor solução e $\underline{b}$ é o vetor que representa o lado direito da equação (20).

Figura 1: Esquema para o cálculo da função de corrente

Montamos a matriz $\underline{\underline{A}}$ aplicando a equação (20) em cada célula cheia da malha. Portanto, para a montagem da matriz é necessário conhecermos as condições de contorno para a função de corrente no injetor, no ejetor e na fronteira rígida, conferir figura (1). A função de corrente no injetor é calculada a partir da relação (17) da seguinte forma:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = u \Rightarrow \int_{\psi_0}^{\psi_1} \partial \psi = \int_{y_0}^{y_1} u \, dy = \psi_1 - \psi_0. \quad (21)$$

O perfil de velocidades no injetor é dado pela equação (5.1): $u(y) = u_0 - \frac{4u_0}{L^2} \left(y - \frac{L}{2}\right)^2$. Nesse caso podemos verificar que $\psi_{total} = \psi_1 - \psi_0 = \frac{2}{3}u_0L$, tomando $y_0 = 0$ e $y_1 = L$. Devido ao fato da contração planar ter simetria em relação ao eixo central, define-se:

$$\begin{aligned} \psi_0 &= -\frac{1}{2}\psi_{total} , \\ \psi_1 &= \frac{1}{2}\psi_{total} . \end{aligned}$$

Assim, as condições de contorno adequadas para a ψ são:

- Na vizinhança de células cheias com células injetoras ou ejetoras aplicamos a condição homogênea de Neumann:

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

$$\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0 .$$

- Na vizinhança de células cheias com células de fronteira rígida aplicamos a condição homogênea de Dirichlet. A função de corrente é calculada como a média entre o valor da função de corrente na célula cheia com o valor da função de corrente na célula de fronteira. Conforme a geometria apresentada na figura (1), dois casos devem ser analisados:

1. Célula cheia com face superior em contato com célula de fronteira:

$$\frac{\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j}}{2} = \psi_1 \quad \Rightarrow \quad \psi_{i,j+1} = -\psi_{i,j} + 2\psi_1 .$$

2. Célula cheia com face inferior em contato com célula de fronteira: :

$$\frac{\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j}}{2} = \psi_0 \quad \rightarrow \quad \psi_{i,j-1} = -\psi_{i,j} + 2\psi_0 .$$

Montado o sistema linear $\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b}$, aplicamos o método dos gradientes conjugados para resolvê-lo. O vetor $\underline{x}$ é inicializado como o vetor de função de corrente no tempo anterior.

Anexo C: Ambiente FreeFlow

O Ambiente de Simulação FreeFlow-2D

O FreeFlow-2D é um ambiente de modelagem, simulação e visualização para escoamentos incompressíveis isotérmicos e com superfícies livres bidimensional. Esse ambiente é composto de quatro módulos distintos:

- **Modflow-2d:** Esse módulo consiste de uma ferramenta gráfica que permite a construção de modelos bidimensionais para a simulação.
- **Simflow-2d:** Esse módulo permite a simulação do modelo gerado através do módulo Modflow-2d.
- **Visflow-2d:** A visualização dos resultados gerados pelo Simflow-2d pode ser efetuada através desse módulo. O Visflow-2d permite a visualização das componentes do campo de velocidades, as tensões totais e não-Newtonianas, da viscosidade e taxa de cisalhamento, bem como a primeira diferença de tensões normais.
- **Resimflow-2d:** Esse módulo é responsável pela reinicialização da simulação caso aconteça queda no fornecimento de energia elétrica. Esse módulo também permite alterações de alguns parâmetros da simulação, como por exemplo, o tempo final de simulação, o número máximo de ciclos, a tolerância do método dos gradientes conjugados, entre outros.

Maiores detalhes sobre esse ambiente de simulação podem ser encontrados no trabalho de Oliveira [1999].