Desenvolvimento de um método numérico
para resolver escoamentos viscoelásticos:
Modelo de Maxwell

Dayene Miralha de Carvalho

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 Matemática.

“VERSÃO REVISADA APÓS A DEFESA”

Data da Defesa: 03/05/2004

Visto do Orientador:

USP – São Carlos
Maio/2004

Dedico este trabalho a minha família
e ao meu querido Alexandre.

Agradecimentos

Agradeço primeiro à Deus por estar sempre presente em minha vida.

Aos meus familiares, em especial aos meus pais, Dirce e Antônio, e minhas irmãs, Fabi e Sheina, pelo aconchego, fortaleza e pelas muitas orações.

Ao meu querido Alexandre, pelo amor, paciência e por estar sempre ao meu lado, me incentivando e apoiando.

Ao meu orientador, Prof. Murilo Francisco Tomé, pelo apoio e amizade.

Aos professores do grupo de pesquisa, em especial ao Prof. Fernando M. Federson pelas valiosas explicações.

Aos amigos e professores da Unesp de Presidente Prudente, em especial aos professores Messias Mcnequette Jr. e José Roberto Nogueira pela amizade e pelo incentivo para dar continuidade aos meus estudos.

A todos meus amigos que sempre torceram por mim e que estão no meu coração, em especial a Roberta e a Regina.

Aos meus inesquecíveis amigos, Gil, João Paulo e Cássio, que foram a minha família em São Carlos e que estarão sempre presentes nas minhas mais valiosas lembranças.

Aos amigos de São Carlos e do LCAD, em especial à Andrea, Lú, Elvia, Veri, Ana Paula (Pepê), Analice, Marcela, Fernanda, Hévilla, Kemelli, Helton, Olivâine, Samuel e Fabrício, pela amizade e por terem feito esses anos mais alegres e descontraídos.

Ao Fred, técnico do LCAD, por toda paciência e ajuda em tantas horas de sufoco com os computadores.

À FAPESP, pelo apoio financeiro no desenvolvimento deste trabalho.

Finalmente, agradeço a todos que direta ou indiretamente foram importantes na execução deste trabalho.

Resumo

Neste trabalho é desenvolvido um método numérico para resolver escoamentos viscoelásticos com superfícies livres. As equações governantes para escoamentos governados pelo modelo de Maxwell juntamente com as condições de contorno para escoamentos bidimensionais usando coordenadas cartesianas são apresentadas. As equações são resolvidas utilizando o método de diferenças finitas numa malha deslocada. Também, é desenvolvida uma formulação para o cálculo do tensor não-Newtoniano em contornos rígidos. As condições de contorno na superfície livre são discutidas em detalhes. Resultados numéricos mostrando a convergência do método numérico desenvolvido nesse trabalho são apresentados. Finalmente, são apresentados resultados numéricos que mostram que a técnica numérica empregada nesse trabalho é capaz de simular escoamentos viscoelásticos governados pelo modelo de Maxwell. Em particular, os seguintes problemas são simulados: jato oscilante, inchamento do extrudado e uma gota de fluido viscoelástico incidindo sobre uma superfície rígida.

Abstract

In this work a numerical technique for solving viscoelastic flows governed by the upper-convected Maxwell constitutive equation is developed. The governing equations for a Maxwell fluid and boundary conditions for two-dimensional free surface flows using cartesian coordinates are presented. The equations are solved by using the finite difference method on a staggered grid. A new formulation is developed for the computation of the non-Newtonian tensor on rigid boundaries and on free surfaces the full free surface stress conditions are employed. Numerical results demonstrating the convergence of the numerical method are given. In addition, numerical results showing that the numerical method introduced is capable of simulating viscoelastic flows are presented. In particular, the following problems are simulated: jet buckling, extrudate swell and impacting drop.

Sumário

Introdução	1
1 Equações Governantes	3
1.1 Equações Básicas	3
1.2 Equações Governantes na Forma Bidimensional	4
1.3 Adimensionalização	6
1.4 Condições de Contorno	7
1.4.1 Cálculo do Tensor não-Newtoniano em Contornos Rígidos	7
1.4.2 Cálculo do Tensor não-Newtoniano em ‘Inflows’ e ‘Outflows’	11
1.4.3 Condições de Contorno na Superfície Livre	11
2 Método Numérico	13
2.1 Algoritmo Computacional	13
3 Aproximação por Diferenças Finitas	17
3.1 Classificação das Células	18
3.2 Aproximação da Equação de Quantidade de Movimento	19
3.3 Aproximação da Equação de Poisson para ψ	20
3.4 Aproximação da Equação da Velocidade Final	20
3.5 Aproximação da Equação da Pressão	20
3.6 Aproximação da Equação Constitutiva	21
3.7 Discretização dos Termos Convectivos	21
3.8 Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre	24
3.9 Cálculo das Componentes do tensor não-Newtoniano em Contornos Rígidos .	27

3.10 Cálculo das Componentes do Tensor não-Newtoniano em Contornos tipo ‘Inflows’ e ‘Outflows’	31
4 Validação do Método Numérico	33
5 Resultados Numéricos	37
5.1 Simulação Numérica do Jato Oscilante	37
5.2 Simulação Numérica do Inchamento do Extrudado	45
5.3 Simulação Numérica do Impacto de uma Gota sobre uma Superfície Rígida .	59
Conclusão	70
Referências Bibliográficas	71

Introdução

A área de dinâmica dos fluidos tem tido um grande avanço nos últimos tempos. Entre os diversos problemas surgidos, o problema de escoamentos com superfícies livres tem atraído a atenção de um grande número de pesquisadores. Esse tipo de escoamento tem diversas aplicações industriais importantes, como: injeção de plásticos, ligas metálicas e enchimento de containers na indústria alimentícia.

O método MAC (Marker-and-Cell), desenvolvido por Harlow e Welch [1], foi uma das primeiras técnicas desenvolvidas para resolver esses tipos de problemas. Outros métodos foram desenvolvidos baseados no método MAC. Entre esses métodos temos SMAC (Simplified-Marker-and-Cell) [2] e GENSMAC (Generalized-Simplified-Marker-and-Cell), introduzido por Tomé e McKee [3]. GENSMAC é uma técnica numérica para simular escoamentos newtonianos com superfícies livres num domínio bidimensional com geometria complexa e utiliza o método de diferenças finitas numa malha deslocada. Em 1996, esta técnica foi estendida para escoamentos de fluidos Newtonianos generalizados [4].

Recentemente, o grupo de pesquisa em Matemática Aplicada do ICMC- USP, no âmbito do projeto temático SNENS III, processo Fapesp nº 00/03385-0, vem desenvolvendo um ambiente de simulação de escoamentos incompressíveis tridimensionais denominado *Freeflow-3D* [5]. *Freeflow-3D* foi obtido pela extensão do método GENSMAC para problemas tridimensionais e é composto por 3 módulos: Modflow-3D - um ambiente para modelar escoamentos tridimensionais; Simflow-3D - nesse módulo implementa-se as equações governantes juntamente com as condições iniciais e de contorno; e Visflow-3D - um módulo responsável pela visualização dos resultados numéricos gerados pelo módulo Simflow-3D. Detalhes de *Freeflow-3D* podem ser obtidos em Castelo *et al.* [5].

Na prática, muitos problemas podem ser modelados em duas dimensões, por isso uma versão bidimensional de *Freeflow-3D*, denominada *Freeflow-2D*, foi desenvolvida [6]. Como

em *Freeflow-3D*, *Freeflow-2D* é composto por 3 módulos distintos: Modflow-2D, Simflow-2D e Visflow-2D.

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos com superfícies livres e implementá-lo no sistema *Freeflow-2D*. Mais precisamente, vamos considerar o modelo de Maxwell com derivadas convectivas avançadas (UCM model). A técnica numérica desenvolvida nesse trabalho é baseada na metodologia apresentada por Tomé *et al.* [7], para um fluido do tipo Oldroyd-B.

Esse trabalho está organizado em 5 capítulos:

- Capítulo 1: são apresentadas as equações governantes para escoamentos governados pelo modelo de Maxwell juntamente com as condições de contorno e condições na superfície livre;
- Capítulo 2: é apresentado um método numérico para resolver as equações governantes obtidas no Capítulo 1;
- Capítulo 3: são apresentadas as aproximações por diferenças finitas das equações governantes e condições de contorno;
- Capítulo 4: é apresentado uma validação do método numérico implementado através do escoamento em um canal totalmente desenvolvido;
- Capítulo 5: são apresentados os resultados numéricos obtidos;

Por fim, é apresentado a conclusão e a bibliografia utilizada.

Capítulo 1

Equações Governantes

As equações que modelam os problemas de mecânica dos fluidos são obtidas pela aplicação dos seguintes princípios:

- conservação de massa;
- conservação de quantidade de movimento;
- conservação de energia.

O fluido será considerado um contínuo de massa, no qual não existem "buracos". Nas escalas macroscópicas, a estrutura discreta da matéria e os movimentos das moléculas podem ser desprezados. As propriedades do escoamento podem então ser descritas em termos de grandezas macroscópicas como velocidade, pressão e densidade.

Em geral, as propriedades macroscópicas do fluido e do escoamento tridimensional são consideradas funções da coordenada temporal t e das coordenadas espaciais x , y e z . As componentes do vetor velocidade $\mathbf{u}$ serão denominadas, respectivamente, u , v e w .

1.1 Equações Básicas

As equações governantes para escoamentos incompressíveis para um fluido do tipo Maxwell são a equação constitutiva

$$\mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2\mu_0 \mathbf{D} \quad (1.1)$$

juntamente com a equação de quantidade de movimento (escrita na forma conservativa)

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g} \quad (1.2)$$

e a equação da continuidade (assumindo incompressibilidade)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.3)$$

onde p é a pressão, ρ é a massa específica, $\mathbf{T}$ é o tensor extra-tensão simétrico, $\mathbf{D}$ é o tensor taxa de deformação, λ é uma constante temporal e μ_0 é o coeficiente da viscosidade do solvente. Na equação (1.1), a derivada contravariante $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}$ é definida por

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{T}) - (\nabla \mathbf{u})^t \cdot \mathbf{T} - \mathbf{T} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \quad (1.4)$$

e

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^t] . \quad (1.5)$$

Para resolver as equações (1.1)–(1.3), introduzimos a mudança de variáveis (conhecida como método EVSS- Elastic-viscous stress-splitting [8])

$$\mathbf{T} = \mathbf{S} + 2\mu_0 \mathbf{D} \quad (1.6)$$

onde $\mathbf{S}$ representa a contribuição não-Newtoniana ao tensor extra-tensão. Substituindo (1.6) em (1.1) e (1.2) obtém-se as equações

$$\mathbf{S} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{S}} = -2\lambda\mu_0 \overset{\nabla}{\mathbf{D}} , \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu_0}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{g} . \quad (1.8)$$

1.2 Equações Governantes na Forma Bidimensional

Neste trabalho vamos considerar escoamentos bidimensionais cartesianos. Deste modo, tem-se

$$\mathbf{x} = (x, y)^t, \quad \mathbf{u} = (u, v)^t, \quad \mathbf{g} = (g_x, g_y)^t \quad \text{e} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{xx} & \mathbf{S}^{xy} \\ \mathbf{S}^{xy} & \mathbf{S}^{yy} \end{pmatrix} .$$

Da equação da continuidade (1.3), tem-se que

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 . \quad (1.9)$$

Desenvolvendo cada termo da equação de quantidade de movimento (1.8), vem

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \text{ e } (\nabla \mathbf{u})^t = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Para o divergente $\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})$, temos

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = \nabla \cdot \begin{pmatrix} u^2 & uv \\ uv & v^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} \\ \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

e os termos $\nabla^2 \mathbf{u}$ e $\nabla \cdot \mathbf{S}$, são dados por

$$\nabla \cdot \nabla \mathbf{u} = \nabla^2 \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \end{pmatrix} \text{ e } \nabla \cdot \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{\partial S^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S^{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial S^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial S^{yy}}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

respectivamente. Substituindo (1.10) (1.12) em (1.8), obtêm-se as equações

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial(u^2)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu_0}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial S^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S^{xy}}{\partial y} \right) + g_x, \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(v^2)}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu_0}{\rho} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial S^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial S^{yy}}{\partial y} \right) + g_y, \quad (1.14)$$

onde g_x e g_y são as componentes do campo gravitacional nas direções x e y respectivamente.

Da equação constitutiva (1.7), tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{S} + \lambda \left[\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{S}) - (\nabla \mathbf{u})^t \cdot \mathbf{S} - \mathbf{S} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \right] = \\ - 2\lambda\mu_0 \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{D}) - (\nabla \mathbf{u})^t \cdot \mathbf{D} - \mathbf{D} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \right] \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde por (1.5)

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D^{xx} & D^{xy} \\ D^{xy} & D^{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Logo, a equação (1.15) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} S^{xx} + \lambda \left(\frac{\partial S^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial(uS^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(vS^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x} S^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y} S^{xy} \right) = \\ - 2\lambda\mu_0 \left(\frac{\partial D^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x} D^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y} D^{xy} \right), \end{aligned} \quad (1.17)$$

$$\begin{aligned} S^{yy} + \lambda \left(\frac{\partial S^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial(uS^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(vS^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x} S^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y} S^{yy} \right) = \\ - 2\lambda\mu_0 \left(\frac{\partial D^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x} D^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y} D^{yy} \right), \end{aligned} \quad (1.18)$$

$$\begin{aligned}
S^{xy} &+ \lambda \left(\frac{\partial S^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial(uS^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(vS^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} S^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} S^{yy} \right) = \\
&- 2\lambda\mu_0 \left(\frac{\partial D^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} D^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} D^{yy} \right) . \quad (1.19)
\end{aligned}$$

1.3 Adimensionalização

Para adimensionalizar as equações de quantidade de movimento, continuidade e a equação constitutiva definimos as variáveis adimensionais

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= U\bar{\mathbf{u}}, & \mathbf{x} &= L\bar{\mathbf{x}}, & t &= \frac{L}{U}\bar{t}, \\
p &= \rho U^2 \bar{p}, & \mathbf{S} &= \rho U^2 \bar{\mathbf{S}}, & \mathbf{g} &= g\bar{\mathbf{g}},
\end{aligned}$$

onde L é um comprimento característico do escoamento e U uma velocidade característica.

Substituindo-se as variáveis adimensionais nas equações (1.9), (1.13), (1.14) e (1.17)–(1.19) obtém-se as equações na forma adimensional (as barras foram omitidas por simplicidade).

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 , \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\partial S^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S^{xy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_x , \quad (1.21)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\partial S^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial S^{yy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_y , \quad (1.22)$$

$$\begin{aligned}
S^{xx} &+ We \left(\frac{\partial S^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial(uS^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(vS^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x} S^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y} S^{xy} \right) = \\
&- 2\frac{We}{Re} \left(\frac{\partial D^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x} D^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y} D^{xy} \right) , \quad (1.23)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S^{yy} &+ We \left(\frac{\partial S^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial(uS^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(vS^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x} S^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y} S^{yy} \right) = \\
&- 2\frac{We}{Re} \left(\frac{\partial D^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x} D^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y} D^{yy} \right) , \quad (1.24)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S^{xy} &+ We \left(\frac{\partial S^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial(uS^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(vS^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} S^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} S^{yy} \right) = \\
&- \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial D^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} D^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} D^{yy} \right) , \quad (1.25)
\end{aligned}$$

onde $Re = \frac{\rho LU}{\mu_0}$ é o número de Reynolds, $Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}}$ é o número de Froude e $We = \frac{\lambda U}{L}$ é o número de Weissenberg.

1.4 Condições de Contorno

Neste trabalho vamos tratar de escoamentos transientes com superfície livre de um fluido viscoso numa atmosfera passiva, na qual pode-se tomar a pressão como sendo nula. Logo, precisamos impor condições de contorno para a velocidade $\mathbf{u}$ e conhecermos os valores de $\mathbf{S}$ no contorno. Em contornos rígidos, adotaremos a condição ‘no-slip’ (não-escorregamento),

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_c$$

onde $\mathbf{u}_c$ é a velocidade do contorno rígido. Geralmente o contorno rígido está estacionário, então tomamos $\mathbf{u}_c = 0$.

As condições de contorno em ‘inflows’ (entrada de fluido) e ‘outflows’ (saída de fluido) para a velocidade são dadas por

$$\text{‘Inflows’}: \mathbf{u}_n = U \quad \text{e} \quad \mathbf{u}_t = 0, \quad (1.26)$$

$$\text{‘Outflows’}: \frac{\partial \mathbf{u}_n}{\partial n} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \mathbf{u}_t}{\partial n} = 0, \quad (1.27)$$

onde n e t denotam direções normais e tangenciais ao ‘inflow’ e ‘outflow’, respectivamente.

1.4.1 Cálculo do Tensor não-Newtoniano em Contornos Rígidos

Os valores das componentes S^{xx} , S^{xy} e S^{yy} no contorno rígido serão obtidos por meio das equações (1.23)–(1.25), as quais assumimos válidas juntamente com a condição inicial

$$\mathbf{S} = 0.$$

Princiramente, introduzindo a mudança de variáveis, (introduzida por Tomé *et al.* [7]),

$$\mathbf{S} = e^{-\frac{1}{We}t} \tilde{\mathbf{S}} \quad (1.28)$$

nas equações (1.23)–(1.25), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{S}^{xx}}{\partial t} &= - \left(\frac{\partial(u\tilde{S}^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tilde{S}^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x}\tilde{S}^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y}\tilde{S}^{xy} \right) \\ &- \frac{2}{Re}e^{\frac{1}{W_e}t} \left[\frac{\partial D^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x}D^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y}D^{xy} \right], \quad (1.29) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{S}^{yy}}{\partial t} &= - \left(\frac{\partial(u\tilde{S}^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tilde{S}^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x}\tilde{S}^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y}\tilde{S}^{yy} \right) \\ &- \frac{2}{Re}e^{\frac{1}{W_e}t} \left[\frac{\partial D^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x}D^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y}D^{yy} \right], \quad (1.30) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{S}^{xy}}{\partial t} &= - \left(\frac{\partial(u\tilde{S}^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tilde{S}^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}\tilde{S}^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y}\tilde{S}^{yy} \right) \\ &- \frac{1}{Re}e^{\frac{1}{W_e}t} \left[\frac{\partial D^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}D^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y}D^{yy} \right]. \quad (1.31) \end{aligned}$$

Para resolvermos as equações (1.29)–(1.31), vamos considerar contornos rígidos estacionários horizontais e verticais, como segue.

Contornos rígidos paralelos ao eixo x

Nestes contornos temos que $u = v = 0 \implies \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = D^{xx} = D^{yy} = 0$, $D^{xy} = \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y}$ e pela equação da continuidade (1.9), $\frac{\partial v}{\partial y} = 0$. Neste caso, as equações (1.29)–(1.31) se reduzem a

$$\frac{\partial \tilde{S}^{xx}}{\partial t} = 2\frac{\partial u}{\partial y}\tilde{S}^{xy} + \frac{2}{Re}e^{\frac{1}{W_e}t} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \quad (1.32)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}^{yy}}{\partial t} = 0, \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial y}\tilde{S}^{yy} - \frac{1}{Re}e^{\frac{1}{W_e}t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right). \quad (1.34)$$

Agora, as equações (1.32)–(1.34) podem ser resolvidas para $\tilde{S}^{xx}$, $\tilde{S}^{xy}$ e $\tilde{S}^{yy}$. Da equação (1.33) obtemos (desde que $\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{S} = 0$ em $t = 0$)

$$\tilde{S}^{yy} = 0. \quad (1.35)$$

Assim, a equação (1.34) se reduz a

$$\frac{\partial \tilde{S}^{xy}}{\partial t} = -\frac{1}{Re} e^{\frac{1}{We}t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) . \quad (1.36)$$

Integrando (1.36) em $[t, t + \delta t]$, vem

$$\tilde{S}^{xy}(x, y, t + \delta t) - \tilde{S}^{xy}(x, y, t) = -\frac{1}{Re} \int_t^{t+\delta t} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \right) e^{\frac{1}{We}s} ds . \quad (1.37)$$

Resolvendo essa integral por partes, obtemos

$$\int_t^{t+\delta t} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \right) e^{\frac{1}{We}s} ds = \left[\frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}s} \right]_t^{t+\delta t} - \int_t^{t+\delta t} \frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \frac{1}{We} e^{\frac{1}{We}s} ds . \quad (1.38)$$

Aplicando o Teorema do Valor Médio para integrais na integral do lado direito, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\delta t} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \right) e^{\frac{1}{We}s} ds &= \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}(t+\delta t)} - \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}t} \\ &\quad - \frac{\partial u(x, y, t^*)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}t} [e^{\frac{1}{We}\delta t} - 1] \end{aligned}$$

onde $\frac{\partial u(x, y, t^*)}{\partial y}$ é avaliada em $t^* \in (t, t + \delta t)$ e é aproximada por

$$\frac{\partial u(x, y, t^*)}{\partial y} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \right] . \quad (1.39)$$

Assim, a integral em (1.37) se resulta em

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\delta t} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \right) e^{\frac{1}{We}s} ds &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}(t+\delta t)} - \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}t} - \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}(t+\delta t)} \right] \quad (1.40) \end{aligned}$$

Substituindo (1.40) em (1.37) obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{S}^{xy}(x, y, t + \delta t) &= \tilde{S}^{xy}(x, y, t) - \frac{1}{2Re} \left[\frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}(t+\delta t)} - \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}t} - \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} e^{\frac{1}{We}(t+\delta t)} \right] . \quad (1.41) \end{aligned}$$

Multiplicando (1.41) por $e^{-\frac{1}{We}(t+\delta t)}$ obtemos o valor de $S^{xy}(x, y, t + \delta t)$, ou seja,

$$\begin{aligned} S^{xy}(x, y, t + \delta t) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x, y, t) + \frac{1}{2Re} e^{-\frac{1}{We}\delta t} \left(\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} - \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2Re} \left(\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} - \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \right) . \quad (1.42) \end{aligned}$$

Para calcular S^{xx} integramos a equação (1.32) em $[t, t + \delta t]$, o que fornece

$$\begin{aligned}\tilde{S}^{xx}(x, y, t + \delta t) &= \tilde{S}^{xx}(x, y, t) + 2 \int_t^{t+\delta t} \frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \tilde{S}^{xy}(x, y, s) ds \\ &+ \frac{2}{Re} \int_t^{t+\delta t} e^{\frac{1}{We}s} \left(\frac{\partial u(x, y, s)}{\partial y} \right)^2 ds .\end{aligned}\quad (1.43)$$

Aproximando a primeira integral em (1.43) pela fórmula dos trapézios e aplicando o Teorema do Valor Médio para integrais na segunda integral, obtemos

$$\begin{aligned}\tilde{S}^{xx}(x, y, t + \delta t) &= \tilde{S}^{xx}(x, y, t) + \delta t \left[\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} \tilde{S}^{xy}(x, y, t) + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \tilde{S}^{xy}(x, y, t + \delta t) \right] \\ &+ 2 \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u(x, y, t^*)}{\partial y} \right)^2 e^{\frac{1}{We}t} [e^{\frac{1}{We}\delta t} - 1] ,\end{aligned}\quad (1.44)$$

onde $\frac{\partial u(x, y, t^*)}{\partial y}$ é aproximada por (1.39) e (1.44) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\tilde{S}^{xx}(x, y, t + \delta t) &= \tilde{S}^{xx}(x, y, t) + \delta t \left[\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} \tilde{S}^{xy}(x, y, t) + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \tilde{S}^{xy}(x, y, t + \delta t) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \right)^2 e^{\frac{1}{We}t} [e^{\frac{1}{We}\delta t} - 1] .\end{aligned}\quad (1.45)$$

Multiplicando (1.45) pelo fator $e^{-\frac{1}{We}(t+\delta t)}$ obtemos

$$\begin{aligned}S^{xx}(x, y, t + \delta t) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xx}(x, y, t) + \delta t \left[\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x, y, t) \right. \\ &+ \left. \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} S^{xy}(x, y, t + \delta t) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} + \frac{\partial u(x, y, t + \delta t)}{\partial y} \right)^2 [1 - e^{-\frac{1}{We}\delta t}] .\end{aligned}\quad (1.46)$$

Contornos rígidos paralelos ao eixo y

Nestes contornos temos que $u = v = 0 \implies \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} = D^{xx} = D^{yy} = 0$, $D^{xy} = \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}$ e pela equação da continuidade (1.9), $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$. Neste caso, as equações (1.29)–(1.31) se reduzem a

$$\frac{\partial \tilde{S}^{xx}}{\partial t} = 0 , \quad (1.47)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}^{yy}}{\partial t} = 2 \frac{\partial v}{\partial x} \tilde{S}^{xy} + \frac{2}{Re} e^{\frac{1}{We}t} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 , \quad (1.48)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}^{xy}}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial x} \tilde{S}^{xx} - \frac{1}{Re} e^{\frac{1}{We}t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) . \quad (1.49)$$

Procedendo de maneira análoga como no cálculo de S^{xx} , S^{xy} e S^{yy} em contornos rígidos paralelos ao eixo x , pode-se mostrar que os valores de S^{xx} , S^{xy} e S^{yy} em contornos rígidos paralelos ao eixo y são dados pelas equações:

$$S^{xx} = 0 , \quad (1.50)$$

$$\begin{aligned} S^{xy}(x, y, t + \delta t) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x, y, t) + \frac{1}{2Re} e^{-\frac{1}{We}\delta t} \left(\frac{\partial v(x, y, t)}{\partial x} - \frac{\partial v(x, y, t + \delta t)}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{2Re} \left(\frac{\partial v(x, y, t)}{\partial x} - \frac{\partial v(x, y, t + \delta t)}{\partial x} \right) , \end{aligned} \quad (1.51)$$

$$\begin{aligned} S^{yy}(x, y, t + \delta t) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{yy}(x, y, t) + \delta t \left[\frac{\partial v(x, y, t + \delta t)}{\partial x} S^{xy}(x, y, t + \delta t) \right. \\ &+ \left. \frac{\partial v(x, y, t)}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x, y, t) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial v(x, y, t)}{\partial x} + \frac{\partial v(x, y, t + \delta t)}{\partial x} \right)^2 [1 - e^{-\frac{1}{We}\delta t}] . \end{aligned} \quad (1.52)$$

1.4.2 Cálculo do Tensor não-Newtoniano em ‘Inflows’ e ‘Outflows’

Nestes contornos as componentes do tensor não-Newtoniano são especificados como segue:

- ‘Inflow’: Na entrada do fluido, adotaremos a estratégia empregada por Crochet [9] e Mompean & Deville [10], ou seja:

$$S^{xx} = 0, S^{xy} = 0 \text{ e } S^{yy} = 0 .$$

- ‘Outflow’: Na saída de fluido impomos as condições de Neumann homogêneas, ou seja,

$$\frac{\partial S^{xx}}{\partial n} = \frac{\partial S^{xy}}{\partial n} = \frac{\partial S^{yy}}{\partial n} = 0 .$$

1.4.3 Condições de Contorno na Superfície Livre

As componentes do tensor das tensões ($\underline{\underline{\sigma}}$) devem ser contínuas nas interfaces entre dois fluidos. Se desprezarmos as tensões superficiais, as condições de contorno na superfície livre são (ver Batchelor [11])

$$\mathbf{n} \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) = 0 , \quad (1.53)$$

$$\mathbf{m} \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) = 0 , \quad (1.54)$$

onde $\mathbf{n}$ e $\mathbf{m}$ são vetores unitários normal e tangencial à superfície livre, respectivamente e $\underline{\underline{\sigma}}$ é o tensor das tensões que na forma adimensional é dado por:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\mathbf{I} + \mathbf{S} + \frac{2}{Re}\mathbf{D} . \quad (1.55)$$

Tomando $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ e $\mathbf{m} = (n_y, -n_x)$ e utilizando (1.55), as equações (1.53) e (1.54) podem ser escritas como

$$p = S^{xx}n_x^2 + 2S^{xy}n_xn_y + S^{yy}n_y^2 + \frac{2}{Re} \left[\frac{\partial u}{\partial x}n_x^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) n_xn_y + \frac{\partial v}{\partial y}n_y^2 \right] \quad (1.56)$$

e

$$\left[S^{xx} - S^{yy} + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] n_xn_y + \left[S^{xy} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] (n_y^2 - n_x^2) = 0 , \quad (1.57)$$

respectivamente.

As equações (1.56) e (1.57) constituem as condições de contorno a serem satisfeitas na superfície livre do fluido.

Capítulo 2

Método Numérico

Neste capítulo apresentaremos um método numérico para resolver as equações governantes juntamente com as condições de contorno e iniciais. O método numérico desenvolvido é baseado no trabalho de Tomé *et al.* [7] para um fluido do tipo Oldroyd-B, que por sua vez foi baseado no método de projeção [12].

Vamos considerar as equações (1.20)–(1.25) escritas na forma vetorial, ou seja,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 , \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) - \nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} , \quad (2.2)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = & - [\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{S}) - (\nabla \mathbf{u})^t \cdot \mathbf{S} - \mathbf{S} \cdot (\nabla \mathbf{u})] \\ & - \frac{2}{Re} \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{D}) - (\nabla \mathbf{u})^t \cdot \mathbf{D} - \mathbf{D} \cdot (\nabla \mathbf{u}) \right] - \frac{1}{We} \mathbf{S} . \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.1 Algoritmo Computacional

Para resolvermos as equações (2.1)–(2.3) assumimos que no instante t_n , o vetor velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ e o tensor não-Newtoniano $\mathbf{S}(\mathbf{x}, t_n)$ são conhecidos. Além disso, são dadas as condições de contorno para o vetor velocidade $\mathbf{u}$, o tensor não-Newtoniano $\mathbf{S}$ e a pressão.

Assim, para calcular o vetor velocidade, o campo de pressão e o tensor não-Newtoniano no tempo $t_{n+1} = t_n + \delta t$ procedemos como segue:

Passo 1: Seja $\tilde{p}(\mathbf{x}, t_n)$ um campo de pressão que satisfaz a condição de contorno para a pressão na superfície livre. Esse campo de pressão é calculado pela equação (1.56).

Passo 2: Calcular o vetor velocidade intermediário $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ por:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) - \nabla \tilde{p} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} \quad (2.4)$$

com $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_n) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ e satisfazendo as condições de contorno para $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$.

Subtraindo (2.4) de (2.2), tem-se

$$\frac{\partial(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} = -\nabla(p - \tilde{p}) . \quad (2.5)$$

Aplicando o rotacional em (2.5), vem

$$\nabla \times \frac{\partial(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} = -\nabla \times [\nabla(p - \tilde{p})]$$

donde obtém-se,

$$\nabla \times \frac{\partial(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} = 0 . \quad (2.6)$$

Comutando os operadores vem

$$\frac{\partial}{\partial t} [\nabla \times (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})] = 0 , \quad (2.7)$$

ou seja,

$$\nabla \times (\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}) = f(x), \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \quad \text{para alguma } f(x) . \quad (2.8)$$

Mas, $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}$ em $t = t_n$, logo, $\nabla \times \tilde{\mathbf{u}} = \nabla \times \mathbf{u}$ em $t = t_n$, e portanto $f(x) = 0$. Assim, $\nabla \times \tilde{\mathbf{u}} = \nabla \times \mathbf{u}$ em $t \in [t_n, t_{n+1}]$. Isso mostra que $\tilde{\mathbf{u}}$ contém a vorticidade correta em $t = t_{n+1}$. Porém, $\tilde{\mathbf{u}}$ não satisfaz $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0$. Logo, seja $\psi(\mathbf{x}, t_{n+1})$ uma função escalar e definimos

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \psi . \quad (2.9)$$

Aplicando o divergente em ambos os lados da equação (2.9), tem-se

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1}) - \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t_{n+1}) . \quad (2.10)$$

Impondo conservação de massa para $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1})$ obtém-se a equação de Poisson para a função ψ

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1}). \quad (2.11)$$

Passo 3: Resolver a equação de Poisson (2.11).

As condições de contorno apropriadas para essa equação são (Tomé *et al.* [7])

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

em contornos rígidos e ‘inflows’, e

$$\psi = 0$$

na superfície livre e ‘outflows’.

Passo 4: Calcular o vetor velocidade final

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_{n+1}) - \nabla \psi(\mathbf{x}, t_{n+1}). \quad (2.12)$$

Passo 5: Calcular a pressão. Pode-se mostrar que a pressão é dada por (Tomé *et al.* [4])

$$p(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \tilde{p}(\mathbf{x}, t_n) + \frac{\psi(\mathbf{x}, t_{n+1})}{\delta t}. \quad (2.13)$$

Passo 6: Atualizar as componentes do tensor não-Newtoniano nos contornos rígidos, ‘inflows’ e ‘outflows’ por meio das equações derivadas nas seções (1.4.1) e (1.4.2), respectivamente.

Passo 7: Calcular as componentes do tensor não-Newtoniano por meio das equações

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{xx}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uS^{xx})}{\partial x} - \frac{\partial(vS^{xx})}{\partial y} + 2\frac{\partial u}{\partial x}S^{xx} + 2\frac{\partial u}{\partial y}S^{xy} \\ & - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial D^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xx})}{\partial y} - 2\frac{\partial u}{\partial x}D^{xx} - 2\frac{\partial u}{\partial y}D^{xy} \right) - \frac{1}{We}S^{xx}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{yy}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uS^{yy})}{\partial x} - \frac{\partial(vS^{yy})}{\partial y} + 2\frac{\partial v}{\partial x}S^{xy} + 2\frac{\partial v}{\partial y}S^{yy} \\ & - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial D^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{yy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{yy})}{\partial y} - 2\frac{\partial v}{\partial x}D^{xy} - 2\frac{\partial v}{\partial y}D^{yy} \right) - \frac{1}{We}S^{yy}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{xy}}{\partial t} &= -\frac{\partial(uS^{xy})}{\partial x} - \frac{\partial(vS^{xy})}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}S^{xx} + \frac{\partial u}{\partial y}S^{yy} \\ &- \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial D^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial(uD^{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(vD^{xy})}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}D^{xx} - \frac{\partial u}{\partial y}D^{yy} \right) - \frac{1}{We}S^{xy} . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Passo 8: Atualizar as posições das partículas marcadoras que representam o fluido. Essas partículas permitem a visualização do escoamento e a orientação da superfície livre e suas posições são atualizadas integrando as equações

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v , \quad (2.17)$$

obtendo assim a nova posição para cada partícula marcadora.

Capítulo 3

Aproximação por Diferenças Finitas

Este capítulo apresenta as discretizações necessárias para a resolução das equações do método numérico apresentado no capítulo 2. As equações (2.4), (2.11)–(2.17), serão resolvidas pelo método de diferenças finitas em uma malha deslocada (ver figura 3.1), com espaçamento δx e δy nas direções x e y , respectivamente. São apresentadas também as aproximações das condições de contorno na superfície livre e das componentes do tensor não-Newtoniano em contornos rígidos, ‘inflows’ e ‘outflows’.

As variáveis pressão, tensor não-Newtoniano e tensor taxa de deformação são aproximadas no centro da célula e as componentes da velocidade u e v são aproximadas nas faces $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i, j + \frac{1}{2})$, respectivamente.

Figura 3.1: Célula Computacional.

3.1 Classificação das Células

Como o fluido está continuamente em movimento, é necessário fazer uma classificação das células da malha para identificar se as mesmas contêm ou não fluido, se estão no contorno rígido ou são células da superfície livre. Para tanto, adota-se a seguinte classificação:

- **Células Vazias (E):** São células que não contém fluido;
- **Células Cheias (F):** São células cheias de fluido e não possuem nenhuma face em contato com células Vazias;
- **Células de Superfície (S):** São células que contém fluido e possuem pelo menos uma face em contato com células Vazias;
- **Células de Contorno (B):** São células que definem o contorno rígido. Nessas células a condição de contorno não escorregamento é imposta;
- **Células ‘Inflow’ (I):** São células que definem a entrada de fluido;
- **Células ‘Outflow’ (O):** São células que definem a saída de fluido.

Considerando um escoamento bidimensional, a figura 3.2 ilustra a estrutura de células na malha em um dado instante.

Figura 3.2: Tipos de célula no domínio computacional.

3.2 Aproximação da Equação de Quantidade de Movimento

Utilizando coordenadas cartesianas bidimensionais, a equação (2.4), é dada por

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = -\frac{\partial(u^2)}{\partial x} - \frac{\partial(uv)}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\partial S^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial S^{xy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_x, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = -\frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(v^2)}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\partial S^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial S^{yy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_y. \quad (3.2)$$

Os termos lineares das equações (3.1) e (3.2) são aproximadas por diferenças centrais e a derivada temporal pelo método de Euler Explícito. Os termos convectivos são aproximados pelo método ‘upwind’ de alta ordem VONOS [13]. Logo, a equação (2.4) é aproximada como segue.

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{u} + \delta t \mathbf{F}(\mathbf{u}),$$

onde $\mathbf{F}(\mathbf{u}) := (F_1, F_2)^t$, tem como componentes:

$$\begin{aligned} F_1 = & -\mathbf{conv}(u^2) - \mathbf{conv}(uv) - \frac{\tilde{p}_{i+1,j} - \tilde{p}_{i,j}}{\delta x} \\ & + \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{3}{2},j}}{\delta x^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\delta y^2} \right) \\ & + \left(\frac{S_{i+1,j}^{xx} - S_{i,j}^{xx}}{\delta x} + \frac{S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} - S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy}}{\delta y} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_x \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} F_2 = & -\mathbf{conv}(uv) - \mathbf{conv}(v^2) - \frac{\tilde{p}_{i,j+1} - \tilde{p}_{i,j}}{\delta y} \\ & + \frac{1}{Re} \left(\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} + \frac{v_{i,j+\frac{3}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y^2} \right) \\ & + \left(\frac{S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} - S_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy}}{\delta x} + \frac{S_{i,j+1}^{yy} - S_{i,j}^{yy}}{\delta y} \right) + \frac{1}{Fr^2} g_y \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} &= \frac{S_{i,j}^{xy} + S_{i+1,j}^{xy} + S_{i,j+1}^{xy} + S_{i+1,j+1}^{xy}}{4}, \\ S_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy} &= \frac{S_{i,j}^{xy} + S_{i+1,j}^{xy} + S_{i,j-1}^{xy} + S_{i+1,j-1}^{xy}}{4}, \\ S_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} &= \frac{S_{i,j}^{xy} + S_{i,j+1}^{xy} + S_{i-1,j+1}^{xy} + S_{i-1,j}^{xy}}{4}. \end{aligned}$$

Os termos que não possuem índices temporais são avaliados no tempo t_n .

3.3 Aproximação da Equação de Poisson para ψ

A equação de Poisson dada por (2.11) pode ser escrita como

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \quad (3.3)$$

e aproximando as derivadas por diferenças finitas de 2º ordem, temos:

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\delta y^2} = \tilde{D}_{i,j} \quad (3.4)$$

onde

$$\tilde{D}_{i,j} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}.$$

A equação (3.4) quando aplicada em todos os pontos do domínio gera um sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, de ordem n , onde n é o número de células (F) da malha, A é uma matriz simétrica, esparsa e definida positiva, $\mathbf{b}$ é o vetor divergente definido por $\tilde{D}_{i,j}$.

Para resolver este sistema é aplicado o método dos gradientes conjugados.

3.4 Aproximação da Equação da Velocidade Final

A equação (2.12) em coordenadas bidimensionais pode ser escrita como

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}, t_{n+1}) &= \tilde{u}(\mathbf{x}, t_{n+1}) + \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t_{n+1})}{\partial x}, \\ v(\mathbf{x}, t_{n+1}) &= \tilde{v}(\mathbf{x}, t_{n+1}) + \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t_{n+1})}{\partial y}. \end{aligned}$$

Aplicando no ponto $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i, j + \frac{1}{2})$, obtém-se

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \frac{\psi_{i-1,j}^{n+1} - \psi_{i,j}^{n+1}}{\delta x}, \\ v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \frac{\psi_{i,j+1}^{n+1} - \psi_{i,j}^{n+1}}{\delta y}, \end{aligned}$$

respectivamente.

3.5 Aproximação da Equação da Pressão

A equação (2.13) aplicada no ponto (i, j) é dada por

$$p_{i,j}^{n+1} = \tilde{p}_{i,j} + \frac{\psi_{i,j}^{n+1}}{\delta t}.$$

3.6 Aproximação da Equação Constitutiva

Os termos lineares das equações (2.14)–(2.16) são aproximados por diferenças de segunda ordem, a derivada temporal pelo método de Euler Explícito e os termos convectivos são aproximados pelo método ‘upwind’ de alta ordem VONOS [13], como segue.

$$\mathbf{S}^{n+1} = \mathbf{S} + \delta t \mathbf{H}(\mathbf{S}),$$

onde $\mathbf{H}(\mathbf{S}) := (H_1, H_2, H_3)^t$.

Para a componente H_1 temos:

$$\begin{aligned} H_1 = & - \left[\mathbf{conv}(uS^{xx})_{i,j} + \mathbf{conv}(vS^{xx})_{i,j} - 2 \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} S_{i,j}^{xx} - 2 \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} S_{i,j}^{xy} \right] \\ & - \frac{2}{Re} \left[-2 \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} \right)^2 - \left(\frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} \right)^2 - \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} \frac{v_{i-\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} \right] \\ & - \frac{1}{We} S_{i,j}^{xx}, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} u_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j+1} + u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1}}{4}, \\ u_{i,j-\frac{1}{2}} &= \frac{u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j-1} + u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{4}, \\ v_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}}}{4}, \\ v_{i-\frac{1}{2},j} &= \frac{v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j-\frac{1}{2}} + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{4}. \end{aligned}$$

De maneira análoga obtemos uma aproximação para as componentes H_2 e H_3 .

Os termos que não possuem índices temporais são avaliados no tempo t_n .

3.7 Discretização dos Termos Convectivos

A discretização dos termos convectivos das equações (1.21)–(1.25) merecem atenção especial por serem responsáveis pelos fenômenos complexos no escoamento e são os principais causadores de dificuldades numéricas nas simulações.

Para completar a discretização inicializada nas seções anteriores, nesta seção apresentamos as aproximações para os termos convectivos, que estão implementadas no código *FreeFlow-2D*.

Utilizaremos o método ‘upwind’ de alta ordem VONOS (Variable Order Non-Oscillatory Scheme) [13] que pode ser visto mais detalhadamente em [14].

Figura 3.3: Stencil usado para calcular ϕ_A e ϕ_B usando o método VONOS.

Considere a figura 3.3, onde ϕ_A e ϕ_B são os valores da variável genérica ϕ nos pontos P_A e P_B , respectivamente. Para calcular a derivada parcial da variável genérica ϕ no ponto P_0 , digamos $\frac{\partial \phi}{\partial s}$, onde s é um dos eixos coordenados, aproximamos por

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial s} \right|_{P_0} = \frac{\phi_B - \phi_A}{\delta s}. \quad (3.5)$$

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 as direções das velocidades convectivas (V_A, V_B) , como segue.

Esquema VONOS:

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

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

$$\begin{aligned} \text{se } V_A \geq 0, \quad \phi_A &= \left\{ \begin{array}{ll} \phi_{-1}, & \hat{\phi}_{-1} \notin [0, 1] \\ 10\phi_{-1} - 9\phi_{-2}, & \hat{\phi}_{-1} \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_0 + \frac{6}{8}\phi_{-1} - \frac{1}{8}\phi_{-2}, & \hat{\phi}_{-1} \in [3/74, 1/2) \\ \frac{3}{2}\phi_{-1} - \frac{1}{2}\phi_{-2}, & \hat{\phi}_{-1} \in [1/2, 2/3) \\ \phi_0, & \hat{\phi}_{-1} \in [2/3, 1] \end{array} \right\}. \\ \text{se } V_A < 0, \quad \phi_A &= \left\{ \begin{array}{ll} \phi_0, & \hat{\phi}_0 \notin [0, 1] \\ 10\phi_0 - 9\phi_1, & \hat{\phi}_0 \in [0, 3/74) \\ \frac{3}{8}\phi_{-1} + \frac{6}{8}\phi_0 - \frac{1}{8}\phi_1, & \hat{\phi}_0 \in [3/74, 1/2) \\ \frac{3}{2}\phi_0 - \frac{1}{2}\phi_1, & \hat{\phi}_0 \in [1/2, 2/3) \\ \phi_{-1}, & \hat{\phi}_0 \in [2/3, 1] \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

onde $\hat{\phi}_i$, ($i = -1, 0, 1$) 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,

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

Por exemplo, considere o termo convectivo $\frac{\partial(uu)}{\partial x}$ que é avaliado no ponto $(i + \frac{1}{2}, j)$. A derivada é aproximada por

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

onde $\hat{u}$ é a velocidade convectiva obtida pela média dos valores vizinhos:

$$\hat{u}_{i+1,j} = \frac{u_{i+\frac{3}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j}}{2}, \quad \hat{u}_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{2}.$$

As velocidades transportadas são calculadas através do esquema convectivo apresentado anteriormente (VONOS).

Por exemplo, os valores $u_{i+1,j}$ e $u_{i,j}$ são obtidos como segue:

Definindo

$$S_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & \hat{u}_{i,j} \geq 0 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{array} \right\}.$$

temos,

$$\hat{\phi}_{i+1,j} = (1 - S_{i+1,j}) \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}} \right) + S_{i+1,j} \left(\frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - u_{i+\frac{5}{2},j}}{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{5}{2},j}} \right)$$

$$\begin{aligned}
u_{i+1,j} &= (1 - S_{i+1,j}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \notin [0,1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j} - 9u_{i-\frac{1}{2},j}, & \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}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \in [3/74, 1/2) \\ \frac{3}{2}u_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{2}u_{i-\frac{1}{2},j}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i+\frac{3}{2},j}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \in [2/3, 1] \end{array} \right\} \\
&+ S_{i+1,j} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{3}{2},j}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \notin [0,1] \\ 10u_{i+\frac{3}{2},j} - 9u_{i+\frac{5}{2},j}, & \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}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \in [3/74, 1/2) \\ \frac{3}{2}u_{i+\frac{3}{2},j} - \frac{1}{2}u_{i+\frac{5}{2},j}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i+\frac{5}{2},j}, & \hat{\phi}_{i+1,j} \in [2/3, 1] \end{array} \right\} \\
\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}) \left\{ \begin{array}{ll} u_{i-\frac{1}{2},j}, & \hat{\phi}_{i,j} \notin [0,1] \\ 10u_{i-\frac{1}{2},j} - 9u_{i-\frac{3}{2},j}, & \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}, & \hat{\phi}_{i,j} \in [3/74, 1/2) \\ \frac{3}{2}u_{i-\frac{1}{2},j} - \frac{1}{2}u_{i-\frac{3}{2},j}, & \hat{\phi}_{i,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i+\frac{1}{2},j}, & \hat{\phi}_{i,j} \in [2/3, 1] \end{array} \right\} \\
&+ S_{i,j} \left\{ \begin{array}{ll} u_{i+\frac{1}{2},j}, & \hat{\phi}_{i,j} \notin [0,1] \\ 10u_{i+\frac{1}{2},j} - 9u_{i+\frac{3}{2},j}, & \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}, & \hat{\phi}_{i,j} \in [3/74, 1/2) \\ \frac{3}{2}u_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{1}{2}u_{i+\frac{3}{2},j}, & \hat{\phi}_{i,j} \in [1/2, 2/3) \\ u_{i-\frac{1}{2},j}, & \hat{\phi}_{i,j} \in [2/3, 1] \end{array} \right\}
\end{aligned}$$

Os outros termos convectivos podem ser aproximados de maneira análoga a esse procedimento.

3.8 Aproximação das Condições de Contorno na Superfície Livre

Considere as condições de contorno na superfície livre dada pelas equações (1.56) e (1.57). Para aplicar essas condições consideramos as idéias apresentadas por Tomé *et al.* [7].

Suponhamos que a malha computacional seja suficientemente fina de modo que a superfície livre intercepta uma célula em duas faces. Então, as condições (1.56) e (1.57) podem ser aplicadas para os seguintes casos:

(1) Células (S) com somente uma face em contato com uma célula (E)

Nessas células, assumimos que a superfície livre é vertical ou horizontal dependendo de qual face está em contato com a célula (E) (ver figura 3.4).

Figura 3.4: Configurações de células (S) com somente uma face em contato com célula (E).

Por exemplo, considerando a figura 3.4a), tomamos $\mathbf{n} = (1, 0)$. Neste caso, as equações (1.56) e (1.57) se reduzem a:

$$\tilde{p} = S^{xx} + \frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (3.6)$$

$$S^{xy} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = 0. \quad (3.7)$$

Com relação a figura 3.4a), observamos que para o cálculo das velocidades intermediárias usando as equações (3.1) e (3.2), os valores de $\tilde{p}_{i,j}$, $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$ são exigidos. Esses valores são obtidos como segue.

Primeiro, discretizando a equação da continuidade (1.9) no ponto (i, j) temos

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} = 0$$

de onde obtemos

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

Agora, discretizando (3.7) no ponto $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2})$, temos

$$S^{xy}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta y} + \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\delta x} \right) = 0$$

e isolando $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$, vem

$$v_{i+1,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} - Re\delta x S_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} - \frac{\delta x}{\delta y}(u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i+\frac{1}{2},j}) .$$

A pressão $\tilde{p}_{i,j}$ é obtida discretizando (3.6) em (i,j)

$$\tilde{p}_{i,j} = S_{i,j}^{xx} + \frac{2}{Re} \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta x} \right) . \quad (3.8)$$

As demais configurações de células (S) com apenas uma face em contato com uma célula (E) são tratadas de maneira análoga.

(2) Células (S) com duas faces adjacentes em contato com células (E)

Nestas células assumimos que o vetor normal faz um ângulo de 45° com as duas faces em contato com células (E), ou seja, tomamos $\mathbf{n} = (\pm \frac{\sqrt{2}}{2}, \pm \frac{\sqrt{2}}{2})$.

Figura 3.5: Configurações de células (S) com duas faces adjacentes em contato com células (E).

Considerando o caso como da figura 3.5a), tomamos $\mathbf{n} = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$ e as equações (1.56) e (1.57) se reduzem a

$$\tilde{p} = \frac{1}{2}(S^{xx} + S^{yy}) + S^{xy} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) , \quad (3.9)$$

$$S^{xx} - S^{yy} + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0 . \quad (3.10)$$

Neste caso, temos que calcular $\tilde{p}_{i,j}$, $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}$.

Aplicando a equação (3.10) e a equação da continuidade no centro da célula (S), temos

$$S_{i,j}^{xx} - S_{i,j}^{yy} + \frac{2}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} - \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} \right) = 0 , \quad (3.11)$$

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} = 0 . \quad (3.12)$$

As equações (3.11) e (3.12) fornecem um sistema 2×2 para $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}$. Resolvendo este sistema, obtemos

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2},j} &= u_{i-\frac{1}{2},j} - \frac{Re\delta x}{4}(S_{i,j}^{xx} - S_{i,j}^{yy}) , \\ v_{i,j+\frac{1}{2}} &= v_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{Re\delta y}{4}(S_{i,j}^{xx} - S_{i,j}^{yy}) . \end{aligned}$$

Para o cálculo de $\tilde{p}_{i,j}$, aplicamos a equação (3.9) no centro da célula (S)

$$\tilde{p}_{i,j} = \frac{1}{2}(S_{i,j}^{xx} + S_{i,j}^{yy}) + S_{i,j}^{xy} + \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\delta y} - \frac{v_{i,j} - v_{i-1,j}}{\delta x} \right) .$$

onde

$$\begin{aligned} u_{i,j} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{2}, & u_{i,j-1} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{2}, \\ v_{i,j} &= \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{2}, & v_{i,j-1} &= \frac{v_{i-1,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j-\frac{1}{2}}}{2}. \end{aligned}$$

As demais configurações de células (S) com somente duas faces adjacentes em contato com células (E) são obtidos de maneira análoga ao anterior.

(3) Células (S) com duas faces opostas ou três faces em contato com células (E):

Para essas células não conseguimos obter uma aproximação para o vetor normal. Nessas células, o valor da velocidade numa das faces é calculado de modo que a equação da continuidade seja satisfeita. O valor da pressão e os valores das componentes do tensor não-Newtoniano são considerados nulos.

3.9 Cálculo das Componentes do tensor não-Newtoniano em Contornos Rígidos

Quando as equações de quantidade de movimento e as equações para o cálculo do tensor não-Newtoniano são aplicadas em nós que são adjacentes ao contorno rígido, os valores de S^{xx} , S^{xy} e S^{yy} nas células (B), são exigidos.

Esses valores são obtidos por meio das equações derivadas da seção (1.4.1). Para isso, percorremos as células de contorno (B) e verificamos qual face está em contato com células (F) ou células (S), como segue.

(1) Células de contorno com apenas a face superior ou a face inferior em contato com célula (F) ou célula (S):

Figura 3.6: Configurações de células (B) com apenas a face superior ou a face inferior em contato com célula (F) ou célula (S).

Considerando a figura 3.6a), assumimos que o contorno rígido é paralelo ao eixo x e utilizando as equações da seção (1.4.1), os valores das componentes do tensor não-Newtoniano são dados por

$$S^{yy}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1}) = 0, \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} S^{xy}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n) + \frac{1}{2Re} \left[\frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} - \frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} - \frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} \right], \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} S^{xx}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xx}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n) + \delta t \left[\frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} S^{xy}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1}) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} + \frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} \right)^2 [1 - e^{-\frac{1}{We}\delta t}], \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde,

$$\frac{\partial u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} = \frac{u_{i,j-\frac{1}{2}}^n - u_{i,j-1}^n}{\frac{\delta y}{2}} = -\frac{2u_{i,j-1}^n}{\delta y}, \quad (\text{desde que } u_{i,j-\frac{1}{2}}^n = 0)$$

e

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

Os valores de $S_{i,j}^{xx}$, $S_{i,j}^{xy}$ e $S_{i,j}^{yy}$ são obtidos por interpolação linear utilizando-se os nós $(i, j - \frac{1}{2})$ e $(i, j - 1)$.

Para células de contorno com apenas a face inferior em contato com célula (F) ou célula (S) (ver figura 3.6b)), os valores das componentes do tensor não-Newtoniano são obtidos analogamente. De fato,

$$S^{yy}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1}) = 0 , \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} S^{xy}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n) + \frac{1}{2Re} \left[\frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} - \frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} - \frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} \right] , \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} S^{xx}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xx}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n) + \delta t \left[\frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} S^{xy}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1}) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} + \frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+1})}{\partial y} \right)^2 [1 - e^{-\frac{1}{We}\delta t}] , \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde,

$$\frac{\partial u(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, t_n)}{\partial y} = \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j+\frac{1}{2}}^n}{\frac{\delta y}{2}} = \frac{2u_{i,j+1}^n}{\delta y} , \quad (\text{desde que } u_{i,j+\frac{1}{2}}^n = 0)$$

e

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

Os valores de $S_{i,j}^{xx}$, $S_{i,j}^{xy}$ e $S_{i,j}^{yy}$ são obtidos por interpolação linear utilizando-se os nós $(i, j + \frac{1}{2})$ e $(i, j + 1)$.

(2) Células de contorno com apenas a face direita ou a face esquerda em contato com uma célula (F) ou uma célula (S):

Neste caso, assumimos que o contorno rígido é paralelo ao eixo y .

Figura 3.7: Configurações de células (B) com apenas a face direita ou a face esquerda em contato com célula (F) ou célula (S).

Considerando a figura 3.7a), o cálculo das componentes do tensor não-Newtoniano nessas células é efetuado através das equações obtidas na seção (1.4.1) e são dados por

$$S^{xx}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) = 0, \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} S^{xy}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n) + \frac{1}{2Re} \left[\frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} - \frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} - \frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} \right], \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} S^{yy}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{yy}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n) + \delta t \left[\frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} S^{xy}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} + \frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} \right)^2 [1 - e^{-\frac{1}{We}\delta t}], \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde,

$$\frac{\partial v(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} = \frac{v_{i+1,j}^n - v_{i+\frac{1}{2},j}^n}{\frac{\delta x}{2}} = \frac{2v_{i+1,j}^n}{\delta x}, \quad (\text{desde que } v_{i+\frac{1}{2},j}^n = 0)$$

e

$$v_{i+1,j}^n = \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i+1,j-\frac{1}{2}}^n}{2}.$$

Os valores de $S_{i,j}^{xx}$, $S_{i,j}^{xy}$ e $S_{i,j}^{yy}$ são obtidos por interpolação linear utilizando-se os nós $(i + \frac{1}{2}, j)$ e $(i + 1, j)$.

Para células de contorno com apenas a face esquerda em contato com célula (F) ou célula (S) (ver figura 3.7b)), os valores das componentes do tensor não-Newtoniano são

obtidos analogamente e são dadas por:

$$S^{xx}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) = 0, \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} S^{xy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n) + \frac{1}{2Re} \left[\frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} - \frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} - \frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} S^{yy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) &= e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{yy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n) + \delta t \left[\frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} S^{xy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} e^{-\frac{1}{We}\delta t} S^{xy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial x} + \frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_{n+1})}{\partial x} \right)^2 [1 - e^{-\frac{1}{We}\delta t}], \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde,

$$\frac{\partial v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, t_n)}{\partial y} = \frac{v_{i-\frac{1}{2},j}^n - v_{i-1,j}^n}{\frac{\delta x}{2}} = -\frac{2v_{i-1,j}^n}{\delta x}, \quad (\text{desde que } v_{i-\frac{1}{2},j}^n = 0)$$

e

$$v_{i-1,j}^n = \frac{v_{i-1,j+\frac{1}{2}}^n + v_{i-1,j-\frac{1}{2}}^n}{2}.$$

Os valores de $S_{i,j}^{xx}$, $S_{i,j}^{xy}$ e $S_{i,j}^{yy}$ são obtidos por interpolação linear utilizando-se os nós $(i - \frac{1}{2}, j)$ e $(i - 1, j)$.

3.10 Cálculo das Componentes do Tensor não-Newtoniano em Contornos tipo ‘Inflows’ e ‘Outflows’

Considerando as condições da seção (1.4.2), temos que em ‘inflows’ $\mathbf{S} = 0$ e em ‘outflows’ $\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial n} = 0$.

Célula ‘Inflow’ com a face direita em contato com célula (F) ou célula (S):

No caso da figura 3.8, os valores das componentes do tensor não-Newtoniano são dadas por

$$S_{i,j}^{xx} = -S_{i+1,j}^{xx}, \quad S_{i,j}^{xy} = -S_{i+1,j}^{xy} \quad \text{e} \quad S_{i,j}^{yy} = -S_{i+1,j}^{yy}.$$

Figura 3.8: Célula ‘inflow’ com a face direita em contato com uma célula (F) ou uma célula (S).

Para as outras configurações de célula ‘inflow’ em contato com célula (F) ou célula (S), as componentes do tensor não-Newtoniano são calculadas de maneira análoga.

Célula ‘Outflow’ com a face esquerda em contato com célula (F) ou célula (S):

Considerando a figura 3.9, os valores das componentes do tensor não-Newtoniano são dadas por

$$S_{i,j}^{xx} = S_{i-1,j}^{xx}, \quad S_{i,j}^{xy} = S_{i-1,j}^{xy} \quad \text{e} \quad S_{i,j}^{yy} = S_{i-1,j}^{yy} .$$

Figura 3.9: Célula ‘outflow’ com a face esquerda em contato com uma célula (F) ou uma célula (S).

Para as outras configurações de célula ‘outflow’ em contato com célula (F) ou célula (S), as componentes do tensor não-Newtoniano são calculadas de maneira análoga.

Capítulo 4

Validação do Método Numérico

As equações discretizadas no capítulo 3 foram implementadas no ambiente de simulação *Freeflow-2D* com a finalidade de simular escoamentos viscoelásticos governados pela equação constitutiva de Maxwell.

Para validar o método numérico desenvolvido nesse trabalho, utilizamos o escoamento em um canal bidimensional formado por duas placas paralelas a uma distância L uma da outra e de comprimento $10L$, como mostrado na figura 4.1.

Figura 4.1: Dimensões do canal.

Na entrada do canal impomos a solução analítica para a velocidade e componentes do tensor não-Newtoniano, que são

$$u(y) = -4\frac{U}{L^2} \left(y - \frac{L}{2}\right)^2 + U; \quad v = 0; \quad (4.1)$$

$$S^{xx} = 2\frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2; \quad S^{yy} = 0; \quad S^{xy} = 0, \quad (4.2)$$

onde U é a velocidade característica, ou seja, a velocidade de injeção do fluido.

Para simular o problema do escoamento totalmente desenvolvido em um canal utilizamos os dados de entrada:

- velocidade de injeção: $U = 1.0m/s$;
- diâmetro do injetor: $L = 1.0m$;
- viscosidade: $\mu_0 = 2.0Pa.s$;
- massa específica: $\rho = 1.0kg/m^3$;
- aceleração gravitacional: $g_x = g_y = 0$;
- $\lambda = 0.4s$.

As variáveis adimensionais foram U, L, ρ e μ , fornecendo $Re = \frac{\rho UL}{\mu_0} = 0.5$, $We = \frac{\lambda U}{L} = 0.4$.

A simulação foi realizada até o escoamento atingir o estado estacionário ($t = 50s$). Após o estado estacionário sabemos que a solução para a velocidade e componentes do tensor não-Newtoniano em todo o canal é a mesma solução imposta na entrada do fluido.

Para verificarmos este fato, utilizamos três malhas diferentes:

- Malha 1 (grossa): 50×5 células; $\delta x = \delta y = 0.2m$.
- Malha 2 (intermediária): 100×10 células; $\delta x = \delta y = 0.1m$.
- Malha 3 (fina): 200×20 células; $\delta x = \delta y = 0.05m$.

A figura 4.2 mostra os resultados obtidos numericamente comparados com a solução analítica para a componente de velocidade u e para a componente do tensor não-Newtoniano S^{xx} em $t = 50s$ no meio do canal ($x = 5m$).

Podemos notar na figura 4.2 que existe uma grande concordância entre a solução analítica e numérica e que ao refinarmos a malha a solução numérica se aproxima mais da solução analítica.

a)

b)

Figura 4.2: Solução analítica e solução numérica no meio do canal ($x = 5m$).

Para mostrarmos a convergência do método numérico, calculamos o erro relativo entre a solução analítica e a numérica. Usando a norma l_2 , temos:

$$E_u = \frac{\sum (u_{exato} - u_{numerico})^2}{\sum (u_{exato})^2}, \quad E_{Sxx} = \frac{\sum (S_{exato}^{xx} - S_{numerico}^{xx})^2}{\sum (S_{exato}^{xx})^2}.$$

Os erros obtidos utilizando as três malhas são mostrados na tabela à seguir.

	Malha1	Malha2	Malha3
E_{Sxx}	$1.1669 \cdot 10^{-2}$	$8.5200 \cdot 10^{-4}$	$5.5000 \cdot 10^{-5}$
E_u	$4.1400 \cdot 10^{-4}$	$3.4000 \cdot 10^{-5}$	$2.0000 \cdot 10^{-6}$

Tabela 4.1: Erro relativo obtido utilizando as três malhas.

Nota-se que o erro relativo reduz conforme a malha é refinada, o que mostra a convergência do método numérico.

Capítulo 5

Resultados Numéricos

Para demonstrarmos que a técnica numérica empregada neste trabalho simula escoamentos viscoelásticos com superfícies livres em movimento, são apresentados três tipos de escoamentos onde podemos notar o comportamento viscoelástico: jato oscilante (Flambagem), inchamento do extrudado e impacto de uma gota contra uma superfície rígida.

5.1 Simulação Numérica do Jato Oscilante

Para fluidos Newtonianos, esse problema tem sido estudado por vários pesquisadores como, Cruickshank [15], Cruickshank & Munson[16] e Tomé & McKee[17]. Em particular, Cruickshank & Munson publicaram resultados experimentais dos quais obtiveram condições específicas para que ocorra o fenômeno conhecido como ‘flambagem’ para um jato bidimensional. De fato, Cruickshank & Munson concluíram que para ocorrer a ‘flambagem’ em um jato Newtoniano bidimensional as seguintes restrições devem ser satisfeitas,

$$Re < 0.56 \quad \text{e} \quad H/L > 3\pi,$$

onde H é a altura do injetor até a superfície rígida e L o diâmetro do injetor, como mostrado na figura 5.1.

Para ilustrar o fenômeno ‘flambagem’ para um fluido do tipo Maxwell, apresentamos duas simulações que mostram os diferentes comportamentos ocasionados por um fluido Newtoniano e um viscoelástico.

Figura 5.1: Dimensões para a simulação do jato.

Primeiro, mostramos duas simulações onde as restrições de Cruickshank & Munson não são satisfeitas. Nesse caso, o jato Newtoniano não deverá apresentar o fenômeno da ‘flambagem’. Para o jato viscoelástico não podemos prever se irá ocorrer ou não a ‘flambagem’.

Os dados de entrada utilizados tanto para o fluido de Maxwell, quanto para o fluido Newtoniano, foram:

- domínio computacional: $0.05m \times 0.05m$;
- espaçamento da malha: $\delta x = \delta y = 0.001m$, 50×50 células;
- velocidade de injeção: $V = -0.25m/s$;
- diâmetro do injetor: $L = 0.006m$;
- viscosidade: $\mu_0 = 6.0Pa.s$;
- massa específica: $\rho = 1000kg/m^3$;
- aceleração gravitacional: $g_x = 0; g_y = -9.81m/s^2$;
- altura do injetor à superfície rígida: $H = 0.05m$;
- número de Reynolds: $Re = \frac{\rho V L}{\mu_0} = 0.25$;
- número de Weissenberg: $\lambda = 0.012s \Rightarrow We = \frac{\lambda V}{L} = 0.5$.

Logo temos $H/L = 8.33 < 3\pi$. Assim, pela teoria de Cruickshank & Munson, a segunda restrição para a ocorrência do efeito ‘flambagem’ não é satisfeita e o jato com o fluido Newtoniano não deverá apresentar este efeito. Porém, essa teoria não se aplica ao jato contendo o fluido tipo Maxwell. De fato, a figura 5.2 mostra os resultados das simulações com os dois tipos de fluidos.

Figura 5.2: Simulação numérica do jato oscilante quando não é satisfeita a condição de Cruickshank & Munson, $H/L > 3\pi$.

$t = 0.32s.$

$t = 0.40s.$

$t = 0.48s.$

$t = 0.56s.$

Figura 5.2: Continuação.

$$t = 0.64s.$$

Figura 5.2: Continuação.

Como podemos ver na figura 5.2, o jato Newtoniano não apresentou o efeito ‘flambagem’ conforme predito pela teoria de Cruickshank & Munson. Porém, o jato viscoelástico modelado pelo fluido de Maxwell apresentou este efeito. Acreditamos que a ocorrência da ‘flambagem’ no fluido de Maxwell é consequência de forças viscoelásticas atuando no fluido.

Para mostrar uma simulação onde o jato Newtoniano e o jato com o fluido de Maxwell apresentam a ‘flambagem’, ou seja, as restrições de Cruickshank & Munson são satisfeitas, utilizamos os seguintes dados de entrada:

- domínio computacional: $0.12m \times 0.12m$;
- espaçamento da malha: $\delta x = \delta y = 0.001m$, 120×120 células;
- velocidade de injeção: $V = -0.5m/s$;
- diâmetro do injetor: $L = 0.006m$;
- viscosidade: $\mu_0 = 12.0Pa.s$;
- viscosidade: $\rho = 1000kg/m^3$;
- aceleração gravitacional: $g_x = 0; g_y = -9.81m/s^2$;
- altura do injetor à superfície rígida: $H = 0.12m$;
- número de Reynolds: $Re = 0.25$;
- número de Weissenberg: $\lambda = 0.003s \Rightarrow We = 0.5$.

Logo temos $H/L = 20.0 > 3\pi$ e $Re = 0.25 < 0.56$. Assim, pela teoria de Cruickshank & Munson, as duas restrições para a ocorrência do efeito ‘flambagem’ são satisfeitas e o jato com o fluido Newtoniano apresentará este efeito. De fato, a figura 5.3 mostra os resultados das simulações com os dois tipos de fluidos.

Figura 5.3: Simulação numérica do jato oscilante quando é satisfeita a condição de Cruickshank & Munson.

$t = 0.26s.$

$t = 0.32s.$

$t = 0.52s.$

$t = 0.70s.$

Figura 5.3: Continuação.

$t = 0.76s.$

$t = 0.82s.$

$t = 0.96s.$

$t = 1.16s.$

Figura 5.3: Continuação.

Como podemos ver na figura 5.3, o jato Newtoniano apresentou o efeito ‘flambagem’ conforme predito pela teoria de Cruickshank & Munson, o mesmo acontecendo com o jato viscoelástico. Mas, no tempo em que o jato Newtoniano começa a produzir o efeito ‘flambagem’, o jato viscoelástico já apresenta muitas dobras.

Esses resultados mostram que a técnica numérica desenvolvida nesse trabalho pode de fato simular escoamentos viscoelásticos para um fluido do tipo Maxwell.

5.2 Simulação Numérica do Inchamento do Extrudado

Considere o escoamento de um fluido dentro de um canal que ao ser espelido para a atmosfera produz o efeito conhecido como ‘inchamento do extrudado’. Esse fenômeno, onde o diâmetro do extrudado aumenta em relação ao diâmetro do canal, vem sendo estudado por vários pesquisadores como por exemplo, Tanner (1970), Ryan & Dutta (1981), Crochet & Keunings (1982), Caswell & Viriyayuthakorn (1983) e Tomé *et al.* (2002).

O problema do inchamento do extrudado foi simulado utilizando um canal de largura L e comprimento $5L$, como é mostrado na figura 5.4.

Figura 5.4: Dimensões da simulação do inchamento do extrudado.

Para modelar este problema utilizamos os seguintes dados:

- domínio computacional: $1.0m \times 13.0m$;
- espaçamento da malha: $\delta x = \delta y = 0.05m$, 20×260 células;

- velocidade na entrada do canal: $U = 1.0m/s$;
- diâmetro do canal: $L = 1.0m$;
- viscosidade: $\mu_0 = 1.0Pa.s$;
- massa específica: $\rho = 1.0kg/m^3$;
- aceleração gravitacional: $g_x = 0; g_y = 0$;
- número de Reynolds: $Re = 1.0$;

Para demonstrar que o método numérico empregado pode tratar de fluidos viscoelásticos, foram realizadas quatro simulações com diferentes números de Weissenberg.

- Simulação 1: $\lambda = 0.2s, We = 0.2$;
- Simulação 2: $\lambda = 0.4s, We = 0.4$;
- Simulação 3: $\lambda = 0.6s, We = 0.6$;
- Simulação 4: $\lambda = 0.8s, We = 0.8$;

Os resultados dessas simulações são apresentadas na figura 5.5, onde para cada tempo são apresentados os resultados para cada número de Weissenberg.

A figura 5.5 mostra os jatos viscoelásticos escoando através de um canal até serem espelidos para a atmosfera em diferentes tempos. No tempo $t = 5.75s$ os jatos se mantêm dentro do canal não sendo possível notar qualquer diferença entre os quatro casos. No entanto, a partir do momento em que os jatos deixam o canal as diferenças são evidentes quando comparados o tamanho do inchamento do extrudado para os quatro casos.

A partir do tempo $t = 11.5s$, podemos observar o aumento do inchamento do extrudado, desde $We = 0.2$ até o maior número de Weissenberg apresentado, $We = 0.8$. A razão de inchamento, $S_r = \frac{D_{max}}{L}$, varia aproximadamente de 1.38 até 1.93. Esses resultados são coerentes com os resultados encontrados na literatura e serão explicados mais detalhadamente à seguir.

Figura 5.5: Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 5.75s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 11.5s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 15.0s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 18.0s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 23.0s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 26.5s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 38.0s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 45.0s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 50.0s$.

Figura 5.5: Continuação. Simulação do inchamento do extrudado no tempo $t = 78.5s$.

Os resultados das simulações mostrados na figura 5.5 foram utilizados para a obtenção das componentes T^{xx} , T^{xy} e T^{yy} e das componentes de velocidades u e v no estado estacionário para $We = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$.

Através de uma análise sobre a solução analítica das componentes do tensor extra-tensão $\mathbf{T}$ no estado estacionário e dentro do canal, as figuras 5.6–5.9 mostram que no meio do canal a componente T^{xx} se anula e então cresce continuamente até as paredes do canal; a componente T^{xy} também se anula no meio do canal e cresce com sinal trocado até as paredes do canal e a componente T^{yy} é nula. De fato, temos que

$$\begin{aligned} T^{xx} &= S^{xx} + \frac{2}{Re} D^{xx}, \\ T^{yy} &= S^{yy} + \frac{2}{Re} D^{yy}, \\ T^{xy} &= S^{xy} + \frac{2}{Re} D^{xy}. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Pela equação (4.2), temos que

$$\begin{aligned} T^{xx} &= S^{xx} = 2 \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \\ T^{yy} &= 0, \\ T^{xy} &= \frac{1}{Re} \frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Assim,

$$N_1 = T^{xx} - T^{yy} = T^{xx}. \quad (5.3)$$

Podemos discutir alguns fatos através das equações (5.2)–(5.3). a componente T^{xx} depende de $\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2$, que é zero no centro do canal, onde a velocidade é máxima, depois aumenta até atingir as paredes nos dois sentidos com mesmo valor e sinal, devido ao quadrado da expressão. A componente T^{xy} depende de $\frac{\partial u}{\partial y}$, que também é zero no centro do canal, onde a velocidade é máxima, depois aumenta até atingir as paredes, com mesmo valor, mas com sinais diferentes. A componente T^{yy} é zero em todo o canal, onde podemos concluir que $N_1 = T^{xx}$. O valor de N_1 é importante, pois é responsável pelo inchamento do extrudado: quanto maior o $\bar{N}_1$, maior o inchamento do extrudado.

Após o fluido deixar o canal, ocorre o fenômeno de relaxação, não tendo mais taxa de cisalhamento e obtendo as variáveis em questão nulas.

Figura 5.6: Visualização das componentes T_{xx} , T_{xy} e T_{yy} e das componentes de velocidade u e v , respectivamente. $We = 0.2$ e tempo $t = 78.5s$ (estado estacionário).

Figura 5.7: Visualização das componentes T^{xx} , T^{xy} e T^{yy} e das componentes de velocidade u e v , respectivamente. $We = 0.4$ e tempo $t = 78.5s$ (estado estacionário).

Figura 5.8: Visualização das componentes T^{xx} , T^{xy} e T^{yy} e das componentes de velocidade u e v , respectivamente. $We = 0.6$ e tempo $t = 78.5s$ (estado estacionário).

Figura 5.9: Visualização das componentes T^{xx} , T^{xy} e T^{yy} e das componentes de velocidade u e v , respectivamente. $We = 0.8$ e tempo $t = 78.5s$ (estado estacionário).

Para validar o problema do inchamento do extrudado, os resultados encontrados nesse trabalho para o modelo de Maxwell serão comparados com a teoria de Tanner (1970) e com os resultados obtidos por Crochet & Keunings (1980), Caswell & Viriyayuthakorn (1983) e Bush *et al.* (1984).

De acordo com a teoria de Tanner , a razão de inchamento do extrudado S_r é dada pela expressão

$$S_r = \frac{D_{max}}{L} = 0.2 + \left(1 + \frac{(S_R)^2}{3}\right)^{\frac{1}{4}},$$

onde D_{max} é o diâmetro do inchamento como mostrado na figura 5.4 e S_R é um parâmetro adimensional definido por:

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

Sabemos que,

$$\mathbf{T} = \mathbf{S} + \frac{2}{Re}\mathbf{D},$$

logo,

$$\begin{aligned} T^{xx} &= S^{xx} + \frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial x}, \\ T^{yy} &= S^{yy} + \frac{2}{Re} \frac{\partial v}{\partial y}, \\ T^{xy} &= S^{xy} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right). \end{aligned}$$

Portanto, considerando o escoamento no estado estacionário, o parâmetro S_R é dado por:

$$S_R = \frac{S^{xx}}{\frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial y}} = \frac{2 \frac{We}{Re} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2}{\frac{2}{Re} \frac{\partial u}{\partial y}} = We \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|,$$

onde $\frac{\partial u}{\partial y}$ é avaliado na parede do canal.

Através da equação (4.1) temos que $\left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| = 4$, na parede do canal. Assim, $S_R = 4We$.

Para comparar os resultados numéricos desse trabalho com os apresentados na literatura, o problema do inchamento do extrudado foi simulado para vários números de Weissenberg. Os seguintes dados de entrada foram utilizados:

- domínio computacional: $1.0m \times 15.0m$;
- espaçamento da malha: $\delta x = \delta y = 0.05m$, 20×300 células;

- velocidade de injeção: $U = 1.0m/s$;
- diâmetro do injetor: $L = 1.0m$;
- viscosidade: $\mu_0 = 10.0Pa.s$;
- massa específica: $\rho = 1.0kg/m^3$;
- aceleração gravitacional: $g_x = 0; g_y = 0$;
- número de Reynolds: $Re = 0.1$;
- A constante λ obteve os valores $\lambda = 0.125s, 0.165s, 0.25s, 0.335s, 0.375s, 0.5s$ produzindo números de Weissenberg: $We = 0.125, 0.165, 0.25, 0.335, 0.375, 0.5$.

Os resultados dessas simulações foram comparados com a teoria de Tanner (1970), Crochet & Keunings (1980), Caswell & Viriyayuthakorn (1983) e Bush *et al.* (1984) (ver [18]), onde são utilizados números de Reynolds baixos. A tabela 5.1 apresenta o inchamento do extrudado obtido por *Freeflow-2D* e os outros autores para vários números Weissenberg.

Pode-se observar na tabela 5.1 que a razão de inchamento do extrudado para os vários números de Weissenberg obtidos nesse trabalho é maior que os apresentados pelos autores mencionados. Acreditamos que essa diferença se deve ao fato que nesse trabalho as equações governantes foram resolvidas sem simplificações enquanto que os autores citados na tabela 5.1 utilizaram $Re = 0$, escoamento permanente, condição na superfície livre $p = 0$, etc.

Investigadores	Número de Weissenberg					
	0.125	0.165	0.25	0.335	0.375	0.5
Tanner	1.134	1.137	1.146	1.157	1.163	1.186
Caswell & Viriyayuthakorn	1.125	-	1.161	-	1.225	1.325
Bush <i>et al.</i>	1.142	-	1.171	-	1.198	1.221
Crochet & Keunings	-	1.129	1.147	1.172	-	1.217
<i>Freeflow2D</i>	1.379	1.392	1.446	1.536	1.563	-

Tabela 5.1: Razão de inchamento para $0.125 \leq We \leq 0.5$.

5.3 Simulação Numérica do Impacto de uma Gota sobre uma Superfície Rígida

O problema do impacto de uma gota contendo fluido viscoelástico sobre uma superfície rígida pode apresentar o efeito viscoelástico. Para mostrar esse efeito, apresentaremos duas simulações utilizando uma gota viscoelástica e uma gota newtoniana. Os resultados obtidos por meio da gota viscoelástica serão comparados com os resultados obtidos com a simulação da gota Newtoniana.

Figura 5.10: Dimensões da simulação do impacto da gota sobre uma superfície rígida.

Considere uma gota de fluido modelado pelo modelo de Maxwell. Os seguintes dados de entrada foram utilizados:

- domínio computacional: $0.05m \times 0.05m$;
- espaçamento da malha: $\delta x = \delta y = 0.0005m$, 100×100 células;
- altura da esfera a superfície rígida: $H = 0.03m$;
- velocidade de injeção: $V = -1.0m/s$;
- diâmetro da gota: $L = 0.02m$;
- viscosidade: $\mu_0 = 0.004Pa.s$;
- massa específica: $\rho = 1.0kg/m^3$;

- aceleração gravitacional: $g_x = 0; g_y = -9.18m/s^2$;
- número de Reynolds: $Re = \frac{\rho V L}{\mu_0} = 5.0$;
- número de Weissenberg: $\lambda = 0.02s \Rightarrow We = \frac{\lambda V}{L} = 1.0$;

Os perfis das componentes de velocidade u e v e a deformação das gotas viscoelástica e Newtoniana ($\lambda = 0$) são apresentados nas figuras 5.11 e 5.12. Podemos observar nessas figuras que a diferença no comportamento da gota do fluido de Maxwell e da gota do fluido Newtoniano é caracterizada pela mudança na deformação das gotas no decorrer do escoamento.

A gota do fluido Newtoniano exibe uma redução contínua de velocidade até alcançar sua forma final deformada, enquanto que a gota do fluido de Maxwell também mostra uma contínua redução das velocidades, mas entre os tempos 0.037s e 0.074s, as componentes da velocidade da gota mudam de sinal, indicando um movimento contrário ao inicial, exibindo um comportamento típico do material elástico. A deformação máxima diminui a cada mudança de sinal e a gota se aproxima da sua forma deformada final com o decorrer do tempo.

As taxas de deformação e as velocidades diminuem com o passar do tempo até o fluido de Maxwell parar. Se houver ainda alguma tensão no fluido, o fluido passa a relaxar essa tensão, aumentando a taxa de deformação e as velocidades, iniciando um novo ciclo de deformação na direção oposta. A cada ciclo, a amplitude da deformação alcançada diminui em função da energia dissipada por ciclo. Acreditamos que esta é a justificativa para o aspecto elástico da deformação da gota do fluido de Maxwell.

A figura 5.13 mostra o perfil das componentes de velocidade u e v , das componentes do tensor $\mathbf{T}$ e a primeira diferença de tensões normais N_1 para o fluido de Maxwell em três tempos diferentes.

Figura 5.11: Componente de velocidade u .

Figura 5.11: Continuação. Componente de velocidade u .

Figura 5.11: Continuação. Componente de velocidade u .

Figura 5.12: Componente de velocidade v .

Figura 5.12: Continuação. Componente de velocidade v .

Figura 5.12: Continuação. Componente de velocidade v .

Figura 5.13: Visualização das componentes de velocidade u e v em três diferentes tempos.

Figura 5.14: Visualização das componentes T^{xx} e T^{xy} em três diferentes tempos.

Figura 5.15: Visualização das componentes T^{yy} e N_1 em três diferentes tempos.

Conclusão

O objetivo do trabalho apresentado nessa dissertação de mestrado consistiu em estender o ambiente de simulação *Freeflow-2D* para simular escoamentos viscoelásticos com superfície livre para um fluido governado pelo modelo de Maxwell. Para isto foi realizado um estudo para resolver as equações governantes para o fluido Maxwell e desenvolvido um método numérico para resolvê-las e sua implementação computacional. A validação do método numérico apresentado foi realizada pela simulação do escoamento totalmente desenvolvido em um canal e os resultados obtidos foram comparados com a solução analítica para a velocidade e para o tensor não-Newtoniano. Os resultados numéricos apresentaram boa concordância com a solução analítica.

Para demonstrar que o método numérico desenvolvido simula escoamentos viscoelásticos governados pelo modelo de Maxwell foram simulados três problemas: jato oscilante, inchamento do extrudado e o impacto de uma gota sobre uma superfície rígida. Para comparar o comportamento do fluido Newtoniano com o do fluido viscoelástico foram feitas simulações para o problema do jato oscilante e da gota incidindo sobre uma superfície rígida. Os resultados obtidos mostram que estes dois tipos de fluidos apresentam escoamentos bem diferentes. Os resultados obtidos para o problema do inchamento do extrudado foram comparados com os resultados teóricos de Tanner (1970), e os resultados numéricos de Crochet & Keunings (1980), Caswell & Viriyayuthakorn (1983) e Bush *et al.* (1984) por meio de uma tabela (ver tabela 5.1) mostrando o aumento da razão de inchamento do extrudado S_r . Os resultados obtidos pelo código *Freeflow-2D* foram maiores que os obtidos pelos pesquisadores supra citados. Acreditamos que essa diferença se deve ao fato que nesse trabalho foram utilizadas as equações completas juntamente com as condições de contorno enquanto que os outros pesquisadores fizeram várias simplificações.

Referências Bibliográficas

- [1] F.H. Harlow and J.E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface, *Phys. Fluids*, **8**:2182-2189 (1965).
- [2] A.A. Amsden and F.H. Harlow, The SMAC method: a numerical technique for calculating incompressible fluid flow, *Los Alamos Scientific Laboratory, Report LA*, 4370 (1970).
- [3] M.F. Tomé and S.McKee, GENSMAC: a computational marker-and-cell method for free surface flows in general domains, *J. Comput. Phys.*, **110**:171-186; (1994).
- [4] M.F. Tomé, B.R. Duffy, S. McKee, A numerical technique for solving unsteady Non-Newtonian free surface flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, **62**:9-34; (1996).
- [5] A. Castelo, M.F. Tomé, C.N.L. César, S.McKee and J.A. Cuminato, Freeflow: An integrated simulation system for three-dimensional free surface flows, *Computing and Visualization in Science*, **2**:199-210; (2000).
- [6] J. Oliveira, Desenvolvimento de um Sistema de Simulação de Escoamentos de Fluidos com Superfícies Livres Bidimensionais, São Carlos, ICMC-USP. *Dissertação de Mestrado*; (1999).
- [7] M.F. Tomé, N. Mangiavacchi, A. Castelo, J.A. Cuminato and S.McKee, A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, **106**:61-106; (2002).
- [8] G.P. Sasmal, A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, **56**:15-47; (1995).

- [9] M. Crochet, A.R. Davis, K. Walters, Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow, *Elsevier, New York, (1984)*.
- [10] G. Mompean and M. Deville, Unsteady finite volume of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, **72**:253-279; (1997).
- [11] G.K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, (1967).
- [12] A. Chorin, Numerical solution of the navier-stokes, *Mathematics of Computation*, **2**:745-762; (1968).
- [13] A. Varonos and G. Bergeles, Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization, *Intern. J. Numer. Meth. Fluids*, **26**:1-16, (1998).
- [14] V.G. Ferreira, M.F. Tomé, N. Mangiavacchi, A. Castelo, J.A. Cuminato, A.O. Fortuna and S.McKee, High-order upwinding and the hydraulic jump, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **39**:549-583; (2002).
- [15] J.O. Cruickshank, Low-Reynolds-number instabilities in stagnating jet flows, *J. Fluid. Mech.*, **193**:111-127 (1988).
- [16] J.O. Cruickshank and B.R. Munson, Viscous-fluid buckling of plane and axisymmetric jets, *J. Fluid. Mech.*, **113** (1981), 221-239.
- [17] M.F. Tomé and S. McKee, Numerical simulation of viscous flow: buckling of planar jets, *Intern. J. Numer. Meth. Fluids*, **29**(1999), 705-718.
- [18] V. Ngamaramvaranggul and M.F. Webster, Viscoelastic simulations of stick-slip and die-swell flows, *Intern. J. Numer. Meth. Fluids*, **36**(2001), 539-595.