



IMPLEMENTAÇÃO DE UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS DE ORDEM
SUPERIOR COM TRATAMENTO MULTIBLOCO APLICADO À SIMULAÇÃO DE
ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Eduardo Moreira de Lemos

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Junior

Argimiro Resende Secchi

Rio de Janeiro

Junho de 2011

IMPLEMENTAÇÃO DE UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS DE ORDEM
SUPERIOR COM TRATAMENTO MULTIBLOCO APLICADO À SIMULAÇÃO DE
ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Eduardo Moreira de Lemos

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Junior, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Príamo Albuquerque Melo Junior, D.Sc.

Prof. Nisio de Carvalho Lobo Brum, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof.^a Mônica Feijó Naccache, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2011

Lemos, Eduardo Moreira de

Implementação de um Método de Volumes Finitos de Ordem Superior com Tratamento Multibloco Aplicado à Simulação de Escoamento de Fluidos Viscoelásticos/
Eduardo Moreira de Lemos. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

XXII, 267 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Junior

Argimiro Resende Secchi

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2011.

Referencias Bibliográficas: p. 259-267.

1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Método de Volumes Finitos. 3. Métodos de Alta Ordem. 4. Tratamento Multibloco. 5. Fluidos Viscoelásticos. I. Biscaia Junior, Evaristo Chalbaud *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

"Um homem precisa viajar. Por sua conta, não por meio de histórias, imagens, livros ou TV. Precisa viajar por si, com seus olhos e pés, para entender o que é seu. Para um dia plantar as suas árvores e dar-lhes valor. Conhecer o frio para desfrutar o calor. E o oposto. Sentir a distância e o desabrigo para estar bem sob o próprio teto. Um homem precisa viajar para lugares que não conhece para quebrar essa arrogância que nos faz ver o mundo como o imaginamos, e não simplesmente como é ou pode ser; que nos faz professores e doutores do que não vimos, quando deveríamos ser alunos, e simplesmente ir ver."

Amyr Klink

“Dedico este trabalho a todos que me ajudaram e me apoiaram nos momentos mais difíceis. Sem vocês, concluir este trabalho jamais seria possível.”

“Tudo tem o seu tempo determinado e há tempo para todo propósito debaixo do céu: há tempo de nascer e tempo de morrer; tempo de chorar e tempo de rir; tempo de abraçar e tempo de afastar-se; tempo de amar e tempo de aborrecer; tempo de guerra e tempo de paz. Que proveito tem o trabalhador naquilo em que trabalha? Tenho visto o trabalho que Deus deu aos filhos dos homens, para com ele os exercitar. Tudo fez formoso em seu tempo; também pôs o mundo no coração do homem, sem que este possa descobrir a obra que Deus fez desde o princípio até ao fim.”

Eclesiastes 3, 1-11

A meus pais Noberto e Diomarina:
Tudo o que sou devo ao amor incondicional de
vocês.

Obrigado por tudo!

AGRADECIMENTOS

Após longos anos de trabalho, em que por várias vezes imaginei que este dia nunca chegaria, enfim a tese está finalizada. Foram momentos muito difíceis e também muito felizes. O amadurecimento, o conhecimento, o crescimento e a superação neste período foram enormes. E nada mais justo do que agradecer aqueles que tornaram este sonho possível. Minha eterna gratidão a todos vocês, meus grandes amigos e minhas mais sinceras desculpas aqueles que porventura eu esqueci.

Primeiramente agradeço a Deus Pai todo poderoso pela imensa graça de terminar este trabalho. Neste momento onde me faltam palavras, cito a regra de São Bento que diz: “Pela graça de Deus sou o que sou” e também Santa Tereza de Ávila “Nada te perturbe. Nada te espante. Tudo passa. Só Deus não muda. A paciência tudo alcança. Quem tem a Deus nada lhe falta. Só Deus basta”. Obrigado meu Deus por todas as graças realizadas em minha vida!

Agradeço aos meus pais, Noberto e Diomarina, meus maiores exemplos de vida, que mesmo com as poucas oportunidades que tiveram na vida sempre buscaram me proporcionar o melhor que podiam, muitas vezes abrindo mão de seus sonhos para investir nos meus. Graças a vocês aprendi que amor, educação, dedicação, apoio e amizade são capazes de levar uma pessoa a qualquer lugar. Aprendi que família é a base de tudo e que o amor é capaz de tornar qualquer sonho real. Obrigado meu pai e minha mãe pelo exemplo que são para minha vida e por tudo que conquistei graças ao amor incondicional de vocês. Amo muito vocês! Agradeço a toda a minha família, em especial a minhas tias: Guiomar e Osmarina, meus primos: Paulinho e Rogério, minha comadre Maira e meus afilhados que sempre estiveram junto a mim em todos os momentos com seu apoio, carinho e orações.

À minha namorada Cristiane por todo amor, apoio, amizade, companheirismo e compreensão. Foram muitos feriados e fins de semana separados e muitas comemorações onde não pude estar presente enquanto trabalhava na tese. Muito obrigado, “amor meu”, por toda amizade e apoio nos momentos de dificuldade e por me ajudar a construir este sonho.

Aos meus orientadores Evaristo e Argimiro, pela oportunidade de realizar este trabalho. Obrigado por todo conhecimento compartilhado, por todas as opiniões,

sugestões, críticas e conselhos que tanto contribuíram para o meu crescimento profissional e pessoal. Muito obrigado pela orientação e amizade ao longo dessa tese e acima de tudo por acreditar no meu trabalho.

Aos amigos do LMSCP, o eterno “lar dos trogloditas”, local onde o conhecimento e a amizade caminham lado a lado. Dividimos por longos anos nossos sonhos e pesadelos, nossas vitórias e fracassos, nosso conhecimento e ignorância. Meu agradecimento a Fabiano, Heloísa, Castoldi, Schwaab, Diego, André, João, Fabrício, Kese, Pedro, Cauê, Ícaro, Willian e Isaías. Agradeço em especial a Rogério Pagano e a Eduardo Lima. Cursamos praticamente as mesmas disciplinas, fizemos muitas listas e trabalhos juntos. O compartilhamento de conhecimento e informações ajudou em meu crescimento.

Estes anos de PEQ me proporcionaram o privilégio de conhecer pessoas fantásticas, grande amigos e excelentes profissionais, gente de bom coração, sempre dispostas a ajudar e compartilhar o conhecimento, pessoas as quais agradeço muito pois sem sua ajuda, incentivo e apoio jamais teria concluído este trabalho. Rogério Pagano, uma pessoa simples, de paciência e conhecimento fantásticos, que me socorreu várias e várias vezes nos momentos de dificuldades. João Batista (“Dr. Chuchuzinho”), um irmão de todas as horas e momentos, devo muito a você meu amigo. André (“Dedé”), o cara cujo coração é tão grande quanto sua inteligência. Kese, minha irmãzinha do coração, mineirinha fantástica. Fabrício (“Miss simpatia”), sempre franco, verdadeiro e amigo. Cauê (“o rei do improviso”), outra pessoa de coração fantástico, sempre disposto a ajudar. José da Paixão, cultura e diversão garantida. Pedro (“Vampetinha”), diretamente da Bahia o maior botafoguense que já conheci, um grande amigo de todas as horas, partilhamos muitas vitórias e fracasso ao longo desta convivência (tanto de time como de tese). Todos vocês tiveram uma importância fundamental na minha formação profissional e pessoal. Todas as vezes que olhar para o meu diploma lembrarei-me de vocês, amigos, pois foram co-responsáveis por ele. Todos vocês são profissionais fantásticos, dotados de extrema inteligência e capacidade. Foi um grande privilégio trabalhar com vocês, obrigado, muito obrigado por tudo! Quem dera pudéssemos trabalhar todos juntos...

Aos meus amigos de longa data, alguns antes de eu sonhar em ser engenheiro, que sempre estiveram presentes com seu apoio e amizade. Henrique, Luciana, Paulo,

Bruno e Thiago. Meus compadres Leonardo e Renata, muito obrigado pelos conselhos e apoio nos momentos difíceis.

Agradeço ao Jovani e a Thais do LTFD.

Aos professores do PEQ e de outros departamentos com quem cursei disciplinas, por todo conhecimento adquirido, e ao pessoal da secretaria, em especial a Paulinha e ao Arthur.

Meu muito obrigado aos meus professores da PUC-RIO, Eduardo Brocchi, Francisco Moura, Roberto de Carvalho e José D'Abreu. Agradeço em especial a professora Maria Isabel por toda ajuda, conselhos e apoio a minha vinda para o PEQ.

Obrigado aos membros da banca, por todas as correções e sugestões.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Sem vocês, concluir este trabalho jamais seria possível, pois “um sonho que se sonha só, é só um sonho que se sonha só, mas sonho que se sonha junto é realidade”. Graças a vocês este sonho se tornou realidade.

Meu muitíssimo obrigado a todos vocês, que tornaram tudo isso possível e, mais uma vez, minhas sinceras desculpas aqueles que porventura eu esqueci.

Um grande abraço.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

IMPLEMENTAÇÃO DE UM MÉTODO DE VOLUMES FINITOS DE ORDEM SUPERIOR COM TRATAMENTO MULTIBLOCO APLICADO À SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Eduardo Moreira de Lemos

Junho/2011

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Junior

Argimiro Resende Secchi

Programa: Engenharia Química

O presente trabalho apresenta uma nova metodologia numérica para a resolução de escoamentos bidimensionais baseada no método de volumes finitos em malha estruturada e arranjo co-localizado, com aplicação especial à simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. A potencialidade desse procedimento está no acoplamento de fórmulas de interpolação de quarta ordem à técnica multibloco, que garante flexibilidade para geração de malhas localmente refinadas.

O procedimento proposto foi aplicado à resolução de diversos exemplos tradicionalmente usados para comparação de métodos, entre estes: o escoamento entre placas paralelas, o escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”), o escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”), o escoamento em uma contração plana e o escoamento em cavidade quadrada (“*lid-driven*”), aplicados tanto à simulação de escoamento de fluidos newtonianos como viscoelásticos. Em todos os casos de estudo a aplicação da metodologia foi capaz de obter resultados com maior ou igual acurácia, usando malhas mais grosseiras com refinamento local, quando comparada a métodos de volumes finitos de segunda e quarta ordens com refinamento global, demandando um menor esforço computacional.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

IMPLEMENTATION OF A HIGH ORDER FINITE VOLUME METHOD WITH
MULTIBLOCK TREATMENT APPLIED TO SIMULATION OF VISCOELASTIC
FLUIDS FLOW

Eduardo Moreira de Lemos

June/2011

Advisors: Evaristo Chalbaud Biscaia Junior
Argimiro Resende Secchi

Department: Chemical Engineering

This work presents a new numerical methodology to solve two-dimensional flow based on finite volume method in structured mesh and co-located arrangement, with special application to simulation of viscoelastic fluid flows. The potentiality of this procedure is the coupling of the fourth-order interpolation schemes and the multiblock technique, which provides flexibility to the generation of locally refined meshes.

The proposed procedure was applied to solve several examples, traditionally used for comparison of methods, among them: the flow between parallel plates, the flow between parallel plates preceded by a shear-free surface ("slip-stick"), the output flow from parallel plates to a shear-free surface ("stick-slip"), the flow in a plane contraction and the flow in a square cavity ("lid-driven"), applied to simulations of both newtonian and viscoelastic fluid flow. In all cases studied the application of the methodology was able to obtain results with higher or equal accuracy, using coarser meshes with local refinement when compared to finite volume methods for the second and fourth-order with global refinement, requiring less computational effort.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. MOTIVAÇÃO.....	2
1.2. OBJETIVOS	7
1.3. ORGANIZAÇÃO.....	8
2. FLUIDOS VISCOELÁSTICOS.....	10
2.1. FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	13
2.2. NÚMEROS ADIMENSIONAIS CARACTERÍSTICOS E FUNÇÕES MATERIAIS	15
2.3. EQUAÇÕES CONSTITUTIVAS PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	19
2.3.1. <i>Fluido Newtoniano Generalizado (FNG)</i>	21
2.3.2. <i>Fluido Viscoelástico Linear</i>	22
2.3.3. <i>Fluido Viscoelástico Não Linear – Modelos Diferenciais</i>	22
2.3.4. <i>Fluido Viscoelástico Não Linear – Modelos Integrais</i>	30
2.3.5. <i>Seleção da Equação Constitutiva</i>	32
2.4. PRINCIPAIS DIFICULDADES ENCONTRADAS PARA SIMULAÇÃO	33
2.4.1. <i>Implementação das Condições de Contorno</i>	35
2.4.2. <i>Relação entre o Refinamento da Malha e o Número de Weisenberg</i>	39
3. A MECÂNICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL E O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS	44
3.1. A MECÂNICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL.....	45
3.1.1. <i>Breve Histórico da Fluidodinâmica Computacional</i>	45
3.1.2. <i>Aplicações da Fluidodinâmica Computacional</i>	48
3.1.3. <i>Descrição Matemática de um Problema</i>	50
3.1.4. <i>Resolução das Equações que Compõem o Modelo</i>	53
3.2. O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS.....	57
3.2.1. <i>Geração da Malha</i>	57
3.2.2. <i>Aplicação da Metodologia</i>	62
3.2.3. <i>Aproximação dos Termos Advectivos</i>	65
3.2.4. <i>Aproximação dos Termos Difusivos</i>	72
3.2.5. <i>Aproximação no Tempo</i>	74
3.2.6. <i>Aproximação do Termo Fonte</i>	77
3.2.7. <i>Tratamento das Condições de Contorno</i>	78
3.2.8. <i>Metodologias Utilizadas na Resolução do Sistema Discretizado</i>	81
3.2.9. <i>Acoplamento Pressão-Velocidade</i>	84
4. APROXIMAÇÕES DE ALTA ORDEM E PARTIÇÃO MULTIBLOCO	95
4.1. ESQUEMAS DE ALTA ORDEM.....	96
4.2. TRATAMENTO DAS OSCILAÇÕES NUMÉRICAS	102
4.3. TRATAMENTO MULTIBLOCO.....	106
5. METODOLOGIA PROPOSTA.....	111
5.1. MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROBLEMA	112
5.1.1. <i>Modelo Matemático para Fluidos Viscoelásticos</i>	113

5.1.2.	<i>Condições de Contorno</i>	115
5.1.3.	<i>Adimensionamento do Conjunto de Equações</i>	118
5.1.4.	<i>Aplicação do Método de Volumes Finitos</i>	120
5.2.	DESENVOLVIMENTO DOS ESQUEMAS DE ALTA ORDEM	124
5.2.1.	<i>Aplicação da Aproximação de Lagrange aos Termos Advectivos</i>	124
5.2.2.	<i>Aplicação da Aproximação de Lagrange aos Termos Difusivos</i>	126
5.2.3.	<i>Aplicação da Aproximação de Lagrange aos Termos Não Lineares</i>	126
5.2.4.	<i>Aplicação da Técnica de Desconvolução</i>	130
5.3.	TRATAMENTO MULTIBLOCO	132
5.4.	PROCEDIMENTO PROPOSTO PARA TRATAMENTO DAS OSCILAÇÕES - WENO	141
5.4.1.	<i>Estênceis para aproximação de Lagrange de 4° Ordem</i>	142
6.	RESULTADOS	144
6.1.	AVALIAÇÃO DA TÉCNICA DE CONEXÃO MULTIBLOCO	146
6.2.	EQUAÇÃO DA ADVEÇÃO-DIFUSÃO BIDIMENSIONAL	160
6.3.	ESCOAMENTO DE FLUIDOS NEWTONIANOS	165
6.3.1.	<i>Escoamento Slip-Stick</i>	165
6.3.2.	<i>Escoamento Stick-Slip</i>	176
6.3.3.	<i>Escoamento em Cavidade Quadrada</i>	187
6.4.	ESCOAMENTO DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	194
6.4.1.	<i>Escoamento entre Placas Plana e Paralelas</i>	194
6.4.2.	<i>Escoamento Slip-Stick</i>	199
6.4.3.	<i>Escoamento Stick-Slip</i>	214
6.4.4.	<i>Escoamento em Cavidade Quadrada</i>	226
6.4.5.	<i>Escoamento em Contração Plana</i>	228
7.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	236
7.1.	CONCLUSÕES	237
7.2.	SUGESTÕES	239
8.	APÊNDICE	242
8.1.	DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DA APROXIMAÇÃO PARA OS TERMOS ADVECTIVOS	243
8.2.	DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DA APROXIMAÇÃO PARA OS TERMOS DIFUSIVOS	243
8.3.	DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DA APROXIMAÇÃO PARA OS TERMOS NÃO LINEARES NA PAREDE DO VOLUME DE CONTROLE	244
8.4.	DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DA APROXIMAÇÃO PARA OS TERMOS NÃO LINEARES NO CENTRO DO VOLUME DE CONTROLE	247
8.5.	DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DA APROXIMAÇÃO PARA OS TERMOS NÃO LINEARES RELACIONADOS À DERIVADA NO CENTRO DO VOLUME DE CONTROLE	249
9.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	259

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Representação ilustrativa do escoamento de Poiseuille entre placas (FIÉTIER e DEVILLE, 2003).....	35
Figura 3.1: Elemento (1234) e os volumes de controles gerados pela aplicação do método das medianas (MALISKA, 2004).....	56
Figura 3.2: Ilustração de um mapeamento estruturado em que as linhas delimitam as faces do volume de controle e os círculos representam os nós.	58
Figura 3.3: Representação ilustrativa de uma malha: (a) Estruturada não uniforme; (b) Bloco-estruturada e (c) Não estruturada.....	60
Figura 3.4: Ilustração de uma malha que utiliza arranjo co-localizado das variáveis. ...	61
Figura 3.5: Ilustração de uma malha que utiliza arranjo desencontrado das variáveis. .	61
Figura 3.6: Representação do volume de controle.	62
Figura 4.1: Representação de uma malha justaposta.....	108
Figura 4.2: Representação de uma malha sobreposta.....	108
Figura 4.3: Representação de uma interface com volumes coincidentes (MALISKA, 2005).....	108
Figura 4.4: Representação de uma interface com volumes não coincidentes (MALISKA, 2005).....	108
Figura 5.1: Representação ilustrativa das direções normal e tangente sobre um contorno qualquer.	115
Figura 5.2: Esquema de interpolação de Lagrange de 4 ^a ordem aplicado ao tratamento multibloco, utilizando grau de refinamento par.....	132
Figura 5.3: Esquema de interpolação de Lagrange de 4 ^a ordem aplicado ao tratamento multibloco, utilizando grau de refinamento impar.	132
Figura 5.4: Bloco conectado por malhas de igual refinamento.	134
Figura 5.5: Bloco com índice de refinamento superior.	135
Figura 5.6: Bloco com índice de refinamento inferior.	135
Figura 5.7: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas de igual refinamento.....	135
Figura 5.8: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento superior.	135
Figura 5.9: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior.	136
Figura 5.10: Representação ilustrativa dos pontos localizados próximos a interface de conexão que podem ser incluídos na conexão entre os blocos.....	136
Figura 5.11: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento superior para pontos próximos a interface de conexão.....	136

Figura 5.12: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior para pontos próximos a interface de conexão, usando apenas pontos internos.....	137
Figura 5.13: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior para pontos próximos a interface de conexão, usando informações do bloco vizinho.....	137
Figura 5.14: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB2 aplicada a malhas com índice de refinamento superior.	138
Figura 5.15: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB2 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior.	138
Figura 5.16: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB2 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior para pontos próximos a interface de conexão, usando informações do bloco vizinho.....	139
Figura 5.17: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB3 aplicada a malhas com índice de refinamento superior.	140
Figura 5.18: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB3 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior.	140
Figura 5.19: Representação esquemática dos estênceis propostos para o esquema de Lagrange de 4° ordem.....	143
Figura 6.1: Representação esquemática do escoamento entre placas planas e paralelas.	146
Figura 6.2: Estrutura de refinamento realizada ao longo do escoamento – Arranjo 1.	147
Figura 6.3: Estrutura de refinamento realizada ao longo do escoamento – Arranjo 2.	147
Figura 6.4: Estrutura de refinamento realizada próximo a parede – Arranjo 3.	148
Figura 6.5: Estrutura de refinamento realizada próximo a simetria – Arranjo 4.....	148
Figura 6.6: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB1 aplicando: (a) Arranjo 1, (b) Arranjo 2 e (c) Arranjo 3.	149
Figura 6.7: Perfil de pressão para o procedimento MB1: (a) Arranjo 1; (b) Arranjo 2 e (c) Arranjo 3.	150
Figura 6.8: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB1 na interface da conexão multibloco $x=5,0$ – Arranjo 1.	151
Figura 6.9: Perfil de pressão para o procedimento MB1 na interface da conexão multibloco $y=0,5$ – Arranjo 3.	151
Figura 6.10: Representação esquemática do procedimento de interpolação para malha de maior grau de refinamento.....	152
Figura 6.11: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão para malha de maior refinamento: (a) Arranjo 1 e (b) Arranjo 2.....	152
Figura 6.12: Perfil de pressão para o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão para malha de maior refinamento: (a) Arranjo 3 e (b) Arranjo 4.	153
Figura 6.13: Perfil de velocidade v_x na interface de conexão aplicando o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão: (a) Arranjo 1 e (b) Arranjo 2.....	153

Figura 6.14: Perfil de pressão na interface de conexão aplicando o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão: (a) Arranjo 3 e (b) Arranjo 4.....	154
Figura 6.15: Perfil para diferentes cortes em x utilizando o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão multibloco e Arranjo 3: (a) Velocidade v_x e (b) Pressão.....	154
Figura 6.16: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB2: (a) Arranjo 1; (b) Arranjo 4 e (c) Arranjo 2.....	156
Figura 6.17: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB3 considerando o arranjo 1.....	156
Figura 6.18: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB3: (a) Arranjo 2 e (b) Arranjo 3.....	157
Figura 6.19: Comparação de soluções entre os procedimentos MB2 e a referência: (a) Perfil de velocidade v_x com arranjo 1 e (b) Perfil de pressão com arranjo 4.....	158
Figura 6.20: Comparação de soluções entre os procedimentos MB3 e a referência: (a) Perfil de velocidade v_x com arranjo 2 e (b) Perfil de pressão com arranjo 3.....	158
Figura 6.21: Comparação entre o procedimento com inclusão dos pontos localizados próximos à interface de conexão na fórmula multibloco (MB11) e a solução com refinamento homogêneo para: (a) Perfil de velocidade v_x e (b) Perfil de pressão.....	159
Figura 6.22: Malha computacional necessária para obtenção da solução convergida para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.....	162
Figura 6.23: Curva de nível obtida pela aplicação do esquema LAG4 $N_x=N_y=30$ para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.....	162
Figura 6.24: Comparação entre os perfis obtidos pela aplicação dos esquema QUICK e LAG4 para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.....	162
Figura 6.25: Estrutura da malha computacional aplicando o procedimento multibloco para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.....	163
Figura 6.26: Curva de nível obtida através da aplicação do procedimento multibloco para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.....	163
Figura 6.27: Perfil em diferentes cortes em y comparando a solução de referência à solução obtida através da aplicação da técnica multibloco para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.....	163
Figura 6.28: Curva de nível obtida pela aplicação do esquema LAG4 $N_x=N_y=40$ para o problema da advecção-difusão – segundo caso de estudo.....	164
Figura 6.29: Malha computacional necessária para obtenção da solução convergida para o problema da advecção-difusão – segundo caso de estudo.....	164
Figura 6.30: Comparação entre os perfis obtidos pela aplicação dos esquemas QUICK e LAG4 para o problema da advecção-difusão – segundo caso de estudo.....	164
Figura 6.31: Representação esquemática do escoamento “ <i>slip-stick</i> ”.....	166
Figura 6.32: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.....	167

Figura 6.33: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.....	169
Figura 6.34: Perfis obtidos para posição $x=3,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y	171
Figura 6.35: Perfis obtidos para posição $x=3,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano para a Pressão.....	172
Figura 6.36: Curvas de nível e linhas de corrente obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 120×80 para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano: (a) Curva de nível para a velocidade v_x ; (b) Curva de nível para a velocidade v_y ; (c) Curva de nível para a Pressão e (d) Linhas de corrente.	173
Figura 6.37: Curvas de nível obtidas aplicando o procedimento multibloco para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano: (a) Estrutura da malha; (b) Curva de nível para a velocidade v_x ; (c) Curva de nível para a velocidade v_y e (d) Curva de nível para a pressão.	174
Figura 6.38: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y : utilizando a malha de refinamento homogêneo (representada por linhas) e malha multibloco (representada por pontos) para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) velocidade v_y e (c) Pressão.	175
Figura 6.39: Representação esquemática do escoamento “ <i>stick-slip</i> ”.....	177
Figura 6.40: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.....	178
Figura 6.41: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.....	180
Figura 6.42: Perfis obtidos para posição $x=3,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.....	182
Figura 6.43: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma malha 120×80 para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Curva de nível para a velocidade v_x e (b) Curva de nível para a velocidade v_y	183
Figura 6.44: Curvas de nível e linhas de corrente obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma malha 120×80 para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Curva de nível para a pressão e (b) Linhas de corrente.	184
Figura 6.45: Resultados obtidos aplicando o procedimento multibloco para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Estrutura da malha; (b) Curva de nível a para velocidade v_x ; (c) Curva de nível para a velocidade v_y e (d) Curva de nível para a pressão	185
Figura 6.46: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y : utilizando a malha de refinamento homogêneo (representada por linhas) e malha multibloco (representada por pontos) para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.....	186

Figura 6.47: Representação esquemática do escoamento em cavidade.....	188
Figura 6.48: Comparações entre os perfis de velocidade aplicando o esquema LAG4 usando malha 20×20 e 50×50 com resultados retirados da literatura para o escoamento em cavidade newtoniano: (a) Perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x=0,5$) e (b) Perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$).....	190
Figura 6.49: Comparações entre os perfis de velocidade aplicando o esquema LAG4 usando malha 20×20, 30×30, 40×40 e 50×50 com resultados retirados da literatura para o escoamento em cavidade newtoniano: (a) Perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x=0,5$) e (b) Perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$).....	192
Figura 6.50: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 50×50 para o escoamento em cavidade newtoniano: (a) Curva de nível para a velocidade v_x ; (b) Curva de nível para a velocidade v_y ; (c) Curva de nível para a pressão e (d) Vetor velocidade.	193
Figura 6.51: Perfis obtidos pela aplicação do esquema LAG4 na saída da placa usando uma malha 10×10 (representada por pontos) e perfis obtidos através da solução analítica (representada por linhas) com diferentes valores de We para o escoamento entre placas viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Tensão τ_{xx} e (c) Tensão τ_{xy}	197
Figura 6.52: Perfis obtidos pela aplicação do esquema LAG4 na saída da placa usando uma malha 10×10 (representada por pontos) e perfis obtidos através da solução analítica (representada por linhas) com diferentes valores de η_e , para o escoamento entre placas viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{xy}	198
Figura 6.53: Perfis de tensão normal τ_{xx} obtidos pela aplicação do esquema LAG4 na saída da placa com diferentes valores de We para o escoamento entre placas viscoelástico.	199
Figura 6.54: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y	200
Figura 6.55: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Pressão; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy}	201
Figura 6.56: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Pressão; (d) Tensão τ_{xx} ; (e) Tensão τ_{yy} e (f) Tensão τ_{xy}	202
Figura 6.57: Perfis obtidos para posição $x=5,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha na região próxima a parede para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Tensão τ_{xx}	203
Figura 6.58: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 60×40 para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y	204
Figura 6.59: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 60×40 para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Pressão; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy}	205
Figura 6.60: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do	

parâmetro η_E , $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .	206
Figura 6.61: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo SPTT com diferentes valores do parâmetro ε , $\eta_E=0,5$, $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .	207
Figura 6.62: Estrutura da malha computacional e curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Estrutura da malha; (b) Velocidade v_x ; (c) Velocidade v_y e (d) Pressão.	208
Figura 6.63: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .	209
Figura 6.64: Comparação entre os perfis, para diferentes cortes em y , utilizando o esquema LAG4 com uma malha 60×60 (representada por linhas) e o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y .	209
Figura 6.65: Comparação entre os perfis, para diferentes cortes em y , utilizando o esquema LAG4 com uma malha 60×60 (representada por linhas) e o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Pressão; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .	210
Figura 6.66: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 usando malha 60×10 e 60×20 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .	212
Figura 6.67: Perfis de tensão τ_{xx} obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Malha 60×10 e (b) Malha 30×40 .	213
Figura 6.68: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema multibloco e pela aplicação do procedimento de refinamento homogêneo usando malha 60×10 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .	214
Figura 6.69: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Tensão τ_{xx} e (d) Tensão τ_{yy} .	215
Figura 6.70: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Tensão τ_{xx} e (d) Tensão τ_{yy} .	216
Figura 6.71: Perfis obtidos para posição $x=5,6667$ pela aplicação dos esquemas CDS e LAG4 com diferentes refinamentos de malha na região próxima a parede para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x com CDS e (b) Velocidade v_x .	217
Figura 6.72: Perfis obtidos para posição $x=5,6667$ pela aplicação dos esquemas CDS e LAG4 com diferentes refinamentos de malha na região próxima a parede para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} com CDS e (b) Tensão τ_{xx} com LAG4.	218

Figura 6.73: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 60×40 para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Pressão e (d) Tensão τ_{xx} ; (d) Tensão τ_{yy} e (e) Tensão τ_{xy}	219
Figura 6.74: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro η_E , $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy}	220
Figura 6.75: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo SPTT com diferentes valores do parâmetro ϵ , $\eta_E=0,5$, $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{xy}	221
Figura 6.76: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y ; (c) Tensão τ_{xx} e (d) Tensão τ_{yy}	222
Figura 6.77: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y utilizando o procedimento LAG com uma malha 60×60 (representada por linhas) e procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y	222
Figura 6.78: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y utilizando o procedimento LAG com uma malha 60×60 (representada por linhas) e procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy}	223
Figura 6.79: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 usando malha 30×20 e 40×50 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy}	224
Figura 6.80: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com as malhas 30×20 e 30×40 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy}	225
Figura 6.81: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com as malhas 50×10 e 40×50 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy}	225
Figura 6.82: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema multibloco utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We e pela aplicação do procedimento de refinamento homogêneo usando malha 30×40 para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy}	226
Figura 6.83: Comparações entre os perfis de velocidade para o esquema LAG4 usando malha 20×20 e 40×40 e os resultados obtidos por YAPICI <i>et al.</i> (2009) para o escoamento em cavidade viscoelástico: (a) Perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x=0,5$) e (b) Perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$).....	228
Figura 6.84: Representação esquemática do escoamento em uma contração plana.....	229
Figura 6.85: Estrutura de refinamento multibloco aplicando 3.400 volumes de controle para o escoamento em contração viscoelástico.....	230

Figura 6.86: Perfis obtidos para linha horizontal para diferentes cortes em y aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico para a velocidade v_x .	230
Figura 6.87: Perfis obtidos para linha horizontal para diferentes cortes em y aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Velocidade v_y ; (b) Tensão τ_{xx} e (c) Tensão τ_{yy} .	231
Figura 6.88: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Tensão τ_{xx} .	232
Figura 6.89: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Tensão τ_{yy} e (b) Linhas de Corrente.	233
Figura 6.90: Perfis obtidos para linha horizontal $y=0,45$ aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico para a velocidade v_y .	233
Figura 6.91: Perfis obtidos para linha horizontal $y=0,45$ aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} ; (b) Tensão τ_{yy} e (c) Tensão τ_{xy} .	234

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Comparação entre metodologias para imposição de condições de contorno para escoamento de fluidos viscoelásticos (XIE e PASQUALI, 2004):	39
Tabela 3.1: Alguns dos esquemas de aproximações utilizados na literatura para aproximação dos termos difusivos.	73
Tabela 6.1: Diferença entre as soluções de referência e MB1.....	155
Tabela 6.2: Diferença entre as soluções de referência e MB2 e MB3.....	158
Tabela 6.3: Diferença entre as soluções de referência e MB11.....	159
Tabela 6.4: Diferença entre as soluções de referência e a solução multibloco para o primeiro caso de estudo.	163
Tabela 6.5: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema CDS aplicando diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano.	168
Tabela 6.6: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema LAG4 e para o esquema CDS aplicando malhas de diferentes refinamentos para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano.	170
Tabela 6.7: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento homogêneo para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” newtoniano.	176
Tabela 6.8: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema CDS aplicando diferentes refinamentos de malha para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano.	179
Tabela 6.9: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema LAG4 e para o esquema CDS aplicando malhas de diferentes refinamentos para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano.	181
Tabela 6.10: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento homogêneo para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” newtoniano.	187
Tabela 6.11: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ retiradas da literatura para o escoamento em cavidade newtoniano com $Re=100$	189
Tabela 6.12: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ aplicando o esquema LAG4 usando diferentes refinamentos de malha para o escoamento em cavidade newtoniano com $Re=100$	189
Tabela 6.13: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ retiradas da literatura e obtidos pelo esquema LAG4 para o escoamento em cavidade newtoniano com $Re=400$	191
Tabela 6.14: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 e solução analítica com diferentes valores de We para o escoamento entre placas viscoelástico.	197
Tabela 6.15: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 e solução analítica com diferentes valores de η_E para o escoamento entre placas viscoelástico.	198

Tabela 6.16: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento completo para o escoamento “ <i>slip-stick</i> ” viscoelástico.	211
Tabela 6.17: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento completo para o escoamento “ <i>stick-slip</i> ” viscoelástico.	223
Tabela 6.18: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ para o escoamento em cavidade viscoelástico.....	227

1. Introdução

“The important thing in science is not so much to obtain new facts as to discover new ways of thinking about them.”

Sir William Bragg

Neste capítulo é apresentada uma breve introdução sobre o trabalho proposto, incluindo a motivação, os objetivos principais e a estrutura de organização da tese.

1.1. Motivação

Materiais poliméricos podem ser utilizados para as mais diversas finalidades. Esta ampla gama de aplicações está associada as suas boas propriedades tais como alta durabilidade, baixo preço, boas condições de processamento e alta resistência mecânica. Tais propriedades permitem que estes materiais atuem como substitutos diretos de vários outros tipos de materiais, tal como o vidro por PET na produção de garrafas, o papel por plástico na confecção de embalagens, metal por plástico no acabamento de automóveis e a madeira por PVC em materiais de construção.

Esta grande variedade de aplicações faz com que existam diferentes processos que transformam o polímero em um bem de consumo, são exemplos destes processos: pultrusão, extrusão, moldagem por injeção ou por sopro, termoformagem, dentre outros (OSSWALD e HERNÁNDEZ-ORTIZ, 2006). A possibilidade de utilizar a fluidodinâmica computacional (CFD) na avaliação destes processos pode gerar redução significativa dos custos do processo, melhora de propriedades de interesse do bem de produção, projeto de novas unidades e treinamento de pessoal.

O presente trabalho apresenta uma nova metodologia numérica para resolução de escoamento bidimensionais baseada no método de volumes finitos em malha estruturada e arranjo co-localizado, com aplicação especial a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. Este novo procedimento aplica os princípios básicos do método de volumes finitos (MVF), utilizando uma malha estruturada e um arranjo co-localizado das variáveis do problema. A grande potencialidade deste código está no acoplamento dos esquemas de alta ordem utilizados nas aproximações dos termos lineares e não lineares e as técnicas de partição multibloco aplicadas no refino da malha do problema. A junção destas duas técnicas permitiu o desenvolvimento de um código que integra a acurácia da utilização dos esquemas de alta ordem à flexibilidade para geração da malha do tratamento multibloco. Assim foi possível geral um procedimento numérico capaz de obter resultados com maior acurácia que os procedimentos tradicionais utilizando recursos computacionais mais reduzidos, características importantes para simulação de fluidos viscoelásticos.

Neste procedimento, os valores médios lineares e não lineares das variáveis nas interfaces dos volumes de controle são aproximados através de esquemas de alta ordem, que utilizam os valores médios das variáveis nos centros dos volumes de controle

vizinhos. Embora esta metodologia utilize diretamente os valores médios, é possível obter os valores pontuais das variáveis, ao final do procedimento, através da aplicação da técnica de desconvolução. O esquema de alta ordem desenvolvido e aplicado neste trabalho foi o esquema de Lagrange de 4ª ordem. É importante ressaltar que, embora tenha sido utilizado o esquema de Lagrange de 4ª ordem, a metodologia pode ser facilmente reduzida ao esquema de Lagrange de 3ª ordem ou estendida a esquemas de ordens superiores.

Para casos de escoamentos que envolvam geometrias complexas ou envolvam regiões que apresentem determinados fenômenos de interesse, como por exemplo, gradientes elevados, descontinuidades ou recirculações, é desejável e muitas vezes necessário realizar o refino da malha para que determinados fenômenos sejam avaliados de forma mais precisa. Entretanto, a utilização de uma malha estruturada, aplicada na sua forma básica, não permite que o refino da malha seja feito localmente. Desta forma, refinar uma determinada região de interesse implica também em aumentar a malha em outra região na qual não existe necessidade alguma, aumentando desnecessariamente o esforço computacional necessário à resolução do problema. Visando superar este problema, o procedimento aqui proposto fez uso de técnicas de partição multibloco para conexão de blocos da malha com diferentes graus de refinamento, permitindo assim que apenas regiões de interesse sejam refinadas. Os procedimentos de conexão dos blocos foram desenvolvidos utilizando diretamente as funções de interpolação de Lagrange, permitindo manter a ordem global da aproximação de forma simples e de fácil implementação computacional.

O modelo matemático utilizado para descrever o escoamento isotérmico de um fluido incompressível sem efeito de forças de campo pode ser representado através do seguinte conjunto de equações:

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}) = 0 \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \tag{1.2}$$

em que \mathbf{U} representa o vetor velocidade, ρ a massa específica, p a pressão e $\boldsymbol{\tau}$ o tensor tensão (BIRD *et al.*, 2002).

As Equações 1.1 e 1.2 são classificadas como um sistema diferencial incompleto. Para que este sistema de equações possa ser resolvido, além das condições de contorno e condição inicial, é necessária a inclusão de relações matemáticas capazes de descrever determinadas propriedades de transporte do fluido (por exemplo, viscosidade, densidade, capacidade calorífica, *etc.*) e equações constitutivas capazes de descrever o comportamento reológico do fluido, principalmente quando se trata de fluidos não newtonianos.

Para fluidos newtonianos, o tensor tensão ($\boldsymbol{\tau}$) pode ser relacionado diretamente ao tensor taxa de deformação do material (\mathbf{D}), através da viscosidade newtoniana (η), segundo a expressão:

$$\boldsymbol{\tau}_N = 2\eta\mathbf{D} \quad 1.3$$

O tensor taxa de deformação é representado pela expressão:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{U} + \nabla\mathbf{U}^T) \quad 1.4$$

Como as Equações 1.3 e 1.4 apresentam uma relação explícita com os termos de velocidade, pode-se substituir diretamente a Equação 1.3 na equação da conservação da quantidade de movimento, Equação 1.2. Deste modo, a simulação de escoamento isotérmico de fluidos newtonianos implica na resolução de sistemas de equações diferenciais parciais constituídos pelas equações da continuidade e do movimento que apresentam como incógnitas as variáveis pressão e componentes do vetor velocidade.

No caso de fluidos viscoelásticos, não é possível representar as propriedades físicas através de uma constante material, como no caso newtoniano, uma vez que as propriedades destes fluidos são função da taxa de deformação e do tempo, dentre outras. Assim, para fluidos poliméricos é mais correto utilizar funções materiais no lugar de constantes materiais. Neste tipo de fluido não é possível, na maioria dos casos, a obtenção de uma relação explícita entre o tensor tensão e os componentes do vetor velocidade. Desta maneira, as equações constitutivas utilizadas para a definição do tensor tensão passam a fazer parte do sistema de equações a ser resolvido, que agora apresenta como variáveis não apenas a pressão e os componentes do vetor velocidade, como no caso newtoniano, mas também os componentes do tensor tensão. Para este tipo

de escoamento é usual representar o componente do tensor tensão como a soma das contribuições newtoniana e polimérica, segundo a expressão:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_N + \boldsymbol{\tau}_P \quad 1.5$$

Existe na literatura um grande número de equações constitutivas que buscam descrever o comportamento reológico dos fluidos viscoelásticos. O modelo mais simples, que contempla o caráter viscoso e elástico em uma única equação, é o modelo de fluido viscoelástico linear, que pode ser representado utilizando o modelo de Maxwell utilizando a formulação multimodo pelo seguinte conjunto de equações (BIRD *et al.*, 1987):

$$\boldsymbol{\tau}_{Pk} + \lambda_k \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_{Pk}}{\partial t} = 2\eta_{Pk} \mathbf{D} \quad k = 1, 2, \dots, N_\lambda \quad 1.6$$

$$\boldsymbol{\tau}_P = \sum_{k=1}^{N_\lambda} \boldsymbol{\tau}_{Pk} \quad 1.7$$

em que o termo N_λ representa o número de modos de relaxação utilizados e as constantes λ_k e η_{Pk} são, respectivamente, o tempo de relaxação e a viscosidade polimérica à taxa de deformação nula para cada modo de relaxação. Desta forma o número de equações que constitui o sistema a ser solucionado terá ligação direta com o número de modos de relaxação utilizados. A utilização da formulação multimodo torna possível a obtenção de soluções mais condizentes com situações reais, entretanto, o uso de multimodos exige um esforço computacional maior, pois cada modo adicional implica em uma equação constitutiva tensorial a mais no modelo.

A grande diferença entre o custo computacional envolvido no escoamento de fluidos newtonianos e viscoelástico pode ser evidenciada através de um cálculo simples, apresentado a seguir. Na simulação de um escoamento bidimensional, para cada volume de controle são resolvidas três equações no caso de um fluido newtoniano, que apresentam como incógnitas pressão, v_x e v_y . No caso de um fluido viscoelástico, tem-se para cada volume de controle o acréscimo de $3 N_\lambda$ equações diferenciais provenientes das equações para determinação dos componentes poliméricas do tensor tensão em cada um dos modos de relaxação (τ_{Pk}^{xx} , τ_{Pk}^{xy} e τ_{Pk}^{yy}). Em uma malha computacional com N_V volumes de controle isso resulta em $3 N_V$ equações para fluidos newtonianos e

$3(1 + N_z)N_V$ para fluidos viscoelásticos. Considerando uma malha computacional com 100 volumes de controle e somente quatro modos de relaxação existe uma diferença de 1.200 equações a mais para simulação de fluidos viscoelásticos. Logo, reduzir a malha computacional para este tipo de escoamento significa reduzir consideravelmente o esforço e, conseqüentemente, o tempo computacional empregado na simulação, o que certamente justifica o emprego neste tipo de problema de esquemas de alta ordem aliado a técnicas de partição multibloco.

Além do número de Reynolds, no estudo de fluidos viscoelásticos existem dois números adimensionais de grande importância, o número de Deborah que define a razão entre o tempo de relaxação do polímero e um determinado tempo característico do escoamento, e o número de Weissenberg, que é definido como o produto do tempo de relaxação do polímero por uma taxa de deformação característica do escoamento. A solução de escoamento de fluidos viscoelásticos que apresenta valores elevados destes números adimensionais é de difícil obtenção devido à presença de gradientes elevados gerados pelo aumento da elasticidade do fluido. Em tais condições, grande parte das ferramentas disponíveis apresenta dificuldades para resolver o problema, o que restringe a simulação a baixos valores destes parâmetros. Como os métodos de alta ordem apresentam uma melhor acurácia que esquemas de baixa ordem comparados sob mesmas malhas computacionais, é possível obter resultados melhores com a aplicação de tais esquemas. Adicionalmente, a aplicação da técnica multibloco permite refinar o domínio do problema nas regiões onde gradientes elevados ocorrem, otimizando assim o refino da malha e, conseqüentemente, reduzindo o esforço computacional empregado. Portanto, a utilização de esquemas de alta ordem em conjunto com técnicas de partição multibloco pode possibilitar melhorias significativas na simulação de fluidos viscoelásticos, especialmente em situações nas quais elevados números de Deborah ou Weissenberg forem empregados.

Como o escoamento de fluidos viscoelásticos é caracterizado por ocorrer em baixos números de Reynolds, a inclusão de modelos de turbulência é, geralmente, desnecessária na simulação deste tipo de problema (MUNIZ *et al.*, 2005).

1.2. Objetivos

A proposta principal deste trabalho é o desenvolvimento de um método de volumes finitos de alta ordem utilizando técnicas de partição multibloco do domínio do problema para simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos.

Os objetivos deste trabalho englobam o desenvolvimento e implementação computacional de um procedimento de aproximação de alta ordem que deve ser capaz de manter sua ordem de aproximação global para todo domínio do problema e o desenvolvimento e implementação computacional de uma técnica de conexão multibloco que permita conectar blocos com diferentes graus de refinamento sem reduzir a ordem da aproximação.

O esquema de alta ordem utilizado neste trabalho foi o esquema de Lagrange de 4ª ordem. Para que a ordem global do procedimento fosse mantida, foi necessário o desenvolvimento de uma série de funções de interpolação específicas a pontos contidos em regiões próximas aos contornos do problema. É importante ressaltar que a maioria dos trabalhos da literatura utiliza aproximações de ordem mais baixa em tais regiões, evitando assim a necessidade de ter de recalcular as fórmulas de aproximação nestas regiões. Entretanto, a utilização de aproximações de ordem mais baixas nos contornos faz com que os erros de truncamentos associados sejam propagados e, conseqüentemente, reduzam a precisão global do método. Neste trabalho, buscou-se desenvolver as aproximações para os termos advectivos, termos difusivos, termos não lineares na parede do volume de controle e termos não lineares no centro do volume de controle, que normalmente constituem o modelo de fluidos viscoelásticos, de forma que todos estes termos apresentem precisão de 4ª ordem, independente das regiões do domínio do problema nas quais são empregadas. Com isso, espera-se a obtenção de resultados mais acurados que aqueles obtidos com procedimentos tradicionalmente utilizados.

A técnica de conexão multibloco desenvolvida utiliza as próprias funções de interpolação de Lagrange de 4ª ordem para conexão dos blocos com diferentes graus de refinamento, garantindo assim a manutenção da ordem global da aproximação. A aplicação desta técnica só foi possível graças à metodologia desenvolvida para geração da malha que permite a conexão direta entre os blocos. Observa-se que os procedimentos utilizados na literatura normalmente realizam uma ponderação entre pontos localizados na fronteira dos blocos de diferentes refinamentos, sem a

preocupação da manutenção da ordem da aproximação. Da mesma forma que para os contornos do problema, os erros associados à redução da ordem utilizados pela técnica de conexão multibloco se propagam reduzindo a ordem global do procedimento. Como a técnica de conexão proposta neste trabalho permite utilizar diretamente a função de interpolação o procedimento é mais acurado e flexível.

1.3. Organização

Este documento encontra-se dividido em sete capítulos cujo conteúdo é descrito nos parágrafos a seguir.

No Capítulo 2 é apresentada a revisão bibliográfica sobre fluidos viscoelásticos, as principais equações constitutivas utilizadas para descrever seu comportamento reológico são devidamente detalhadas junto às principais dificuldades reportadas na literatura para a simulação deste tipo de escoamento.

No Capítulo 3 é apresentada uma breve revisão sobre a fluidodinâmica computacional, englobando uma sucinta descrição sobre as principais técnicas numéricas utilizadas pela literatura para a resolução de problemas de CFD. Neste capítulo também é apresentada uma revisão sobre os princípios básicos de aplicação do método de volumes finitos (MVF), e a descrição da malha de integração, suas diferentes formas de construção e os tipos de arranjo das variáveis em seu domínio. Em seguida, o método dos volumes finitos é apresentado, os principais esquemas de interpolação utilizados pela literatura para aproximação dos termos advectivos e difusivos são revisados, bem como a forma de tratamento de não linearidades, do termo fonte, das condições de contorno e das condições de entrada, saída, simetria e parede. A seguir, são apresentadas as técnicas utilizadas para resolução do sistema discretizado, gerado na aplicação do MVF. O capítulo é então finalizado com uma revisão dos algoritmos utilizados no tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

No Capítulo 4 é apresentada uma revisão da literatura relativa aos esquemas de alta ordem, aos procedimentos de tratamento de oscilações numéricas e às técnicas de partição multibloco.

No Capítulo 5, o procedimento proposto neste trabalho é descrito. São apresentados os esquemas de alta ordem propostos para aproximação dos termos advectivos, difusivos e não lineares e a técnica de partição multibloco para conexão dos blocos com diferentes graus de refinamento de malha.

No Capítulo 6 são apresentados os resultados obtidos através do procedimento numérico proposto. São tratados problemas envolvendo o escoamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos. Foram considerados como, problemas teste, o escoamento entre placas paralelas, o escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”), o escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”), o escoamento em uma contração plana e o escoamento em cavidade quadrada sob a ação de uma placa deslizante (“*lid-driven*”).

No capítulo 7 são apresentadas as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

2. Fluidos Viscoelásticos

“What we know is a drop. What we don’t know is an ocean.”

Sir. Isaac Newton

Neste capítulo é apresentada a revisão bibliográfica sobre fluidos viscoelásticos. As principais equações constitutivas utilizadas para descrever o comportamento reológico desse tipo de fluido são devidamente detalhadas. Ao final do capítulo, são apresentadas as principais dificuldades reportadas na literatura para simulação deste tipo de escoamento.

Embora a formação clássica de um engenheiro seja direcionada ao estudo de fluidos que apresentam comportamento newtoniano, são inúmeras as aplicações de materiais que apresentam comportamento completamente distinto ao comportamento deste tipo de fluido. O que é o caso dos fluidos viscoelásticos, que hoje em dia estão presentes em inúmeras aplicações do dia a dia, como em embalagens, em peças para indústria de construção civil, nas indústrias automobilística e eletroeletrônica, dentre inúmeras outras aplicações.

De uma forma geral, a diferença básica entre fluidos newtonianos e fluidos viscoelásticos ocorre quando tais fluidos forem submetidos a uma tensão. No caso de fluidos newtonianos, a tensão de cisalhamento aplicada é diretamente proporcional ao gradiente de velocidade na direção normal, em que a constante que define esta proporcionalidade é a chamada viscosidade. Já fluidos viscoelástico respondem de uma forma completamente distinta à ação de uma tensão de cisalhamento, não existindo uma constante que permita relacionar diretamente a tensão aplicada sobre o fluido à sua taxa de deformação. Fazendo uma analogia aos fluidos newtonianos é como se a viscosidade variasse em função da tensão aplicada sobre o fluido. Segundo BIRD 2004 *et al.* (2004), esta grande distinção de comportamento apresentada por este tipo de fluido deve-se a sua composição química. Os fluidos viscoelásticos apresentam cadeias de elevada massa molecular com muitos graus internos de liberdade, o que permite a formação de cadeias lineares ou ramificadas que geralmente estão entrelaçadas formando estruturas complexas que podem ser modificadas quando submetidas a uma tensão. Devido à enorme possibilidade de arranjos que as cadeias poliméricas podem assumir estes materiais podem assumir uma infinidade de conformações.

Em relação à formulação do modelo matemático, a grande distinção ocorre no próprio conjunto de equações utilizadas para descrever o fluido. No caso de fluidos newtonianos, o modelo matemático é constituído pela equação da continuidade e pelas equações de conservação da quantidade de movimento, visto que para este caso as equações constitutivas utilizadas para descrever o comportamento reológico do fluido podem ser diretamente substituída na equação da conservação da quantidade de movimento. No caso de fluidos viscoelásticos, para a maioria dos casos, as equações constitutivas não apresentam uma relação explícita entre os componentes do tensor tensão com as demais variáveis que compõem o modelo, isso faz com que estas equações sejam partes integrantes do sistema de equações a ser solucionado. Ou seja, o

modelo matemático utilizado para fluidos viscoelásticos é composto, como no caso newtoniano, pela equação da continuidade e pelas equações de conservação da quantidade de movimento acrescido das equações constitutivas utilizadas para descrever o comportamento do tensor tensão. Existe na literatura uma grande quantidade de equações constitutivas, entretanto, mesmo com todo o esforço envolvido, não existe ainda uma equação multi-propósito que seja capaz de representar adequadamente o comportamento de qualquer polímero, o que existe são equações específicas para substâncias específicas e muitas vezes limitadas também por condições operacionais.

Para construção de um modelo matemático que seja capaz de representar adequadamente o escoamento, especialmente de materiais poliméricos, é de extrema importância formular corretamente as relações matemáticas que descrevem o comportamento reológico do fluido. Normalmente na literatura este comportamento pode ser classificado dentre os seguintes grupos (FAVERO, 2009):

Sólidos de Hooke: sólidos, perfeitamente elásticos que, quando submetidos a uma tensão sofrem uma deformação finita, recuperam a sua conformação inicial uma vez retirada a tensão. Apresentam uma relação linear entre a tensão e a deformação dada pelo módulo de Young, também chamado de módulo elástico.

Fluidos newtonianos: fluidos puramente viscosos que apresentam uma relação linear entre a taxa de deformação e a tensão aplicada dada pela viscosidade. Enquadram-se nesta categoria gases e líquidos com peso molecular menor que cerca de 5000 g/mol (BIRD *et al.*, 2004) como, por exemplo: água e ar.

Fluidos puramente viscosos não newtonianos: fluidos puramente viscosos, mas que não apresentam uma relação linear entre a tensão e a taxa de deformação. São materiais que apresentam a viscosidade dependente do tempo e/ou da taxa de deformação. A relação entre tensão e taxa de deformação é dada através de uma equação constitutiva, geralmente explícita em termos da taxa de deformação, de forma que o número de equações e incógnitas do problema não é alterado quando comparado ao modelo de um fluido newtoniano. São exemplos de materiais que apresentam viscosidade que depende da taxa de deformação: pseudoplástico no qual a viscosidade aparente diminui com o aumento da taxa de deformação (Ex: polpa de papel e tinta de impressora), dilatante em que a viscosidade aparente aumenta com o aumento da taxa de deformação (Ex: suspensão de amido) e plástico de Bingham que se comporta como um sólido até que uma tensão mínima seja atingida e, após, apresenta uma relação linear

entre tensão e taxa de deformação (Ex: pasta de dente). Fluidos que apresentam a viscosidade como função do tempo são denominados: tixotrópico que apresenta diminuição da viscosidade aparente com o tempo sob a ação de uma tensão de cisalhamento constante (Ex: Ketchup) e reopéticos que apresenta aumento da viscosidade aparente com o tempo, sob a ação de uma tensão de cisalhamento constante (Ex: Maionese).

Fluidos viscoelásticos: fluido que apresenta uma associação do comportamento viscoso e elástico. Uma descrição mais detalhada deste tipo de fluido é apresentada no item a seguir.

2.1. Fluidos Viscoelásticos

Um fluido é classificado como elástico quando a aplicação de um campo de tensão gera uma deformação no material que naturalmente desaparece logo após cessada a força. Um fluido é classificado como viscoso quando a aplicação de um campo de tensão causa uma deformação que é mantida logo depois de retirada esta força. Fluidos viscoelásticos são assim chamados, pois apresentam em conjunto características elásticas e viscosas (BIRD *et al.*, 2002).

A resposta viscoelástica de materiais poliméricos é um assunto que tem sido fonte de inúmeras pesquisas e desenvolvimento durante as últimas décadas e mesmo nos dias de hoje ainda existe uma grande quantidade de trabalhos direcionados ao melhor entendimento deste fenômeno. Este crescente interesse da literatura deve-se a grande quantidade de substâncias poliméricas que apresentam aplicações industriais, como o caso do plástico e da borracha.

O tempo e a temperatura exercem uma grande influência nas propriedades mecânicas do polímero, dependência esta que é muito maior que em outros materiais como, por exemplo, em metais. Assim, uma compreensão do comportamento viscoelástico é fundamental para a manufatura e a utilização do polímero. Entretanto, a viscoelasticidade é um assunto de grande complexidade que apresenta uma série de dificuldades conceituais (SHAW e MACKNIGHT, 2005).

Existe uma série de experimentos que evidenciam a clara distinção entre o comportamento de fluidos newtonianos e poliméricos (BIRD *et al.*, 1987 e FERRY, 1980). Um destes experimentos é submeter o fluido a uma taxa de deformação constante até que o estado estacionário seja atingido e após decorrido um determinado tempo,

interromper o movimento. Para fluidos newtonianos imediatamente a tensão cai a zero, já para fluidos viscoelásticos a tensão apresenta um valor finito e decai exponencialmente com tempo, normalmente conhecido como tempo de relaxação.

Outro experimento que também demonstra um comportamento bastante distinto dos fluidos poliméricos é o “*Rod-Climbing*” que consiste em colocar o fluido contido em um bécher sob agitação através de um eixo rotatório. Para o fluido newtoniano é possível observar a formação de um vórtice junto ao eixo do agitador. Já no caso de fluidos poliméricos observa-se que o fluido sobe junto ao eixo do agitador. Isso ocorre porque as linhas de corrente são círculos fechados e as tensões normais ao longo das linhas de corrente “estrangulam” o fluido gerando uma força que age para dentro em oposição a força centrífuga e para cima oposta a força gravitacional (BIRD *et al.*, 1987).

Outro efeito característicos de fluidos viscoelásticos é o efeito de inchamento do estruturado (“*Extrudate Swell*” ou “*die Swell*”), no qual é observado um aumento de tamanho da seção vertical, que pode chegar até 300% do diâmetro original, quando uma substancia polimérica sai de um tubo devido às propriedades elásticas do fluido. No caso de fluidos newtonianos, quando submetidos ao mesmo experimento não existe mudanças significativas neste diâmetro (BIRD *et al.*, 1987).

Todos os produtos de origem polimérica passam por algum processo que transforma o produto bruto, que é a resina virgem, em um bem de consumo final. Exemplos destes processos de transformação são: o processo de pultrusão, extrusão, moldagem por injeção ou sopro, dentre muitos outros. Cada um destes processos destina-se a produção de um determinado bem de consumo. Entretanto, na grande maioria dos casos o que ocorre é a fusão do material para que seja processado, assumindo a forma de interesse final. O desenvolvimento de um modelo matemático que permita descrever adequadamente esses processos permite que inúmeros estudos possam ser conduzidos, na grande maioria das vezes de forma mais econômica e segura, possibilitando o estudo de condições operacionais, da relação com que tais condições afetam o processo e até mesmo das propriedades mecânicas finais do polímero. Podendo assim proporcionar melhoras significativas no processo e conseqüentemente no produto, reduzindo o custo de operação e aumentando o lucro.

2.2. Números adimensionais Característicos e Funções Materiais

Grande parte dos fenômenos característicos dos fluidos viscoelásticos deve-se às tensões geradas no escoamento devido ao estiramento e alinhamento das cadeias poliméricas ao longo das linhas de corrente. Em um processo transiente de relaxação de tensões o tempo que o material leva para retornar a sua conformação de menor energia é conhecido como tempo de relaxação. Deste tempo, que é característico do fluido, decorre um número que é de fundamental importância para o escoamento de fluidos viscoelásticos, chamado de número de Deborah (De), que define a razão entre o tempo de relaxação do polímero (λ) e um tempo característico do escoamento (t_c), definido pela equação:

$$De = \frac{\lambda}{t_c} \quad 2.1$$

O número de Deborah está diretamente relacionado com o efeito elástico do material. Quanto maior este número, mais pronunciado é o efeito elástico, sendo nulo para fluidos newtonianos. Não existe um único tempo de relaxação para um polímero, o que existe na realidade é um espectro de relaxação, pois um polímero é formado por diversas cadeias de diferentes tamanhos e conformações, cada qual com um tempo de relaxação característico e este tempo também depende da geometria. No cálculo do número de Deborah o tempo de relaxação característico recomendado pode ser o maior ou o que apresenta maior importância dentro do espectro de relaxação.

Outro número adimensional de extrema importância é o número de Weissenberg (We), que é definido pelo produto entre o tempo de relaxação do polímero (λ) e uma taxa de deformação característica do escoamento ($\dot{\gamma}_c$), definido pela equação:

$$We = \lambda \dot{\gamma}_c \quad 2.2$$

A menos que a deformação seja muito pequena ou muito lenta o comportamento de um fluido viscoelástico é não linear, o número de Weissenberg tem como finalidade descrever esta não linearidade e também indicar o grau de anisotropia ou de orientação gerada por uma deformação transitória. O número de Weissenberg é também apropriado para descrever os escoamentos que apresentam um estiramento constante ao longo do tempo. Em contrapartida, o número de Deborah governa o grau de elasticidade que se manifesta em resposta a uma deformação transitória e deve ser usado para descrever os

escoamentos que apresentam estiramentos variáveis ao longo do tempo, e fisicamente representa a taxa na qual a energia elástica é armazenada ou liberada (DEALY 2010; BIRD *et al.*, 1987).

Se o número de Deborah for pequeno, o movimento térmico mantém as moléculas mais ou menos em sua configuração de equilíbrio e o líquido polimérico apresenta um comportamento próximo a de um fluido newtoniano. É dito que o comportamento de um fluido newtoniano é atingido quando $De \rightarrow 0$. Em contrapartida, se o número de Deborah for grande as moléculas poliméricas que forem distorcidas pelo escoamento não terão tempo de mudar de conformação durante a escala de tempo do processo ou do experimento. No limite, quando $De \rightarrow \infty$ o experimento acontece tão rápido que as moléculas do polímero não têm tempo de mudar de configuração e o comportamento do fluido é mais ou menos como o de um sólido de Hooke (BIRD *et al.*, 1987).

Tais números surgem naturalmente durante o procedimento de adimensionamento das equações constitutivas para fluidos viscoelásticos, da mesma forma que o número de Reynolds surge no adimensionamento das equações de conservação de quantidade de movimento, sendo definido pela expressão:

$$Re = \frac{\rho UL}{\eta} \quad 2.3$$

em que ρ representa a massa específica, U a velocidade, L um comprimento característico e η a viscosidade dinâmica à taxa de deformação característica do escoamento. Para valores baixos de números de Reynolds o escoamento é classificado como laminar e para valores elevados o escoamento é classificado como turbulento.

Um parâmetro de fundamental importância é a viscosidade, que no caso de fluidos newtonianos é apenas função das variáveis de estado do processo, sendo definida como uma constante material. A viscosidade é capaz de relacionar o tensor tensão (por exemplo: τ_{xy}) ao tensor taxa de deformação do material (D_{xy}) segundo a expressão:

$$\tau_{xy} = 2\eta D_{xy} \quad 2.4$$

em que os índices x e y indicam as direções características do escoamento.

No caso de fluidos poliméricos não é possível relacionar as características do escoamento através de uma constante material, visto que as propriedades destes fluidos são funções de taxa de deformação, tempo, dentre outras. Neste caso são utilizadas funções materiais.

As funções materiais para fluidos poliméricos são classificadas de acordo com o tipo de escoamento e são denominadas funções materiais para escoamentos por cisalhamento e funções materiais para escoamentos livres de cisalhamento. Escoamentos por cisalhamento são encontrados em muitas operações de processamento de polímeros, tal como moldagem por injeção e extrusão. Também estão sujeitos a cisalhamento polímeros fundidos e soluções poliméricas escoando em dutos utilizados em aplicações de lubrificação. Escoamentos livres de cisalhamento também são encontrados em muitas aplicações industriais como é o caso da termoformagem a vácuo e estiramento de fibras (BIRD *et al.*, 1987).

Supondo que o tensor tensão depende apenas do campo de escoamento é possível relacionar a tensão no estado estacionário com a taxa de deformação, em que a viscosidade (η), também conhecida como viscosidade não newtoniana ou viscosidade dependente da taxa de deformação, é definida analogamente à viscosidade de fluidos newtonianos.

$$\tau_{xy} = 2\eta(\mathbf{D})D_{xy} \quad 2.5$$

Da mesma forma é possível definir os coeficientes de tensão normal Ψ_1 e Ψ_2 , segundo a expressão:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} - \tau_{yy} &= \Psi_1(\mathbf{D})D_{xy}^2 \\ \tau_{yy} - \tau_{zz} &= \Psi_2(\mathbf{D})D_{xy}^2 \end{aligned} \quad 2.6$$

As funções Ψ_1 e Ψ_2 são conhecidas como primeira e segundo coeficientes das tensões normais. O conjunto η , Ψ_1 e Ψ_2 são comumente referenciados como funções viscométricas. Experimentalmente, dentre as funções viscométricas, a viscosidade é a que pode mais facilmente ser obtida. A função Ψ_1 é para a maioria dos casos positiva e apresenta frequentemente uma maior taxa de declínio com relação à taxa de deformação do que a viscosidade. A função Ψ_2 é comumente negativa e mais difícil de ser medida

experimentalmente não sendo tão frequentemente estudada como η e Ψ_1 . O ponto importante a se ressaltar sobre esta função é que sua magnitude é muito menor que Ψ_1 , usualmente cerca de 10% (BIRD *et al.*, 1987).

No caso de escoamento livres de cisalhamento também é possível definir funções materiais. Supondo que o fluido seja isotrópico, a tensão e a função material para um escoamento livre de cisalhamento dependem da taxa de alongação ($\dot{\epsilon}$) e de um parâmetro (b) que define o tipo do escoamento. Uma taxa de alongação positiva ($\dot{\epsilon} > 0$) representa um escoamento alongacional e uma taxa de alongação negativa ($\dot{\epsilon} < 0$) representa uma compressão biaxial. Para um escoamento estacionário são definidas duas funções de viscosidade $\bar{\eta}_1$ e $\bar{\eta}_2$ que são relacionadas às diferenças das tensões normais, segundo as expressões abaixo (BIRD *et al.*, 1987):

$$\begin{aligned}\tau_{xx} - \tau_{yy} &= \bar{\eta}_1 \left(\dot{\epsilon}, b \right) \dot{\epsilon} \\ \tau_{yy} - \tau_{zz} &= \bar{\eta}_2 \left(\dot{\epsilon}, b \right) \dot{\epsilon}\end{aligned}\tag{2.7}$$

Uma situação especial ocorre quando o valor do parâmetro b é especificado como nulo. Neste caso obtêm-se $\bar{\eta}_2 = 0$ e $\bar{\eta}_1 = \bar{\eta}$, que recebe o nome de viscosidade alongacional, algumas vezes também chamada de viscosidade de Trouton ou viscosidade extensional.

A suposição de que o tensor tensão é simétrico implica que não existe troca entre o momento macroscópico e molecular. Não existem experimentos realizados em líquidos poliméricos para medir a assimetria do tensor das tensões. Quase todas as teorias cinéticas de líquidos poliméricos formulam um tensor de tensões simétrico, nos poucos casos em que uma contribuição assimétrica aparece, é considerada como desprezível (BIRD e WIEST, 1995).

Como já destacado inúmeras vezes ao longo deste texto, fluidos viscoelásticos possuem um comportamento reológico bastante diferente dos fluidos newtonianos, especialmente no que diz respeito a como representar adequadamente o tensor tensão em termos das variáveis do modelo. A escolha da equação constitutiva é de fundamental

importância para o sucesso do modelo, no próximo item será apresentada uma breve descrição das principais equações constitutivas aplicadas a fluidos viscoelásticos.

2.3. Equações Constitutivas para Fluidos Viscoelásticos

As propriedades reológicas de soluções poliméricas diluídas (massa molar, rigidez e ramificação da cadeia e distribuição de carga elétrica) são dependentes da arquitetura das moléculas constituintes. As interações entre soluto-solvente podem desempenhar um papel importante no movimento do polímero e afetar seu comportamento macroscópico. A maioria dos líquidos poliméricos é composta de moléculas com diferentes comprimentos, ou seja, apresentam uma distribuição de massas molares, e esta "polidispersão" afeta fortemente as propriedades reológicas e, portanto, o comportamento do fluido. Para as regiões de fronteiras próximas à interface fluido-sólido as moléculas de polímero são limitadas em seus movimentos e, como resultado, surgem os efeitos de parede que incluem os efeitos da segregação de soluto e os efeitos do deslizamento.

A escolha de uma equação constitutiva depende basicamente da sua aplicação. Por exemplo, para realizar estimativas em problemas industriais no qual o escoamento é estacionário por cisalhamento (ou que pode ser aproximado por isso), pode-se utilizar o "modelo de fluido newtoniano generalizado", que é simples, útil e eficaz em muitos casos. Já para caracterização de líquidos poliméricos e escoamentos que dependem do tempo, outros modelos precisam ser aplicados.

Existe um número elevado de relações possíveis que podem ser utilizadas para relacionar o tensor tensão aos tensores cinemáticos, e há também um número grande de tensores cinemáticos (tensor tensão, tensor taxa de deformação, *etc.*) que podem ser usados.

Então, com a finalidade de estreitar o campo de possíveis relações arbitrárias e impor algumas "condições de admissibilidade", Oldroyd em 1950 propôs, para escoamentos incompressíveis, as seguintes considerações restritivas aos modelos: (a) a forma do modelo deve ser independente do sistema de coordenadas, (b) o valor retornado pelo modelo deve ser independente de movimentos de translação ou rotação do corpo rígido de um elemento fluido que se move através do espaço e (c) o valor retornado pelo modelo deve independe do histórico reológico dos elementos de fluido vizinhos. As condições de admissibilidade de Oldroyd forneceram as diretrizes para a construção de

equações constitutivas desde 1950. A maioria das teorias moleculares tem formulado equações constitutivas que estão em concordância com as condições de Oldroyd, sendo esta a primeira abordagem utilizada para desenvolvimento de uma equação constitutiva: Uma expressão segundo os critérios de admissibilidade Oldroyd é formulada e testada com dados experimentais e termos adicionais podem ser incluídos até que uma concordância razoável com estes dados seja obtida (BIRD e WIEST, 1995).

Uma segunda abordagem para o desenvolvimento de equações constitutivas é a utilização de expansões matemáticas. Pode-se, por exemplo, expandir o tensor de tensões em algo como uma série de Taylor, a fim de representar os pequenos desvios de comportamento newtoniano. No entanto, esta metodologia não apresenta aplicações em escoamento industriais, porque a série converge muito lentamente.

Outra abordagem usa a teoria molecular. Esta teoria consiste em representar as moléculas de polímero usando algum tipo de modelo mecânico, geralmente "esfera" e "mola" unidas de tal modo a refletir a arquitetura das moléculas. Desta forma, pode-se simular a orientação e alongamento dos polímeros e também prever o grande número de configurações que a molécula pode assumir. Exceto para alguns modelos muito simples, é necessário a realização de aproximações matemáticas para obtenção de equações constitutivas da teoria molecular.

Por fim também é possível utilizar a termodinâmica dos processos irreversíveis. Basicamente isso implica em estabelecer um novo quadro, com novo conjunto de postulados incorporando conceitos de mecânica do contínuo e da mecânica estatística na formulação do modelo.

Existem vários livros publicados com enfoque em equações constitutivas, reologia e solução de problemas de escoamento polimérico em dinâmica de fluidos. Dentre estes, merecem destaque os livros de BIRD *et al.* (1987), SHAW e MACKNIGHT (2005), LARSON (1988), de onde foi retirada grande parte dos conceitos básicos apresentados neste trabalho.

A seguir são apresentados diferentes grupos de equações constitutivas para fluidos poliméricos, descrevendo para cada um deles suas principais características e seu equacionamento.

2.3.1. Fluido Newtoniano Generalizado (FNG)

O modelo FNG é uma generalização do modelo de fluido newtoniano, sendo a viscosidade definida como uma função da taxa de deformação, segundo a expressão:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\boldsymbol{\eta}(\dot{\gamma})\mathbf{D} \quad 2.8$$

em que a viscosidade η é função de $\dot{\gamma}$ é o segundo invariante do tensor taxa de deformação \mathbf{D} , definida por:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \sum_i \sum_j D_{ij} D_{ji}} = \sqrt{\frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbf{D}} \quad 2.9$$

É importante salientar que este modelo não possui a capacidade de prever os efeitos elásticos e sua aplicação é apenas indicada para escoamentos estacionários por cisalhamento puro com taxas de deformação elevadas.

Os modelos utilizados para descrever a viscosidade não newtoniana são empíricos. O modelo mais simples e mais conhecido na literatura que relaciona a viscosidade com a taxa da deformação é a lei da potência (BIRD *et al.*, 1987), dada por:

$$\eta = m\dot{\gamma}^{n-1} \quad 2.10$$

em que m e n são parâmetros relacionados ao fluido. Devido a sua simplicidade é possível obter a solução analítica para uma grande variedade de escoamento no qual este modelo é utilizado.

Outro modelo bastante utilizado é o de Carreau-Yasuda, este modelo apresenta cinco parâmetros e tem flexibilidade suficiente para descrever a viscosidade para uma ampla faixa de taxa de deformação (BIRD *et al.*, 1987), sendo representado pela expressão:

$$\frac{\eta - \eta_\infty}{\eta_0 - \eta_\infty} = \left[1 + (\lambda\dot{\gamma})^a \right]^{\frac{n-1}{a}} \quad 2.11$$

em que η_0 representa a viscosidade a baixas deformações, η_∞ a viscosidade a altas taxas de deformação, λ é uma constante de tempo, n e a são parâmetros diretamente relacionados ao fluido.

O modelo de fluido newtoniano generalizado tem a deficiência de não prever o efeito elástico que é característico de fluidos viscoelásticos. Tais modelos são apenas válidos para escoamento estacionário por cisalhamento puro e com taxas de deformação elevada e ainda dependem da equação utilizada para viscosidade. Entretanto, mesmo com estas limitações, este modelo é muito utilizado em aplicações industriais, como por exemplo, nos processos de extrusão e injeção.

2.3.2. *Fluido Viscoelástico Linear*

O modelo de fluido viscoelástico linear é o modelo mais simples capaz de contemplar em sua formulação o caráter viscoso e elástico.

O Modelo de Maxwell foi a primeira equação desenvolvida para descrever o comportamento viscoelástico linear. Esta equação é formulada como uma combinação das equações de Hooke para sólido elástico e de Newton para a viscosidade, apresentando relações lineares entre tensão e taxa de deformação. Abaixo é apresentado o modelo de Maxwell utilizando a formulação multimodo:

$$\boldsymbol{\tau}_k + \lambda_k \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_k}{\partial t} = 2\eta_k \mathbf{D} \quad 2.12$$

em que N representa o número de modos de relaxação, λ_k o tempo de relaxação e η_k a viscosidade polimérica a taxa de deformação nula para cada um dos modos de relaxação utilizados. Quando o tempo de relaxação for nulo, $\lambda_k = 0$, o modelo de Maxwell transforma-se na lei de Newton para viscosidade.

A aplicação deste modelo é apenas válida em regiões em que a viscoelasticidade apresenta comportamento linear o que é aparentemente pouco comum em aplicações de engenharia. A importância do estudo deste tipo de modelo é que o mesmo serve como ponto de partida para a formulação dos modelos viscoelásticos não lineares. Alguns modelos não lineares são generalizações do modelo linear, buscando acrescentar uma melhor predição do fenômeno físico de natureza não linear, como quando a viscosidade depende da taxa de deformação e quando ocorrem diferenças das tensões normais (BIRD *et al.*, 2004).

2.3.3. *Fluido Viscoelástico Não Linear – Modelos Diferenciais*

Comparado aos modelos apresentados anteriormente, os modelos de fluidos viscoelásticos são bem mais complexos. Foram desenvolvidos principalmente por

físicos e matemáticos aplicados interessados em estabelecer uma teoria que fosse comum a todos os fluidos (BIRD *et al.*, 2004). Tais modelos são capazes de descrever a viscosidade não newtoniana, a diferença de tensões normais ao longo do escoamento e os efeitos elásticos.

Do ponto de vista matemático, modelos para fluidos viscoelásticos não lineares podem ser enquadrados em dois grupos: modelos diferenciais, descritos através de equações diferenciais e de modelos integrais, representados por equações integrais.

Os modelos diferenciais para fluido viscoelástico não linear podem ser obtidos através do modelo para fluido viscoelástico linear, na sua forma diferencial, substituindo as derivadas em relação ao tempo pela derivada convectiva no tempo (LARSON, 1988).

A derivada convectiva no tempo do tensor tensão pode ser representada de duas formas distintas, sendo a primeira desta denominada derivada convectiva superior, dada pela Equação 2.13, em que os vetores de base são paralelos às linhas materiais.

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - [\nabla\mathbf{U}^T \cdot \boldsymbol{\tau}] - [\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla\mathbf{U}] \quad 2.13$$

A outra formulação denominada derivada convectiva inferior, em que os vetores de base são normais às linhas materiais e é representada pela expressão:

$$\overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - [\nabla\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\tau}] - [\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla\mathbf{U}^T] \quad 2.14$$

em que a derivada $\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt}$ representa a derivada material dada pela expressão:

$$\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} \quad 2.15$$

As definições destas derivadas supõem que as tensões são produzidas somente quando há deformação do material, sem levar em consideração rotações (BIRD *et al.*, 1987).

Na obtenção do modelo diferencial não linear além da utilização da derivada convectiva no tempo, também podem ser incluídos termos não lineares e parâmetros nas equações.

Diferente dos modelos lineares, os modelos não lineares não estão limitados aos casos em que ocorrem pequenas deformações, sendo modelos mais realistas que permitem obter informações qualitativas mais consistentes dos efeitos viscoelásticos em situações reais de escoamentos.

A teoria de molécula individual foi originalmente desenvolvida para descrever as moléculas de polímeros em uma solução muito diluída, em que interações polímero-polímero são pouco frequentes. Nesta teoria, a molécula é usualmente representada por meio de um modelo esfera-mola, uma série de esferas conectada por molas lineares e não lineares de modo a representar a arquitetura molecular. Então, da teoria cinética é possível obter a “função de distribuição” para orientação das moléculas e uma vez conhecida esta função é possível calcular várias propriedades macroscópicas. No caso de soluções concentradas e polímeros fundidos, o movimento de uma molécula deve ser avaliado considerando-se sua proximidade com as moléculas vizinhas. Desta forma, é mais fácil para as “esferas” do modelo se mover em direção da “coluna vertebral” da cadeia polimérica do que perpendicularmente à mesma, executando um movimento semelhante ao de uma cobra, denominado “reptiliano” de onde é baseada a teoria da reptação (BIRD *et al.*, 2004).

Os modelos diferenciais mais conhecidos e simples, capazes de combinar os efeitos do tempo e das não linearidades, são os modelos UCM e LCM. Tais modelos são obtidos pela generalização do modelo de Maxwell. Dependendo do tipo da derivada convectiva no tempo do tensor tensão utilizada, temos o modelo de UCM (derivada convectiva superior), Equação 2.16, ou LCM (derivada convectiva inferior), Equação 2.17.

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta\mathbf{D} \quad 2.16$$

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta\mathbf{D} \quad 2.17$$

Avaliando as Equações 2.16 e 2.17 aparentemente não existe razão para optar por uma ou outra formulação. Entretanto, quando são avaliados os coeficientes de tensão normal, observa-se que no caso do modelo LCM a diferença entre o segundo coeficiente da tensão normal, $N_1 = \tau_{yy} - \tau_{zz}$, tem a mesma magnitude do primeiro coeficiente da tensão normal, $N_2 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$, mas de sinal oposto. Assim, a magnitude

de $N_1/N_2 = -1$, ao passo que os dados experimentais mostram que $N_1/N_2 \approx -1/10$. Devido a este fato, este modelo não é utilizado sendo normalmente apresentado apenas por razões históricas (LARSON, 1988).

O modelo UCM é muito usado para testar metodologias numéricas, já que a ausência da viscosidade do solvente no modelo torna mais crítica a estabilidade numérica do problema.

O modelo de Oldroyd deriva da teoria de molécula individual para soluções poliméricas concentradas e polímeros fundidos. Neste modelo, a cadeia polimérica é representada por um conjunto de duas esferas unidas por uma mola, em que as esferas estão relacionadas com a interação hidrodinâmica entre o solvente e as macromoléculas da solução polimérica. Ou seja, a força de arrasto viscoso do solvente sobre as macromoléculas. As molas representam o efeito elástico que o polímero apresenta.

Apesar do fato deste modelo ter sido proposto há mais que 50 anos, o modelo proposto por Oldroyd (1958) ainda vem sendo utilizado. É uma expressão empírica que apresenta relação linear do tensor tensão e contém todos os termos dos gradientes de velocidade e todos os produtos admissíveis de tensões e gradientes de velocidade. Este modelo apresenta resultados qualitativamente corretos em uma ampla variedade de situações de fluxo, por isso, sua utilização tem sido muito popular para a avaliação de técnicas numéricas para dinâmica de fluidos não newtonianos (BIRD e WIEST, 1995).

Novamente, dependendo do tipo da derivada convectiva no tempo do tensor tensão utilizada, temos o modelo de Oldroyd-B (derivada convectiva superior), Equação 2.18 ou Oldroyd-A (derivada convectiva inferior), Equação 2.19.

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta \left(\mathbf{D} + \lambda_r \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad 2.18$$

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta \left(\mathbf{D} + \lambda_r \overset{\Delta}{\mathbf{D}} \right) \quad 2.19$$

A equação Oldroyd-A também não é utilizada, pelos mesmos motivos que modelo LCM.

A equação de Oldroyd-B pode ser reescrita, segundo a expressão:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_p + \boldsymbol{\tau}_s \quad 2.20$$

em que $\boldsymbol{\tau}_p$ é a tensão polimérica que satisfaz à equação UCM:

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2\eta_p \mathbf{D} \quad 2.21$$

e $\boldsymbol{\tau}_s$ é a tensão do solvente que representa a contribuição newtoniana descrita através da expressão:

$$\boldsymbol{\tau}_s = 2\eta_s \mathbf{D} \quad 2.22$$

Relacionando os termos η e λ_r presentes na Equação 2.18 com os termos η_p , η_s e λ presentes nas Equações 2.21 e 2.22, obtém-se:

$$\lambda_r = \frac{\eta_s \lambda}{\eta_p + \eta_s} \quad 2.23$$

$$\eta = \eta_p + \eta_s \quad 2.24$$

Assim sendo, quando se despreza a contribuição do solvente no modelo de Oldroyd-B, que é equivalente a supor a viscosidade do solvente como sendo nula, tem-se diretamente o UCM.

Para que uma melhor representação do comportamento real do fluido possa ser obtida existe uma classe de modelos similares ao modelo UCM e ao modelo de Oldroyd-B, que consideram a viscosidade polimérica e o tempo de relaxação como funções da taxa de deformação, como é o caso do modelo de White-Metzner que é uma modificação do modelo UCM, definido pela expressão:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda(\dot{\gamma}) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta(\dot{\gamma}) \mathbf{D} \quad 2.25$$

A vantagem deste modelo é ser simples e prever razoavelmente a dependência da viscosidade com a taxa de deformação e o primeiro coeficiente de tensões normais. Não sendo recomendado para escoamento livres de cisalhamento, já que a viscosidade elongacional pode tender ao infinito (BIRD *et al.*, 1987).

Existe na literatura uma vasta quantidade de funções que permitem relacionar a viscosidade polimérica e o tempo de relaxação com a taxa de deformação, como é caso dos modelos Larson, Cross e Carreau-Yasuda. Maiores detalhes podem ser obtidos em BIRD *et al.*, (1987); LARSON (1988); SHAW e MACKNIGHT (2005).

Outro modelo bem conhecido, capaz de fazer boas predições, é o modelo de Giesekus (1982) que também é baseado no modelo esfera/mola de Maxwell, só que diferente dos modelos anteriores, este modelo leva em consideração a não isotropia no movimento e no arraste hidrodinâmico das moléculas do polímero no meio.

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p - \alpha \frac{\lambda}{\eta_p} [\boldsymbol{\tau}_p \cdot \boldsymbol{\tau}_p] = 2\eta_p (\dot{\boldsymbol{\gamma}}) \mathbf{D} \quad 2.26$$

A inclusão do termo não linear produz uma variação das propriedades cisalhantes frente à taxa de deformação fazendo com que este modelo apresente melhores resultados quando comparado ao modelo de Oldroyd-B para escoamento por cisalhamento, mas não apresenta bons resultados para escoamentos livres de cisalhamento (BIRD *et al.*, 1987).

O modelo de mola linear considera que a macromolécula pode se deformar indefinidamente sem qualquer restrição. Visando superar esta limitação, muitos modelos constitutivos passaram a ter como base descrições de molas não lineares em que uma restrição de deformação máxima (L^2) é imposta. Tais modelos são conhecidos como FENE – *Finitely Extensible Nonlinear Elastic*, apresentando diversas derivações como é o caso do Modelo FENE-P – *Finitely Extensible Nonlinear Elastic Peterlin* (BIRD *et al.*, 1987), descrito pela expressão:

$$\left(\frac{\frac{3}{1 - \frac{3}{L^2}} + \frac{\lambda}{\eta_p} tr(\boldsymbol{\tau}_p)}{L^2} \right) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2 \frac{1}{\left(1 - \frac{3}{L^2}\right)} \eta_p \mathbf{D} \quad 2.27$$

em que $tr(\boldsymbol{\tau}_p)$ representa o traço do tensor tensão. Para o caso limite quando L^2 tende ao infinito, este modelo é reduzido ao modelo de Oldroyd-B.

A teoria de redes foi originalmente desenvolvida para descrever as propriedades mecânicas da borracha e estendidas para descrever polímeros fundidos e soluções

concentradas, postulando uma rede em contínua mutação na qual os pontos de junção são temporários, formado por segmentos adjacentes que se movem juntos por um determinado tempo e então gradualmente se afastam. Nesta teoria é necessário adotar algumas premissas empíricas sobre as taxas de formação e ruptura destas junções (BIRD *et al.*, 2004).

O modelo de PTT - *Phan-Thien-Tanner* é um modelo muito utilizado em simulações numéricas. Este modelo é obtido através da teoria de rede de soluções concentradas e polímeros fundidos (BIRD *et al.*, 1987). A sua forma simplificada SPTT – *Simplified-Phan-Thien-Tanner*, que é a mais utilizada, é representada pela equação:

$$\left(1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_p)\right) \boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2\eta_p \mathbf{D} \quad 2.28$$

Este modelo traz bons resultados para uma grande variedade de escoamentos, entretanto, em alguns casos podem ocorrer soluções inconsistentes e, no caso simplificado, pode prever valores nulos da segunda diferença das tensões normais.

O modelo de *Pom-Pom* tem como base a teoria da reptação. Com esse modelo, um comportamento não linear consistente é alcançado tanto para fluxos elongacionais como cisalhantes. A interação de uma cadeia com a cadeia vizinha é modelada como um conjunto de obstáculos (entrelaçamentos) ao movimento de difusão. O entrelaçamento entre as cadeias é correlacionado através de uma distância (α), com valores pequenos de α o movimento entre as cadeias está correlacionado, caso contrário não. A difusão da cadeia ocorre em “tubos” definidos pelos entrelaçamentos com o restante das cadeias, cada “tubo” é uma cadeia (“cadeia primitiva”) constituída por Z segmentos primitivos.

O modelo *Pom-Pom* consiste de duas equações desacopladas: uma para orientação e outra para o estiramento:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{O}}_p + 2[\mathbf{D} : \mathbf{O}_p] \mathbf{O}_p + \frac{1}{\lambda_o} \left[\mathbf{O}_p - \frac{1}{3} \delta \right] = 0 \quad 2.29$$

$$\frac{D(\mathbf{E}_p)}{Dt} = \mathbf{E}_p [\mathbf{D} : \mathbf{O}_p] + \frac{1}{\lambda_E} [\mathbf{E}_p - 1] = 0 \quad 2.30$$

$$\lambda_M = \lambda_O \exp\left(-\frac{2}{q}(\mathbf{E}_p - 1)\right) \quad \forall \mathbf{E}_p \leq q$$

$$\tau_p = \frac{\eta_p}{\lambda_O} \exp(3 \mathbf{E}_p^2 \mathbf{O}_p - \delta) \quad 2.31$$

A Equação 2.29 é a equação que descreve o tensor orientação \mathbf{O}_p , a Equação 2.30 é a equação para o estiramento dorsal da molécula \mathbf{E}_p e representa a razão entre o comprimento do tubo e o comprimento de equilíbrio e a Equação 2.31 retorna o valor da tensão viscoelástica. λ_O é o tempo de relaxação para orientação da espinha dorsal do tubo sendo obtido através do espectro linear de relaxação através de medidas dinâmicas, λ_M é o tempo de relaxação para o estiramento e q é a quantidade de ramos existentes desde o começo até o fim da espinha dorsal do tubo e representa a influência do meio sobre o tubo.

Entretanto, o modelo original de *Pom-Pom* apresenta algumas limitações: solução descontínua quando submetida a altas taxas de deformação no estado estacionário, a equação evolutiva para o tensor orientação não apresenta limites quando submetida a taxas altas de alongação, já que é do tipo UCM e não prediz a segunda diferença entre as tensões normais.

Devido a estas desvantagens, reformulações do modelo original de *Pom-Pom* foram elaboradas, sendo as mais comumente utilizadas, *single equation extended Pom-Pom – SXPP* e *double equation extended Pom-Pom – DXPP*.

Uma descrição mais detalhada dos modelos para fluidos viscoelásticos não lineares pode ser encontrada em FERRY (1980), BIRD *et al.*, (1987), LARSON (1988) e SHAW e MACKNIGHT (2005).

Da análise da literatura pode-se observar que os modelos diferenciais não descrevem muito bem a viscoelasticidade linear, mesmo sendo este o ponto de partida no desenvolvimento destes modelos. Tal fato ocorre porque este modelo tem apenas um tempo de relaxação. Esta deficiência pode ser contornada formulando as expressões em forma integral, incluindo mais que uma constante de tempo. Outra forma de contornar

esta limitação é utilizar a formulação multimodo representando a tensão como a soma das contribuições de cada modo. Entretanto, é importante lembrar que a utilização desta formulação aumenta consideravelmente o número de equações a serem resolvidas.

2.3.4. Fluido Viscoelástico Não Linear – Modelos Integrais

Os modelos integrais, assim como os diferenciais, são obtidos a partir de modificações do modelo linear e são descritos na forma de uma equação integral.

A fórmula geral para modelos integrais “quase lineares”, que são modelos obtidos através de uma modificação do modelo linear, é descrita pela expressão:

$$\boldsymbol{\tau} = \int_{-\infty}^t M(t-t') \boldsymbol{\gamma}_{[0]}(t, t') dt' \quad 2.32$$

em que $M(t-t')$ é a função de memória, t' é um instante de tempo anterior a t e $\boldsymbol{\gamma}_{[0]}(t, t')$ representa o tensor de deformação relativa, definido em BIRD *et al.* (1987) pela expressão:

$$\gamma_{[0] i, j}(\boldsymbol{r}, t, t') = \delta_{ij} - \sum_m \frac{\partial x_i}{\partial x'_m} \frac{\partial x_j}{\partial x'_m} \quad 2.33$$

$$\gamma_{i, j}^{[0]}(\boldsymbol{r}, t, t') = \sum_m \frac{\partial x'_m}{\partial x_i} \frac{\partial x'_m}{\partial x_j} - \delta_{ij} \quad 2.34$$

em que $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(x, y, z)$ define a posição de uma partícula de fluido em um tempo t e δ_{ij} é o operador delta de Kroenecker.

A função de memória é característica de cada um dos tipos de modelos, um exemplo de função de memória é o modelo de Lodge, que é análogo ao modelo UCM na forma diferencial (BIRD *et al.*, 1987), descrito pela expressão:

$$M(t-t') = \frac{\eta_0}{\lambda^2} \exp\left(-\frac{t-t'}{\lambda}\right) \quad 2.35$$

Para obtenção dos modelos integrais não lineares, similar aos modelos diferenciais, são introduzidas não linearidades à Equação 2.32. Os termos normalmente acrescidos à equação são o produto do tensor de deformação relativa do tipo $\boldsymbol{\gamma}_{[0]} \boldsymbol{\gamma}_{[0]}$, ou de ordem superiores avaliados em diferentes tempos t', t'' (BIRD *et al.*, 1987).

Dois exemplos dos mais conhecidos, e do qual derivam diversos outros modelos, é o modelo de K-BKZ, Equação 2.36, que é obtido através de uma transformação da expressão geral de modelo não linear para o tensor tensão como um sólido elástico ideal, definido pela expressão.

$$\boldsymbol{\tau} = \int_{-\infty}^t \left[\frac{\partial V(t-t', I_1, I_2)}{\partial I_1} \boldsymbol{\gamma}_{[0]} + \frac{\partial V(t-t', I_1, I_2)}{\partial I_2} \boldsymbol{\gamma}^{[0]} \right] dt' \quad 2.36$$

E o modelo de *Rivlin-Sawyers*, Equação 2.37, que é formulado levando em consideração que o efeito da tensão na deformação do material no tempo t difere do efeito da tensão na deformação do material no tempo para t' de forma independente. Considerando esta hipótese, esta equação representa a equação mais geral para aplicação a fluidos isotrópicos. O modelo de *Rivlin-Sawyers* inclui diretamente o modelo K-BKZ.

$$\boldsymbol{\tau} = \int_{-\infty}^t [\psi_1(t-t', I_1, I_2) \boldsymbol{\gamma}_{[0]} + \psi_2(t-t', I_1, I_2) \boldsymbol{\gamma}^{[0]}] dt' \quad 2.37$$

em que V e Ψ_1 são funções escalares. Exemplos de possíveis combinações de I_1 e I_2 , para materiais incompressíveis pode ser encontrada em BIRD *et al.*, (1987).

Entretanto, poucos trabalhos utilizam diretamente as expressões dos modelos de *Rivlin-Sawyers* e K-BKZ apresentadas anteriormente, Equação 2.36 e 2.37. Sendo de costume introduzir uma hipótese adicional de que as funções escalares V e Ψ_1 podem ser descritas segundo as expressões

$$V(t-t', I_1, I_2) = M(t-t') \mathcal{W}(I_1, I_2) \quad 2.38$$

$$\psi_1(t-t', I_1, I_2) = M(t-t') \phi(I_1, I_2) \quad 2.39$$

Novamente $M(t-t')$ representa a função de memória. Com estas simplificações são obtidos os modelos mais comumente aplicados pela literatura o modelo de K-BKZ fatorizado e o modelo de *Rivlin-Sawyers* fatorizado descrito, respectivamente, pelas expressões:

$$\boldsymbol{\tau} = \int_{-\infty}^t \left[M(t-t') \frac{\partial W(I_1, I_2)}{\partial I_1} \boldsymbol{\gamma}_{[0]} + M(t-t') \frac{\partial W(I_1, I_2)}{\partial I_2} \boldsymbol{\gamma}^{[0]} \right] dt' \quad 2.40$$

$$\boldsymbol{\tau} = \int_{-\infty}^t \left[M(t-t') \phi(I_1, I_2) \boldsymbol{\gamma}_{[0]} + M(t-t') \phi(I_1, I_2) \boldsymbol{\gamma}^{[0]} \right] dt' \quad 2.41$$

Várias teorias são baseados nos modelos K-BKZ fatorizado e de *Rivlin-Sawyers* fatorizado, como por exemplo: a teoria de Rouse-Zimm, Curtiss-Bird, polímeros fundidos e a teoria de rede de Lodge (BIRD *et al.*, 1987).

Os modelos integrais para fluidos viscoelásticos não lineares incluem na sua formulação a viscoelasticidade linear e têm grande aplicação tanto na simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos como na determinação de funções materiais. Geralmente os resultados obtidos pela aplicação destes modelos apresentam resultados melhores que os resultados obtidos através de modelos diferenciais. Entretanto, do ponto de vista numérico, a solução de modelos integrais é mais difícil e demanda um esforço computacional maior (BIRD *et al.*, 1987).

2.3.5. Seleção da Equação Constitutiva

Nas seções anteriores foi apresentada uma descrição sobre os principais grupos de equações constitutivas utilizadas para descrever o comportamento reológico de fluidos não newtonianos. Pode-se observar que existe uma grande quantidade de equações constitutivas na literatura e que não existe, ainda, uma equação que seja capaz de descrever completamente o escoamento de fluidos viscoelásticos. O que existe atualmente são equações capazes de representar o comportamento de determinados fluidos em condições de escoamento específicas, não existindo assim uma equação multi-propósito. Normalmente quanto mais complexo for o modelo melhor será a qualidade dos resultados obtidos, implicando, no entanto, em maior esforço computacional necessário à resolução do problema.

Neste trabalho serão utilizados dois modelos: o modelo de Oldroyd-B e o modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado. Tais modelos foram escolhidos por serem amplamente aplicados na literatura em simulações de fluidos viscoelásticos e apresentam bons resultados. Estes modelos também apresentam na sua formulação as relações não lineares que mais comumente surgem entre os modelos diferenciais,

permitindo, assim, a extensão do procedimento para outros modelos de equações constitutivas de uma forma bastante simples e direta.

2.4. Principais Dificuldades Encontradas para Simulação

Há um crescente interesse no desenvolvimento de ferramentas numéricas para avaliar os fenômenos observados em experimentos que envolvem o escoamento de fluidos viscoelásticos. O desenvolvimento destas ferramentas é uma tarefa difícil e desafiadora visto que tais simulações são muito sensíveis a instabilidades numéricas. Diferente do escoamento de fluidos newtonianos, o escoamento de fluidos viscoelásticos apresenta uma série de características que dificultam a sua simulação. Dentre elas, a mudança da classificação do sistema de equações a ser resolvido, a imposição correta das condições de contorno, a técnica numérica aplicada à resolução do sistema discretizado, a solução de modelos transientes, a precisão do esquema utilizado na discretização espacial e a razão de refinamento da malha computacional.

A escolha da técnica a ser utilizada na resolução de equações diferenciais parciais são dependentes da classificação (elíptica, hiperbólica ou parabólica) da equação que se deseja resolver. Apesar do movimento de sólidos elásticos ser descrito pela equação de onda, que é uma equação hiperbólica, os fluidos newtonianos são governados por equações parabólicas. Fluidos viscoelásticos têm propriedades intermediárias e isso se reflete na natureza matemática das suas equações. Como no sistema de equações que descreve o escoamento de um fluido viscoelástico em estado estacionário há uma parte elíptica associada à condição de incompressibilidade, uma parte hiperbólica associado à propagação de informações ao longo das linhas de corrente e uma parte que pode mudar de classificação dependendo das condições com que o escoamento se propaga. E, em alguns casos, esta mudança de classificação está diretamente relacionada às dificuldades encontradas na simulação numérica (RENARDY, 1989; DENN, 1990).

A técnica usada para resolução de sistemas lineares em cada passo da iteração e a natureza das estimativas usadas para prover a convergência depende muito da classificação da equação. Enquanto que equações hiperbólicas propagam singularidades nos dados iniciais levando ao surgimento de “choques” na solução obtida, mesmo quando dados iniciais “suaves” são informados, os modelos descritos por equações parabólicas tendem a suavizar as singularidades. Assim sendo, as equações que regem materiais viscoelásticos abrangem todos estes espectros de possibilidades.

A primeira análise rigorosa da estabilidade linear do estado de repouso de fluidos viscoelásticos foi realizada por Slemrod (1976), mostrando que o estado de repouso é assintoticamente estável desde que a função de memória seja positiva e monotônica decrescente. Como fluidos viscoelásticos apresentam efeito de memória, ou seja, o fluxo dentro do domínio em questão é afetado por deformações que o fluido experimenta antes da sua entrada no domínio. As informações sobre a “história do escoamento” devem ser informadas sob a forma de condições de contorno na fronteira de ingresso. Como as equações constitutivas diferenciais permitem a formulação de problemas bem definidos para o valor de contorno e, até mesmo em alguns casos, a obtenção de soluções analíticas, tais modelos são muito populares em simulações numéricas (RENARDY, 1989).

Muitas equações constitutivas viscoelásticas apresentam uma resposta elástica instantânea. Esta noção de elasticidade instantânea decorre diretamente de um modelo de rede transitório para o líquido polimérico, o que é incompatível com a imagem habitual de uma solução diluída em que não há contato entre as cadeias poliméricas individuais. No modelo matemático a resposta elástica instantânea equivale a utilizar um tempo de relaxação nulo. Entretanto, modelos de equações constitutivas que não apresentam tempo de relaxação podem mudar de classificação e tornam-se hiperbólicos em determinadas regiões do escoamento. Mudanças deste tipo têm sido frequentemente identificadas como uma possível causa de dificuldades computacionais para simulação de líquidos viscoelásticos (DENN, 1990).

A aplicação do método de volumes finitos torna necessário que todos os valores das variáveis sejam especificados nos contornos. Algumas condições de contorno são diretamente informadas, como, por exemplo, uma condição de entrada para a velocidade (normalmente especificada através de um perfil parabólico) ou obtida através de extrapolações como é o caso da condição de simetria. Aplicar corretamente o conjunto de condições de contorno ao problema, especialmente as condições relacionadas ao tensor tensão é uma das principais dificuldades encontradas para a simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos (XIE e PASQUALI, 2004; FIÉTER e DEVILLE 2003; YAPICI *et al*, 2009). A necessidade de uma análise cuidadosa das condições de contorno é evidente, tendo em conta os termos convectivos presentes nas equações constitutivas. No caso de uma condição de entrada, é necessário conhecer a “história” deste campo de tensões. Na prática, as exigências de condição de contorno são muitas

vezes satisfeitas supondo "condições de escoamento completamente desenvolvido". Entretanto, quando We for de valor elevado torna-se necessário utilizar um domínio de entrada suficientemente grande para que a condição seja válida (CROCHET, 1983).

2.4.1. Implementação das Condições de Contorno

Segundo XIE e PASQUALI (2004) a equação constitutiva é normalmente uma equação hiperbólica, assim, as condições de contorno são apenas necessárias nos contornos de entrada e devem informar o estado de entrada do líquido o mais preciso possível. Além disto, todos os componentes do tensor tensão devem ser especificados. Uma prática comum relatada em muitos trabalhos é a utilização de condições de Dirichlet para a velocidade em todos os contornos do domínio e para o tensor tensão no contorno de entrada. São frequentemente utilizadas condições de contornos abertas que, em geral, estão localizadas em regiões de escoamento completamente desenvolvidas, embora sua presença não seja ditada pela física do problema, mas sim pela necessidade de truncamento do domínio computacional. Desta forma, a localização de tais condições de contorno e as imposições das condições de entrada razoáveis têm sido um importante desafio para mecânica de fluidos não newtonianos. Segundo estes autores seis métodos podem ser utilizados para solucionar o problema da imposição das condições de contorno na entrada para o tensor tensão. Com a finalidade de ilustrar a aplicação de cada um destes métodos, será considerado o escoamento bi-dimensional de Poiseuille entre placas planas paralelas utilizando o modelo de Oldroyd-B, na forma descrita por FIÉTER e DEVILLE (2003) representado ilustrativamente pela Figura 2.1 e descrito matematicamente pelo conjunto de Equações 2.42, 2.43 e 2.44.

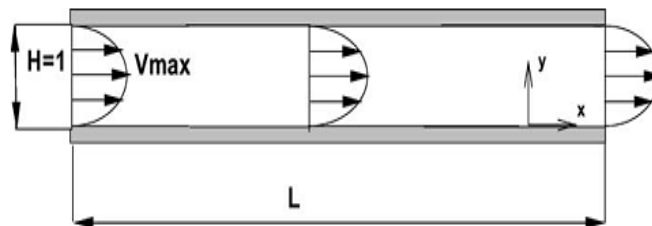


Figura 2.1: Representação ilustrativa do escoamento de Poiseuille entre placas (FIÉTER e DEVILLE, 2003).

Equação da continuidade:

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}) = 0 \tag{2.42}$$

Equações da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad 2.43$$

Equações constitutivas:

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_p = 2\eta_p \mathbf{D} \quad 2.44$$

em que:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_N + \boldsymbol{\tau}_p$$

$$\boldsymbol{\tau}_N = 2\eta_N \mathbf{D}$$

ρ é a massa específica, \mathbf{U} é o vetor velocidade, p é a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor das tensões, $\boldsymbol{\tau}_N$ representa a contribuição newtoniana, normalmente o solvente, e $\boldsymbol{\tau}_p$ a contribuição polimérica.

Imposição da Solução Analítica do tensor tensão:

Este procedimento (M1) impõem a solução analítica do tensor tensão como condição de entrada. A solução analítica para a entrada do escoamento bi-dimensional de Poiseuille em estado estacionário apresentadas em FIÉTIER e DEVILLE (2003) é representada pelo seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} \tau_{xx}(x, y) &= 32 V_{\max}^2 We (1 - \eta_p)(1 - y)^2 \\ \tau_{yy}(x, y) &= 0 \\ \tau_{xy}(x, y) &= 4 V_{\max} (1 - \eta_p)(1 - y) \end{aligned} \quad 2.45$$

Onde

$$V_{\max} = -\frac{1}{8} \frac{\partial p}{\partial x}$$

Assim sendo, a aplicação desta metodologia consiste em atribuir como condição de entrada para os componentes do tensor tensão os valores definidos na Equação 2.45.

A aplicação desta metodologia é sempre a melhor escolha, desde que uma expressão analítica possa ser obtida, o que não é o caso para muitos modelos constitutivos e também para escoamentos tridimensionais.

Imposição de Soluções Periódicas:

Esta metodologia (M2) consiste em alimentar periodicamente como condição de entrada os valores do tensor tensão tomados em uma região suficientemente distante da entrada, normalmente na saída da placa. Neste caso, a condição de entrada para o tensor tensão em um tempo $t+\Delta t$ é especificada como sendo a solução obtida na saída da placa no tempo anterior t , ou seja:

$$\begin{aligned}\tau_{xx}(x_i, y)^{(t+\Delta t)} &= \tau_{xx}(x_f, y)^{(t)} \\ \tau_{yy}(x_i, y)^{(t+\Delta t)} &= \tau_{yy}(x_f, y)^{(t)} \\ \tau_{xy}(x_i, y)^{(t+\Delta t)} &= \tau_{xy}(x_f, y)^{(t)}\end{aligned}\tag{2.46}$$

Como a aplicação desta metodologia não leva em consideração qualquer especificidade das equações constitutivas que compõem o modelo do problema, este método pode ser aplicado a qualquer modelo.

Imposição da condição $\mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} = 0$:

A aplicação deste procedimento (M3) impõe diretamente a condição $\mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} = 0$ na entrada. Como no caso do escoamento de Poiseuille entre placas, o componente de velocidade v_y é nulo, a aplicação deste procedimento resulta que o tensor tensão não apresenta qualquer variação em relação a x na entrada, ou seja:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}[\tau_{xx}(x, y)] &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial x}[\tau_{yy}(x, y)] &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial x}[\tau_{xy}(x, y)] &= 0\end{aligned}\tag{2.47}$$

Este procedimento também pode ser aplicado a qualquer conjunto de equações constitutivas e consiste basicamente em extrapolar os valores do tensor tensão na entrada de forma a satisfazer às condições impostas na Equação 2.47. A fórmula de extrapolação mais simples consiste em igualar diretamente o valor da variável no contorno ao valor no centro do volume de controle mais próximo, também se pode

utilizar fórmulas de interpolações mais precisas desenvolvidas especificamente para o contorno, como as fórmulas de interpolação de Lagrange desenvolvidas neste trabalho.

Imposição de Condições de Contorno Arbitrárias:

A aplicação desta metodologia (M4) utiliza condições de contornos arbitrárias na entrada, deixando que o escoamento se desenvolva até que uma solução real do problema seja obtida. Uma estimativa bastante comum é considerar que na entrada o escoamento está livre de tensões, o que resulta em considerar que todos os componentes do tensor tensão são nulos.

$$\begin{aligned}\tau_{xx}(x,y) &= 0 \\ \tau_{yy}(x,y) &= 0 \\ \tau_{xy}(x,y) &= 0\end{aligned}\tag{2.48}$$

A aplicação deste método também não depende das equações constitutivas utilizadas, mas não funciona bem em problemas em que ocorrem refluxos e também requer um esforço computacional elevado, visto que o comprimento da placa deve ser suficientemente grande para que uma solução estabelecida possa ser encontrada.

Imposição de Soluções Periódicas Impondo à Condição $\mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} = 0$:

A aplicação deste procedimento (M5) consiste em impor como estimativa inicial para a tensão na entrada do escoamento a condição de contorno $\mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} = 0$, representada pelo conjunto de Equações 2.47 e realimentar periodicamente os valores obtidos na saída do escoamento como condições de entrada seguindo o procedimento apresentado na Equação 2.46.

Incorporação das Condições de Contorno ao Sistema de Equações:

A aplicação desta metodologia (M6) impõe a condição de escoamento estabelecido na equação constitutiva obtendo uma equação para o tensor tensão que é resolvida junto com equação da continuidade e as equações de conservação da quantidade de movimento.

A aplicação desta metodologia para o escoamento de Poiseuille entre placas gera o seguinte conjunto de equações para o tensor tensão na entrada que devem ser resolvidas junto com as demais equações que compõem o modelo.

$$\tau_{xx}(x, y) = 2We(1 - \eta_P) \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2$$

$$\tau_{yy}(x, y) = 0$$

$$\tau_{xy}(x, y) = (1 - \eta_P) \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)$$
2.49

Segundo XIE e PASQUALI (2004), o método que incorpora as condições de contorno ao sistema de equações apresenta os melhores resultados para todas as condições estudadas, como pode ser averiguado na Tabela 2.1. Entretanto, quando aplicada neste trabalho verificou-se que a utilização de tal metodologia apresentou, na grande maioria dos casos estudados, dificuldades de convergência. Sendo a metodologia M3 o procedimento escolhido para ser aplicado neste trabalho.

Tabela 2.1: Comparação entre metodologias para imposição de condições de contorno para escoamento de fluidos viscoelásticos (XIE e PASQUALI, 2004):

Método	Generalidade Equações	Aumento domínio	Malhas estruturadas	Escoamentos 3D	Fluxos desconhecidos	Refluxo
M1	F	E	E	F	E	E
M2	E	B	D	E	E	E
M3	E	B	F	E	E	E
M4	E	P	E	E	D	F
M5	E	E	D	E	F	F
M6	E	E	E	E	E	E

Excelente, Bom, Pobre, Falha, Difícil implementação.

Uma alternativa avaliada no trabalho de FIÉTIER e DEVILLE (2003) consiste em impor o mesmo tipo de condições de Dirichlet para o tensor tensão e para a velocidade em todos os contornos com exceção da fronteira de saída, em que as condições diretas são aplicadas. Ou seja, as integrais de superfície envolvidas na equação discretizada são avaliadas em função das incógnitas no contorno de saída (v , p e τ), juntamente com as integrais de volume. A resolução através desta estratégia apresentou resultados melhores em termos de precisão e convergência para maioria dos casos de estudo.

2.4.2. Relação entre o Refinamento da Malha e o Número de Weisenberg

KEILLER (1992) realizou uma investigação de instabilidades numéricas que ocorrem na simulação de escoamentos viscoelásticos transientes usando os modelos de

Maxwell com derivada convectiva superior, Oldroyd-B e FENE. Neste trabalho é apresentado um critério de instabilidade que relaciona o valor do número de Weissenberg ao refinamento da malha segundo a expressão: $We_{crit} = O(\Delta x/\Delta y)$ em que Δx e Δy são as escalas de refinamento da malha computacional. Assim, a limitação do número Weissenberg não é determinada pelo refinamento absoluto da malha, mas sim pela razão de refinamento da malha. Segundo os autores, um maior refinamento da malha na direção cruzada ao fluxo reduz a instabilidade da simulação. As instabilidades são menores para o modelo FENE, visto que esta equação prediz em geral valores de tensões normais muito menores. Esta parece ser uma provável razão física para esta instabilidade, embora uma análise detalhada dos termos da equação de Oldroyd-B e de Maxwell sugerir que a utilização da derivada convectiva superior também é importante. De qualquer forma, pode-se esperar que as equações constitutivas sem grandes tensões normais e alta advecção sejam mais passíveis de simulação numérica. Em um trabalho posterior, KEILLER (1993) observou o mesmo critério de limitação para We_{crit} , entretanto, uma reformulação proposta para as fórmulas de aproximação nos contornos foi capaz de melhorar a estabilidade do procedimento.

FIÉTIER e DEVILLE (2004) mostraram, através da aplicação do método espectral, que realmente existe uma relação entre a razão de refinamento da malha e a estabilidade do procedimento numérico. Segundo os autores, a limitação do número Weissenberg não é determinada pelo refinamento absoluto da malha, mas sim pelo refinamento relativo entre a direção longitudinal e a direção cruzada ao escoamento. Melhoras na estabilidade do procedimento podem ser obtidas aumentando o refinamento na direção cruzada ao escoamento. VAN OS e PHILLIPS (2004) aplicaram também o método espectral para o escoamento entre placas concluindo que ocorre uma diminuição do valor crítico do número Weissenberg quando o comprimento do canal for reduzido, ou o número de elementos no sentido longitudinal for maior. Tais relações de instabilidade foram também observadas por outros grupos como, por exemplo, no trabalho de SMITH *et al.* (2000) utilizando o método de elementos finitos. FIÉTIER e DEVILLE (2003) sugerem que este problema pode estar ocorrendo devido à implementação incorreta das condições de contorno. Embora a utilização da condição de contorno pseudoperiódica, definindo a velocidade na seção de entrada igual à velocidade na seção de saída no intervalo de tempo anterior, não apresentou nenhuma melhora quando comparada à aplicação da condição de Dirichlet.

DUARTE *et al.* (2008) estudaram a partida (“*start-up*”) de um escoamento entre placas paralelas, usando os modelos de UCM, Oldroyd-B, PTT e FENE. Neste trabalho, o escoamento dentre placas foi resolvido de forma unidimensional, as condições de contorno são re-alimentadas de forma periódicas fazendo com que os resultados não dependam do tamanho do domínio. Sendo assim, não foi possível obter uma relação que confirme a relação de estabilidade com a malha. No entanto, algumas simulações preliminares usando o domínio 2D, impondo perfis analíticos na entrada, sugerem que o critério de estabilidade proposto por KELLER (1992, 1993) é válido.

FIÉTIER e DEVILLE (2003) mostraram que a estabilidade da simulação pode ser melhorada através da utilização de malha adaptativa e aumentando a ordem de aproximação dos elementos polinomiais. Entre os parâmetros do fluido, a extensibilidade e a viscosidade têm uma forte influência sobre o número de Weissenberg crítico.

Nos trabalhos avaliados na literatura, verificou-se que a limitação imposta pelo número de Weissenberg não é determinada pelo refinamento absoluto da malha, mas sim por um refinamento relativo à direção cruzada ao fluxo e à direção longitudinal. Redução da instabilidade pode ser obtida aumentando o grau de refinamento na direção cruzada ao fluxo.

Segundo XUE *et al.* (2004), como fluidos viscoelásticos tem memória, qualquer problema de escoamento viscoelástico está mais diretamente relacionado com as derivadas temporais do que com as derivadas espaciais. Segundo os autores, é mais indicado resolver um escoamento viscoelástico como um problema de valor inicial, do que como um problema valor de contorno. No entanto, para cálculos de escoamentos transientes, a questão sobre a precisão na resolução temporal parece muito mais complexa quando comparada à precisão espacial, especialmente para a simulação de processos que nunca chegam a estados de equilíbrio estável. Segundo os autores, a propriedade de estabilidade numérica, inerente ao método de discretização temporal, pode ser comprometida devido às oscilações espaciais causadas pela combinação inadequada com os métodos de discretização espacial.

Para o caso transiente, FIÉTIER e DEVILLE (2003) mostraram que quando as soluções convergidas obtidas para simulações estacionárias de um escoamento de fluidos viscoelásticos são utilizadas como condições iniciais para problema transiente, existe um determinado valor do número Weissenberg acima do qual os erros relativos à

velocidade, pressão e componentes do tensor das tensões aumentam exponencialmente com o número de passos de integração.

Segundo DUARTE *et al.* (2008), o modelo de Oldroyd-B apresenta em sua formulação a contribuição newtoniana do solvente. Tal contribuição faz com que a velocidade de difusão seja infinita, inibindo a formação de ondas de choque e descontinuidades que são observadas quando o modelo UCM é aplicado. Esta estabilidade é uma consequência da introdução de alguma difusão física na equação de movimento através da viscosidade finita do solvente. No caso da aplicação do modelo PTT, a magnitude da velocidade durante situações de partida depende do parâmetro ε do modelo. Observa-se que sob o mesmo gradiente de pressão a velocidade média é maior para o fluido PTT quando maior for o valor do parâmetro ε . Observa-se também que quando o valor de ε aumenta e os valores de viscosidade extensional são muito reduzidos o modelo PTT apresenta resultados mais discrepantes do que os resultados do modelo UCM, representando melhor o comportamento do fluido. Para valores pequenos de ε as oscilações tornam-se mais acentuadas, embora a frequência dessas oscilações sejam mais fracas. Segundo os autores, descontinuidades na solução fazem com que o acúmulo de erro diminua a taxa de convergência do procedimento de discretização temporal podendo chegar a uma precisão de primeira ordem com relação ao tempo. Também segundo o autor, o aumento do efeito elástico faz com que oscilações com frequências e amplitudes muito mais altas sejam obtidas.

Para os modelos de Maxwell e Oldroyd, é possível a obtenção de uma solução analítica para os perfis transientes de velocidade e do tensor tensão. No entanto, para outros modelos a obtenção desta solução não é viável, como no trabalho de ABOUBACAR *et al.* (2004 e 2005), em que o modelo de *pom-pom* é aplicado. Neste caso, as condições de entrada do problema precisam ser determinadas numericamente. Para se obter a solução do estado estacionário para o modelo de *pom-pom* (XPP) as condições de entrada do fluido são definidas através do modelo Oldroyd-B. Os perfis de entrada se desenvolvem através do canal até atingir os perfis desejados do modelo de *pom-pom* na saída. Naturalmente, o domínio computacional deve ser suficientemente longo para garantir com que o fluxo totalmente desenvolvido seja atingido na saída.

XUE *et al.* (2004) constatou que os métodos de solução simultâneos não são adequados para resolver equações constitutiva hiperbólicas, devido à restrição da discretização espacial que impõe que a maior ordem que pode ser utilizada para o

esquema de discretização é de primeira ordem. Entretanto, FIÉTIER e DEVILLE (2003) concluem que a técnica de solução simultânea é, geralmente, mais estável que os métodos segregados, mas os recursos computacionais necessários são mais elevados. A utilização da técnica desacoplada demanda um esforço menor da CPU, mas podem apresentar convergência lenta. A presença de termos implícitos na resolução da equação constitutiva implica que a matriz resultante após a discretização espacial não seja simétrica, fazendo com que a aplicação de técnicas eficientes de pré-condicionamento seja importante para a obtenção de uma convergência rápida. Como a técnica de resolução simultânea resolve de forma acoplada todo o sistema de equações discretizadas é esperado que esta técnica seja realmente mais estável e conduza a melhores resultados que a técnica segregada, embora o custo computacional seja maior.

XUE *et al.* (2004) observaram também que a aplicação conjunta de esquemas de resolução simultâneos com esquemas de alta ordem dá origem a uma condição de estabilidade que impõe uma severa restrição não só ao passo de tempo, mas, especialmente, ao refinamento da malha para que soluções livres de oscilação possam ser obtidas. Existe uma razão de refinamento, no caso bidimensional ($\Delta x/\Delta y$), que deve ser respeitada para que a solução seja convergente.

Embora ainda não exista um acordo geral sobre as dificuldades de convergência encontradas para a obtenção de soluções para valores elevados do número Weissenberg, a maioria dos investigadores acredita que a maior dificuldade está associada com a resolução dos gradientes do tensor tensão que são muito elevados nos contornos. O aprimoramento de técnicas experimentais durante a última década permitiu a identificação de um vórtice de recirculação que decorre da singularidade na entrada do canal. A presença deste vórtice de recirculação na entrada do canal que ocorre na maioria dos líquidos poliméricos tem levado alguns autores à tentativa de desenvolver soluções aproximadas como um meio de estimar as perdas de pressão de entrada (DENN, 1990).

O dilema existente entre os esquemas de discretização espacial a ser aplicado leva a avaliar entre precisão ou estabilidade. Como resultado, as soluções numéricas de escoamentos complexos são contaminadas pelo excesso de erros devido à difusão numérica que é introduzida sempre que um esquema de baixa ordem é utilizado ou a soluções oscilatórias que podem ser obtidas quando os efeitos elásticos se tornarem dominante se um esquema de discretização de ordem superior é usado.

3. A Mecânica dos Fluidos Computacional e o Método de Volumes Finitos

“Although this may seem a paradox, all exact science is dominated by the idea of approximation.”

Bertrand Russell

Neste capítulo é apresentada uma breve descrição sobre a fluidodinâmica computacional. Neste capítulo é também realizada uma revisão sobre os princípios básicos de aplicação do método de volumes finitos, incluindo a descrição da malha de integração, os principais esquemas de interpolação utilizados pela literatura, as técnicas utilizadas para resolução do sistema discretizado e as técnicas utilizadas no tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

3.1. A Mecânica dos Fluidos Computacional

Segundo HIRSH (2007), a fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*) é definida como o conjunto de metodologias que, implementadas em um computador, permitem simular o escoamento de fluidos.

A partir da CFD é possível realizar um projeto complexo de engenharia com segurança e confiabilidade de resultados. Também é possível realizar o estudo de condições operacionais, visando condições ótimas e seguras do processo.

Entretanto, para que a CFD seja aplicada de forma segura e confiável, deve-se atender a uma série de pré-requisitos, dentre estes, a obtenção de um modelo matemático que seja capaz de descrever adequadamente o processo ou fenômeno a ser simulado e a aplicação de ferramentas numéricas adequadas à resolução do modelo proposto. Basicamente o processo de modelagem matemática engloba as equações de conservação de massa, energia e movimento, equações de estado e equações constitutivas. Existe na literatura, uma enorme quantidade de metodologias disponíveis para resolução destas equações, uma revisão mais detalhada deste assunto será apresentada nos itens subsequentes. De uma forma geral, a aplicação correta da CFD deve aliar um bom modelo matemático a uma boa técnica numérica de resolução do modelo. O resultado obtido deve ser capaz de reproduzir satisfatoriamente o fenômeno de interesse, sem a necessidade de um esforço computacional (tempo) que torne proibitivo a aplicação da técnica.

Uma vez cumprido tais requisitos é enorme a potencialidade da mecânica dos fluidos computacional, uma vez que é possível através de simulações computacionais projetar, otimizar e avaliar grande número de fenômenos, operações ou processos. Exemplos práticos destas aplicações podem ser encontrados nas mais diferentes áreas da ciência tais como projetos de sistemas de resfriamentos, aerodinâmica de veículos automotivos e aviões, hidrodinâmica de navios, estabilidade de estruturas *off-shore*, previsão do tempo (clima), comportamento do fluxo sanguíneo em veias e artérias, projeto de reatores químicos e sistemas de separação, *etc.*

3.1.1. Breve Histórico da Fluidodinâmica Computacional

Desde o início da civilização é notório o interesse da humanidade em fluidos, sejam nos estudos do fluxo da água em um rio, direção e velocidade do vento, força das correntes marítimas e até, mesmo, como o sangue flui no corpo humano.

Dentre os inúmeros cientistas que contribuíram para os fundamentos da mecânica dos fluidos hoje utilizados, alguns merecem destaque. Arquimedes, que determinou como medir a densidade e volume de objetos e explicou a flutuação através do que é hoje conhecido como princípio de Arquimedes. Sir Isaac Newton, cuja contribuição para mecânica dos fluidos inclui a segunda lei da mecânica clássica e o conceito de viscosidade newtoniana que relaciona linearmente a força aplicada à tensão no fluido. Daniel Bernoulli, pela equação de mesmo nome que é capaz de relacionar variações de pressão, elevação e velocidade ao longo de uma linha de escoamento. Leonhard Euler que propôs a equação de mesmo nome, equação esta capaz de descrever a conservação de massa e momento para fluidos invíscidos. Claude Louis Marie Henry Navier e George Gabriel Stokes introduziram o transporte viscoso na equação de Euler resultando na famosa equação de Navier-Stokes, que mesmo proposta a cerca de 200 anos atrás, constitui a base da fluidodinâmica computacional. Este conjunto de equações é extremamente acoplado e difícil de resolver, apenas com o advento do computador entre 1960 e 1970 foi possível solucionar um escoamento real em uma escala de tempo razoável. No século XIX merecem destaque os trabalhos de: Jean Le Rond d'Alembert, Siméon-Denis Poisson, Joseph Louis Lagrange, Jean Louis Marie Poiseuille, John William Rayleigh, M. Maurice Couette, Osborne Reynolds e Pierre Simon de Laplace. No início do século XX, observam-se muitos trabalhos dedicados a teoria da camada limite e a turbulência, merecendo destaque: Ludwig Prandtl, Theodore Von Karman, Geoffrey Ingram Taylor, Andrey Nikolaevich Kolmogorov e George Keith Batchelor (FLUENT, 2008; KOREN, 2006).

Não existe um consenso sobre quem fez os primeiros cálculos de CFD (em um senso moderno). Na Inglaterra, Lewis Fry Richardson desenvolveu o primeiro sistema numérico de previsão do tempo dividindo o espaço físico em células utilizando a aproximações de diferença finitas. A sua tentativa de prever o tempo para um período de oito horas levou seis semanas e terminou em fracasso. As enormes exigências de cálculo do modelo levaram Richardson a propor uma solução que ele deu o nome de “Fábrica de previsão” (*“forecast-factory”*). O procedimento envolveria um estádio ocupado com cerca de 64.000 pessoas. Cada um, com uma calculadora, executaria parte do cálculo de fluxo. Um líder no centro, usando sinais coloridos de luzes e comunicação de telégrafo, coordenaria a previsão. Esta idéia proposta teria sido um cálculo de CFD muito rudimentar (FLUENT, 2008).

A primeira solução numérica para o fluxo através de um cilindro foi apresentada em 1933, por Thom: "*A.Thom, The Flow Past Circular Cylinders at Low Speeds', Proc. Royal Society, A141, pp. 651-666, London, 1933*". Em 1953, Kawaguti, obteve uma solução similar para fluxo através de um cilindro, utilizando uma calculadora mecânica trabalhando 20 horas por semana durante 18 meses. "*M. Kawaguti, Numerical Solution of the NS Equations for the Flow Around a Circular Cylinder at Reynolds Number 40', Journal of Phy. Soc. Japan, vol. 8, pp. 747-757, 1953*" (KOREN, 2006).

Em 1940, o método de diferenças finitas foi aplicado na resolução de equações diferenciais parciais no *Los Alamos National Laboratory*. Entretanto estes trabalhos foram direcionados ao desenvolvimento de armas e tecnologia de guerra. Apenas quando o ENIAC (*Electronic Numerical Integrator and Computer*), o primeiro computador a usar eletrônica digital, foi instalado em Aberdeen em 1947, aplicações mais amplas, incluindo a fluidodinâmica, puderam ser realizadas (SHANG, 2004).

John Von Neumann realizou importantes trabalhos nesta área, principalmente em métodos destinados à resolução numérica de escoamento de fluidos, escrevendo os primeiros algoritmos deste tipo. Entre 1945 e 1946, Neumann delineou os elementos críticos de um sistema de computador e mais tarde em 1949 surge o EDSAC - *Electronic Delay Storage Automatic Calculator* ou "*Calculadora Automática com Armazenamento por Retardo Eletrônico*", inventado por Maurice Wilkes, utilizando os princípios de programação e alocação de memória desenvolvidos por Neumann. Sendo este, o primeiro computador operacional de grande escala capaz de armazenar seus próprios programas, marcando assim o início da "Era do Computador". Embora, Richardson e Courant já tivessem combinados elementos de fluidodinâmica a métodos numéricos antes de Neumann, eles não apresentaram idéias tão claras para sua integração a computadores e algoritmos de aplicação. Ainda na área de solução numérica das equações do movimento, Peter David Lax desenvolveu inúmeras ferramentas para resolução de equações diferenciais não lineares, em particular para sistemas hiperbólicos, introduzindo esquemas computacionais amplamente utilizados em aplicações tecnológicas e científicas, desde a previsão do tempo até o projeto de aviões. Seu trabalho foi essencial para o desenvolvimento posterior da análise numérica. Sergei Konstantinovich Godunov, em 1959, apresentou um esquema numérico para resolução de equações diferenciais parciais, conhecido como método de Godunov. Ele também provou ser impossível desenvolver um método linear que seja mais preciso que o

esquema de primeira ordem sem que ocorram oscilações na solução numérica, (teorema de Godunov) (KOREN, 2006).

Por volta de 1960, surge, na NASA, o *Ames Research Center*, responsável por aplicar os conceitos da fluidodinâmica na indústria aerodinâmica. Este grupo obteve avanços que revolucionaram a indústria aerodinâmica, desenvolvendo muitas das técnicas aplicadas atualmente.

Em 1970, um grupo coordenado por D. Brian Spalding, do *Imperial College, de Londres*, desenvolveu também inúmeros algoritmos numéricos importantes para o desenvolvimento da CFD, dentre estes o método SIMPLE. Outra importante contribuição para CFD ocorreu em 1980, quando Suhas V. Patankar publicou "*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*", provavelmente o livro mais influente sobre CFD até então publicado.

Por volta de 1980 surgem no mercado os primeiros pacotes comerciais de CFD. Estes pacotes são baseados em conjuntos complexos de expressões matemáticas não lineares que definem as equações fundamentais capazes de descrever o movimento do fluido, do calor e transporte material. Estas equações são resolvidas iterativamente usando algoritmos computacionais embutidos no pacote. O desenvolvimento destes *softwares* possibilitou que poucos anos depois, em 1985, a fluidodinâmica computacional fosse aplicada na "indústria aérea" (*Boeing, General Electric, etc.*) e uma década depois aplicada nas demais indústrias, principalmente a automobilística.

Atualmente a CFD tornou-se uma parte indispensável de qualquer projeto ou pesquisa que envolva escoamento de fluidos, suas aplicações se entendem às mais diversas áreas de forma confiável, segura e econômica.

3.1.2. Aplicações da Fluidodinâmica Computacional

As aplicações para CFD são encontradas em inúmeras áreas da ciência: engenharia, astronomia, meteorologia, física, nuclear, biomédica, *etc.* Atualmente inúmeros cursos de graduação e pós-graduação apresentam, mesmo que de forma introdutória, a disciplina de CFD em sua grade curricular. Sua aplicação industrial também é abrangente, com aplicações nas indústrias: química, automotiva, aeronáutica, naval, petrolífera, de alimentos, *etc.* Estas aplicações abrangem as etapas de projeto, treinamento e otimização.

A grande potencialidade da CFD está na possibilidade de simular em computador, determinadas operações nas quais seriam necessárias construções de unidades, contratação de pessoal, riscos de acidentes, tempo e recursos financeiros consideráveis. Um exemplo clássico é a utilização de túneis de vento no estudo aerodinâmico de automóveis e aviões, tal estudo pode também ser feito com o mesmo grau de confiabilidade em simuladores, utilizando recursos financeiros bem mais reduzidos de forma extremamente segura e intervalos de tempo inferiores.

Como em todo modelo, discrepâncias consideráveis podem ser encontradas entre as respostas obtidas numericamente e os resultados experimentais. As equações de conservação de massa, momento e energia necessitam de relações matemáticas para o cálculo de propriedades do fluido tal como densidade, viscosidade, capacidade calorífica e equações constitutivas que sejam capazes de relacionar o tensor tensão ao campo de velocidade, dentre outras. Caso tais relações não representem de forma adequada as características do fluido, fontes de erros podem estar sendo inseridas ao modelo. É importante ressaltar que diferentes tipos de fluidos requerem diferentes relações constitutivas. Existe na literatura uma grande variedade destas equações, mas nenhuma pode ser aplicada de forma generalizada.

Entretanto, grande parte da potencialidade da CFD encontra-se limitada pela necessidade de resolver de forma precisa as equações de conservação, o que não é normalmente uma tarefa fácil para a maioria das aplicações (FERZIGER e PERIC, 2002). Na resolução dessas equações podem ser introduzidos dois fatores de erro ao resultado, o primeiro relacionado ao procedimento de discretização, em que o sistema original de equações é aproximado, e o segundo proveniente da técnica numérica aplicada à resolução do sistema discretizado.

Os erros de discretização podem ser reduzidos fazendo uso de técnicas de aproximações mais acuradas ou considerando regiões ainda menores do domínio do problema, através do aumento do número de pontos de discretização, o que resulta no aumento do tempo para obtenção da solução do problema. Os erros da etapa de resolução do sistema discretizado podem ser minimizados pela utilização de metodologias apropriadas com um controle adequado da tolerância do método (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002; MALISKA, 2005).

A visualização da solução numérica obtida pode ser feita na forma de tabelas ou na forma gráfica, apresentadas através de vetores, contornos, superfícies e até mesmo filmes. Esta etapa de análise de resultados deve ser realizada com muita atenção e cuidados, pois soluções errôneas podem a princípio, ser interpretadas como soluções corretas. Belos gráficos e figuras podem causar uma boa impressão mas nem sempre são indícios de soluções corretas.

Concluindo, a potencialidade de estudos utilizando a CFD é enorme. A precisão e confiabilidade dos resultados obtidos estão diretamente relacionadas à construção correta dos modelos e utilização das equações constitutivas adequadas bem como, a aplicação apropriada das técnicas numéricas para a resolução do problema.

3.1.3. Descrição Matemática de um Problema

Um fluido é uma substância que se deforma continuamente sob ação de uma tensão de cisalhamento, não importa quão pequena ela seja (FOX *et al.*, 2004).

O movimento do fluido é causado pela ação de forças externas. As forças de movimento mais comuns incluem: pressão, ação da gravidade e tensões superficiais. Tais forças são comumente chamadas de campos de tensão, sendo divididas em forças de superfície (pressão, atrito), que são geradas pelo contato com outras partículas ou com superfícies sólidas e as forças de campo ou de corpo (força da gravidade e eletromagnética), que agem no volume da partícula (FERZIGER e PERIC, 2002).

O conceito do contínuo é a base da fluidodinâmica clássica, sendo de extrema importância saber quando um fluido pode ou não ser tratado como contínuo. A hipótese do contínuo apenas é válida no tratamento do comportamento dos fluidos sob condições normais, mas falha quando a trajetória livre das moléculas é menor que a ordem de grandeza da menor dimensão característica significativa do problema (FOX *et al.*, 2004). Quando a hipótese do contínuo é válida é possível abstrair-se da composição molecular e sua consequente descontinuidade, assim sendo, qualquer pequena parte considerada do fluido (normalmente chamada de partícula ou ponto material), por menor que seja, é capaz de representar o comportamento do fluido como um todo. Permitindo assim considerar que cada propriedade do fluido apresenta um valor definido para cada ponto do espaço, ou seja, que propriedades tais como velocidade, temperatura e concentração, possam ser consideradas como funções contínuas da posição e do tempo.

Dois tipos diferentes de descrição podem ser utilizados para analisar problemas de mecânica dos fluidos. O primeiro é o método de descrição Lagrangeana, no qual o movimento da partícula é acompanhado a cada instante de tempo e o método de descrição Euleriana, no qual as propriedades do campo de escoamento são determinadas em pontos específicos do espaço, sendo descritas como função do tempo e das coordenadas espaciais. Desta forma, o conceito de trajetória está associado à descrição Lagrangeana ao passo que o conceito de linhas de corrente está ligado à descrição Euleriana.

A modelagem matemática de escoamento de fluidos tem como base os princípios da conservação de massa, momento linear e energia. Tais equações podem ser formuladas em termos de volumes de controle infinitesimais ou volumes de controle finitos. A formulação em termos de volumes de controle infinitesimais resulta em um sistema constituído por equações diferenciais, ao passo que a utilização de volumes de controle finitos resulta em um sistema de equações integrais. Segundo FOX *et al.* (2004), a formulação diferencial deve ser utilizada quando existe a necessidade de um estudo detalhado do escoamento e a formulação integral deve ser preferida quando houver interesse no comportamento do sistema como um todo.

O conjunto de equações considerando o sistema isotérmico e composto pelas equações da conservação de massa e da conservação da quantidade de movimento, é apresentado a seguir.

A equação da continuidade descreve a taxa de variação temporal da massa específica do fluido em uma posição fixa no espaço, sendo expressa pela equação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad 3.1$$

A equação de conservação da quantidade de movimento relaciona as mudanças na quantidade de movimento de uma partícula fluida pela ação de forças, sendo representada, sem considerar as forças de campo, pela equação:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad 3.2$$

No caso de fluidos newtonianos incompressíveis, a tensão viscosa é diretamente proporcional à taxa de deformação por cisalhamento. Permitindo assim, que as tensões

possam ser expressas em termos de gradientes de velocidade e de propriedades dos fluidos. Abaixo é apresentada a equação da conservação da quantidade de movimento para um escoamento incompressível e com viscosidade constante:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \eta\nabla^2\mathbf{U} \quad 3.3$$

As equações de Navier-Stokes apresentadas dessa forma podem ser classificadas como um sistema diferencial incompleto. Para que este sistema de equações possa ser resolvido, é necessária a inclusão de relações matemáticas capazes de descrever determinadas propriedades de transporte do fluido (viscosidade, densidade, *etc.*) e equações constitutivas capazes de descrever o comportamento reológico do fluido. Tais equações com suas condições de contorno e as condições iniciais constituem o sistema de equações diferenciais a ser resolvido.

Este conjunto de equações é não linear, fortemente acoplado não é de fácil resolução. Em algumas situações, hipóteses simplificadoras podem ser adotadas, tais como: a suposição de propriedades físicas constantes, escoamento sem atrito ($\tau=0$), processo isotérmico, *etc.* Para tais situações, as equações tornam-se consideravelmente mais simples e em, alguns poucos casos, podem até apresentar solução analítica. Entretanto, para que uma solução analítica seja obtida muitos termos da equação devem ser considerados nulos e, na grande maioria dos casos de interesse, a não consideração de tais termos pode introduzir erros significativos na representação física do modelo. Geralmente, soluções analíticas são extremamente úteis para auxiliar no entendimento do problema, mas raramente podem ser utilizadas diretamente em projetos de engenharia (FERZIGER e PERIC, 2002). Para casos mais complexos, é necessária a aplicação de alguma técnica que seja capaz de obter uma solução aproximada mais próxima possível da solução real do problema.

Sistemas formados por equações diferenciais parciais podem ser classificados como: parabólicos, hiperbólicos ou elípticos. Esta classificação revela características específicas do problema que refletem nos métodos numéricos apropriados para sua resolução. As equações de Navier-Stokes apresentam uma classificação mista, dependendo das condições do problema pode ser hiperbólica, parabólica ou elíptica. Como no caso do escoamento compressível em estado estacionário que, dependendo da velocidade do escoamento, pode ser classificado como hiperbólico no caso de

escoamento supersônico e como elíptico no caso de escoamento subsônico. Tal aspecto inviabiliza a possibilidade de desenvolvimento de uma técnica numérica que seja aplicável para qualquer condição das equações de conservação (CEBECI *et al.*, 2005).

No próximo item são apresentadas as principais técnicas utilizadas na literatura para resolução de problemas de CFD.

3.1.4. Resolução das Equações que Compõem o Modelo

Para se obter uma solução aproximada de um problema é necessário aplicar uma técnica de discretização, que irá aproximar o sistema original de equações diferenciais por um sistema de equações algébricas. Tais aproximações transformam o domínio do problema de contínuo para um domínio discreto, desta forma a solução não existe em todos os pontos do domínio, como no caso de soluções analíticas, e sim apenas em pontos específicos do problema, os denominados pontos de discretização.

Como um domínio contínuo está sendo aproximado por um domínio discreto, fontes de erros podem ser introduzidas nesta etapa e a literatura recomenda (FERZIGER e PERIC, 2002; HOFFMAM, 2001; TANNEHILL *et al.*, 1997) que métodos de soluções numéricas apresentem determinadas propriedades a fim de minimizar algumas destas fontes:

- **Consistência:** Um método é dito consistente quando a diferença existente entre o sistema de equação original e o sistema de equação discretizado tende a zero à medida que o espaçamento da malha de discretização tende a zero.
- **Estabilidade:** Um método é dito estável, quando não ocorre ampliação de erros ao longo do processo de solução numérica, ou seja, o método não deve divergir.
- **Convergência:** Um método é dito convergente quando a solução do sistema discretizado tende para solução exata da equação diferencial original quando o tamanho da malha de discretização tende a zero.
- **Deve respeitar as leis da conservação:** Um esquema é dito conservativo quando o princípio da conservação das propriedades é satisfeito.
- **Deve respeitar limites de variáveis:** Soluções numéricas devem estar dentro de certos limites, como o caso de valores positivos para densidade,

viscosidade, *etc.*, e respeitar os limites impostos pelas condições de contorno.

- Deve apresentar acurácia: O resultado obtido pela aplicação da técnica numérica deve estar bem próximo do valor verdadeiro do problema.

Da análise da literatura foi possível observar a existência de inúmeras técnicas de aproximação numérica, as mais comumente empregadas na CFD são: o método das diferenças finitas (MDF), o método dos elementos finitos (MEF) e o método dos volumes finitos (MVF). Outros métodos, tais como o método espectral e o método de elementos no contorno, são também aplicados em CFD embora sua utilização esteja limitada a uma classe especial de problemas (MALISKA, 2004).

O método de diferenças finitas é o método mais antigo de solução numérica de EDPs, credita-se sua primeira aplicação ao matemático Euler no século XVIII (FERZIGER e PERIC, 2002). Basicamente a aplicação do MDF consiste em substituir os operadores diferenciais presentes na equação por operadores de diferenças. Tais aproximações são obtidas através da expansão em série de Taylor, truncadas no nível da ordem do erro desejada (HOFFMAM, 2001). É um método de fácil aplicação, entretanto observa-se que sua utilização é mais comum a malhas estruturadas em geometrias simples e os princípios de conservação não são assegurados.

O método de elementos finitos foi originalmente desenvolvido para solucionar problemas complexos de elasticidade e análise estrutural. Credita-se o desenvolvimento desta metodologia ao trabalho desenvolvido por Hrennikoff (1941) e McHenry (1943). Entretanto apenas anos mais tarde, em 1960, o nome método de elementos finitos foi utilizado pela primeira vez por Clough (CLOUGH e WILSON, 1999). Sua aplicação tem como base subdividir o domínio do problema em pequenas regiões (elementos) e em cada um destes subintervalos a solução é aproximada através de uma função, normalmente um polinômio. Para que os coeficientes de tais funções sejam determinados, faz-se com que a integral ponderada das equações governantes do processo seja nula ao longo do domínio do problema. Condições adicionais que assegurem a continuidade da função e de sua derivada também podem ser introduzidas na fronteira dos elementos (AMES, 1977). Uma importante vantagem apresentada por este método é sua habilidade de lidar com geometrias complexas, já que técnicas para geração de malhas são bem difundidas na literatura. A principal desvantagem da aplicação desta metodologia é encontrada na estrutura apresentada pelas matrizes que

contêm o sistema linearizado a ser resolvido, estas matrizes não são bem estruturadas, desta forma, a solução eficiente deste sistema requer rotinas numéricas específicas (FLETCHER, 1991).

O método de volumes finitos é atualmente o método mais aplicado na resolução de escoamentos de fluidos (CEBECI *et al.*, 2005). Credita-se sua primeira aplicação a McDonald, em 1971, para simulação de um escoamento bidimensional de gás em turbinas (BLAZEK, 2001). A aplicação do MVF consiste basicamente em subdividir o domínio do problema em volumes de controle, quando então duas diferentes abordagens podem ser utilizadas. A primeira é a utilização do balanço da propriedade conservada em cada um dos subdomínios do problema e a segunda é a integração direta das equações governantes do processo, em sua forma conservativa, no volume do subdomínio (PATANKAR, 1980). As condições de contorno podem ser incorporadas à solução do problema de diferentes formas, tais como: adequação da malha à condição de contorno, utilização de volumes fictícios e utilização de balanços para volumes inteiros no contorno (PINTO e LAGE, 2001). Como o procedimento proposto utiliza o método dos volumes finitos, uma revisão mais detalhada será apresentada no próximo tópico deste documento.

O Método de volumes de controle baseados em elementos tem origem com dois trabalhos de Baliga e Patankar de 1979, (PATANKAR, 1980). Neste método, o domínio do problema é dividido em elementos onde os nós computacionais encontram-se situados em cada um dos vértices dos elementos. O volume de controle é gerado ao redor de cada um dos nós, ligando o centróide do elemento aos pontos médios de cada um dos lados do elemento (método das medianas), Figura 3.1. A equação é integrada no volume de controle da mesma forma que no MVF. Como a quantidade de volumes de controle é igual ao número de vértices que cada elemento possui, tem-se para cada elemento o número de equações definidos pelo número de vértices apresentado pela figura que constrói o elemento (MALISKA, 2004).

Entretanto para que a equação seja integrada no volume de controle é necessário conhecer o comportamento da variável em cada um dos elementos, o que é feito aproximando o valor da variável no interior de cada elemento através de uma função do

tipo: $\phi(x, y) = \sum_{i=1}^{NV} N_i(x, y)\phi_i$ em que $N_i(x, y)$ representa a função de forma, NV o número de vértices do elemento e ϕ_i representa o valor da variável nos vértices de cada

elemento. Como exemplo de uma função de forma para elementos triangulares, tem-se: (PATANKAR, 1980): $N(x, y) = a + bx + cy$, sendo a , b e c obtidos de forma a ajustar a função com os pontos nodais. Como o comportamento da variável dentro do elemento é descrito pela aproximação utilizada, as integrais podem ser então calculadas, obtendo-se ao final um sistema algébrico de equações que envolvem os vértices de cada elemento (FERZIGER e PERIC, 2002).

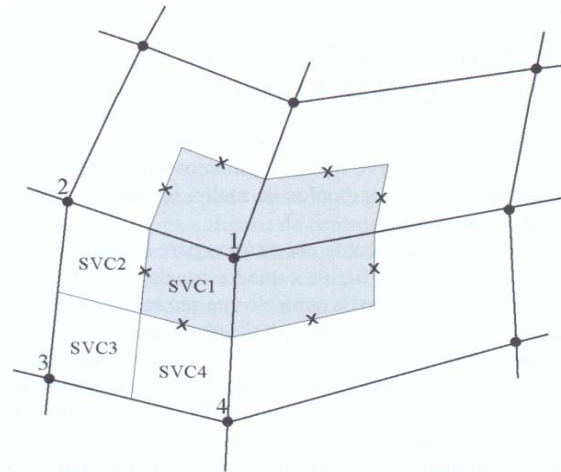


Figura 3.1: Elemento (1234) e os volumes de controles gerados pela aplicação do método das medianas (MALISKA, 2004).

Historicamente a maioria dos trabalhos relativos à área de mecânica dos fluidos utiliza o MDF e MVF, ao passo que, na solução de problemas de elasticidade, característicos da área de estruturas, utiliza o MEF. Particularidades de cada área contribuíram para o desenvolvimento das características apresentadas por cada método. Como por exemplo, a melhor capacidade que o MDF e o MVF possuem para lidar com problemas que envolvam termos advectivos e forte acoplamento entre as equações, que são característicos do escoamento de fluidos. Já o MEF, apresenta uma melhor capacidade no tratamento de geometrias complexas, que são características da área estrutural (MALISKA, 2004).

Um dos grandes atrativos, que possibilitaram o crescimento das aplicações do MVF, está diretamente relacionado à forma como a equação aproximada é obtida. Esta equação é obtida aplicando a lei de conservação da propriedade em cada volume de controle no qual o domínio do problema encontra-se dividido, garantindo que os balanços sejam satisfeitos em nível dos volumes elementares, independentemente do tamanho da malha. Por outro lado, os métodos de diferenças finitas e de elementos finitos não garantem a conservação da propriedade em nível discreto.

O MVF é a técnica mais empregada pelos pacotes comerciais de CFD. Segundo MALISKA (2004), esta preferência está diretamente relacionada às características conservativas que este método apresenta, uma vez que na simulação de escoamentos é extremamente importante satisfazer as leis de conservação em nível discreto. Desta forma, não existe a possibilidade de gerações/consumo artificiais de quantidades, tais como massa, energia, quantidade de movimento, no interior do volume de controle.

3.2. O Método dos Volumes Finitos

A aplicação do método de volumes finitos é iniciada com a geração da malha do problema, nesta etapa o domínio é transformado de um domínio contínuo para um domínio discreto, definido pelos volumes de controle adotados. As equações governantes são então integradas em cada um destes volumes, resultando em um sistema de equações constituídos pelas variáveis localizadas nas interfaces dos volumes de controle. Como os valores das variáveis localizadas nas faces dos volumes de controle não são conhecidos é necessária a utilização de funções de interpolação que tem por finalidade obter valores aproximados para estas variáveis através dos valores das variáveis localizadas nos centros dos volumes de controles vizinhos. Por fim o sistema algébrico ou diferencial resultante é resolvido através de uma rotina numérica apropriada.

Todas estas etapas e procedimentos, sucintamente descritos anteriormente, serão apresentados em detalhes nos tópicos que se seguem.

3.2.1. Geração da Malha

Para que o sistema de equações de Navier-Stokes apresentado no capítulo anterior seja resolvido numericamente é necessário, antes de tudo, que o domínio do problema seja representado em uma forma discreta, através da subdivisão do domínio do problema em um número finito de sub-regiões. A forma, a localização e o número de células utilizadas definem a posição geométrica e a quantidade de pontos para os quais as variáveis do problema serão calculadas. É de extrema importância que a distribuição e arranjo dos elementos que constroem a malha de discretização sejam capazes de representar adequadamente o domínio físico do problema (TANNEHILL *et al.*, 1997).

O domínio de interesse pode ser mapeado seguindo dois diferentes tipos de construção: estruturado e não estruturado. Ilustrativamente, as linhas delimitam as faces dos volumes de controle e os círculos estão associados aos nós, onde geralmente são

calculadas as variáveis de interesse, como pode ser observado na Figura 3.2. A forma com que as linhas interagem constrói a forma do volume de controle adotado como, por exemplo, quadrados ou triângulos no caso bidimensional e classifica o tipo de estrutura utilizado na geração da malha.

A etapa de geração da malha é tão importante na aplicação da CFD que cerca de 50% do tempo gasto na execução de um projeto é dedicado a definição da geometria e a geração da malha do problema (MALALASEKERA, 1995).

A precisão da solução gerada é governada pelo número de células que constroem a malha. Em geral quando mais refinada a malha melhor a precisão da solução obtida. Entretanto, é necessário ponderar entre precisão e o custo computacional referente ao refino da malha (SHAW, 1992).

Pode-se observar na literatura que o MVF e o MEF são aplicados tanto a malhas uniformes como a não uniformes enquanto que grande parte das aplicações que utilizam o MDF está restrita a malhas uniformes e retangulares, embora esta técnica não esteja limitada apenas a aplicações em geometrias regulares (MALISKA, 2004).

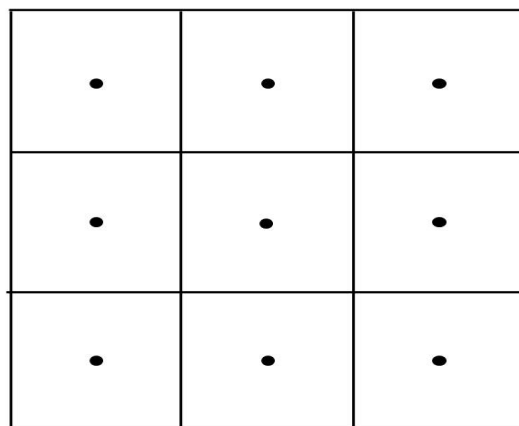


Figura 3.2: Ilustração de um mapeamento estruturado em que as linhas delimitam as faces do volume de controle e os círculos representam os nós.

3.2.1.1. Malha Estruturada e Malha Não Estruturada

Uma malha é definida como estruturada quando gerada através de um procedimento de discretização, em que a aresta de todos os volumes de controles são linhas coordenadas e todos os volumes de controle possuem o mesmo número de faces, (FERZIGER e PERIC, 2002). Em termos geométricos pode-se caracterizar a malha

estruturada se para cada volume interno existir sempre o mesmo número de volumes vizinhos (MALISKA, 2004).

Outra classificação possível para este tipo de malha está relacionada ao espaçamento dado entre as linhas que constroem o volume de controle. Quando estas linhas são igualmente espaçadas construindo volumes que apresentam sempre a mesma dimensão, é chamada de malha uniforme. Para os casos em que existem volumes com diferentes tamanhos a malha é denominada de malha não uniforme.

Uma grande desvantagem da utilização de malhas estruturadas está na impossibilidade de refinar uma região específica do domínio do problema sem que outras regiões sejam também refinadas, como pode ser observado na Figura 3.3a.

Uma alternativa é a utilização de uma malha estruturada em blocos, também conhecida como tratamento multibloco, este tipo de malha utiliza dois ou mais níveis de subdivisão do domínio do problema, Figura 3.3b. Desta forma é possível utilizar um bloco com a malha mais refinada para uma ou mais regiões e um bloco com refinamento mais grosseiro para o restante do domínio. Segundo FERZIGER e PERIC (2002), este procedimento permite lidar com domínios complexos com facilidade e também pode ser utilizado para seguir corpos em movimentos: um bloco é ligado ao corpo movendo-se com ele enquanto outro bloco estagnado envolve as vizinhanças. Esta técnica também oferece a possibilidade de decompor o domínio de solução possibilitando a utilização de “*solvers*” operando em paralelo (BLAZEK, 2001). A desvantagem deste procedimento é que o princípio da conservação nem sempre é respeitado nas fronteiras dos blocos. Como esta técnica será aplicada neste trabalho, uma revisão sobre este assunto será apresentada mais adiante.

Devido à melhor capacidade de adaptação, principalmente em geometrias irregulares, tais como saliências e cantos, a aplicação de malhas não estruturadas, Figura 3.3c, é recomendada a problemas que apresentem geometria complexas (MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002). Neste tipo de malha os volumes de controle podem apresentar qualquer forma, na prática, triângulos ou quadrados em geometria bidimensional e tetraedros ou hexaedros em geometria tridimensional, e não existe restrição com relação ao número de volumes vizinhos.

Embora a utilização de malhas não estruturadas atribua bastante flexibilidade no tratamento de geometrias complexas, sua aplicação gera matrizes de discretização que não apresentam estrutura bloco diagonal e na grande maioria das vezes são extremamente irregulares, fazendo com que a localização dos pontos precise ser especificada explicitamente. A estrutura da matriz de coeficientes é esparsa necessitando de códigos específicos para resolução, que na maioria dos casos requerem um maior esforço computacional e conseqüentemente um tempo maior de execução (MALISKA, 2004; FERZIGER e PERIC, 2002).

É importante ressaltar que a estrutura utilizada para geração de malha não altera de forma alguma como o MVF é aplicado, já que no desenvolvimento do método é considerado um volume elementar qualquer, seja ele estruturado ou não.

É possível observar que existem vantagens e desvantagens para cada tipo de construção de malha, a opção por aplicar uma ou outra deve ser feita considerando características do problema em estudo, precisão de resultados e tempo computacional.

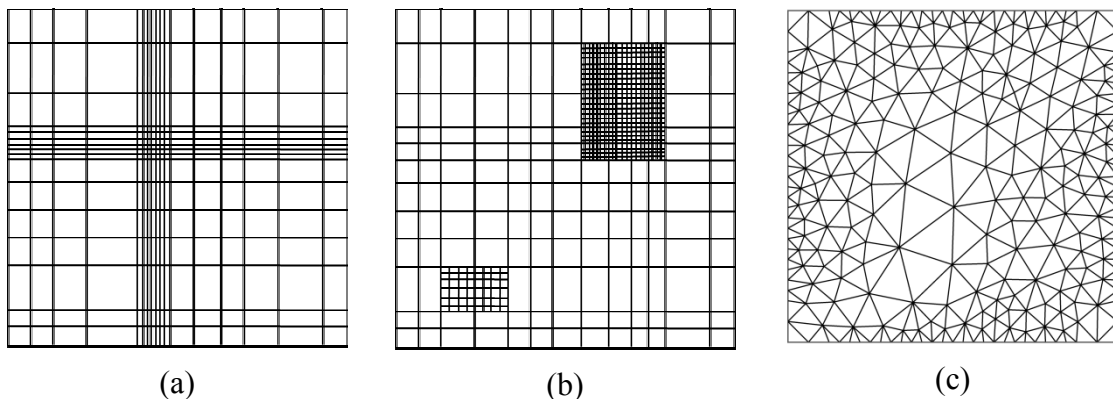


Figura 3.3: Representação ilustrativa de uma malha: (a) Estruturada não uniforme; (b) Bloco-estruturada e (c) Não estruturada.

3.2.1.2. Arranjo Co-Localizado e Arranjo Desencontrado das Variáveis

A localização geométrica das variáveis na malha computacional é conhecida como arranjo das variáveis, cuja característica principal é a posição relativa entre os componentes do vetor velocidade e a pressão. Muitos arranjos são possíveis, mas, para sistemas de coordenadas ortogonais, apenas dois deles são empregados.

No arranjo co-localizado, Figura 3.4, todas as variáveis de interesse (os componentes do vetor velocidade e os demais escalares) são armazenadas no centro do volume de controle. Este arranjo facilita a implementação do algoritmo, pois todas as variáveis estão armazenadas em uma mesma posição.

No arranjo desencontrado, Figura 3.5, os componentes do vetor velocidade são armazenados na fronteira do volume de controle e as demais propriedades escalares são armazenadas no centro do volume, promovendo assim um acoplamento eficiente entre a pressão e a velocidade. Neste tipo de arranjo, as variáveis são localizadas de tal forma que torna possível interpretar a diferença de pressão existente entre os volumes vizinhos ao qual o campo de velocidade é calculado como sendo a força motriz do escoamento, o que é mais consistente sob o ponto de vista físico.

Segundo MALISKA (2004), existe uma grande controvérsia sobre a utilização do arranjo desencontrado. A vantagem ou desvantagem da utilização deste tipo de arranjo depende do tipo de problema e da metodologia de resolução empregada. Por exemplo, na área aeroespacial é dominante a utilização do arranjo co-localizado, não existindo registro histórico algum relacionado à aplicação do arranjo desencontrado nesta área. Isso ocorre, pois os tipos de problemas estudados nessa área são normalmente escoamentos com altas velocidades em que a formulação compressível pode ser aplicada, havendo, assim, uma equação evolutiva para cada variável do problema.

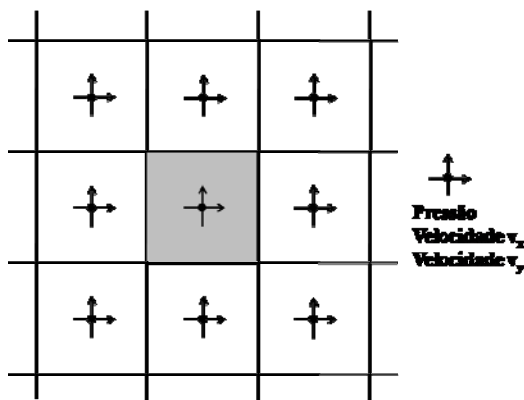


Figura 3.4: Ilustração de uma malha que utiliza arranjo co-localizado das variáveis.

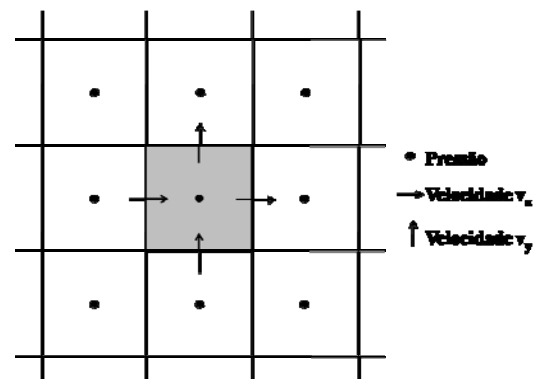


Figura 3.5: Ilustração de uma malha que utiliza arranjo desencontrado das variáveis.

Na resolução de escoamentos incompressíveis, em que não existe uma equação que relacione diretamente as variáveis de estado ao campo de pressão, o acoplamento é de extrema importância, e deve ser tratado com muito cuidado, especialmente com relação ao grau de precisão das fórmulas utilizadas para avaliar o gradiente de pressão, o que na maioria dos casos não utiliza os valores de pressão localizados no volume onde o balanço de quantidade de movimento é realizado. Isso acarreta não só uma perda de

precisão na avaliação do gradiente de pressão, como também inviabiliza a detecção de campos de pressão oscilatórios. Como consequência, para evitar que campos de pressão com elevadas variações sejam tratados como campos uniformes, a utilização do arranjo desencontrado provê um melhor acoplamento pressão-velocidade (PATANKAR, 1980).

3.2.2. Aplicação da Metodologia

Neste item, o procedimento de utilização do MVF será ilustrado através de sua aplicação à resolução do problema advectivo-difusivo bi-dimensional em estado estacionário.

A equação que descreve a advecção-difusão em estado estacionário em duas dimensões é representada pela expressão:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad 3.4$$

Inicialmente, é necessário definir o volume de controle onde a equação apresentada anteriormente será integrada. Neste caso, utiliza-se um volume estruturado uniforme, ou seja, os pontos situados no vértice do volume de controle encontram-se igualmente espaçados em relação ao centro do volume de controle com distâncias Δx e Δy . Os valores fracionados apresentados na Figura 3.6 representam os pontos localizados no centro do volume de controle e os valores inteiros os pontos localizados nas interfaces.

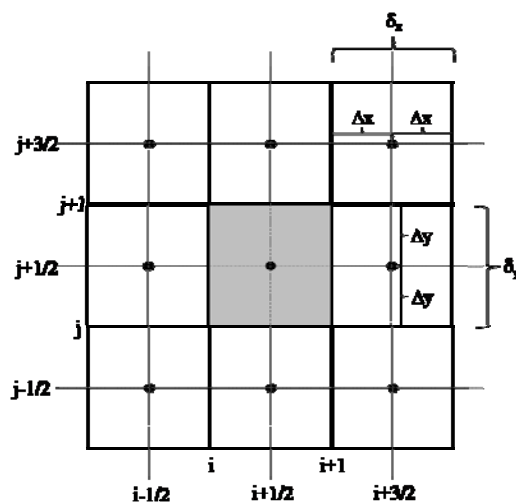


Figura 3.6: Representação do volume de controle.

A segunda etapa do procedimento consiste em integrar a equação, Equação 3.4, ao longo do volume de controle, apresentado na Figura 3.6 segundo a expressão:

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x \phi) dx dy + \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y \phi) dx dy = \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy \quad 3.5$$

A integração do problema advectivo-difusivo resulta na expressão:

$$\int_{y_j}^{y_{j+1}} [(\rho v_x \phi)_{i+1} - (\rho v_x \phi)_i] dy + \int_{x_i}^{x_{i+1}} [(\rho v_y \phi)_{j+1} - (\rho v_y \phi)_j] dx = \int_{y_j}^{y_{j+1}} \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \right] dy + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{j+1} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_j \right] dx \quad 3.6$$

Tais integrais representam a taxa de transferência advectiva e difusiva nas interfaces do volume de controle e podem ser representadas através da aplicação do teorema do valor médio, segundo as expressões:

$$\left(\overline{\rho v_x \phi^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta y = \int_{y_j}^{y_{j+1}} (\rho v_x \phi)_i dy \quad 3.7 \quad \left(\overline{\rho v_y \phi^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \Delta x = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (\rho v_y \phi)_j dx \quad 3.8$$

$$\left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta y = \int_{y_j}^{y_{j+1}} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i dy \quad 3.9 \quad \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \Delta x = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_j dx \quad 3.10$$

Substituindo as expressões acima na Equação 3.6, obtém-se a expressão:

$$\left[\left(\overline{\rho v_x \phi^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\rho v_x \phi^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \left[\left(\overline{\rho v_y \phi^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{\rho v_y \phi^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x = \left[\left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \left[\left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x \quad 3.11$$

A grande maioria das referências consultadas (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002) considera

que os valores médios das variáveis nas interfaces do volume, podem ser aproximados pelo valor da variável avaliada no meio da interface do volume de controle. Tal aproximação apresenta uma precisão de segunda ordem, sendo representada pelas expressões:

$$\left(\overline{\rho v_x \phi^y}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} \approx (\rho v_x \phi)_{i,j+\frac{1}{2}} \quad 3.12 \quad \left(\overline{\rho v_y \phi^x}\right)_{i+\frac{1}{2},j} \approx (\rho v_y \phi)_{i+\frac{1}{2},j} \quad 3.13$$

$$\left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi^y}{\partial x}}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} \approx \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} \quad 3.14 \quad \left(\overline{\Gamma \frac{\partial \phi^x}{\partial y}}\right)_{i+\frac{1}{2},j} \approx \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_{i+\frac{1}{2},j} \quad 3.15$$

É importante ressaltar que a utilização de uma aproximação de segunda ordem para os valores médios, limita a ordem da aproximação global do método à segunda ordem. Assim sendo, não existe ganho significativo para utilização de esquemas de aproximação de ordem superiores a dois.

Utilizando a aproximação apresentada anteriormente para os valores médios, pode-se reescrever a Equação 3.11 pela expressão:

$$\begin{aligned} & \left[(\rho v_x \phi)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - (\rho v_x \phi)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \left[(\rho v_y \phi)_{i+\frac{1}{2},j+1} - (\rho v_y \phi)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x = \\ & \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x \end{aligned} \quad 3.16$$

Também é possível a utilização de técnicas numéricas de integração, tais como: o método de Simpson e métodos de quadraturas para computar o valor do fluxo médio, com a finalidade de aumentar a ordem de precisão desta aproximação, como exemplificado abaixo, em que o método de Simpson foi utilizado no cálculo do valor médio.

$$\left(\overline{\rho v_x \phi^y}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta y} \int_{y_j}^{y_{j+1}} (\rho v_x \phi)_i dy \approx \frac{1}{3} \left[(\rho v_x \phi)_{i,j} + 4(\rho v_x \phi)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\rho v_x \phi)_{i,j+1} \right] \quad 3.17$$

É importante ressaltar, que ao contrário da metodologia apresentada acima, que considera que o valor médio na face do volume de controle pode ser aproximado por determinados pontos do volume de controle, a metodologia proposta neste trabalho

utiliza diretamente os valores médios definidos na Equação 3.11. Apenas ao final do procedimento os valores pontuais da variável são resgatados através da aplicação da técnica de desconvolução. A utilização direta dos valores médios torna o procedimento mais simples, uma vez que as integrações são evitadas.

Entretanto, para que a Equação 3.16 ou a Equação 3.11 possa ser resolvida é necessário conhecer os valores dos fluxos advectivos e difusivos nas interfaces do volume de controle. Embora tais valores não sejam conhecidos, podem ser aplicadas funções de interpolação que sejam capazes de aproximar os valores das variáveis nas interfaces do volume de controle através dos valores das variáveis no centro dos volumes vizinhos, ou de uma forma geral por:

$$(\rho v_x \phi)_{i,j+\frac{1}{2}} \approx f\left(\dots, (\rho v_x \phi)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, (\rho v_x \phi)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, \dots\right) \quad 3.18$$

$$\left(\overline{\rho v_x \phi}^{xy}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} \approx f\left(\dots, \left(\overline{\rho v_x \phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, \left(\overline{\rho v_x \phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, \dots\right) \quad 3.19$$

Em que o fluxo médio no centro do volume de controle, $\left(\overline{\rho v_x \phi}^{xy}\right)$, é definido pela expressão:

$$\left(\overline{\rho v_x \phi}^{xy}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} (\rho v_x \phi) dx dy \quad 3.20$$

De uma forma geral a metodologia de aplicação do MVF necessita que duas aproximações sejam realizadas até a obtenção do sistema discretizado. A primeira delas é a aproximação numérica das integrais que descrevem os fluxos advectivos e difusivos nas interfaces. E a segunda é a aproximação dos valores das variáveis localizadas nas interfaces do volume de controle através dos valores das variáveis nos centros de volumes vizinhos.

3.2.3. Aproximação dos Termos Advectivos

Existem diversos esquemas desenvolvidos e utilizados na literatura para aproximar a variável na fronteira do volume de controle a partir dos valores das variáveis localizadas nos centros dos volumes adjacentes. Neste trabalho serão apresentadas apenas as aproximações mais utilizadas na literatura e que são os esquemas mais utilizados nos códigos computacionais de CFD.

3.2.3.1. CDS

O esquema de Diferenças Centrais (*Central Differencing Scheme* – CDS) aproxima a variável localizada na interface do volume de controle pela média ponderada da propriedade localizada no centro dos volumes vizinhos, resultando em uma aproximação de segunda ordem, descrita pela expressão:

$$\left(\bar{\phi}^y\right)_i \approx \frac{1}{2} \left[\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} \right] \quad 3.21$$

A utilização do CDS na aproximação dos termos advectivos cria quase sempre a presença de coeficientes negativos na matriz que representa o sistema de equações discretizado. A presença destes coeficientes negativos pode provocar oscilações numéricas que levam a dificuldades na convergência do método numérico utilizado na resolução deste sistema. Para que a presença de coeficientes negativos não ocorra é necessário que o número de Péclet atenda à seguinte restrição $(Pe)_i = \frac{(\rho u)_i}{(\Gamma/\delta x)_i} \leq 2$.

Entretanto, para problemas reais é praticamente impossível refinar a malha do problema de forma que esta condição seja satisfeita. Desta forma, a aplicação desta técnica em problemas que apresentem advecção dominante gera, em geral, soluções pouco realistas (CEBECI *et al.*, 2005), embora possa ser bastante eficiente quando aplicada a problemas predominantemente difusivos (MALISKA, 2004). PATANKAR (1980) recomenda a aplicação do esquema CDS apenas a problemas advectivos-difusivos que apresentem baixos números de Reynolds.

A existência dos coeficientes negativos não significa que a solução irá divergir. A utilização de métodos robustos de resolução de sistemas lineares, que sejam capazes de lidar com a presença de tais coeficientes, é capaz de resolver o sistema e obter a solução do problema (MALISKA, 2004).

3.2.3.2. UDS

O esquema *upwind* (*Upwind Differencing Scheme* – UDS) foi proposto primeiramente por Courant, Isaacson e Rees em 1952 e reformulado anos depois por diversos outros pesquisadores (PATANKAR, 1980). Esta metodologia aproxima o valor da variável na interface no volume de controle pelo valor da variável no centro do volume adjacente, sendo a escolha do ponto realizada de acordo com a direção na qual o

escoamento ocorre. Esta aproximação apresenta precisão de primeira ordem, e segue a expressão:

$$\left(\overline{\phi}^y\right)_i \approx \begin{cases} \left(\overline{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} & v_x > 0 \\ \left(\overline{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} & v_x < 0 \end{cases} \quad 3.22$$

O esquema UDS não apresenta em hipótese alguma coeficientes negativos na matriz de discretização do sistema. Produz soluções fisicamente coerentes, mas têm a propriedade de suavizar gradientes elevados, por ser um método dissipativo (MALISKA, 2004).

A aplicação desta metodologia pode produzir resultados errados que tem uma aparência similar à difusão sendo comumente referenciados como “falsa difusão”, (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). O erro causado pela falsa difusão pode ser diminuído pelo refino da malha de integração. Entretanto, o grau de refinamento necessário pode tornar proibitivo o método devido ao aumento do esforço computacional. Para problemas com números de Reynolds elevados, a falsa difusão pode ser suficientemente grande a ponto de gerar resultados fisicamente inconsistentes (FERZIGER e PERIC, 2002).

3.2.3.3. Exponencial

O esquema exponencial (*Exponential Differencing Scheme – EDS*) utiliza como função de interpolação a solução exata do problema advectivo-difusivo unidimensional em uma malha uniforme.

A aplicação do esquema EDS consiste em aproximar o fluxo total pela equação:

$$\left(\overline{q}^y\right)_i = (\rho u)_i \left[\left(\overline{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} + \frac{\left(\overline{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}}}{e^{(Pe)_i} - 1} \right] \quad 3.23$$

em que o termo $\left(\overline{q}^y\right)$ representa o fluxo total, advectivo e difusivo, em cada um dos volumes de controles, sendo representado pela equação:

$$\left(\overline{q}^y\right) = \rho u \left(\overline{\phi}^y\right) - \Gamma \left(\frac{\partial \overline{\phi}^y}{\partial x} \right) \quad 3.24$$

O esquema exponencial não é muito utilizado devido ao alto custo computacional envolvido em sua aplicação, uma vez que a função de interpolação necessita do cômputo da exponencial do número de Péclet, o que, por sua vez, é função do valor da velocidade. Sendo, portanto, necessário o cálculo da exponencial em todas as interfaces do volume de controle.

Como este método é apenas exato para o problema unidimensional não se justifica a sua aplicação a problemas bi e tridimensionais (PATANKAR, 1980).

3.2.3.4. Híbrido

O esquema híbrido (*Hybrid Differencial Scheme – HDS*) foi desenvolvido em 1972 por Spalding (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995) e utiliza uma aproximação do esquema exponencial baseada na combinação dos esquemas CDS e UDS para o fluxo advectivo e difusivo na interface do volume de controle.

$$\left(\bar{q}^y\right)_i \approx \begin{cases} (\rho u)_i \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} & (Pe)_i < -2 \\ \frac{1}{2} (\rho u)_i \left[\left(1 + \frac{2}{(Pe)_i}\right) \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \left(1 - \frac{2}{(Pe)_i}\right) \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} \right] & -2 \leq (Pe)_i \leq 2 \\ (\rho u)_i \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} & (Pe)_i > 2 \end{cases} \quad 3.25$$

A base do esquema híbrido pode ser entendida pela análise do número de Péclet. Para valores pequenos do número de Péclet $|(Pe)_i| \leq 2$ o esquema é equivalente à utilização do esquema CDS e para $|(Pe)_i| > 2$ este esquema é reduzido ao UDS com o termo de difusão fixados em zero.

O esquema é conservativo de primeira ordem e, desde que os coeficientes da matriz de discretização sejam mantidos sempre positivos, é condicionalmente estável. As soluções obtidas são fisicamente consistentes, sendo um esquema inerentemente estável quando comparado a esquemas de alta ordem (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

3.2.3.5. Power-Law

O esquema *Power-Law (Power-Law Differencing Scheme)* foi desenvolvido em 1979 por Patankar (PATANKAR, 1980). Este método é uma adaptação do esquema híbrido, em que é utilizada uma melhor representação do comportamento exponencial, a

difusão é definida nula quando o número de Péclet exceder o valor 10 e quando o número de Péclet for inferior a dez o fluxo é calculado usando a expressão:

$$\left(\bar{q}^y\right)_i \approx \begin{cases} (\rho u)_i \left[\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} - \beta_i \left(\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} \right) \right] & 0 < (Pe)_i < 10 \\ (\rho u)_i \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} & (Pe)_i > 10 \end{cases} \quad 3.26$$

$$\beta_i = \frac{[1 - 0,1(Pe)_i]^5}{(Pe)_i}$$

Embora este seja um esquema que utilize uma formulação mais complexa do que o esquema híbrido, as expressões utilizadas para interpolação não requerem um esforço computacional considerável sendo uma representação extremamente satisfatória do comportamento exponencial. A diferença entre este esquema e o esquema híbrido é muita pequena e para $|(Pe)_i| > 10$ são idênticos (PATANKAR, 1980). Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), o esquema *Power-Law* é a aproximação mais precisa da solução exata do problema advectivo-difusivo unidimensional e tem sido utilizado em muitos simuladores comerciais como uma alternativa ao esquema híbrido, sendo aplicado até mesmo como procedimento padrão.

3.2.3.6. WUDS

O esquema WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*) também utiliza uma aproximação do esquema exponencial, entretanto, a ponderação entre os esquemas é realizada através de um parâmetro embutido na aproximação (α). Tal esquema é representado pela expressão:

$$\left(\bar{\phi}^y\right)_i \approx \left[\frac{1}{2} + \alpha_i \right] \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \left[\frac{1}{2} - \alpha_i \right] \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} \quad 3.27$$

A equação original para o cálculo de α é apresentada abaixo:

$$\alpha_i = \frac{1}{2} - \frac{e^{\frac{(Pe)_i}{2}} - 1}{e^{(Pe)_i} - 1} \quad 3.28$$

A utilização da função exponencial, como já discutido anteriormente, demanda um esforço computacional considerável. Uma alternativa ao cálculo de α é a utilização da proposta de Raitthby apresentada em MALISKA (2004), pela expressão:

$$\alpha_i = \frac{[(Pe)_i]^2}{10 + 2[(Pe)_i]^2} \quad 3.29$$

Este procedimento gera sempre coeficientes positivos, independente do sentido da velocidade. O valor do parâmetro α pondera o efeito da velocidade na função de interpolação, e para casos extremos como $\alpha=0$ e $\alpha=0,5$ ou $\alpha= -0,5$ os esquemas CDS e UDS são, respectivamente, reproduzidos.

A utilização deste esquema evita oscilações numéricas e também possíveis divergências da solução numérica. Entretanto, à medida que as velocidades aumentam o valor de α tende ao valor 0,5 reproduzindo-se o esquema UDS, no qual ocorre as indesejáveis difusões numéricas.

3.2.3.7. Esquemas de Alta Ordem

LUDS

O esquema LUDS (*Linear Upwind Differencing Scheme*) tem como base o esquema UDS, ou seja, emprega o sentido da velocidade para a escolha dos pontos de interpolação adotados, utilizando dois pontos anteriores ou posteriores à interface do volume de controle que se deseja aproximar, resultando em uma aproximação de segunda ordem segundo a expressão:

$$\left(\bar{\phi}^y\right)_i \approx \begin{cases} \frac{1}{2} \left[-\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{3}{2}} + 3\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} \right] & v_x > 0 \\ \frac{1}{2} \left[3\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{3}{2}} \right] & v_x < 0 \end{cases} \quad 3.30$$

Como se trata de um método de segunda ordem pode ocorrer oscilações na solução numérica obtida.

QUICK

O esquema QUICK (*Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics*) foi desenvolvido por Leonard em 1979, (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Este esquema utiliza como função de interpolação um

polinômio de segundo grau o que resulta em uma aproximação de terceira ordem. Os pontos selecionados para interpolação dependem do sentido da velocidade. Este esquema é representado pela expressão:

$$\left(\bar{\phi}^y\right)_i \approx \begin{cases} -\frac{1}{8}\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{3}{2}} + \frac{6}{8}\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{3}{8}\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} & v_x > 0 \\ \frac{3}{8}\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{6}{8}\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{8}\left(\bar{\phi}^{xy}\right)_{i+\frac{3}{2}} & v_x < 0 \end{cases} \quad 3.31$$

Este esquema não é sempre estável. Ou seja, dependendo das condições em que ocorre o escoamento, pode haver a presença de coeficientes negativos na matriz que representa o sistema discretizado, o que pode gerar problemas de instabilidade e soluções incoerentes.

Segundo MALISKA (2004), a aproximação QUICK é ligeiramente superior ao esquema CDS, sendo raro observar a existência de grandes diferenças entres estes dois esquemas. VERSTEEG e MALALASEKERA (1995) citam o esquema QUICK como mais preciso do que o CDS e o HDS, conservando as características do esquema UDS, com efeitos da “falsa difusão” consideravelmente menores e resultados mais precisos para condições de refinamentos grosseiros da malha. Entretanto, por ser tratar de um esquema de alta ordem, pode ocorrer a presença de oscilações na solução numérica.

Outros Esquemas de Alta Ordem

Esquemas de terceira ordem e de ordens superiores têm sido desenvolvidos para discretização do termo advectivo e vem apresentando grau de sucesso variável com inerentes dificuldades de implementação, tais como as relacionadas às condições de contorno, e com a ocorrência de oscilações em sua solução numérica. Existem situações em que a aplicação de esquemas de alta ordem é necessária como no caso de escoamento de fluidos viscoelásticos, em que as características reológicas do fluido impõem a necessidade de uma malha muito refinada quando se aplica os esquemas de aproximação tradicionais. Para este caso a aplicação de esquemas de alta ordem leva a uma melhor ou igual acurácia de resultados com a aplicação de uma malha menos refinada.

A aplicação direta de esquemas de alta ordem tais como, LUDS e QUICK, apesar de serem esquemas mais acurados, podem gerar soluções que apresentem oscilações indesejadas, o que compromete a precisão da solução numérica obtida.

Visando desenvolver esquemas que utilizem aproximações de alta ordem, sem o inconveniente efeito das oscilações, foram desenvolvidos esquemas de alta ordem não oscilatórios, conhecidos na literatura como HRS (“*High Resolution Schemes*”). Tais como: FCT (*Flux-Corrected Transport*) de Boris e Book de 1973, TVD (“*Total Variation Diminishing*”) de Harten de 1983, ENO (“*Essentially Non-Oscillatory*”) de Harten *et al.* de 1987, CBC (“*Convection-Bounded Criterion*”) de Gaskell e Lau de 1988, WENO (“*Weighted Essentially Non-Oscillatory*”) de Liu *et al.* de 1994, dentre inúmeros outros (MALISKA, 2004; FERZIGER e PERIC, 2002). Tais métodos serão mais bem detalhados ao longo deste documento, em momento mais pertinente.

Os esquemas de alta ordem desenvolvidos e aplicados neste trabalho serão apresentados mais adiante bem como a revisão dos trabalhos da literatura sobre tais esquemas. Por ora, é importante ressaltar, que os esquemas que utilizam funções de interpolação de ordens mais elevadas são poucos aplicados na solução de problemas com o método de volumes finitos.

3.2.4. Aproximação dos Termos Difusivos

Na grande maioria das referências consultadas (PATANKAR, 1980; CEBECI *et al.*, 2005; MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007; FERZIGER e PERIC, 2002; HIRSCH, 2007) observa-se que o método de diferenças centrais é o esquema mais aplicado para a aproximação dos termos difusivos na interface do volume de controle. Este método é extremamente prático, já que a aproximação relaciona diretamente o termo difusivo na interface ao valor da variável nos centros de volumes vizinhos, onde o valor da variável é conhecido. A aplicação deste esquema resulta em um erro de aproximação de segunda ordem, o que para grande parte dos processos de simulação de escoamento é satisfatório. Entretanto, para casos em que sejam requeridas aproximações de ordens mais elevadas para o termo advectivo, como exemplo o esquema QUICK que apresenta precisão de terceira ordem, a utilização do esquema de diferenças centrais na aproximação dos termos difusivos pode prejudicar a solução do problema, já que a utilização de tal esquema pode reduzir a ordem de aproximação global do procedimento. Neste caso, é recomendada a utilização de uma aproximação de ordem mais elevada também para o termo difusivo visando manter a ordem global da aproximação.

Na Tabela 3.1 são apresentados alguns dos esquemas utilizados na literatura para aproximação dos termos difusivos.

Tabela 3.1: Alguns dos esquemas de aproximações utilizados na literatura para aproximação dos termos difusivos.

Esquema	Fórmula
<i>Diferenças Centrais</i>	$\left(\frac{\partial \phi^y}{\partial x}\right)_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} \right)$
<i>WUDS</i>	$\left(\frac{\partial \phi^y}{\partial x}\right)_i = \frac{\beta_i}{\Delta x} \left(\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} \right)$ <p>Em que: $\beta_i = \frac{1 + 0,005 [(Pe)_i]^2}{1 + 0,05 [(Pe)_i]^2}$</p>
<i>Lagrange</i>	$\left(\frac{\partial \phi^y}{\partial x}\right)_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\sum_{k=0}^m a_k \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\left(k+\frac{1}{2}\right)} + \sum_{k=0}^n b_k \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\left(k+\frac{1}{2}\right)} \right)$
<i>Padé</i>	$\sum_{k=0}^m a_k \left(\frac{\partial \phi^y}{\partial x}\right)_{i-k} + \left(\frac{\partial \phi^y}{\partial x}\right)_i + \sum_{k=0}^m a_k \left(\frac{\partial \phi^y}{\partial x}\right)_{i+k} =$ $= \frac{1}{\Delta x} \left(\sum_{k=0}^n b_k \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\left(k+\frac{1}{2}\right)} + \sum_{k=0}^n b_k \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\left(k+\frac{1}{2}\right)} \right)$

Na literatura existem poucos trabalhos que apliquem o MVF utilizando aproximações de alta ordem para os termos difusivos. KOBAYASHI (1999) apresenta um método de volumes finitos de alta ordem utilizando esquemas compactos, também conhecidos como esquema de Padé, para interpolação de termos advectivos e difusivos. MUNIZ *et al.* (2008) apresentaram um procedimento baseado em aproximações de alta ordem para resolução de escoamentos de fluidos viscoelásticos, utilizando esquemas de quarta ordem na aproximação dos termos difusivos. PILLER e STALIO (2008) apresentam procedimento baseado no MVF utilizando esquemas compactos para resolução de problemas advectivos-difusivos tridimensionais, usando o esquema de Padé proposto por KOBAYASHI (1999) na aproximação dos termos difusivos.

3.2.5. Aproximação no Tempo

Para os casos de escoamento transiente é necessária a utilização de métodos que permitam avaliar o comportamento temporal das variáveis, como ilustrado no exemplo a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad 3.32$$

Seguindo o procedimento de aplicação do método de volumes finitos, descritos nos itens anteriores no qual a equação anterior é integrada ao longo volume de controle, integrando também no tempo, tem-se origem a expressão:

$$\left[(\rho\phi)_i^{t+\Delta t} - (\rho\phi)_i^t \right] dx = \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1}^\theta - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i^\theta \right] dt \quad 3.33$$

O sobrescrito θ presente na Equação 3.33 relaciona em que instante de tempo o fluxo é avaliado, sendo o valor da propriedade calculado segundo a expressão:

$$(\phi)_i^\theta = \theta \phi^{t+\Delta t} + [1 - \theta] \phi^t \quad 3.34$$

Desta forma o valor de θ informa os três tipos de formulações possíveis para interpolação das variáveis ao longo do tempo: A primeira conhecida como formulação explícita considera o valor de θ igual a zero, assim sendo o valor da variável é avaliado sempre no instante de tempo anterior, que por sua vez já é conhecido. Como estas equações não estão acopladas, não existe a necessidade de se resolver um sistema algébrico não linear. A segunda formulação é chamada de formulação totalmente implícita no qual o valor de θ é igual a um, esta formulação recebe este nome porque o valor da variável é avaliado no instante final do intervalo de tempo. A aplicação deste procedimento dá origem a um sistema algébrico de equações que relaciona as variáveis calculadas no instante de tempo inicial e final. A terceira e última formulação recebe o nome de formulação implícita no qual o valor de θ encontra-se limitado no intervalo $0 < \theta < 1$. O mais conhecido método pertencente a esta classe é o método de Crank-Nicolson em que $\theta=1/2$ e o valor da variável é aproximada por sua média aritmética entre os instantes de tempo t e $t+\Delta t$. (MALISKA, 2004 e HIRSCH, 2007).

Esquemas explícitos são em geral mais simples de serem implementados e também de serem executados em paralelo com um baixo custo computacional para cada avanço de tempo. Entretanto, tais métodos demandam incrementos de tempo muito pequenos para assegurar sua estabilidade, principalmente, quando ocorrem grandes variações da velocidade ou do tamanho da malha. Esquemas implícitos são inerentemente estáveis e incrementos de tempos maiores podem ser aplicados, mas, na prática, restrições relativas ao incremento do tempo podem ocorrer devido às não linearidades presentes nas equações de fluxo. Estes procedimentos são excelentes para resolução de problemas estacionários, entretanto, são mais difíceis de serem implementados e executados em paralelo, a convergência e a acurácia do procedimento deteriora à medida que o incremento de tempo (Δt) aumenta (FERZIGER e PERIC, 2002 e MALISKA, 2004).

A escolha entre um método explícito e um método implícito deve ser feita levando-se em consideração o custo por unidade de tempo e o número de passos de tempo (HIRSCH, 2007).

Basicamente, a metodologia apresentada anteriormente consiste em substituir todas as variáveis e operadores diferenciais (espaciais e temporais) que compõem o sistema por aproximações, resultando em um sistema algébrico de equações que uma vez resolvido permite obter o valor da variável de interesse em cada um dos pontos de discretização no intervalo de tempo, $t+\Delta t$. Outra metodologia utilizada para resolução de sistemas que apresentam variação temporal consiste em aplicar as aproximações apenas às derivadas espaciais de forma a converter o sistema original de EDPs em um sistema de EDOs ou em um sistema de equações algébrico-diferenciais (EADs), esta metodologia é conhecida como método das linhas, ou esquema semi-discreto (HIRSCH, 2007).

O método das linhas consiste basicamente na substituição das derivadas espaciais, em uma ou mais dimensões, por aproximações discretas (via diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos, ou método dos resíduos ponderados) de forma a converter o sistema original de EDPs em um sistema de EDOs ou de EADs. Segundo VIEIRA (1998), esta metodologia tem como grande vantagem a simplicidade da implementação já que o usuário precisa apenas aplicar o procedimento de discretização às direções espaciais.

A escolha de um código está diretamente relacionada à estrutura do problema que se deseja solucionar. Quando se trata de EADs uma classificação importante diz respeito ao índice diferencial do sistema. Por definição, índice diferencial é o número de vezes no qual todo ou parte do sistema de equações precisa ser diferenciado em relação à variável independente do problema a fim de que todas as variáveis dependentes que compõem o sistema apareçam na forma diferencial. Determinados códigos computacionais estão restritos à solução de equações que apresentam índice diferencial um ou zero, como é o caso da DASSL (PETZOLD, 1989). Outros códigos como DASSLC (SECCHI, 2007), MEBDF (ABDULLA *et al.*, 2000) e PSIDE (SWART *et al.*, 1997), podem ser aplicados a problemas de índices diferenciais maiores.

Um sistema de EADs surge naturalmente durante a solução numérica de escoamentos transientes incompressíveis. Neste caso, a equação da continuidade é transformada em uma equação algébrica e as equações do movimento em equações diferenciais que juntas constituem um sistema de EADs de índice diferencial igual a dois. Entretanto, é possível manipular a equação da continuidade a fim de reduzir o índice do sistema. Tal manipulação resulta na conhecida equação de Poisson para pressão que, ao ser substituída no lugar da equação da continuidade, dá origem a um sistema de índice diferencial unitário.

A aplicação do método das linhas pode ser exemplificada pela transformação do sistema de EDPs apresentado pela Equação 3.35 de dimensão m (VIEIRA, 1998):

$$\mathbf{F}\left(t, \mathbf{z}(t, x), \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial t}, \frac{\partial^k \mathbf{z}}{\partial x^k}\right) = 0 \quad 3.35$$

Em um sistema de EDOs de dimensão $m.N$, como demonstrado abaixo pela Equação 3.36:

$$\begin{aligned} F_1\left(t, \mathbf{z}_1(t, x), \frac{d\mathbf{z}_1}{dt}\right) &= 0 \\ F_2\left(t, \mathbf{z}_2(t, x), \frac{d\mathbf{z}_2}{dt}\right) &= 0 \\ &\vdots \\ F_N\left(t, \mathbf{z}_N(t, x), \frac{d\mathbf{z}_N}{dt}\right) &= 0 \end{aligned} \quad 3.36$$

Em que N representa o número de pontos utilizados para a discretização no domínio de x .

A utilização de funções de aproximações no tempo pode também ser utilizada na resolução de problemas estacionários, normalmente chamados de falso transiente ou transiente distorcido. Neste caso, a solução ao longo do tempo avança até que a solução do estado estacionário seja obtida. Como, neste caso, não há real interesse no comportamento da variável ao longo do tempo e sim apenas na solução do estado estacionário, não existe a necessidade de um controle de precisão do sistema, o que se faz é iterar algumas vezes, ou até mesmo uma única vez, e mudar para o próximo incremento de tempo.

A convergência dos métodos iterativos depende das estimativas iniciais que são atribuídas às variáveis, já que a partir destas estimativas o método avança para obtenção da nova solução. Entretanto, muitas das vezes tais estimativas estão bastante distantes da solução do problema. Assim sendo, resolver o modelo estacionário a partir do modelo transiente pode fazer com que o procedimento convirja mais rapidamente, já que melhores estimativas são alimentadas a cada iteração do falso transiente.

Segundo XUE *et al.* (2004), do ponto de vista de estabilidade numérica, para resolver um problema transiente que apresente dominância advectiva, não é recomendado utilizar um método numérico explícito de primeira ordem, como o método de Euler, se o esquema de discretização espacial para a advecção possui ordem de precisão maior do que primeira ordem, tais como o esquema de diferença central e o esquema QUICK. Existem dois processos que podem causar erros numéricos, o processo de discretização temporal de cada uma das equações e o processo de solução do sistema discretizado. Assim sendo, as propriedades de estabilidade numérica inerente ao método de discretização temporal podem ser comprometidas devido a uma combinação inadequada com os métodos de discretização espacial.

3.2.6. Aproximação do Termo Fonte

A finalidade do termo fonte é associar todos os termos que não se enquadram na forma generalizada da expressão da conservação e geralmente inclui uma expressão não linear. Muitas vezes, tal termo armazena informações importantes do modelo, como por exemplo, a taxa de uma reação química. Desta forma, deve-se tomar extremo cuidado no seu tratamento a fim de que o processo de solução iterativo utilizado na resolução do sistema não divirja.

Nos casos em que o termo fonte expressa uma relação não linear, algumas vezes, é necessário linearizar a expressão de forma que o termo fonte possa ser atualizado a cada etapa do processo iterativo. Entretanto, dependendo da importância do termo fonte, apenas a linearização não é suficiente, sendo necessário atualizá-lo com mais frequência que os demais coeficientes (MALISKA, 2004 e PATANKAR 1980).

3.2.7. Tratamento das Condições de Contorno

As fórmulas apresentadas anteriormente para os esquemas de aproximação são aplicadas apenas para um volume interno do domínio do problema. A aplicação destes esquemas em regiões próximas aos contornos necessita de um tratamento especial a fim de incorporar as condições de contorno do problema.

Existem diferentes formas para incluir as condições de contorno na solução do problema. A primeira delas é a adequação da malha à condição de contorno. Esta técnica tem como base utilizar, no contorno, os volumes mais apropriados para representar as condições de contorno. Constrói-se então uma malha na qual o ponto central do volume de controle esteja situado na fronteira, originando um meio volume de controle na fronteira. Para os casos nos quais o valor da variável é conhecido no contorno não é recomendada a utilização deste procedimento, pois a sua aplicação leva a não conservação da propriedade no meio-volume. A aplicação deste procedimento requer atenção especial na implementação das rotinas usadas na resolução do sistema discretizado, uma vez que os volumes nos contornos são diferentes dos demais volumes interno, sendo esta a principal desvantagem deste tipo de tratamento (PATANKAR, 1980 e MALISKA, 2004).

O segundo procedimento consiste na utilização de volumes fictícios, que permite que toda malha seja constituída de volumes inteiros, este procedimento como o próprio nome já diz utiliza volumes de controles imaginários que não existem geometricamente e apenas são utilizados como uma extensão do domínio. Embora seja este um procedimento de fácil aplicação que garante que a malha seja constituída apenas de volumes inteiros, respeitando assim a conservação da propriedade para todos os volumes, a criação destes volumes aumenta o número de incógnitas do problema, principalmente em problema multidimensionais, o que acarreta em um aumento do custo computacional. Este procedimento apenas é aplicado para malhas geradas através de coordenadas ortogonais (PINTO e LAGE, 2001).

O terceiro procedimento consiste na utilização de balanços para os volumes de fronteira. A malha utilizada é constituída sempre com volumes inteiros, inclusive nos contornos. O princípio da conservação é aplicado a todo o domínio do problema, a integração dos volumes na fronteira é realizada da mesma forma que para os volumes internos. Desta forma não existem um aumento de incógnitas do problema e as condições de contorno são adicionadas nas equações dos volumes na fronteira. A utilização desta formulação tem como vantagem a uniformidade dos volumes dentro da malha, facilitando assim sua implementação computacional. Esta técnica é adequada tanto a malhas ortogonais como não ortogonais, sendo o tratamento mais recomendado para o tratamento de condições de contorno (PINTO e LAGE, 2001 e MALISKA, 2004).

Para a resolução de qualquer sistema de equações diferenciais parciais, as condições de contorno em conjunto com as condições iniciais, determinam a solução particular do problema em estudo. Para a grande maioria de problemas que envolvem escoamento de fluidos e transferência de calor, as condições de contorno mais comumente aplicadas são as de Dirichlet e de Neumann.

A condição de contorno de Dirichlet impõe um valor constante e conhecido para variável (concentração, velocidade, temperatura, *etc.*) na fronteira do problema. Já a condição de Neumann impõe que a derivada na fronteira atenda a restrição: $\frac{\partial \phi}{\partial n} = f$ em que n representa a coordenada perpendicular à fronteira e f representa uma função ou constante conhecida. Assim sendo, o valor de ϕ na fronteira não é conhecida sendo uma das incógnitas do sistema de equação a ser resolvido.

A seguir são apresentadas as condições de contorno mais comuns e como sua implementação é comumente realizada na aplicação do método de volumes finitos.

3.2.7.1. *Condição de Entrada*

Normalmente em uma condição de contorno deste tipo é necessário que a velocidade e as outras variáveis sejam especificadas, o que normalmente é feito informando um perfil de escoamento na entrada. No caso em que são informados os valores para o fluxo de massa e sua distribuição, o fluxo difusivo deve ser especificado como nulo, pois a existência de um fluxo difusivo alteraria o fluxo advectivo e a distribuição da variável no contorno de entrada. Como consequência não seria possível

satisfazer a condição de contorno naquela posição, tal condição de contorno é conhecida como localmente parabólica (MALISKA, 2004).

Para o caso em que são especificados o perfil de velocidade na entrada e uma condição de velocidade normal nula na saída não é recomendado que o valor de pressão seja especificado, pois, neste caso, a solução do problema pode vir a ser prejudicada já que do ponto de vista físico duas forças motrizes estariam agindo sobre o escoamento. Normalmente, o campo de pressão é deixado livre para que os algoritmos que tratam do acoplamento pressão-velocidade ajustem o campo de velocidade (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

3.2.7.2. *Condição de Saída*

Neste caso considera-se que o escoamento está plenamente estabelecido na saída, ou seja, os fluxos difusivos são considerados nulos no final do domínio (aproximação localmente parabólica). Assim, o valor da variável na fronteira de saída é especificado como sendo igual ao valor da variável considerado no volume anterior ou extrapolado a partir dos volumes vizinhos (FERZIGER e PERIC, 2002). É importante assegurar que na saída do problema as condições de escoamento estabelecidas possam ser satisfeitas para que tais condições sejam válidas, caso contrário é necessário mover esta fronteira até um local do domínio do problema no qual a condição seja satisfeita.

3.2.7.3. *Condição nas Paredes*

Normalmente a condição implementada para os volumes de controle situados nas regiões próximas a parede é a condição de não deslizamento (*no-slip*). Esta condição especifica que a velocidade na direção paralela a parede é igual à velocidade com que a parede se move. Como na maioria dos casos de estudo, o fluido se move em torno de superfícies fixas, a velocidade tangencial junto à parede é zero e, conseqüentemente, sua derivada tangencial também. No caso de paredes impermeáveis a velocidade na direção normal a parede também é zero. A partir da equação da conservação de massa é possível demonstrar que a derivada da velocidade na direção normal à parede deve ser também considerada como nula (FERZIGER e PERIC, 2002).

3.2.7.4. *Condição de Simetria*

As condições de simetria impõem que não exista escoamento através da linha de simetria e nenhum fluxo atravessa esta linha, ou seja, todas as velocidades normais às linhas de simetria são definidas como nulas bem como os fluxos difusivos. O que

equivale a considerar os valores de todas as variáveis anteriores à linha de simetria como sendo iguais aos valores da variável posteriores à linha de simetria (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

3.2.8. Metodologias Utilizadas na Resolução do Sistema Discretizado

A aplicação do método de volumes finitos na resolução das equações de escoamento geralmente dá origem a um conjunto de equações algébricas não lineares que apresentam como incógnitas os valores das variáveis no centro dos volumes de controle, caso seja utilizada a metodologia convencional, ou o valor médio da variável, caso seja aplicada a metodologia de alta ordem.

A solução deste sistema não linear de equações pode ser realizada de duas formas diferentes: A primeira e mais comumente aplicada na literatura (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004; VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002) consiste em aplicar um procedimento de linearização através da aproximação via série de Taylor aos termos não lineares presentes na equação. Desta forma o sistema pode ser representado na forma matricial já que o processo de linearização permite que termos não lineares possam ser representados utilizando informações obtidas na iteração anterior. Este procedimento iterativo avança até que a convergência do sistema seja obtida ou o número máximo de iterações seja alcançado.

Outra forma de resolução é solucionar diretamente o sistema não linear de equações através do método de Newton-Raphson. Entretanto é importante ressaltar que embora o método de Newton seja diretamente aplicado à solução do sistema não linear de equações, a cada iteração deste procedimento é necessária a resolução de um sistema linear de equações. Assim sendo, independente do caminho escolhido para resolução do sistema de equações é imprescindível a necessidade de resolução de um sistema algébrico linear de equações.

Duas classes de métodos podem ser utilizadas para resolução deste tipo de sistema: A primeira desta classe são os métodos diretos que são métodos capazes de obter a solução do sistema utilizando um número fixo e pré-determinado de operações de eliminação algébrica. São exemplos de método diretos: Eliminação de Gauss, decomposição LU e método de Gauss-Jordan. Em alguns casos nos quais as matrizes apresentam estruturas especiais existem algoritmos desenvolvidos levando em

consideração tais característica, como é o caso do algoritmo de Thomas para sistemas tridiagonais.

A outra classe de métodos são os métodos iterativos, que como o próprio nome diz, utilizam procedimentos iterativos para obtenção da solução. A partir de uma estimativa inicial o procedimento avança até que a solução seja obtida ou o número máximo de iterações seja alcançado, (TANNEHILL *et al.*, 1997). Como exemplo de métodos iterativos: Método de Jacobi, método de Gauss-Seidel, Método da sobre-relaxação sucessiva (SOR), método implícito de direção alternada (ADI), métodos de minimização tais como: Gradiente conjugado, gradiente biconjugado, gradiente conjugado quadrado (CGS), gradiente conjugado quadrado estabilizado (CGSTAB) e método dos resíduos generalizados (GMRES) (FERZIGER e PERIC, 2002).

Uma das técnicas iterativas que merece destaque é o “*multigrid*” que, segundo HIRSCH (2007), é o procedimento iterativo mais geral e eficiente conhecido na atualidade. Esta técnica tem sua fundamentação relacionada ao comportamento da convergência dos métodos iterativos como, por exemplo, os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel.

A base da técnica “*multigrid*” é suavizar o erro em cada uma das faixas de frequência no espaçamento de malha mais adequado, com a finalidade de que os erros que apresentem longos comprimentos de ondas (baixa frequência) possam ser eliminados com eficiência. Desta forma varrendo o domínio do problema utilizando diferentes espaçamentos de malhas, refinadas e grosseiras, é possível eliminar os erros em todas as frequências e desta forma acelerar o processo de convergência. Assim sendo o objetivo do “*multigrid*” é transferir os erros de baixas frequências para a malha mais grosseira onde eles são progressivamente incorporados aos erros de alta frequência que por sua vez são eficientemente tratados pelas etapas de relaxação. FERZIGER e PERIC (2002) classificam o “*multigrid*” mais como uma estratégia do que um método propriamente dito.

Uma comparação entre diferentes códigos que aplicam métodos diretos de solução na resolução de sistemas esparsos podem ser encontrados no trabalho de NICHOLAS e JENNIFER (2007), em que os autores avaliam o desempenho dos pacotes com relação ao tempo computacional e à quantidade de memória utilizada por cada pacote.

Um aspecto de extrema importância na escolha do método a ser utilizado na resolução do sistema linear de equações está relacionado à estrutura da matriz dos coeficientes. A estrutura desta matriz depende do esquema de interpolação utilizado na aproximação dos termos advectivos e difusivos, uma vez que o esquema utilizado estabelece quais e quantos pontos situados no centro de volumes de controle vizinhos serão utilizados com a finalidade de aproximar a variável na face do volume de controle. Como por exemplo, a utilização de esquemas de segunda ordem gera sistemas com estrutura tridiagonal quando aplicados a sistemas unidimensionais, já a utilização de aproximação de ordens mais elevadas (como a aproximação de Lagrange proposta neste trabalho), gera no caso unidimensional um sistema pentadiagonal.

Outro conceito de extrema importância é a esparsidade de uma matriz. O conceito de esparsidade está relacionado à quantidade de elementos nulos que uma matriz apresenta. Uma matriz tridiagonal, por exemplo, é classificada como uma matriz bastante esparsa, uma vez que $n^2 - 3n - 2$ coeficientes desta matriz apresentam valores nulos. A esparsidade de uma matriz pode ser quantificada pelo índice de esparsidade (IE) que é calculado segundo a expressão:

$$IE = 1 - \frac{N^0 \text{ de não Nulos}}{N^0 \text{ de Elementos}} \quad 3.37$$

Segundo MALISKA (2004), o alto índice de esparsidade da matriz influencia no método utilizado na resolução do sistema linear de equações. A utilização de métodos diretos implicaria na manipulação de uma quantidade considerável de elementos nulos, o que exerce significativa influência na taxa de convergência e no tempo de computação. Embora, este comentário seja apenas pertinente a códigos que não utilizem métodos diretos com álgebra esparsa.

Outro aspecto que exerce significativa influência sobre a técnica utilizada na resolução do sistema de equações diz respeito à positividade dos coeficientes que constituem a matriz do sistema discretizado e à dominância diagonal desta matriz. A convergência dos métodos iterativos é assegurada se, para cada linha de coeficientes da matriz de discretização do sistema, o valor absoluto dos elementos da diagonal é maior que a soma dos valores absolutos dos demais elementos (YANG *et al.*, 2005), ou seja:

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i}^N |a_{ij}| \quad j = 1, 2, \dots, N \quad 3.38$$

A presença de coeficientes negativos pode gerar soluções fisicamente inconsistentes além de ocasionar dificuldades na convergência do método numérico utilizado na resolução do correspondente sistema linear. O que ocorre quando se utiliza o esquema CDS na aproximação dos termos advectivos em problemas que apresentem predominância advectiva.

3.2.9. *Acoplamento Pressão-Velocidade*

Em situações em que o campo de pressão não exerce influência sobre a massa específica, como é o caso de escoamento incompressível, não existe uma equação que relacione diretamente as variáveis de processo ao campo de pressão. Neste caso, o efeito da pressão aparece apenas nas equações do movimento, não de uma forma direta, mas acoplada com o campo de velocidade. Neste acoplamento encontra-se a grande dificuldade de resolução do sistema de equações de Navier-Stokes: determinar a pressão de forma que esta ao ser substituída na equação do movimento resulte em um campo de velocidade capaz de satisfazer a equação da continuidade. Neste caso, a equação da continuidade não pode ser utilizada como uma equação evolutiva, mas como uma restrição que precisa ser obedecida.

Em processos em que o campo de pressão exerce influência sobre a massa específica, escoamento compressível, o uso de uma equação de estado que relaciona pressão, massa específica e temperatura, como a equação de gás ideal $\overline{PM} = \rho RT$, resulta em uma equação evolutiva direta para o campo de pressão.

O tratamento do acoplamento pressão-velocidade pode ser realizado de duas formas distintas: a abordagem segregada e a abordagem simultânea.

A solução segregada utiliza um procedimento iterativo para resolução das equações de Navier-Stokes. Sendo assim, é necessário que cada variável apresente uma equação evolutiva que permita controlar seu avanço a cada iteração do processo. Neste procedimento, o conjunto de equações é linearizado permitindo que a cada iteração os valores das variáveis sejam obtidos através da resolução do sistema linear de equações, e este procedimento iterativo avança até que a convergência estipulada seja obtida. A

forma como determinadas variáveis são atualizadas durante o procedimento iterativo dá origem aos diferentes algoritmos de acoplamento pressão-velocidade.

A solução simultânea consiste em resolver simultaneamente todas as equações que constituem o modelo. Tanto no caso estacionário como no caso transiente, o sistema de equações é resolvido diretamente, sem a necessidade de técnicas adicionais para relacionar determinadas variáveis do problema. Como o sistema é resolvido simultaneamente, o acoplamento entre as variáveis é automaticamente garantido. Entretanto, a aplicação desta abordagem necessita que boas estimativas iniciais sejam informadas na etapa inicial para que o procedimento numérico alcance a convergência.

É importante ressaltar que apenas na utilização de um algoritmo de solução segregada ocorre o problema do acoplamento pressão-velocidade. A utilização de um procedimento de resolução simultânea, como o proposto no presente trabalho, evita que este problema ocorra. Entretanto, as rotinas numéricas para a resolução do sistema discretizado necessitam ser bem mais elaboradas, uma vez que o custo computacional da aplicação de uma técnica simultânea pode tornar o procedimento proibitivo.

Segundo DARWISH *et al.* (2009) o algoritmo aplicado na resolução do acoplamento pressão-velocidade é de extrema importância para CFD, pois é este algoritmo que direciona as simulações de escoamento de fluido para a convergência. Ao longo das últimas décadas muito esforço foi dispendido no desenvolvimento de algoritmos mais robustos e eficientes resultando em um melhor entendimento das questões numéricas que afetam o desempenho desses algoritmos.

Dois abordagens são mais comumente reportadas na literatura para a resolução das equações de Navier-Stokes em casos incompressíveis. A primeira normalmente conhecida como método baseado na pressão (“*pressure-based*”) tem como base satisfazer diretamente a incompressibilidade. Nesta abordagem, pode-se utilizar diretamente as variáveis primitivas pressão e velocidade, ou grandezas derivadas, tais como vorticidade e função corrente que, neste caso, resultam em um conjunto diferente de equações governantes. As variáveis primitivas podem ser também manipuladas no sistema de equação original como é o caso da aplicação da equação de Poisson para pressão. A solução do sistema pode ser realizada de duas formas distintas. Na primeira, a equação da continuidade e as equações de conservação de momento são discretizadas diretamente, sem que seja introduzida ao sistema qualquer relação direta com a pressão. Como não existe uma relação direta da pressão na equação da continuidade, a aplicação

de um procedimento de solução simultânea leva muitas vezes a um sistema de equações discretizado mal condicionado, o que pode ser contornado através do uso de pré-condicionadores. Na segunda abordagem de solução, uma equação evolutiva para a pressão é obtida através da adição de pseudo-velocidades, tal como no algoritmo segregado SIMPLE e SIMPLER (DARWISH *et al.*, 2009).

Segundo KWAK *et al.* (2005), a abordagem baseada em variáveis primitivas é a opção mais flexível. Outras formulações utilizando variáveis derivadas, tais como função corrente e vorticidade, eliminam a dependência com o gradiente de pressão, no entanto, isso vem à custa da adição de um novo requisito para as variáveis derivadas, tais como condições de contorno para vorticidade.

A segunda abordagem mais comumente reportada na literatura na resolução das equações de Navier-Stokes em casos incompressíveis é conhecida como método baseado na densidade (“*density-based*”) e tem como base a formulação de um escoamento compressível, no qual as equações da conservação de movimento e da continuidade são acopladas através do uso da densidade. Neste caso, a incompressibilidade é recuperada como um caso limite da formulação, o método de compressibilidade artificial é típico desta abordagem (KWAK *et al.*, 2005).

HANBY *et al.* (1996) compara a forma de resolução segregada e simultânea. A análise dos resultados apresentados neste trabalho permite concluir que o melhor desempenho de determinada técnica de resolução depende do tipo de problema que se deseja resolver e de determinados aspectos característicos da metodologia utilizada na resolução do sistema. Como é o caso do fator de relaxação, que é utilizado pela técnica segregada nas equações que atualizam os campos de velocidade e pressão. No caso da metodologia acoplada, um aspecto de extrema importância para o desempenho do método é a metodologia numérica utilizada para a resolução do sistema linear.

Da análise da literatura foi possível observar que existem diferentes métodos de solução segregada, sendo os mais comumente aplicados:

O método SIMPLE (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation*) desenvolvido por PATANKAR e SPALDING em 1972 (PATANKAR, 1980). Sua metodologia de aplicação consiste na estimação e correção dos campos de pressão e velocidade com a finalidade de satisfazer as equações de conservação.

O método SIMPLER (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation Revised*) desenvolvido por PATANKAR e SPALDING em 1980 (PATANKAR, 1980) como uma versão melhorada do SIMPLE. Neste procedimento a equação da continuidade é utilizada com a finalidade de gerar uma equação para obtenção da pressão, que tem seu valor obtido diretamente, sem o uso de correção. Sendo a correção da pressão apenas utilizada na equação que corrige o campo de velocidade.

O método SIMPLEC (*Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation Consistent*) desenvolvido por VON DOORMAL e RAITHBY em 1984 (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). O procedimento de aplicação desta metodologia é o mesmo aplicado no método SIMPLE, diferindo apenas na forma como os campos de velocidade são atualizados.

O método PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) desenvolvido por ISSA em 1986 (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Este procedimento utiliza técnicas de predição-correção divididas em uma etapa de predição e duas etapas de correção e pode ser encarado como uma extensão do SIMPLE, com etapas adicionais de correção dos campos de pressão e velocidades.

O método PRIME (*Pressure Implicit Momentum Explicit*) desenvolvido por MALISKA e RAITHBY em 1986 (MALISKA, 2004) tendo como motivação principal realizar a correção da velocidade e da pressão em uma única etapa.

Uma melhor descrição sobre estas metodologias de resolução segregada do sistema de equações pode ser encontrada em: MALISKA, 2004; PATANKAR, 1980, VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002.

Como o procedimento desenvolvido neste trabalho propõe utilizar a solução simultânea do sistema de equação, é apresentada nos itens subsequentes, uma breve descrição das principais técnicas de solução simultânea utilizadas pela literatura para prover um melhor acoplamento entre a pressão e a velocidade.

3.2.9.1. *Método Baseado em Linhas de Corrente e na Vorticidade*

Em casos de escoamentos bidimensionais incompressíveis nos quais as propriedades do fluido são constantes, é possível simplificar a equação de Navier-Stokes introduzindo a função corrente (ψ) e vorticidade (ω), como novas variáveis dependentes do problema. Estas novas variáveis são definidas em coordenadas cartesianas pelas expressões:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = v_x \qquad \frac{\partial \psi}{\partial x} = -v_y \qquad \omega = \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \qquad 3.39$$

A substituição deste novo conjunto de variáveis na equação do movimento nas direções x e y permitem que estas sejam combinadas, resultando na expressão conhecida como equação do transporte para vorticidade, representada pela expressão:

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho v_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial \omega}{\partial y} = \mu \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \qquad 3.40$$

A substituição das equações que descrevem a função corrente, Equação 3.39, na equação que descreve a vorticidade, Equação 3.40, resulta na equação de Poisson para a função corrente segundo a expressão:

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = -\omega \qquad 3.41$$

É importante observar que na equação do transporte para vorticidade não mais aparece o gradiente de pressão, contudo, é possível manipular a equação de conservação da quantidade de movimento em conjunto com a equação de conservação de massa a fim de se obter uma equação que permita obter o campo de pressão. Tal manipulação será apresentada no próximo item.

A aplicação deste procedimento deve seguir as seguintes etapas:

1. Atribuir os valores iniciais para ψ e ω no instante de tempo $t = t_0$;
2. A partir dos valores para função corrente obtidos, calcular os componentes da velocidade através de diferenciação, Equação 3.39;
3. Resolver a equação de transporte para a vorticidade, Equação 3.40, obtendo o valor da variável vorticidade para o tempo $t+\Delta t$;
4. A partir dos valores da vorticidade calculados na etapa anterior resolver a equação de Poisson para a função corrente, Equação 3.41;
5. Avançar para o próximo intervalo de tempo $t+\Delta t$.

3.2.9.2. Equação de Poisson para Pressão

A obtenção da equação de Poisson para a pressão consiste na manipulação das equações de Navier-Stokes de forma a obter uma equação que possa substituir a equação da continuidade e que apresente uma relação direta entre os campos de

velocidade e de pressão. Este processo de manipulação nada mais é do que uma redução de índice realizada na equação da continuidade, como demonstrado a seguir, para um escoamento bidimensional.

Diferenciando em relação ao tempo a equação da continuidade para um escoamento incompressível:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right) = 0 \quad 3.42$$

Diferenciando em relação a x a equação do movimento na direção x e diferenciando em relação a y a equação do movimento na direção y , considerando escoamento incompressível, obtêm-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v_x v_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v_y v_x}{\partial y} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) \quad 3.43$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v_x v_y}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v_y v_y}{\partial y} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right) \quad 3.44$$

Substituindo a Equação 3.43 e 3.44 na Equação 3.42 e realizando as simplificações necessárias, chega-se finalmente à equação de Poisson para a pressão, segundo a expressão:

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) = -\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial x} \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) \quad 3.45$$

O método baseado nas linhas de corrente e na vorticidade pode apenas ser utilizado para o cálculo do campo de pressão se a técnica de resolução numérica deste procedimento for realizada de forma consistente, ou seja, o procedimento de discretização deve utilizar na resolução da equação de Poisson os mesmo pontos utilizados na equação da vorticidade. Realizando o procedimento desta maneira, é possível resgatar os componentes da velocidade e resolver a equação de Poisson para se obter os valores do campo de pressão.

3.2.9.3. Método de Chorin

Este procedimento foi desenvolvido por CHORIN em 1967 e utiliza o conceito de compressibilidade artificial. Este tratamento permite que inicialmente o escoamento

seja tratado como compressível e à medida que o processo tende ao estado estacionário este efeito de compressibilidade desaparece. Este procedimento serviu como base para grande parte dos algoritmos para o tratamento de escoamento de fluidos incompressíveis (MALISKA, 2004).

Considere a equação do movimento para direção x , em que o termo F_x representa todos os termos não lineares, segundo a expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_x + \frac{\partial p}{\partial x} = F_x v_x \quad 3.46$$

Supondo que o valor de v_x no tempo t é conhecido e que o valor de v_x no tempo $t+\Delta t$, representado na equação por v_x^* , é obtido resolvendo-se a equação aproximada:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_x^* = F_x v_x^* \quad 3.47$$

Subtraindo a Equação 3.46 da Equação 3.47 e considerando os valores de $F_x v_x$ e $F_x v_x^*$ como iguais, obtém-se a expressão que relaciona os fluxos nos dois intervalos de tempo apresentada abaixo:

$$\rho v_x = \rho v_x^* - \Delta t \frac{\partial p}{\partial x} \quad 3.48$$

Sendo o valor do campo de pressão obtido pela seguinte equação iterativa:

$$p^{k+1} = p^k - \lambda D \quad 3.49$$

em que λ representa um parâmetro de relaxação, D a aproximação numérica da equação da conservação de massa, ou o erro em satisfazer esta equação, e k o passo do intervalo de tempo no qual a solução está sendo obtida (MALISKA, 2004).

A utilização deste procedimento deve seguir as seguintes etapas:

1. Obter o valor da velocidade v^* a partir da Equação 3.47;
2. Corrigir o campo de velocidade (v_x , v_y e v_z) através da Equação 3.48;
3. Calcular o valor da pressão pela Equação 3.49;
4. Iterar as etapas 2 e 3 até que os valores da velocidade e da pressão obtidos satisfaçam a equações da conservação dentro da faixa de tolerância estabelecida;

5. Avançar para o próximo intervalo de tempo $t+\Delta t$.

3.2.9.4. *Hipótese da Pseudo-Compressibilidade*

Outra maneira de se lidar com o acoplamento pressão velocidade é considerar o escoamento incompressível como sendo um escoamento compressível, introduzindo a hipótese da pseudo-compressibilidade. Nesta formulação, a equação da continuidade é modificada pela adição da derivada com relação ao tempo do termo de pressão, resultando em:

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad 3.50$$

em que β é uma compressibilidade artificial ou um parâmetro de pseudo-compressibilidade. Ambos os termos, a compressibilidade artificial e pseudo-compressibilidade, são alternadamente usados na literatura. Esta abordagem é amplamente aplicada associada ao método de elementos finitos (FLETCHER, 1988). Fisicamente, isso significa que ondas finitas de velocidade são introduzidas no campo de escoamento incompressível como um meio para distribuir a pressão. Para que o escoamento seja verdadeiramente incompressível, a velocidade da onda deve ser infinita, ao passo que a velocidade de propagação dessas pseudo-ondas depende da magnitude da compressibilidade artificial. Como em um escoamento incompressível, o campo de pressão é afetado instantaneamente por eventuais perturbações no campo de escoamento, na compressibilidade artificial, há uma defasagem de tempo entre a perturbação do escoamento e seu efeito sobre o campo de pressão. Idealmente, o valor da compressibilidade artificial é escolhido para ser tão elevado quanto o algoritmo escolhido permita, de modo que a incompressibilidade seja recuperada rapidamente. Por outro lado, se a compressibilidade artificial for escolhida de forma que estas ondas se movimentem muito lentamente, a variação do campo de pressão que acompanha essas ondas vai ser muito lenta. Isso irá interferir com o desenvolvimento da camada limite e, para escoamentos viscosos, o comportamento da camada limite é muito sensível ao gradiente de pressão.

Outra forma de aplicar a compressibilidade artificial desenvolvida por KAWAHARA e HIRANO (1983) tem como base admitir que a variação da densidade não ocorre de forma significativa e que a variação tanto da pressão como da densidade estão relacionadas à velocidade do som que por sua vez apresenta um valor finito. Esta

suposição permite construir uma relação direta entre os campos de velocidade e pressão na equação da continuidade.

A velocidade de propagação do som para um escoamento isentrópico é dado pela expressão:

$$a^2 = \frac{\gamma P}{\rho} \quad \text{em que : } \gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad 3.51$$

Assim sendo:

$$\rho = \frac{\gamma P}{a^2} \Rightarrow d\rho = \frac{\gamma}{a^2} dp \quad 3.52$$

Substituindo as aproximações apresentadas na Equação 3.52 na equação da continuidade, é possível obter uma expressão que relaciona diretamente o campo de pressão e os campos de velocidade, segundo a expressão:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{a^2}{\gamma} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y) \right] = 0 \quad 3.53$$

3.2.9.5. Considerações Gerais Sobre os Procedimentos

Embora o método SIMPLER necessite de um esforço computacional maior já que a cada iteração existe a necessidade de se resolver um sistema de equações a mais do que no algoritmo SIMPLE, o algoritmo SIMPLER apresenta uma convergência mais rápida e mais segura (MALISKA, 2004). Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA (1995), o número de operações numéricas envolvidas por iteração chega a ser 30% maior, entretanto, a alta taxa de convergência reduz o tempo computacional entre 30 a 50%.

Em uma comparação realizada entre os métodos SIMPLE, SIMPLEC e PRIME (MALISKA, 2004) em um problema incompressível em coordenadas generalizadas com diferentes condições de contorno, o método PRIME mostrou-se comparável aos demais e superior em grande parte das situações testadas, apresentando boa estabilidade e permitindo que valores elevados dos intervalos de tempo fossem usados durante a resolução.

VERSTEEG e MALALASEKERA (1995) comentam que os procedimentos SIMPLEC e PISO mostraram-se, em determinados tipos de escoamentos, mais eficientes que o procedimento SIMPLER. As comparações realizadas mostraram que a eficiência de cada um dos procedimentos está relacionada às condições do escoamento e

ao grau de acoplamento entre as equações do movimento com as demais equações que relacionam as demais variáveis escalares do problema.

Em uma série de trabalhos, DARWISH *et al.* (2000, 2004a, 2004b, 2004c e 2004d) compara os métodos de acoplamento SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC, PISO e PRIME aplicados a diferentes tipos de problemas: escoamento em bombas, tubos e aerofólios e também diferentes condições de escoamento: subsônica e supersônica, compressível e incompressível e monofásica e multifásica. Em termos de eficiência computacional, não existe uma superioridade global e consistente de qualquer algoritmo perante os outros. O algoritmo SIMPLER apresentou a melhor estabilidade e o método PRIME apresentou o maior tempo computacional, entretanto este algoritmo mostrou ser bastante estável para grande parte dos casos testados. O método PISO apresentou o menor número de iterações dentre todos os métodos, mas este algoritmo mostrou-se propenso a instabilidade nos problemas que envolveram ondas de choque. O desempenho do SIMPLE em termos de tempo computacional foi aceitável para a maioria dos problemas, embora este procedimento tenha também se mostrado sensível a ondas de choque e se tornado instável em alguns dos problemas

Os trabalhos de DARWISH *et al.* (2004a, 2004c e 2004d) avaliaram as aplicações de técnicas “*multigrid*” em conjunto com os métodos de tratamento do acoplamento pressão-velocidade havendo uma melhora significativa, tanto na estabilidade e convergência do método quanto na diminuição do esforço computacional.

A utilização de procedimentos de resolução segregada das equações de Navier-Stokes necessita que sejam utilizados fatores de sobre-relaxação nas equações evolutivas que atualizam o campo de velocidade e pressão, para que o procedimento não divirja ao longo do processo iterativo. A escolha correta do fator de sobre-relaxação α é fundamental para que a simulação ocorra de forma eficiente. Valores elevados deste parâmetro podem causar oscilações e até mesmo a divergência do procedimento iterativo e valores pequenos causam uma baixa velocidade de convergência do processo (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). A seleção correta deste parâmetro depende de condições do escoamento, assim o valor ótimo deve ser determinado para cada caso. PATANKAR (1980) recomenda o valor de 0,5 na atualização das velocidades e 0,8 para atualização da pressão.

Segundo MALISKA (2004) o método SIMPLEC dispensa a necessidade de sub-relaxação severa na equação de atualização do campo de pressão que é necessária ao

método SIMPLE para que este obtenha a convergência. Segundo DARWISH *et al.* (2004b), a relaxação da equação da pressão se torna desnecessária devido à aproximação obtida pelo algoritmo SIMPLER ser melhor, uma vez que as correções das velocidades aproximam melhor a equação do movimento e como consequência obtém-se uma ordem maior de convergência.

No trabalho de XUE *et al.* (2004) foram comparados os métodos de solução segregada, SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEST e PISO, para solução de escoamento de fluidos viscoelásticos. As soluções obtidas com o SIMPLEST são as mais precisas quando comparadas com os outros três algoritmos. A superioridade do SIMPLEST deve-se a dupla correção que assegura com que os campos de pressão e velocidade, obtidos ao final de cada passo de tempo, satisfaçam a equação da continuidade e a equação da conservação da quantidade de movimento. Os erros introduzidos no cálculo da correção da pressão determinam o desempenho numérico do algoritmo. O método SIMPLE tem uma precisão de $O(\Delta t^2)$, o método PISO tem uma precisão de $O(\Delta t^3)$ e o método SIMPLEST apresenta uma precisão de $O(\Delta t^4)$.

A grande vantagem do método baseado em linhas de corrente e na vorticidade é que, para escoamentos bidimensionais, torna possível a obtenção da solução do campo de escoamento com apenas duas variáveis (ψ e ω) ao invés de três (v_x , v_y e p). Entretanto, a aplicação deste procedimento em escoamentos tridimensionais é extremamente trabalhosa e demanda um esforço computacional elevado, tornando-o proibitivo. Outro aspecto negativo do procedimento reside na dificuldade de se estabelecer os valores das condições de contorno da vorticidade e da função corrente, uma vez que os valores destas variáveis nos contornos podem apenas ser calculados se a velocidade for conhecida (FERZIGER e PERIC, 2002).

4. Aproximações de Alta Ordem e Partição Multibloco

“The greater our knowledge increases, the greater our ignorance unfolds.”

John F. Kennedy

Neste capítulo é apresentada a revisão da literatura sobre os esquemas de alta ordem, os esquemas de tratamento de oscilações numéricas e as técnicas de partição multibloco. Nesta etapa as principais contribuições da literatura são referenciadas visando identificar os pontos fortes e fracos apresentados por cada procedimento aplicado à simulação de escoamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos.

4.1. Esquemas de Alta Ordem

Os primeiros trabalhos envolvendo a simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos têm início na década de 70 com os trabalhos de CROCHET e PILATE (1976) e PETERA e WALTERS (1977), em que o método de diferenças finitas foi aplicado.

Os primeiros trabalhos a aplicarem o método de elementos finitos para simulação deste tipo de fluido foram os trabalhos de KAWAHARA e TAKEUCHI (1977), CASWELL (1979) e CROCHET e BEZY (1979). Nestes trabalhos, observam-se diversas limitações tais como: instabilidade numérica devidos às aproximações utilizadas para os termos advectivos e a não obtenção de uma solução convergente quando utilizados valores do número de Weissenberg próximos a um. Nos anos que se seguiram, diferentes metodologias e formulação foram propostas com a finalidade de contornar as limitações citadas anteriormente (CROCHET *et al.*, 1984).

A utilização do método de volumes finitos na simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos data do início da década de 90 com os trabalhos de HU e JOSEPH (1990) e YOO e NA (1991), em que foi utilizado o arranjo desencontrado, o método de resolução segregado para acoplamento pressão velocidade e esquemas de primeira ordem para aproximação dos termos advectivos.

Nos trabalhos iniciais, e também em muitos trabalhos posteriores, foram utilizados os esquemas de interpolação UDS e o esquema HDS que, embora garantam a estabilidade do procedimento, podem levar a resultados imprecisos devido ao efeito da difusão numérica. Alternativamente, esquemas de interpolação de altas ordens permitem que soluções com uma melhor qualidade sejam obtidas utilizando recursos computacionais inferiores. Esquemas de alta ordem são assim chamados devido ao grau mais elevado de acurácia obtido por sua aplicação, apresentando ordem de aproximação superior a dois. Em alguns casos, apesar da melhora nos resultados, a aplicação destes esquemas apresentam problemas de convergência e estabilidade, ocasionando a formação de falsas oscilações na solução numérica obtida. Entretanto, tais oscilações podem ser minimizadas e, até mesmo eliminadas, através da aplicação de técnicas específicas ou pelo aumento do refinamento da malha (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Aproximações de alta ordem são utilizadas tanto no Método de Diferenças Finitas (MDF) quanto no Método de Volumes Finitos (MVF). Como o MDF foi o

primeiro a receber tais esquemas, já era de se esperar um maior número de aplicações encontradas na literatura fosse relativo a este método

HYMAN *et al.* (1992) formularam aproximações de 2ª e 4ª ordem em malhas não uniformes para os principais operadores diferenciais (gradiente, divergente e laplaciano), tanto para aplicação ao MFV como ao MDF. As aproximações desenvolvidas foram aplicadas à resolução dos problemas bidimensionais de difusão e da equação da onda. Comparando as soluções obtidas pelo MFV e pelo MDF usando aproximações de 2ª ordem não foram observadas diferenças significativas. A mesma comparação realizada utilizando uma aproximação de 4ª ordem mostra que a aplicação do MVF é capaz de obter soluções mais acuradas e com uma menor dependência do refino da malha que o MDF. Comparando as soluções obtidas pela aplicação do MVF usando as aproximações de 2ª e 4ª ordem os autores mostraram, em todos os casos testados, que a magnitude do erro para MVF de 4ª ordem é muito menor que o MVF de 2ª ordem, considerando o mesmo grau de refinamento.

LEONARD (1995) apresentou as explicações para as diferenças significativas encontradas para o erro de truncamento quando diferentes esquemas de aproximações, em especial do método QUICK, são aplicados ao MVF e ao MDF. Em seu trabalho, o autor demonstrou como a utilização de aproximações de ordens diferentes, para os termos advectivos e difusivos, pode alterar a ordem global da aproximação e também como o erro do procedimento de discretização está relacionado com o erro de truncamento do esquema utilizado na interpolação. Este autor também cita que, em geral, esquemas de aproximação aplicados no MVF são mais precisos que esquemas de mesma ordem aplicados ao MDF.

TAFTI (1996) comparou algumas variantes do esquema UDS com o esquema de CDS na aplicação do MDF à resolução das equações de Navier-Stokes para escoamento transiente e incompressível. Neste trabalho, são utilizadas aproximações de 5ª ordem para os termos advectivos, à exceção dos contornos em que aproximações de 3ª ordem são aplicadas. Para aproximação dos termos difusivos são utilizadas aproximações de 5ª ordem e 3ª e 2ª ordens nos contornos. O termo do gradiente de pressão é aproximado por esquemas de 2ª e 4ª ordens. O autor concluiu que, para os exemplos testados, a aplicação dos esquemas de alta ordem melhorou a acurácia do método, entretanto, tal aspecto não justifica o maior esforço computacional gasto e a maior dificuldade de aplicação da técnica. Segundo o autor, o tempo necessário para resolução do problema

utilizando os esquemas de alta ordem chega a ser o dobro do tempo gasto pelo esquema CDS.

KOBAYASHI (1999) apresentou uma classe de método de volumes finitos utilizando aproximações de Padé. O objetivo do trabalho foi estender e analisar a utilização da aproximação de Padé no MVF proposto originalmente por GAITONDE e SHANG em 1997. Neste trabalho, são avaliados: os erros de truncamento da interpolação espacial com respeito a sua ordem de precisão e resolução espectral, o efeito das condições de contorno na qualidade dos resultados, a estabilidade do método e a precisão dos esquemas explícitos aplicados para avanço de tempo. Foi constatado que o erro de truncamento obtido pela interpolação de Padé é sempre menor que o erro obtido pela interpolação de Lagrange sob mesma ordem de precisão, como, por exemplo, para um esquema de 12^a ordem esta diferença chega a ser 400 vezes maior. KOBAYASHI mostrou que o contorno tem efeito determinante na ordem global do método. Desta forma, a aplicação destes esquemas necessita que as aproximações para os contornos apresentem a mesma ordem de precisão que as aproximações utilizadas no interior do domínio, tal fato já havia sido abordado anteriormente por LEONARD (1995) com o esquema QUICK. Esta afirmação, por sua vez, entra em desacordo com os trabalhos de CARPENTER *et al.* (1993) e POINSOT e LELE (1992) que afirmam que a utilização de aproximações para as condições de contorno de no máximo uma ordem de precisão abaixo das interpolações usadas para o interior do domínio não afeta a ordem global da aproximação.

ALVES *et al.* (2000) aplicaram o método de volumes finitos usando malhas ortogonais e não uniformes, arranjo co-localizado das variáveis dependentes e resolução segregada através do algoritmo SIMPLEC, para solução de um escoamento de fluido viscoelástico em uma contração 4:1, aplicando o modelo de Maxwell com derivada convectiva superior (UCM). O esquema HRS (“*High Resolutions Scheme*”) MINMOD é utilizado na aproximação dos termos advectivos com a finalidade de evitar as oscilações numéricas próximas às regiões de elevados gradientes. O esquema MINMOD foi capaz de obter soluções convergentes para números Deborah maiores que os esquemas CDS, UDS e LUDS que apresentam limitações de convergência e estabilidade. A utilização do esquema MINMOD permitiu a obtenção da solução de problemas com valores de número de Reynolds igual 0,01 e número de Deborah de cinco, ao passo que aplicação do esquema CDS é limitada a Reynolds igual a zero e

número de Deborah igual a um. As simulações confirmam os padrões de escoamento previstos pela literatura, à medida que o número de Deborah aumenta o tamanho do vórtice junto à contração aumenta, ao passo que o vórtice junto à parede diminui. A partir de um determinado valor do número de Deborah ($De=5$) os dois vórtices se fundem com o vórtice mais próximo à contração predominante e, para valores mais elevados do parâmetro, o vórtice começa a crescer de forma única.

Dando continuidade a este trabalho, ALVES *et al.* (2001) utilizaram a mesma metodologia para simulações de escoamento de fluidos viscoelásticos ao redor de um cilindro, só que desta vez usando malhas não ortogonais e aplicando também o esquema HRS SMART. Os modelos de equações constitutivas empregados são o modelo UCM e o modelo de Oldroyd-B. Os resultados são comparados às soluções obtidas através da aplicação do MEF. Para todos os exemplos testados o MEF produziram resultados mais precisos. O esquema SMART apresentou convergência ligeiramente superior ao esquema MINMOD, entretanto, a aplicação do esquema MINMOD mostrou ser mais robusta que o MEF, especialmente quando aplicado ao modelo UCM para valores do número de Deborah maiores que um.

PEREIRA *et al.* (2001) apresentaram uma nova formulação para aplicação do MEF que utiliza esquemas compactos para discretização das equações de Navier-Stokes incompressíveis em estado estacionário ou transiente. Neste trabalho, o esquema de Padé de 4ª ordem foi aplicado tanto na aproximação dos termos advectivos quanto na aproximação dos termos difusivos. Um tratamento especial é dado aos termos não lineares de forma que a ordem da aproximação seja mantida, como de 4ª ordem. O sistema resultante da aplicação do MEF é resolvido de forma acoplada através do método de Newton-Krylov. O método é bastante robusto e pode ser aplicado para valores altos de número de Reynolds. Segundo os autores, o método de Newton pode ser diretamente aplicado na resolução do problema estacionário, embora exista a necessidade que boas estimativas sejam dadas como ponto de partida da solução para que o método obtenha convergência. Existem várias maneiras de superar este problema, nesse trabalho foi utilizado um método de Euler implícito de 1ª ordem para resolver o problema pseudo-transiente. Para simulações de escoamentos transientes o método de Runge-Kutta de 4ª ordem é utilizado.

ABOUBACAR *et al.*, (2004 e 2005) aplicaram e compararam dois esquemas diferentes de volumes finitos à simulação do escoamento entre placas de um fluido

viscoelástico estacionário e transiente, utilizando o modelo de Oldroyd-B e o modelo de *Pom-Pom*. O primeiro destes esquemas é um esquema híbrido baseado em uma discretização por elementos finitos das equações de conservação e uma discretização em volumes finitos da equação constitutiva. O segundo esquema é o método de volumes finitos tradicional utilizando um arranjo co-localizado e uma resolução segregada através do algoritmo SIMPLER. Ambos os procedimentos foram construídos de forma a prover uma precisão de segunda ordem com relação à discretização espacial. As soluções no estado estacionário foram utilizadas para avaliar a influência dos parâmetros do modelo no perfil de velocidade e tensões na saída do escoamento. Uma boa concordância entre os resultados foi encontrada, ambos os procedimentos apresentaram soluções estáveis o que, segundo os autores, permite estender a aplicação da metodologia a modelos de equações constitutivas mais sofisticadas e em geometrias mais complexas. Entretanto, é importante ressaltar que em momento algum deste trabalho tais metodologias são comparadas em relação ao esforço computacional e tempo gasto no processamento das simulações.

PILLER e STALIO (2004) aplicaram esquemas compactos de quarta ordem em uma malha não uniforme com o arranjo desencontrado de variáveis. Segundo os autores, a eficiência computacional da utilização de esquemas compactos depende das características do escoamento, como pode ser observado no trabalho de MEINKE *et al.* (2002) em que o tempo computacional gasto na resolução de um escoamento tridimensional incompressível, aplicando esquemas compactos, foi aproximadamente 1,5 vezes maior do que o tempo gasto aplicando uma combinação de esquemas de segunda ordem, considerando o mesmo nível de acurácia. Embora a aplicação de esquemas compactos gere resultados mais acurados para condições que apresentam altos números de Reynolds.

LACOR *et al.* (2004) aplicou o MVF utilizando esquemas compactos em diferentes estruturas de malhas. Segundo os autores, é necessário tomar os devidos cuidados para que esquemas de alta ordem sejam aplicados a malhas não uniformes já que a fórmula para determinação das aproximações é realizada tomando como base malhas uniformes, assim sendo a sua precisão pode apenas ser mantida quando malhas também uniformes forem utilizadas.

MUNIZ *et al.* (2005 e 2008) apresentam uma nova abordagem para a resolução das equações governantes de escoamentos de fluidos viscoelásticos, utilizando o modelo

Oldroyd-B. A metodologia proposta é baseada no MVF utilizando arranjo co-localizado das variáveis e aproximações de Lagrange de 3ª e 4ª ordem. Tais aproximações têm como base o trabalho de PEREIRA *et al.* (2001), sendo obtidas através de expansões em série de Taylor. O esquema WENO é utilizado para evitar oscilações da solução numérica, utilizando a metodologia proposta por JIANG e SHU (1996). O sistema não linear, resultante da discretização das equações, é resolvido de forma simultânea utilizando o método de Newton. A metodologia é avaliada pela sua aplicação ao problema de escoamento “*slip-stick*”. As simulações envolvendo o esquema WENO exigem um esforço computacional maior. Entretanto, as simulações usando o esquema de Lagrange de 3ª ordem para os termos advectivos e Lagrange de 4ª ordem para os termos difusivos apresentaram soluções com oscilações perto da singularidade, trazendo instabilidade ao procedimento numérico para escoamentos viscoelásticos. Longe dessa região crítica, as soluções obtidas por ambas aproximações têm o mesmo comportamento.

TRINDADE *et al.* (2007) utilizaram funções de aproximação de alta ordem à resolução de escoamentos incompressíveis em regime transientes em malhas uniformes e estruturadas. O esquema CDS de 4ª ordem foi utilizado na aproximação dos termos advectivos e difusivos. Para a discretização dos termos transiente foi aplicado o esquema de Runge-Kutta de 4ª ordem. Após cada incremento de tempo, foi realizada uma etapa de correção da pressão com a finalidade de verificar a conservação de massa. Tal correção foi realizada utilizando a equação de Poisson para a pressão, em que os fluxos de massa foram calculados a partir dos campos de velocidade obtidos no intervalo de tempo atual.

PILLER e STALIO (2008) utilizaram o MVF em conjunto com esquemas explícitos e compactos em malhas curvilíneas, não ortogonais e tridimensionais para discretização da equação da advecção-difusão. O esquema Upwind de quinta ordem desenvolvido por PIROZOLLI (2002) foi utilizado na aproximação dos termos advectivos enquanto que a aproximação dos termos difusivos foi feita através do esquema de Padé desenvolvido por KOBAYASHI (1999). Segundo os autores, o MVF utilizando esquemas compactos não tem sido muito aplicado em simulações de interesse prático, em contrapartida, a sua aplicação no MDF é bastante difundida, principalmente na simulação de geometrias complexas.

FAVERO *et al.* (2010a e 2010b) apresentam uma metodologia numérica para tratar problemas com elevados números de Weissenberg utilizando equações constitutivas diferenciais. A metodologia proposta foi incluída no pacote de código aberto OpenFOAM. As equações constitutivas implementadas foram os modelos de Oldroyd-B, UCM, Giesekus, PTT, FENE-P, FENE-CR e *Pom-Pom*, usando formulação simples e multimodo. No trabalho de 2010a, a metodologia proposta foi avaliada comparando os resultados obtidos com dados experimentais e numéricos retirados da literatura para o escoamento em uma contração plana 4:1, apresentando boa concordância de resultados. No trabalho de 2010b o pacote computacional é utilizado na simulação de escoamentos de superfície livre, com especial atenção à simulação do fenômeno de inchamento do estruturado. Também neste trabalho foi obtido uma boa concordância qualitativa entre os resultados alcançados. Os resultados demonstram um bom potencial do código para análise de escoamentos viscoelásticos, com a disponibilidade de diversos modelos de equações constitutivas e as características intrínsecas que a ferramenta OpenFOAM apresenta.

4.2. Tratamento das Oscilações Numéricas

A grande vantagem da utilização de esquemas de alta ordem está na obtenção de soluções com elevado grau de acurácia aplicando malhas com um baixo grau de refinamento. Entretanto, como já mencionado ao longo deste documento, a aplicação destes esquemas provoca oscilações na solução numérica, comumente chamada de falsa oscilação ou oscilação numérica. Para que a resposta gerada seja livre de tais oscilações é necessário a utilização de técnicas capazes de minimizar ou eliminar o surgimento de tais respostas inadequadas.

Godunov (1959) foi o primeiro a analisar as condições necessárias para que um esquema de alta ordem não apresentasse oscilações numéricas, desenvolvendo um conceito de extrema importância para o entendimento deste fenômeno, a monotonicidade. Segundo este conceito, as oscilações numéricas são consequências de um comportamento não monotônico apresentado pelos esquemas de aproximação.

Uma solução é dita monotônica quando a solução numérica não cria extremos locais e o valor mínimo local existente é não decrescente e o valor máximo local é não crescente (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). Segundo HIRSCH (2007) a solução numérica apresenta um comportamento monotônico se o valor da solução ϕ_i^{n+1}

no tempo $(n+1)$ não alcançar valores fora do obtidos pela solução ϕ_{i+j}^n no tempo anterior (n) . Matematicamente, este critério pode ser representado, considerando um esquema explícito, segundo a expressão (HIRSCH, 2007):

$$\phi_i^{n+1} = \sum_j b_j \cdot \phi_{i+j}^n \quad 4.1$$

Em que os termos b_j devem satisfazer à condição de consistência, definida pela equação:

$$\sum_j b_j = 1 \quad 4.2$$

Existe um teorema que comprova que a condição de monotonicidade é satisfeita se todos os coeficientes b_j apresentarem valores não negativos. Tal condição implica que todos os valores dos coeficientes b são menores que um, desta forma a solução ϕ_i^{n+1} é uma soma convexa de valores médios ponderados menores que um da solução antiga. Se a solução numérica estiver contida no intervalo $\phi_{\min}^n \leq \phi_{i+j}^n \leq \phi_{\max}^n$ é possível escrever que:

$$\sum_j b_j \phi_{\min}^n \leq \phi_i^{n+1} = \sum_j b_j \phi_{i+j}^n \leq \sum_j b_j \phi_{\max}^n \quad 4.3$$

O que, em consequência resulta em:

$$\phi_{\min}^n \leq \phi_i^{n+1} \leq \phi_{\max}^n \quad 4.4$$

A análise da expressão acima mostra que a nova solução calculada no tempo $(n+1)$ também está contida no mesmo intervalo que a solução anterior. Desta forma, nenhum valor novo calculado a partir da Equação 4.1 excederá o limite inicial da solução obtida para o tempo anterior. Assim sendo, qualquer possibilidade de um comportamento oscilatório é excluída e a solução é denominada como tendo um comportamento monotônico.

Outro conceito de extrema importância para formulação de esquemas não oscilatórios é o teorema de Godunov, segundo o qual todos os esquemas monotônicos são necessariamente de primeira ordem.

Utilizando tais conceitos, foi possível desenvolver esquemas de alta ordem capazes de satisfazer às condições de monotonicidade, introduzindo componentes não

lineares, denominados pela literatura de limitadores (“*limiters*”) à formulação destes esquemas. O principal papel de uma função limitadora é controlar o surgimento das oscilações prevenindo que os gradientes excedam determinados limites ou mude de sinal entre pontos adjacentes. Tais esquemas são conhecidos na literatura como esquemas de alta resolução (HRS – *High Resolution Schemes*) e foram introduzidos primeiramente por Van Leer (1973, 1974) e Boris e Book (1973, 1976) (HIRSCH, 2007).

BORIS e BOOK (1973) desenvolveram a técnica FCT (*Flux-Corrected Transport*), a qual permitiu desenvolver esquemas de alta ordem capazes de respeitar a condição de monotonicidade. Esta técnica acrescenta ao esquema uma função limitadora que tem por finalidade controlar o fluxo contra difusivo, assegurando assim que nenhum máximo ou mínimo será gerado pela solução numérica. Maiores detalhes são encontrados em HOFFMANN e CHIANG (2000).

O esquema TVD (*Total Variation Diminishing*), desenvolvido por HARTEN (1983), visa preservar a propriedade de monotonicidade da solução fazendo com que a variação total da solução discreta diminua com o tempo, ou seja, que $TV(\phi_i^{n+1}) \leq TV(\phi_i^n)$, garantindo assim que nenhuma oscilação espúria seja gerada. A grande desvantagem da aplicação deste esquema é que a ordem da aproximação utilizada apenas é mantida em regiões livres de oscilações, para regiões de elevados gradientes ou presença de descontinuidade, em que geralmente aproximações de alta ordem geram oscilações, o esquema de aproximação é reduzido a um esquema de primeira ordem, reduzido assim a ordem global da aproximação. Maiores detalhes sobre aplicação desta metodologia podem ser encontrados em VERSTEEG e MALASEKERA (2007).

O esquema CBC (*Convection Boundedness Criterion*), desenvolvido por Gaskell e Lau (1988), é baseado no conceito de variáveis normalizadas (NV – *Normalized Variables*) introduzido por Leonard (1979). Ambos procedimentos estão baseados em diferentes estimativas de razões de gradientes como variáveis normalizadas e sua representação gráfica em um diagrama de variáveis normalizadas. Maiores informações sobre a aplicação deste procedimento podem ser obtidas em HIRSCH (2007).

Comparações entre os esquemas NV, CBC, FCT e TVD podem ser obtidas em SWEBY (1984), TÓTH e ODSTRCIL (1996) e WATERSON e DECONICK (2007).

Existe na literatura uma grande quantidade de funções limitadoras de fluxo, que por sua vez dão origem a diferentes métodos de tratamento de oscilações, como é o caso dos métodos: MUSCL desenvolvido por Van Leer em 1979, MINMOD desenvolvido por Harten em 1983, SMART desenvolvido por Gaskell e Lau em 1988, ADER desenvolvido por SCHWARTZKOPFF *et al.* em 2001, dentre outros.

O esquema ENO (*Essentially Non-Oscillatory*), desenvolvido HARTEN *et al.* (1987), constitui uma outra classe de métodos para o tratamento de oscilações. Esta técnica tem como base a utilização de diferentes conjuntos de pontos, denominado estêncil, para aproximação da variável. A utilização do estêncil permite selecionar diferentes conjuntos de pontos para a obtenção da solução aproximada de forma a evitar que pontos em lados distintos de uma descontinuidade ou gradiente elevado sejam incluídos na fórmula de interpolação. LIU *et al.* (1994) desenvolveram o WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) que tem como base o esquema ENO, em que os esquemas de aproximação são gerados como uma combinação ponderada de diferentes estênceis ao invés de um único estêncil. A seleção do conjunto de pontos que constitui o estêncil e a ponderação atribuída a ele no esquema de interpolação final é realizada também de forma a evitar que pontos de ambos os lados de descontinuidades sejam incluídos na fórmula de interpolação. SHU *et al.* (1996 e 2002) apresentam critérios para a determinação dos conjuntos de pontos e procedimentos para a obtenção de valores ótimos do peso de cada um dos estênceis no esquema de interpolação final.

HANNAPEL *et al.* (1995) compararam o esquema ENO com o esquema MUSCL-TVD para a resolução de problemas uni e bidimensionais. Os resultados obtidos pelo esquema ENO apresentaram um alto grau de precisão quando comparados ao esquema MUSCL-TVD, que, para alguns dos exemplos testados, não foi capaz de gerar resultados satisfatórios. De uma forma geral, os resultados obtidos demonstraram a superioridade do esquema ENO frente ao esquema TVD, embora a aplicação do esquema seja mais trabalhosa, principalmente nos exemplos bidimensionais.

Existe uma vasta literatura sobre técnicas destinadas ao tratamento de oscilações em esquemas de alta ordem. Uma revisão detalhada sobre tais esquemas pode ser obtida em VERSTEEG e MALASEKERA (2007), HOFFMANN e CHIANG (2000) e HIRSCH (2007). Este documento apenas apresentará, mais adiante, uma descrição detalhada sobre a aplicação do esquema WENO e como tal esquema pode ser aplicado em conjunto com o esquema de Lagrange de 4º ordem.

4.3. Tratamento Multibloco

A utilização do tratamento multibloco permite refinar regiões específicas do domínio do problema sem que este refinamento seja estendido a outras regiões desnecessariamente. Tal característica faz desta técnica um procedimento de extrema eficiência para o refino de malhas, principalmente no caso de geometrias complexas (MALISKA, 2005; FREY e GEORGE, 2000; FARRASHKHALVAT e MILES, 2003).

A aplicação do tratamento multibloco consiste em subdividir o domínio do problema em um determinado número de blocos de forma que este conjunto de blocos cubra toda a extensão do domínio do problema. A cada um destes blocos é permitido um diferente grau de refinamento, possibilitando assim refinar regiões específicas e utilizar malhas mais grosseiras em regiões de pouca necessidade. A grande dificuldade da aplicação deste procedimento está na conexão entre os blocos que apresentam diferentes graus de refinamento. Os pontos da malha devem ser conectados de forma a permitir uma simples, prática e eficiente troca de informações entre os blocos vizinhos e principalmente manter a ordem global da aproximação.

As possibilidades para implementação de técnicas multiblocos são classificadas de acordo com sua topologia e as restrições empregadas nas conexões dos blocos.

Malha justaposta (*Patched Meshes*): Neste tipo de estruturação de malha não existe qualquer sobreposição entre os blocos, Figura 4.1, a única conexão existente se dá através da fronteira que estes elementos apresentam em comum. O procedimento de geração desse tipo de malha deve ser realizado de forma planejada a fim de garantir uma eficiente conexão entre os blocos, uma vez que todas as informações são trocadas através das interfaces. De acordo com a forma como a estrutura da malha é gerada pode-se obter duas situações: A primeira chamada de volumes coincidentes, Figura 4.3, ocorre quando na interface existe a coincidência da malha dos dois blocos e a segunda chamada de volume não coincidente ocorre quando as malhas dos dois blocos são completamente diferentes, Figura 4.4. A utilização de volumes coincidentes tem como principal vantagem não necessitar de funções de interpolação, já que para este caso as interfaces de conexão dos blocos são comuns. Entretanto, para que isto ocorra, o procedimento de geração de malha deve ser realizado de forma adequada o que requer um planejamento maior em sua realização. Segundo MALISKA (2005), a diferença máxima entre o comprimento dos volumes de controle relacionados na fórmula de interpolação, representados na Figura 4.3 por a e b , não deve exceder a 20%. A

necessidade de eventuais alterações estruturais em um determinado bloco pode também requerer alterações na malha dos blocos vizinhos a fim de que a coincidência dos volumes se mantenha. Desta forma, ao aplicar este procedimento é importante avaliar se o esforço necessário à construção de uma malha adequada compensa a possibilidade de conexão direta dos blocos. Para o caso de volumes não coincidentes, como não existe qualquer coincidência entre os pontos dos blocos vizinhos, não é possível fazer a utilização direta das funções de interpolação. Uma das formas de se prover a conexão entre os blocos é criar um ponto fictício no volume vizinho, representado na Figura 4.4 pelo ponto P , e aplicar uma função de interpolação que utiliza um determinado conjunto de pontos (1, 2, 3 e 4) pertencentes ao bloco, com a finalidade de gerar um valor aproximado para o ponto no qual a função de interpolação deve ser calculada. Segundo MALIKA (2005), uma boa simplificação que evita a utilização de funções de interpolações e também confere bons resultados, é utilizar o valor do ponto da malha vizinha mais próximo geometricamente do ponto fictício como sendo seu valor aproximado. Malhas que apresentam volumes coincidentes são inerentemente conservativas, já malhas em que os volumes são não coincidentes, devido à utilização de funções de aproximação, não é possível garantir a conservação.

Malha sobreposta ou Chimera (*Overlapped Meshes*): Neste tipo de implementação os blocos são posicionados de forma sobrepostas, Figura 4.2. Cada bloco pode ser refinado de forma independente, sem qualquer preocupação com a estrutura de refinamento utilizada pelo seu vizinho, já que este procedimento não necessita de interpolação nas interfaces de conexão dos blocos. Entretanto, é necessário transferir informações entre as malhas vizinhas de forma a manter a precisão da interpolação e assegurar a estabilidade do método. A grande vantagem apresentada por este tipo de malha é que se pode alterar a estrutura de refinamento em um dos blocos sem que a estrutura dos blocos vizinhos precise ser modificada, desde que continue existindo uma região adequada de sobreposição. Esta facilidade reduz o tempo para desenvolvimento da estrutura final da malha do problema. A grande desvantagem na aplicação desta técnica está na necessidade de se interpolar os valores das propriedades em pontos localizados em um malha irregular. Assim sendo, tornam-se necessários códigos de interpolação adicionais para conectar as malhas que têm por função definir quais são as interfaces de conexão e quais pontos devem ser utilizados nas fórmulas de

interpolação, o que demanda tempo e esforço computacional. Como no caso das malhas de volumes não coincidentes, não é possível garantir previamente a conservação.

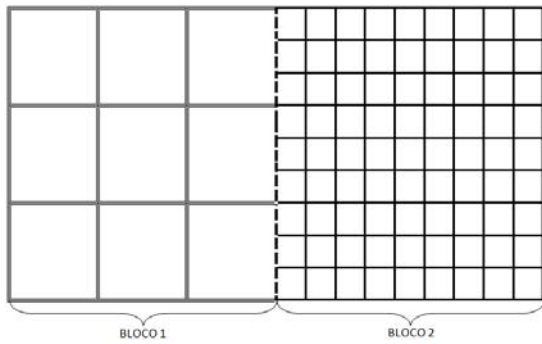


Figura 4.1: Representação de uma malha justaposta.

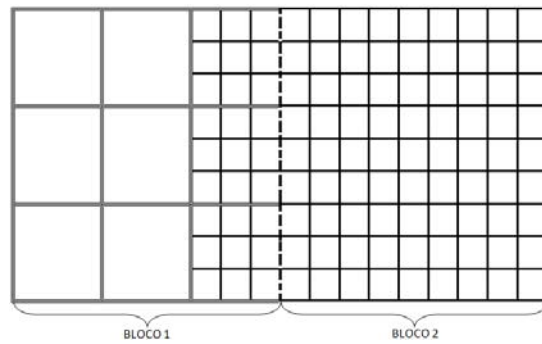


Figura 4.2: Representação de uma malha sobreposta.

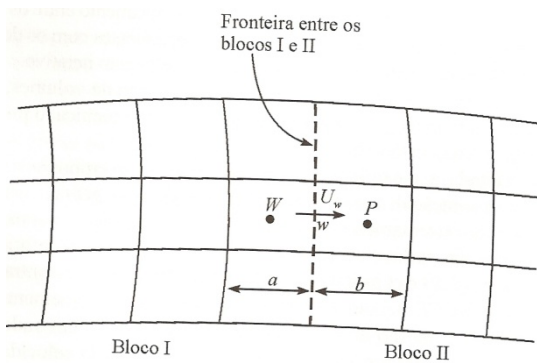


Figura 4.3: Representação de uma interface com volumes coincidentes (MALISKA, 2004).

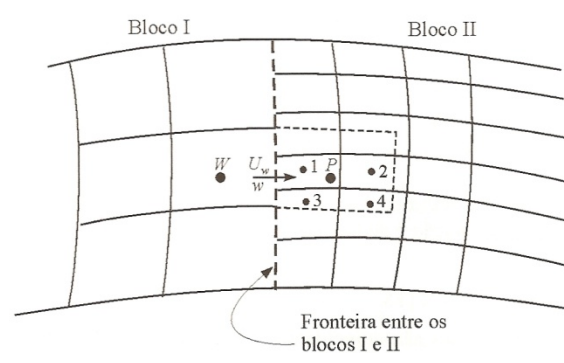


Figura 4.4: Representação de uma interface com volumes não coincidentes (MALISKA, 2004).

RAI (1984) desenvolveu uma forma conservativa de tratamento para as interfaces para aplicação de malhas justapostas. O procedimento mostrou boa capacidade de aproximar ondas de choque nas interfaces dos blocos. Demonstrando a vantagem da utilização do tratamento conservativo a problemas que envolvem discontinuidades ou fortes gradientes ao longo do escoamento.

BERGER (1987) aplicou esquemas conservativos em malhas sobrepostas para a resolução de sistemas hiperbólicos bidimensionais que apresentam discontinuidades na malha. Segundo o autor a utilização de esquemas conservativos nas interfaces garante que ondas de choque artificiais não sejam propagadas entre os blocos. Procedimentos numéricos para realizar a conexão nas regiões de sobreposição dos blocos foram desenvolvidos, aplicando fórmulas de interpolação lineares utilizando informações de ambos os blocos para determinação do fluxo desconhecido.

LIU e SHYY (1996) propuseram um tratamento na conexão das interfaces para aplicação da técnica multibloco em malhas justapostas. Este procedimento utiliza funções de interpolação bilineares na aproximação das equações do movimento. Devido ao procedimento segregado utilizado no tratamento do acoplamento pressão-velocidade, existe a necessidade de um tratamento conservativo na interface para a equação que controla o avanço da pressão. Este tratamento é feito de duas formas diferentes: a primeira emprega a condição de 1º tipo na fronteira de ambos os blocos permitindo assim associar diretamente o fluxo mássico ao valor do contorno. A segunda utiliza uma condição do 2º tipo para o contorno permitindo determinar o contorno do bloco através da interpolação do campo de pressão do bloco vizinho.

CHEN *et al.* (1997) propuseram uma nova metodologia de refinamento completamente conservativa para aplicação de técnicas multibloco em malhas estruturadas para a resolução de escoamentos laminares e turbulentos. A malha é gerada de forma justaposta e parâmetros derivados de uma solução são utilizados para identificar regiões onde malhas mais refinadas precisam ser introduzidas através de funções denominadas sensores de solução. Os valores das interfaces são obtidos através de fórmula de interpolação. Três diferentes funções de interpolação foram utilizadas e comparadas: interpolação bilinear, interpolação biquadrática e esquemas compactos. Segundo os autores, a utilização da interpolação bilinear é a mais eficiente, mas menos precisa e o esquema compacto embora menos eficiente é o mais preciso.

TANG e ZHOU (1999) investigaram a aplicação de procedimentos não conservativos para a conexão de interfaces. O procedimento aplica esquemas de interpolação conservativos no interior dos blocos e tratamentos não conservativos na interface. Segundo os autores, a aplicação de esquemas não conservativos em malhas sobrepostas frequentemente gera bons resultados, desde que não existam propagações de elevados gradientes através das interfaces. Aplicações de esquemas conservativos são mais indicados para tratamento nas interfaces onde ocorrem ondas de choque e elevados gradientes e o erro de conservação devido à utilização de esquemas não conservativos diminui à medida que a malha é refinada.

Aplicações de técnicas multiblocos com malhas justapostas utilizando computação paralela podem ser encontradas no trabalho de DJOMEHRI e BISWAS (2003), em que uma série de estratégias para melhorar o desempenho deste

procedimento em problemas de CFD são avaliadas e no trabalho de CAI *et al.* (2006) em que tais técnicas foram aplicadas a simulações de escoamentos viscosos.

ZHANG *et al.* (2007) aplicaram esquemas conservativos em conjunto com o MEF. A troca de informações entre os blocos é realizada através de um método de interpolação móvel, chamado de método de interpolação consistente. Este método resolve o sistema de equações utilizando elementos auxiliares localizados nas vizinhanças dos nós de interpolação usando o mesmo esquema de interpolação usado no cômputo dos nós internos. A utilização do método de interpolação consistente promove uma troca de informações mais precisa entre as interfaces, já que através dos elementos auxiliares introduzidos pela utilização do método é possível satisfazer a conservação de massa e de momento ao longo da interface.

ROUBOA e MONTEIRO (2008) utilizaram o tratamento multiblocos combinado com sistemas de coordenadas curvilíneas generalizadas para simulações de transferência de calor em processos de solidificação. O MVF e o MDF são utilizados na discretização do sistema visando determinar quais dos métodos, quando comparados a resultados experimentais, geram os resultados mais próximos. Uma boa concordância foi observada em ambos métodos, embora o MVF tenha apresentado resultados ligeiramente melhores. A malha multibloco é gerada por interpolações bilineares, este procedimento aumenta a concentração de células perto de singularidades onde altos gradientes são esperados.

5. Metodologia Proposta

“Science may set limits to knowledge, but should not set limits to imagination.”

Bertrand Russell

Neste capítulo será apresentada e devidamente detalhada toda a metodologia proposta para este trabalho. São apresentadas as fórmulas de interpolação de Lagrange de 4ª ordem para os termos lineares e não lineares, a metodologia que permite conectar os blocos com diferentes graus de refinamento de malhas e o procedimento de aplicação do esquema WENO sugerido para o tratamento das oscilações.

Inicialmente, será apresentado o conjunto de equações que descrevem a modelagem matemática do escoamento de fluidos viscoelástico e o sistema de equações discretizadas geradas pela aplicação do MVF ao problema.

Em seguida, serão apresentadas as fórmulas de interpolação de Lagrange de 4^a ordem aplicadas nas aproximações dos termos advectivos, difusivos, termos não lineares na parede do volume de controle, termos não lineares no centro do volume de controle e as fórmulas de desconvolução. É importante ressaltar o esforço realizado para manter a acurácia da fórmula de interpolação, especialmente nas regiões dos contornos, em que todas as fórmulas de interpolação foram construídas de maneira a manter o erro de 4^a ordem.

No item seguinte, será apresentada a técnica de partição multibloco, utilizada para conectar os blocos com diferentes graus de refinamento. A grande preocupação durante o desenvolvimento desta metodologia foi obter um procedimento que fosse capaz de manter a ordem da aproximação nos pontos de junção das malhas com diferentes graus de refinamento e que pudesse ser aplicado de forma simples e sistemática. É importante destacar que a técnica proposta neste trabalho não só foi capaz de realizar a conexão sem perdas na ordem da aproximação como também permitiu aplicar diretamente as fórmulas de interpolação base. Embora neste trabalho a fórmula de conexão multibloco seja aplicada apenas ao procedimento de Lagrange de 4^a ordem, a metodologia desenvolvida pode ser estendida a qualquer esquema de interpolação, tais como os esquemas CDS, QUICK, Lagrange de 3^a ordem ou ordens superiores e também ao esquema de Padé.

Por fim, será apresentada a aplicação do esquema de tratamento de oscilações numérica WENO para a aproximação de Lagrange de 4^a ordem.

5.1. Modelagem Matemática do Problema

O modelo matemático de um escoamento incompressível, isotérmico e transiente é composto, pelas equações de conservação de massa e de momento e pelas equações constitutivas do tensor tensão. Como o foco deste trabalho é a simulação de fluidos viscoelásticos, que comumente se desenvolvem sob baixos números de Reynolds, não existe a necessidade da utilização de modelos de turbulência. Independente do problema que se deseja simular este conjunto de equações sempre constituirá a base do modelo,

apenas nas definições da geometria, das condições iniciais e principalmente na definição das condições de contorno é que surge a especificidade de cada problema.

5.1.1. Modelo Matemático para Fluidos Viscoelásticos

Neste trabalho será considerado apenas o escoamento isotérmico e incompressível de fluidos, assim sendo o conjunto de equações que descreve este modelo é constituída pela equação da conservação de massa, equações da conservação da quantidade de movimento e equações constitutivas que sejam capazes de descrever adequadamente o comportamento do fluido. Assim sendo, o conjunto de equações que serão resolvidas neste trabalho é composto pelas seguintes relações matemáticas:

Equação da continuidade:

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}) = 0 \quad 5.1$$

Equações da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad 5.2$$

Equações constitutivas:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_N + \boldsymbol{\tau}_P$$

$$\boldsymbol{\tau}_N = 2\eta\mathbf{D}$$

$$\left(1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_P)\right) \boldsymbol{\tau}_P + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_P = 2\eta_p\mathbf{D} \quad 5.3$$

onde:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{U} + \nabla\mathbf{U}^T)$$

ρ é a massa específica, \mathbf{U} é o vetor velocidade, p é a pressão, $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão, $\boldsymbol{\tau}_N$ representa a contribuição newtoniana, normalmente do solvente e $\boldsymbol{\tau}_P$ a contribuição polimérica, representada através do modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado ou do modelo de Oldroyd-B (valor do parâmetro $\varepsilon = 0$).

Neste trabalho foram apenas resolvido o caso bidimensional utilizando o sistema de coordenadas cartesianas. Desta forma, o conjunto de equações apresentados anteriormente assume a forma:

Equação da continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial x}(v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y) = 0 \quad 5.4$$

Equações da conservação da quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial}{\partial t}(v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(v_x v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y v_x) \right) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_N \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \tau_{xx}^p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}^p}{\partial y} \\ \rho \left(\frac{\partial}{\partial t}(v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y v_y) \right) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_N \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \tau_{xy}^p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}^p}{\partial y} \end{aligned} \quad 5.5$$

Equações constitutivas:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_p} (\tau_{xx}^p + \tau_{yy}^p) \right) \tau_{xx}^p + \lambda \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t}(\tau_{xx}^p) + \frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{xx}^p) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{xx}^p) \\ -2\tau_{xx}^p \frac{\partial v_x}{\partial x} - 2\tau_{xy}^p \frac{\partial v_x}{\partial y} \end{pmatrix} &= 2\eta_p \frac{\partial v_x}{\partial x} \\ \left(1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_p} (\tau_{xx}^p + \tau_{yy}^p) \right) \tau_{yy}^p + \lambda \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t}(\tau_{yy}^p) + \frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{yy}^p) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{yy}^p) \\ -2\tau_{xy}^p \frac{\partial v_y}{\partial x} - 2\tau_{yy}^p \frac{\partial v_y}{\partial y} \end{pmatrix} &= 2\eta_p \frac{\partial v_y}{\partial y} \\ \left(1 + \frac{\lambda \varepsilon}{\eta_p} (\tau_{xx}^p + \tau_{yy}^p) \right) \tau_{xy}^p + \lambda \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t}(\tau_{xy}^p) + \frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{xy}^p) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{xy}^p) \\ -\tau_{xx}^p \frac{\partial v_y}{\partial x} - \tau_{yy}^p \frac{\partial v_x}{\partial y} \end{pmatrix} &= \eta_p \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad 5.6$$

O sistema de equações apresentado anteriormente apresenta como variáveis os componentes do vetor velocidade (v_x e v_y), a pressão (p) e os componentes do tensor-tensão (τ_{xx}^p , τ_{yy}^p e τ_{xy}^p). Em que τ_{xx}^p e τ_{yy}^p representam as tensões normais nas direções x e y , respectivamente, e τ_{xy}^p representa a tensão de cisalhamento.

Além do modelo formado pelo conjunto de Equações apresentadas em 5.4, 5.5 e 5.6, é necessário informar também o conjunto de condições de contorno e iniciais que devem ser satisfeitas pela solução.

5.1.2. Condições de Contorno

Em problemas típicos de engenharia podem ocorrer diferentes tipos de condições de contorno, que vão depender fundamentalmente do tipo de problema que se está modelando. Neste item, é devidamente detalhada a forma como as condições de contornos são mais comumente aplicadas.

Com a finalidade de facilitar o entendimento da representação adotada, a Figura 5.1 representa ilustrativamente um contorno, no qual n representa a direção normal e t a direção tangente/paralela ao plano do contorno. Assim sendo: a velocidade v_x representa a velocidade na direção x e τ_{xy} representa a tensão gerada por uma força na direção x sobre a superfície normal à direção y .

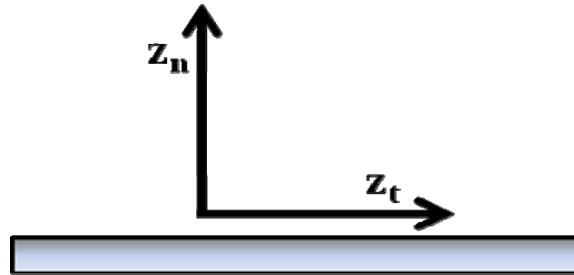


Figura 5.1: Representação ilustrativa das direções normal e tangente sobre um contorno qualquer.

5.1.2.1. Condições de Entrada

Em uma fronteira definida como entrada, as condições de contornos impostas para o campo de velocidade e a tensão devem ser especificadas, ou seja, para este tipo de condição de contorno os valores das variáveis devem ser informados. Assim sendo:

$$\begin{aligned}v_n &= v^{Entrada} \\v_t &= 0 \\ \tau_{nn} &= \tau_{nn}^{Entrada} \\ \tau_{tt} &= \tau_{tt}^{Entrada} \\ \tau_{nt} &= \tau_{nt}^{Entrada}\end{aligned}\tag{5.7}$$

em que $v^{Entrada}$, $\tau_{nn}^{Entrada}$, $\tau_{tt}^{Entrada}$ e $\tau_{nt}^{Entrada}$ são os valores especificados no contorno para velocidade e tensão.

5.1.2.2. Condições de Saída

Em uma fronteira definida como saída, geralmente considera-se o escoamento como plenamente desenvolvido. Para que este tipo de condição de contorno possa ser devidamente aplicado é necessário assegurar que a região do domínio do problema onde a condição de saída é imposta apresente o fluxo plenamente estabelecido, ou seja, não existem mais mudanças das variáveis em relação à direção normal ao escoamento. Sendo assim, as derivadas em relação à direção do escoamento são nulas e os valores das variáveis, do campo de velocidade e do tensor tensão, na parede de saída podem ser especificados como sendo iguais aos valores destas variáveis no centro do volume de controle mais próximo a parede, ou obtidas através de extrapolações.

$$\begin{aligned}
 v_n &= v^{Extrap} \\
 v_t &= 0 \\
 \frac{\partial v_n}{\partial n} &= 0 \\
 \frac{\partial v_t}{\partial n} &= 0 \\
 \tau_{nn} &= \tau_{nn}^{Extrap} \\
 \tau_{tt} &= \tau_{tt}^{Extrap} \\
 \tau_{nt} &= \tau_{nt}^{Extrap}
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

em que v^{Extrap} , τ_{nn}^{Extrap} , τ_{tt}^{Extrap} e τ_{nt}^{Extrap} são os valores de velocidade e tensão obtidos por extrapolação utilizando os valores de pontos internos ao domínio do problema. A extrapolação mais simples consiste em igualar diretamente o valor da variável na parede ao valor no centro do volume de controle mais próximo à parede, pode-se também utilizar as fórmulas de extrapolações desenvolvidas especificamente para o contorno.

5.1.2.3. Condições de Parede

Neste tipo de contorno, a condição imposta junto à parede é a condição de não deslizamento, assim sendo, a velocidade na direção tangente a parede é a mesma velocidade com que a parede se move. Para o caso especial em que a parede é fixa como não existe velocidade da parede a velocidade é nula. Como nenhuma quantidade entra ou sai pela parede, a parede é impermeável, a velocidade na direção normal a parede é também nula. Também são nulas as derivadas em relação à direção tangente e, como consequência da aplicação da equação da continuidade, a derivada da velocidade na direção normal em relação à direção normal também é nula.

$$\begin{aligned}
v_n &= 0 \\
v_t &= v^{parede} \\
\frac{\partial v_n}{\partial n} &= 0 \\
\frac{\partial v_n}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial v_t}{\partial t} &= 0 \\
\tau_{nn} &= \tau_{nn}^{EqCons} \\
\tau_{tt} &= \tau_{tt}^{EqCons} \\
\tau_{nt} &= \tau_{nt}^{EqCons}
\end{aligned}
\tag{5.9}$$

em que v^{parede} é a velocidade com que a parede se move, sendo $v_{parede} = 0$ no caso da parede fixa, τ_{nn}^{EqCons} , τ_{tt}^{EqCons} e τ_{nt}^{EqCons} são os valores de tensão obtidos no contorno quando impostas as condições de contorno para o campo de velocidade na equação constitutiva.

5.1.2.4. Condições de Simetria

Para uma linha de simetria não existe transporte de qualquer propriedade ao longo da linha de simetria, assim sendo, a velocidade na direção normal ao contorno de simetria é nula bem como a tensão de cisalhamento.

$$\begin{aligned}
v_n &= 0 \\
v_t &= v^{Extrap} \\
\frac{\partial v_n}{\partial t} &= 0 \\
\frac{\partial v_t}{\partial n} &= 0 \\
\tau_{nn} &= \tau_{nn}^{Extrap} \\
\tau_{tt} &= \tau_{tt}^{Extrap} \\
\tau_{nt} &= 0
\end{aligned}
\tag{5.10}$$

em que v^{Extrap} , τ_{nn}^{Extrap} , τ_{tt}^{Extrap} e τ_{nt}^{Extrap} são os valores de velocidade e tensão obtidos por extrapolação utilizando os valores dos pontos internos.

5.1.3. Adimensionamento do Conjunto de Equações

Neste item o conjunto de Equações descrito em 5.4, 5.5 e 5.6, será colocado na sua forma adimensional. O adimensionamento do sistema traz uma série de vantagens. Uma delas é o surgimento de números adimensionais que expressam importantes características do fluido e do escoamento como, por exemplo, o número de Reynolds, o número de Weissenberg e o número de Deborah. A introdução destes números adimensionais permite que comparações possam ser realizadas de uma forma mais eficiente do que variando parâmetros da equação. Outra grande vantagem do procedimento de adimensionamento está no escalonamento que é realizado nas variáveis fazendo com que todos estejam na mesmo ordem de grandeza.

Definindo as variáveis adimensionais:

$$\begin{aligned}
 t^* &= t \frac{v_c}{L_c} & x^* &= \frac{x}{L_c} & y^* &= \frac{y}{L_c} \\
 v_x^* &= \frac{v_x}{v_c} & v_y^* &= \frac{v_y}{v_c} & p^* &= \frac{p - p_0}{\Delta p_0} \\
 \tau_{xx}^* &= \frac{\tau_{xx}}{\tau_c} & \tau_{yy}^* &= \frac{\tau_{yy}}{\tau_c} & \tau_{xy}^* &= \frac{\tau_{xy}}{\tau_c} \\
 \eta^* &= \frac{\eta}{\eta_c} & \Delta p_0 &= \tau_0 = \eta_c \frac{v_c}{L_c}
 \end{aligned}
 \tag{5.11}$$

em que v_c , L_c , τ_c , p_0 , Δp_0 e η_c são, respectivamente, o comprimento, velocidade, tensão, pressão, queda de pressão e viscosidade característicos.

O adimensionamento da pressão foi realizado pela diferença de pressão e não por seu valor absoluto, porque a diferença de pressão apresenta um significado físico mais forte. É importante ressaltar que o valor de p_0 não altera o adimensionamento, sendo este apenas um valor de referência, já que para simulação de escoamentos incompressíveis não tem sentido referir-se a pressão absoluta, mas sim em pressão relativa.

Para a viscosidade utiliza-se o próprio valor da viscosidade no caso de fluidos newtonianos e no caso de fluidos viscoelásticos este valor é dado pela soma da contribuição newtoniana e da contribuição polimérica, segundo a expressão:

$$\eta_0 = \eta_N + \eta_P \quad 5.12$$

No caso de fluidos viscoelásticos, existem ainda duas viscosidades adimensionais dadas pelas expressões:

$$\eta_V = \frac{\eta_N}{\eta_N + \eta_P} \quad 5.13$$

$$\eta_E = \frac{\eta_P}{\eta_N + \eta_P} \quad 5.14$$

As expressões definidas anteriormente podem ser interpretadas como uma fração que define a contribuição newtoniana e a contribuição polimérica, sendo válida a seguinte relação:

$$\eta_V + \eta_E = 1 \quad 5.15$$

A substituição das variáveis definidas anteriormente, Equação 5.11, no sistema de Equações 5.4, 5.5 e 5.6, dá origem ao sistema adimensional definido pelas equações:

Equação da continuidade na forma adimensional:

$$\frac{\partial}{\partial x^*}(v_x^*) + \frac{\partial}{\partial y^*}(v_y^*) = 0 \quad 5.16$$

Equação da conservação da quantidade de movimento em x na forma adimensional:

$$\begin{aligned} \text{Re} \left(\frac{\partial}{\partial t^*}(v_x^*) + \frac{\partial}{\partial x^*}(v_x^* v_x^*) + \frac{\partial}{\partial y^*}(v_y^* v_x^*) \right) = - \frac{\partial p^*}{\partial x^*} \\ + (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^{*2}}(v_x^*) + \frac{\partial^2}{\partial y^{*2}}(v_x^*) \right) + \frac{\partial \tau_{xx}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \tau_{xy}^*}{\partial y^*} \end{aligned} \quad 5.17$$

Equação da conservação da quantidade de movimento em y na forma adimensional:

$$\begin{aligned} \text{Re} \left(\frac{\partial}{\partial t^*}(v_y^*) + \frac{\partial}{\partial x^*}(v_x^* v_y^*) + \frac{\partial}{\partial y^*}(v_y^* v_y^*) \right) = - \frac{\partial p^*}{\partial y^*} \\ + (1 - \eta_E) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^{*2}}(v_y^*) + \frac{\partial^2}{\partial y^{*2}}(v_y^*) \right) + \frac{\partial \tau_{xy}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \tau_{yy}^*}{\partial y^*} \end{aligned} \quad 5.18$$

Equações constitutivas na forma adimensional:

$$\left(1 + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} (\tau_{xx}^* + \tau_{yy}^*)\right) \tau_{xx}^* + We \left(\frac{\partial}{\partial t^*} (\tau_{xx}^*) + \frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* \tau_{xx}^*) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* \tau_{xx}^*) \right) = 2\eta_E \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} \quad 5.19$$

$$\left(-2\tau_{xx}^* \frac{\partial v_x^*}{\partial x^*} - 2\tau_{xy}^* \frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} \right)$$

$$\left(1 + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} (\tau_{xx}^* + \tau_{yy}^*)\right) \tau_{yy}^* + We \left(\frac{\partial}{\partial t^*} (\tau_{yy}^*) + \frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* \tau_{yy}^*) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* \tau_{yy}^*) \right) = 2\eta_E \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} \quad 5.20$$

$$\left(-2\tau_{xy}^* \frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} - 2\tau_{yy}^* \frac{\partial v_y^*}{\partial y^*} \right)$$

$$\left(1 + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} (\tau_{xx}^* + \tau_{yy}^*)\right) \tau_{xy}^* + We \left(\frac{\partial}{\partial t^*} (\tau_{xy}^*) + \frac{\partial}{\partial x^*} (v_x^* \tau_{xy}^*) + \frac{\partial}{\partial y^*} (v_y^* \tau_{xy}^*) \right) =$$

$$\left(-\tau_{xx}^* \frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} - \tau_{yy}^* \frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} \right) \quad 5.21$$

$$\eta_E \left(\frac{\partial v_y^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v_x^*}{\partial y^*} \right)$$

em que o termo Re representa o número de Reynolds e We o número de Weissenberg que relacionam diversos parâmetros característicos do problema segundo as expressões:

$$Re = \frac{\eta_c}{\rho_c v_c L_c} \quad 5.22$$

$$We = \lambda \frac{v_c}{L_c} \quad 5.23$$

Com a finalidade de simplificar a notação o sobrescrito “*” será omitido nas próximas definições das expressões matemática.

5.1.4. Aplicação do Método de Volumes Finitos

A aplicação do MVF ao sistema definido pelas Equações 5.16 – 5.21, gera um sistema de equações algébrico diferencial de índice dois, definido pelas expressões:

Aplicação do MVF à equação da continuidade:

$$\left[\left(\overline{v_x^y} \right)_{i+1,j} - \left(\overline{v_x^y} \right)_{i,j} \right] \Delta y + \left[\left(\overline{v_y^x} \right)_{i,j+1} - \left(\overline{v_y^x} \right)_{i,j} \right] \Delta x = 0 \quad 5.24$$

Aplicação do MVF à equação da conservação da quantidade de movimento em x:

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left(\frac{d\overline{v_x^{xy}}}{dt} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \text{Re} \left[\left(\overline{v_x v_x^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_x v_x^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \\ & \text{Re} \left[\left(\overline{v_y v_x^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_y v_x^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x = - \left[\left(\overline{p^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{p^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \\ & (1-\eta_E) \left[\left(\frac{\partial \overline{v_x^y}}{\partial x} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial \overline{v_x^y}}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + (1-\eta_E) \left[\left(\frac{\partial \overline{v_x^x}}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\frac{\partial \overline{v_x^x}}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x + \\ & \left[\left(\overline{\tau_{xx}^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\tau_{xx}^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \left[\left(\overline{\tau_{xy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{\tau_{xy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x \end{aligned} \quad 5.25$$

Aplicação do MVF à equação da conservação da quantidade de movimento em y:

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left(\frac{d\overline{v_y^{xy}}}{dt} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \text{Re} \left[\left(\overline{v_x v_y^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_x v_y^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \\ & \text{Re} \left[\left(\overline{v_y v_y^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_y v_y^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x = - \left[\left(\overline{p^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{p^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x + \\ & (1-\eta_E) \left[\left(\frac{\partial \overline{v_y^y}}{\partial x} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial \overline{v_y^y}}{\partial x} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + (1-\eta_E) \left[\left(\frac{\partial \overline{v_y^x}}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\frac{\partial \overline{v_y^x}}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x + \\ & \left[\left(\overline{\tau_{xy}^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\tau_{xy}^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \left[\left(\overline{\tau_{yy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{\tau_{yy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x \end{aligned} \quad 5.26$$

Aplicação do MVF às equações constitutivas:

$$\begin{aligned}
& \left(\overline{\tau_{xx}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} \left(\left(\overline{\tau_{xx} \tau_{xx}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \left(\overline{\tau_{yy} \tau_{xx}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y \right) + \\
& We \left(\frac{d \overline{\tau_{xx}^{xy}}}{dt} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + We \left[\left(\overline{v_x \tau_{xx}^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_x \tau_{xx}^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \\
& We \left[\left(\overline{v_y \tau_{xx}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_y \tau_{xx}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x - 2We \left(\overline{\tau_{xx} \frac{\partial v_x^{xy}}{\partial x}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y - \\
& 2We \left(\overline{\tau_{xy} \frac{\partial v_x^{xy}}{\partial y}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y = 2\eta_E \left[\left(\overline{v_x^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_x^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y
\end{aligned} \tag{5.27}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\overline{\tau_{yy}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} \left(\left(\overline{\tau_{xx} \tau_{yy}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \left(\overline{\tau_{yy} \tau_{yy}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y \right) + \\
& We \left(\frac{d \overline{\tau_{yy}^{xy}}}{dt} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + We \left[\left(\overline{v_x \tau_{yy}^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_x \tau_{yy}^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \\
& We \left[\left(\overline{v_y \tau_{yy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_y \tau_{yy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x - 2We \left(\overline{\tau_{xy} \frac{\partial v_y^{xy}}{\partial x}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y - \\
& 2We \left(\overline{\tau_{yy} \frac{\partial v_y^{xy}}{\partial y}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y = 2\eta_E \left[\left(\overline{v_y^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_y^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x
\end{aligned} \tag{5.28}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\overline{\tau_{xy}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \frac{\varepsilon We}{\eta_E} \left(\left(\overline{\tau_{xx} \tau_{xy}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \left(\overline{\tau_{yy} \tau_{xy}^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y \right) + \\
& We \left(\frac{d \overline{\tau_{xy}^{xy}}}{dt} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + We \left[\left(\overline{v_x \tau_{xy}^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_x \tau_{xy}^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y + \\
& We \left[\left(\overline{v_y \tau_{xy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_y \tau_{xy}^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x \Delta y - We \left(\overline{\tau_{xx} \frac{\partial v_y^{xy}}{\partial x}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y - \\
& We \left(\overline{\tau_{yy} \frac{\partial v_x^{xy}}{\partial y}} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y = \eta_E \left(\left[\left(\overline{v_y^y} \right)_{i+1,j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{v_y^y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} \right] \Delta y \right. \\
& \left. + \left[\left(\overline{v_x^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j+1} - \left(\overline{v_x^x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} \right] \Delta x \right)
\end{aligned} \tag{5.29}$$

Resolver diretamente o sistema de Equações 5.24, 5.25, 5.26, 5.27, 5.28 e 5.29, descreve a forma de resolução simultânea do acoplamento pressão-velocidade. Neste trabalho, optou-se por resolver o sistema diretamente utilizando para resolução do sistema de equações discretizado o código DASSLC Versão 3.2 (SECCHI, 2007).

A utilização da hipótese da pseudo-compressibilidade, consiste apenas em acrescentar a derivada da pressão em relação ao tempo multiplicada pelo inverso do fator de compressibilidade na equação da continuidade. Para este caso, o sistema a ser resolvido é obtido substituindo a Equação 5.24 pela Equação 5.30, definida pela expressão:

$$\frac{1}{\beta} \left(\frac{d \overline{p^{xy}}}{dt} \right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \Delta x \Delta y + \left[\left(\overline{v_x^y} \right)_{i+1,j} - \left(\overline{v_x^y} \right)_{i,j} \right] \Delta y + \left[\left(\overline{v_y^x} \right)_{i,j+1} - \left(\overline{v_y^x} \right)_{i,j} \right] \Delta x = 0 \tag{5.30}$$

Analisando o sistema de equações discretizadas, é possível observar que as expressões obtidas relacionam os valores das variáveis nas interfaces do volume de controle através de relações lineares e não lineares entre as variáveis que não tem “*a priori*” seus valores conhecidos. Desta forma, é necessária a utilização de funções de interpolação que permitam relacionar estes termos com valores conhecidos das variáveis localizados nos centro dos volumes de controle. Neste trabalho, foram utilizadas para aproximação dos termos lineares e não lineares as funções de interpolação de Lagrange

de 4º ordem. A forma como tais aproximações foram obtidas e suas expressões matemáticas são mostradas no tópico a seguir.

5.2. Desenvolvimento dos Esquemas de Alta Ordem

A finalidade dos esquemas de interpolação é prover uma boa aproximação para o valor de uma determinada variável situado na interface do volume de controle a partir de informações concentradas nos centros de volumes vizinhos (HIRSH, 2007).

Os esquemas desenvolvidos e aplicados neste documento têm como base os trabalhos KOBAYASHI (1999), PEREIRA *et al.* (2001) e MUNIZ *et al.* (2008). O valor da propriedade na interface é aproximado utilizando uma média ponderada dos valores médios da propriedade nos centros dos volumes vizinhos. Quanto maior a quantidade de pontos utilizados para a aproximação, mais alta será a ordem de aproximação do esquema. A utilização de esquemas de ordens mais elevadas permite que um maior grau de acurácia seja obtido mesmo utilizando malhas mais grosseiras (KOBAYASHI 1999; PEREIRA *et al.* 2001; PILLER e STALIO 2008; PILLER e STALIO, 2004; TRINDADE e PEREIRA, 2007).

5.2.1. Aplicação da Aproximação de Lagrange aos Termos Advectivos

A fórmula geral para a obtenção de aproximações de Lagrange para os valores médios na parede do volume de controle é definida pela expressão:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_i = \sum_{k=0}^m a_k \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\left(k+\frac{1}{2}\right)} + \sum_{k=0}^n b_k \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\left(k+\frac{1}{2}\right)}$$

Com :

$$\sum_{k=0}^m a_k + \sum_{k=0}^n b_k = 1$$

em que, os termos m e n relacionam os pontos a serem utilizados na aproximação e, consequentemente, a ordem da aproximação.

A forma base para a aproximação de Lagrange de 4ª ordem utiliza dois pontos anteriores e dois pontos posteriores da face do volume de controle que se deseja aproximar, segundo a expressão:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_i = a \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{3}{2}} + b \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + c \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} + d \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2}}$$

O procedimento para a obtenção das funções de interpolação consiste na identificação dos coeficientes que compõem a fórmula de aproximação. Tais coeficientes são determinados seguindo o procedimento descrito a seguir:

1. Definir a fórmula de interpolação a ser utilizada. A quantidade e a localização dos pontos estão diretamente relacionadas à ordem da aproximação. Para este caso a relação é dada pela Equação 5.32.
2. Expandir a variável em série de Taylor em torno de um ponto (x_0, y_0) , truncada de acordo com a ordem do erro desejada, quarta ordem neste caso.
3. Obter os valores médios na parede e nos centros dos volumes de controle que fazem parte da aproximação definida na etapa 1, utilizando a série de Taylor obtida na etapa 2.
4. Substituir os valores médios obtidos na etapa 3 no esquema de interpolação selecionado na etapa 1.
5. A partir da equação obtida na etapa 4 é possível construir um sistema algébrico linear de equações que apresenta como incógnitas os valores dos coeficientes da aproximação igualando os termos de mesma ordem de derivada de ambos os lados da expressão.
6. A fim de calcular a ordem da aproximação, os coeficientes obtidos na etapa 5 são substituídos na expressão de aproximação definida na etapa 1 e a diferença entre esta aproximação e o valor obtido pela expansão em série de Taylor define o erro real da expressão.

Aplicando a metodologia descrita acima para determinação dos coeficientes a , b , c e d , e substituindo estes coeficientes na Equação 5.32 o esquema de aproximação é obtido, sendo definido pela expressão:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_i = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2}} \quad 5.33$$

Analisando a expressão acima é possível observar que em regiões próximas ao contorno, tais como $i=0$, 1 , $N-1$ e N , o esquema de aproximação irá requerer informações que não estão contidas no domínio do problema. Para que este problema não ocorra é necessário que a aproximação proposta pela Equação 5.31 seja definida utilizando apenas pontos pertencentes ao domínio do problema, tomando o devido

cuidado para que a ordem da aproximação seja mantida. No Apêndice deste documento são apresentadas as fórmulas de interpolação para aplicação aos contornos do problema e o erro de aproximação relacionado a cada uma destas expressões.

5.2.2. Aplicação da Aproximação de Lagrange aos Termos Difusivos

A fórmula geral para obtenção de aproximações de Lagrange para os valores médios da derivada espacial na parede do volume de controle é definida pela expressão:

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

Com : 5.34

$$\sum_{k=0}^m a_k + \sum_{k=0}^n b_k = 1$$

A forma base da aproximação de Lagrange de 4ª ordem com os coeficientes a , b , c e d já determinados e substituindo na fórmula de aproximação, é dada pela expressão:

$$\left(\frac{\partial \overline{\phi^y}}{\partial x} \right)_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right)_{i-\frac{3}{2}} - \frac{5}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{5}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right)_{i+\frac{3}{2}} \right) \quad 5.35$$

Novamente, a aplicação da aproximação base em regiões próximas ao contorno, como $i=0$, 1 , $N-1$ e N , necessita de informações fora do domínio do problema. Sendo necessário também para este caso recalculer as fórmula de interpolação utilizando apenas pontos internos e mantendo a 4ª ordem do procedimento. As fórmulas de interpolação aplicadas ao contorno e seus respectivos erros de aproximação são apresentadas no Apêndice.

5.2.3. Aplicação da Aproximação de Lagrange aos Termos Não Lineares

A presença de termos não lineares é muito comum no sistema de equações de Navier-Stokes, como por exemplo, os produtos da velocidade $v_x v_x$, $v_x v_y$ e $v_y v_y$ presentes na equação do movimento. Não linearidades são ainda mais frequentes nas equações constitutivas necessárias à simulação de fluidos viscoelásticos, como por exemplo, as relações entre os tensores e velocidade $\tau_{xx} \tau_{xx}$, $\tau_{xx} v_x$ e $\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x}$.

Neste caso, uma abordagem bastante comum reside em aproximar diretamente o valor médio do produto das variáveis pelo produto das médias, segundo as expressões:

$$\left(\overline{\phi_1 \phi_2^y}\right)_{i,j} \approx \left(\overline{\phi_1^y}\right)_{i,j} \left(\overline{\phi_2^y}\right)_{i,j} + O(h^2) \quad 5.36$$

$$\left(\overline{\phi_1 \phi_2^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \approx \left(\overline{\phi_1^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \left(\overline{\phi_2^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + O(h^2) \quad 5.37$$

$$\left(\overline{\phi_1 \frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \left(\overline{\phi_1^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + O(h^2) \quad 5.38$$

É importante observar que, embora os termos envolvidos na multiplicação tenham precisão de 4ª ordem, a aplicação deste procedimento resulta em uma aproximação com precisão de 2ª ordem. Assim sendo, aproximar os termos não lineares segundo a Equação 5.36, 5.37 e 5.38 acarreta em uma redução da ordem global da aproximação.

PEREIRA *et al.* (2001), comparando as expansões em série de Taylor das aproximações dos termos não lineares, observaram que a diferença de aproximar o valor médio do produto das variáveis pelo produto das médias são as derivadas das variáveis envolvidas no produto mais um termo de 4ª ordem, ou seja:

$$\left(\overline{\phi_1 \phi_2^y}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} \approx \left(\overline{\phi_1^y}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} \left(\overline{\phi_2^y}\right)_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta y^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y}\right)_{(x_0,y_0)} \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial y}\right)_{(x_0,y_0)} + O(h^4) \quad 5.39$$

$$\begin{aligned} \left(\overline{\phi_1 \phi_2^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &\approx \left(\overline{\phi_1^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \left(\overline{\phi_2^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{(x_0,y_0)} \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial x}\right)_{(x_0,y_0)} + \\ &+ \frac{\Delta y^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y}\right)_{(x_0,y_0)} \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial y}\right)_{(x_0,y_0)} + O(h^4) \end{aligned} \quad 5.40$$

$$\begin{aligned} \left(\overline{\phi_1 \frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} &= \left(\overline{\phi_1^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big|_{(x_0, y_0)} \left(\overline{\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x}} \right) \Big|_{(x_0, y_0)} \\ &+ \frac{\Delta y^2}{12} \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big|_{(x_0, y_0)} \left(\overline{\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x}} \right) \Big|_{(x_0, y_0)} + O(h^4) \end{aligned} \quad 5.41$$

Desta forma, é possível gerar uma aproximação de 4ª ordem para o valor médio do produto das variáveis utilizando o produto da média, desde que os valores das derivadas sejam acrescidos à fórmula de aproximação. Neste trabalho, todas as fórmulas de aproximação para derivadas foram obtidas de forma a satisfazer o critério de correção definido por PEREIRA *et al.* (2001).

As expressões para os cálculos da derivada na parede do volume de controle e no centro do volume de controle para os pontos que não sofrem influência do contorno são dadas pelas expressões:

$$\Delta y \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \Big|_{i, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \quad 5.42$$

$$\Delta y \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} \quad 5.43$$

$$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} \quad 5.44$$

$$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} \quad 5.45$$

$$\Delta y \left(\frac{\partial \phi^{xy}}{\partial y} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{3}{2}} - \frac{2}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{2}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big|_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{5}{2}} \quad 5.46$$

Para obtenção dos valores das derivadas em regiões próximas ao contorno, as aproximações precisam ser reescritas para que os limites impostos pelo domínio do

problema sejam respeitados e são apresentadas juntas a seus respectivos erros de aproximação no Apêndice deste documento.

A substituição das aproximações das derivadas apresentadas pelas Equações 5.42, 5.43, 5.44, 5.45 e 5.46 nas aproximações dos termos não lineares Equações 5.39, 5.40 e 5.41 garantem que o método tenha acurácia de 4ª ordem.

Outra forma possível de tratar os termos não lineares, que também mantém a ordem da aproximação, é realizar diretamente o produto entre os valores médios nos centros dos volumes de controle envolvidos no cálculo da aproximação do termo não linear na fórmula de interpolação, como representado abaixo:

$$\left(\overline{\phi\theta^y}\right)_i = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2}} \quad 5.47$$

Para os termos não lineares próximos às regiões de contorno, $i=0, 1, N-1$ e N , as aproximações são calculadas de acordo com as expressões apresentadas abaixo, procedimento análogo é utilizado para os pontos $j=0,1, N-1$ e N :

$$\left(\overline{\phi\theta^y}\right)_0 = \frac{25}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{1}{2}} - \frac{23}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{5}{2}} - \frac{1}{4}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{7}{2}} \quad 5.48$$

$$\left(\overline{\phi\theta^y}\right)_1 = \frac{1}{4}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{1}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{3}{2}} - \frac{5}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{5}{2}} + \frac{1}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{\frac{7}{2}} \quad 5.49$$

$$\left(\overline{\phi\theta^y}\right)_{N-1} = \frac{1}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{7}{2}} - \frac{5}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{4}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2}} \quad 5.50$$

$$\left(\overline{\phi\theta^y}\right)_N = -\frac{1}{4}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{7}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2}} - \frac{23}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2}} + \frac{25}{12}\left(\overline{\phi\theta^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2}} \quad 5.51$$

A aplicação deste procedimento permite que as mesmas funções de interpolações aplicadas na aproximação dos termos advectivos sejam utilizadas na aproximação dos termos não lineares. Sua implementação computacional também é bem mais fácil de ser realizada comparando com o outro procedimento. Entretanto, a aplicação do procedimento falha nos pontos $i=0$ e N , em que o valor da variável ϕ ou θ é especificado, pois nesta situação a utilização desta metodologia irá sempre aproximar

o valor da variável, ignorando a informação do contorno. No caso em que os valores de ϕ e θ são ambos especificados o produto é calculado diretamente pela multiplicação das variáveis.

5.2.4. Aplicação da Técnica de Desconvolução

O procedimento desenvolvido e aplicado neste trabalho utiliza diretamente os valores médios da variável ao longo de todo processo de resolução do problema. Apenas ao final do procedimento os valores pontuais são resgatados aplicando-se a técnica de desconvolução. A vantagem da utilização direta dos valores médios é que não existe a necessidade de aproximar as integrais, o que diminui a quantidade de pontos envolvidos na aproximação tornando o procedimento mais rápido e mais preciso, PEREIRA *et al.* (2001).

Por definição, desconvolução é a restauração de sinais degradados por uma operação de convolução. No contexto do MVF a desconvolução é necessária para que os valores pontuais das variáveis sejam obtidos a partir dos valores médios das variáveis nos centros dos volumes de controle. Esta operação não é necessária quando são utilizadas aproximações de segunda ordem, mas é essencial quando aplicadas a técnicas de ordens mais elevadas PILLER e STALIO (2008).

A fórmula geral para obtenção da fórmula de desconvolução aplicada ao esquema de Lagrange é definida pela expressão:

$$(\phi)_i = \sum_{k=0}^m a_k (\overline{\phi^x})_{i-(k+\frac{1}{2})} + \sum_{k=0}^n b_k (\overline{\phi^x})_{i+(k+\frac{1}{2})} \quad 5.52$$

Com :

$$\sum_{k=0}^m a_k + \sum_{k=0}^n b_k = 1$$

nos quais, os termos m e n relacionam os pontos a serem utilizados na aproximação e, conseqüentemente, a ordem da aproximação.

A fórmula base de desconvolução aplicada ao esquema de Lagrange de 4ª ordem utiliza dois valores médios anteriores e dois posteriores ao ponto do volume de controle que se deseja conhecer o valor, segundo a expressão:

$$(\phi)_i = a(\overline{\phi^x})_{i-\frac{3}{2}} + b(\overline{\phi^x})_{i-\frac{1}{2}} + c(\overline{\phi^x})_{i+\frac{1}{2}} + d(\overline{\phi^x})_{i+\frac{3}{2}} \quad 5.53$$

O procedimento para a obtenção dos valores das variáveis nos vértices dos volumes de controle a partir dos valores médios nas interfaces dos volumes vizinhos consiste na identificação dos coeficientes que compõem a fórmula de desconvolução. Tais coeficientes são determinados seguindo o procedimento descrito a seguir:

1. Definir a fórmula de desconvolução a ser utilizada, de acordo com o esquema de interpolação utilizado, neste caso a Equação 5.53.
2. Expandir a variável em série de Taylor em torno de um ponto (x_0, y_0) , truncada de acordo com a ordem do erro desejada.
3. Obter os valores médios nas faces do volume de controle que fazem parte da fórmula de desconvolução, utilizando a série de Taylor obtida na etapa 1.
4. Substituir os valores médios obtidos na etapa 3 na fórmula de desconvolução definida na etapa 1.
5. A partir da equação obtida na etapa 3, que relaciona o valor da variável no vértice ao valor médio nas interfaces vizinhas, é possível construir um sistema algébrico linear de equações que apresenta como incógnitas os valores dos coeficientes da fórmula de desconvolução. Tal sistema é gerado igualando-se os termos de mesma ordem de derivada de ambos os lados da expressão de aproximação obtida na etapa anterior.

Aplicando a metodologia descrita anteriormente para determinação dos coeficientes a , b , c e d , e substituindo os coeficientes obtidos na Equação 5.53 o esquema de desconvolução é obtido, resultando na expressão:

$$(\phi)_i = -\frac{1}{12}(\overline{\phi^x})_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}(\overline{\phi^x})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}(\overline{\phi^x})_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}(\overline{\phi^x})_{i+\frac{3}{2}} \quad 5.54$$

Nas regiões próximas aos contornos, $i=0,1$, $N-1$ e N , o esquema de desconvolução a ser aplicado encontra-se devidamente descrito no Apêndice deste documento.

5.3. Tratamento Multibloco

O desenvolvimento de um procedimento computacional que aplique a técnica de partição multibloco deve tratar de forma clara e independente a transferência de informações entre os blocos. Este procedimento deve ser capaz de conectar os blocos de diferentes graus de refinamento de forma simples, rápida e de fácil implementação. Cada bloco deve ser capaz de reconhecer com que tipo de contorno sua interface está conectada, seja ela parede, entrada, saída, simetria ou outro bloco. Além destas características, o procedimento de conexão deve ser capaz de manter a ordem da aproximação na interface de ligação entre os blocos, o que constitui o principal desafio enfrentado durante a formulação deste procedimento.

Várias metodologias foram desenvolvidas e testadas. Inicialmente, buscou-se recalcular os esquemas de interpolações de forma que seus respectivos coeficientes fossem relacionados com o grau de refinamento apresentado pelo bloco vizinho, ou seja, os valores dos coeficientes seriam funções do comprimento do volume de controle do bloco mais refinado. Tal abordagem é ilustrativamente apresentada na Figura 5.2 e Figura 5.3 para o esquema de Lagrange de 4ª ordem considerando blocos com refinamentos pares e ímpares.

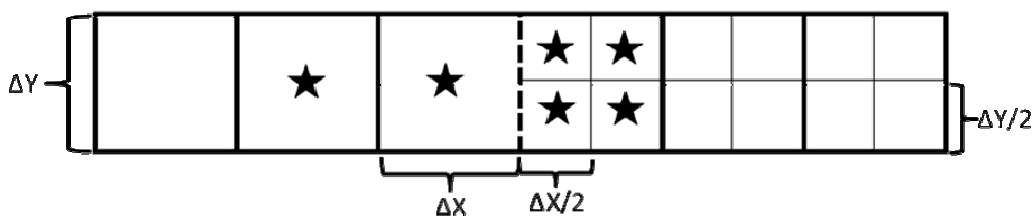


Figura 5.2: Esquema de interpolação de Lagrange de 4ª ordem aplicado ao tratamento multibloco, utilizando grau de refinamento par.

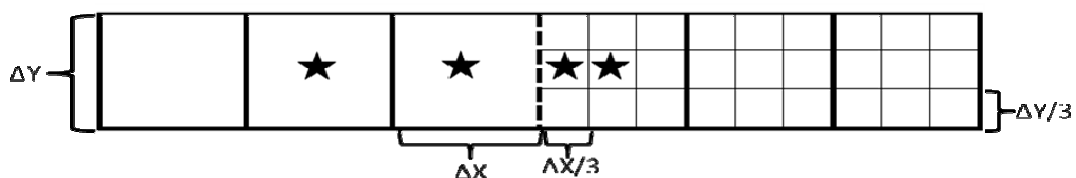


Figura 5.3: Esquema de interpolação de Lagrange de 4ª ordem aplicado ao tratamento multibloco, utilizando grau de refinamento ímpar.

Para as situações apresentadas nas Figura 5.2 e Figura 5.3, as fórmulas de aproximação a serem calculadas a fim de se obter os coeficientes são, para malha par e ímpar, respectivamente:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^{\frac{\Delta Y}{2}} g(x_0, y_0 + \beta) d\beta &= \frac{a}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^{\frac{\Delta Y}{2}} \int_{-2\Delta X}^{-\Delta X} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta + \\
\frac{b}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^{\frac{\Delta Y}{2}} \int_{-\Delta X}^0 g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta &+ \frac{c}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^0 \int_0^{\frac{\Delta X}{N_x}} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta \\
+ \frac{d}{\Delta X \Delta Y} \int_0^{\frac{\Delta Y}{N_y}} \int_0^{\frac{\Delta X}{N_x}} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta &+ \frac{e}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{N_y}}^0 \int_{\frac{\Delta X}{N_x}}^{\frac{2\Delta X}{N_x}} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta \\
+ \frac{f}{\Delta X \Delta Y} \int_0^{\frac{\Delta Y}{N_y}} \int_{\frac{\Delta X}{N_x}}^{\frac{2\Delta X}{N_x}} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta &
\end{aligned} \tag{5.55}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^{\frac{\Delta Y}{2}} g(x_0, y_0 + \beta) d\beta &= \frac{a}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^{\frac{\Delta Y}{2}} \int_{-2\Delta X}^{-\Delta X} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta \\
+ \frac{b}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2}}^{\frac{\Delta Y}{2}} \int_{-\Delta X}^0 g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta &+ \frac{c}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2\cdot N_y}}^{\frac{\Delta Y}{2\cdot N_y}} \int_0^{\frac{\Delta X}{N_x}} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta \\
+ \frac{d}{\Delta X \Delta Y} \int_{-\frac{\Delta Y}{2\cdot N_y}}^{\frac{\Delta Y}{2\cdot N_y}} \int_{\frac{\Delta X}{N_x}}^{\frac{2\Delta X}{N_x}} g(x_0 + \alpha, y_0 + \beta) d\alpha d\beta &
\end{aligned} \tag{5.56}$$

Entretanto, a aplicação das fórmulas de interpolação apresentadas para as interfaces de acordo com as Equações 5.55 e 5.56 não foram capazes de manter a ordem de precisão do esquema original, sendo reduzida para segunda ordem. Desta forma, para que este esquema de interpolação pudesse ser aplicado, a quantidade de pontos utilizados pela fórmula de interpolação deveria ser ainda maior, o que aumentaria o custo computacional. Devido a estes fatores a aplicação deste procedimento foi descartada.

Analisando a Figura 5.3 é possível observar que existe uma grande vantagem na utilização de refinamentos ímpares, já que nesta situação os centros dos volumes de controle dos blocos permanecem sobre uma mesma linha de simetria. Como todos os volumes de controle da malha mais refinada e da malha menos refinada estão sobre a mesma linha de simetria é possível utilizar diretamente as fórmulas de interpolação de Lagrange. Para isto, basta apenas desenvolver um procedimento que identifique os pontos que estão localizados no centro do volume de controle da malha mais refinada e localizados a mesma distância ΔX ou ΔY da malha menos refinada. Partindo desta condição, buscou-se desenvolver uma fórmula de conexão dos blocos que pudesse ser feita de forma simples e automática com o requisito fundamental da manutenção da

ordem da aproximação do esquema de interpolação utilizado, trabalhando sempre com índices de refinamento ímpares.

A base do procedimento consiste em realizar refinamentos apenas utilizando múltiplos ímpares de ΔX e ΔY , que representam o comprimento e a altura dos volumes de controle que constituem a malha uniforme e estruturada na qual a técnica de interpolação foi formulada. A fim de facilitar a implementação computacional do procedimento de refino foi criado o índice de refino do bloco (IR), este índice define o espaçamento entre os volumes de controle que constituem o bloco. Optou-se por utilizar sempre o número três na subdivisão da malha de forma que o espaçamento entre os volumes é calculado segundo a expressão:

$$\Delta X^{Bloco} = \frac{\Delta X^{Base}}{3^{IR}} \quad IR = 0 \Rightarrow \Delta X^{Bloco} = \Delta X^{Base}$$

$$\Delta Y^{Bloco} = \frac{\Delta Y^{Base}}{3^{IR}} \quad IR = 0 \Rightarrow \Delta Y^{Bloco} = \Delta Y^{Base}$$

5.57

Como todos os blocos que constituem a malha computacional são gerados utilizando múltiplos de ΔX e ΔY é possível realizar a conexão direta entre os blocos, bastando apenas identificar o ponto da malha vizinha que apresenta o mesmo valor de ΔX ou ΔY no qual as fórmulas de interpolação foram calculadas.

Com exceção das condições de contorno clássicas: entrada, saída, parede e simetria, um determinado bloco pode ter como contorno outro bloco. O contorno entre blocos pode ocorrer de três formas diferentes. Na primeira delas o índice de refinamento entre os blocos é igual, Figura 5.4, na segunda o índice de refino do bloco vizinho é menor, Figura 5.5 e por último o índice de refino do bloco vizinho é maior, Figura 5.6.

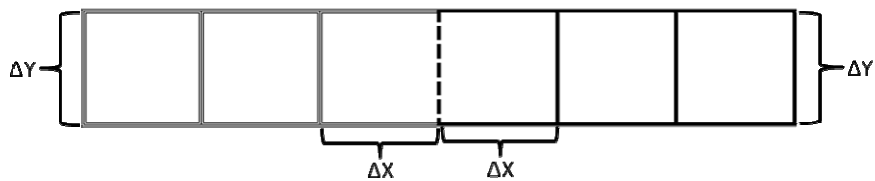


Figura 5.4: Bloco conectado por malhas de igual refinamento.

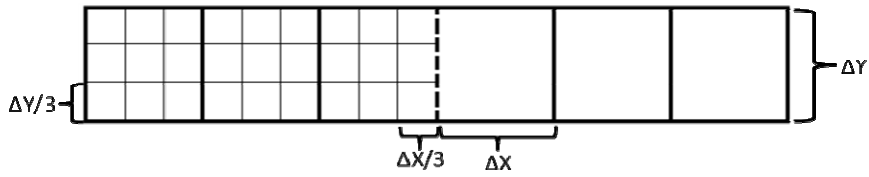


Figura 5.5: Bloco com índice de refinamento superior.

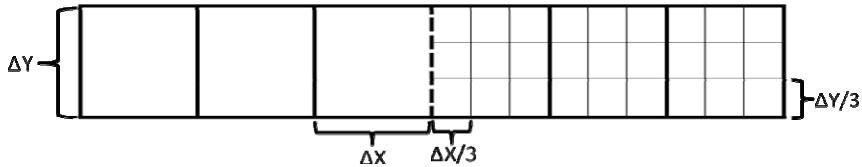


Figura 5.6: Bloco com índice de refinamento inferior.

Utilizando o procedimento apresentado anteriormente, foram formulados diferentes esquemas de conexões entre os blocos, nos quais as fórmulas de interpolação podem ser diretamente utilizadas mantendo assim a ordem da aproximação.

O primeiro destes esquemas (MB1) conecta a interface utilizando dois pontos contidos dentro do domínio do bloco e dois pontos localizados no bloco vizinho, sempre respeitando o valor de ΔX ou ΔY da fórmula de interpolação, conforme a Figura 5.7, Figura 5.8 e Figura 5.9.

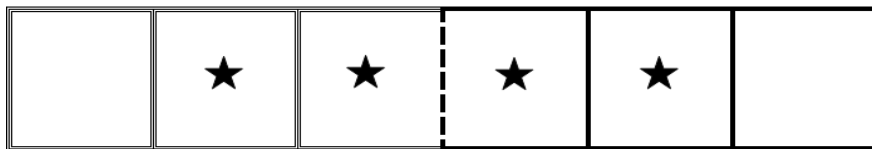


Figura 5.7: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas de igual refinamento.

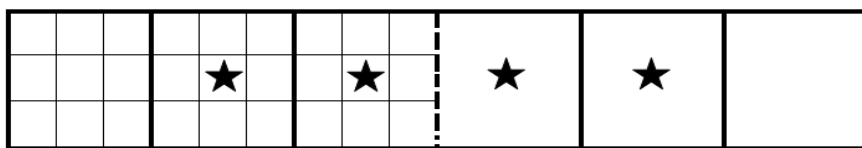


Figura 5.8: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento superior.

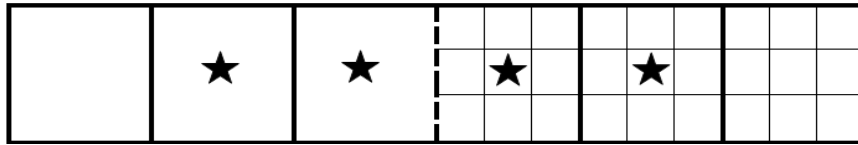


Figura 5.9: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior.

Como neste trabalho são utilizados esquemas de quarta ordem, os pontos localizados próximo à interface podem também fazer parte da conexão multibloco, Figura 5.10, aumentando assim a quantidade de informações transferidas entre os blocos e podendo melhorar o procedimento de convergência.

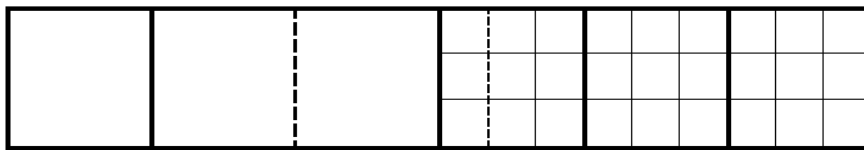


Figura 5.10: Representação ilustrativa dos pontos localizados próximos a interface de conexão que podem ser incluídos na conexão entre os blocos.

Entretanto, para os pontos próximos à interface em que o bloco apresenta maior refinamento que o bloco vizinho não é possível realizar a troca de informações entre as malhas, pois a utilização de qualquer conjunto de pontos pertencentes à malha vizinha que é menos refinada, não resultaria em um esquema que mantivesse a ordem do esquema de aproximação. Para este caso, deve-se aplicar um esquema de interpolação que utilize apenas pontos contidos no domínio do bloco, Figura 5.11.

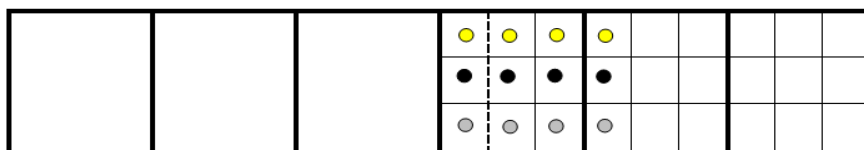


Figura 5.11: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB1 aplicada a malhas com índice de refinamento superior para pontos próximos a interface de conexão.

Para os pontos próximos à interface em que o bloco apresenta menor refinamento que o bloco vizinho, duas abordagens são possíveis: a primeira é não considerar os pontos da malha mais refinada, utilizando apenas pontos internos ao domínio do bloco da mesma forma que a interpolação realizada na malha mais refinada, Figura 5.12. E a segunda opção é incluir as informações da malha mais refinada,

utilizando neste caso a mesma fórmula de interpolação que foi aplicada ao contorno, Figura 5.13.

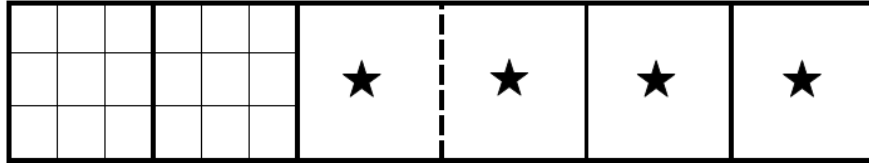


Figura 5.12: Representação ilustrativa da conexão multibloco MBI aplicada a malhas com índice de refinamento inferior para pontos próximos a interface de conexão, usando apenas pontos internos.

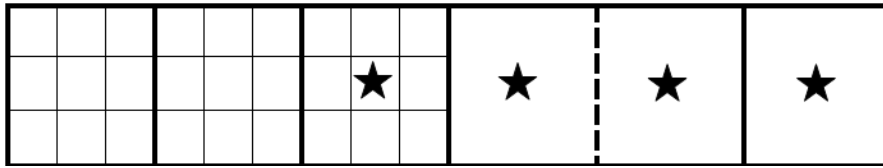


Figura 5.13: Representação ilustrativa da conexão multibloco MBI aplicada a malhas com índice de refinamento inferior para pontos próximos a interface de conexão, usando informações do bloco vizinho.

Utilizando o esquema apresentado acima, as funções de interpolação para a aproximação dos termos advectivos aplicadas à conexão dos blocos de refinamento diferentes, seguindo a ordem definida pelas Figura 5.7, Figura 5.8, Figura 5.9, Figura 5.11, Figura 5.12 e Figura 5.13, são representadas, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-\frac{3}{2},j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-\frac{1}{2},j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} \quad 5.58$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR2,j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR1,j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} \quad 5.59$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-\frac{3}{2},j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-\frac{1}{2},j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{CR1,j}^{bl} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{CR2,j}^{bl} \quad 5.60$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{1,j}^{bl} = \frac{1}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{0,j}^{bl} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} - \frac{5}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} + \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j}^{bl} \quad 5.61$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{1,j}^{bl} = \frac{1}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{0,j}^{bl} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} - \frac{5}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} + \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j}^{bl} \quad 5.62$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{1,j}^{bl} = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR1,j}^{blv} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j}^{bl} \quad 5.63$$

em que bl faz referência ao bloco e blv ao bloco vizinho que faz fronteira com o bloco bl , $CR1=3^{ir}/2$ e $CR2=3^{ir+1}/2$.

As demais fórmulas de interpolação para termos lineares e não lineares foram obtida seguindo o mesmo procedimento apresentada para conexão MB1.

O procedimento apresentado anteriormente é aplicado de forma idêntica para os outros três contornos do bloco: superior, inferior e direito. Devido à similaridade na aplicação deste procedimento, optou-se por suprimir suas descrições neste documento.

Outra forma de conexão multibloco testada neste trabalho, esquema de conexão MB2, aplica novamente as fórmulas originais de interpolações concentrando a maior quantidade de pontos possíveis no bloco de maior refinamento. Para este esquema, a fórmula de conexão da interface utiliza a informação de 3 pontos contidos na malha de maior refinamento e apenas um ponto na malha de menor refinamento, sempre respeitando o valor de ΔX ou ΔY da fórmula de interpolação, conforme a Figura 5.14 e Figura 5.15

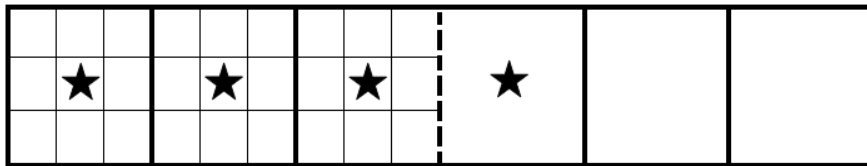


Figura 5.14: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB2 aplicada a malhas com índice de refinamento superior.

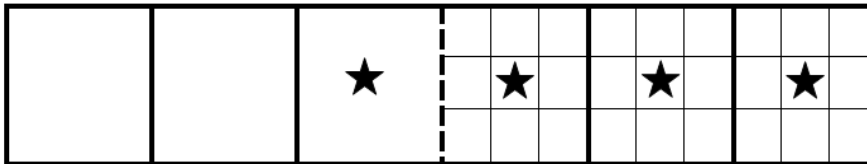


Figura 5.15: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB2 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior.

Para os pontos próximos à interface em que o bloco apresenta maior refinamento que seu vizinho a fórmula de conexão utiliza apenas os pontos dentro do domínio do bloco, sendo neste caso utilizado a mesma estrutura de conexão apresentada para a metodologia MB1, Figura 5.11.

Para o caso oposto, os pontos próximos à interface em que o bloco apresenta menor refinamento que seu vizinho, novamente duas abordagens podem ser utilizadas. A primeira opção é idêntica ao esquema MB1, ou seja, considera apenas pontos internos, Figura 5.12. A segunda opção é incluir as informações da malha mais refinada, Figura 5.16.

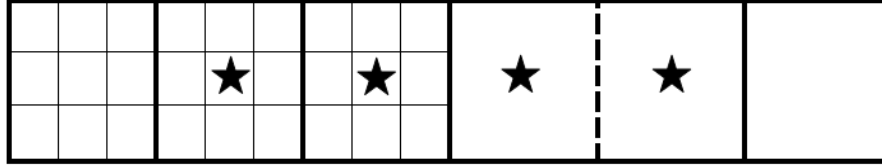


Figura 5.16: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB2 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior para pontos próximos a interface de conexão, usando informações do bloco vizinho.

Para o esquema MB2 as funções de interpolação aplicadas à conexão dos blocos de refinamento diferentes, seguindo a ordem definida pelas Figura 5.14, Figura 5.15 e Figura 5.16, são representadas, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N_x-CR3,j}^{blv} - \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N_x-CR2,j}^{blv} + \frac{13}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N_x-CR1,j}^{blv} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} \quad 5.64$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N_x-CR1,j}^{blv} + \frac{13}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} - \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} + \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j}^{bl} \quad 5.65$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{1,j}^{bl} = \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N_x-CR2,j}^{blv} - \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N_x-CR1,j}^{blv} + \frac{13}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} \quad 5.66$$

em que bl faz referência ao bloco e blv ao bloco vizinho que faz fronteira com o bloco bl , $CR1=3^{ir}/2$ e $CR2=3^{ir+1}/2$ e $CR3=3^{ir+2}/2$.

As demais fórmulas de interpolação para termos lineares e não lineares foram obtidas utilizando o mesmo procedimento utilizado para o esquema MB2.

Por fim buscou-se estudar qual seria o efeito de concentrar a maior quantidade de pontos possíveis no bloco de menor refinamento, resultando no esquema de conexão MB3.

Neste esquema a fórmula de conexão da interface utiliza a informação de 3 pontos contidos na malha de menor refinamento e apenas um ponto na malha de maior

refinamento, sempre respeitando o valor de ΔX ou ΔY da fórmula de interpolação, conforme a Figura 5.17 e Figura 5.18.

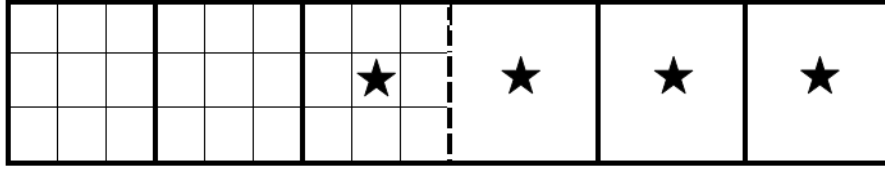


Figura 5.17: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB3 aplicada a malhas com índice de refinamento superior.

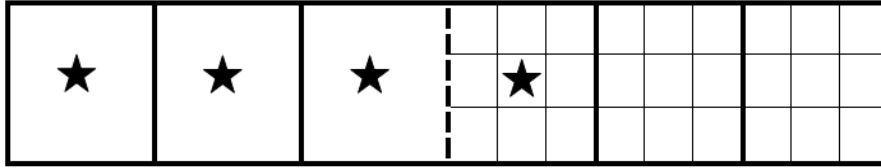


Figura 5.18: Representação ilustrativa da conexão multibloco MB3 aplicada a malhas com índice de refinamento inferior.

Os pontos próximos à interface em que o bloco apresenta maior refinamento que seu vizinho utiliza a mesma fórmula de conexão que os procedimentos MB1 e MB2, representado pela Figura 5.11.

Já para os pontos próximos à interface em que o bloco apresenta menor refinamento que seu vizinho, pode-se utilizar a abordagem que considera apenas pontos internos, Figura 5.12. Para melhorar a troca de informações para estes pontos foi também testada a utilização do esquema proposto para MB1 definido na Figura 5.13, que permite coletar informação do bloco vizinho na fórmula de interpolação.

Para o esquema MB3 as funções de interpolação aplicadas à conexão dos blocos de refinamento diferentes, seguindo a ordem definida pelas Figura 5.17 e Figura 5.18, são representadas, respectivamente, pelas seguintes expressões:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR1,j}^{blv} + \frac{13}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} - \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j}^{bl} + \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j}^{bl} \quad 5.67$$

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{0,j}^{bl} = \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR3,j}^{blv} - \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR2,j}^{blv} + \frac{13}{12} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{Nx-CR1,j}^{blv} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j}^{bl} \quad 5.68$$

em que bl faz referência ao bloco e blv ao bloco vizinho que faz fronteira com o bloco bl , $CR1=3^{ir}/2$ e $CR2=3^{ir+1}/2$ e $CR3=3^{ir+2}/2$.

Seguindo o mesmo procedimento utilizado para o esquema MB3 as fórmulas de interpolação para os demais termos lineares e não lineares foram também obtidas.

Para que as fórmulas de interpolação possam ser utilizadas diretamente deve haver a coincidência da malha dos dois blocos na interface de conexão. Normalmente, esta exigência faz com que o esforço e o tempo necessário à geração deste tipo de malha sejam maiores do que para aplicação de malhas sobrepostas. Entretanto, o procedimento proposto neste trabalho para geração e correta adequação da malha é feito de forma simples e automática sem acarretar aumentos consideráveis de tempos ou esforços para aplicação da metodologia.

5.4. Procedimento Proposto Para Tratamento das Oscilações - WENO

O esquema WENO apresenta uma boa capacidade de lidar com o surgimento de oscilações numéricas e também não reduz a ordem da aproximação em regiões de descontinuidade como acontece com o método baseados em funções limitadoras como é o caso do TVD.

O esquema WENO foi desenvolvido por *Liu et al.* (1994) e consiste em uma combinação convexa de diferentes esquemas de mesma ordem de aproximação, mas com diferentes estênceis. Sua principal característica é evitar a presença de oscilações irrealis na solução em regiões de altos gradientes ou descontinuidades ponderando os diferentes estênceis que fazem parte do esquema de interpolação. O peso relativo a cada um dos estênceis depende da localização de cada ponto de cada estêncil em relação aos pontos da descontinuidade e deve ser obtido de forma a evitar o aparecimento das oscilações.

Para aplicação do esquema WENO o fluxo na interface i é representado como uma combinação convexa das funções f segundo a expressão:

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_i = \sum_{k=0}^{r-1} \varpi_k f_k \quad 5.69$$

em que r representa o número de estênceis adotados e o termo ϖ_k é o peso que cada estêncil apresenta no esquema resultante, obtido segundo a expressão (JIANG e SHU, 1996):

$$\varpi_k = \frac{\alpha_k}{\sum_{i=0}^{r-1} \alpha_i} \quad 5.70$$

$$\alpha_k = \frac{c_k}{(\varepsilon + IS_k)^2}$$

Os valores de IS_k são obtidos segundo as expressões:

$$IS_0 = \frac{13}{12} \left(f_{i-\frac{5}{2}} - 2f_{i-\frac{3}{2}} + f_{i-\frac{1}{2}} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(f_{i-\frac{5}{2}} - 4f_{i-\frac{3}{2}} + 3f_{i-\frac{1}{2}} \right)^2 \quad 5.71$$

$$IS_1 = \frac{13}{12} \left(f_{i-\frac{3}{2}} - 2f_{i-\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(f_{i-\frac{3}{2}} - f_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 \quad 5.72$$

$$IS_2 = \frac{13}{12} \left(f_{i-\frac{1}{2}} - 2f_{i+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{3}{2}} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(3f_{i-\frac{1}{2}} - 4f_{i+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{3}{2}} \right)^2 \quad 5.73$$

O termo c_k é chamado de peso ótimo, IS_k proporciona a suavidade do estêncil e ε é uma pequena constante positiva utilizada para evitar divisões por zero, normalmente 10^{-6} . Entretanto, segundo JIANG e SHU (1996) a solução numérica não é afetada para valores entre (10^{-5} a 10^{-7}). Os valores ótimos para os parâmetros c_k , apresentados também neste trabalho são: $c_0 = \frac{1}{10}$, $c_1 = \frac{6}{10}$ e $c_2 = \frac{3}{10}$.

Para a aplicação do esquema de Lagrange de 4ª ordem em conjunto com o tratamento WENO é necessário que os valores dos parâmetros c_k sejam recalculados de forma a garantir que a ordem da aproximação seja mantida.

A obtenção dos termos f_k depende do esquema de interpolação utilizado. Abaixo são apresentados os valores destas funções para o esquema de Lagrange de 4ª ordem.

5.4.1. Estênceis para aproximação de Lagrange de 4ª Ordem

Usando uma aproximação de Lagrange de 4ª ordem para o fluxo advectivo em uma interface genérica i paralela a direção y e cinco estênceis é possível construir cinco diferentes funções, que podem ser interpretadas geometricamente, segundo a Figura 5.19:

-7/2	-5/2	-3/2	-1/2				
	-5/2	-3/2	-1/2	+1/2			
		-3/2	-1/2	+1/2	+3/2		
			-1/2	+1/2	+3/2	+5/2	
				+1/2	+3/2	+5/2	+7/2

Figura 5.19: Representação esquemática dos estênceis propostos para o esquema de Lagrange de 4º ordem.

Tais funções são representadas matematicamente pelas equações:

$$f_0 = -\frac{1}{4}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{7}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{5}{2}} - \frac{23}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{3}{2}} + \frac{25}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}} \quad 5.74$$

$$f_1 = +\frac{1}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{5}{2}} - \frac{5}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{1}{2}} \quad 5.75$$

$$f_2 = -\frac{1}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}} \quad 5.76$$

$$f_3 = +\frac{1}{4}(\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{1}{2}} - \frac{5}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}} + \frac{1}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{5}{2}} \quad 5.77$$

$$f_4 = +\frac{25}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{1}{2}} - \frac{23}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{5}{2}} - \frac{1}{4}(\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{7}{2}} \quad 5.78$$

6. Resultados

“... é possível errar de várias maneiras, ao passo que só é possível acertar de uma maneira...”

Em Ética a Nicômaco, de Aristóteles

Neste capítulo são apresentados os principais resultados obtidos pela aplicação do procedimento numérico proposto à resolução de escoamento de fluidos newtonianos e viscoelásticos.

Neste capítulo, foram apresentados os principais resultados obtidos pela aplicação da técnica de alta ordem e da técnica de conexão multibloco proposta neste trabalho. Foram considerados para avaliação exemplos clássicos da literatura comumente utilizados para testes e avaliação de procedimentos numéricos, tais como: o escoamento entre placas paralelas, o escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”), o escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”), o escoamento em uma contração plana e o escoamento em cavidade quadrada sob a ação de uma placa deslizante (“*lid-driven*”), aplicados tanto à simulação de escoamento de fluidos newtonianos como viscoelásticos.

Os resultados obtidos pela aplicação do procedimento proposto foram confrontados, quando possível, com soluções analíticas com resultados retirados da literatura e obtidos pela aplicação de outros esquemas de interpolação.

Na primeira etapa, as diferentes propostas de conexão multibloco (MB1, MB2 e MB3) foram testadas e avaliadas. Esta avaliação foi realizada aplicando cada uma das metodologias à simulação do escoamento de um fluido newtoniano entre placas planas e paralelas. Este problema foi escolhido por apresentar uma série de particularidades que fazem dele um bom exemplo para teste das formulações multibloco. Este caso de estudo possui elevados gradientes tanto na direção y (gradiente de velocidade) como para direção x (gradiente de pressão), desta forma, foi possível avaliar como a metodologia lida com a presença de gradientes próximos à interface de conexão, quando diferentes refinamentos de malha são aplicados. Comparando as soluções obtidas para os perfis de velocidade e de pressão, foi possível verificar a existência de alguma descontinuidade ou oscilação próxima à interface de conexão.

Uma vez testado e devidamente avaliado o procedimento de conexão multibloco, a metodologia foi inicialmente aplicada à simulação de escoamento de fluidos newtonianos e depois aplicada à simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos. Nesta etapa, foram comparados os resultados obtidos através da fórmula de interpolação de Lagrange de 4ª ordem propostas neste trabalho com resultados encontrados na literatura e obtidos pela aplicação de outros procedimentos. Em seguida, foi avaliado o efeito conjunto da técnica de alta ordem com a técnica de partição multibloco.

Para quantificar as diferenças entre soluções, a seguinte métrica conhecida como RMS (“*root mean square*”), foi adotada:

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{w}\| = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (v_i - w_i)^2} \quad 6.1$$

em que N representa quantidade de pontos nos quais a solução é comparada

As simulações apresentadas neste trabalho foram realizadas em um computador com processador Intel i5 de 3.2 GHz e 8.0 GB de memória RAM.

6.1. Avaliação da Técnica de Conexão Multibloco

Como já mencionado anteriormente, as diferentes propostas de conexão multibloco (MB1, MB2 e MB3) foram testadas e avaliadas através de sua aplicação à simulação do escoamento de um fluido newtoniano entre placas planas e paralelas.

Este exemplo considera um fluido escoando entre duas placas planas e paralelas, podendo ser esquematicamente representado pela Figura 6.1.

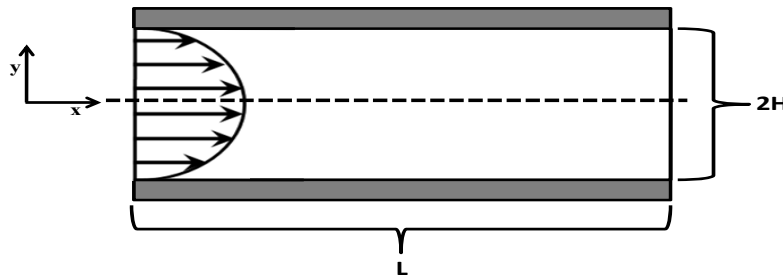


Figura 6.1: Representação esquemática do escoamento entre placas planas e paralelas.

Para este escoamento, foi atribuído um perfil de entrada parabólico para a velocidade, considerando que, ao final do escoamento, o perfil de velocidade já se encontra estabelecido. Na parede foi aplicada a condição de não deslizamento e na saída a pressão foi especificada como sendo nula. Para reduzir o tamanho da malha computacional, utilizou-se a condição de simetria no centro da seção horizontal, simulando desta forma apenas metade do domínio do problema.

Para realização dos testes e comparações, foi considerado o número de Reynolds igual a 10, o comprimento da placa $L=10$ e sua meia altura $H=1$. As coordenadas x e y adimensionais foram consideradas a partir do ponto onde se localiza a linha de simetria horizontal ($y=0$) e a entrada das placas ($x=0$).

Duas estruturas de refinamento, representadas pelas Figura 6.2, Figura 6.3, Figura 6.4 e Figura 6.5, foram estudadas.

Na primeira estrutura, o refinamento foi realizado ao longo do escoamento. A conexão multibloco se dá ao longo do eixo y na posição $x=5,0$. Neste caso, cada bloco utilizou como refinamento base $N_x=10$ e $N_y=20$. A malha mais refinada foi obtida usando o índice de refinamento do bloco (IR) igual a 1, gerando assim um bloco com refinamento $N_x=30$ e $N_y=60$.

Na segunda estrutura o refinamento foi realizado na região próxima à parede ou na região próxima a simetria. A conexão multibloco se dá ao longo do eixo x na posição $y=0,5$, na qual cada bloco apresenta refinamento base de $N_x=20$ e $N_y=10$. Novamente a malha mais refinada foi obtida utilizando $IR=1$, gerando um bloco com refinamento $N_x=60$ e $N_y=30$.

Os resultados obtidos pela aplicação da técnica multibloco foram comparados aos resultados obtidos pela simulação considerando um refinamento homogêneo de malha com $N_x=60$ e $N_y=60$, o que é equivalente a usar em todo domínio a malha mais refinada do procedimento multibloco, sendo esta solução tomada como solução de referência. Desta forma foi possível quantificar os desvios na solução obtidos pela aplicação da técnica multibloco bem como verificar a presença de descontinuidade na interface de conexão.

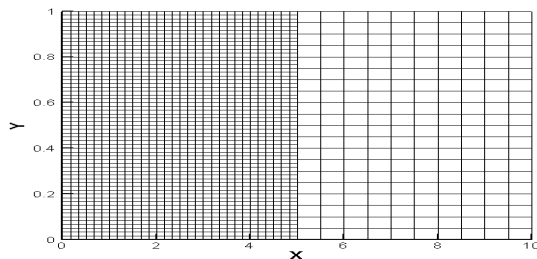


Figura 6.2: Estrutura de refinamento realizada ao longo do escoamento – Arranjo 1.

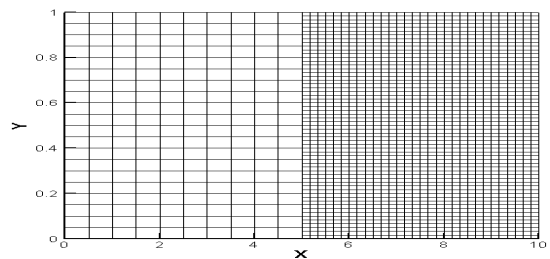


Figura 6.3: Estrutura de refinamento realizada ao longo do escoamento – Arranjo 2.

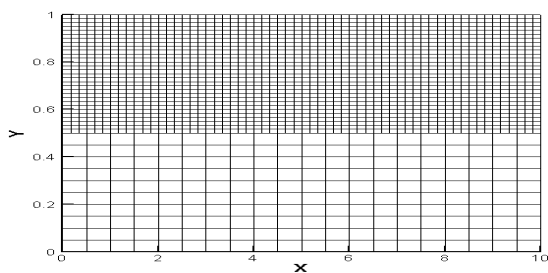


Figura 6.4: Estrutura de refinamento realizada próximo a parede – Arranjo 3.

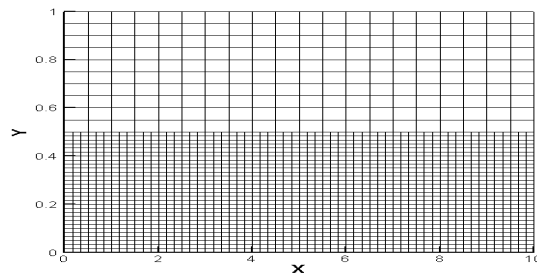


Figura 6.5: Estrutura de refinamento realizada próximo a simetria – Arranjo 4.

Aplicar o refino da malha ao longo do escoamento não é indicado para este tipo de problema (Arranjo 1 e Arranjo 2), visto que o perfil de solução é constante. Entretanto, este tipo de arranjo de malha permite avaliar isoladamente os efeitos da técnica multibloco no perfil de velocidade, pois nesta situação o único gradiente presente na interface de conexão é o gradiente de velocidade v_x , sendo v_y nulo e o gradiente de pressão constante.

A segunda estrutura de refino de malha (Arranjo 3 a Arranjo 4) permitiu avaliar isoladamente os efeitos que a técnica multibloco apresenta ao conectar a pressão, visto que para esta situação a única variação ao longo da interface de conexão ocorre com a pressão, o gradiente de velocidade v_x é constante e a velocidade v_y nula.

O arranjo de malha mais indicado é definir o maior refinamento da malha junto às regiões de elevados gradientes, como é o caso das regiões próximas à parede. É importante ressaltar que, por ora, a estrutura adotada para o refinamento da malha tem apenas o objetivo de testar e avaliar o procedimento de conexão multibloco proposto neste trabalho, sem qualquer preocupação com a conformação da estrutura da malha. Esta etapa visa apenas identificar se as formas de conexão aplicadas estão sendo capazes de conectar adequadamente os blocos de diferentes graus de refinamento mantendo a continuidade das variáveis na interface de conexão e qual metodologia conecta melhor os blocos (MB1, MB2 ou MB3).

Analisando os perfis de velocidade do procedimento MB1 apresentados na Figura 6.6, que consideram apenas a aproximação da fronteira na fórmula de conexão, pode-se observar que em nenhum dos casos testados a fórmula de conexão multibloco é capaz de manter a continuidade da variável e no caso do Arranjo 4 sequer uma solução pode ser obtida. A descontinuidade observada no perfil da solução, destacada pelo círculo na figura da esquerda e ampliada para melhor visualização na figura da direita,

deve-se a estrutura de conexão adotada, na qual foi considerado que o valor das variáveis localizadas nas paredes dos volumes de controle da interface de maior refinamento apresentava o mesmo valor que nas paredes dos volumes de controle da interface de menor refinamento. Esta aproximação faz com que quanto maior o gradiente envolvido na interface de conexão mais deficiente seja a aplicação da metodologia. Como pode ser observado mais facilmente para aplicação do arranjo 3 e 4, nos quais estão envolvidos o gradiente de pressão. Assim sendo, considerar que a variável localizada nas paredes dos volumes de controle da malha de menor refinamento tem o mesmo valor que a variável localizada na parede do volume de controle da malha de maior refinamento não se revelou como uma boa estratégia.

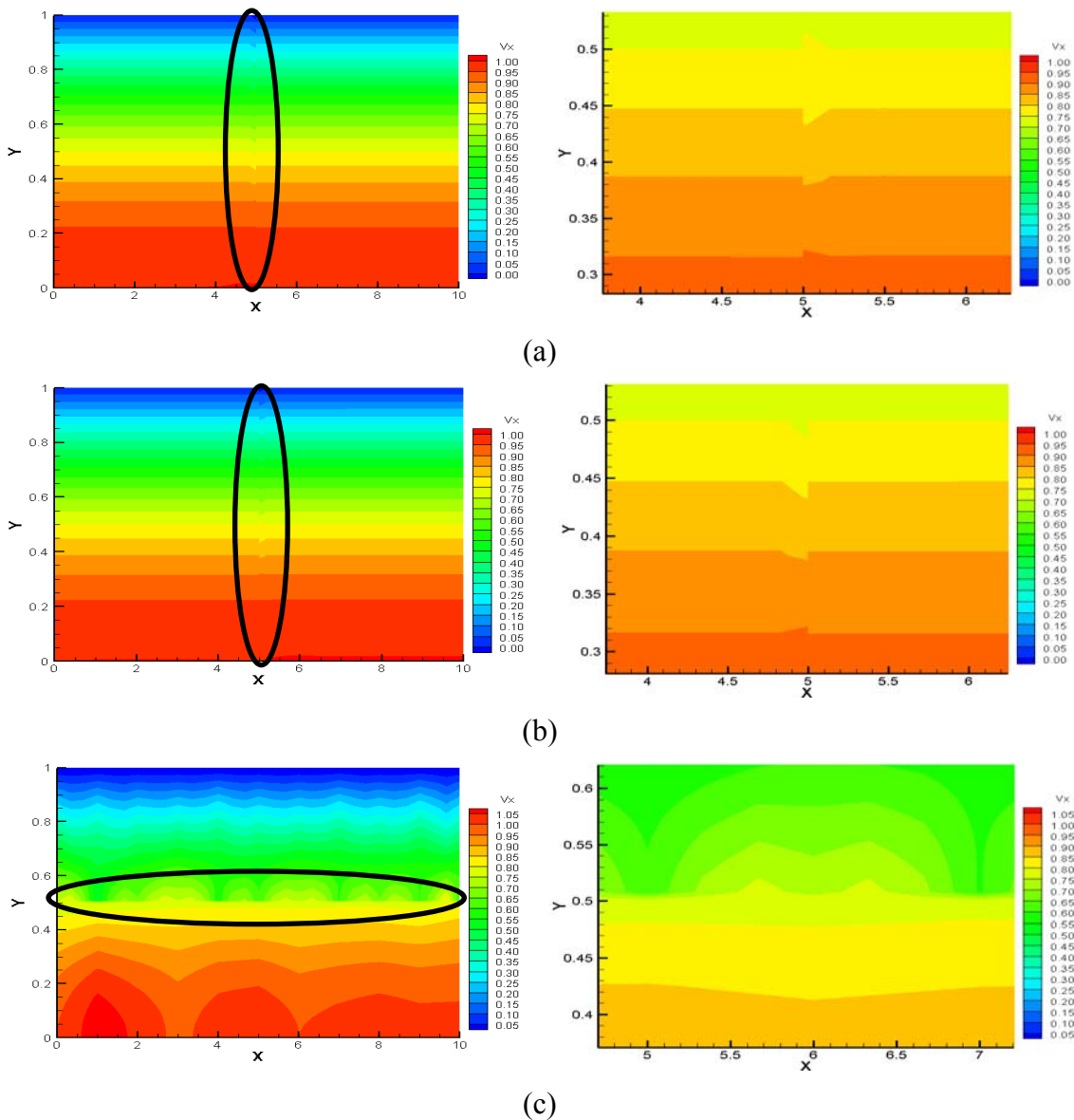


Figura 6.6: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB1 aplicando: (a) Arranjo 1, (b) Arranjo 2 e (c) Arranjo 3.

Analisando os perfis de pressão para o procedimento MB1, apresentados na Figura 6.7, fica evidente que o problema ocorrido no arranjo 3 e 4 deve-se à forma de conexão utilizada, que foi incapaz de lidar adequadamente com o gradiente de pressão.

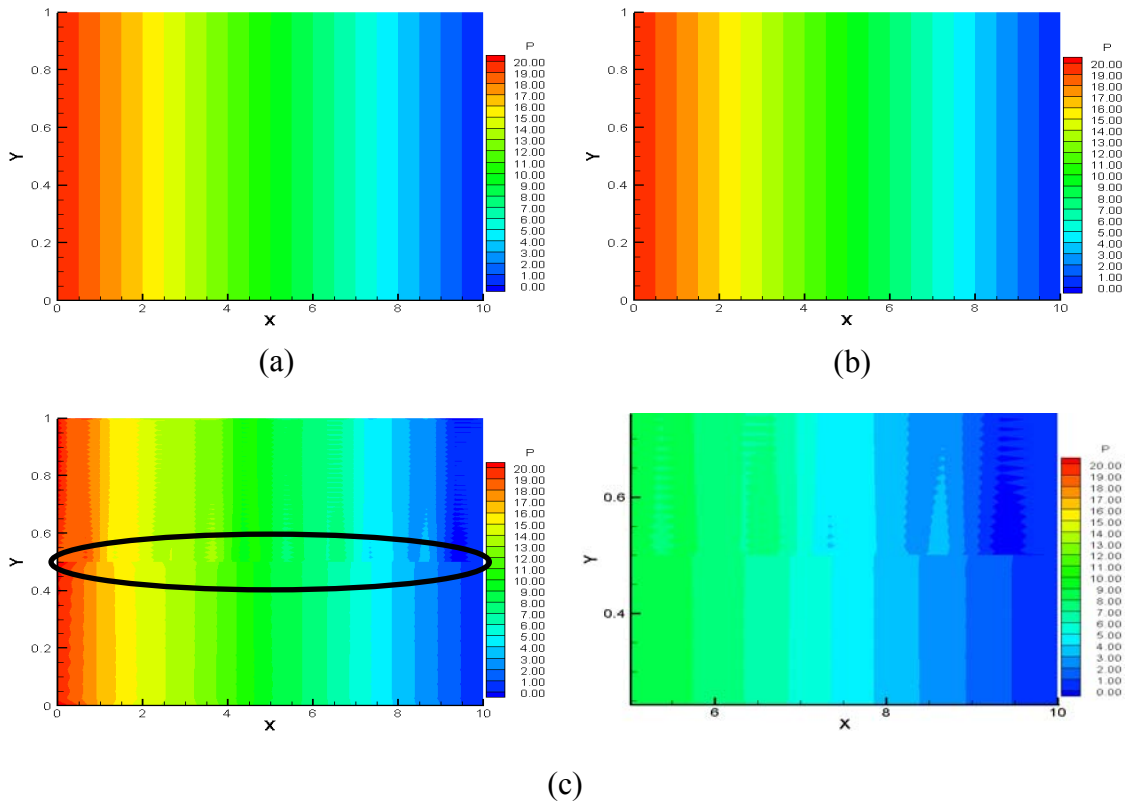


Figura 6.7: Perfil de pressão para o procedimento MB1: (a) Arranjo 1; (b) Arranjo 2 e (c) Arranjo 3.

Um melhor entendimento do efeito obtido, quando se considera que o valor das variáveis localizadas nas paredes dos volumes de controle de maior refinamento tem o mesmo valor que das interfaces de conexão de menor refinamento, pode ser observada na Figura 6.8 e Figura 6.9 considerando o arranjo 1 e 3. As figuras da esquerda apresentam o perfil de solução completo e as figuras da direita uma ampliação para melhor visualização dos resultados.

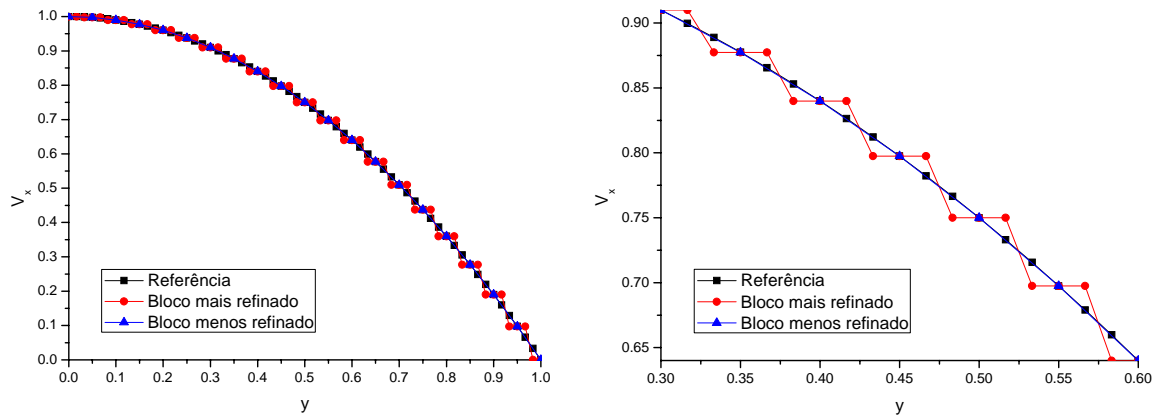


Figura 6.8: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB1 na interface da conexão multibloco $x=5,0$ – Arranjo 1.

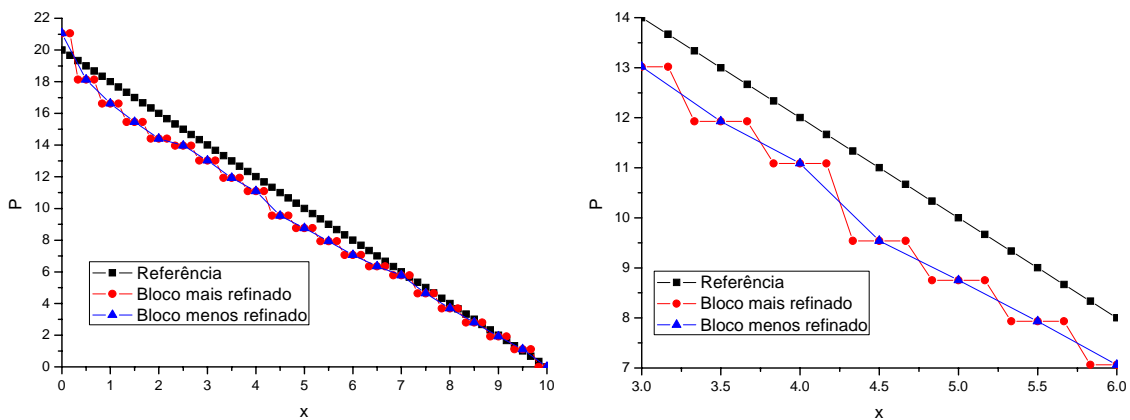


Figura 6.9: Perfil de pressão para o procedimento MB1 na interface da conexão multibloco $y=0,5$ – Arranjo 3.

Para que os valores da interface do bloco de maior refinamento sejam mais bem aproximados há a necessidade de se usar fórmulas de interpolação que levem em consideração ambas as direções (x e y), ou seja, deve-se utilizar interpolações bidimensionais na conexão. Neste caso as fórmulas de interpolação de Lagrange deveriam ser estendidas à formulação bidimensional, segundo a expressão.

$$\left(\overline{\phi^y}\right)_{i,j} = \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^m a_{k,l} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\left(k+\frac{1}{2}\right), j-\left(l+\frac{1}{2}\right)} + \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^n b_{k,l} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\left(k+\frac{1}{2}\right), j+\left(l+\frac{1}{2}\right)} \quad 6.2$$

Entretanto, a aplicação deste procedimento demandaria um esforço computacional muito maior. Visando corrigir este problema, aproximaram-se os valores da malha de maior refinamento através de uma fórmula de interpolação linear usando os valores da malha de menor refinamento como mostrado na Figura 6.10. As fórmulas originais de Lagrange de 4º ordem foram aplicadas apenas aos pontos comuns da malha

de maior e menor refinamento, os demais pontos foram obtidos através de uma interpolação linear dos pontos vizinhos.

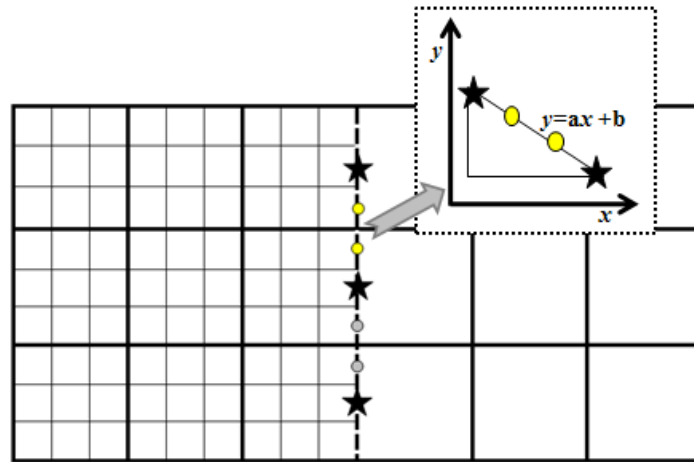


Figura 6.10: Representação esquemática do procedimento de interpolação para malha de maior grau de refinamento.

É importante ressaltar que esta fórmula de interpolação é de 1ª ordem. Assim sendo, possíveis fontes de erros podem ser introduzidas ao esquema, sendo então quantificadas comparando os valores na fronteira da conexão multibloco com os valores usando o grau de refinamento completo da malha. Cabe enfatizar que esta fórmula de interpolação não é uma limitação do procedimento proposto, pois fórmulas de interpolação de mais alta ordem podem ser utilizadas.

Aplicando esta nova fórmula de interpolação houve uma melhora significativa dos resultados, como podem ser observados na Figura 6.11 relativa ao perfil de velocidade v_x e na Figura 6.12 relativas ao perfil de pressão, não sendo mais observada a presença de descontinuidade no perfil de solução.

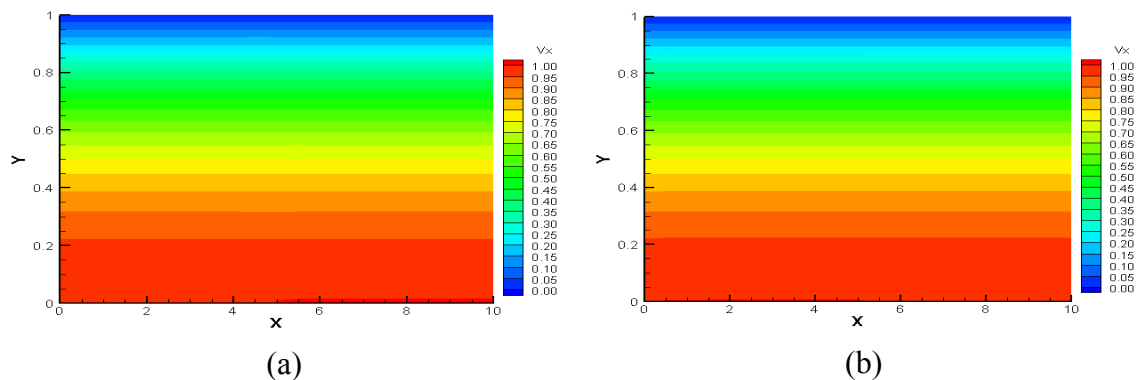


Figura 6.11: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão para malha de maior refinamento: (a) Arranjo 1 e (b) Arranjo 2.

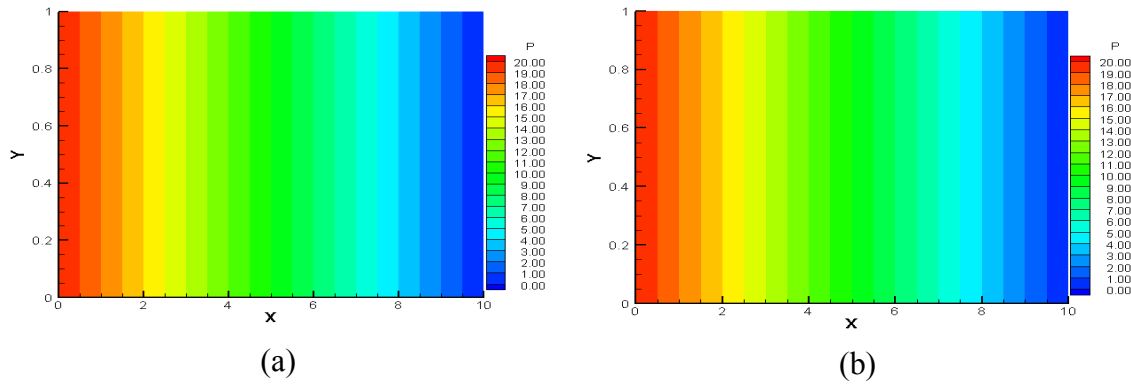


Figura 6.12: Perfil de pressão para o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão para malha de maior refinamento: (a) Arranjo 3 e (b) Arranjo 4.

Analisando os perfis apresentados na Figura 6.13 e na Figura 6.14, nos quais o procedimento de aproximação linear é comparado com a malha com grau de refinamento homogêneo, é possível constatar que a fórmula de interpolação aplicada à malha de maior refinamento foi capaz de prover uma boa aproximação para os valores das variáveis a partir da malha de menor refinamento. Os resultados obtidos não apresentam discrepâncias consideráveis e a continuidade do perfil de velocidade e de pressão são mantidas na interface. Os RMS destes perfis são: $4,7681 \times 10^{-4}$, $4,7690 \times 10^{-4}$, $6,8182 \times 10^{-5}$ e $4,0621 \times 10^{-3}$, para as situações (a), (b), (c) e (d) respectivamente, confirmando que a fórmula de interpolação aplicada, mesmo sendo de 1ª ordem, não comprometeu as soluções obtidas, tendo sido uma boa solução para ajustar a malha de maior refinamento.

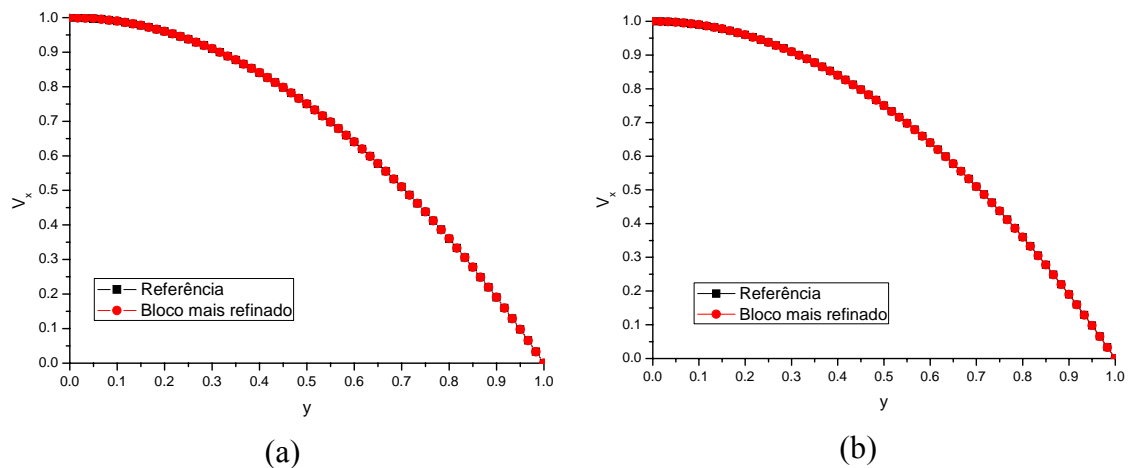


Figura 6.13: Perfil de velocidade v_x na interface de conexão aplicando o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão: (a) Arranjo 1 e (b) Arranjo 2.

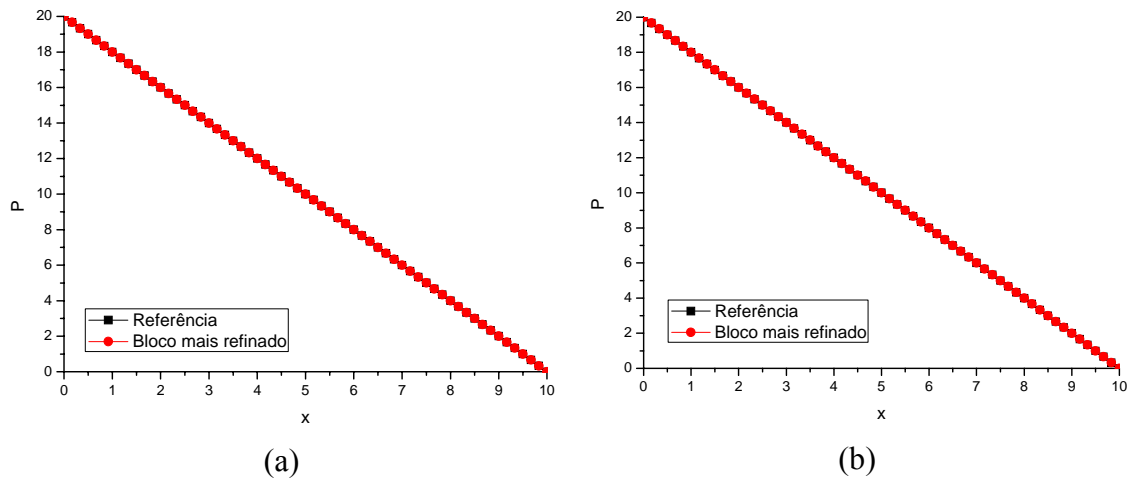


Figura 6.14: Perfil de pressão na interface de conexão aplicando o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão: (a) Arranjo 3 e (b) Arranjo 4.

De todos os arranjos de malha utilizados o arranjo 3, no qual é aplicado maior refinamento próximo a parede, foi o mais indicado para o problema de escoamento em placas, por isso optou-se por analisar apenas esta forma de arranjo. Abaixo são apresentados os perfis de velocidade e pressão para diferentes posições do escoamento, Figura 6.15, comparando o esquema MB1 à solução com grau de refinamento homogêneo. Os RMS destes perfis são apresentados na Tabela 6.1.

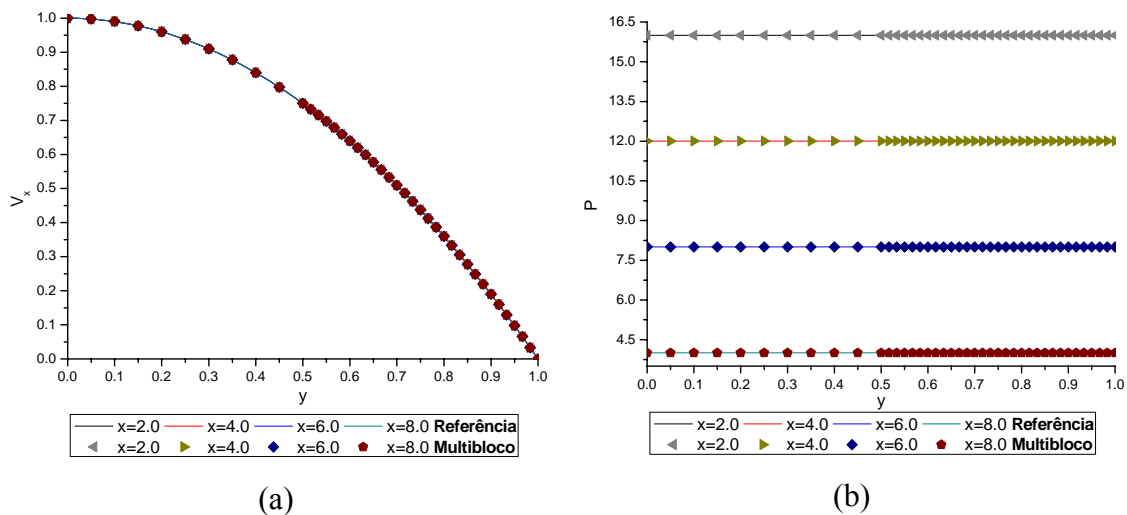


Figura 6.15: Perfil para diferentes cortes em x utilizando o procedimento MB1 com nova fórmula de conexão multibloco e Arranjo 3: (a) Velocidade v_x e (b) Pressão.

Tabela 6.1: Diferença entre as soluções de referência e MB1.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ P^{ref} - P\ $
$x=2,0$	$9,7054 \times 10^{-5}$	$1,0359 \times 10^{-4}$
$x=4,0$	$9,6702 \times 10^{-5}$	$8,4102 \times 10^{-5}$
$x=6,0$	$9,7117 \times 10^{-5}$	$1,9318 \times 10^{-5}$
$x=8,0$	$9,7693 \times 10^{-5}$	$1,6155 \times 10^{-5}$

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.15 é possível constatar que a conexão multibloco pode ser feita de forma adequada sem a presença de oscilações ou descontinuidade no perfil de solução. A estratégia de refinamento da malha foi capaz de obter soluções tão boas quanto a solução de referência, como pode ser constatado na Tabela 6.1, demandando um esforço computacional menor. O tempo de simulação para a obtenção da solução de referência foi de 770 segundos, ao passo que a utilização do procedimento multibloco utilizou 492 segundos. Tal redução de tempo é plenamente justificável, visto que a aplicação da técnica multibloco utilizou 2.000 volumes de controle, ao passo que a aplicação do refinamento homogêneo utilizou 3.600 volumes de controle. Tais resultados demonstram a potencialidade da aplicação do procedimento multibloco.

Como a limitação encontrada no esquema MB1 se estende à formulação dos esquemas MB2 e MB3, o procedimento de conexão adotado para malha de maior refinamento foi estendido também a estes procedimentos.

Os mesmos testes realizados para a metodologia MB1 foram também aplicados aos procedimentos MB2 e MB3, nos quais foi observado que a eficiência na aplicação destes procedimentos está condicionada às condições do escoamento, visto que a forma de disposição dos pontos na interface de conexão está diretamente relacionada ao sentido do escoamento e à intensidade de variações dos gradientes.

A aplicação do esquema MB2, que utiliza uma maior quantidade de informações da malha mais refinada, pode apenas ser utilizada em situações nas quais a malha mais refinada esteja na direção contrária do escoamento e na região de maior variação dos gradientes, como pode ser observado na Figura 6.16, em que apenas os arranjos 1 e 4 apresentaram soluções satisfatórias. Para o arranjo 2 (Figura 6.16c), observou-se a presença de descontinuidades, destacada por um círculo na figura da esquerda e ampliada para melhor visualização na figura da direita, e para o arranjo 3 o procedimento não convergiu.

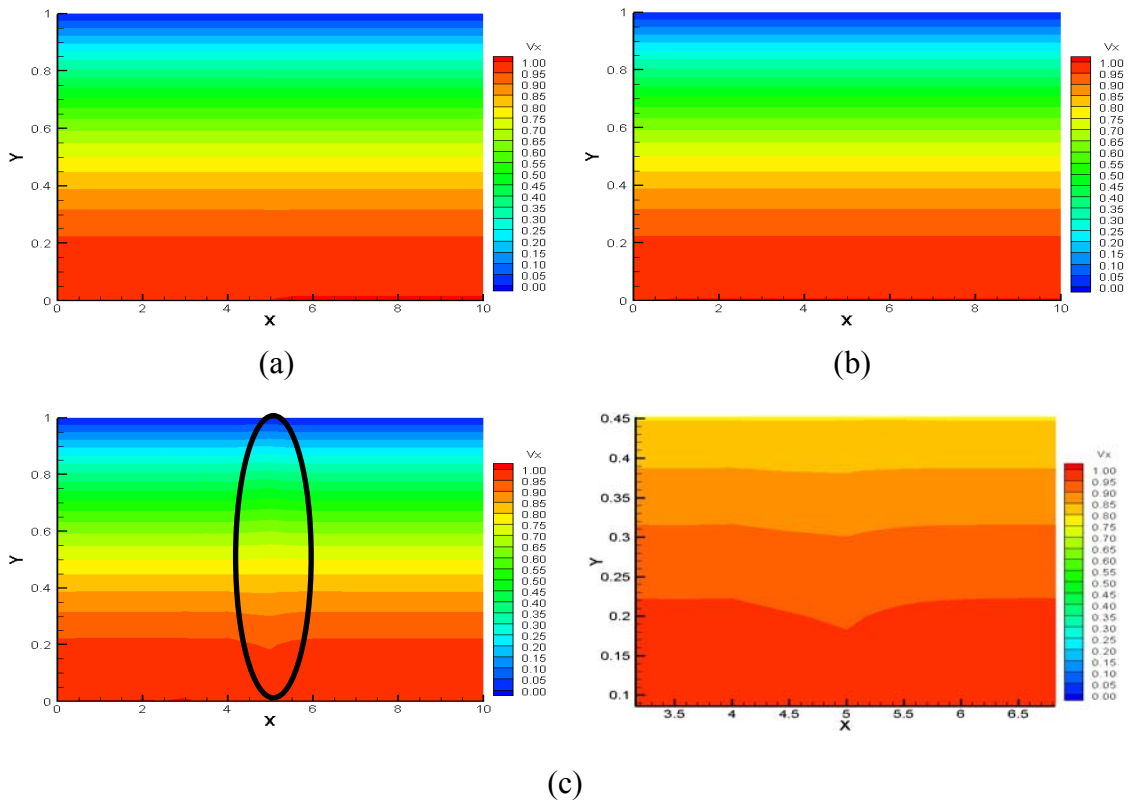


Figura 6.16: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB2: (a) Arranjo 1; (b) Arranjo 4 e (c) Arranjo 2.

A aplicação do esquema MB3, que utiliza uma maior quantidade de informações da malha de menor refinamento, pode apenas ser utilizada em situações nas quais a malha menos refinada esteja na direção contrária ao escoamento e de menor variação dos gradientes, como pode ser observado na Figura 6.17 e na Figura 6.18, em que apenas os arranjos 2 e 3 apresentaram soluções satisfatórias. A utilização do arranjo 1 (Figura 6.17) apresentou solução com oscilações, destacada por um círculo na figura da esquerda e ampliada para melhor visualização na figura da direita, e o arranjo 4 não obteve uma solução convergente.

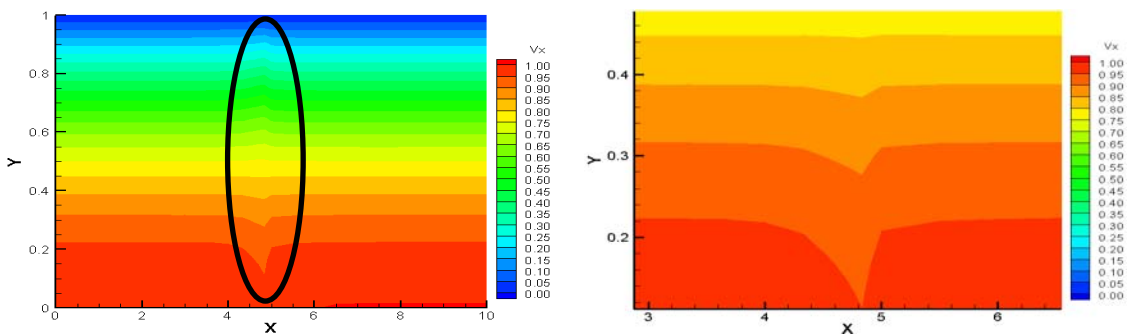


Figura 6.17: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB3 considerando o arranjo 1.

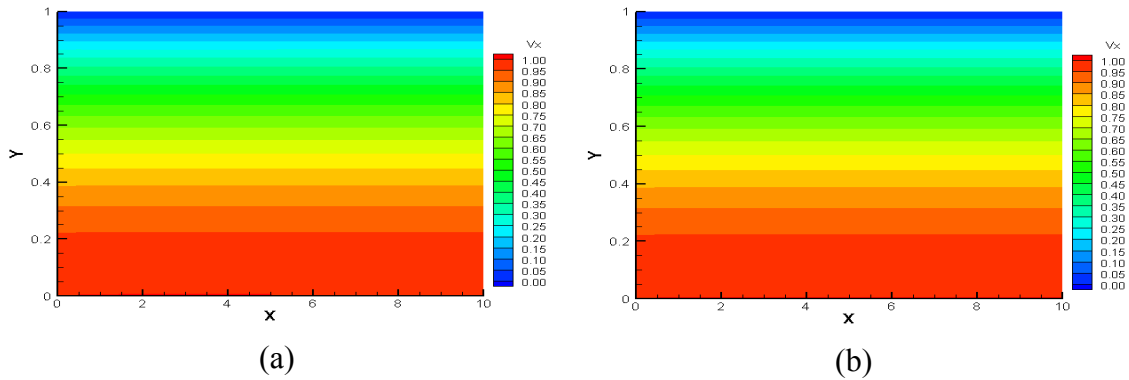


Figura 6.18: Perfil de velocidade v_x para o procedimento MB3: (a) Arranjo 2 e (b) Arranjo 3.

Para que os procedimentos MB2 e MB3 pudessem ser aplicados de forma independente, é necessário que a escolha dos pontos na interface de conexão leve em consideração o sentido do escoamento, de forma muito similar ao esquema UDS e ao esquema QUICK. Neste caso, o esquema MB2 é aplicado quando a velocidade for positiva e o esquema MB3 quando a velocidade for negativa.

Comparando os resultados obtidos pela aplicação do esquema MB2 aplicando o arranjo 1 e 4 e do esquema MB3 aplicando os arranjos 2 e 3, com os resultados obtidos utilizando o grau de refinamento completo, Figura 6.19, Figura 6.20 e Tabela 6.2, pode-se observar que os perfis obtidos estão muito próximos. Entretanto, em todos os casos, o tempo de simulação obtido com a aplicação dos esquemas MB2 e MB3 foi maior do que o obtido com a aplicação do esquema MB1, por isto, os esquemas MB2 e MB3 não foram considerados no trabalho.

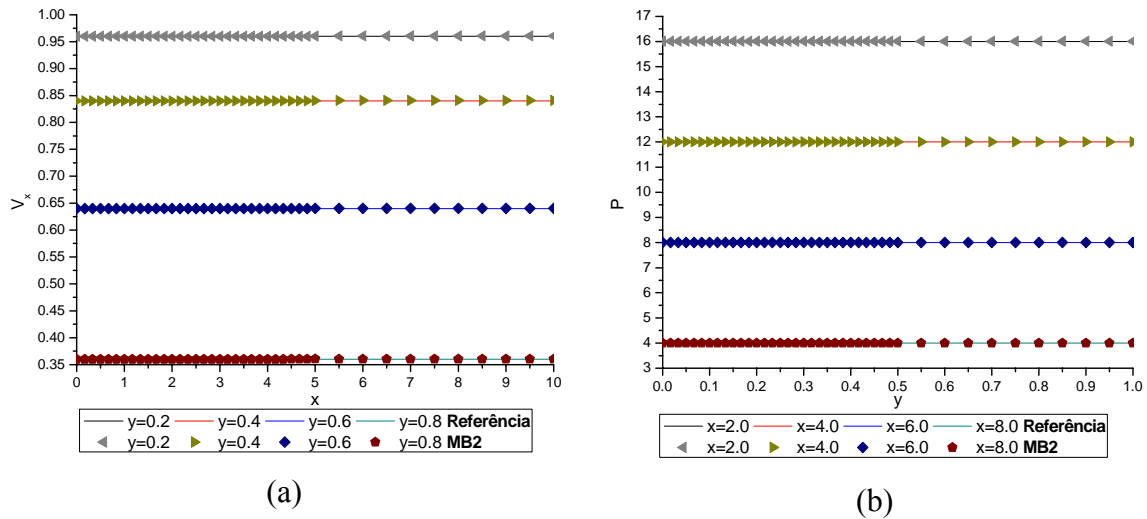


Figura 6.19: Comparação de soluções entre os procedimentos MB2 e a referência: (a) Perfil de velocidade v_x com arranjo 1 e (b) Perfil de pressão com arranjo 4.

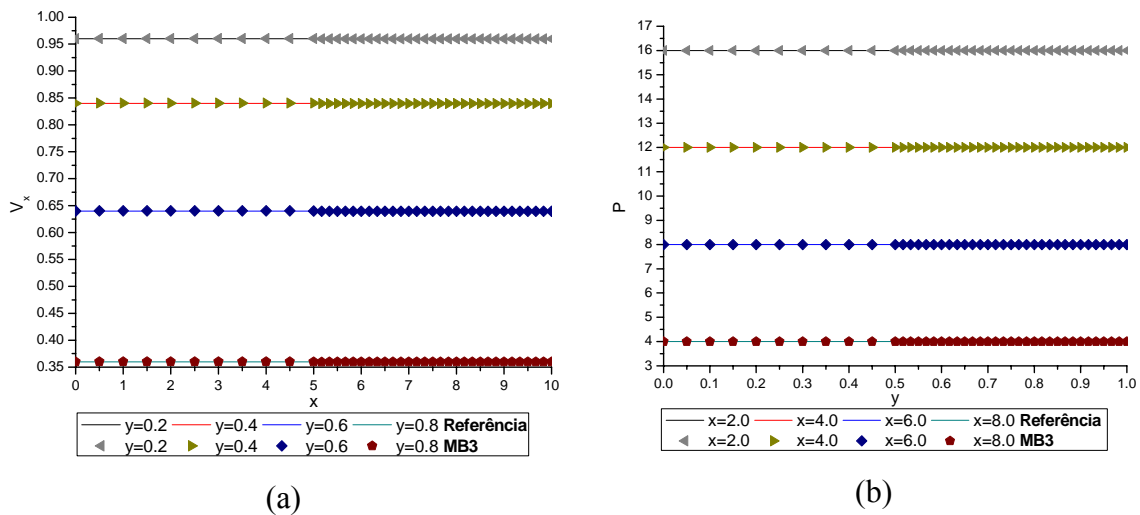


Figura 6.20: Comparação de soluções entre os procedimentos MB3 e a referência: (a) Perfil de velocidade v_x com arranjo 2 e (b) Perfil de pressão com arranjo 3.

Tabela 6.2: Diferença entre as soluções de referência e MB2 e MB3.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	
	Arranjo 1 – MB2	Arranjo 2 – MB3
$x=2,0$	$3,6438 \times 10^{-4}$	$3,9755 \times 10^{-4}$
$x=4,0$	$3,1646 \times 10^{-4}$	$3,5903 \times 10^{-4}$
$x=6,0$	$2,4973 \times 10^{-4}$	$2,7961 \times 10^{-4}$
$x=8,0$	$1,6410 \times 10^{-4}$	$1,6417 \times 10^{-4}$
	$\ P^{ref} - P\ $	
	Arranjo 3 – MB3	Arranjo 4 – MB2
$x=2,0$	$1,5381 \times 10^{-4}$	$4,5879 \times 10^{-3}$
$x=4,0$	$4,3729 \times 10^{-4}$	$3,5000 \times 10^{-3}$
$x=6,0$	$2,2217 \times 10^{-4}$	$2,3800 \times 10^{-3}$
$x=8,0$	$1,1375 \times 10^{-4}$	$1,2602 \times 10^{-3}$

Por fim, verificou-se qual a influência da inclusão dos pontos localizados próximos à fronteira de conexão no procedimento multibloco (ver Figura 5.12 e Figura 5.13). Para isso as soluções obtidas através da aplicação do procedimento MB11 que promove a inclusão dos pontos localizados próximos à interface de conexão foram comparadas com a solução que utiliza grau de refinamento homogêneo, permitindo assim que a inclusão desta informação pudesse ser analisada de forma mais direta, Figura 6.21 e Tabela 6.3.

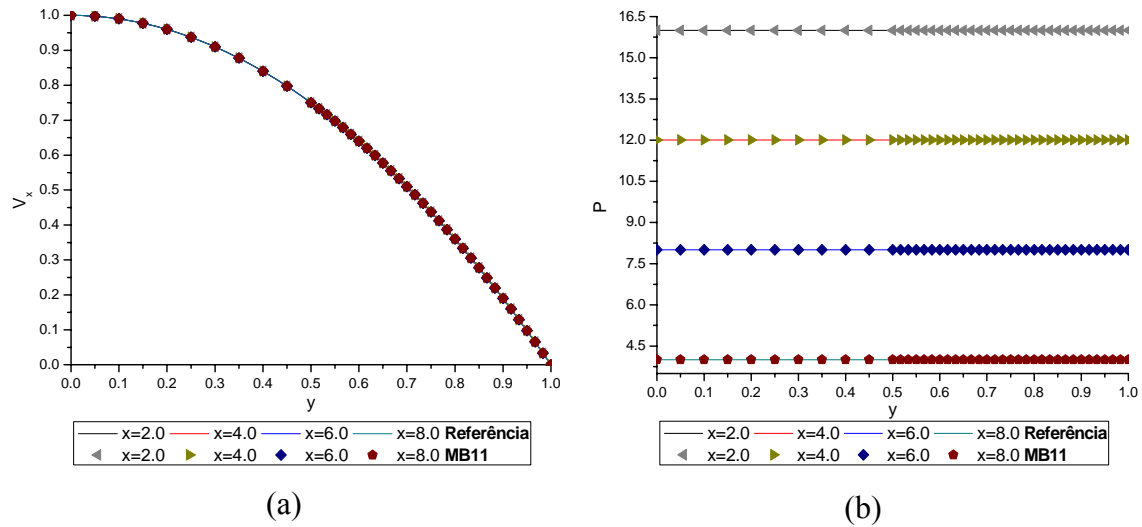


Figura 6.21: Comparação entre o procedimento com inclusão dos pontos localizados próximos à interface de conexão na fórmula multibloco (MB11) e a solução com refinamento homogêneo para: (a) Perfil de velocidade v_x e (b) Perfil de pressão.

Tabela 6.3: Diferença entre as soluções de referência e MB11.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ P^{ref} - P\ $
$x=2,0$	$1,0106 \times 10^{-4}$	$1,1043 \times 10^{-4}$
$x=4,0$	$9,8612 \times 10^{-5}$	$1,0932 \times 10^{-4}$
$x=6,0$	$1,0107 \times 10^{-4}$	$4,4885 \times 10^{-5}$
$x=8,0$	$1,0077 \times 10^{-4}$	$4,5879 \times 10^{-5}$

Analisando os resultados apresentados na Figura 6.21 e Tabela 6.3, é possível verificar que a aplicação de ambos os procedimentos conduz a resultados equivalentes. Comparando o tempo computacional gasto para a simulação, constatou-se que incluir mais informações para conexão aumentou o tempo de solução que neste caso foi de 530 segundos, ao passo que o procedimento que utiliza apenas pontos internos gastou 492 segundos.

Diante de todos os resultados apresentados anteriormente, pode-se constatar que o procedimento MB1 utilizando apenas os pontos juntos à interface para conexão multibloco apresenta o melhor desempenho dentre os procedimentos propostos. A partir desta etapa do trabalho será este o único procedimento aplicado para conectar os blocos com diferentes graus de refinamento.

Nos tópicos subsequentes serão apresentados os resultados obtidos pela aplicação de metodologia de alta ordem em conjunto com a técnica de partição multibloco a diversos problemas, permitindo que o procedimento proposto seja devidamente testado e avaliado.

6.2. Equação da Advecção-Difusão Bidimensional

Fenômenos que envolvem mecanismos de advecção-difusão ocorrem em diversos processos de interesse industrial. O modelo matemático bidimensional e transiente que descreve este fenômeno é representado pela equação:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + v_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + v_y \frac{\partial \phi}{\partial y} = \Gamma \cdot \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \quad 6.3$$

em que: $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ e $t \geq 0$.

As condições de contornos e inicial atribuídas ao problema são:

$$\phi(x, y, t)|_{x=0} = 0 \quad \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial x} \Big|_{x=yf} = 0 \quad 6.4$$

$$\phi(x, y, t)|_{y=0} = 1 \quad \phi(x, y, t)|_{y=yf} = 1 \quad 6.5$$

$$\phi(x, y, t)|_{t=0} = 0 \quad 6.6$$

Para resolução deste problema foi utilizado o MVF aplicando o esquema UDS ou QUICK na aproximação dos termos advectivos e o esquema CDS na aproximação dos termos difusivos e o Lagrange de 4ª ordem (LAG4) para ambos os termos.

Para o primeiro caso de estudo foram considerados os valores de $v_x=1,0$ e $v_y=2,0$ e $\Gamma=0,1$. O resultado apresentado na Figura 6.22 representa o número de pontos de discretização necessários para que cada método obtivesse a solução convergida

considerando o estado estacionário. O critério utilizado na convergência da malha foi de que o RMS entre os valores obtidos nos pontos de discretização da malha de refinamento $k+m$ e os valores obtidos nos pontos de discretização pela malha de refinamento k fossem inferiores a 10^{-6} , em que k e m representam os números de volumes de controle (N_ξ) no qual a malha computacional foi dividida, em todos os exemplos testados $N_x=N_y$.

Na Figura 6.22, é possível constatar que o esquema LAG4 necessita de um menor grau de refino da malha para obtenção da solução numérica que os esquemas UDS e QUICK, quando a malha computacional não exerce mais influência sobre a solução obtida.

Analisando a curva de nível apresentada na Figura 6.23, é possível observar que para valores de $x > 0,5$ existe pouca mudança no perfil da solução, assim sendo, pode-se reduzir o grau de refinamento nesta região do problema sem comprometer o resultado final da simulação. A técnica de partição multibloco foi aplicada gerando uma estrutura de refinamento representada pela Figura 6.25.

Analisando a Figura 6.24, que ilustra o perfil da variável ϕ obtido pela aplicação dos esquemas QUICK e LAG4 considerando o estado estacionário e os valores de $v_x=1,0$ e $v_y=2,0$ e $\Gamma=0,1$ e utilizando o número de pontos de discretização apresentados na Figura 6.22, é possível observar a equivalência entre os perfis numéricos obtidos pela aplicação do esquema QUICK e LAG4.

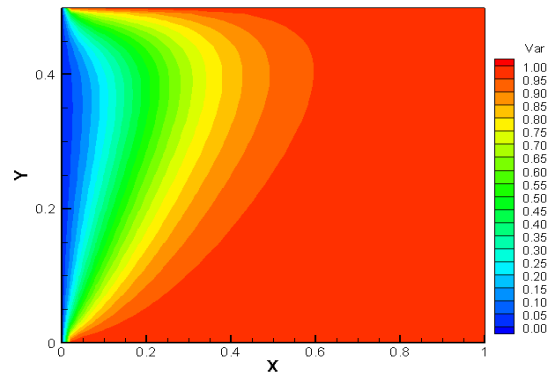
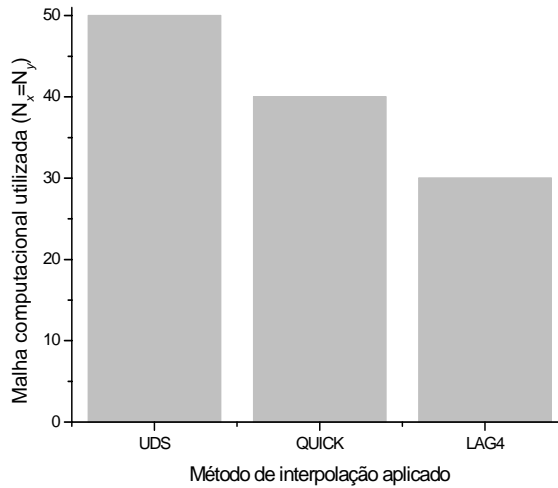


Figura 6.22: Malha computacional necessária para obtenção da solução convergida para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.

Figura 6.23: Curva de nível obtida pela aplicação do esquema LAG4 $N_x=N_y=30$ para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.

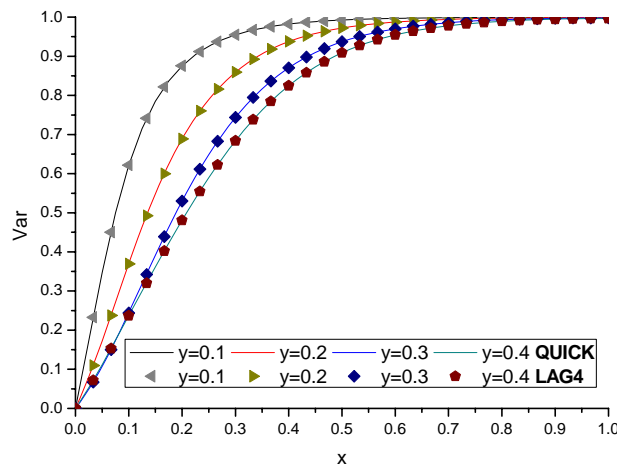


Figura 6.24: Comparação entre os perfis obtidos pela aplicação dos esquema QUICK e LAG4 para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo..

Na Figura 6.25, Figura 6.26 e Figura 6.27 são apresentadas os resultados obtidos pela aplicação da técnica de partição multibloco, quando se buscou refinar apenas as regiões de maior variação do problema.

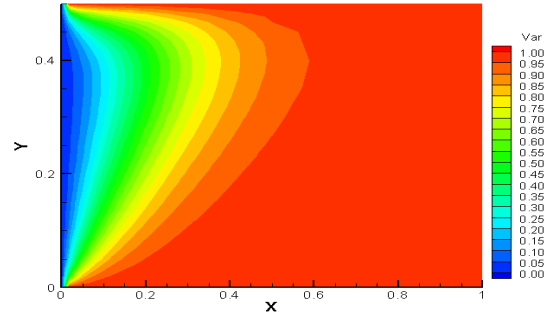
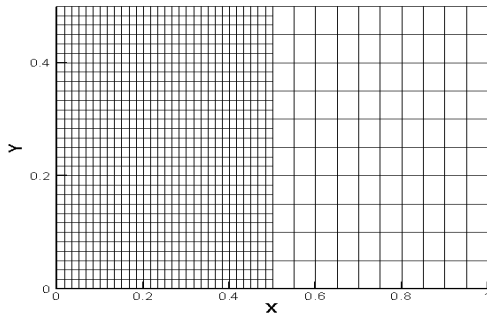


Figura 6.25: Estrutura da malha computacional aplicando o procedimento multibloco para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo. Figura 6.26: Curva de nível obtida através da aplicação do procedimento multibloco para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.

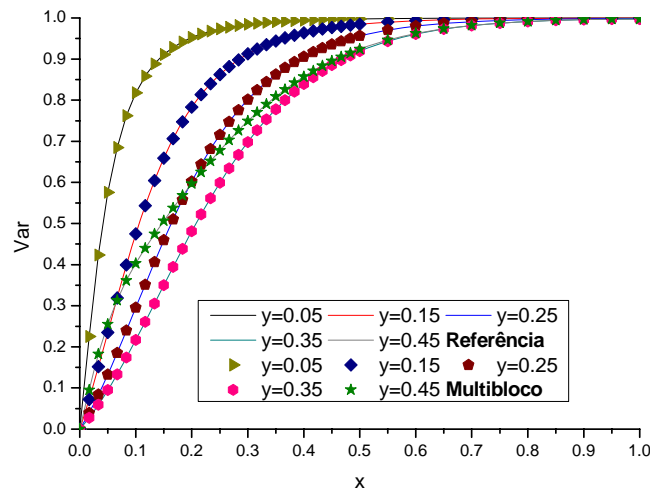


Figura 6.27: Perfil em diferentes cortes em y comparando a solução de referência à solução obtida através da aplicação da técnica multibloco para o problema da advecção-difusão – primeiro caso de estudo.

A Tabela 6.4 informa o RMS entre valores obtidos pela solução de referência (que utiliza grau de refinamento homogêneo) e o esquema multibloco.

Tabela 6.4: Diferença entre as soluções de referência e a solução multibloco para o primeiro caso de estudo.

	$\ \phi^{ref} - \phi\ $
$y=0,05$	$2,2384 \times 10^{-5}$
$y=0,15$	$6,8386 \times 10^{-5}$
$y=0,25$	$8,1192 \times 10^{-5}$
$y=0,35$	$1,1291 \times 10^{-4}$
$y=0,45$	$3,0809 \times 10^{-4}$

Pelos resultados apresentados na Figura 6.26, Figura 6.27 e na Tabela 6.4 é possível constatar a boa adequação da técnica de partição multibloco. Um maior grau de refinamento da malha foi utilizado no comprimento inicial, onde existem gradientes

mais elevados e uma malha menos refinada foi aplicada a regiões sem grande variação. As soluções apresentadas na Figura 6.26 e Figura 6.27, foram compatíveis com os resultados obtidos pelos demais procedimentos e não houve qualquer oscilação no procedimento de conexão multibloco, como pode ser observado na Figura 6.27.

A Figura 6.28 ilustra a curva de nível da variável ϕ obtida pela aplicação dos esquemas LAG4 considerando o estado estacionário e os valores de $v_x=10,0$ e $v_y=5,0$ e $\Gamma=0,1$, utilizando o número de pontos de discretização apresentados na Figura 6.29 no qual o procedimento numérico apresenta sua solução convergida, usando o mesmo critério para convergência da malha utilizado no caso anterior.

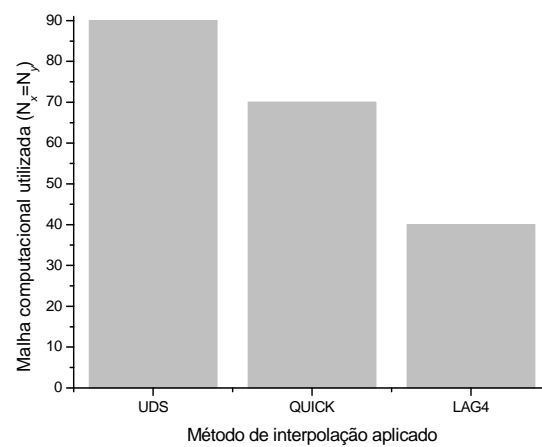
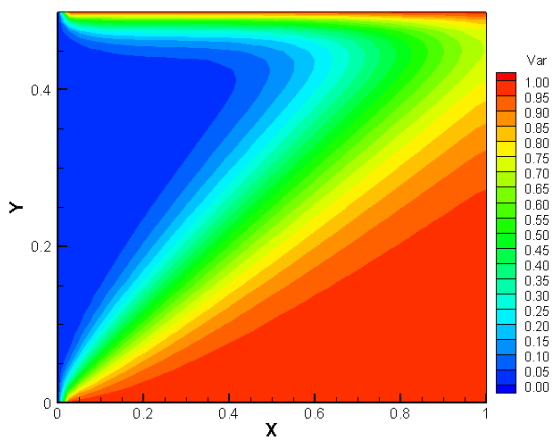


Figura 6.28: Curva de nível obtida pela aplicação do esquema LAG4 $N_x=N_y=40$ para o problema da advecção-difusão – segundo caso de estudo.

Figura 6.29: Malha computacional necessária para obtenção da solução convergida para o problema da advecção-difusão – segundo caso de estudo.

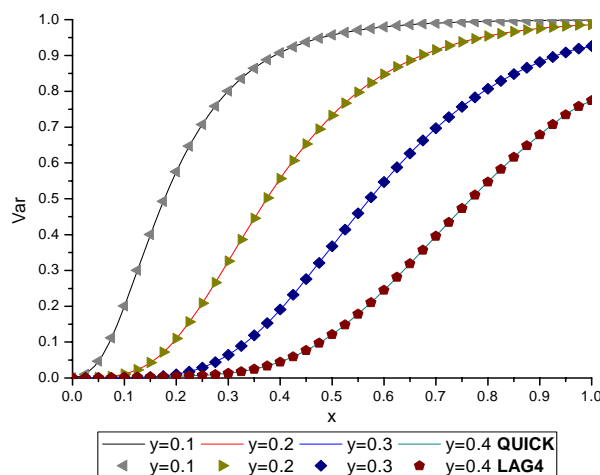


Figura 6.30: Comparação entre os perfis obtidos pela aplicação dos esquemas QUICK e LAG4 para o problema da advecção-difusão – segundo caso de estudo.

Também para este exemplo é possível verificar que o esquema LAG4 apresenta taxa de convergência mais acelerada que os procedimentos UDS e QUICK. Neste caso, o grau de refino da malha para obtenção da solução numérica quando a malha computacional não exerce mais influência sobre a solução obtida é consideravelmente inferior para o esquema LAG4, especialmente quando comparada ao esquema UDS, no qual esta diferença ultrapassa o dobro do número de pontos de refinamento. Comparando o perfil da variável ϕ obtido pela aplicação dos esquemas QUICK e LAG4, Figura 6.30, é possível observar a equivalência entre os perfis numéricos obtidos.

6.3. Escoamento de Fluidos Newtonianos

Neste item, serão apresentados os resultados para simulações de escoamento de fluidos newtonianos, com o objetivo de testar e avaliar a metodologia proposta neste trabalho. Os exemplos aplicados para testes são:

- Escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”).
- Escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”).
- Escoamento em uma cavidade quadrada sob a ação de uma placa deslizando no topo (“*lid-driven*”).

Tais problemas, apesar de sua relativa simplicidade, são amplamente utilizados pela literatura para testes e avaliações de procedimentos de soluções numéricas.

Optou-se por fazer estes estudos utilizando números relativamente baixos de Reynolds, visto que o escoamento de fluidos poliméricos, que é o foco principal deste trabalho, é caracterizado por ocorrer com baixos valores deste parâmetro.

6.3.1. Escoamento Slip-Stick

Este problema consiste no escoamento de um fluido entre duas placas planas e paralelas. O escoamento se dá em uma superfície livre de cisalhamento (“*free-slip*”) seguida por uma condição de não deslizamento (“*no-slip*”) aplicada na superfície da placa Figura 6.31. A característica principal deste problema é a presença de singularidades quando a condição de contorno muda de livre de cisalhamento para uma condição de não deslizamento, prejudicando a qualidade da aproximação.

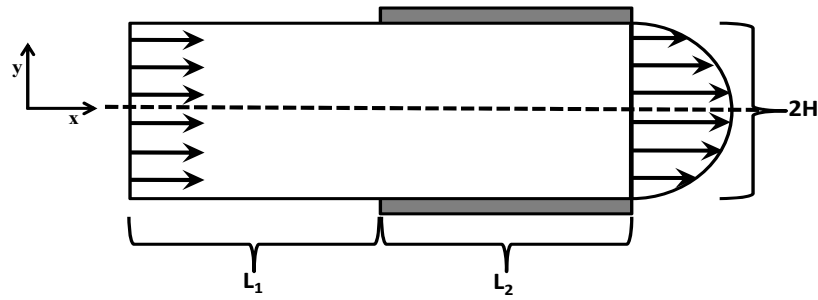


Figura 6.31: Representação esquemática do escoamento “*slip-stick*”.

Como o problema é simétrico ao longo do eixo y , foi possível reduzir o tamanho da malha computacional utilizando-se a condição de simetria na seção horizontal central, simulando desta forma apenas metade do domínio inicial. Na entrada foi considerado um perfil constante de velocidade. Na condição de saída o escoamento foi considerado como estabelecido.

Para a realização dos testes e das comparações, foram considerados número de Reynolds de 10 ($Re=10$), comprimento da placa antes da singularidade de $L_1=3$, comprimento da placa após a singularidade de $L_2=7$ e meia altura da placa de $H=1$. As coordenadas x e y adimensionais foram consideradas a partir do ponto onde está localizada a linha de simetria horizontal ($y=0$) e o início do escoamento ($x=0$).

Inicialmente, foi aplicado o esquema CDS utilizando sete diferentes graus de refinamento de malha: 30×10 , 30×20 , 60×10 , 60×20 , 60×40 , 120×40 , 120×80 e 240×40 . As soluções foram comparadas visando identificar o grau de refinamento que apresentasse a solução mais próxima possível da convergência. Foram comparados os perfis de velocidade v_x , velocidade v_y e pressão para os diferentes refinamentos de malha para a linha horizontal $y=0,9$, apresentadas na Figura 6.32. As figuras do lado esquerdo representam os perfis das variáveis ao longo de todo domínio e as figuras do lado direito apresentam uma ampliação da área próxima a singularidade, permitindo assim visualizar melhor os resultados obtidos pelos diferentes graus de refinamentos.

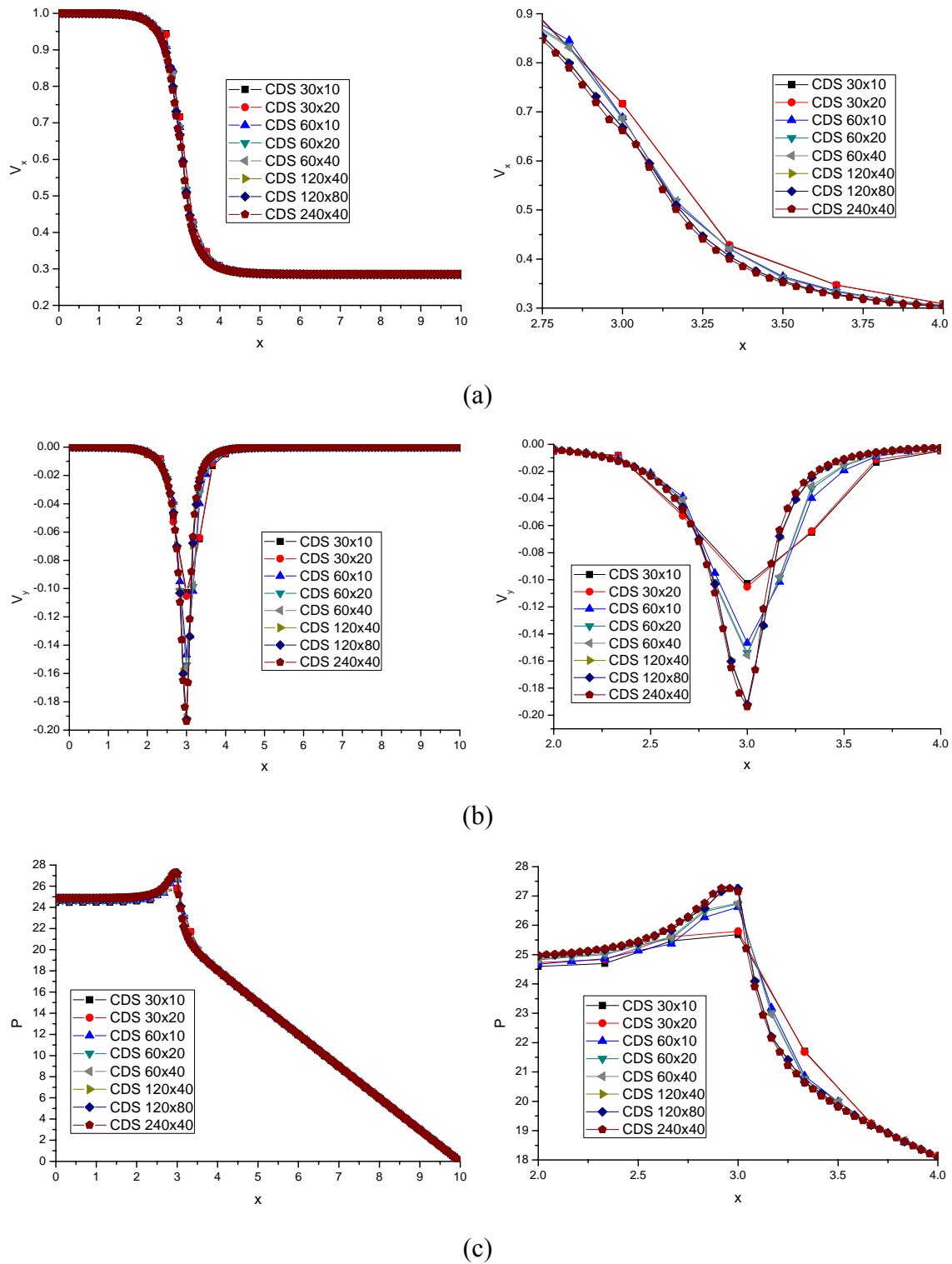


Figura 6.32: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.

Com a finalidade de comparar as diferenças entre os resultados obtidos pela aplicação do esquema CDS utilizando diferentes graus de refinamento de malha são apresentados os RMS na Tabela 6.5.

Tabela 6.5: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema CDS aplicando diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
240×40 e 120×80	$2,1614 \times 10^{-3}$	$1,5004 \times 10^{-3}$	$3,6693 \times 10^{-2}$
240×40 e 120×40	$2,4122 \times 10^{-3}$	$1,7109 \times 10^{-3}$	$4,3545 \times 10^{-2}$
120×80 e 120×40	$3,1223 \times 10^{-4}$	$2,4903 \times 10^{-4}$	$9,0084 \times 10^{-3}$
240×40 e 60×40	$7,4595 \times 10^{-3}$	$6,7631 \times 10^{-3}$	$1,4043 \times 10^{-1}$
120×80 e 60×40	$5,5075 \times 10^{-3}$	$6,1343 \times 10^{-3}$	$1,3027 \times 10^{-1}$
60×40 e 30×20	$9,7802 \times 10^{-3}$	$1,1099 \times 10^{-2}$	$2,5903 \times 10^{-1}$
120×40 e 60×20	$5,6889 \times 10^{-3}$	$6,2312 \times 10^{-3}$	$1,4031 \times 10^{-1}$
60×20 e 30×10	$9,7594 \times 10^{-3}$	$1,1103 \times 10^{-2}$	$2,8685 \times 10^{-1}$

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.32, pode-se observar que os resultados obtidos pelo esquema CDS utilizando a malha 120×40, 120×80 e 240×40 apresentaram soluções próximas, como pode ser verificado na Tabela 6.5, em que os RMS obtidos pelas malhas 120×80 e 120×40 não apresentam diferenças significativas quando comparados à malha 240×40. Comparando os RMS entre malhas 120×80 e 120×40 também é possível constatar que o aumento dos pontos em y não alterava significativamente a qualidade da solução. Através da sequência de RMS das malhas 30×10, 60×20, 120×40 e 240×40 (ou das malhas 30×20, 60×40, 120×80 e 240×40), é possível observar a baixa taxa de convergência do método CDS. Observa-se também que a maior diferença entre os perfis ocorre nos pontos próximos à singularidade, fora desta região grande parte das estruturas de malha estudadas apresentam uma solução de boa qualidade. Como o procedimento aplicado utiliza uma malha estruturada, a necessidade de um melhor refinamento próximo à singularidade torna necessário que todo o domínio seja refinado, demandando um esforço computacional elevado. Portanto, ao aplicar um refinamento maior apenas próximo à singularidade permite reduzir o esforço computacional sem comprometer a qualidade da solução. Esta estratégia será aplicada mais adiante com a utilização do procedimento multibloco.

Os perfis apresentados na Figura 6.33 comparam os resultados obtidos pelo esquema LAG4 usando diferentes refinamentos de malha com o resultado obtido pelo esquema CDS usando uma malha de 120×80 para a linha horizontal $y=0,9$.

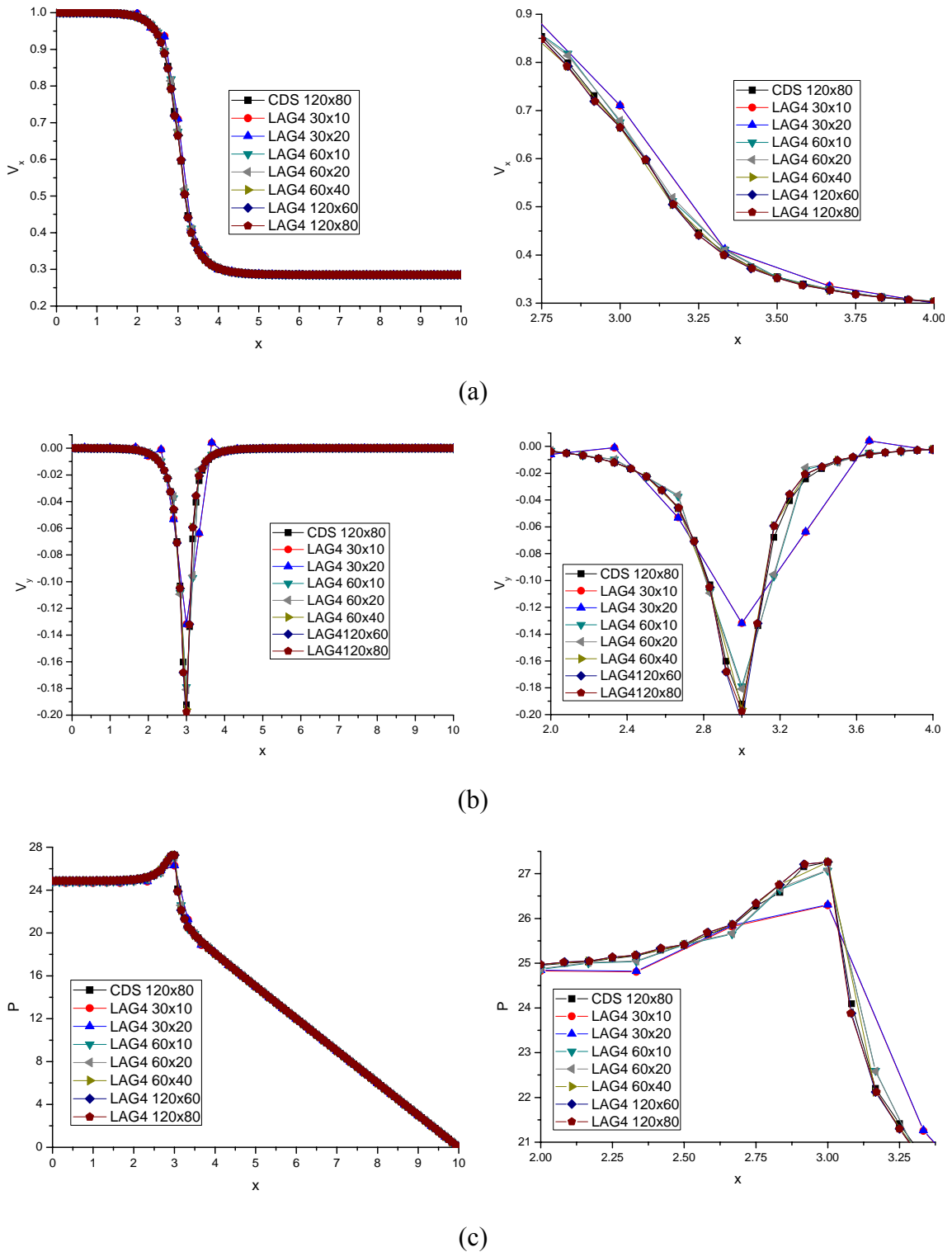


Figura 6.33: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.

Com a finalidade de comparar as diferenças entre as soluções obtidas pelo esquema LAG4 em relação às soluções obtidas pelo esquema CDS foram computados os RMS apresentados na Tabela 6.6

Tabela 6.6: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema LAG4 e para o esquema CDS aplicando malhas de diferentes refinamentos para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
LAG4 120×80 e LAG4 120×60	$2,1308 \times 10^{-5}$	$7,2839 \times 10^{-5}$	$5,2903 \times 10^{-4}$
LAG4 120×80 e LAG4 60×40	$4,2843 \times 10^{-4}$	$1,5730 \times 10^{-4}$	$1,8277 \times 10^{-3}$
LAG4 120×60 e LAG4 60×40	$4,0777 \times 10^{-4}$	$1,2806 \times 10^{-4}$	$1,4542 \times 10^{-3}$
LAG4 60×40 e LAG4 30×20	$1,2165 \times 10^{-2}$	$1,4100 \times 10^{-2}$	$2,4180 \times 10^{-1}$
LAG4 120×80 e CDS 240×40	$1,1486 \times 10^{-3}$	$1,5976 \times 10^{-3}$	$1,9462 \times 10^{-2}$
LAG4 120×60 e CDS 240×40	$1,1260 \times 10^{-3}$	$1,2380 \times 10^{-3}$	$1,9430 \times 10^{-2}$
LAG4 60×40 e CDS 240×40	$7,0428 \times 10^{-4}$	$8,9374 \times 10^{-4}$	$2,0853 \times 10^{-2}$
LAG4 120×80 e CDS 120×80	$1,7383 \times 10^{-3}$	$1,7206 \times 10^{-3}$	$3,3186 \times 10^{-2}$
LAG4 120×60 e CDS 120×80	$1,7053 \times 10^{-3}$	$1,6065 \times 10^{-3}$	$3,2964 \times 10^{-2}$
LAG4 60×40 e CDS 120×80	$1,4536 \times 10^{-3}$	$1,3084 \times 10^{-3}$	$3,0096 \times 10^{-2}$

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.33, pode-se observar que os resultados obtidos pelo esquema LAG4 utilizando as malhas 60×10, 60×20, 60×40, 120×60 e 120×80 apresentaram soluções próximas às soluções obtidas pelo esquema CDS utilizando uma malha 120×80. Diferenças mais significativas são apenas observadas para o perfil de velocidade v_y , Figura 6.33b, em que a utilização das malhas 60×40, 120×60 e 120×80 apresentaram soluções mais próximas às soluções obtidas pelo esquema CDS. A presença de “*overshoot*” na solução numérica obtida pelo esquema LAG4 para as malhas 30×10 e 30×20, que é característica da aplicação de aproximações de alta ordem, pode ser minimizada aumentando o refinamento da malha computacional, como pode ser observado na utilização das malhas 60×10, 60×20, 60×40, 120×60 e 120×80, em que tais oscilações não ocorrem mais.

Analisando os RMS apresentados na Tabela 6.6, é possível constatar a proximidade dos resultados obtidos pelo esquema LAG4 com refinamentos de malhas 120×80, 120×60 e 60×40, indicando que a utilização da malha 60×40 é capaz de produzir soluções com boa acurácia, quando comparada às soluções que utilizam refinamentos superiores. Comparando as soluções obtidas pelos esquemas LAG4 e CDS é possível verificar que a solução obtida pelo esquema LAG4 60×40 têm o mesmo nível de acurácia que a obtida pelo esquema CDS utilizando malha 240×40. Através dos RMS das malhas 30×20, 60×40 e 120×80 foi possível observar a maior taxa de convergência do método LAG4 em relação ao CDS.

Visando verificar a qualidade das soluções dos esquemas LAG4 e CDS em pontos próximos à singularidade em relação ao eixo vertical x , foi realizada a comparação entre os resultados obtidos pelo esquema LAG4 usando diferentes refinamentos de malha, com o resultado obtido pelo esquema CDS usando uma malha de 120×80 para a linha vertical $x=3,6667$, Figura 6.34 e Figura 6.35.

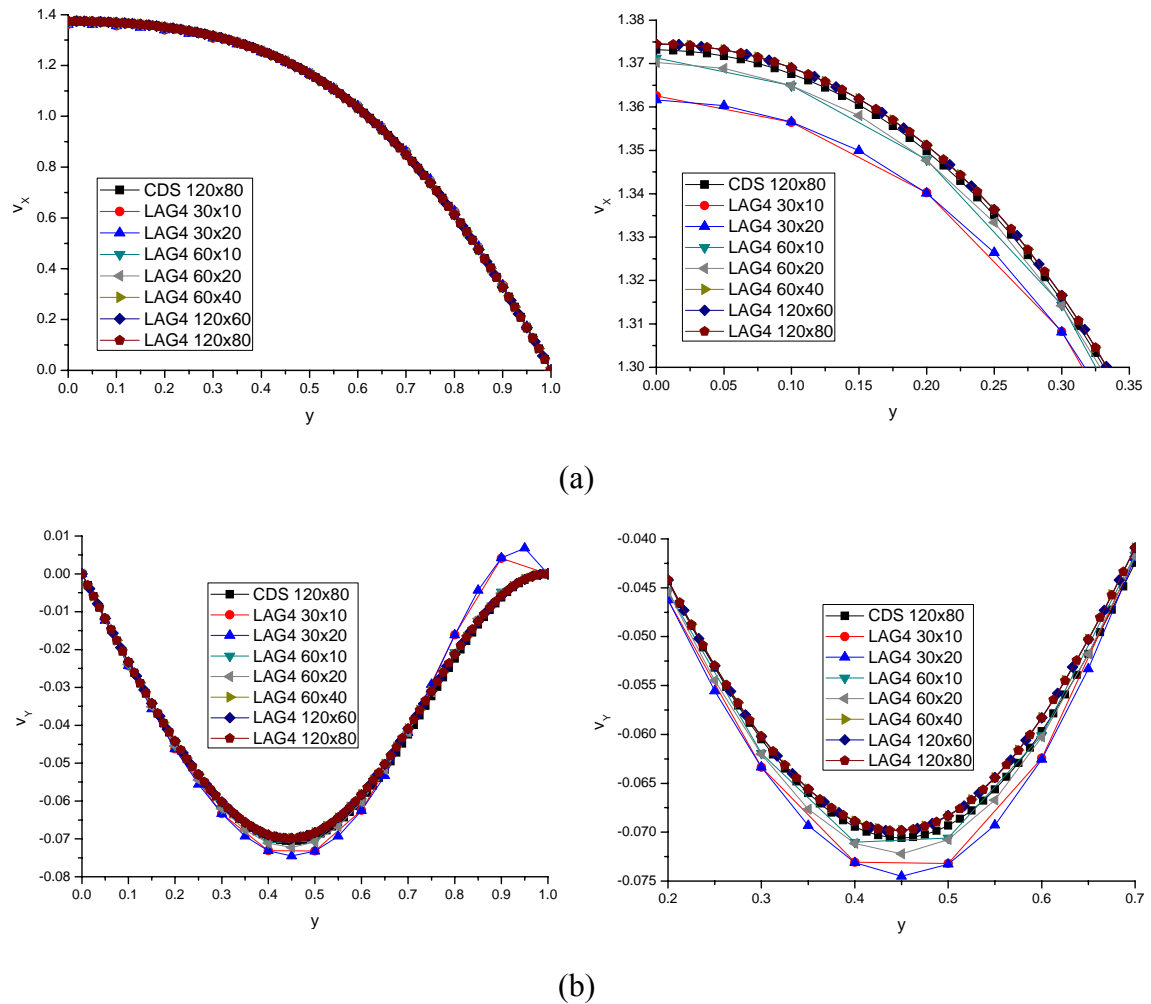


Figura 6.34: Perfis obtidos para posição $x=3,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y .

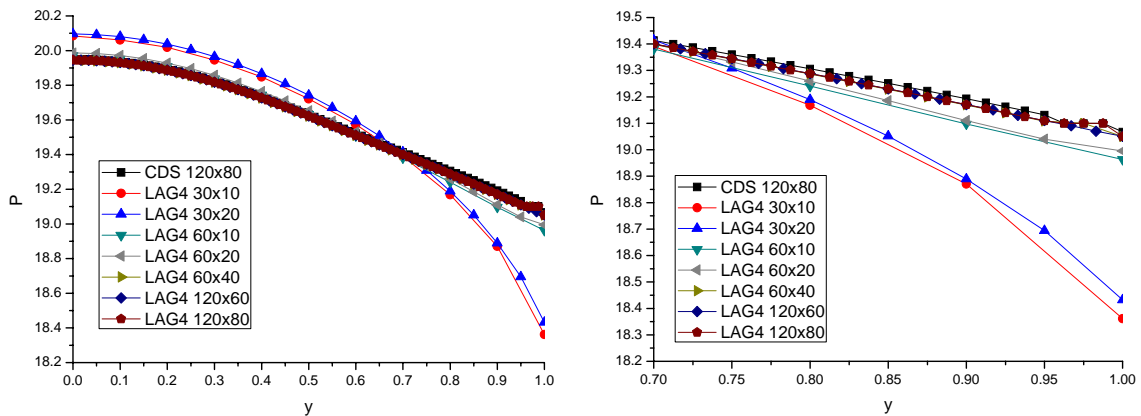


Figura 6.35: Perfis obtidos para posição $x=3,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano para a Pressão.

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.34 e na Figura 6.35, pode-se observar que as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 utilizando a malha 60×40 , 120×60 e 120×80 apresentam soluções próximas às soluções obtidas pelo esquema CDS utilizando uma malha 120×80 , mas com qualidade superior a esta última.

Comparando o tempo computacional para a obtenção de soluções com o mesmo grau de precisão, foi possível constatar um melhor desempenho do esquema LAG4 que utilizando uma malha 60×40 demandou 480 segundos para obtenção da solução ao passo que o esquema CDS com uma malha 120×80 demandou 1.135 segundos. O que demonstra claramente a vantagem de procedimentos de ordens mais elevadas.

Na Figura 6.36 são apresentadas as curvas de nível e linhas de corrente para o escoamento “*slip-stick*”. Tais simulações foram realizadas aplicando o esquema LAG4 e uma malha computacional 120×80 .

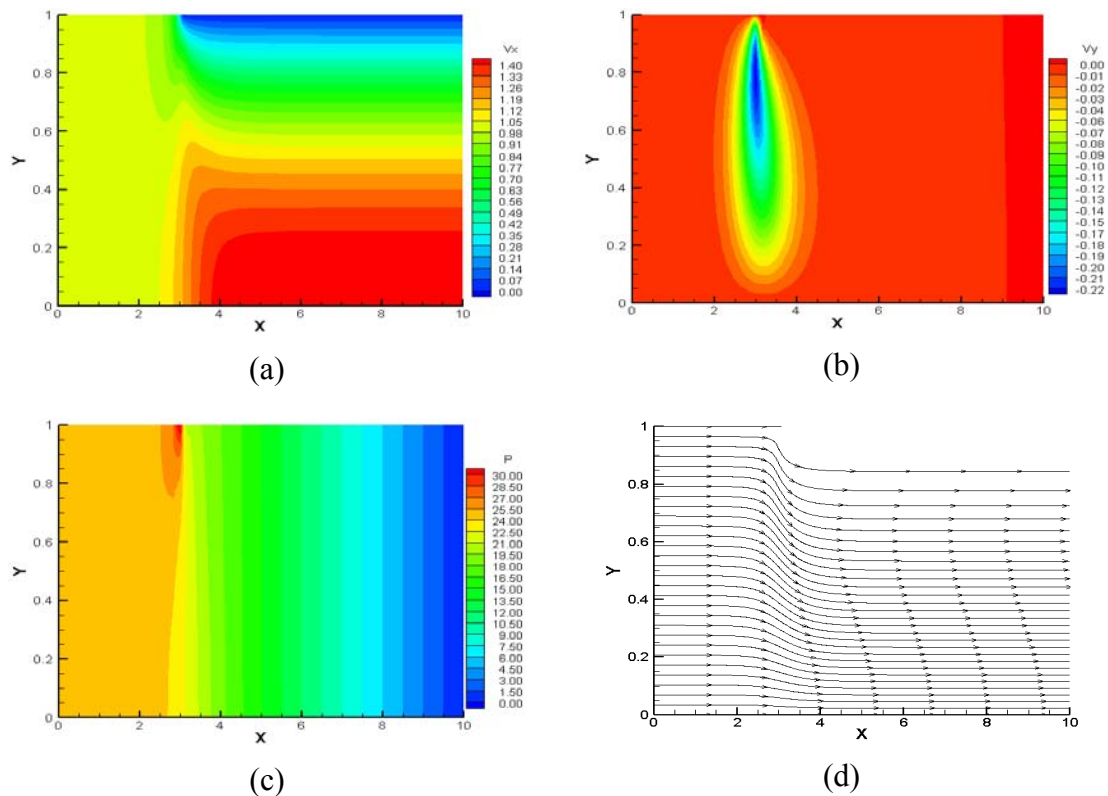


Figura 6.36: Curvas de nível e linhas de corrente obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 120×80 para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano: (a) Curva de nível para a velocidade v_x ; (b) Curva de nível para a velocidade v_y ; (c) Curva de nível para a Pressão e (d) Linhas de corrente.

Pelas curvas de nível apresentadas na Figura 6.36, pode-se observar que existe uma grande mudança no campo de velocidades na região próxima à singularidade. Esta mudança ocorre devido à frenagem realizada pela condição de não deslizamento imposta na parede, que faz com que a velocidade v_x passe do valor unitário para o valor nulo, resultando em um componente de velocidade v_y que se propaga na direção cruzada ao escoamento. Depois de decorrido um determinado comprimento da placa, a velocidade v_x assume um perfil de velocidade parabólico e o componente v_y torna-se nulo, significando que o escoamento encontra-se plenamente desenvolvido, sem influência da singularidade. No caso da pressão, é possível observar que o valor máximo obtido ocorre na região da parede no ponto de singularidade, assumindo no decorrer do escoamento um perfil linear.

Na Figura 6.37, são apresentadas as curvas de nível para velocidade e pressão obtidas pela aplicação da técnica de partição multibloco ao problema. Neste caso, buscou-se refinar apenas as regiões necessárias, ou seja, próxima à singularidade e

próxima à região de parede, segundo a estrutura de malha proposta na Figura 6.37a, resultando em uma malha composta de 3.600 volumes de controle.

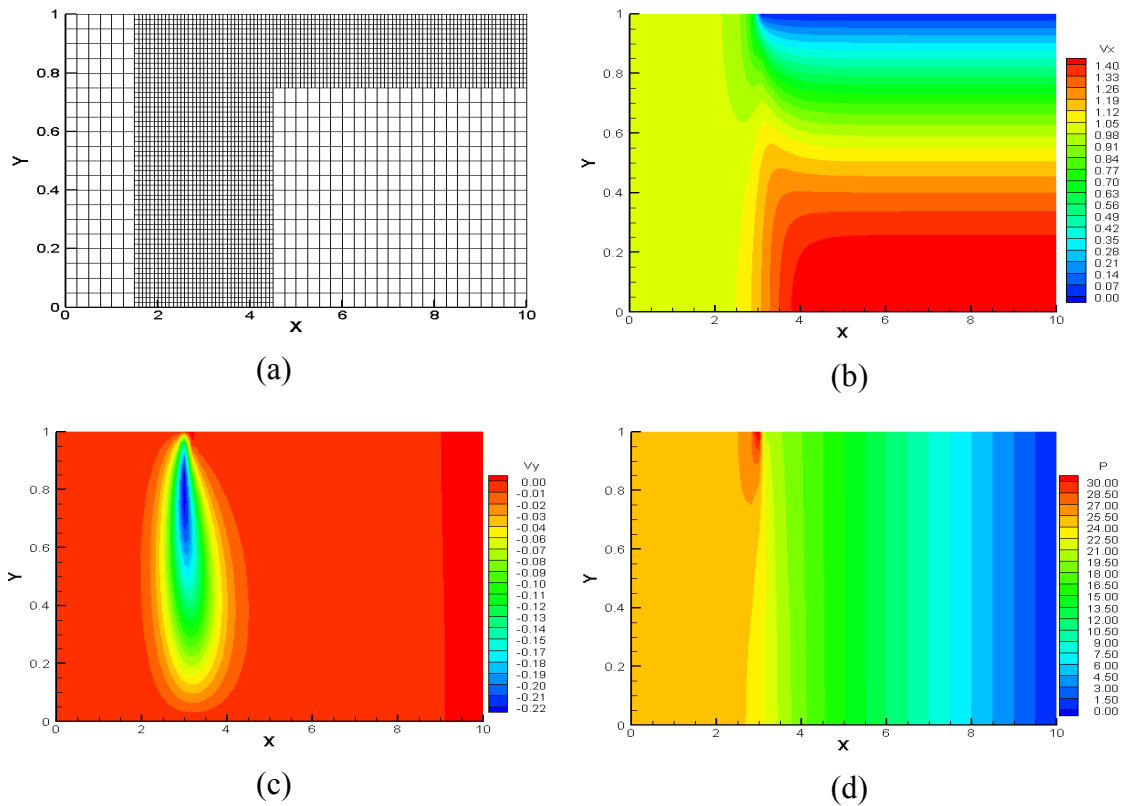


Figura 6.37: Curvas de nível obtidas aplicando o procedimento multibloco para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano: (a) Estrutura da malha; (b) Curva de nível para a velocidade v_x ; (c) Curva de nível para a velocidade v_y e (d) Curva de nível para a pressão.

Comparando os resultados obtidos pela aplicação do esquema multibloco (Figura 6.37) com os resultados obtidos pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha uniforme 120×80 de 9.600 volumes de controle (Figura 6.36), é possível observar uma boa concordância entre os resultados obtidos.

Com a finalidade de comparar melhor as soluções obtidas pelo procedimento multibloco foi também simulado o problema utilizando para todo domínio o mesmo grau de refinamento usado junto à região de singularidade e à parede, gerando uma malha de 120×60 (7.200 volumes de controle). Foram comparados os perfis horizontais em diferentes cortes em y , Figura 6.38. As diferenças entre estes valores também foram computadas e encontram-se apresentadas na Tabela 6.7.

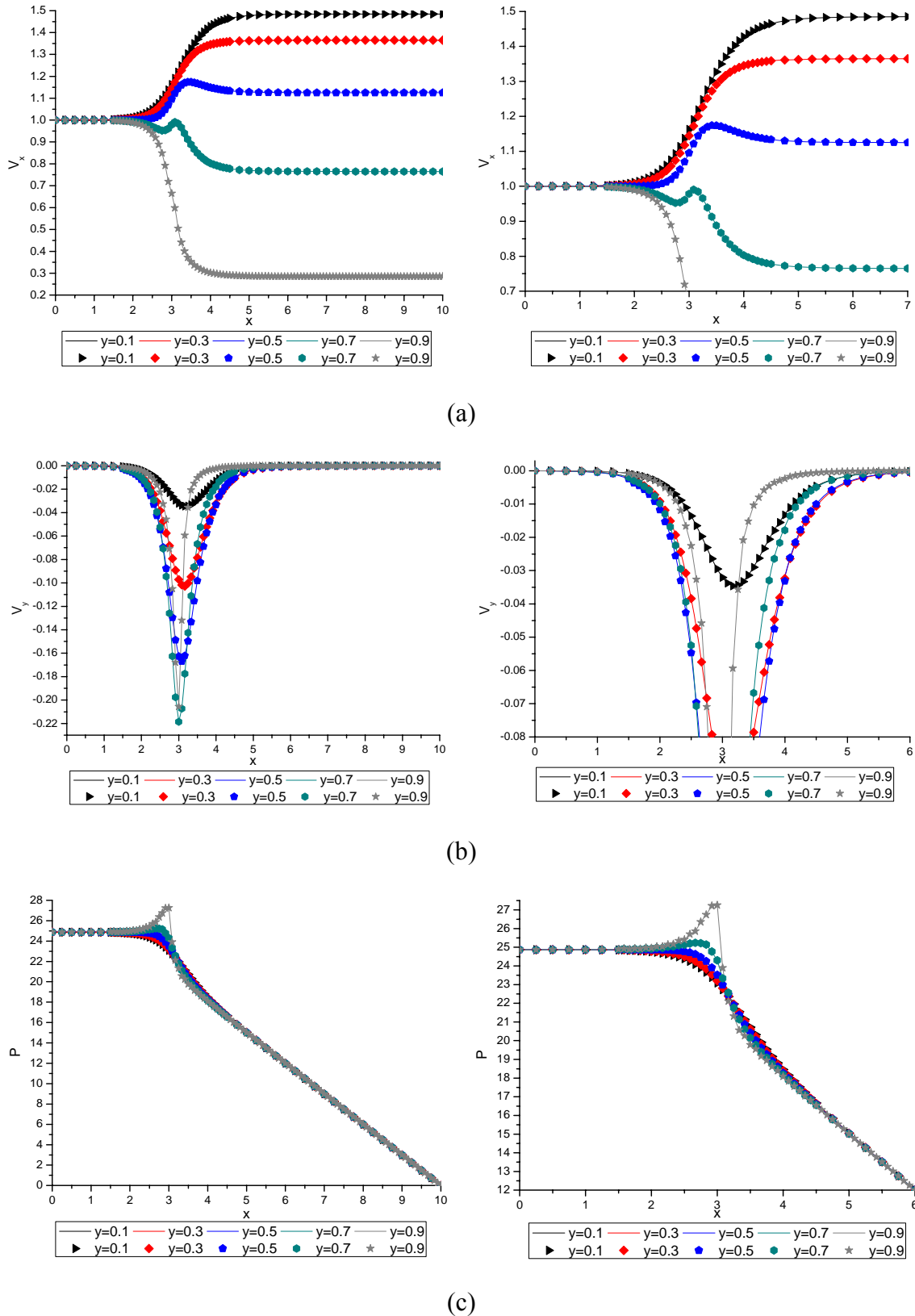


Figura 6.38: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y : utilizando a malha de refinamento homogêneo (representada por linhas) e malha multibloco (representada por pontos) para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) velocidade v_y e (c) Pressão.

Tabela 6.7: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento homogêneo para o escoamento “*slip-stick*” newtoniano.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
$y=0,1$	$8,0884 \times 10^{-4}$	$1,4104 \times 10^{-4}$	$1,2678 \times 10^{-3}$
$y=0,3$	$6,0253 \times 10^{-4}$	$3,6850 \times 10^{-4}$	$3,2590 \times 10^{-3}$
$y=0,5$	$4,3171 \times 10^{-4}$	$5,0762 \times 10^{-4}$	$3,3566 \times 10^{-3}$
$y=0,7$	$6,7666 \times 10^{-4}$	$4,6678 \times 10^{-4}$	$1,5684 \times 10^{-3}$
$y=0,9$	$3,0739 \times 10^{-4}$	$9,7468 \times 10^{-5}$	$1,2885 \times 10^{-3}$

Comparando os perfis obtidos pelos diferentes procedimentos de refino de malha que são apresentados na Figura 6.38, pode-se observar equivalência das soluções. Entretanto, para aplicação do procedimento multibloco existe uma demanda computacional muito menor. No caso da malha com refinamento homogêneo são utilizados 7.200 volumes de controle ao passo que o procedimento multibloco utiliza 3.600 volumes de controle. Essa considerável redução de malha permitiu diminuir o tempo computacional de 1.770 segundos no procedimento de refinamento completo para 851 segundos no procedimento multibloco, demonstrando claramente a vantagem de se utilizar uma malha bloco estruturada. Comparando a diferença entre a solução obtida pelo procedimento multibloco e a solução que utiliza o refinamento completo, Tabela 6.7, pode-se constatar que não existem discrepâncias significativas entre as soluções obtidas. Desta forma, o procedimento multibloco foi capaz de reduzir consideravelmente o esforço computacional empregado na simulação sem comprometer a qualidade da aproximação, demonstrando claramente a vantagem e a potencialidade da aplicação deste esquema.

6.3.2. Escoamento *Stick-Slip*

Neste problema, o fluido escoar entre duas placas planas paralelas e subitamente encontra uma superfície livre de cisalhamento, como esquematicamente representado pela Figura 6.39. Novamente, a grande dificuldade para simulação deste tipo de problema ocorre devido à mudança abrupta da condição de contorno que ocasiona a presença de singularidades na solução.

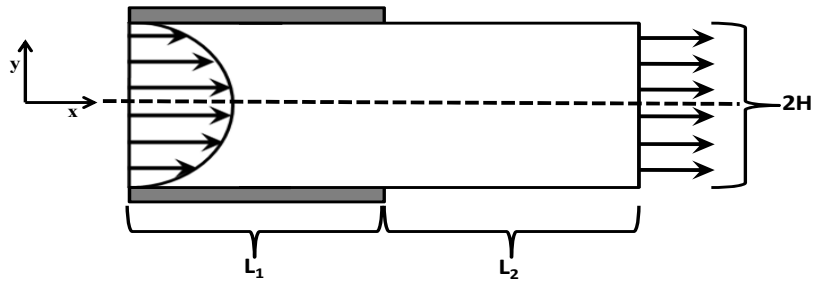
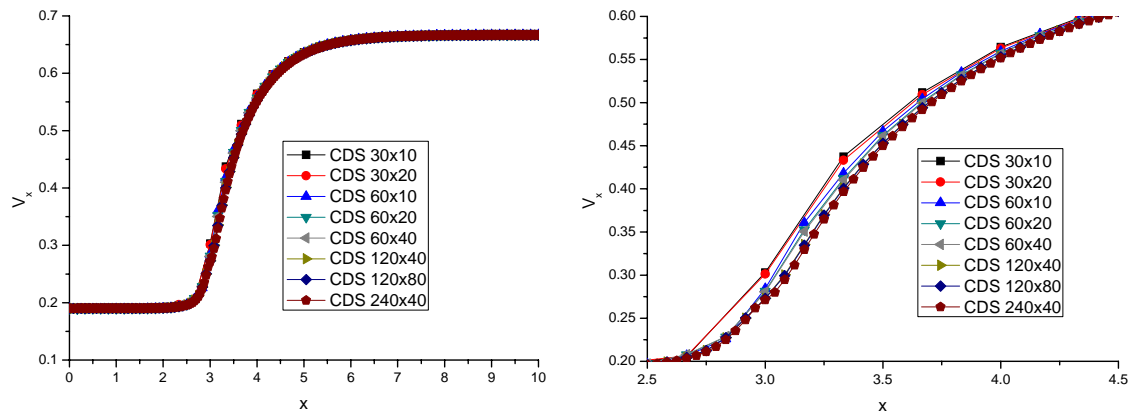


Figura 6.39: Representação esquemática do escoamento “stick-slip”.

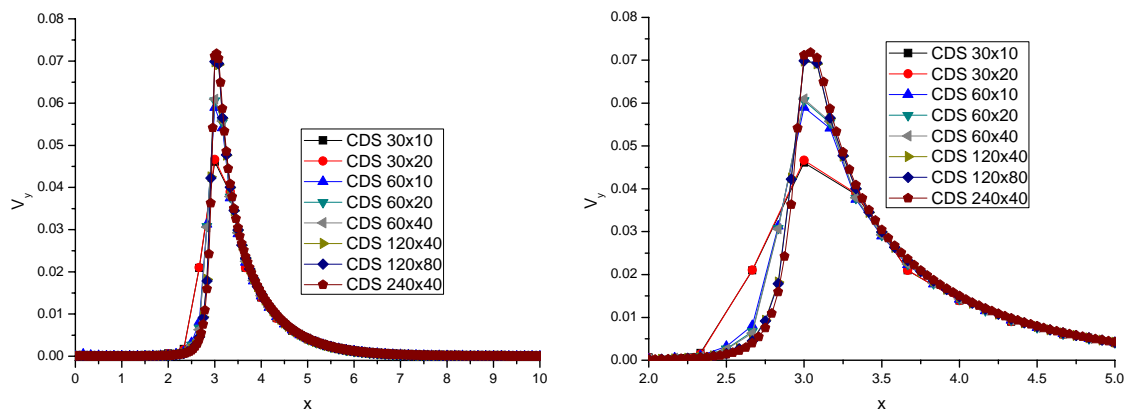
A condição de simetria é aplicada à seção horizontal central. Na entrada é considerado um perfil parabólico de velocidade. A condição de não deslizamento é aplicada até a saída das placas, onde é considerado o escoamento livre de cisalhamento. A pressão é especificada como nula na saída.

Para realização dos testes e comparações foram considerados o número de Reynolds de 10 ($Re=10$), comprimento da placa antes da singularidade de $L_1=3$, comprimento da placa após a singularidade de $L_2=7$ e meia altura da placa de $H=1$. As coordenadas x e y adimensionais são consideradas a partir do ponto onde se localiza a linha de simetria horizontal ($y=0$) e o início do escoamento ($x=0$).

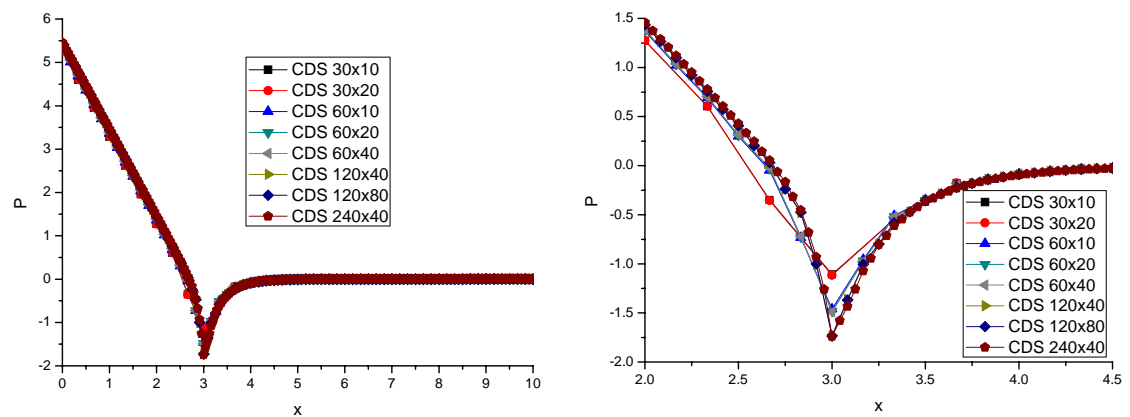
Como no exemplo anterior, o esquema CDS foi aplicado utilizando sete diferentes graus de refinamento de malha: 30×10 , 30×20 , 60×10 , 60×20 , 60×40 , 120×40 , 120×80 e 240×40 . Todas as soluções foram comparadas entre si visando identificar a estrutura de refinamento que apresenta a solução mais próxima possível da convergência. Foram comparados os perfis de velocidade v_x , velocidade v_y e pressão para os diferentes refinamentos de malha para a linha horizontal $y=0,9$, apresentados na Figura 6.40. As figuras do lado esquerdo representam os perfis das variáveis ao longo de todo domínio e as figuras do lado direito apresentam uma ampliação da área próxima à singularidade que é a região na qual as maiores diferenças são encontradas, permitindo assim visualizar melhor os resultados obtidos pelas diferentes proporções de refinamentos.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.40: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “stick-slip” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.

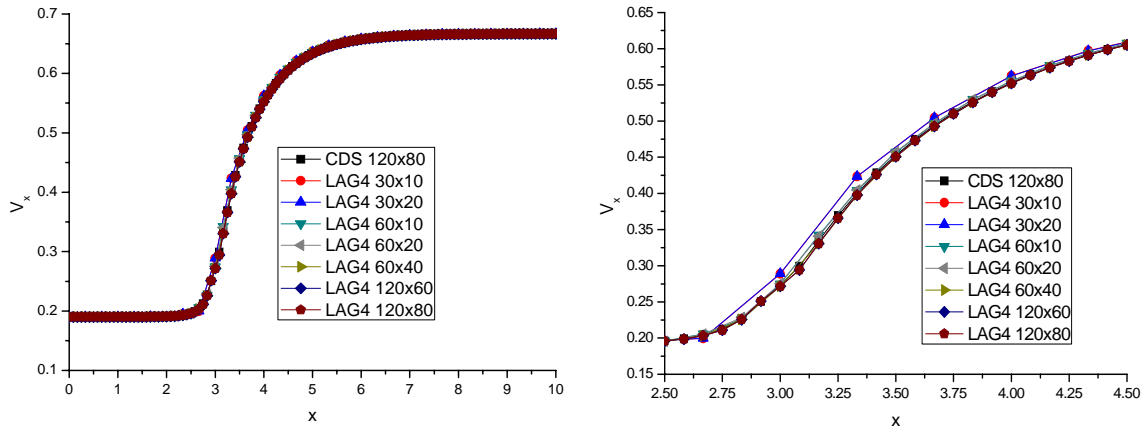
Com a finalidade de comparar as diferenças entre os resultados obtidos pela aplicação do esquema CDS para diferentes refinamentos de malha são apresentados na Tabela 6.8 os RMS das soluções.

Tabela 6.8: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema CDS aplicando diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*stick-slip*” newtoniano.

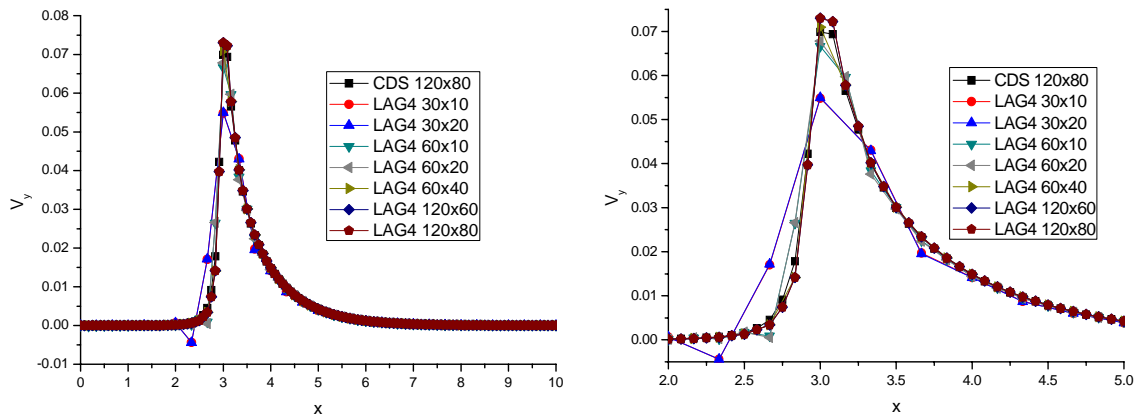
	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
240×40 e 120×80	$1,1262 \times 10^{-3}$	$6,5390 \times 10^{-4}$	$1,7451 \times 10^{-2}$
240×40 e 120×40	$1,3176 \times 10^{-3}$	$7,0439 \times 10^{-4}$	$1,9238 \times 10^{-2}$
120×80 e 120×40	$2,0786 \times 10^{-4}$	$5,9299 \times 10^{-5}$	$2,0587 \times 10^{-3}$
240×40 e 60×40	$4,1442 \times 10^{-3}$	$2,3912 \times 10^{-3}$	$6,4754 \times 10^{-2}$
120×80 e 60×40	$3,0852 \times 10^{-3}$	$2,0420 \times 10^{-3}$	$5,4807 \times 10^{-2}$
60×40 e 30×20	$5,9920 \times 10^{-3}$	$3,7025 \times 10^{-3}$	$1,0313 \times 10^{-1}$
120×40 e 60×20	$3,3381 \times 10^{-3}$	$2,0454 \times 10^{-3}$	$5,5681 \times 10^{-2}$
60×20 e 30×10	$6,5635 \times 10^{-3}$	$3,6671 \times 10^{-3}$	$1,0269 \times 10^{-1}$

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.40 e os RMS apresentados na Tabela 6.8, pode-se observar que os resultados obtidos pelo esquema CDS utilizando a malha 120×40, 120×80 e 240×40 apresentam soluções próximas. Comparando os RMS entre as malhas 120×80 e 120×40 é possível constatar que o aumento do refinamento da malha em y não altera de maneira significativa a solução. A baixa taxa de convergência do método CDS pode ser constatada através da sequência de RMS das malhas 30×10, 60×20, 120×40 e 240×40 (ou das malhas 30×20, 60×40, 120×80 e 240×40). As maiores discrepâncias entre os perfis ocorrem no ponto próximo à singularidade. Logo, é de grande interesse prover um maior refinamento da malha nesta região. Entretanto, para malhas uniformes, aumentar o refino próximo à região de contração implica refinar todo o domínio do problema, sugerindo a utilização da técnica multibloco para refinar localmente as áreas de interesse, como será demonstrado mais a frente.

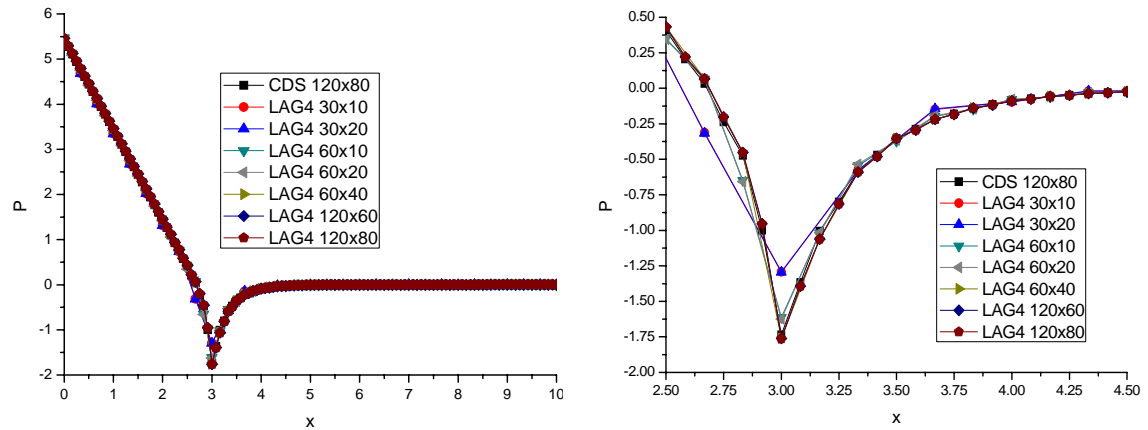
Os perfis apresentados na Figura 6.41 comparam os resultados obtidos pelo esquema LAG4 usando diferentes graus de refinamento de malha com o resultado obtido pelo esquema CDS usando uma malha de 120×80 para a linha horizontal $y=0,9$.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.41: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “stick-slip” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.

Com a finalidade de comparar as diferenças entre as soluções obtidas pelo esquema LAG4 em relação às soluções obtidas pelo esquema CDS foram computados os RMS apresentados na Tabela 6.9.

Tabela 6.9: Diferença entre as soluções obtidas pelo esquema LAG4 e para o esquema CDS aplicando malhas de diferentes refinamentos para o escoamento “*stick-slip*” newtoniano.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
LAG4 120×80 e LAG4 120×60	$7,6012 \times 10^{-6}$	$2,7477 \times 10^{-6}$	$9,8489 \times 10^{-5}$
LAG4 120×80 e LAG4 60×40	$3,2793 \times 10^{-5}$	$2,6398 \times 10^{-4}$	$5,8709 \times 10^{-4}$
LAG4 120×60 e LAG4 60×40	$2,5894 \times 10^{-5}$	$2,6263 \times 10^{-4}$	$5,1426 \times 10^{-4}$
LAG4 60×40 e LAG4 30×20	$6,5027 \times 10^{-3}$	$3,9927 \times 10^{-3}$	$1,2319 \times 10^{-1}$
LAG4 120×80 e CDS 240×40	$4,1943 \times 10^{-4}$	$4,3815 \times 10^{-4}$	$8,1077 \times 10^{-3}$
LAG4 120×60 e CDS 240×40	$4,1781 \times 10^{-4}$	$4,3655 \times 10^{-4}$	$8,0504 \times 10^{-3}$
LAG4 60×40 e CDS 240×40	$2,9225 \times 10^{-4}$	$2,9315 \times 10^{-4}$	$5,8097 \times 10^{-3}$
LAG4 120×80 e CDS 120×80	$8,7640 \times 10^{-4}$	$6,0888 \times 10^{-4}$	$1,1914 \times 10^{-2}$
LAG4 120×60 e CDS 120×80	$8,7352 \times 10^{-4}$	$6,0791 \times 10^{-4}$	$1,1832 \times 10^{-2}$
LAG4 60×40 e CDS 120×80	$8,1865 \times 10^{-4}$	$5,4737 \times 10^{-4}$	$1,0975 \times 10^{-2}$

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.41, é possível constatar que a utilização do procedimento LAG4 com uma malha 60×40 apresenta resultados similares às soluções obtidas por refinamentos superiores, 120×60 e 120×80, como pode ser constatado na Tabela 6.9. Comparando os perfis obtidos pelo esquema LAG4 com as soluções obtidas pelo esquema CDS utilizando uma malha 120×80 é possível verificar que a utilização do esquema LAG4 com refinamento 60×10, 60×20, 60×40, 120×60 e 120×80 apresentam soluções próximas ao esquema CDS. Neste caso, diferenças mais significativas entre os resultados são apenas observadas para aplicação das malhas 30×10 e 30×20, em que inclusive é possível observar a presença de oscilações na solução obtida para velocidade v_y , que são eliminadas com o aumento da malha computacional. Através da análise dos RMS apresentados na Tabela 6.9, é possível constatar que a aplicação do esquema LAG4 apresenta uma maior taxa de convergência que o esquema CDS e também melhor acurácia.

Com a finalidade de verificar a qualidade das soluções obtidas pelos esquemas LAG4 e CDS em pontos próximos à singularidade em relação ao eixo vertical, os resultados obtidos pelo esquema LAG4 usando diferentes tamanhos de malha foram comparados aos resultados obtidos pelo esquema CDS usando uma malha de 120×80 para a linha vertical $x=3,6667$, Figura 6.42.

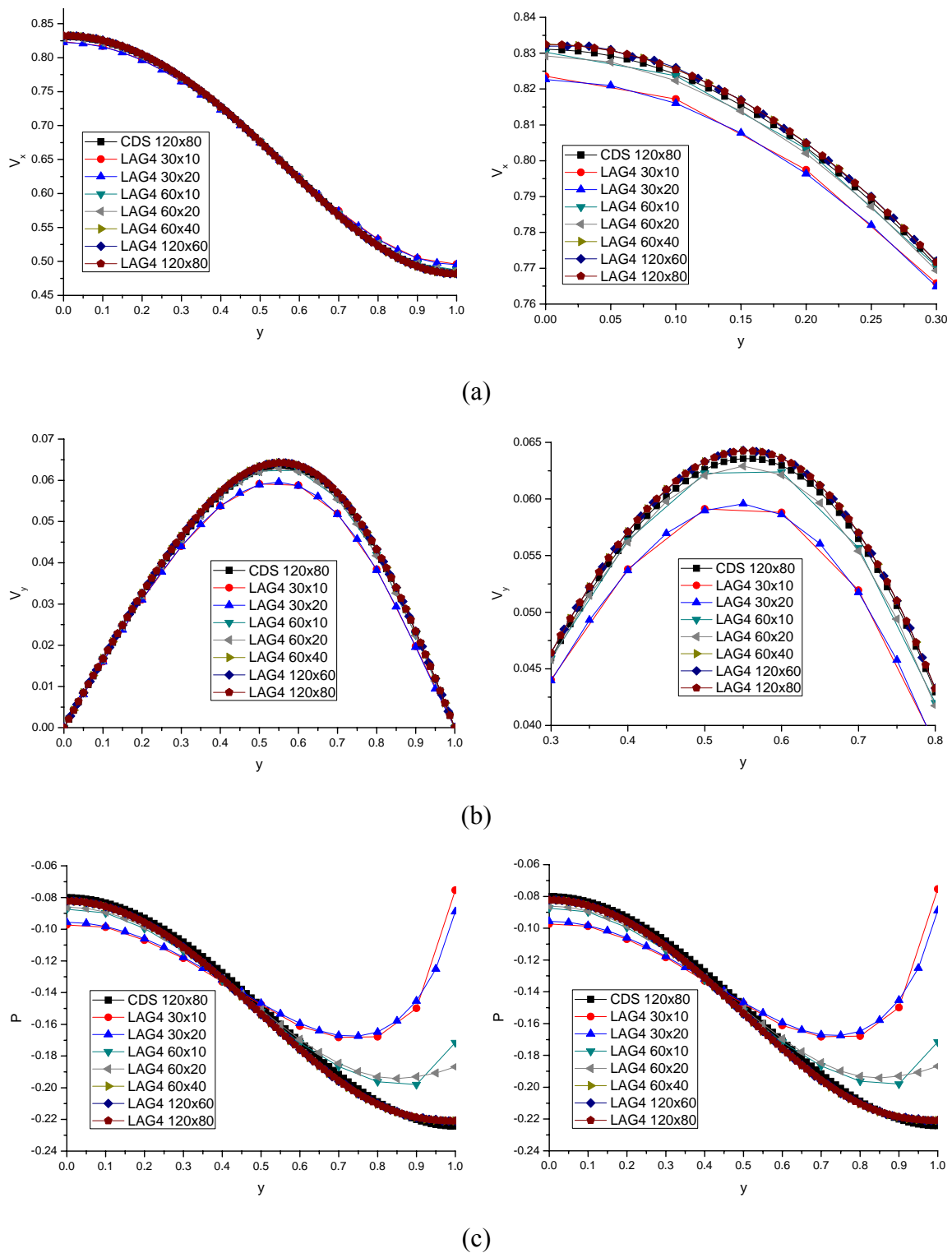


Figura 6.42: Perfis obtidos para posição $x=3,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “stick-slip” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.42, pode-se constatar que as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 utilizando a malha 60×40 apresentam solução próxima a obtida pela malha 120×80 indicando a convergência da

solução. As soluções obtidas pelo esquema LAG4 usando a malha 60×40 e 120×80 estão em concordância com a resposta obtida pelo esquema CDS utilizando uma malha 120×80 , mas com qualidade superior a esta última. As maiores discrepâncias entre os resultados foram observadas para a pressão, especialmente na região próxima à parede, onde apenas as malhas 60×40 e 120×80 foram capazes de apresentar soluções próximas à solução obtida pelo esquema CDS.

Comparando o tempo de simulação necessário para obtenção de soluções com o mesmo grau de precisão, pode-se novamente constatar a superioridade do esquema LAG4 que demandou um esforço computacional menor que o esquema CDS. A aplicação do esquema LAG4 para malha 60×40 necessitou de 338 segundos para completar a simulação, enquanto que o esquema CDS com malha 120×80 necessitou de 758 segundos, o que representa mais do que o dobro do tempo.

A Figura 6.43 apresenta as curvas de nível para as velocidades e a Figura 6.44 apresenta as curvas de nível para a pressão e as linhas de corrente para o escoamento em questão, utilizando o esquema LAG4 e uma malha computacional de 120×80 .

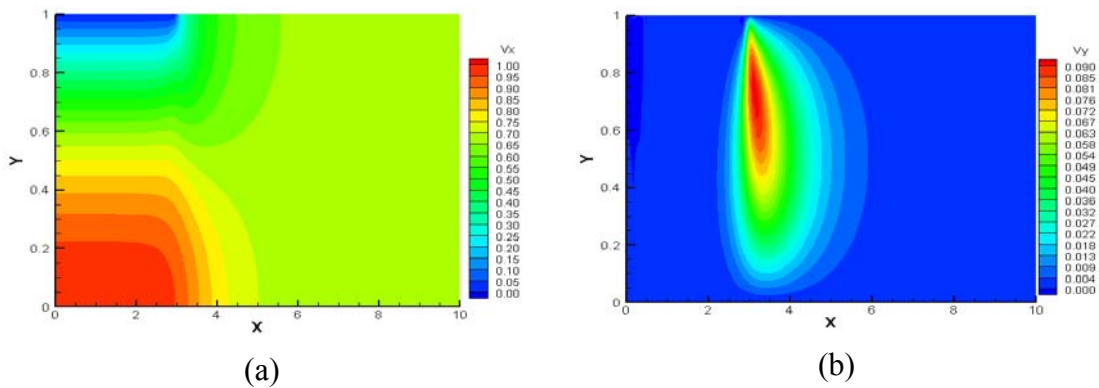


Figura 6.43: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma malha 120×80 para o escoamento “*stick-slip*” newtoniano: (a) Curva de nível para a velocidade v_x e (b) Curva de nível para a velocidade v_y .

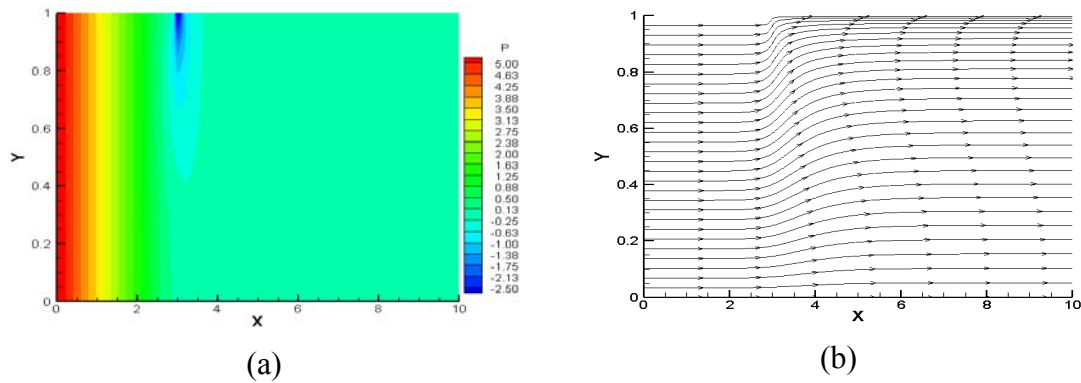


Figura 6.44: Curvas de nível e linhas de corrente obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma malha 120×80 para o escoamento “*stick-slip*” newtoniano: (a) Curva de nível para a pressão e (b) Linhas de corrente.

Pela análise dos resultados, Figura 6.43 e Figura 6.44, é possível visualizar uma grande variação da solução na região próxima à singularidade, o que ocorre devido à mudança da condição de não deslizamento para condição livre de cisalhamento, fazendo com que a velocidade v_x passe de zero para um valor que vai crescendo ao longo do escoamento até assumir um valor constante. No instante em que ocorre a mudança na condição de parede surge um componente de velocidade v_y que se propaga na direção cruzada ao escoamento que após um determinado comprimento, torna-se nula. A velocidade v_x passa de um perfil parabólico para um perfil uniforme ao longo do escoamento. Observa-se que o valor mínimo da pressão é obtido no ponto de singularidade junto à parede.

Na Figura 6.45, são apresentadas as curvas de nível de velocidade e de pressão obtidas utilizando a técnica de partição multibloco. Neste caso, buscou-se refinar as regiões apenas necessárias, ou seja, próxima à singularidade e próxima à região de parede, conforme a Figura 6.45a, resultando em uma malha composta de 2.960 volumes de controle.

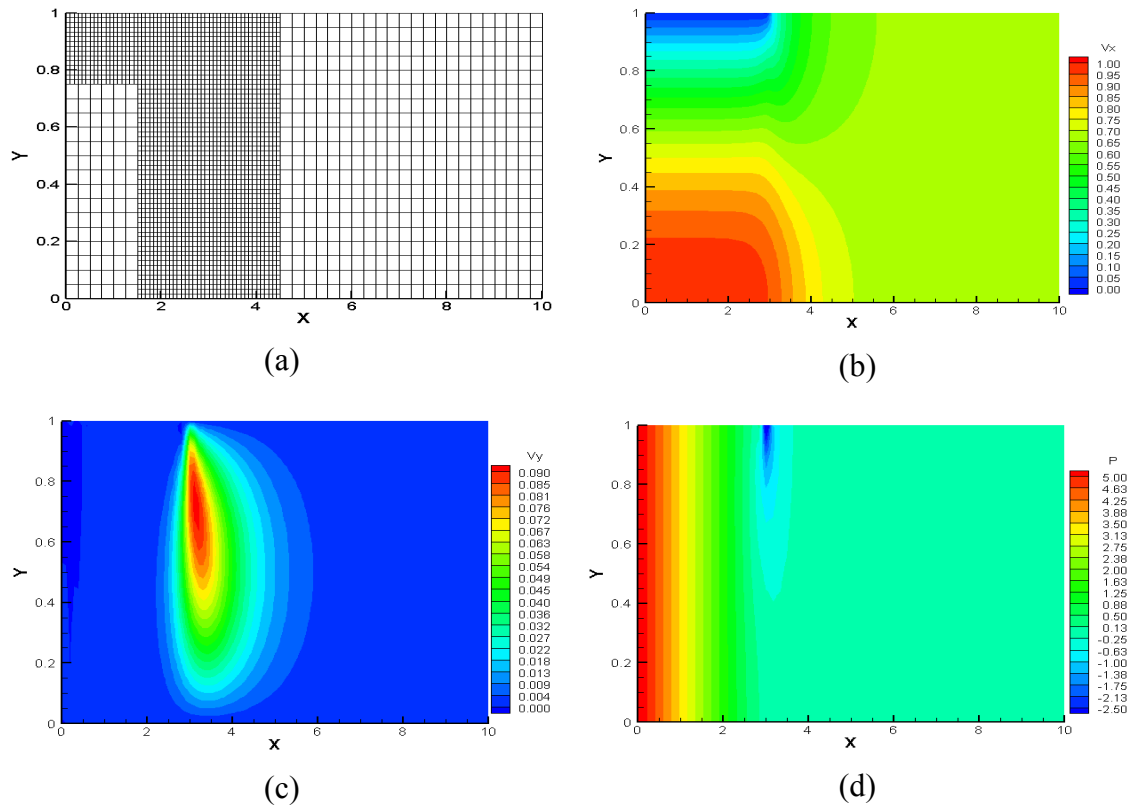
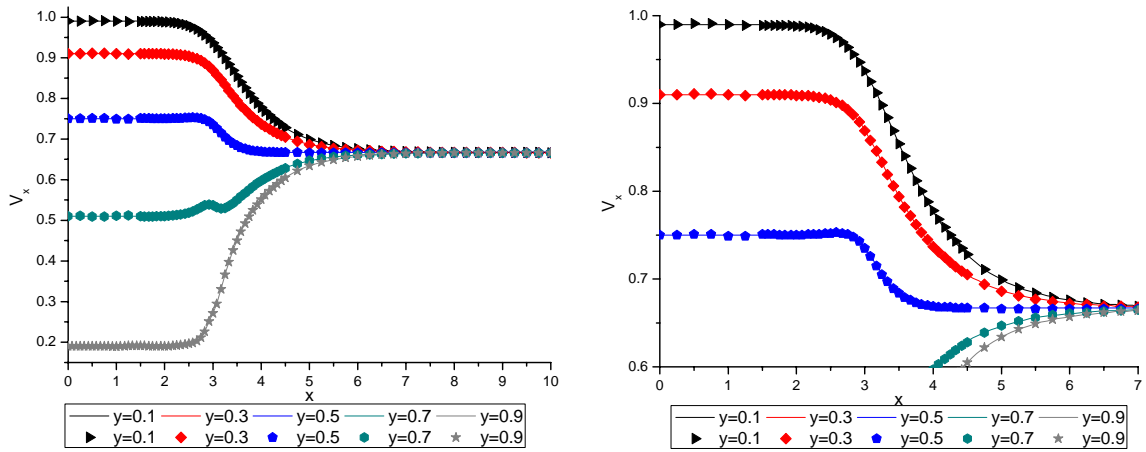


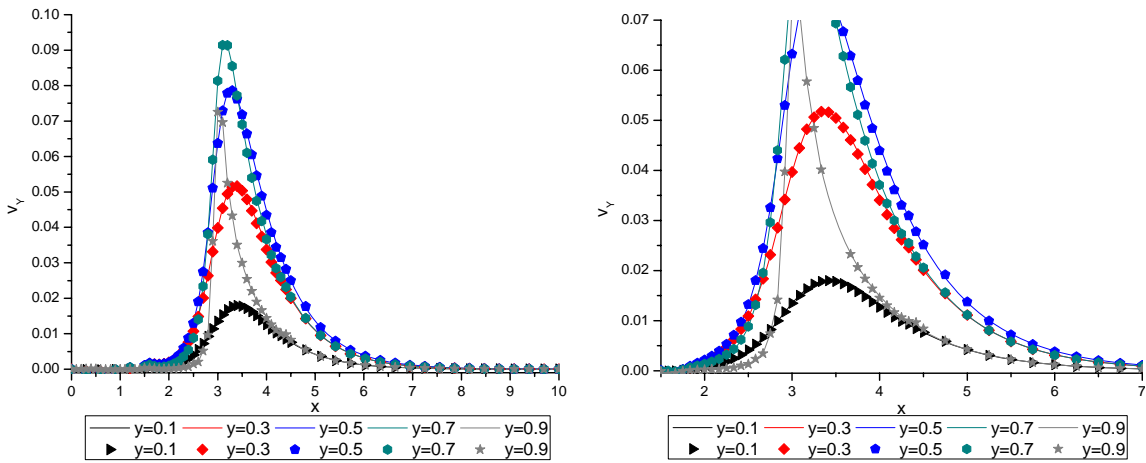
Figura 6.45: Resultados obtidos aplicando o procedimento multibloco para o escoamento “*stick-slip*” newtoniano: (a) Estrutura da malha; (b) Curva de nível para a velocidade v_x ; (c) Curva de nível para a velocidade v_y e (d) Curva de nível para a pressão

Comparando os resultados obtidos pela aplicação do esquema multibloco, Figura 6.45, com os resultados obtidos pela aplicação apenas do esquema LAG4 com uma malha 120×80 de 9.600 volumes de controle, Figura 6.43, é possível observar uma boa concordância entre os resultados obtidos.

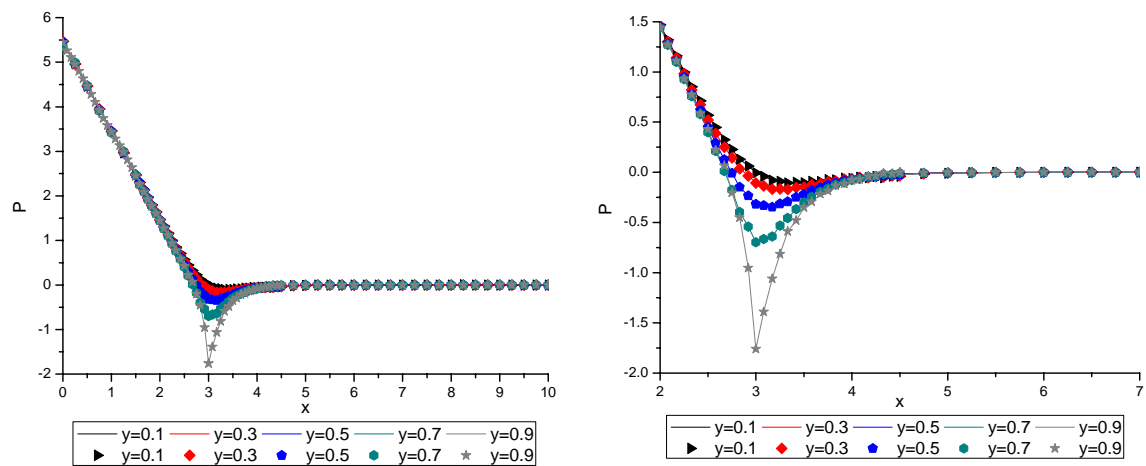
Com a finalidade de comparar melhor as soluções obtidas pelo procedimento multibloco, foi também simulado o problema utilizando para todo o domínio o mesmo grau de refinamento usado junto à região de singularidade e a parede, aplicando uma malha de 120×60 (7.200 volumes de controle). Foram comparados os perfis horizontais de velocidade e pressão em diferentes cortes em y , Figura 6.46. As diferenças entre estes valores também foram computadas e encontram-se apresentadas na Tabela 6.10.



(a)



(b)



(c)

Figura 6.46: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y : utilizando a malha de refinamento homogêneo (representada por linhas) e malha multibloco (representada por pontos) para o escoamento “*stick-slip*” newtoniano: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y e (c) Pressão.

Tabela 6.10: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento homogêneo para o escoamento “stick-slip” newtoniano.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
y=0,1	$2,2582 \times 10^{-5}$	$1,7929 \times 10^{-4}$	$2,9318 \times 10^{-4}$
y=0,3	$1,5576 \times 10^{-5}$	$4,7273 \times 10^{-4}$	$2,0870 \times 10^{-4}$
y=0,5	$7,6320 \times 10^{-6}$	$6,0757 \times 10^{-4}$	$2,3862 \times 10^{-4}$
y=0,7	$1,6023 \times 10^{-5}$	$5,1098 \times 10^{-4}$	$3,2035 \times 10^{-4}$
y=0,9	$1,9313 \times 10^{-5}$	$1,4423 \times 10^{-4}$	$2,9740 \times 10^{-4}$

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.46 e os valores apresentados na Tabela 6.10, pode-se constatar que as soluções obtidas pelo procedimento multibloco e a utilização do refinamento de malha homogêneo são equivalentes. A aplicação do procedimento com a malha homogênea utiliza 7.200 volumes de controle, ao passo que o procedimento multibloco utiliza 2.960 volumes de controle. Em termos de tempo computacional essa redução vai de 1.131 segundos, utilizando o procedimento com malha uniforme, para 493 segundos, utilizando o procedimento multibloco, demonstrando claramente a vantagem da utilização da metodologia. A aplicação da técnica multibloco permitiu que apenas regiões de interesse fossem refinadas, diminuindo assim o esforço empregado na simulação do problema sem comprometer a precisão da simulação, como pode ser observado comparando os RMS apresentados nas Tabela 6.10.

6.3.3. Escoamento em Cavidade Quadrada

O escoamento em cavidade quadrada é constituído por um líquido inicialmente em repouso e no tempo t_0 a superfície superior da cavidade entra em contato com uma placa deslizante que se move com velocidade constante V , Figura 6.47. Este exemplo se caracteriza pela formação de vórtices, principalmente quando considerados elevados números de Reynolds.

Neste caso, são consideradas em todas as paredes a condição não deslizamento e para a parede móvel um perfil de velocidade constante para v_x . Para a realização dos testes e das comparações foi simulada uma cavidade de tamanho unitário ($H=1$) com as coordenadas x e y adimensionais consideradas nos respectivos eixos, conforme Figura 6.47.

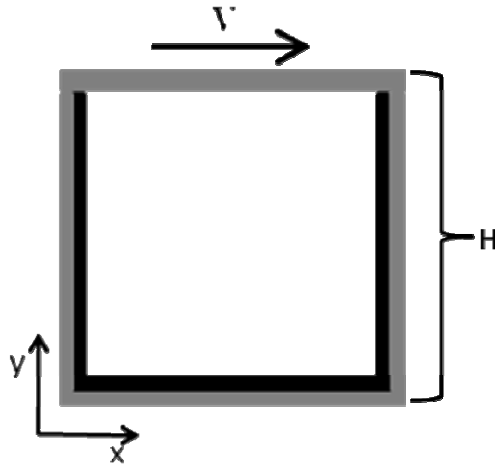


Figura 6.47: Representação esquemática do escoamento em cavidade.

Para este exemplo, duas condições de escoamento são estudadas: a primeira considerando número de Reynolds de 100 e a segunda considerando o número de Reynolds de 400. Para ambos os casos, os resultados obtidos pela aplicação do esquema LAG4 são comparados aos resultados retirados da literatura, visando avaliar a qualidade da aproximação obtida.

6.3.3.1. Escoamento em Cavidade Quadrada para $Re=100$

Neste item são realizadas comparações entre os resultados obtidos pela aplicação do esquema LAG4 com os resultados retirados de BOTELLA e PEYRET (1998) em que diversas metodologias foram aplicadas à solução do problema da cavidade, YAPICI *et al.* (2009) e de MUNIZ *et al.* (2003) em que esquemas de alta ordem foram aplicados.

Na Tabela 6.11 são apresentados os resultados retirados do trabalho de BOTELLA e PEYRET (1998), YAPICI *et al.* (2009) e de MUNIZ *et al.* (2003). Nesta Tabela são apresentados os valores de velocidade mínima v_x considerada na linha vertical central ($x=0,5$) e o correspondente valor de y , onde este valor de mínimo ocorre, e os valores máximo e mínimo da velocidade v_y , na linha horizontal central ($y=0,5$), e os correspondentes valores das abscissas x .

Os resultados apresentados por BOTELLA e PEYRET (1998) foram obtidos pela utilização de um método espectral de colocação de Chebyshev, DENG *et al.* (1994) usaram o método de volumes finitos com extrapolação de Richardson para obtenção da solução, GHIA *et al.* (1982) e BRUNEAU e JOURON (1990) usaram o método de diferenças finitas com técnica multigrid e YAPICI *et al.* (2009) aplicaram o método de

volumes finitos utilizando o esquema de diferenças centrais (CDS). Os resultados apresentados por MUNIZ *et al.* (2003) foram obtidos pela utilização do método de volumes finitos aplicando os esquemas de Padé e Lagrange ambos de 4ª ordem.

Tabela 6.11: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ retiradas da literatura para o escoamento em cavidade newtoniano com $Re=100$.

	Malha	v_x^{\min}	y^{\min}	v_y^{\max}	x^{\max}	v_y^{\min}	x^{\min}
Botella	96×96	-0,2140	0,4581	0,1795	0,2370	-0,2538	0,8104
Deng	64×64	-0,2131	-----	0,1789	-----	-0,2533	-----
Ghia	129×129	-0,2109	0,4531	0,1752	0,2344	-0,2453	0,8047
Bruneau	129×129	-0,2106	0,4531	0,1786	0,2344	-0,2521	0,8125
Yapici	305×305	-0,2139	0,4565	0,1795	0,2383	-0,2537	0,8089
LAG4*	50×50	-0,2139	0,4575	0,1794	0,2375	-0,2537	0,8100
Padé	40×40	-0,2142	0,4578	0,1798	0,2375	-0,2540	0,8109

* MUNIZ *et al.* (2003)

Na Tabela 6.12 são apresentados os valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ obtidos pela aplicação do esquema LAG4 para diferentes refinamentos de malhas.

Tabela 6.12: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ aplicando o esquema LAG4 usando diferentes refinamentos de malha para o escoamento em cavidade newtoniano com $Re=100$.

	Malha	v_x^{\min}	y^{\min}	v_y^{\max}	x^{\max}	v_y^{\min}	x^{\min}
LAG4	10×10	-0,2066	0,4750	0,1708	0,2360	-0,2382	0,8135
LAG4	20×20	-0,2121	0,4591	0,1792	0,2393	-0,2519	0,8113
LAG4	30×30	-0,2131	0,4575	0,1791	0,2422	-0,2538	0,8096
LAG4	40×40	-0,2141	0,4563	0,1793	0,2371	-0,2538	0,8101
LAG4	50×50	-0,2140	0,4563	0,1793	0,2378	-0,2538	0,8101
LAG4	60×60	-0,2140	0,4564	0,1794	0,2380	-0,2536	0,8084

Comparando os resultados obtidos pelo esquema LAG4, Tabela 6.12, com os resultados retirados da literatura, Tabela 6.11, pode-se observar uma boa concordância entre os resultados obtidos, especialmente quando comparados às soluções de maior grau de refinamento utilizadas por YAPICI *et al.* (2009) e às soluções obtidas com as aproximações de ordem mais elevadas utilizadas por MUNIZ *et al.* (2003). É importante ressaltar o grau de acurácia obtido pelo esquema LAG4, que mesmo utilizando malhas com menor grau de refinamento foi capaz de obter soluções satisfatórias, especialmente quando comparados aos resultados de GHIA *et al.* (1982) e

BRUNEAU e JOURON (1990) que utilizando malhas de 129x129 obtiveram resultados próximos ao LAG4 usando uma malha 20x20.

A qualidade da aproximação utilizando o esquema LAG4 pode ser melhor avaliada comparando o perfil de velocidade v_x na linha central ($x=0,5$) e o perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$) obtidos por YAPICI *et al.* (2009) usando o método de volumes finitos com uma malha 305x305 com os correspondentes perfis de velocidade obtidos usando o esquema LAG4 com os refinamentos 20x20 e 50x50, Figura 6.48.

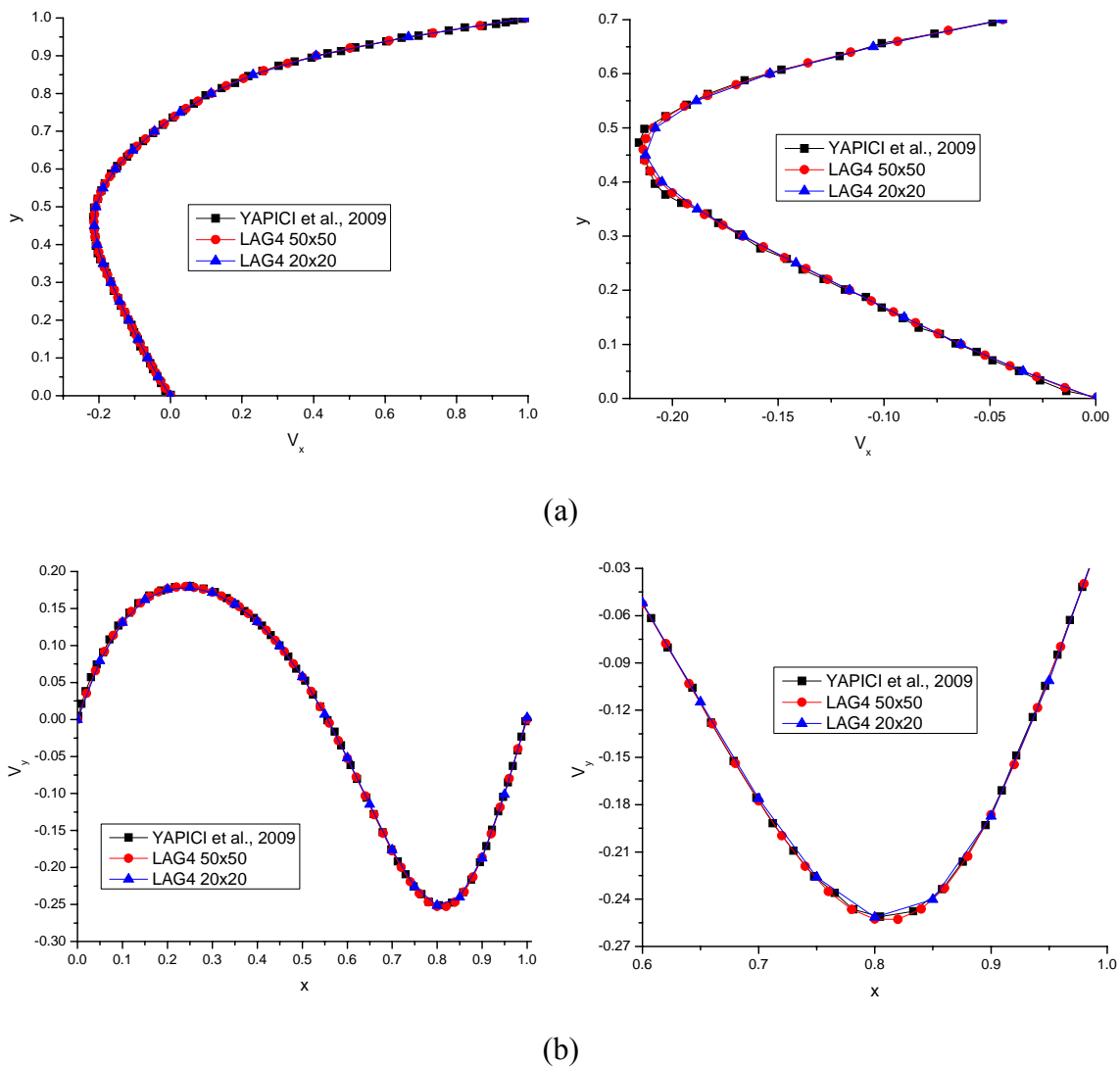


Figura 6.48: Comparações entre os perfis de velocidade aplicando o esquema LAG4 usando malha 20x20 e 50x50 com resultados retirados da literatura para o escoamento em cavidade newtoniano: (a) Perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x=0,5$) e (b) Perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$).

6.3.3.2. Escoamento em Cavidade Quadrada para $Re=400$

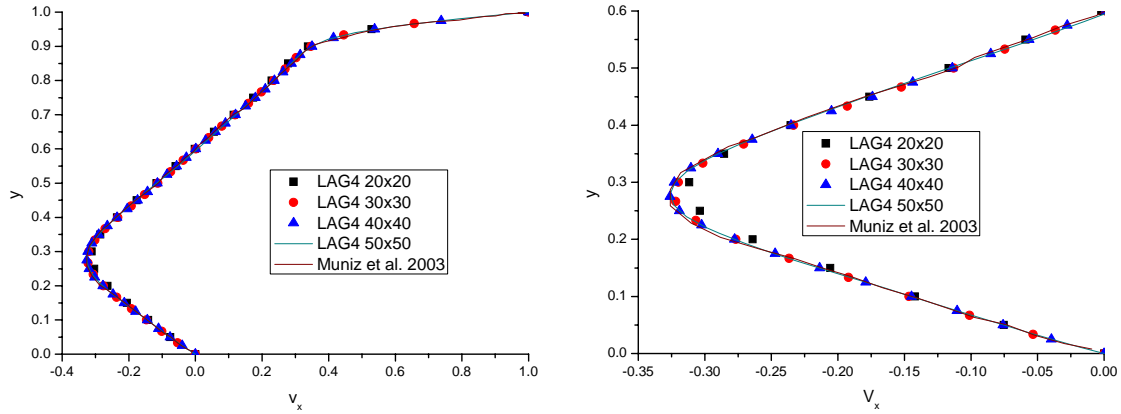
Neste item, são realizadas comparações entre os resultados obtidos pela aplicação do esquema LAG4 usando uma malha 20×20 , 30×30 , 40×40 e 50×50 com os resultados retirados de GHIA *et al.* (1982) utilizando o método de diferenças finitas com técnica multigrid, YAPICI *et al.* (2009) aplicando o método de volumes finitos utilizando o esquema de diferenças centrais (CDS) e os resultados extraídos de MUNIZ *et al.* (2003) usando o método de volumes finitos com esquema de PADE de 4ª ordem.

Na Tabela 6.13 são apresentados os resultados obtidos pela aplicação do esquema LAG4 e os resultados retirados dos trabalhos de GHIA *et al.* (1982) e YAPICI *et al.* (2009). Nesta Tabela são apresentados os valores de velocidade mínima v_x considerada na linha vertical central ($x=0,5$) e o correspondente valor de y , onde este valor de mínimo ocorre, e os valores máximo e mínimo da velocidade v_y , na linha horizontal central ($y=0,5$), e os correspondentes valores das abscissas x .

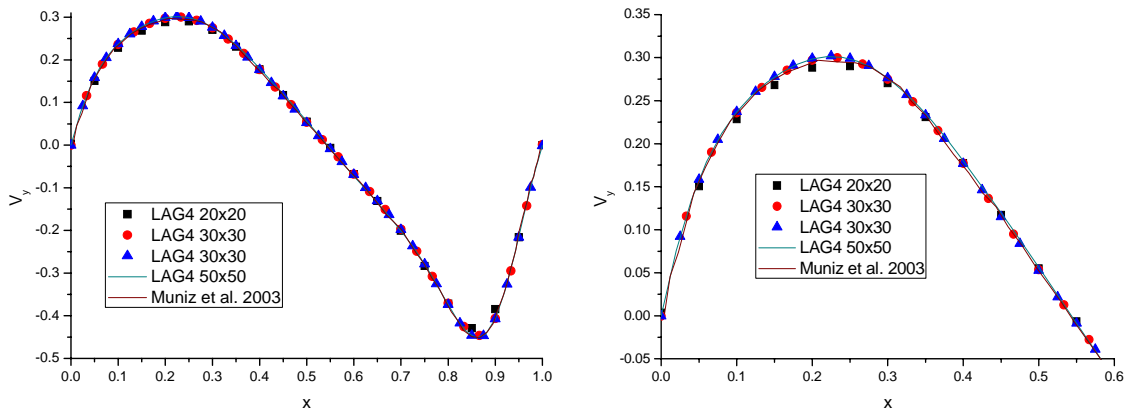
Tabela 6.13: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ retiradas da literatura e obtidos pelo esquema LAG4 para o escoamento em cavidade newtoniano com $Re=400$.

	Malha	v_x^{\min}	y^{\min}	v_y^{\max}	x^{\max}	v_y^{\min}	x^{\min}
Ghia	129×129	-0,3272	0,2813	0,3020	0,2266	-0,4499	0,8594
Yapici	305×305	-0,3284	0,2809	0,3036	0,2245	-0,4538	0,8627
LAG4	20×20	-0,3130	0,2862	0,2919	0,2293	-0,4304	0,8565
LAG4	30×30	-0,3232	0,2792	0,3001	0,2260	-0,4469	0,8633
LAG4	40×40	-0,3263	0,2798	0,3020	0,2256	-0,4512	0,8631
LAG4	50×50	-0,3260	0,2789	0,3013	0,2257	-0,4524	0,8627

Na Figura 6.49, são apresentados o perfil de velocidade v_x na linha central ($x=0,5$) e o perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$) usando o esquema LAG4 e os perfis obtidos por MUNIZ *et al.* (2003), utilizando o esquema de PADE de 4ª ordem com uma malha 40×40 .



(a)



(b)

Figura 6.49: Comparações entre os perfis de velocidade aplicando o esquema LAG4 usando malha 20×20 , 30×30 , 40×40 e 50×50 com resultados retirados da literatura para o escoamento em cavidade newtoniano: (a) Perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x=0,5$) e (b) Perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$).

Comparando os resultados obtidos pelo esquema LAG4 com as soluções retiradas da literatura apresentados na Tabela 6.13 e Figura 6.49, é possível constatar que os resultados do esquema LAG4 usando uma malha 40×40 e 50×50 possuem soluções concordantes com os resultados apresentados da literatura. Pode-se considerar também satisfatória a solução obtida pela aplicação do esquema de LAG4 utilizando uma malha 30×30 , visto que os desvios em relação à solução obtida usando malhas mais refinadas não são tão pronunciados. As soluções obtidas pela malha 20×20 apresentam maiores discrepâncias, entretanto a diferença entre os valores obtidos não chegam a ser tão pronunciada, especialmente se considerado que neste caso o refinamento da malha é consideravelmente menor. Demonstrando a capacidade que os esquemas de alta ordem têm de prover boa qualidade de aproximação mesmo para malhas pouco refinadas.

Na Figura 6.50 são apresentadas as curvas de nível para a velocidade, a pressão e o vetor velocidade para o escoamento em cavidade, usando o esquema de LAG4 com malha 50×50 .

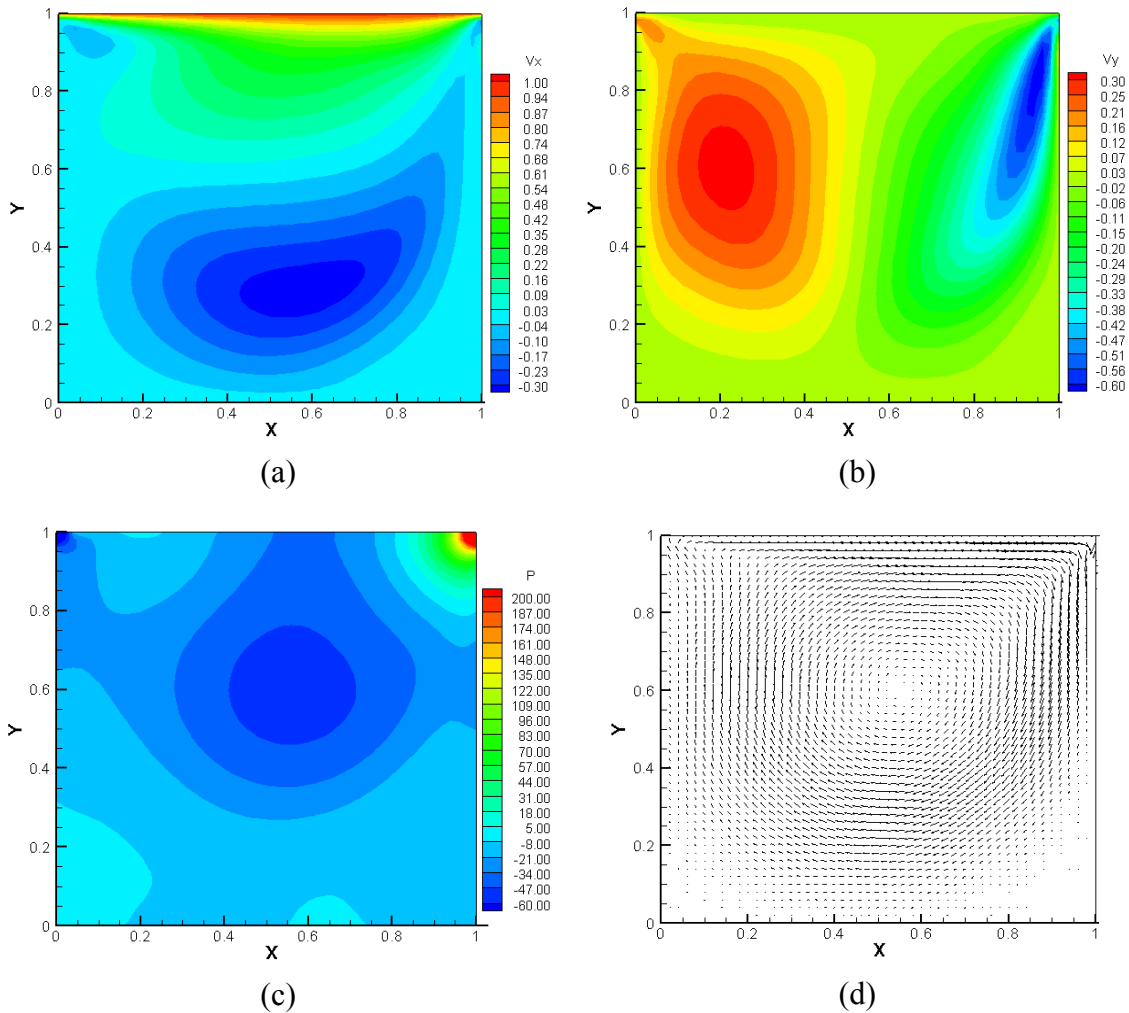


Figura 6.50: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 50×50 para o escoamento em cavidade newtoniano: (a) Curva de nível para a velocidade v_x ; (b) Curva de nível para a velocidade v_y ; (c) Curva de nível para a pressão e (d) Vetor velocidade.

Analisando as curvas de nível para velocidade v_x , Figura 6.50a, é possível observar duas regiões distintas de escoamento a primeira próxima à superfície da cavidade e a segunda próxima ao fundo da cavidade. A primeira região forma-se devido à proximidade com a placa móvel e a segunda região decorre da recirculação de fluido que ocorre no fundo da cavidade. Para a velocidade v_y , observa-se também a presença de duas regiões distintas, a primeira do lado direito da cavidade, onde ocorrem os valores de v_y negativos, e o lado esquerdo da cavidade, onde ocorrem os valores positivos de v_y .

(Figura 6.50b). Esta mudança de sinal novamente ocorre devido à recirculação de líquido na cavidade, como pode ser melhor observada na Figura 6.50d.

6.4. Escoamento de Fluidos Viscoelásticos

A aplicação do procedimento proposto neste trabalho ao escoamento de fluidos newtonianos realizado no tópico anterior possibilitou realizar uma avaliação preliminar da metodologia proposta. Pôde-se então observar a superioridade na qualidade da solução obtida pelo procedimento LAG4 bem como a potencialidade da técnica de conexão multibloco.

Neste item, a metodologia será aplicada ao escoamento de fluidos viscoelásticos, para isso foram selecionados os seguintes exemplos:

- Escoamento entre placas paralelas.
- Escoamento entre placas paralelas precedido de uma superfície livre de cisalhamento (“*slip-stick*”).
- Escoamento de saída de placas paralelas para uma superfície livre de cisalhamento (“*stick-slip*”).
- Escoamento em uma cavidade quadrada sob a ação de uma placa deslizante no topo (“*lid-driven*”).
- Escoamento em um duto retangular de profundidade infinita, que sofre uma súbita diminuição da seção transversal.

Os modelos de equações constitutivas utilizadas serão os modelos de Oldroyd-B e o modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado (SPTT).

6.4.1. Escoamento entre Placas Plana e Paralelas

Este exemplo considera um fluido escoando entre duas placas planas e paralelas, como anteriormente ilustrado pela Figura 6.1.

Para este escoamento é atribuído como condição de entrada um perfil parabólico para velocidade. Na parede é aplicada a condição de não deslizamento e na saída a pressão é especificada como sendo nula. Para reduzir o tamanho da malha computacional, utiliza-se a condição de simetria no centro da seção horizontal, simulando desta forma apenas metade do domínio do problema. As simulações foram realizadas utilizando o modelo de Oldroyd-B e considerando uma placa com

comprimento $L=10$ e meia altura $H=1$. As coordenadas x e y adimensionais são consideradas a partir do ponto onde está localizada a linha de simetria horizontal ($y=0$) e a entrada das placas ($x=0$).

Para a condição limite de Reynolds igual a zero, o conjunto de equações que descreve o escoamento de fluidos viscoelásticos utilizando o modelo de Oldroyd-B assume a forma:

Equação da continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial x}(v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y) = 0 \quad 6.7$$

Equação da conservação da quantidade de movimento em x:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + (1 - \eta_E) \left[\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0 \quad 6.8$$

Equação da conservação da quantidade de movimento em y:

$$-\frac{\partial p}{\partial y} + (1 - \eta_E) \left[\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} = 0 \quad 6.9$$

Equação constitutiva:

$$\tau_{xx} + We \left[\frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{xx}) - 2\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x} - 2\tau_{xy} \frac{\partial v_x}{\partial y} \right] = 2\eta_E \frac{\partial v_x}{\partial x} \quad 6.10$$

$$\tau_{yy} + We \left[\frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{yy}) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{yy}) - 2\tau_{xy} \frac{\partial v_y}{\partial x} - 2\tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y} \right] = 2\eta_E \frac{\partial v_y}{\partial y} \quad 6.11$$

$$\tau_{xy} + We \left[\frac{\partial}{\partial x}(v_x \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y \tau_{xy}) - \tau_{xx} \frac{\partial v_y}{\partial x} - \tau_{yy} \frac{\partial v_x}{\partial y} \right] = \eta_E \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \quad 6.12$$

Para a condição de escoamento estabelecido são válidas às seguintes condições:

$$\frac{\partial}{\partial x}(v_x) = 0 \quad v_y = 0 \quad \frac{\partial}{\partial x}(v_y) = 0 \quad 6.13$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\tau_{xx})=0 \qquad \frac{\partial}{\partial x}(\tau_{yy})=0 \qquad \frac{\partial}{\partial x}(\tau_{xy})=0$$

Considerando o perfil parabólico de velocidade v_x na entrada:

$$v_x = U_{\max} \cdot (1 - y^2) \qquad 6.14$$

em que U_{\max} representa a velocidade máxima na linha de centro.

Aplicando a condição de escoamento estabelecido definida pela Equação 6.13 e o perfil de entrada dado pela Equação 6.14 nas Equações 6.7 a 6.12, é possível chegar às soluções descritas pelas expressões:

$$v_x = U_{\max} (1 - y^2) \qquad 6.15$$

$$v_y = 0 \qquad 6.16$$

$$p = -2U_{\max} x + p_0 \qquad 6.17$$

$$\tau_{xx} = 8U_{\max}^2 We \eta_E y^2 \qquad 6.18$$

$$\tau_{yy} = 0 \qquad 6.19$$

$$\tau_{xy} = -2\eta_E U_{\max} y \qquad 6.20$$

As soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 foram comparadas com as soluções apresentadas pelas Equações 6.15 a 6.20. Permitindo assim avaliar a acurácia do esquema de solução numérica.

Na Figura 6.51 são apresentados o perfil de velocidade v_x e os perfis de tensão τ_{xx} e τ_{xy} , considerando o parâmetro de viscosidade elástica $\eta_E=0,8$ e diferentes números de Weissenberg (We) na saída do escoamento, usando o procedimento LAG4 com malha 10×10 representados pelos pontos e a solução analítica representada pelas linhas contínuas.

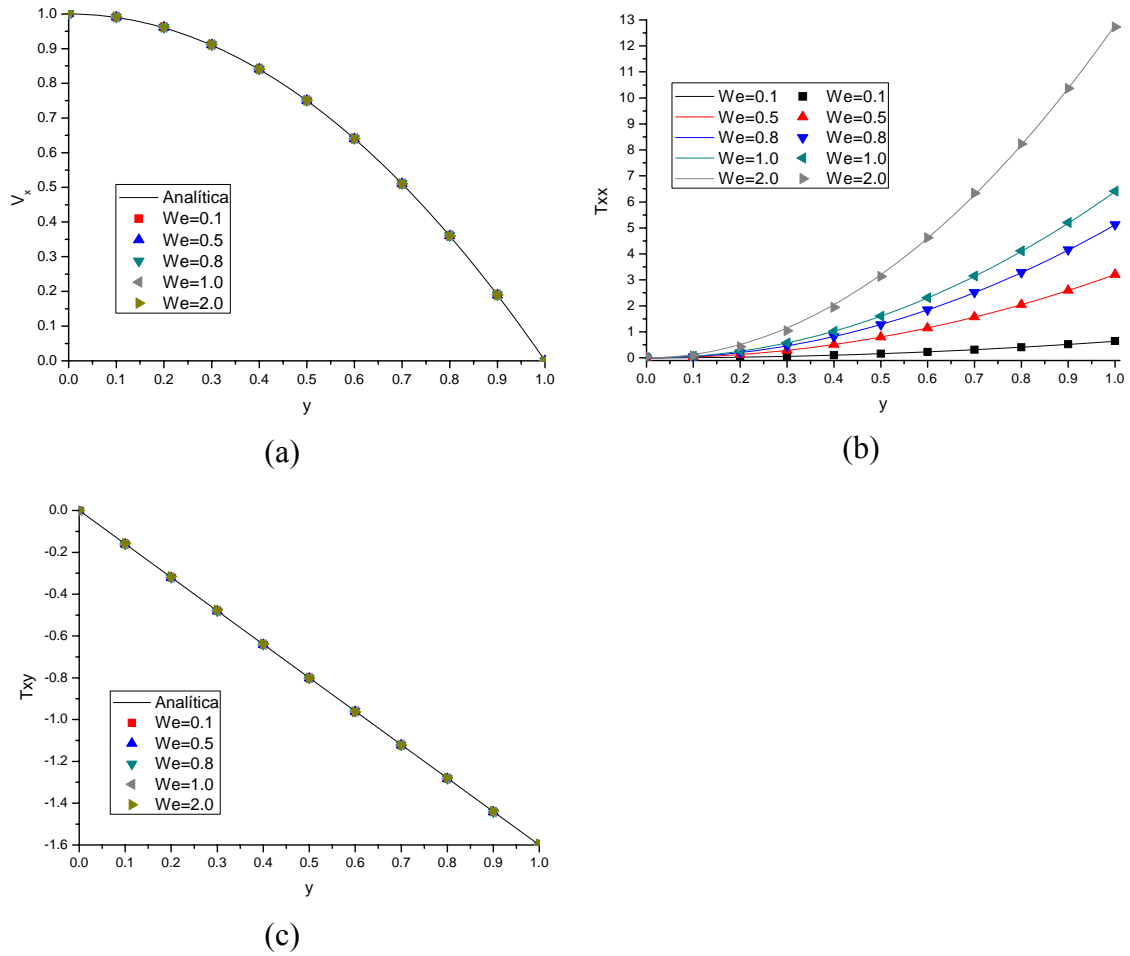


Figura 6.51: Perfis obtidos pela aplicação do esquema LAG4 na saída da placa usando uma malha 10×10 (representada por pontos) e perfis obtidos através da solução analítica (representada por linhas) com diferentes valores de We para o escoamento entre placas viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Tensão τ_{xx} e (c) Tensão τ_{xy} .

Na Tabela 6.14 são apresentadas as diferenças entre as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 utilizando uma malha 10×10 e a solução analítica do problema para diferentes números de We .

Tabela 6.14: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 e solução analítica com diferentes valores de We para o escoamento entre placas viscoelástico.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ \tau_{xx}^{ref} - \tau_{xx}\ $	$\ \tau_{xy}^{ref} - \tau_{xy}\ $
$We=0,1$	$2,7440 \times 10^{-5}$	$2,2924 \times 10^{-5}$	$3,0598 \times 10^{-5}$
$We=0,5$	$2,7440 \times 10^{-5}$	$1,0919 \times 10^{-4}$	$3,0517 \times 10^{-5}$
$We=0,8$	$2,7474 \times 10^{-5}$	$2,2151 \times 10^{-4}$	$3,1714 \times 10^{-5}$
$We=1,0$	$2,7576 \times 10^{-5}$	$3,3388 \times 10^{-4}$	$3,4082 \times 10^{-5}$
$We=2,0$	$3,3415 \times 10^{-5}$	$2,0200 \times 10^{-3}$	$7,6007 \times 10^{-5}$

A aplicação do esquema LAG4 mesmo utilizando uma malha pouco refinada, 10×10 , é capaz de obter soluções muito próximas às respostas analíticas, demonstrando a potencialidade da aplicação de esquemas de alta ordem à simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos. Analisando os RMS apresentados na Tabela 6.14, pode-se constatar que quanto maior o valor do parâmetro We maior é o RMS obtido, especialmente para o componente do tensor tensão τ_{xx} .

Na Figura 6.52 é avaliado o efeito que o parâmetro η_E exerce nos perfis de tensão τ_{xx} e τ_{xy} considerando $We=1,0$. As soluções obtidas pelo procedimento numérico são representadas por pontos e a solução analítica pela linha contínua.

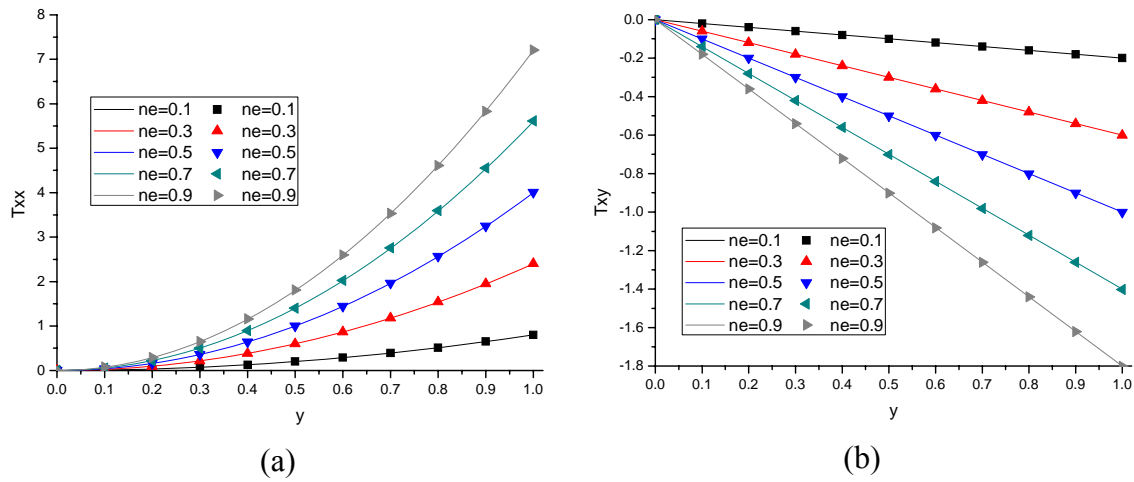


Figura 6.52: Perfis obtidos pela aplicação do esquema LAG4 na saída da placa usando uma malha 10×10 (representada por pontos) e perfis obtidos através da solução analítica (representada por linhas) com diferentes valores de η_e , para o escoamento entre placas viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{xy} .

Na Tabela 6.14 são apresentadas as diferenças entre as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 utilizando uma malha 10×10 e a solução analítica do problema para diferentes números de η_E .

Tabela 6.15: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação do esquema LAG4 e solução analítica com diferentes valores de η_E para o escoamento entre placas viscoelástico.

	$\ \tau_{xx}^{ref} - \tau_{xx}\ $	$\ \tau_{xy}^{ref} - \tau_{xy}\ $
$\eta_E=0,1$	$2,9708 \times 10^{-5}$	$4,4173 \times 10^{-6}$
$\eta_E=0,3$	$9,5947 \times 10^{-5}$	$1,3424 \times 10^{-5}$
$\eta_E=0,5$	$1,7541 \times 10^{-4}$	$2,2839 \times 10^{-5}$
$\eta_E=0,7$	$2,0432 \times 10^{-4}$	$3,1714 \times 10^{-5}$
$\eta_E=0,9$	$4,7182 \times 10^{-4}$	$4,0283 \times 10^{-5}$

Novamente a aplicação do esquema LAG4 é capaz de obter soluções muito próximas às soluções analíticas, como pode ser observado na Tabela 6.15, mesmo utilizando uma malha pouco refinada. Com o aumento do efeito elástico, observa-se o aumento do RMS tanto para o componente do tensor tensão τ_{xx} quanto para o componente do tensor tensão τ_{xy} .

Analisando o comportamento do perfil de tensão frente às variações do parâmetro η_E é possível constatar que quanto mais pronunciado o efeito elástico maior é a tensão existente no escoamento, como pode ser conferido pela Figura 6.52. Assim sendo, quanto maior for o valor deste parâmetro mais difícil será a obtenção da solução, como pode ser observado na Figura 6.53, em que a utilização de $\eta_E=0,2$ possibilitou simular o problema para valores maiores de We .

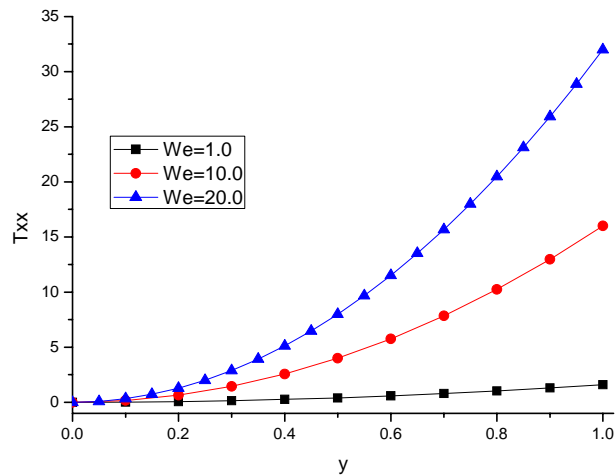


Figura 6.53: Perfis de tensão normal τ_{xx} obtidos pela aplicação do esquema LAG4 na saída da placa com diferentes valores de We para o escoamento entre placas viscoelástico.

6.4.2. Escoamento Slip-Stick

A descrição deste problema é idêntica à realizada no item 6.31 para fluidos newtonianos. Neste caso foram apenas alterados os comprimentos das placas, sendo agora considerado o comprimento da placa antes da singularidade de $L_1=5$ e o comprimento da placa após a singularidade $L_2=5$ e a meia altura da placa foi mantida como $H=1$. Os valores dos parâmetros aplicados foram: $Re=0,1$, $We=0,1$ e $\eta_E=0,9$. As coordenadas x e y adimensionais são consideradas a partir do ponto onde se localizada a linha de simetria horizontal ($y=0$) e o início do escoamento ($x=0$).

Como no caso de fluidos newtonianos, a característica principal deste problema é a presença de singularidades quando a condição de contorno muda de livre de cisalhamento para uma condição de não deslizamento. Agravadas ainda mais neste caso pela introdução no sistema de equações das equações constitutivas dos componentes do tensor tensão que apresentam elevados gradientes nas regiões próximas a singularidade, especialmente com o aumento do número de Weissenberg.

O problema foi primeiramente solucionado utilizando o esquema CDS, aplicando sete diferentes graus de refinamento de malha: 30×10 , 30×20 , 60×10 , 60×20 , 60×40 , 120×40 e 120×80 , visando identificar o efeito que o grau de refinamento da malha exerce na qualidade da aproximação. Para isto, as soluções obtidas foram comparadas na linha horizontal $y=0,9$ para todas as variáveis que compõem o modelo, apresentados na Figura 6.54 e na Figura 6.55. São apenas apresentadas as soluções próximas a singularidade, pois nesta localização foram observadas as maiores discrepâncias, ficando desta forma mais evidente as diferenças entre as soluções.

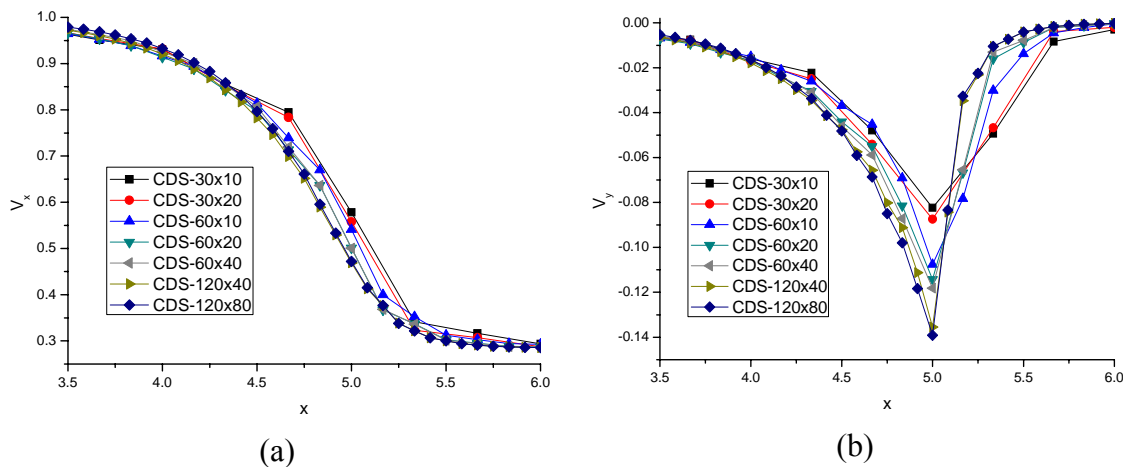


Figura 6.54: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y .

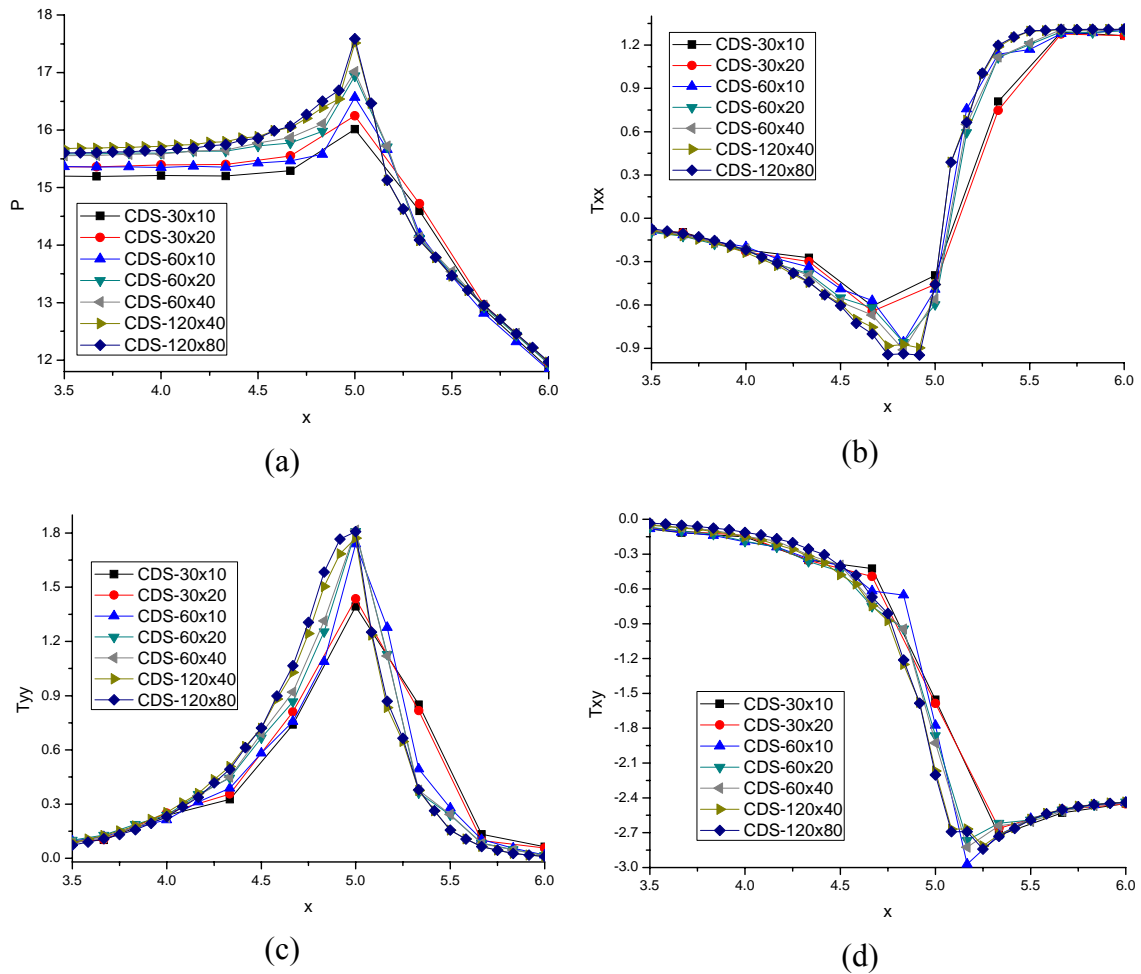


Figura 6.55: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Pressão; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .

Pelos resultados apresentados na Figura 6.54 e na Figura 6.55, pode-se observar que a menor diferença entre as soluções obtidas ocorre para aplicação das malhas 120×40 e 120×80 , indicando que a malha embora ainda não convergida, encontra-se próxima à convergência. Soluções aplicando maiores refinamentos de malhas foram testadas, mas não foi possível obter soluções convergidas para estas simulações. Esta dificuldade de obtenção de soluções para malhas mais refinadas pode estar relacionado à razão entre We e $\Delta y/\Delta x$, como já reportado no item 3.4.3 deste documento, que descreve que para determinadas relações de malhas o procedimento torna-se instável não apresentando convergência de solução. É importante ressaltar que, embora não tenha sido possível obter uma solução convergida para o esquema CDS, a proximidade entre as soluções utilizando as malhas mais refinadas indica que as soluções estão próximas de convergir.

Os perfis apresentados na Figura 6.56 comparam os resultados obtidos pelo esquema LAG4 usando diferentes refinamentos de malha com o resultado obtido pelo esquema CDS usando uma malha de 120×80 para a linha horizontal $y=0,9$ na região próxima à singularidade.

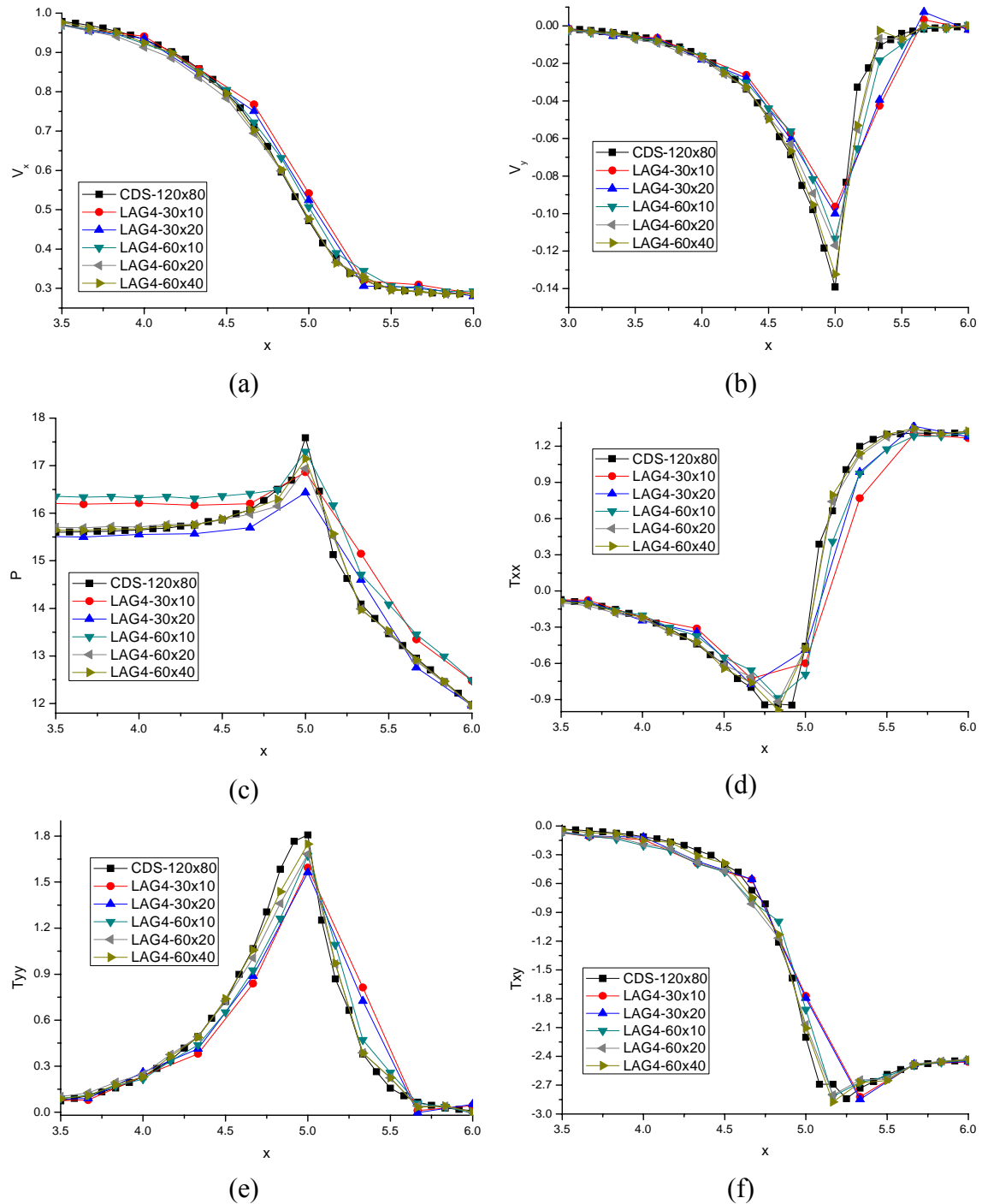


Figura 6.56: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Pressão; (d) Tensão τ_{xx} ; (e) Tensão τ_{yy} e (f) Tensão τ_{xy} .

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.56, pode-se observar uma boa concordância dos resultados obtidos utilizando o esquema LAG4 com os resultados obtidos aplicando o esquema CDS. A maior discrepância entre os resultados ocorre na Figura 6.56e para o perfil de tensão τ_{yy} , entretanto para as demais soluções os perfis obtidos são próximos, especialmente se levado em consideração que no caso do esquema LAG4 é aplicado metade do refinamento utilizado no esquema CDS.

As oscilações observadas em alguns casos como, por exemplo, para velocidade v_y , Figura 6.56b, são características da aplicação de esquemas de alta ordem e podem ser eliminados através do aumento do refinamento da malha ou através da utilização de técnicas específicas. Para este exemplo também foram aplicadas malhas mais refinadas, como por exemplo, 120×40 e 120×80 , entretanto as simulações não apresentaram convergência de solução. Da mesma forma que para aplicação do esquema CDS, a não convergência destas simulações pode estar relacionada ao surgimento de instabilidades numéricas decorrentes do grau de refinamento de malha aplicado.

Visando verificar a qualidade das soluções dos esquemas LAG4 e CDS em pontos próximos à singularidade em relação ao eixo vertical, foi realizada a comparação entre os resultados obtidos para a velocidade v_x e para a tensão τ_{xx} , pelo esquema LAG4, usando diferentes refinamentos de malha, com o resultado obtido pelo esquema CDS, usando uma malha de 120×80 na linha vertical $x=5,6667$ e regiões próximas à parede, Figura 6.57.

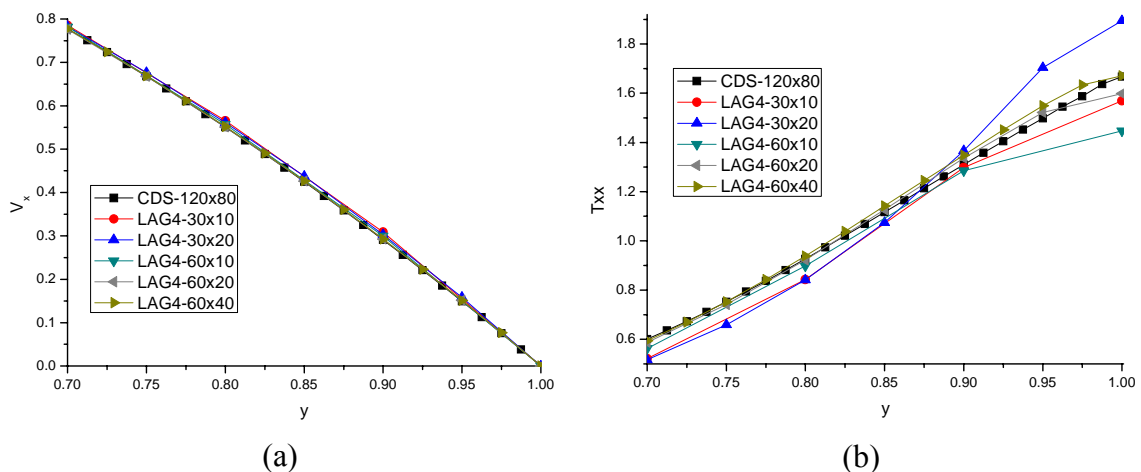


Figura 6.57: Perfis obtidos para posição $x=5,6667$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha na região próxima a parede para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Tensão τ_{xx} .

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.57, pode-se observar que as maiores discrepâncias entre as soluções são obtidas para a tensão τ_{xx} , Figura 6.57b, especialmente para o valor da tensão na parede. Neste caso, os valores obtidos pelo esquema LAG4 60×40 e 60×20 são mais condizentes com os valores obtidos pelo esquema CDS. No caso da velocidade v_x , Figura 6.57a, não são observadas diferenças significativas entre as soluções.

Comparando o tempo computacional para obtenção das soluções para o esquema CDS 120×80 com o esquema LAG4 60×40 , foi possível constatar um melhor desempenho do esquema LAG4 demandando 1.242 segundos para obtenção da solução contra 3.557 segundos do esquema CDS. Novamente, o esquema LAG4 mostrou sua superioridade comparada ao esquema CDS, tanto no que se refere à acurácia quanto ao tempo de processamento da simulação.

Não foram feitas comparações quantitativas entre as soluções obtidas para este exemplo, pois não foi possível confirmar a convergência da malha computacional.

Na Figura 6.58 e na Figura 6.59 são apresentadas as curvas de nível para o escoamento “*slip-stick*”, aplicando o esquema LAG4 e uma malha computacional 60×40 .

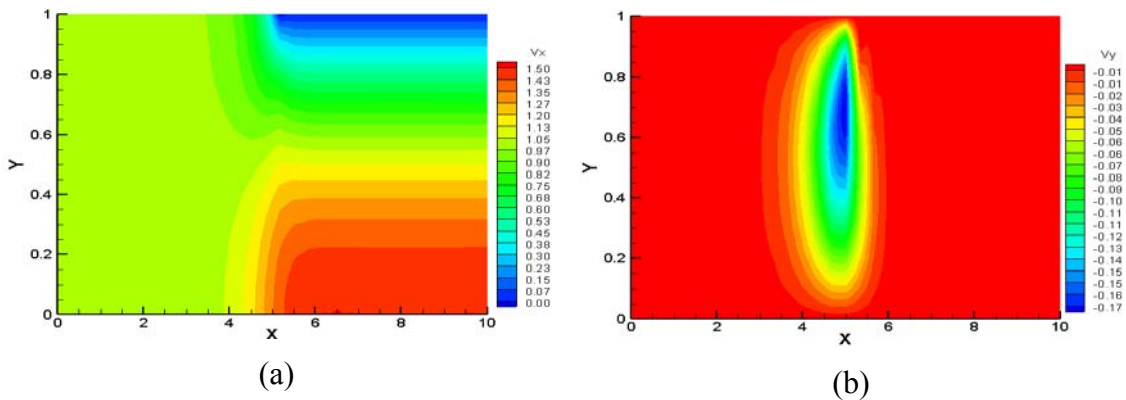


Figura 6.58: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 60×40 para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y .

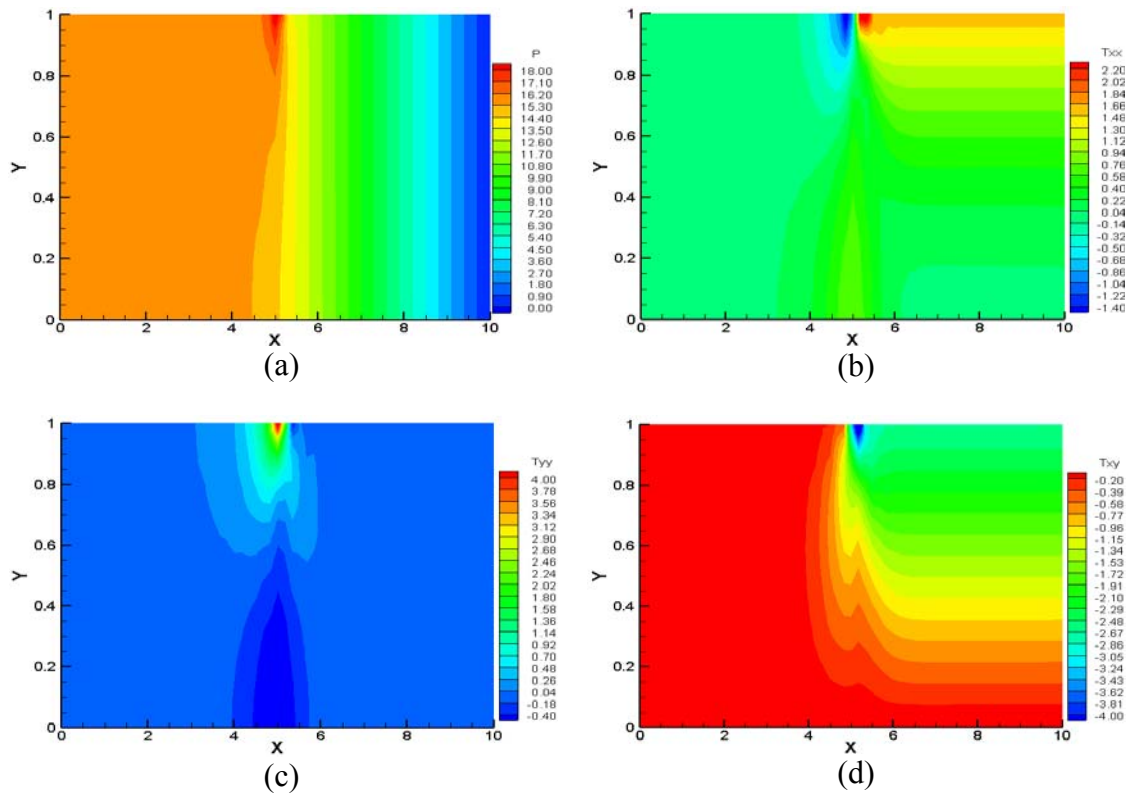


Figura 6.59: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 60×40 para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Pressão; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .

Pelas curvas de nível apresentadas na Figura 6.58 e na Figura 6.59, pode-se observar que as maiores variações ocorrem na região próxima à singularidade. Visto que nesta região o fluido vindo de uma superfície livre de cisalhamento é abruptamente frenado pela condição de não deslizamento. Como não existe cisalhamento na região de entrada do fluido, as tensões nestas regiões são nulas. Na região de descontinuidade existe o componente de tensão τ_{yy} que, logo após decorrido um determinado comprimento de placa, torna-se novamente nulo visto que não existe mais qualquer força que contribua para sua manutenção. Com relação aos componentes τ_{xx} e τ_{xy} , observa-se que estes sofrem a influência do efeito de frenagem e depois de um determinado comprimento assumem um perfil desenvolvido.

A Figura 6.60 tem por finalidade verificar o efeito que o parâmetro η_E do modelo de Oldroyd-B exerce no escoamento “*slip-stick*”, para isso foi utilizado o esquema LAG4 com uma malha 60×40 com $We=0,1$ e $Re=0,1$. São plotados os valores da velocidade v_x e das tensões τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{xy} para diferentes valores do parâmetro η_E na linha horizontal $y=0,9$.

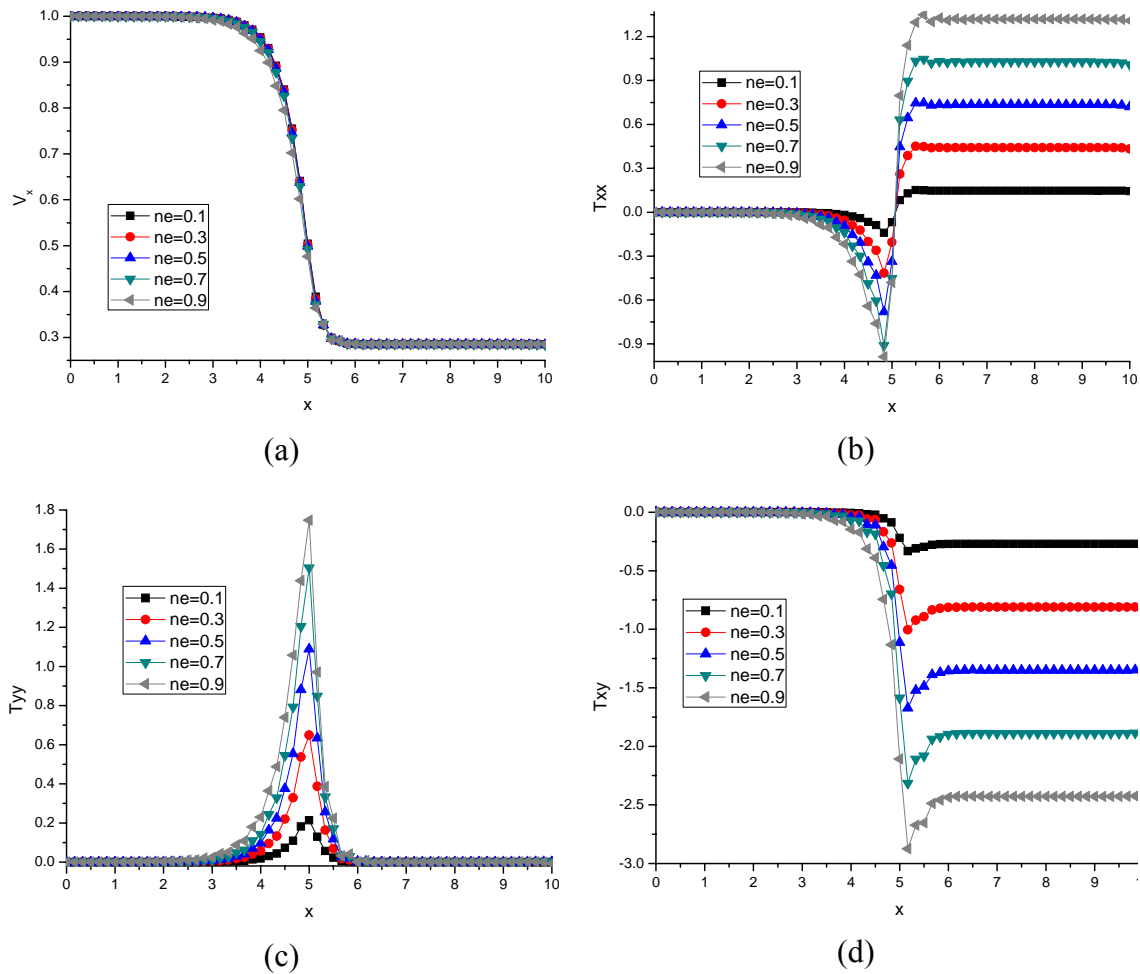
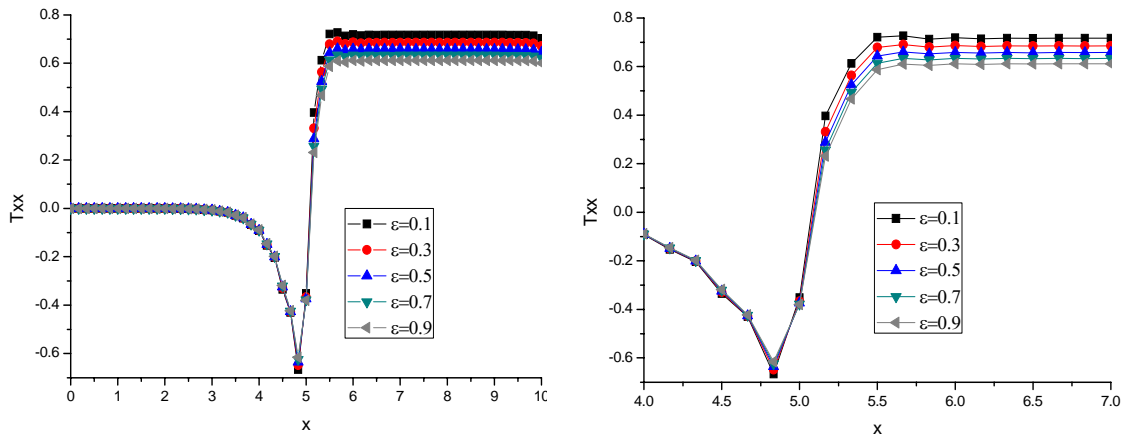


Figura 6.60: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro η_E , $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .

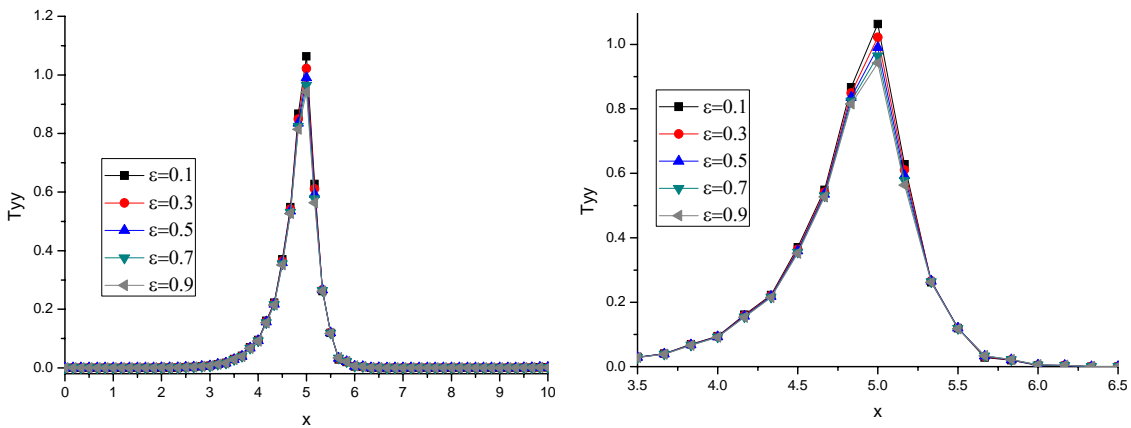
Analisando a Figura 6.60, é possível constatar que quanto maior o valor do parâmetro η_E mais alto é o valor da tensão na região onde ocorre a descontinuidade. Além disto, observa-se que com o aumento do valor deste parâmetro ocorre o surgimento de oscilações na região após a singularidade, possibilitando concluir que quanto mais pronunciado for o efeito elástico mais difícil torna-se a obtenção da solução.

A Figura 6.61 tem por finalidade verificar o efeito que o parâmetro ε do modelo de SPTT exerce no escoamento “*slip-stick*”, para isto foi utilizado o esquema LAG4 com uma malha 60×40 com $\eta_E=0,5$, $We=0,1$ e $Re=0,1$. São plotados os valores das tensões τ_{xx} e τ_{yy} para diferentes valores do parâmetro ε na linha horizontal $y=0,9$. As figuras do lado esquerdo representam os perfis das variáveis ao longo de todo domínio e

as figuras do lado direito apresentam uma ampliação da área próxima à singularidade, permitindo assim visualizar melhor os efeitos produzidos por alterações de ε .



(a)



(b)

Figura 6.61: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo SPTT com diferentes valores do parâmetro ε , $\eta_E=0,5$, $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Comparando a influência do parâmetro ε no modelo SPPT, é possível concluir que o aumento do valor deste parâmetro atua de forma inversa ao parâmetro η_E , embora não com a mesma magnitude. Ou seja, o aumento no valor de ε faz com que as tensões nas regiões próximas à singularidade sejam menores, como pode ser observado na Figura 6.61. Assim sendo, quanto mais elevado for o valor de ε menor será o pico de tensão nesta região, proporcionando em muitos casos uma melhor estabilidade da solução.

Os resultados apresentados a seguir resultam da aplicação da técnica de partição multibloco ao problema e tem como principal vantagem possibilitar a aplicação de um maior refinamento de malha apenas na região próxima à contração, permitindo que soluções mais precisas sejam obtidas sem um aumento desnecessário dos recursos computacionais.

Na Figura 6.62 e na Figura 6.63, são apresentadas as curvas de nível para a velocidade, a pressão e a tensão obtidas pela aplicação da técnica de partição multibloco ao problema, utilizando os valores de parâmetro de $We=0,1$, $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$. Neste caso, buscou-se refinar apenas as regiões próximas à singularidade, segundo a estrutura de malha proposta na Figura 6.62a, resultando em uma malha composta de 2.000 volumes de controle.

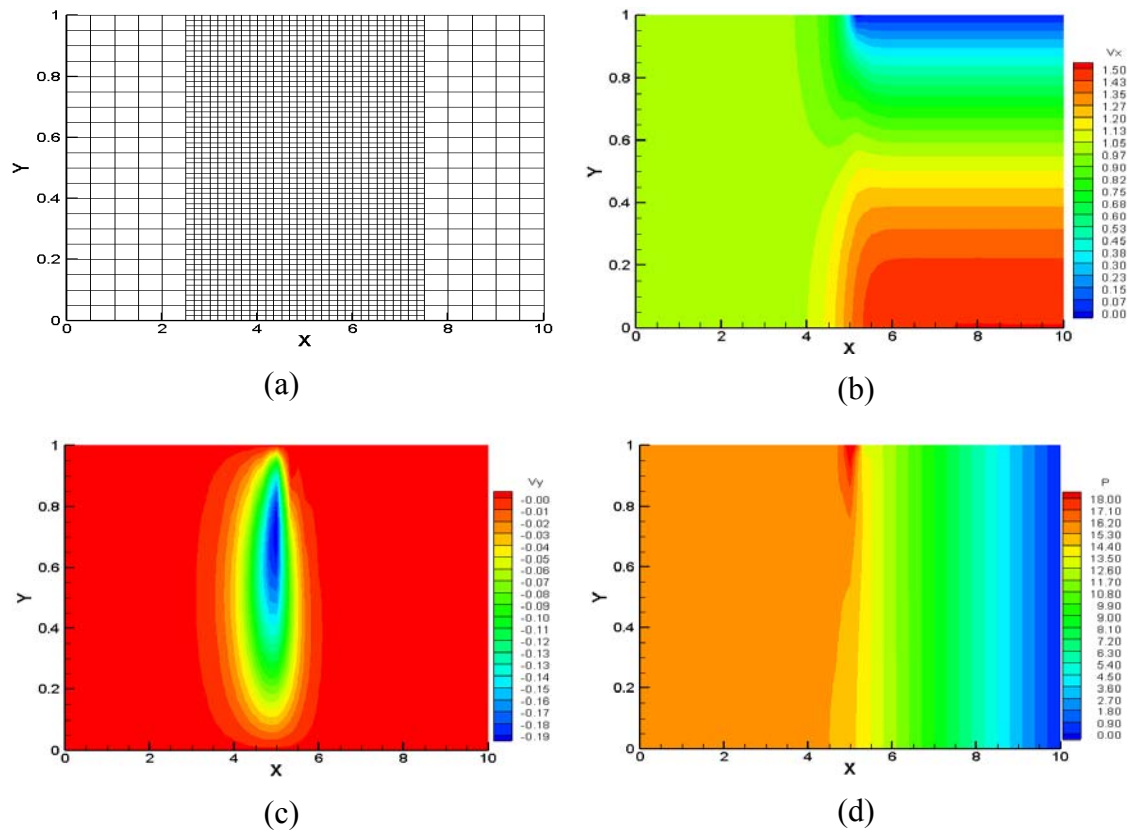


Figura 6.62: Estrutura da malha computacional e curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento “slip-stick” viscoelástico: (a) Estrutura da malha; (b) Velocidade v_x ; (c) Velocidade v_y e (d) Pressão.

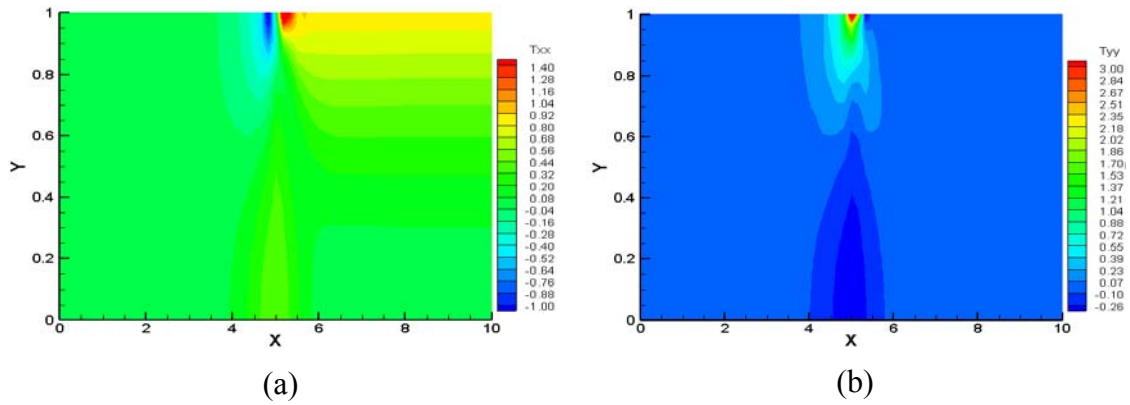


Figura 6.63: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Com a finalidade de aferir a qualidade das soluções obtidas, foram comparados os perfis horizontais em diferentes cortes em y , Figura 6.64 e Figura 6.65, pela aplicação do procedimento multibloco, usando uma malha constituída de 2.000 volumes de controle, definida na Figura 6.62a, com a solução obtida através da aplicação de um esquema de refinamento homogêneo, usando uma malha 60×60 , que é equivalente a usar o maior grau de refinamento aplicado no esquema multibloco em todo domínio.

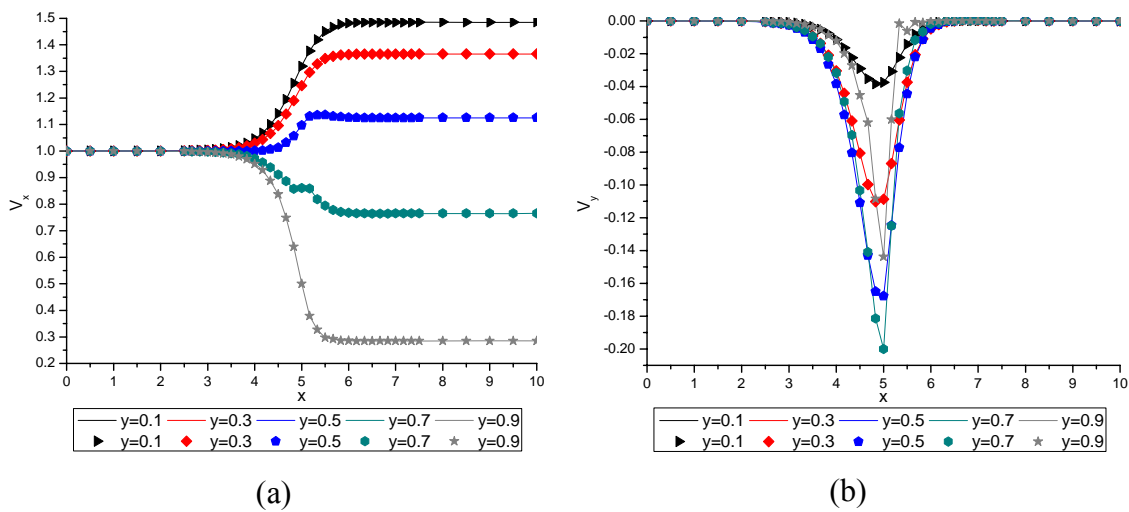


Figura 6.64: Comparação entre os perfis, para diferentes cortes em y , utilizando o esquema LAG4 com uma malha 60×60 (representada por linhas) e o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y .

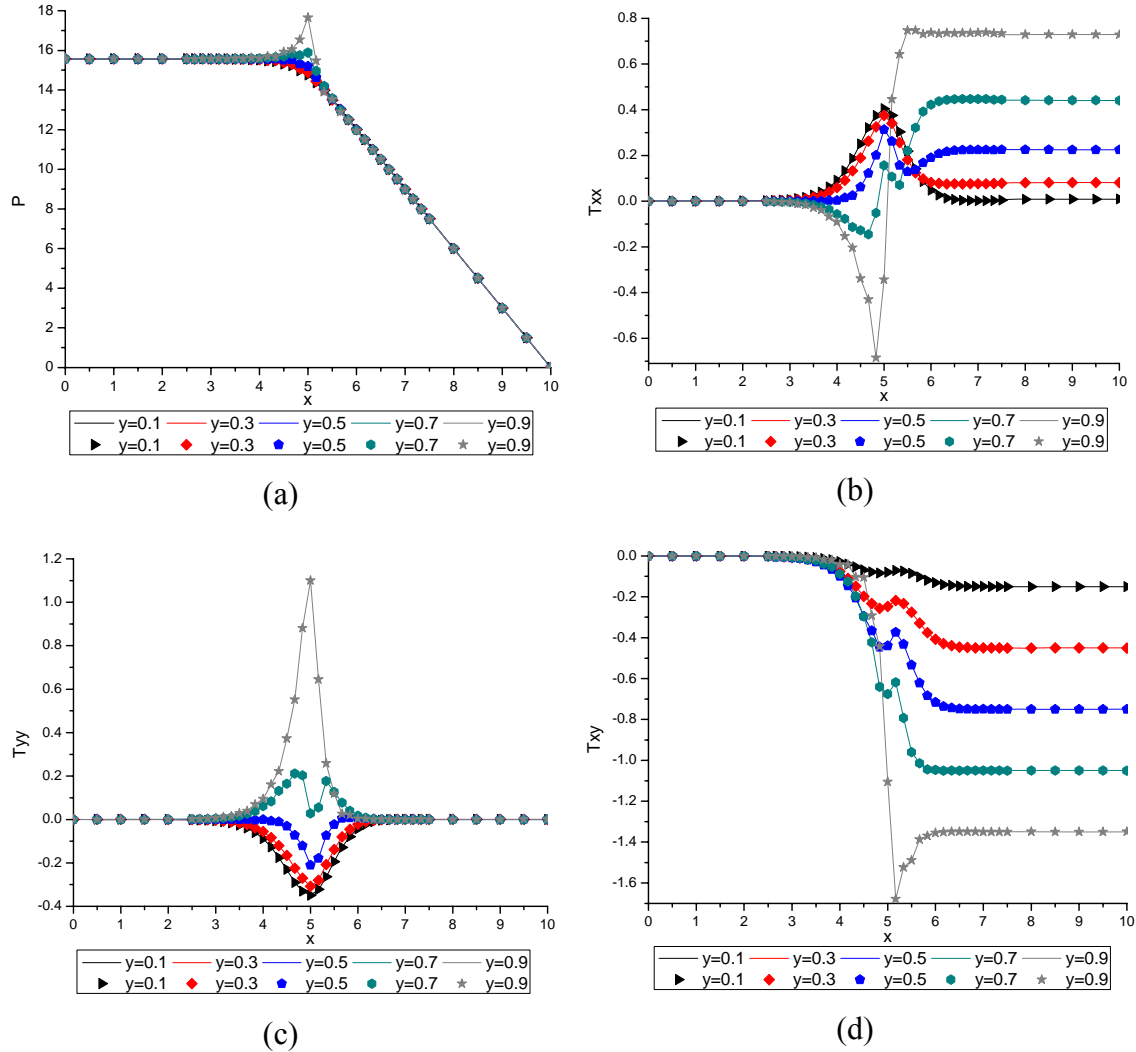


Figura 6.65: Comparação entre os perfis, para diferentes cortes em y , utilizando o esquema LAG4 com uma malha 60×60 (representada por linhas) e o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Pressão; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .

Comparando os perfis obtidos pelas diferentes técnicas de refinamento de malha apresentadas na Figura 6.64 e Figura 6.65, pode-se observar equivalência das soluções obtidas. Não é observada a presença de qualquer oscilação ou alteração do perfil de solução próxima à região da conexão dos blocos de diferentes refinamentos, indicando que a técnica foi capaz de conectar adequadamente os blocos. As oscilações observadas na Figura 6.64b, são inerentes à aplicação de aproximações de alta ordem e não estão relacionadas ao procedimento multibloco, tanto que estas oscilações são observadas na utilização de ambos procedimentos.

Tabela 6.16: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento completo para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
$y=0,1$	$4,3118 \times 10^{-4}$	$4,9270 \times 10^{-5}$	$4,3254 \times 10^{-3}$
$y=0,3$	$3,6125 \times 10^{-4}$	$1,2318 \times 10^{-4}$	$4,2435 \times 10^{-3}$
$y=0,5$	$3,0270 \times 10^{-4}$	$1,5059 \times 10^{-4}$	$4,4502 \times 10^{-3}$
$y=0,7$	$3,4214 \times 10^{-4}$	$1,1817 \times 10^{-4}$	$1,6381 \times 10^{-3}$
$y=0,9$	$3,5682 \times 10^{-4}$	$4,3038 \times 10^{-5}$	$1,8912 \times 10^{-3}$
	$\ \tau_{xx}^{ref} - \tau_{xx}\ $	$\ \tau_{yy}^{ref} - \tau_{yy}\ $	$\ \tau_{xy}^{ref} - \tau_{xy}\ $
$y=0,1$	$6,3756 \times 10^{-4}$	$3,7020 \times 10^{-4}$	$1,6938 \times 10^{-4}$
$y=0,3$	$4,6798 \times 10^{-4}$	$2,5912 \times 10^{-4}$	$3,6351 \times 10^{-4}$
$y=0,5$	$2,4387 \times 10^{-4}$	$1,8850 \times 10^{-4}$	$4,9785 \times 10^{-4}$
$y=0,7$	$5,8121 \times 10^{-4}$	$3,5193 \times 10^{-4}$	$4,6966 \times 10^{-4}$
$y=0,9$	$1,4083 \times 10^{-3}$	$4,8827 \times 10^{-4}$	$4,1611 \times 10^{-4}$

Comparando a diferença entre as soluções, Tabela 6.16, pode-se constatar que a aplicação do esquema multibloco foi capaz de obter soluções com o mesmo nível de precisão que os resultados obtidos através do refinamento homogêneo utilizando um grau de refinamento global menor. A aplicação do tratamento multibloco também foi capaz de reduzir o esforço computacional empregado na simulação. Comparando o tempo computacional para convergência dos procedimentos obteve-se 1.933 segundos usando o esquema de refinamento homogêneo e 1.021 segundos usando o procedimento multibloco.

Por fim, buscou-se verificar a influência do número de Weissenberg para o escoamento “*slip-stick*”. Visto que este número adimensional é de grande importância no escoamento de fluidos viscoelásticos e existe na literatura uma grande dificuldade para obtenção de soluções para valores elevados deste parâmetro. Para isto, foram realizadas diversas simulações aplicando diferentes valores de We com variados graus de refinamentos de malha utilizando o modelo de Oldroyd-B com $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

Na Figura 6.66 são apresentados os perfis de tensão τ_{xx} e τ_{yy} para a linha horizontal $y=0,9$ para os valores de $We=0,1$, $We=0,2$ e $We=0,3$, usando malhas 60×10 e 60×20 , aplicando o modelo de Oldroyd-B com $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

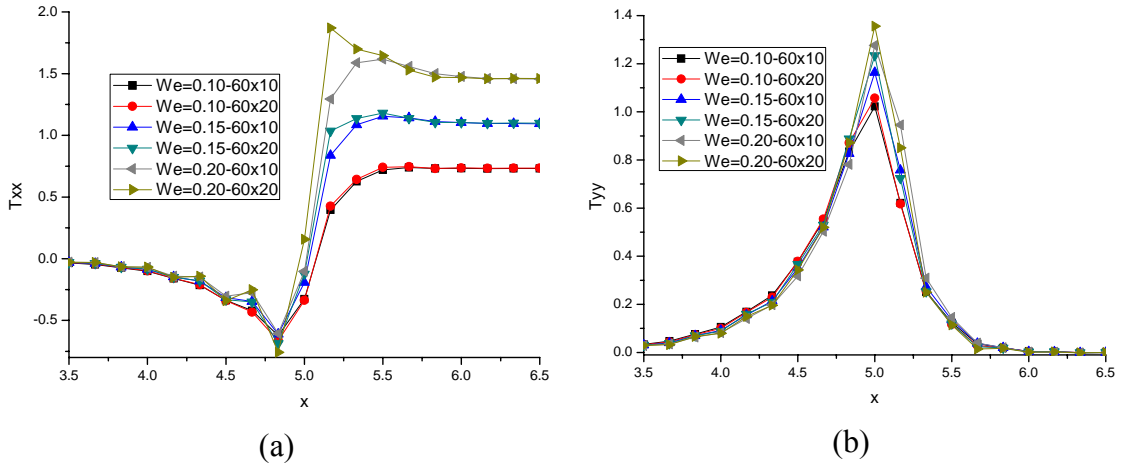


Figura 6.66: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 usando malha 60×10 e 60×20 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Comparando os resultados apresentados na Figura 6.66 pela malha 60×10 com a malha 60×20 , observa-se valores menores do pico de tensão para utilização da malha 60×10 do que os obtidos pela malha 60×20 , especialmente para $We=0,20$ que foi o último ponto no qual a malha 60×20 obteve convergência de resultados. Quanto mais elevado for o pico de tensão na região de singularidade menos estável será o procedimento de solução numérica, como pode ser observado para $We=0,20$ quando ocorrem oscilações de maior amplitude antecedendo a singularidade.

Na Figura 6.67 são apresentados os perfis de tensão τ_{xx} para a linha horizontal $y=0,9$ para diferentes valores de We , usando malhas 60×10 e 30×40 , aplicando o modelo de Oldroyd-B com $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

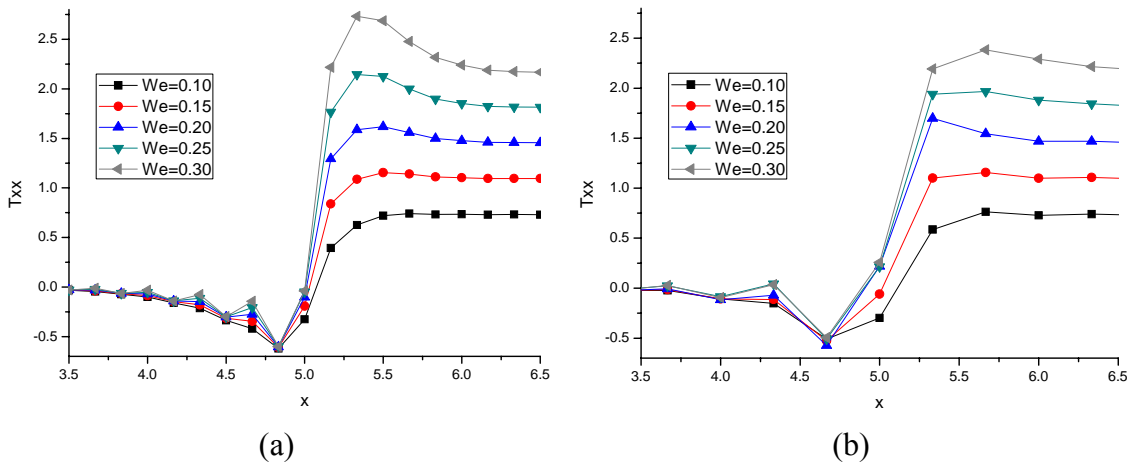


Figura 6.67: Perfis de tensão τ_{xx} obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Malha 60×10 e (b) Malha 30×40 .

Comparando os resultados obtidos para os perfis de tensão τ_{xx} para as malhas 60×10 e 30×40 , observa-se que as soluções não apresentam grandes discontinuidades na solução. As discrepâncias existentes entre as soluções são ainda mais elevadas com o aumento do número de Weissenberg. É importante observar que a amplitude das oscilações existentes antes da singularidade cresce à medida que o número de Weissenberg aumenta, indicando o aumento da instabilidade do procedimento numérico.

Analisando as soluções apresentadas anteriormente, pode-se concluir que a estabilidade do procedimento está diretamente associada ao refinamento da malha junto à singularidade. Por conseguinte, deve-se buscar um grau de refinamento que seja capaz de evitar o surgimento de instabilidades numéricas sem comprometer a qualidade da solução.

Os resultados apresentados na Figura 6.68 comparam a aplicação do procedimento de refinamento homogêneo usando uma malha 60×10 com os resultados obtidos pela aplicação do procedimento multibloco, usando a estrutura de malha definida pela Figura 6.62a.

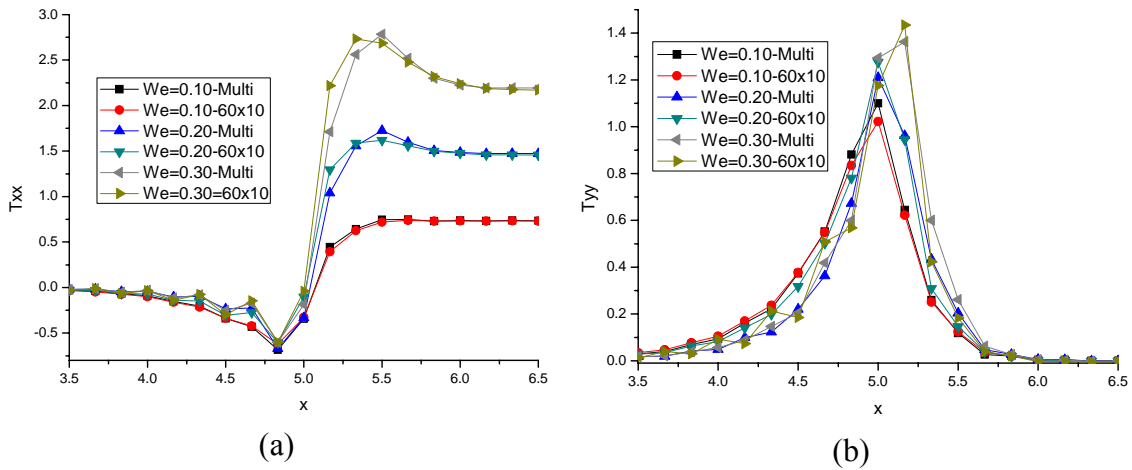


Figura 6.68: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema multibloco e pela aplicação do procedimento de refinamento homogêneo usando malha 60×10 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “*slip-stick*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Analisando os componentes do tensor tensão τ_{xx} e τ_{yy} , Figura 6.68, pode-se constatar que o procedimento multibloco, por apresentar um maior refinamento em relação à ordenada y na região de singularidade, obtém uma melhor qualidade de aproximação que a aplicação do procedimento de refinamento homogêneo, especialmente quando o valor do parâmetro We aumenta. Como pode ser observado para tensão τ_{yy} com $We=0,3$, quando uma solução livre de oscilações foi obtida. É importante ressaltar que para a aplicação do procedimento de refinamento homogêneo com a mesma qualidade de solução que o procedimento multibloco seria necessária a utilização de uma malha 60×60 . Este nível de refinamento resulta em um sistema de 21.600 equações, ao passo que procedimento multibloco totaliza um sistema de 12.000 equações e um refinamento constituído de 2.000 volumes de controle, reduzindo consideravelmente o custo computacional da simulação do problema.

6.4.3. Escoamento *Stick-Slip*

O escoamento de fluidos poliméricos “*stick-slip*” pode ser visualizado como uma aproximação da saída do material polimérico em uma extrusora, sem levar em consideração o efeito de inchamento do material polimérico que ocorre na saída da matriz. O problema em questão segue a mesma descrição do caso newtoniano, item 6.3.2.

Para realização das simulações foram considerados os valores de parâmetros $Re=0,1$, $We=0,1$ e $\eta_E=0,9$, o comprimento da placa antes e após a singularidade são

iguais a $L_1=L_2=5$ e meia altura da Placa $H=1$. As coordenadas x e y dimensionais são consideradas a partir do ponto onde está localizada a linha de simetria horizontal ($y=0$) e o início do escoamento ($x=0$).

O esquema CDS foi aplicado utilizando diferentes refinamentos de malha: $(30 \times 10, 30 \times 20, 60 \times 10, 60 \times 20, 60 \times 40$ e $120 \times 40)$, visando identificar a relação de refinamento que apresenta solução mais próxima possível da convergência, apresentado na Figura 6.69. A visualização dos resultados próximos à região de singularidade permite uma melhor comparação, visto que nesta região são observadas as maiores diferenças entre as soluções.

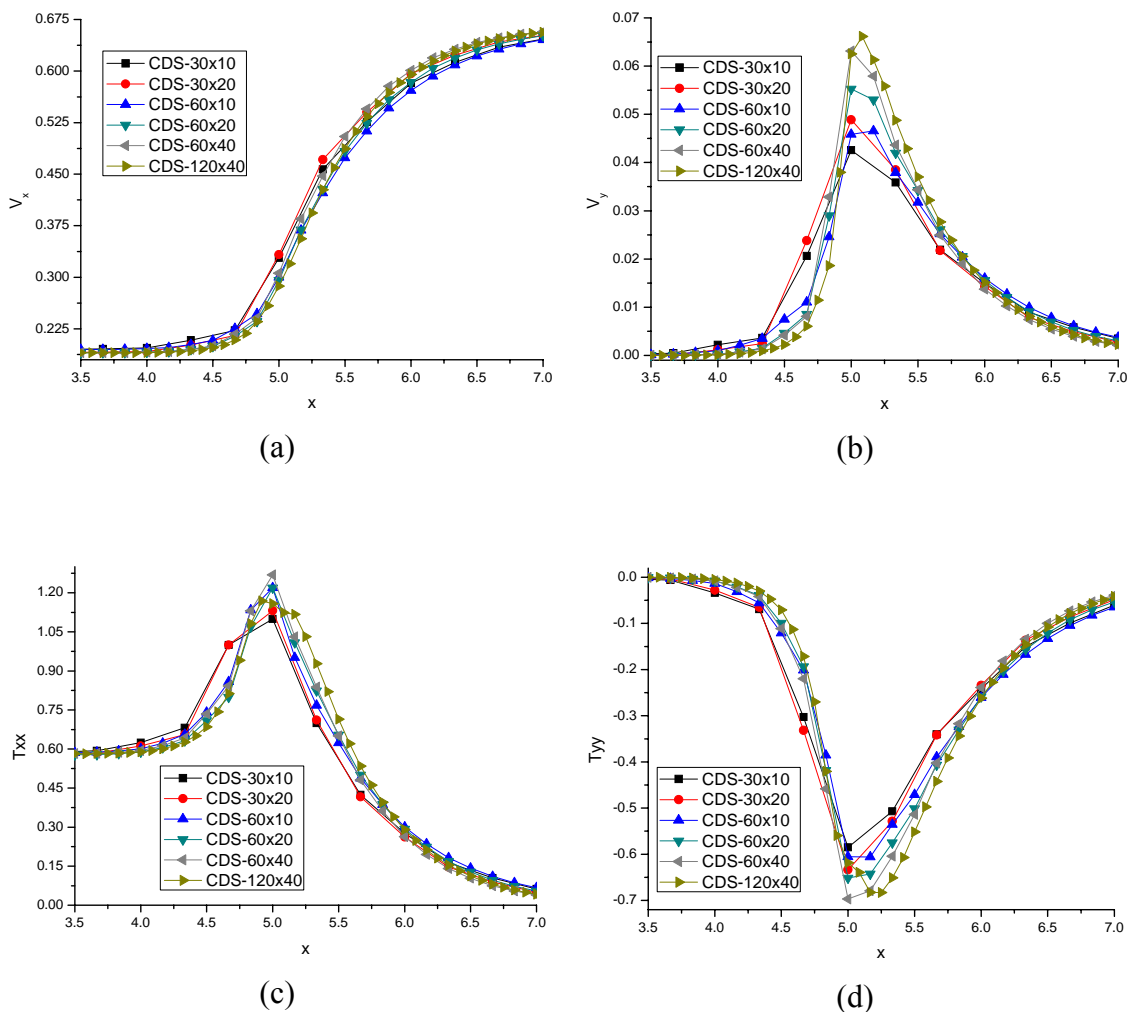


Figura 6.69: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema CDS com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Tensão τ_{xx} e (d) Tensão τ_{yy} .

Pelos resultados apresentados na Figura 6.69, é possível verificar que todos os refinamentos testados apresentam diferenças entre as soluções obtidas, especialmente para o ponto $x=0,5$, que é o local no qual ocorrem as mudanças das condições de

contorno do escoamento. As discrepâncias obtidas entre as soluções de diferentes refinamentos indicam que a malha precisa ser mais refinada, especialmente na região próxima à singularidade. Soluções aplicando maiores refinamentos de malha foram testadas, entretanto os procedimentos não apresentaram convergência. O problema de convergência pode estar relacionado ao surgimento de instabilidades numéricas proporcionadas pelo grau de refinamento adotado, de forma similar às ocorridas no escoamento “*slip-stick*”.

Os perfis apresentados na Figura 6.70 comparam os resultados obtidos pelo esquema LAG4 usando diferentes refinamentos de malha com o resultado obtido pelo esquema CDS usando uma malha de 120×40 para a linha horizontal $y=0,9$ na região próxima à singularidade para os perfis de velocidade v_x e v_y e de tensão τ_{xx} e τ_{yy} .

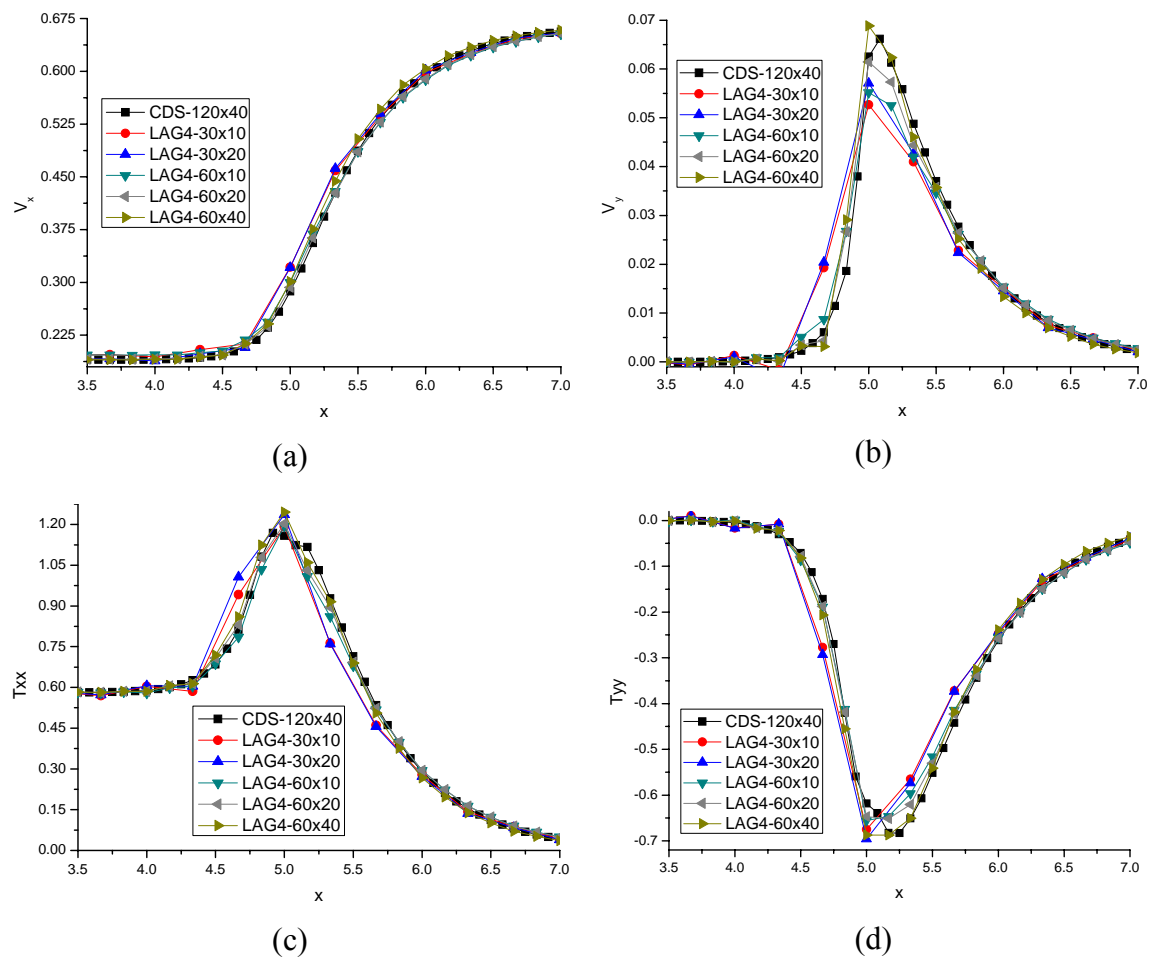


Figura 6.70: Perfis obtidos para posição $y=0,90$ pela aplicação do esquema LAG4 com diferentes refinamentos de malha para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Tensão τ_{xx} e (d) Tensão τ_{yy} .

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.70, é possível verificar algumas discordâncias entre os resultados obtidos pelo esquema CDS usando a malha 120×40 e os resultados obtidos através do procedimento LAG4. Observa-se também que as soluções obtidas para o esquema LAG4 apresentam boa concordância já que à medida que a malha torna-se mais refinada as soluções convergem para um valor comum, indicando que a convergência de malha está próxima. Neste caso, diferenças mais significativas são apenas observadas para velocidade v_y , Figura 6.70b, para os demais casos as aplicações do esquema LAG4 usando malhas 60×10 , 60×20 e 60×40 apresentam soluções próximas.

Comparando os perfis obtidos pelo esquema CDS, Figura 6.69, com os perfis obtidos pelo LAG4, Figura 6.70, fica evidente, especialmente quando comparados os valores das tensões, que o procedimento LAG4 apresenta menor influência do refinamento da malha que o procedimento CDS.

Visando verificar a qualidade das soluções dos esquemas LAG4 e CDS na região próxima à singularidade em relação ao eixo vertical, foi realizada a comparação entre os resultados obtidos pelo esquema CDS e LAG4, para as variáveis velocidade v_x e tensão τ_{xx} , utilizando diferentes refinamentos de malha na linha vertical $x=5,6667$ e para regiões próximas à parede, Figura 6.71 e Figura 6.72.

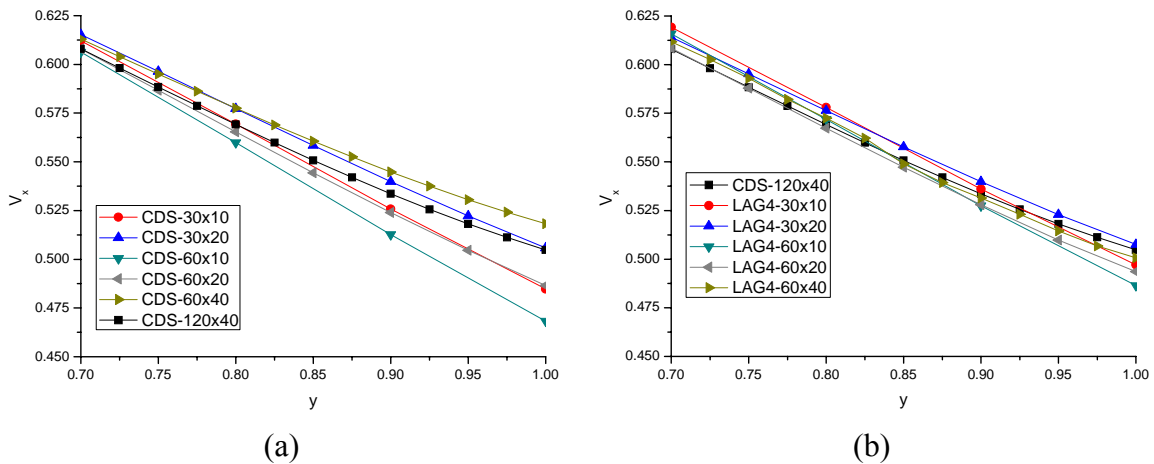


Figura 6.71: Perfis obtidos para posição $x=5,6667$ pela aplicação dos esquemas CDS e LAG4 com diferentes refinamentos de malha na região próxima a parede para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Velocidade v_x com CDS e (b) Velocidade v_x .

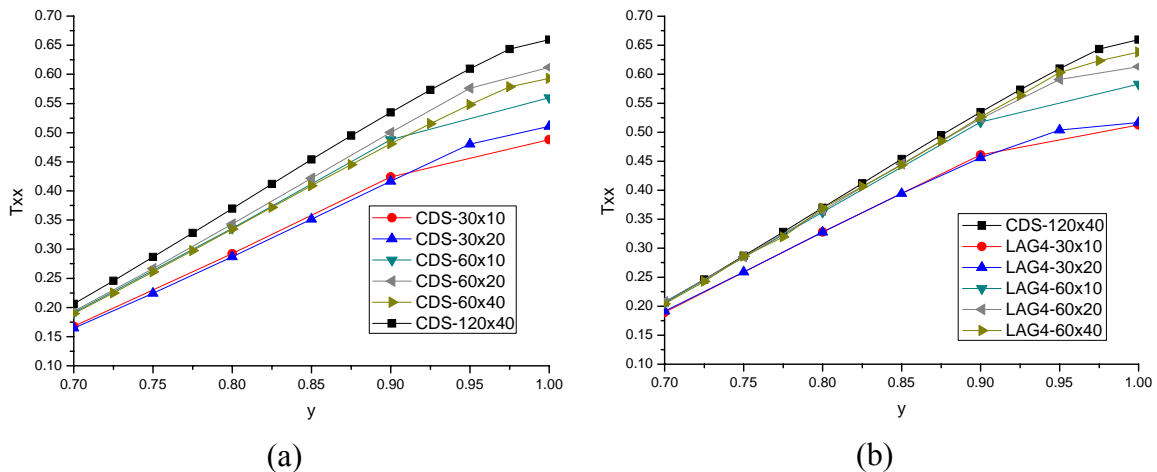


Figura 6.72: Perfis obtidos para posição $x=5,6667$ pela aplicação dos esquemas CDS e LAG4 com diferentes refinamentos de malha na região próxima a parede para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} com CDS e (b) Tensão τ_{xx} com LAG4.

Comparando os perfis apresentados na Figura 6.71 e na Figura 6.72, é possível observar diferenças nas soluções obtidas pelo esquema CDS 120×40 e o esquema LAG4. É importante destacar que, novamente, as soluções obtidas pelo procedimento LAG4 são menos afetadas pelo refinamento da malha que as soluções obtidas pelo esquema CDS. Indicando que o procedimento LAG4 encontra-se mais próximo da convergência de malha que o esquema CDS. Observação concordante com a comparação realizada anteriormente ao longo do escoamento e que mais uma vez demonstrar a potencialidade para aplicação de esquemas de ordens mais elevadas.

O tempo de processamento para o esquema LAG4 utilizando uma malha 60×40 foi de 1.142 segundos e o tempo do esquema CDS com uma malha 120×40 foi de 1.708 segundos. Pela análise realizada anteriormente, sobre a influência que o refinamento de malha exerce sobre a solução de cada um dos esquemas, é possível concluir que a aplicação do esquema LAG4 usando uma malha 60×40 é mais vantajosa que a aplicação do esquema CDS tanto no que diz respeito à acurácia como na redução do esforço computacional empregado na simulação.

Comparações quantitativas entre as soluções obtidas não foram realizadas, pois, neste exemplo, não foi possível verificar a convergência da malha computacional.

Na Figura 6.73 são apresentadas as curvas de nível para o escoamento “*slip-stick*”, aplicando o esquema LAG4 e uma malha computacional 60×40.

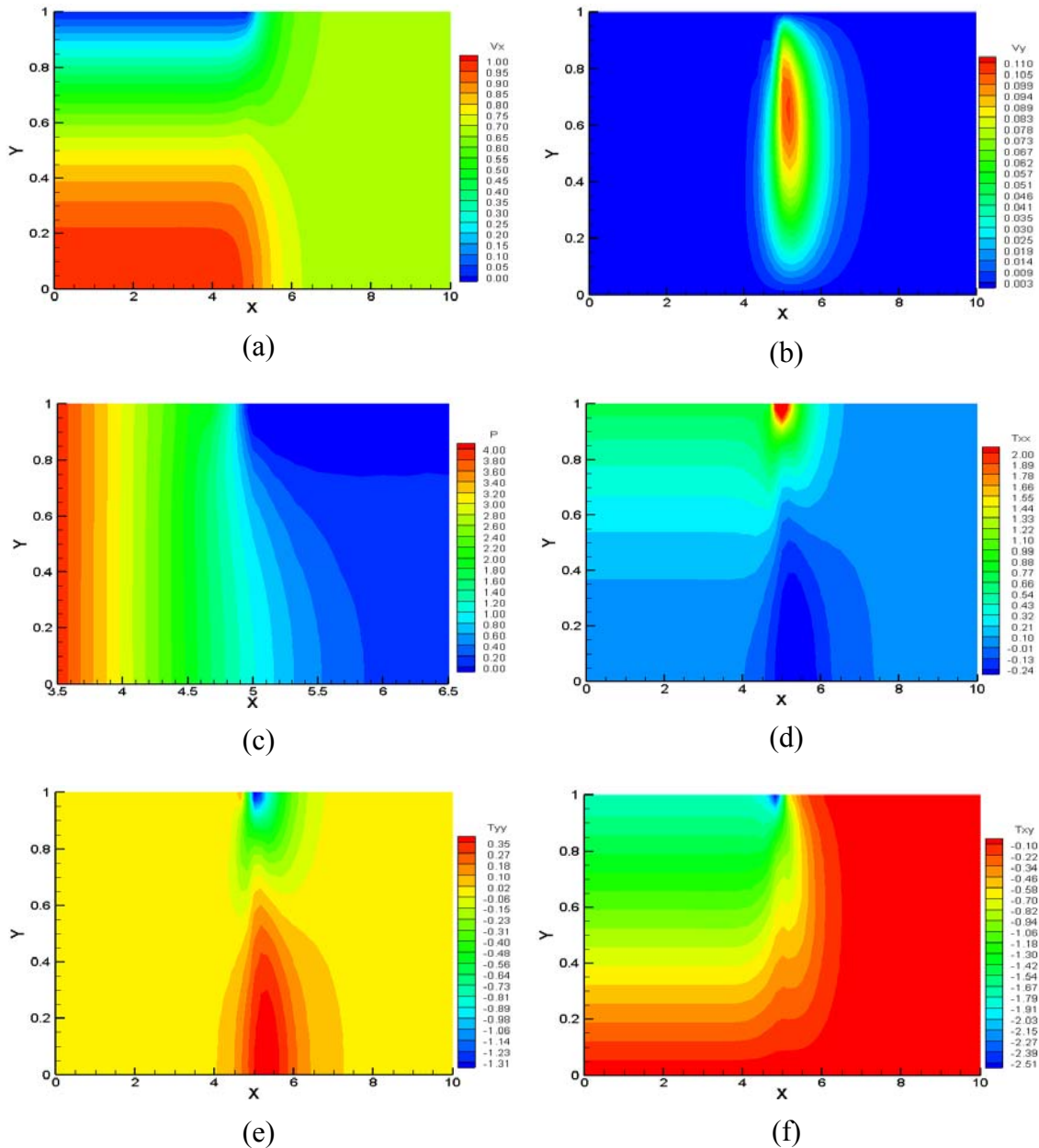


Figura 6.73: Curvas de nível obtidas pela aplicação dos esquemas LAG4 com uma Malha 60×40 para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Velocidade v_y ; (c) Pressão e (d) Tensão τ_{xx} ; (e) Tensão τ_{yy} e (f) Tensão τ_{xy} .

Pela análise dos resultados, Figura 6.73, é possível visualizar que os maiores gradientes ocorrem na região próxima à singularidade devido à mudança da condição de não deslizamento para condição de livre de cisalhamento. Isto faz com que os valores de velocidade e tensão, que até então apresentam perfis já estabelecidos, sejam modificados abruptamente, sendo esta a principal fonte de instabilidade numérica. Observa-se que os componentes do tensor tensão vão progressivamente diminuindo na região de não deslizamento e, como nesta região não há cisalhamento, tendendo a zero à medida que o escoamento vai se estabelecendo.

A Figura 6.74 tem por finalidade verificar o efeito que o parâmetro η_E do modelo de Oldroyd-B exerce no escoamento “*stick-slip*”, para isto foi utilizado o esquema LAG4 com uma malha 60×40 com $We=0,1$ e $Re=0,1$. São plotados os valores da velocidade v_x e das tensões τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{xy} para diferentes valores do parâmetro η_E para a linha horizontal $y=0,9$.

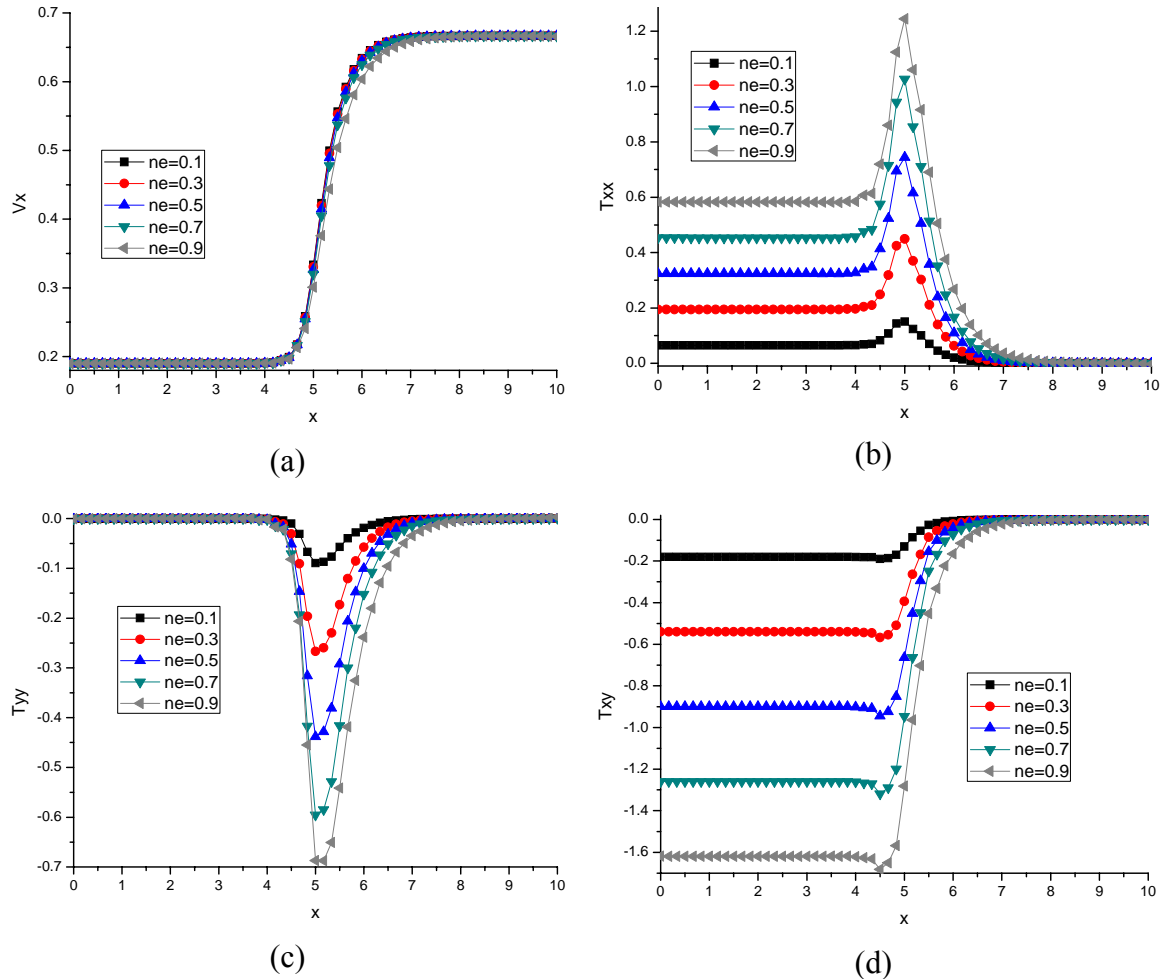


Figura 6.74: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro η_E , $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Velocidade v_x ; (b) Tensão τ_{xx} ; (c) Tensão τ_{yy} e (d) Tensão τ_{xy} .

Analisando os gráficos apresentados na Figura 6.74, é possível constatar que quanto maior o valor do parâmetro η_E mais alto é o pico da tensão na região de discontinuidade e quanto mais pronunciado for o efeito elástico, mais difícil é a obtenção de soluções.

A Figura 6.75 tem por finalidade verificar o efeito que o parâmetro ϵ do modelo de SPTT exerce no escoamento “*stick-slip*”, para isto foi utilizado o esquema LAG4

com uma malha 60×40 com $\eta_E=0,5$, $We=0,1$ e $Re=0,1$. São plotados os valores das tensões τ_{xx} e τ_{yy} para diferentes valores do parâmetro ε para a linha horizontal $y=0,9$ na região próxima à singularidade, permitindo assim visualizar melhor os efeitos produzidos por alterações de ε .

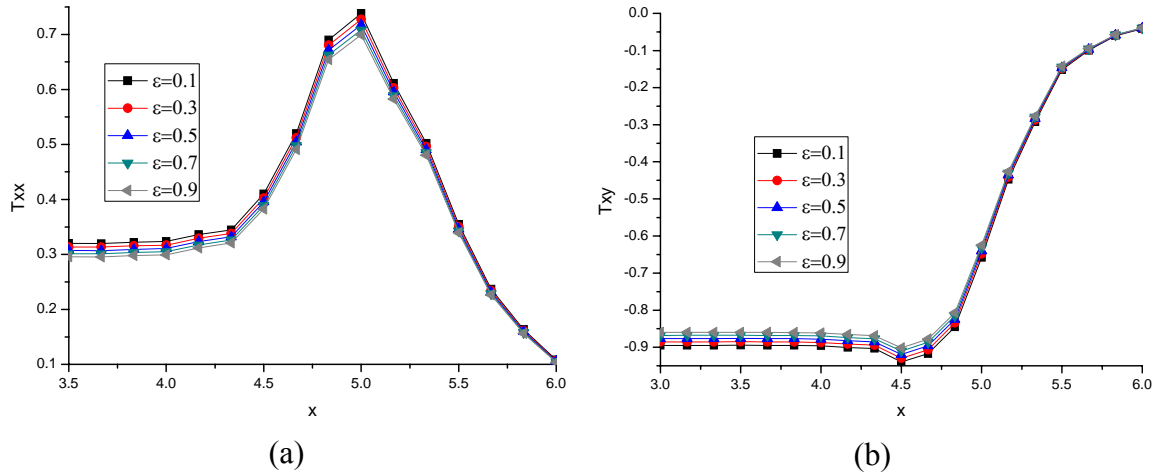


Figura 6.75: Perfis obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com uma malha 60×40 utilizando o modelo SPTT com diferentes valores do parâmetro ε , $\eta_E=0,5$, $We=0,1$ e $Re=0,1$ para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{xy} .

Analisando os perfis apresentados na Figura 6.75 é possível verificar que o aumento do parâmetro ε faz com que as tensões nas regiões próximas à singularidade sejam menores, diminuindo assim o pico de tensão.

Os próximos resultados apresentados foram obtidos através da aplicação da técnica de partição multibloco utilizando a mesma estrutura de malha aplicada no escoamento “*slip-stick*” dada pela Figura 6.62a, onde apenas a região próxima à singularidade é refinada, resultando em uma malha constituída de 2.000 volumes de controle.

Na Figura 6.76, são apresentadas as curvas de nível para velocidade e tensão τ_{xx} e τ_{yy} obtidas pela aplicação da técnica de partição multibloco ao problema, utilizando os valores de parâmetro de $We=0,1$, $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

Com a finalidade de comparar melhor a qualidade das soluções obtidas, foram plotados os perfis horizontais em diferentes cortes em y , Figura 6.77 e Figura 6.78, pela aplicação do procedimento multibloco, usando uma malha constituída de 2.000 volumes de controle e a solução obtida através da aplicação do procedimento de refinamento

homogêneo usando a malha mais refinada do procedimento multibloco, que equivale a utilizar uma malha 60×60 .

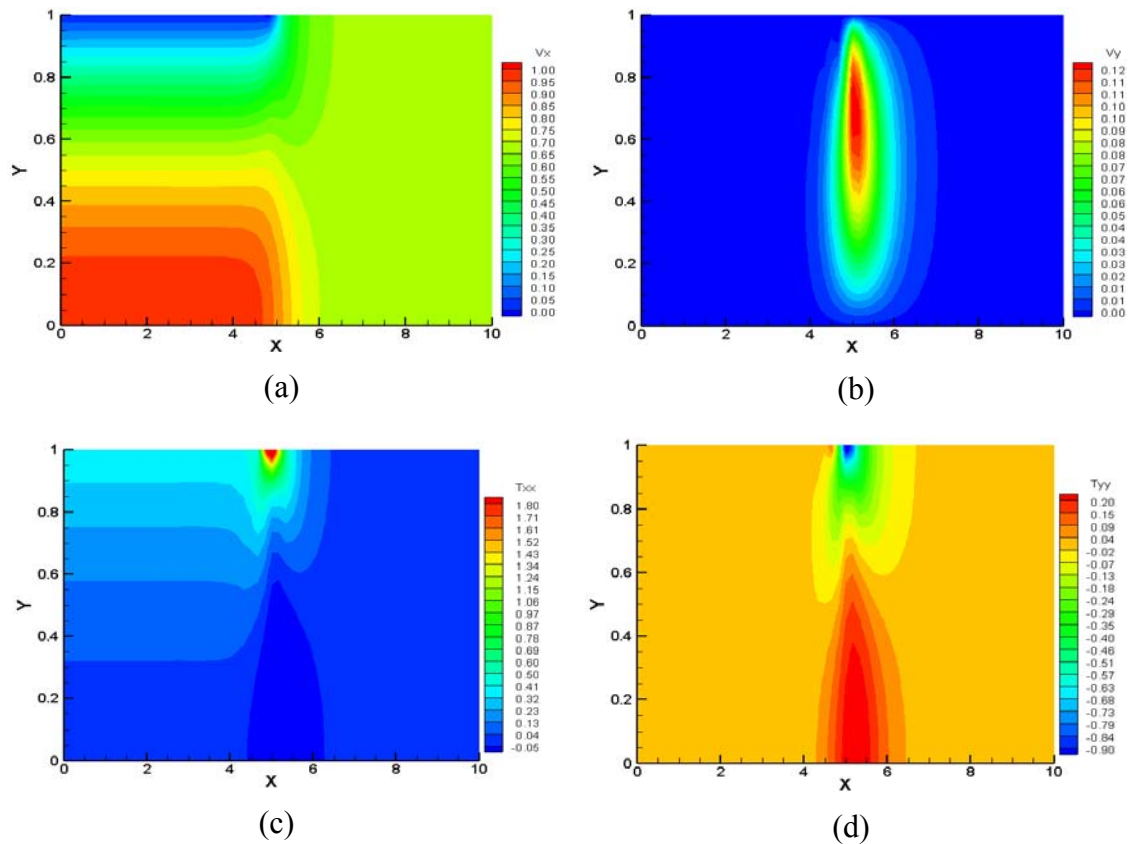


Figura 6.76: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y ; (c) Tensão τ_{xx} e (d) Tensão τ_{yy} .

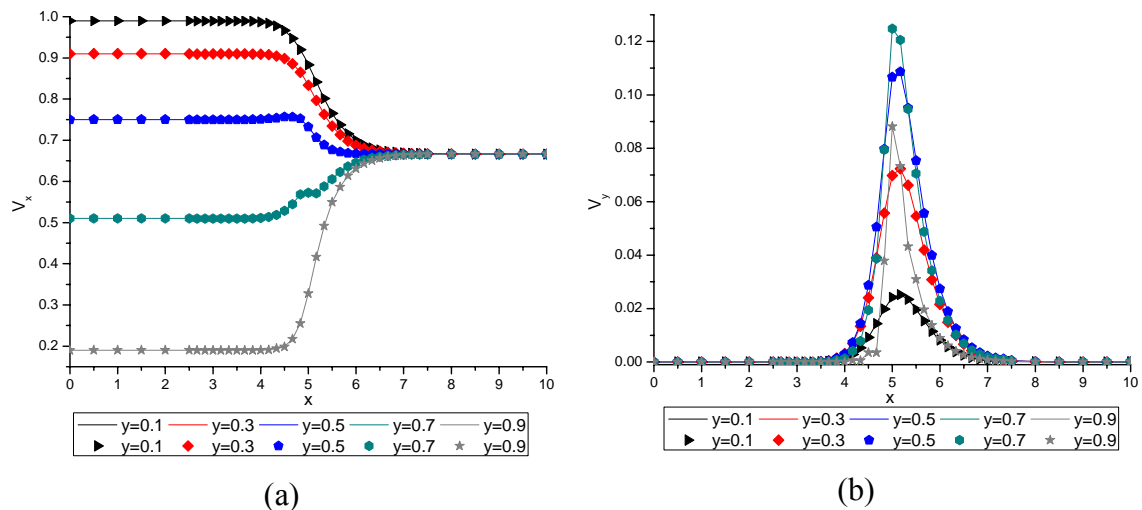


Figura 6.77: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y utilizando o procedimento LAG com uma malha 60×60 (representada por linhas) e procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Velocidade v_y .

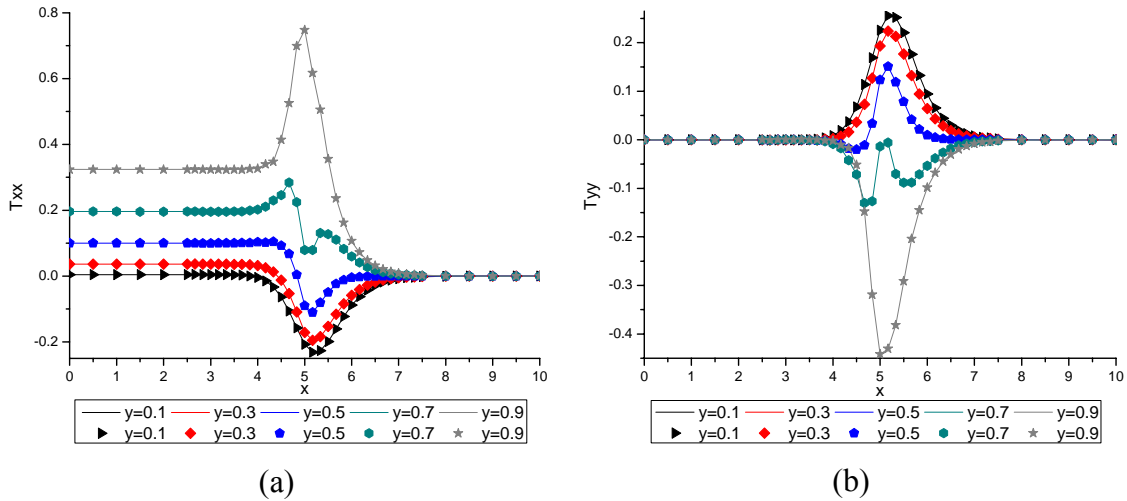


Figura 6.78: Comparação entre os perfis para diferentes cortes em y utilizando o procedimento LAG com uma malha 60×60 (representada por linhas) e procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Tabela 6.17: Diferença entre as soluções obtidas pela aplicação da técnica multibloco e as soluções obtidas utilizando o grau de refinamento completo para o escoamento “stick-slip” viscoelástico.

	$\ v_x^{ref} - v_x\ $	$\ v_y^{ref} - v_y\ $	$\ p^{ref} - p\ $
$y=0,1$	$3,7591 \times 10^{-4}$	$1,9789 \times 10^{-5}$	$2,0867 \times 10^{-3}$
$y=0,3$	$3,5308 \times 10^{-4}$	$5,0724 \times 10^{-5}$	$1,7789 \times 10^{-3}$
$y=0,5$	$3,1742 \times 10^{-4}$	$6,3402 \times 10^{-5}$	$1,4798 \times 10^{-3}$
$y=0,7$	$2,9138 \times 10^{-4}$	$5,2783 \times 10^{-5}$	$1,3987 \times 10^{-3}$
$y=0,9$	$2,8095 \times 10^{-4}$	$2,2081 \times 10^{-5}$	$1,5058 \times 10^{-3}$
	$\ \tau_{xx}^{ref} - \tau_{xx}\ $	$\ \tau_{yy}^{ref} - \tau_{yy}\ $	$\ \tau_{xy}^{ref} - \tau_{xy}\ $
$y=0,1$	$2,3718 \times 10^{-4}$	$2,2912 \times 10^{-4}$	$7,4569 \times 10^{-5}$
$y=0,3$	$1,5388 \times 10^{-4}$	$1,6177 \times 10^{-4}$	$2,0450 \times 10^{-4}$
$y=0,5$	$1,0254 \times 10^{-4}$	$1,1135 \times 10^{-4}$	$2,7374 \times 10^{-4}$
$y=0,7$	$1,9102 \times 10^{-4}$	$1,5611 \times 10^{-4}$	$2,7006 \times 10^{-4}$
$y=0,9$	$3,1921 \times 10^{-4}$	$2,3113 \times 10^{-4}$	$3,1605 \times 10^{-4}$

Comparando os perfis obtidos pelo esquema que utiliza refinamento homogêneo e pelo procedimento multibloco apresentados na Figura 6.77 e na Figura 6.78, pode-se observar que o procedimento multibloco foi capaz de conectar adequadamente os blocos de diferentes refinamentos sem a presença de oscilações ou descontinuidades nas fronteiras de conexão. Através dos resultados apresentados na Tabela 6.17, pode-se constatar que aplicação do procedimento multibloco foi capaz de obter soluções com o mesmo nível de precisão que o procedimento aplicando o refinamento homogêneo utilizando um refinamento global menor. Tais resultados demonstram que o

procedimento multibloco foi capaz de eliminar o refinamento desnecessário na área de entrada e saída, concentrando apenas o maior refinamento na região de singularidade, sem comprometer a qualidade e precisão dos resultados.

Comparando o tempo computacional para convergência dos procedimentos obtiveram-se 941 segundos usando o esquema LAG4 com procedimento multibloco e 1.753 segundos usando o esquema LAG4 com refinamento homogêneo. Resultado que, mais uma vez, demonstra as vantagens da aplicação do procedimento

Por fim, buscou-se verificar a influência que o número de Weissenberg apresenta sobre o escoamento “*stick-slip*”. Foram realizadas diversas simulações utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes graus de refinamentos de malha e valores variados de We com $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

Na Figura 6.79 são apresentados os perfis de tensão τ_{xx} e τ_{yy} para a linha horizontal $y=0,9$ para os valores de $We=0,1$, $We=0,2$ e $We=0,3$ usando malhas 30×20 e 40×50 , aplicando o modelo de Oldroyd-B com $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$

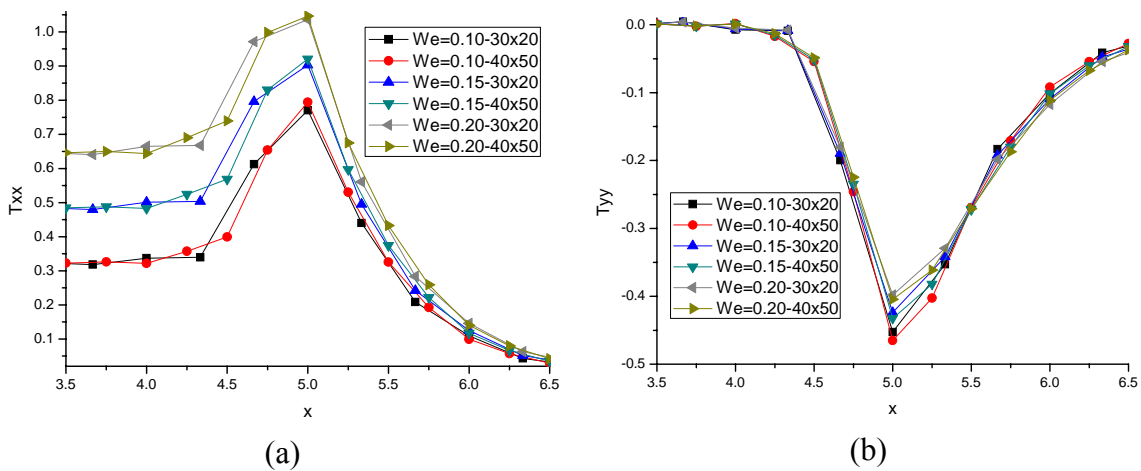


Figura 6.79: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 usando malha 30×20 e 40×50 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Comparando os resultados apresentados na Figura 6.79 pela malha 30×20 com a malha 40×50 , observa-se que para malha 40×50 os valores de tensão crescem mais rapidamente que para a malha 30×20 e que os picos de tensão obtidos pela malha 40×50 no ponto da singularidade, $x=5,0$, são ligeiramente superiores.

Na Figura 6.80 e na Figura 6.81 são apresentadas as comparações dos perfis de tensão τ_{xx} e τ_{yy} para linha horizontal $y=0,9$ para diferentes valores de We usando

diferentes refinamentos de malha, aplicando o modelo de Oldroyd-B com $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

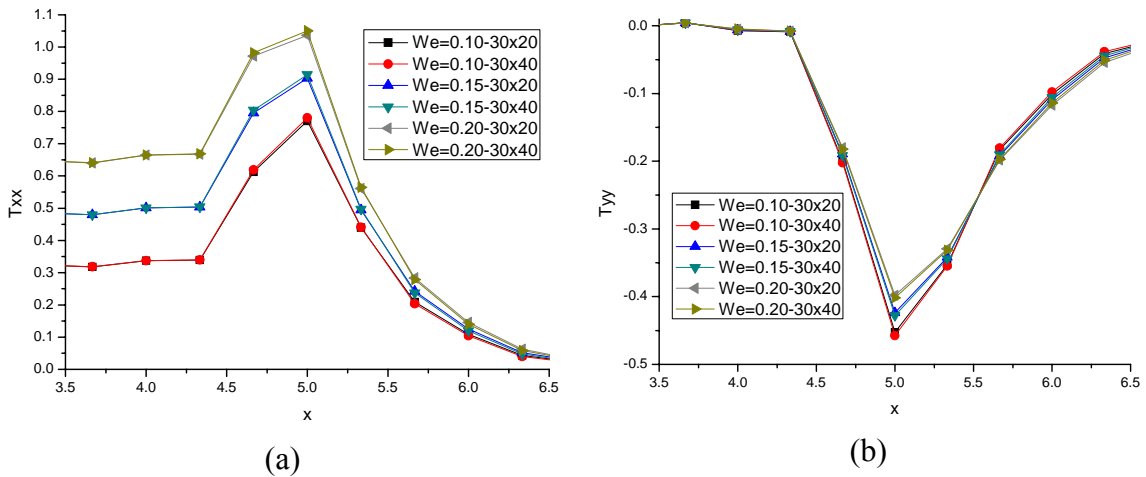


Figura 6.80: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com as malhas 30×20 e 30×40 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

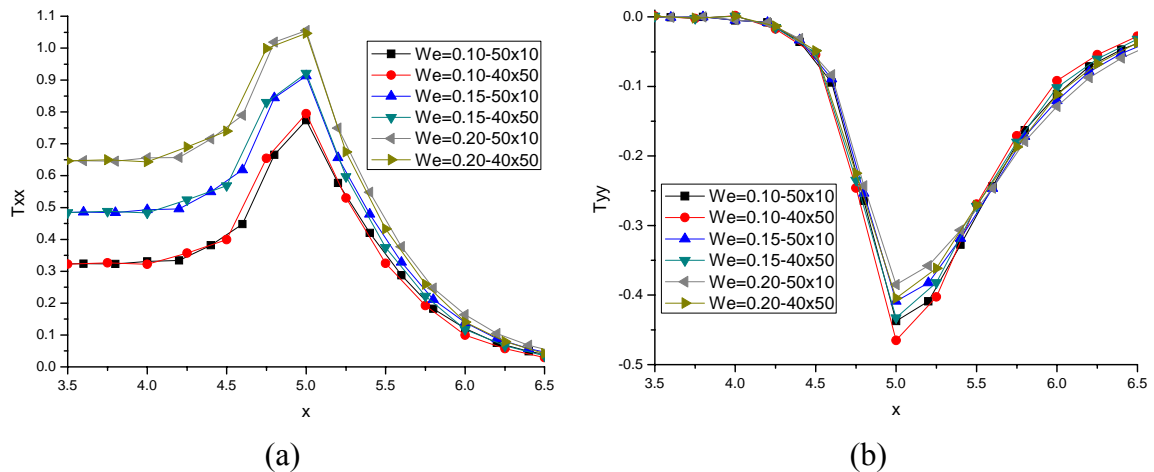


Figura 6.81: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema LAG4 com as malhas 50×10 e 40×50 utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We para o escoamento “*stick-slip*” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Comparando os resultados apresentados na Figura 6.80, é possível constatar que o aumento de pontos de discretização em y não altera significativamente os perfis de tensão. Comparando os perfis de tensão apresentados na Figura 6.81, pode-se observar que o pico de tensão de τ_{yy} é muito mais discrepante com relação ao refinamento da malha que as soluções de τ_{xx} . É importante ressaltar que da mesma forma que o escoamento “*slip-stick*”, quanto maior o refinamento da malha mais elevado é o pico de

tensão obtido no ponto de descontinuidade, $x=0,5$, como pode ser melhor evidenciado na Figura 6.81b.

Aplicando a técnica de partição multibloco, usando a malha definida pela Figura 6.62a com os valores de parâmetros $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$ e comparando os resultados obtidos pela aplicação do procedimento homogêneo, usando uma malha 30×40 , são obtidas as seguintes relações entre o tensor tensão τ_{xx} e τ_{yy} , Figura 6.82.

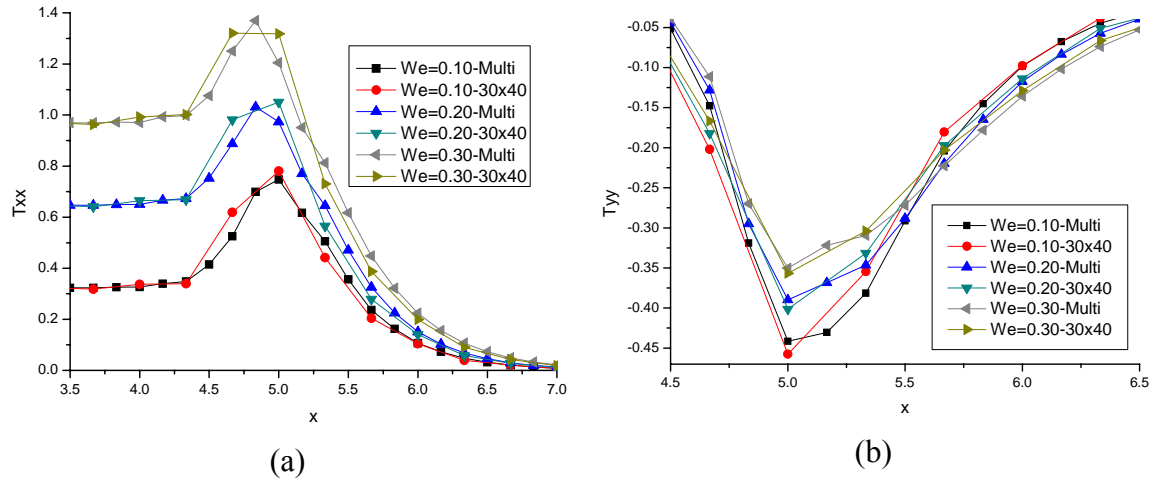


Figura 6.82: Perfis de tensão obtidos para posição $y=0,9$ pela aplicação do esquema multibloco utilizando o modelo de Oldroyd-B com diferentes valores do parâmetro We e pela aplicação do procedimento de refinamento homogêneo usando malha 30×40 para o escoamento “stick-slip” viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} e (b) Tensão τ_{yy} .

Analisando os gráficos apresentados na Figura 6.82, pode-se constatar uma melhora significativa dos resultados obtidos, visto que a utilização do procedimento multibloco concentra uma quantidade maior de pontos na região de descontinuidade, melhorando assim a qualidade da aproximação. Para que o procedimento de refinamento homogêneo fosse capaz de obter a mesma qualidade de resultados seria necessária a utilização de uma malha 60×60 , resultando em um sistema de equações constituído de 21.600 equações. A aplicação da técnica multibloco reduz o sistema a 12.000 equações distribuídas em 2.000 volumes de controle. A redução significativa de recursos computacionais comprova a potencialidade do tratamento multibloco e os resultados obtidos certificam que sua aplicação pode ser realizada sem ocasionar perda na qualidade dos resultados.

6.4.4. Escoamento em Cavidade Quadrada

O escoamento em cavidade quadrada, descrito no item 6.3.3, é agora simulado para escoamento de fluidos viscoelásticos. Para a realização dos testes e comparações

foi considerada uma cavidade de tamanho unitário ($H=1$) com as coordenadas x e y adimensionais. Os valores de parâmetros adotados foram $We=0,1$, $Re=100$ e $\eta_E=0,7$. Tais valores de parâmetros foram escolhidos seguindo o trabalho de YAPICI *et al.* (2009), que aplicaram o método de volumes finitos utilizando o esquema de diferenças centrais com uma malha constituída de 305×305 volumes de controle.

Na Tabela 6.18 são apresentados os valores de velocidade mínima v_x considerada na linha vertical central ($x=0,5$) e o correspondente valor de y , onde este valor de mínimo ocorre, e os valores máximo e mínimo da velocidade v_y , na linha horizontal central ($y=0,5$), e os correspondentes valores das abscissas x , obtidos pela aplicação do procedimento LAG4 e os obtidos por YAPICI *et al.* (2009).

Tabela 6.18: Valores das velocidades mínimas e máximas em $x=0,5$ e $y=0,5$ para o escoamento em cavidade viscoelástico.

	YAPICI <i>et al.</i> (2009)	LAG4	
		M20×20	M40×40
v_x^{\min}	-0.193175	-0.186464	-0.192834
y^{\min}	0.488128	0.499486	0.492858
v_y^{\max}	0.155133	0.144179	0.153285
x^{\max}	0.234913	0.234580	0.232237
v_y^{\min}	-0.211728	-0.198831	-0.207754
x^{\min}	0.802375	0.802414	0.801144

Comparando os valores apresentados na Tabela 6.18 é possível verificar a grande potencialidade para aplicação de esquemas de alta ordem visto que a aplicação do esquema de Lagrange de 4ª ordem foi capaz de obter soluções tão precisas quanto os resultados apresentados YAPICI *et al.* (2009), utilizando refinamentos consideravelmente mais reduzidos.

Na Figura 6.83 o perfil de velocidade v_x na linha central ($x=0,5$) e o perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$) extraídos de YAPICI *et al.* (2009) são comparados aos perfis obtidos pela aplicação do esquema LAG4 com os refinamentos 20×20 e 40×40 .

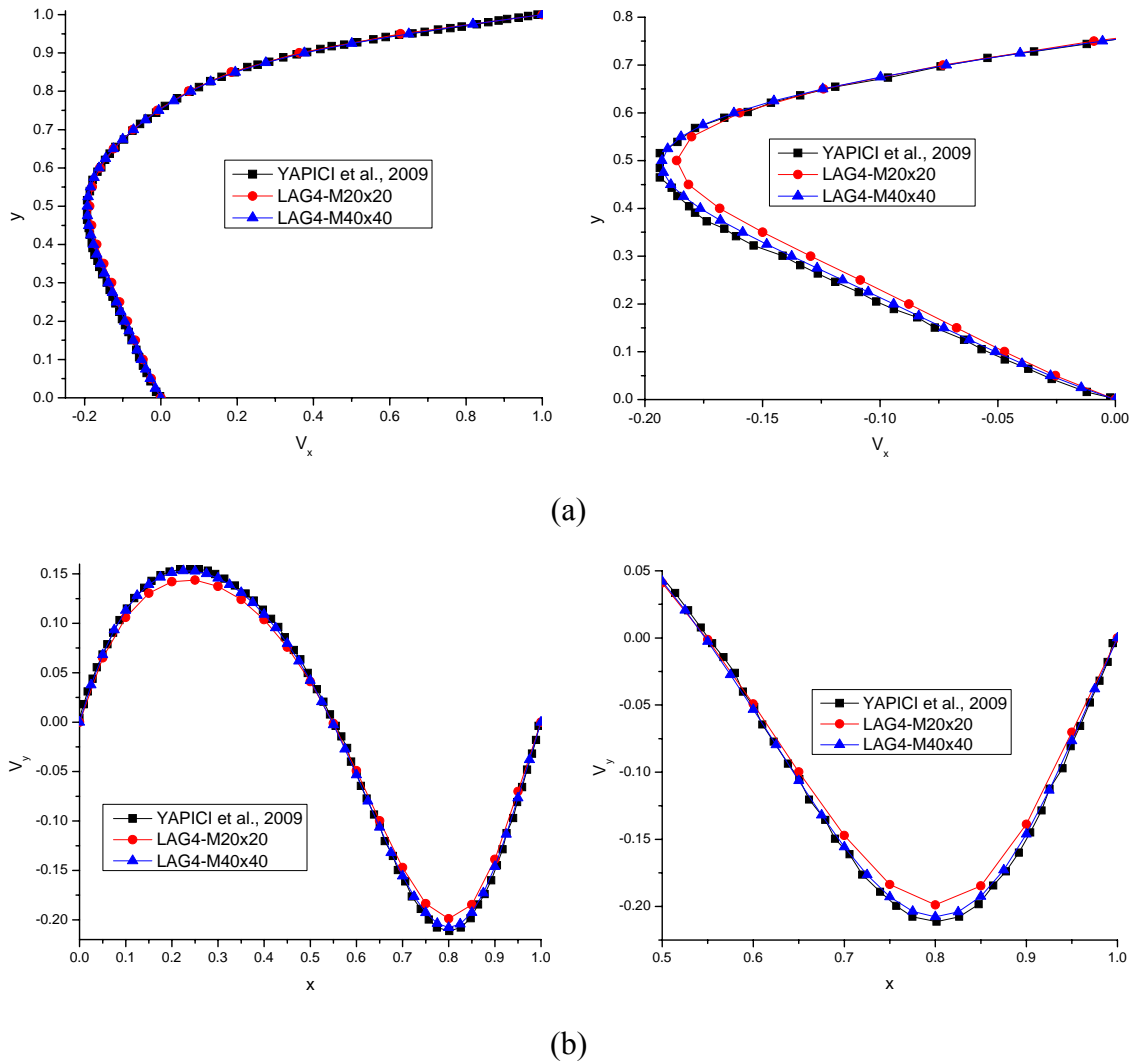


Figura 6.83: Comparações entre os perfis de velocidade para o esquema LAG4 usando malha 20×20 e 40×40 e os resultados obtidos por YAPICI *et al.* (2009) para o escoamento em cavidade viscoelástico: (a) Perfil de velocidade v_x na linha vertical central ($x=0,5$) e (b) Perfil de velocidade v_y na linha horizontal central ($y=0,5$).

Comparando os resultados apresentados na Figura 6.83 é possível verificar uma boa concordância entre os perfis de velocidade obtidos pelo esquema LAG4 e os resultados extraídos da literatura. Embora os resultados obtidos pela aplicação da malha 20×20 encontrem-se um pouco afastados dos demais perfis, é importante ressaltar a qualidade da solução que, mesmo utilizando um grau de refinamento baixo, foi capaz de produzir solução relativamente próxima às demais soluções.

6.4.5. Escoamento em Contração Plana

Neste problema, o escoamento se dá em um duto retangular de profundidade infinita no qual a partir de um determinado ponto existe uma diminuição na área da seção transversal, representado ilustrativamente pela Figura 6.84. Geometrias que

apresentam contrações abruptas como estas são facilmente encontradas em diversos processos de transformação de materiais poliméricos, tais como os processos de extrusão e injeção. A grande dificuldade para a simulação deste tipo de problema ocorre na região da contração onde comumente se observa a presença de singularidades e oscilações na solução.

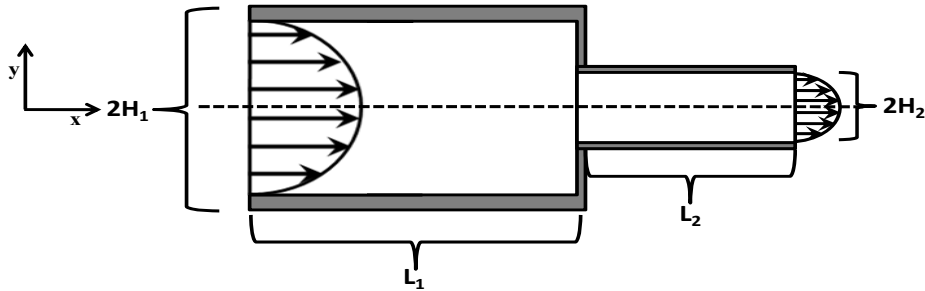


Figura 6.84: Representação esquemática do escoamento em uma contração plana.

Na entrada é considerado um perfil parabólico de velocidade, para as paredes são aplicadas as condições de não deslizamento, a condição de simetria é aplicada à seção horizontal central e por fim considera-se o escoamento estabelecido na saída.

Para realização dos testes e comparações, foram considerados o comprimento da placa antes da contração de $L_1=10$, comprimento da placa após a contração $L_2=5$, meia altura do canal antes da contração de $H_1=1$ e meia altura do canal após a contração de $H_2=0,5$, caracterizando uma contração 2:1. Mais uma vez as coordenadas x e y adimensionais são consideradas a partir do ponto onde se localiza a linha de simetria horizontal ($y=0$) e o início do escoamento ($x=0$).

O problema foi resolvido utilizando o esquema CDS aplicando uma malha 60×80 na região anterior à contração e uma malha 30×40 na região posterior à contração, totalizando 6.000 volumes de controle. Os resultados obtidos pelo esquema CDS foram comparados às soluções do procedimento multibloco com LAG4 aplicando 3.400 volumes de controle, distribuídos conforme a Figura 6.85, com a finalidade de confrontar a qualidade da solução obtida. Para a realização das simulações foi considerado o modelo de Oldroyd-B, com $Re=0,1$, $We=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

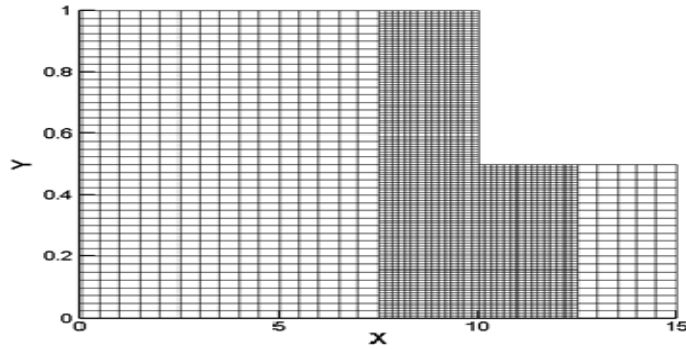


Figura 6.85: Estrutura de refinamento multibloco aplicando 3.400 volumes de controle para o escoamento em contração viscoelástico.

Na Figura 6.86 e na Figura 6.87 são apresentados os perfis de velocidade v_x e os perfis de tensão na linha horizontal $y=0,15$, $y=0,30$, $y=0,45$, $y=0,60$, $y=0,70$ e $y=0,90$ aplicando o esquema CDS com refinamento homogêneo (representado através da linha contínua) e aplicando o procedimento multibloco com LAG4 (representado por pontos). As figuras do lado esquerdo representam os perfis das variáveis ao longo de todo domínio e as figuras do lado direito apresentam uma ampliação da área próxima à contração, permitindo assim visualizar melhor as discrepâncias entre as soluções obtidas.

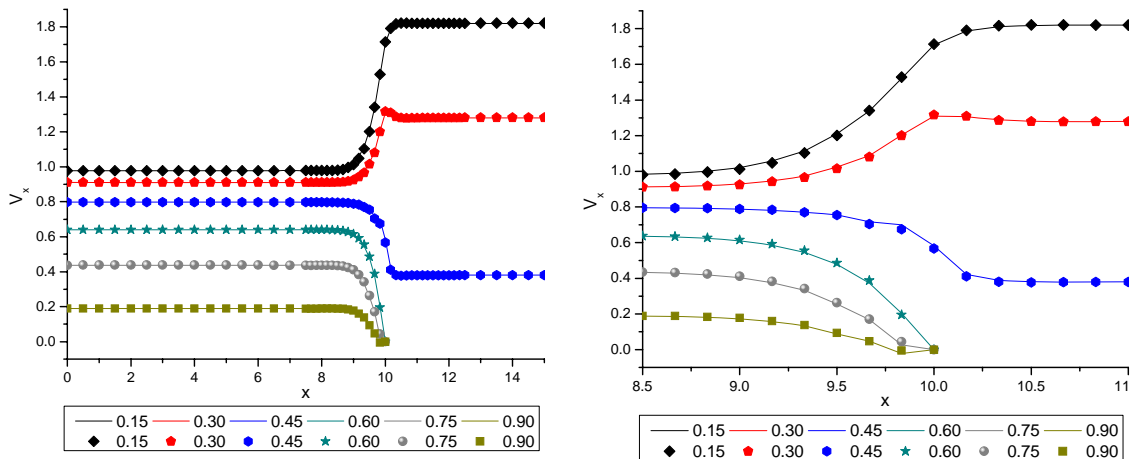
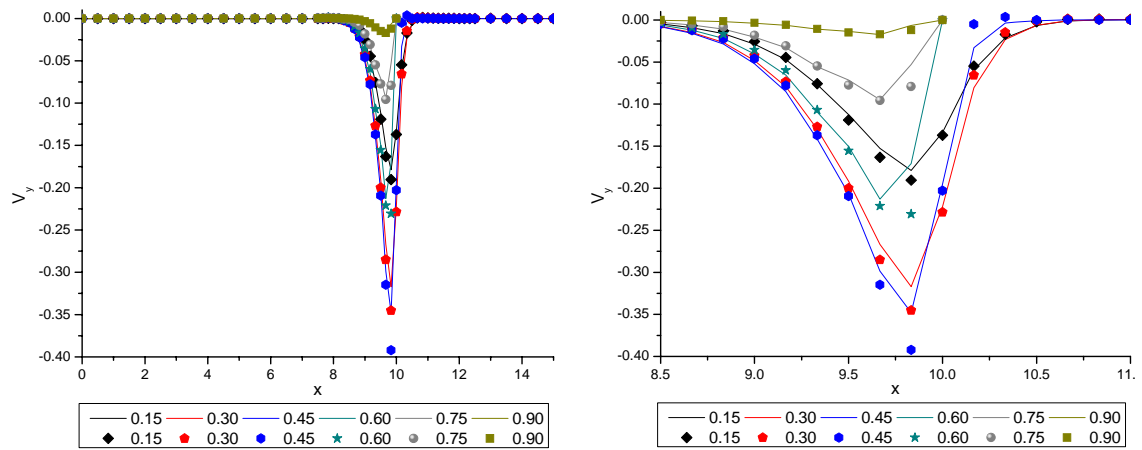
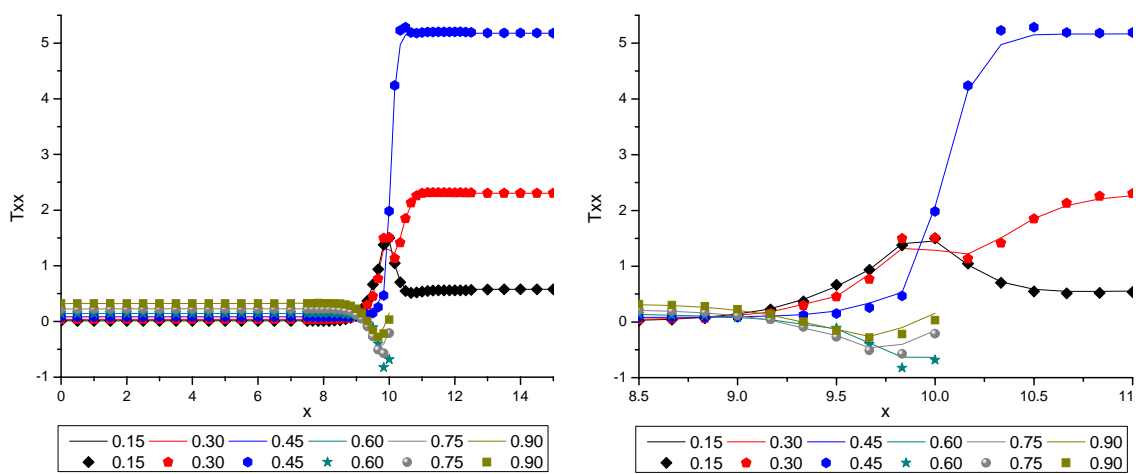


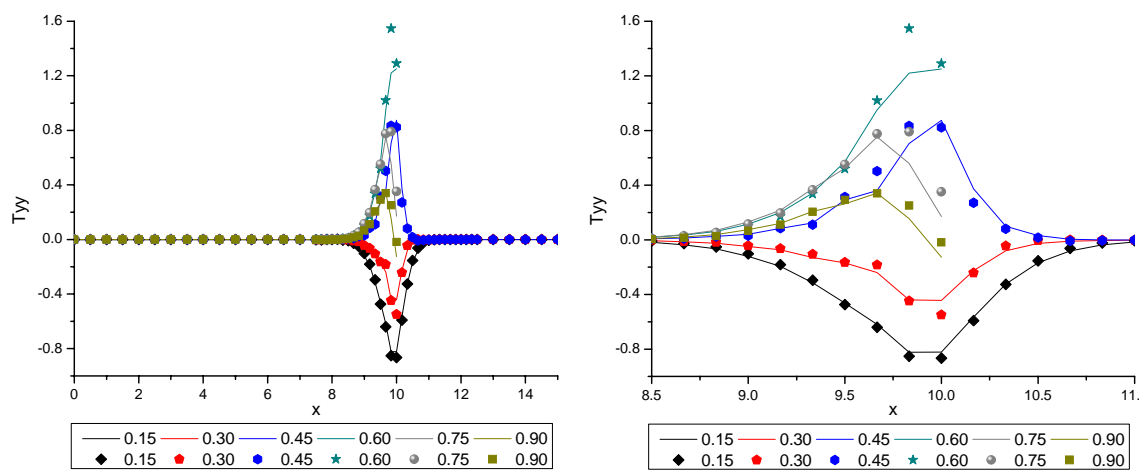
Figura 6.86: Perfis obtidos para linha horizontal para diferentes cortes em y aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico para a velocidade v_x .



(a)



(b)



(c)

Figura 6.87: Perfis obtidos para linha horizontal para diferentes cortes em y aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Velocidade v_y ; (b) Tensão τ_{xx} e (c) Tensão τ_{yy} .

Comparando os resultados apresentados na Figura 6.86 e na Figura 6.87, é possível observar que quanto mais próximo da região de contração maior é a diferença observada entre as soluções, especialmente para os valores máximos das tensões. A aplicação do procedimento CDS com refinamento homogêneo, embora utilize um número maior de volumes de controle (9.000), apresenta na região de contração um refinamento $\Delta x=0,1667$ e $\Delta y=0,0125$, ao passo que o procedimento LAG4 com uma quantidade menor de volumes de controle (3.400) apresenta o mesmo refinamento Δx de 0,1667 e um Δy mais refinado de 0,0083. Além do maior refinamento na região de contração, que certamente melhora a qualidade da aproximação, o esquema LAG4 apresenta uma precisão maior que o esquema CDS, o que faz com que as aproximações obtidas pela técnica multibloco sejam mais precisas que a aplicação do esquema CDS. Comparando as soluções obtidas, pode-se verificar que a técnica de conexão multibloco não promove qualquer perda na qualidade da solução nas áreas de menor refinamento onde as soluções são concordantes com as soluções obtidas pelo esquema CDS. Com relação ao tempo de processamento, o procedimento multibloco necessitou de 1.556 segundos para obtenção da solução contra 2.394 segundos do esquema CDS.

Na Figura 6.88 e na Figura 6.89 são apresentadas as curvas de nível da velocidade v_x , das tensões τ_{xx} e τ_{yy} e as linhas de correntes obtidas pela aplicação da técnica de partição multibloco com LAG4 utilizando os valores de parâmetro de $We=0,1$, $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

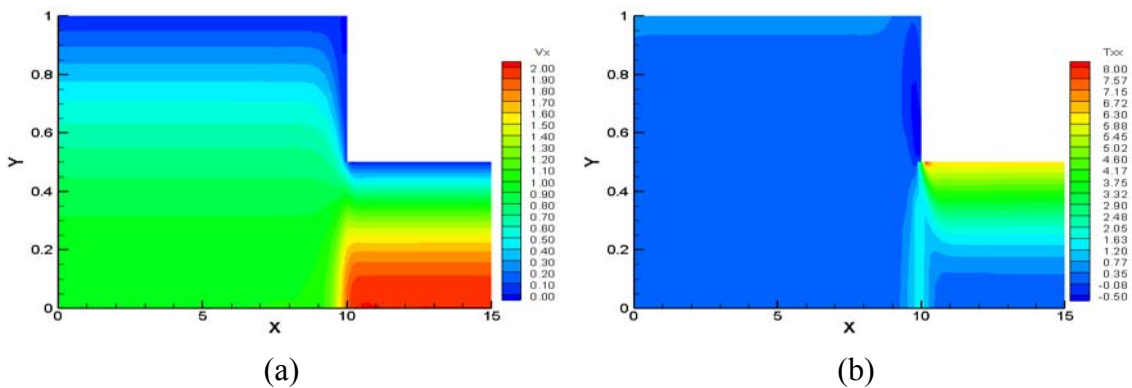


Figura 6.88: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Velocidade v_x e (b) Tensão τ_{xx} .

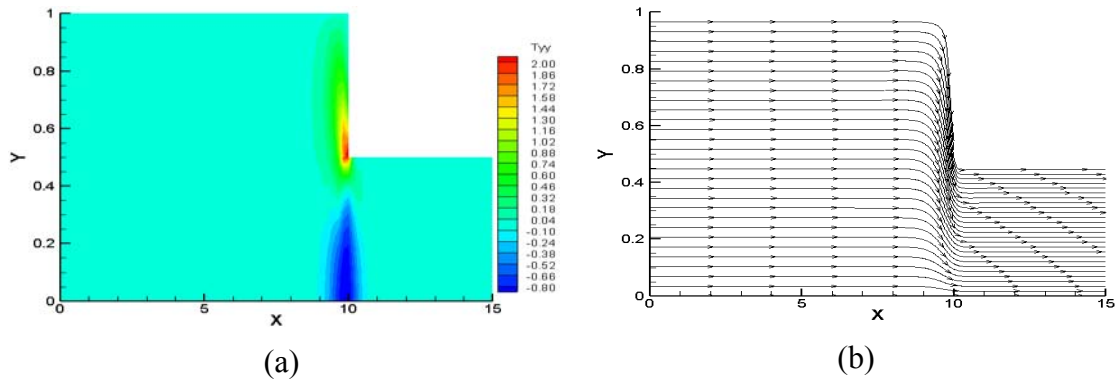


Figura 6.89: Curvas de nível obtidas pela aplicação do esquemas multibloco para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Tensão τ_{yy} e (b) Linhas de Corrente.

Os próximos resultados têm por finalidade verificar a influência que o número de Weissenberg exerce sobre o problema da contração. Na realização deste estudo foi novamente utilizada a técnica multibloco aplicando a estrutura de refinamento definida pela Figura 6.85, aplicando o modelo Oldroyd-B com valores variados de We e $Re=0,1$ e $\eta_E=0,5$.

Na Figura 6.90 são apresentados os perfis de velocidade v_y e na Figura 6.91 são apresentados os perfis de tensão na linha horizontal $y=0,45$ obtidos pela aplicação do procedimento multibloco para diferentes valores do número de Weissenberg. Nas figuras do lado esquerdo são apresentados os perfis das variáveis ao longo de todo domínio e as figuras do lado direito apresentam uma ampliação da área próxima à contração, permitindo assim visualizar melhor os efeitos associados ao aumento de We .

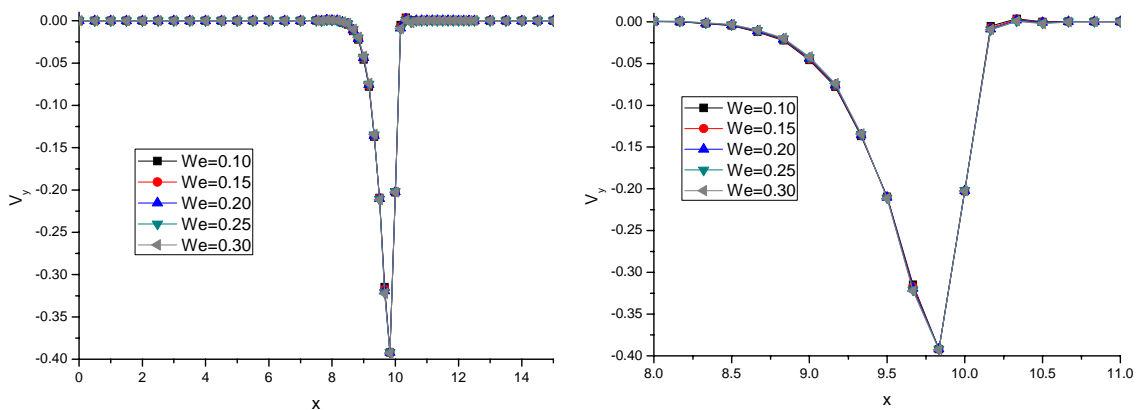
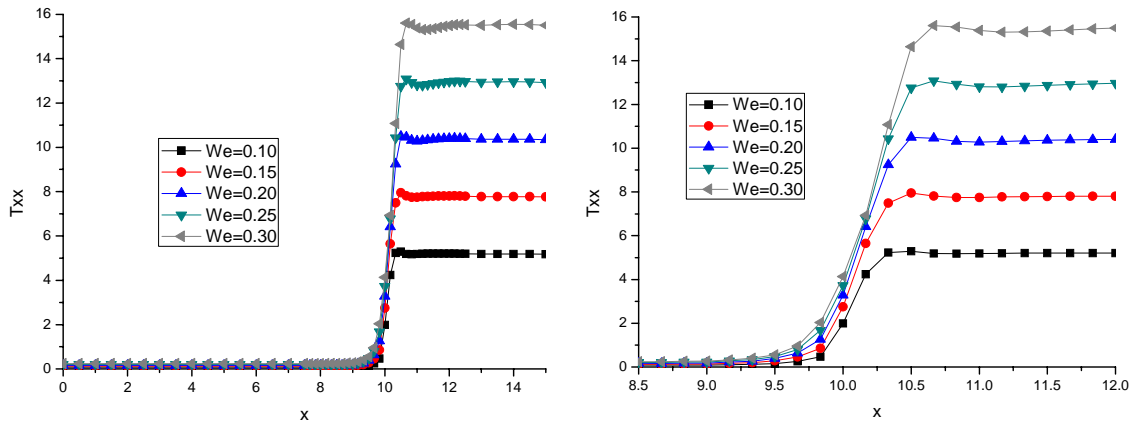
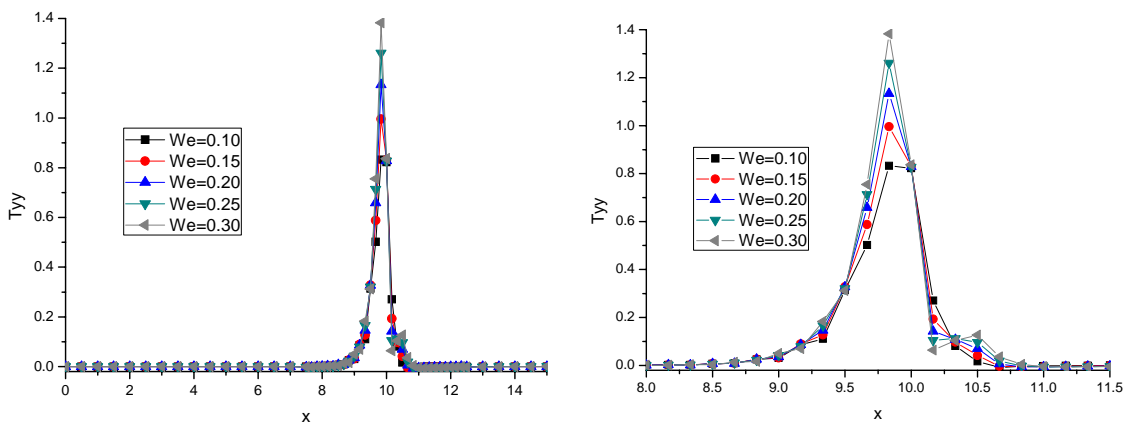


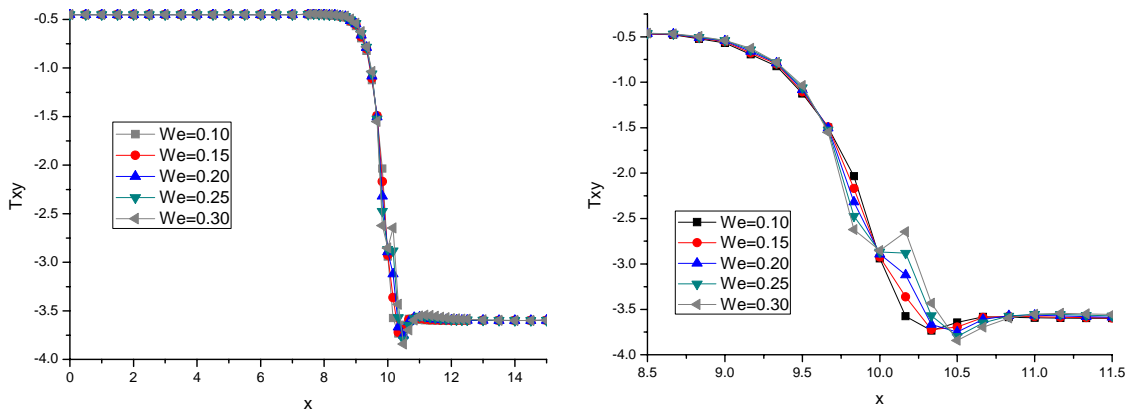
Figura 6.90: Perfis obtidos para linha horizontal $y=0,45$ aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico para a velocidade v_y .



(a)



(b)



(c)

Figura 6.91: Perfis obtidos para linha horizontal $y=0,45$ aplicando o esquema CDS (representada por linhas) e aplicando o procedimento multibloco (representada por pontos) para o escoamento em contração viscoelástico: (a) Tensão τ_{xx} ; (b) Tensão τ_{yy} e (c) Tensão τ_{xy} .

Analisando os perfis de tensão apresentados na Figura 6.90e na Figura 6.91 é possível verificar que à medida que o número de Weissenberg aumenta os valores

máximos dos picos de tensão também aumentam. Com o acréscimo do parâmetro We observa-se também o surgimento de oscilações após a contração (Figura 6.91b e Figura 6.91c), com amplitudes maiores para valores de Weissenberg superiores a 0,2. Neste caso, a implementação de técnicas específicas para tratamento de oscilações em conjunto com o procedimento proposto seria capaz de tratar adequadamente este problema, evitando o surgimento de oscilações e melhorando a qualidade da solução. Comparando os perfis, é possível constatar que mais uma vez a aplicação do procedimento multibloco foi capaz de conectar adequadamente os blocos de diferentes refinamentos, visto que não é observada a presença de qualquer descontinuidade ou oscilações próximas às interfaces de conexão. É importante ressaltar que a aplicação do procedimento multibloco utiliza 3.400 volumes de controle ao passo que a aplicação de um procedimento de refino homogêneo necessitaria de uma malha com 9.000 volumes de controle. Esta redução significativa no refinamento da malha demonstra claramente a vantagem da utilização da técnica de partição multibloco e o ganho obtido na aplicação desta metodologia.

7. Conclusões e Sugestões

“The important thing is not to stop questioning.”

Albert Einstein

Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões do trabalho e sugestões para melhorias no procedimento proposto.

7.1. Conclusões

O principal objetivo deste trabalho foi o desenvolvimento de um método de volumes finitos de alta ordem utilizando técnicas de partição multibloco do domínio do problema para a resolução das equações de Navier-Stokes, com foco especial à simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos.

Esta metodologia foi baseada no método de volumes finitos, utilizando uma malha estruturada e um arranjo co-localizado das variáveis do problema. Neste procedimento, os valores médios lineares e não lineares das variáveis nas interfaces dos volumes de controle são aproximados através de esquemas de alta ordem, que utilizam os valores médios das variáveis nos centros dos volumes de controle vizinhos. Embora sejam utilizados durante todo o processo de resolução os valores médios das variáveis, o que torna o procedimento mais simples e acurado, visto que aproximações adicionais são evitadas, ao final do processo os valores pontuais das variáveis podem ser obtidos através da aplicação da técnica de desconvolução.

A utilização de esquemas de alta ordem permitiu a obtenção de uma solução com melhor ou igual acurácia utilizando-se malhas menos refinadas, reduzindo assim o tempo de processamento da simulação, como foi comprovado em todos os exemplos testados neste trabalho.

O esquema de alta ordem desenvolvido e aplicado neste trabalho foi o esquema de Lagrange de 4ª ordem. Todas as fórmulas de interpolação (termos advectivos, termos difusivos, termos não lineares na parede do volume de controle e termos não lineares no centro do volume de controle) foram formuladas tendo como requisito fundamental a manutenção da ordem global do procedimento de aproximação. Para que o procedimento fosse capaz de manter sua ordem global, foi necessário reformular todas as fórmulas de interpolação para os contornos do problema, tomando sempre o cuidado de utilizar o mínimo de relações possíveis entre as variáveis para obtenção do grau de acurácia desejado. Assim sendo, foi possível desenvolver uma metodologia de alta ordem capaz de manter sua ordem de acurácia independente da região do domínio do problema a ser aplicada. Desta forma, evitou-se que erros relacionados à utilização de esquema de ordem menos elevadas fossem propagados, o que diminuiria a ordem global de aproximação.

A técnica de conexão multibloco desenvolvida foi capaz de conectar adequadamente os blocos de diferentes refinamentos de forma simples e eficiente. O aspecto mais importante desta metodologia está na utilização direta da própria fórmula de interpolação para conexão dos blocos. Esta aplicação direta somente foi possível graças à estrutura de geração de malha proposta que permite que os centros dos volumes de controle dos blocos de diferentes refinamentos estejam alinhados, possibilitando que os esquemas de interpolação pudessem ser aplicados diretamente sem ocasionar perda alguma na ordem do procedimento. Outro aspecto importante a ser ressaltado é que a metodologia de partição multibloco pode ser aplicada com qualquer outro esquema de interpolação de ordem superior ou inferior, permitindo também, para estes casos, utilizar diretamente a sua fórmula de interpolação.

A utilização em conjunto destas duas técnicas permitiu o desenvolvimento de um código computacional associando a melhor acurácia dos esquemas de alta ordem à flexibilidade do tratamento multibloco. Gerando, assim, um procedimento numérico capaz de reduzir o esforço computacional, comparado aos procedimentos tradicionais, o que foi comprovado em todos os testes realizados.

Dentre a grande quantidade de equações constitutivas disponíveis na literatura capazes de descrever o comportamento reológico de fluidos viscoelásticos, foram selecionados o modelo de Oldroyd-B e o modelo de Phan-Thien-Tanner simplificado (SPTT). Tais modelos foram escolhidos, pois apresentam na sua formulação as relações que mais comumente surgem entre os modelos diferenciais. Permitindo, assim, que o procedimento pudesse ser estendido de forma simples e direta a outros modelos de equações constitutivas.

Para teste da metodologia, foram selecionados exemplos clássicos da literatura, comumente utilizados para a avaliação de procedimentos numéricos. A aplicação direta do esquema de interpolação de alta ordem foi capaz de reduzir o esforço computacional empregado na simulação de todos os problemas testados. Para todos os casos, a aplicação do procedimento de Lagrange de 4ª ordem foi capaz de obter resultados com igual, ou melhor, acurácia que o procedimento CDS utilizando um grau de refinamento de malha inferior, bem como um tempo de simulação mais reduzido, demonstrando a potencialidade da aplicação de procedimentos de alta ordem em problemas de fluido dinâmica computacional.

As oscilações observadas em alguns casos (como, por exemplo, a região próxima a singularidades no escoamento “*slip-stick*” e “*stick-slip*”) são características da aplicação de esquemas de alta ordem e podem ser minimizadas ou até mesmo eliminadas através do aumento do refino da malha ou pela utilização de esquemas específicos para o tratamento de oscilações, sendo neste caso recomendado o uso do esquema WENO, devidamente formulado na Seção 5.4 deste documento. A aplicação deste procedimento é indicada visto que sua utilização não promove redução alguma da ordem do esquema, diferente de esquemas tais como TVD.

O procedimento multibloco foi capaz de conectar adequadamente as malhas com diferentes graus de refinamento, sem a presença de qualquer alteração ou oscilação na interface de conexão entre os blocos. Para alguns casos, as soluções aplicando uma malha de refinamento homogêneo, utilizando o mesmo refino de malha do bloco de maior refinamento do procedimento multibloco, foram comparadas às soluções obtidas pela aplicação do procedimento multibloco, permitindo assim quantificar qualquer desvio de solução resultante do procedimento de conexão. Não foram observadas diferenças significativas entre as soluções obtidas pela aplicação de ambos os procedimentos, indicando que o procedimento de conexão foi capaz de conectar adequadamente os blocos de diferentes refinamentos. Para o caso de fluidos viscoelásticos, a vantagem do procedimento multibloco foi ainda mais evidente, especialmente com o aumento de valor do parâmetro de Weissenberg, neste caso foi possível obter soluções para escoamento entre placas “*slip-stick*” e “*stick-slip*” utilizando 2.000 volumes de controle gerando um sistema de 12.000 equações ao passo que para aplicação de um procedimento de refino homogêneo seriam necessários 3.600 volumes resultando em um sistema de 21.600 equações.

A redução considerável de recursos computacionais obtida pela aplicação do esquema proposto, para obtenção de soluções com o mesmo nível de acurácia torna evidente a potencialidade de aplicação desta técnica.

7.2. Sugestões

O surgimento de oscilações numéricas é inerente da aplicação de esquemas de alta ordem e ocorre especialmente em regiões de elevados gradientes, por isso uma melhora significativa pode ser obtida acoplado ao procedimento proposto uma técnica apropriada para lidar com o surgimento destas oscilações. Recomenda-se utilizar um procedimento que não reduza a ordem do esquema de interpolação na região de

descontinuidade, visto que os erros gerados pela redução da precisão do esquema podem ser propagados, prejudicando assim a qualidade da solução e, possivelmente, exigindo um maior refinamento de malha para compensar a perda da precisão, aumentando assim o custo computacional envolvido.

A simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos para valores elevados do número de Weissenberg (We) ou de Deborah (De) é uma dificuldade comum em muitos trabalhos da literatura e também foi encontrada durante a realização deste trabalho. Por isso, recomenda-se introduzir ao procedimento metodologias numéricas capazes de estabilizar o procedimento de solução numérica. Esta estabilização normalmente é feita aumentando o caráter elíptico das equações de movimento através da introdução de um operador elíptico, como é o caso da formulação viscosa. Maiores detalhes sobre estas metodologias podem ser obtidas no trabalho de FAVERO *et al.* (2009).

É reportada na literatura que a convergência numérica da simulação de fluidos viscoelásticos está relacionada ao número de Weissenberg e ao grau de refino da malha, ou seja, existe uma relação $We_{crit} \approx \Delta y / \Delta x$. Neste trabalho, em alguns casos, não foi possível obter uma solução aumentando o refino da malha para dados valores de We . Verificou-se que algumas relações de malha promovem um aumento das oscilações numéricas indicando possíveis instabilidades no procedimento. Sugere-se uma melhor avaliação desta relação entre We e o grau de refinamento da malha, visando identificar se tal relação de fato existe e em caso afirmativo como esta relação se define.

Sem dúvida, um aspecto de extrema importância na aplicação do procedimento proposto é a resolução do sistema discretizado, que neste caso foi resolvido através do DASSLC (2007). Melhorar as rotinas numéricas aplicadas na resolução do sistema discretizado implica diretamente em melhorar o procedimento proposto neste trabalho. Por isso, sugere-se uma avaliação melhor das metodologias numéricas disponíveis na literatura para resolução de sistemas esparsos e seu acoplamento ao código. Para que isso seja feito de forma adequada, sugere-se também um melhor estudo do sistema de equações gerado buscando identificar características importantes do sistema tais como o grau e padrão de esparsidade e o condicionamento do sistema.

Embora não contidas neste documento, algumas simulações transientes foram realizadas aplicando a hipótese da pseudocompressibilidade, da compressibilidade artificial e da resolução direta do sistema de equações, indicando potencialidade para aplicação destas técnicas para resolução direta do acoplamento pressão-velocidade.

Sugere-se para trabalhos futuros a utilização destas abordagens para simulação de escoamentos transiente em conjunto com o uso de funções de regularização (VIEIRA *et al.*, 1998). Como testado preliminarmente para compressibilidade artificial, quando foi criada uma equação que relacionava densidade e pressão através de uma função de regularização que tinha por finalidade manter o acoplamento nos instantes iniciais da simulação e, depois de decorrido certo período de tempo, a densidade passa a assumir um valor constante, transformando a equação da continuidade novamente em uma equação algébrica, desacoplando assim o sistema.

8. APÊNDICE

Neste apêndice estão contidos todos os esquemas de interpolação de Lagrange de 4ª ordem para aplicação dos termos advectivos, difusivos, termo não lineares na parede do volume de controle e termos não lineares no centro do volume de controle para aplicação tanto aos pontos internos como aos contornos do problema. É importante ressaltar que todas as aproximações aqui apresentadas possuem precisão de 4ª ordem.

8.1. Determinação dos Coeficientes da Aproximação para os Termos Advectivos

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\left(\overline{\phi^y}\right)_i = -\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2}}$	$-\frac{1}{30}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$\left(\overline{\phi^y}\right)_0 = \frac{25}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2}} - \frac{23}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2}} - \frac{1}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{7}{2}}$	$-\frac{1}{5}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$\left(\overline{\phi^y}\right)_1 = \frac{1}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2}} - \frac{5}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2}} + \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{7}{2}}$	$\frac{1}{20}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$\left(\overline{\phi^y}\right)_{N-1} = \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{7}{2}} - \frac{5}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{20}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$\left(\overline{\phi^y}\right)_N = -\frac{1}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{7}{2}} + \frac{13}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2}} - \frac{23}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2}} + \frac{25}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{5}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$

8.2. Determinação dos Coeficientes da Aproximação para os Termos Difusivos

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\left(\frac{\partial \overline{\phi^y}}{\partial x}\right)_i = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{3}{2}} - \frac{5}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2}} + \frac{5}{4}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2}} \right)$	$-\frac{1}{1920}\Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^4 \partial x}$
$\left(\frac{\partial \overline{\phi^y}}{\partial x}\right)_0 = \frac{1}{\Delta x} \left(\begin{array}{l} -\frac{25}{6}\left(\overline{\phi^y}\right)_0 + \frac{415}{72}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2}} - \frac{161}{72}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2}} + \frac{55}{72}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2}} \\ -\frac{1}{8}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{7}{2}} \end{array} \right)$	$-\frac{1}{1920}\Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^4 \partial x}$
$\left(\frac{\partial \overline{\phi^y}}{\partial x}\right)_1 = \frac{1}{\Delta x} \left(\begin{array}{l} -\frac{5}{3}\left(\overline{\phi^y}\right)_1 - \frac{1}{2}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2}} + \frac{23}{9}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2}} - \frac{4}{9}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2}} \\ + \frac{1}{18}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{7}{2}} \end{array} \right)$	$\begin{array}{l} -\frac{1}{1920}\Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^4 \partial x} \\ -\frac{1}{24}\Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} \\ -\frac{1}{48}\Delta y^2 \Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^3 \partial x^2} \end{array}$
$\left(\frac{\partial \overline{\phi^y}}{\partial x}\right)_{N-1} = \frac{1}{\Delta x} \left(\begin{array}{l} -\frac{1}{18}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{7}{2}} + \frac{4}{9}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2}} - \frac{23}{9}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2}} + \\ \frac{1}{2}\left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2}} + \frac{5}{3}\left(\overline{\phi^y}\right)_{N-1} \end{array} \right)$	$\begin{array}{l} -\frac{1}{1920}\Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^4 \partial x} \\ -\frac{1}{24}\Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} \\ -\frac{1}{48}\Delta y^2 \Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^3 \partial x^2} \end{array}$

$\left(\overline{\frac{\partial \phi^y}{\partial x}}\right)_{i,N} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{1}{8} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i,N-\frac{7}{2}} - \frac{55}{72} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i,N-\frac{5}{2}} + \frac{161}{72} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i,N-\frac{3}{2}} - \frac{415}{72} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i,N-\frac{1}{2}} + \frac{25}{6} \left(\overline{\phi^y}\right)_{i,N} \right)$	$-\frac{1}{1920} \Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^4 \partial x}$
--	--

8.3. Determinação dos Coeficientes da Aproximação para os Termos Não lineares na Parede do Volume de Controle

$$\left(\overline{\phi_1 \phi_2^x}\right)_i = \left(\overline{\phi_1^x}\right)_i \left(\overline{\phi_2^x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{12} \left(\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{(x_0,y_0)} \right) \left(\left(\frac{\partial \phi_2}{\partial x}\right)_{(x_0,y_0)} \right) + O(h^4)$$

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

8.3.1. Aproximação de $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{(x_0,y_0)}$ na Parede do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2},j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{6} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{\frac{1}{2},j} = -\frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j-\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{3}{2},j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{\frac{5}{2},j+\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{N-\frac{1}{2},j} = \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2},j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2},j-\frac{1}{2}} + \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{3}{2},j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{N-\frac{5}{2},j+\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},0} = \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2},\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i+\frac{3}{2},\frac{3}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}}\right)_{i-\frac{1}{2},\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{6} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N} = -\frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{6} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, 0} = -\frac{9}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N} = \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, N-\frac{3}{2}} - \frac{9}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} + 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, 0} = \frac{9}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, \frac{3}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N} = -\frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, N-\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{9}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} + \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta y^2 \Delta x \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

8.3.2. Aproximação de $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big|_{(x_0, y_0)}$ na Parede do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{6} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{0, j+\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} + \frac{1}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{3} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$

8.4. Determinação dos Coeficientes da Aproximação para os Termos Não lineares no Centro do Volume de Controle

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

8.4.1. Aproximação de $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big|_{(x_0, y_0)}$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi}^{xy} \right) \Big _{\frac{5}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N+\frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, 0} = \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N+\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

8.4.2. Aproximação de $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big|_{(x_0, y_0)}$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{5}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

8.5. Determinação dos Coeficientes da Aproximação para os Termos Não lineares Relacionados à Derivada no Centro do Volume de Controle

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

8.5.1. Aproximação de $\left(\overline{\frac{\partial \phi_2}{\partial x}}\right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2}{\partial x}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{2}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{2}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{1920} \Delta x^5 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5} - \frac{1}{576} \Delta x^3 \Delta y^2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^3 \partial y^2} - \frac{1}{1920} \Delta x \Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x \partial y^4}$
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2}{\partial x}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{11}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{7}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{4} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2}{\partial x}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{7}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{12} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \frac{1}{576} \Delta x^3 \Delta y^2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^3 \partial y^2} - \frac{1}{1920} \Delta x \Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x \partial y^4} - \frac{1}{1920} \Delta x^5 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5}$
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2}{\partial x}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{7}{2}, j+\frac{1}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$+\frac{1}{12} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} - \frac{1}{576} \Delta x^3 \Delta y^2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^3 \partial y^2} - \frac{1}{1920} \Delta x \Delta y^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x \partial y^4} - \frac{1}{1920} \Delta x^5 \frac{\partial^5 \phi}{\partial x^5}$
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2}{\partial x}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{7}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}} - 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{11}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{4} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$

8.5.2. Aproximação de $\left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial y}}\right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta y \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial y}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j-\frac{3}{2}} - \frac{2}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{2}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{5}{2}}$	$-\frac{1}{1920} \Delta y^5 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^5} - \frac{1}{576} \Delta y^3 \Delta x^2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^3 \partial x^2} + \frac{1}{1920} \Delta y \Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y \partial x^4}$
$\Delta y \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial y}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{11}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{5}{2}} + \frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{7}{2}}$	$-\frac{1}{4} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4}$
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{5}{2}} - \frac{1}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{7}{2}}$	$-\frac{1}{12} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} - \frac{1}{1920} \Delta y^5 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^5} - \frac{1}{576} \Delta y^3 \Delta x^2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^3 \partial x^2} + \frac{1}{1920} \Delta y \Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y \partial x^4}$
$\Delta x \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} = \frac{1}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{7}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{12} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4} - \frac{1}{1920} \Delta y^5 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^5} - \frac{1}{576} \Delta y^3 \Delta x^2 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y^3 \partial x^2} + \frac{1}{1920} \Delta y \Delta x^4 \frac{\partial^5 \phi}{\partial y \partial x^4}$
$\Delta y \left(\overline{\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial y}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{7}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 3 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{11}{6} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{4} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^4}$

8.5.3. Aproximação de $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x}\right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} + \frac{5}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N+\frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, 0} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, \frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta x \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

8.5.4. Aproximação de $\left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y}\right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^2 \partial y} + \frac{5}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x} - \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$

$\Delta y \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} + \frac{3}{2} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x \Delta y^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial y^2 \partial x}$ $- \frac{7}{24} \Delta x^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}$
--	---

8.5.5. Aproximação de $\left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x^2} \right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $+ \frac{1}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} - 5 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}} + 4 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}}$ $- \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{7}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = - \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{7}{2}, j+\frac{1}{2}} + 4 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{5}{2}, j+\frac{1}{2}} - 5 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{3}{2}, j+\frac{1}{2}}$ $+ 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $+ \frac{1}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} + \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $+ \frac{1}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = 2 \cdot \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 5 \cdot \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} + 4 \cdot \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, \frac{1}{2}} - \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{7}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = 2 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} - 5 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} + 4 \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}}$ $- \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{\frac{7}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$

$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, 0} = -(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{7}{2}, \frac{1}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{5}{2}, \frac{1}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}$ $+ 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$
$\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial x \partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = -(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{7}{2}, N-\frac{1}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{5}{2}, N-\frac{1}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}}$ $+ 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$

8.5.6. Aproximação de $\left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y^2} \right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} - 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $+ \frac{1}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} - 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} - 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} + (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{5}{2}} - (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{7}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $+ \frac{1}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = -(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{7}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}}$ $+ 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $+ \frac{1}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = 2(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{5}{2}} - (\overline{\phi^{xy}}) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{7}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^2 \partial x^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^4}$

$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{0, N-\frac{1}{2}} = -(\overline{\phi^{xy}})_{\frac{1}{2}, N-\frac{7}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}})_{\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}})_{\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}}$ $+ 2(\overline{\phi^{xy}})_{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = 2(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$ $- (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, \frac{7}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$
$\Delta y^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial y} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = -(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, N-\frac{7}{2}} + 4(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 5(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}}$ $+ 2(\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta y^2 \Delta x^2 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial x^2 \partial y^2}$ $- \frac{7}{8} \Delta y^4 \frac{\partial^4 \phi_2}{\partial y^4}$

8.5.7. Aproximação de $\left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right)$ no Centro do Volume de Controle

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}}$ $+ \frac{1}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}$	$\frac{5}{24} \Delta x^3 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^3 \partial y}$ $\frac{5}{24} \Delta x \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^3 \partial x}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = -\frac{5}{12} (\overline{\phi^{xy}})_{\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} + \frac{3}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{3} (\overline{\phi^{xy}})_{\frac{5}{2}, j+\frac{3}{2}}$ $+ \frac{5}{12} (\overline{\phi^{xy}})_{\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{1}{3} (\overline{\phi^{xy}})_{\frac{5}{2}, j-\frac{1}{2}}$	$-\frac{23}{24} \Delta x^3 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial y \partial x^3}$ $+ \frac{5}{24} \Delta x \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^3 \partial x}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{3} (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{5}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{3}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{3}{2}, j+\frac{3}{2}}$ $+ \frac{5}{12} (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, j+\frac{3}{2}} - \frac{1}{3} (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{5}{2}, j-\frac{1}{2}} + \frac{3}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{3}{2}, j-\frac{1}{2}} - \frac{5}{12} (\overline{\phi^{xy}})_{N-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}$	$-\frac{23}{24} \Delta x^3 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial y \partial x^3}$ $+ \frac{5}{24} \Delta x \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^3 \partial x}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{5}{12} (\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} + \frac{3}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{3} (\overline{\phi^{xy}})_{i+\frac{3}{2}, \frac{5}{2}}$ $+ \frac{5}{12} (\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} (\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + \frac{1}{3} (\overline{\phi^{xy}})_{i-\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$-\frac{23}{24} \Delta x \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y \partial x^3}$ $+ \frac{5}{24} \Delta x^3 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^3 \partial x}$

$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{i+\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{5}{2}} - \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{3}{2}}$ $+ \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i+\frac{3}{2}, N-\frac{1}{2}} - \frac{1}{3} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} + \frac{3}{4} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}} - \frac{5}{12} \left(\overline{\phi^{xy}} \right) \Big _{i-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{23}{24} \Delta x \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial y \partial x^3}$ $+ \frac{5}{24} \Delta x^3 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial y^3 \partial x}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^3 \partial y}$ $- \frac{7}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x \partial y^3}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 2 \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}}$ $+ \frac{3}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^3 \partial y}$ $- \frac{7}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x \partial y^3}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{3}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + 2 \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}}$ $- \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, \frac{5}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^3 \partial y}$ $- \frac{7}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x \partial y^3}$
$\Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 \phi_2}{\partial y \partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{5}{2}} - 2 \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{3}{2}}$ $+ \frac{3}{2} \left(\frac{\partial \phi_2^{xy}}{\partial x} \right) \Big _{N-\frac{1}{2}, N-\frac{1}{2}}$	$\frac{1}{24} \Delta x^2 \Delta y \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^3 \partial y}$ $- \frac{7}{24} \Delta y^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x \partial y^3}$

8.6. Determinação dos Coeficientes da Fórmula de Desconvolução

FÓRMULA DE APROXIMAÇÃO	ERRO
$(\phi)_i = -\frac{1}{12}(\overline{\phi^x})_{i-\frac{3}{2}} + \frac{7}{12}(\overline{\phi^x})_{i-\frac{1}{2}} + \frac{7}{12}(\overline{\phi^x})_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{12}(\overline{\phi^x})_{i+\frac{3}{2}}$	$-\frac{1}{30}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$(\phi)_0 = \frac{25}{12}(\overline{\phi^x})_{\frac{1}{2}} - \frac{23}{12}(\overline{\phi^x})_{\frac{3}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^x})_{\frac{5}{2}} - \frac{1}{4}(\overline{\phi^x})_{\frac{7}{2}}$	$-\frac{1}{5}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$(\phi)_1 = \frac{1}{4}(\overline{\phi^x})_{\frac{1}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^x})_{\frac{3}{2}} - \frac{5}{12}(\overline{\phi^x})_{\frac{5}{2}} + \frac{1}{12}(\overline{\phi^x})_{\frac{7}{2}}$	$-\frac{1}{60}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$(\phi)_{N-1} = \frac{1}{12}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{7}{2}} - \frac{5}{12}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{5}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{3}{2}} + \frac{1}{4}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{60}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$
$(\phi)_N = -\frac{1}{4}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{7}{2}} + \frac{13}{12}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{5}{2}} - \frac{23}{12}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{3}{2}} + \frac{25}{12}(\overline{\phi^x})_{N-\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{5}\Delta x^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}$

9. Referências Bibliográficas

- ABOUBACAR, M., PHILLIPS, T. N., TAMADDON-JAHROMI, H. R., SNIGEREV, B. A., WEBSTER, M. F., 2004, "High-Order Finite Volume Methods for Viscoelastic Flow Problems", *Journal of Computational Physics*, v. 199, pp. 16-40.
- ABOUBACAR, M., AGUAYO, J. P., PHILLIPS, P. M., PHILLIPS, T. N., TAMADDON-JAHROMI, H. R., SNIGEREV, B. A., WEBSTER, M. F., 2005, "Modeling Pom-Pom Type Models with High-Order Finite Volume Schemes", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 126, pp. 207-220.
- ALVES, M. A., PINHO, F. T., OLIVEIRA, P. J., 2000, "Effect of a High-Resolution Differencing Schemes on Finite-Volume Predictions of Viscoelastic Flows", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 93, pp. 287-314.
- ALVES, M. A., PINHO, F. T., OLIVEIRA, P. J., 2001, "The Flow of Viscoelastic Fluids Past a Cylinder: Finite-Volume High-Resolution Methods", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 97, pp. 207-232.
- AMMARA, I., MASSON, C., 2004, "Development of a fully coupled control-volume finite element method for the incompressible Navier–Stokes equations", *International Journal for Numerical Method in Fluids*, v. 44, pp. 621-644.
- AMES, W. F., 1977, *Numerical Method for Partial Differential Equations*. 2 ed. Orlando, Academic Press.
- BERGER, M. J., 1987, "On Conservation at Grid Interfaces", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 24, No. 5, pp. 967-984.
- BIRD, R. B., ARMSTRONG, R. C., HASSAGER, O., 1987, *Dynamics of Polymeric Liquids Volume 1 Fluid Mechanics*. 2 ed. USA, John Wiley and Sons, Inc.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., 2002, *Transport Phenomena*. 2 ed. USA, John Wiley and Sons, Inc.
- BIRD, R. B., WIEST, J. M., 1995, "Constitutive Equations for Polymeric Liquids", *Annual Review Fluid Mechanics*, v. 27, pp. 169-193.
- BLASEK, J., 2001, *Computational Fluid Dynamics - Principles and Applications*. 1 ed. USA, Elsevier Science Ltd.
- BORIS, J. P., BOOK, D. L., 1973, "Flux Transport I, SHASTA, A Fluid Transport Algorithm that Works", *Journal Computation Physics*, v. 11, pp. 38-69.
- BOTELLA, O., PEYRET, R., 1998, "Spectral Results on the Lid-Driven Cavity Flow", *Computers and Fluids*, v. 27, N° 4, pp. 421-433.
- BRUNEAU, C-H., JOURON, C., 1990, "An Efficient Scheme for Solving Steady Incompressible Navier-Stokes Equations", *Journal of Computational Physics*, v. 89, pp. 389-413.
- CAI, J., TSAI, H. M., LIU, F., 2006, "A parallel viscous flow solver on multi-block overset grids", *Computer and Fluids*, v. 35, pp. 1290-1301.
- CASWELL, B., 1979, "Finite Element Method for Fluids with Memory", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 5, pp. 199.

- CEBECI, T., SHAO, J. P., KAFYERE, F., LAURENDEAU, E., 2005, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. 1 ed. Springer, Inc.
- CHEN, W. L., LIEN, F. S., LASCHZINER, M. A., 1997, "Local mesh refinement within a multi-block structured-grid scheme for general flows", *Computer Method Applied Mechanics Engineering*, v. 144, pp. 327-369.
- CLOUGH, R. W., WILSON, E. L., 1999, "Early Finite Element Research at Berkeley", *National Conference on Computational Mechanics*, Aug. 4-6.
- CROCHET, M. J., PILATE, G., 1976, "Plane Flow of a Fluid of Second Grade Through a Contraction", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 1, pp. 247-258.
- CROCHET, M. J., BEZY, M., 1979, "Numerical Solution for the Flow of Viscoelastic Fluids", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 5, pp. 210-218.
- CROCHET, M. J., WALTERS, K., 1983, "Numerical Method in Non-Newtonian Fluid Mechanics", *Annual Review Fluid Mechanics*, v. 15, pp. 241-260.
- CROCHET, M. J., DAVIES, A. R., WALTERS, K., 1984, "Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow", Amsterdam, Elsevier.
- DARWISH, M., MOUKALLED, F., 2000, "A Unified Formulation of the Segregated Class of Algorithms for Fluid Flow at all Speeds", *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, v. 37, No. 1, pp. 103-139.
- DARWISH, M., ASMAR, D., MOUKALLED, F., 2004, "A Comparative Assessment within a Multigrid Environment of Segregated Pressure-Based Algorithms for Fluid Flow at all Speeds", *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, v. 45, No. 1, pp. 49-74.
- DARWISH, M., MOUKALLED, F., 2004, "Pressure-Based Algorithms for Multifluid Flow at all Speeds – Part I: Mass Conservation Formulation", *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, v. 45, Iss. 6, pp. 495-522.
- DARWISH, M., MOUKALLED, F., 2004, "Pressure-Based Algorithms for Multifluid Flow at all Speeds – Part II: Geometric Conservation Formulation", *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, v. 45, No. 6, pp. 523-540.
- DARWISH, M., MOUKALLED, F., 2004, "The Performance of Geometric Conservation-Based Algorithms for Incompressible Multifluid Flow", *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, v. 45, Iss. 4, pp. 343-368.
- DARWISH, M., SRARJ, I., MOUKALLED, F., 2009, "A coupled Finite Volume Solver for the Solution of Incompressible Flows on Unstructured Grids", *Journal Computations Physics*, v. 228, pp. 180-201.
- DEALY, J. M., 2010, "Weissenberg and Deborah Numbers - Their Definition and Use", *The News and Information Publication of the Society of Rheology*, v. 79, N. 2, pp. 14-18.
- DENG, G. B., PIQUET, J., QUEUTEY, P., VISONNEAU, M., 1994, "Incompressible Flow Calculations with a Consistent Physical Interpolation Finite Volume Approach", *Computers and Fluids*, v. 23, pp. 1029-1047.

- DENN, M. M., 1990, "Issues in Viscoelastic Fluid Mechanics", *Annual Review Fluid Mechanics*, v. 22, pp. 13-34.
- DJOMEHRI, M. J., BISWAS, R., 2003, "Performance enhancement strategies for multi-block overset grid CFD applications", *Parallel Computing*, v. 29, pp. 1791-1810.
- DUARTE, A. S. R., MIRANDAB, A. I. P., OLIVEIRA, P. J., 2008, "Numerical and Analytical Modeling of Unsteady Viscoelastic Flows: The Start-up and Pulsating Test Case Problems", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 154, pp. 153-169.
- FAVERO, J. L., 2009, "Simulação de Escoamentos Viscoelásticos: Desenvolvimento de uma Metodologia de Análise Utilizando o Software OpenFOAM e Equações Constitutivas Diferenciais", Dissertação de M.sc., UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.
- FAVERO, J. L., SECCHI, A. R., CARDOZO, M. S. M., JASAK, H., 2010a, "Viscoelastic Flow Analysis Using the Software OpenFOAM and Differential Constitutive Equations", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 165, pp. 1625-1636.
- FAVERO, J. L., SECCHI, A. R., CARDOZO, M. S. M., JASAK, H., 2010b, "Viscoelastic Fluid Analysis in Internal and in Free Surface Flows Using the Software OpenFOAM", *Computers and Chemical Engineering*, v. 34, pp. 1984-1993.
- FARRASHKHALVAT, M., MILES, J. P., 2003, *Basic Structured Grid Generation*. 1 ed. London, Butterworth Heinemann.
- FERRY, J. D., 1980, *Viscoelastic Properties of Polymers*. 3 ed. USA, John Wiley and Sons, Inc.
- FERZIGER, J. H., PERIC, M., 2002, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3 ed. New York, Springer.
- FINLAYSON, B. A., SCRIVEN, L.E., 1966, "The Method of Weighted Residuals – A review", *Applied Mechanics Review*, v. 19, n. 9 (Sep), pp. 735-748.
- FIÉTER, N., DEVILLE, M. O., 2003, "Time-dependent Algorithms for the Simulation of Viscoelastic Flows with Spectral Element Methods: Applications and Stability", *Journal of Computational Physics*, No. 183, pp. 93-121.
- FLETCHER, C. A. J., 1991, *Computational techniques for fluid dynamics*. 2 ed. New York, Springer-Verlag.
- FOX, R. W., MCDONALD, A. T., PRITCHARD, P. J., 2004, "Introdução à Mecânica dos Fluidos", 6 ed., Ltc Editora.
- FREY, P. J., GEORGE, P. L., 1978, *Mesh Generation Application to Finite Elements*. 1 ed. United Kingdom, Hermes Science Europe.

- GHIA, U., GHIA, K. N., SHIN, C. T., 1982, "High-Re Solutions for Incompressible Flows Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method", *Journal of Computational Physics*, No. 48, pp. 387-411.
- HANBY, R. F., SILVESTER, D. J., CHEW, J. W., 1994, "A Comparison of Coupled and Segregated Iterative Solutions Techniques for Incompressible Swirling flow", *Numerical Analysis Report*, No. 246 , pp. 1-34.
- HANNAPPEL, R., 1995, HAUSER, T., FRIEDRICH, R., "A Comparison of ENO and TVD Schemes for the Computation of Shock-Turbulence Interaction", *Journal Computation Physics*, v. 121, pp. 176-184.
- HARTEN, A., 1983, "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", *Journal Computation Physics*, v. 49, pp. 357-393.
- HARTEN, A., ENGQUIST, B., OSHER, S. CHAKRAVARTHY, S., 1987, "Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes", *Journal Computation Physics*, v. 71, pp. 231.
- HAYASE, T., HUMPHREY, J. A. C., GREIF, R., 1992, "A Consistently Formulated QUICK Scheme for Fast and Stable Convergence Using Finite-Volume Iterative Calculation Procedures", *Journal Computations Physics*, v. 98, pp. 108-118.
- HIRSCH, C., 2007, *Numerical Computation of Internal and External Flows*. 2 ed. USA, Elsevier.
- HOFFMAN, J. D., 2001, *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. 2 ed. USA, Marcel-Dekker, Inc.
- HOFFMAN, K. A., CHIANG, S. T., 2000, *Computational Fluid Dynamics*. 4 ed. USA, Engineering Education System.
- HU, H. H., JOSEPH, D. D., 1990, "Numerical Simulation of Viscoelastic Flow past a Cylinder", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 37, pp. 347-377.
- HYMAN, J. M., KNAPP, R. J., SCOVEL J. C., 1992, "High Order Finite Volume Approximation of Differential Operators on Nonuniform Grids", *Physica D*, v. 60, pp. 112-138.
- KAWAHARA, M., TAKEUCHI, N., 1977, "Mixed Finite Element Method for Viscoelastic Fluid Flows", *Computers Fluids*, v. 5, pp. 33-45.
- KAWAHARA, M., HIRANO, H., 1983, " A Finite Element Method for High Reynolds Number Viscous Fluid Flow Using Two Step Explicit Scheme", *Int. J. Num. Meth. Fluids*, v. 3, pp. 137-163.
- KEILLER, R. A., 1992, "Numerical Instability of Time-dependent flows", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 43, pp. 229-246.
- KOBAYASHI, M. H., 1999, "On a Class of Padé Finite Volume Method", *Journal of Computational Physics*, v. 156, pp. 137-180.
- KEILLER, R. A., 1993, "Entry-Flow calculations for the Oldroyd-B and FENE equations", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 46, pp. 143-178.

- KOREN, B., 2006, "Computational fluid dynamics: science and tool", *Modeling, Analysis and Simulation*, REPORT MAS-E0602, pp. 1-14.
- KWAK, D., KIRIS, C., KIM, C. S., 2005, "Computational Challenges of Viscous Incompressible Flows", *Computers and Fluids*, v. 34, pp. 283-299.
- LACOR, C., SMIRNOV, S., BAELMANS, M., 2004, "A Finite Volume Formulation of Compact Central Schemes on Arbitrary Structured Grids", *Journal of Computational Physics*, v. 198, pp. 535-566.
- LARSON, R. G., 1988, "*Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*", USA, Butterworths.
- LEONARD, B. P., 1995, "Order of Accuracy of QUICK and Related Convection-Diffusion Schemes", *Appl. Math. Modeling*, v. 19, pp. 640-653.
- LIU, J., SHYY, W., 1996, "Assessment of grid interface treatments for multi-block incompressible viscous flow computation", *Computer and Fluids*, v. 25, No. 8, pp. 719-740.
- LIU, X., OSHER, S. CHAN, T., 1994, "Weighted essentially non-oscillatory schemes", *Journal Computation Physics*, v. 115, pp. 200-212.
- MALISKA, J., 2005, "*Transferência De Calor e Mecânica Dos Fluidos Computacional*", 2 ed. Brasil, Ltc Editora.
- MEINKE, M., SCHRÖDER, W., KRAUSE, E., RISTER, Th, 2002, "A Comparison of a second- and sixth-order methods for large-eddy simulations", *Computers and Fluids*, v. 31, pp. 695-718.
- MUNIZ, A. R., 2003, "Desenvolvimento de um método de Volumes Finitos de Alta Ordem para Simulação de Escoamento de Fluidos Viscoelástico", Dissertação de M.sc., UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.
- MUNIZ, A. R., SECCHI, A. R., CARDOZO, N. S. M., 2005, "Uma Nova Metodologia para simulação de Escoamento de Fluidos Viscoelásticos", *Polímeros Ciência e Tecnologia*, v. 25, pp. 53-58.
- MUNIZ, A. R., SECCHI, A. R., CARDOZO, N. S. M., 2008, "High-Order Finite Volume Method for Solving Viscoelastic Fluid Flows", *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 25, pp. 1-14.
- NICHOLAS, I. M. G., JENNIFER, A. S., 2004, "Solution of Parabolic Partial Differential Equations by a Double Collocation Method", *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 30, N. 3, pp. 300-325.
- OSSWALD, T.A, HERNÁNDEZ-ORTIZ, J. P., 2006, *Polymer Process: Modeling and Simulation*. 1 ed. USA, Hanser Gardner Publications, Inc.
- PATANKAR, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer And Fluid Flow*. 1 ed. USA, Hemisphere Publishing Corporation.

- PEREIRA, J. M. C., KOBAYASHI, M. H., PEREIRA J. C. F., 2001, "A Fourth-Order-Accuracy Finite Volume Compact Method for the Incompressible Navier-Stokes Solutions", *Journal Of Computational Physics*, v. 167, pp. 217-243.
- PETERA, M. G. N., WALTERS, K., 1977, "Long-Range Memory Effects in Flows Involving Abrupt Changes in Geometry. Part I. Flows Associated with L-Shaped and T-Shaped Geometries", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 2, pp. 353-365.
- PETZOLD, L. R., 1989, *Computing and Mathematics Research Division*, Lawrence Livermore National Laboratory, L316, PO Box 808, Livermore, CA 94559
- PILLER, M., STALIO, E., 2004, "Finite Volume Compact Scheme on Staggered grids", *Journal of Computational Physics*, v. 197, pp. 299-340.
- PILLER, M., STALIO, E., 2008, "Compact Finite Volume Schemes on Boundary-fitted Grids", *Journal of Computational Physics*, v. 227, pp. 4736-4762.
- PINTO, J. C., LAGE, P. L. C., 2001, *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*. 1 ed. Rio de Janeiro, E-Books.
- PIROZOLLI, S., 2002, "Conservative Hybrid Compact-WENO Schemes for Shock-Turbulence Interaction", *Journal Computation Physics*, v. 178, pp. 81-117.
- RENARDY, M., 1989, "Mathematical Analysis of Viscoelastic Flows ", *Annual Review Fluid Mechanics*, v. 21, pp. 21-36.
- ROUBOA, A., MONTEIRO, E., 2008 "Heat transfer in multi-block grid during solidification Performance of Finite Differences and Finite Volume methods", *Journal of Materials Processing Technology*, v. 204, pp. 451-458.
- SECCHI, A. R., 2007, "User's Manual Version 3.2", Universidade Federal do Rio Grande do Sul, DEQUI, Porto Alegre, RS, Brasil.
- SHANG, J. S., 2004, "Three decades of accomplishments in computational fluid dynamics", *Progress in Aerospace Sciences*, v. 40, pp. 173-197.
- SHAW, C. T., 1992, *Using Computational Fluid Dynamic*. 1 ed. USA, Prentice Hall.
- SHAW, M. T., MACKNIGHT, W. J, 2005, *Introduction to Polymer Viscoelasticity*. 3 ed. USA, Wiley-InterScience.
- SMITH, M.D., ARMSTRONG, R. A., BROWN, R. A., SURESHKUMAR, R., 2000, "Finite Element Analysis of Stability of Two-dimensional Viscoelastic Flow to Three-dimensional Perturbations", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 93, pp. 203-244.
- SHU, C., HU, C., SHI, J., 2002, "A Technique of Treating Negative Weights in WENO Schemes", *Journal Computation Physics*, v. 175, pp. 108-127.
- SHU, C., JIANG, G., 1996, "Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes", *Journal Computation Physics*, v. 126, pp. 202-228.
- SITE DA FLUENT, Disponível em <http://www.fluent.com/about/cfdhistory.htm> Acesso em: 22 jul. 2008.

- SWEBY, P. K., 1984, "High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 21, No 5, pp. 995-1011.
- TAFTI, D., 1996, "Comparison of Some Upwind-Biased High Order Formulation with a Second-Order Central-Difference Scheme for Time Integration of the Incompressible Navier-Stokes Equations", *Computers and Fluids*, v. 25, n. 7, pp. 647-665.
- TANG, H. S., ZHOU, T., 1999, "On Nonconservative Algorithms for Grid Interfaces", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 37, No. 1, pp. 173-193.
- TANNEHILL, J. C., ANDERSON, D. A., PLETCHER, R. H., 1997, *Computational Fluid Mechanics And Heat Transfer*. 2 ed. Washington, Taylor and Francis.
- TÓTH, G., ODSTRCIL, D., 1996, "Comparison of Some Flux Corrected Transport and Total Variation Diminishing Numerical Schemes for Hydrodynamic and Magnetohydrodynamic Problems", *Journal Computation Physics*, v. 128, pp. 82-100.
- TRINDADE, J. M. F., PEREIRA J. C. F., 2007, "On the Temporal and Spatial Fourth-Order Finite Volume Velocity de Averaging for Unsteady Incompressible Flows Simulation", *International Journal for Computer Aided Engineering and Software*, v. 24, n. 8, pp. 738-752.
- VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W., 1995, *Introduction to Computational Fluid Dynamics-The Finite Volume Method*. 1 ed. England, Longman Scientific and Technical.
- VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W., 2007, *Introduction to Computational Fluid Dynamics-The Finite Volume Method*. 2 ed. England, Person Prentice Hall.
- VAN OS, R. G.M, PHILLIPS, T. N., 2004, "Spectral Element Methods for Transient Viscoelastic Flow Problems ", *Journal Computation Physics*, v. 201, pp. 286-314.
- VIEIRA, R. C., 1998, *Métodos Diretos para Iniciação de Sistemas Algébrico-diferenciais*, Tese de D.sc., PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- WATERSON, N. P., DECONINCK, H., 2007, "Design principles for bounded higher-order convection schemes – a unified approach", *Journal Computation Physics*, v. 224, pp. 182-207.
- XUE, S. -C., TANNER, R. I., PHAN-THIEN, N., 2004, "Numerical Modeling Transient Viscoelastic Flows", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 123, pp. 33-58.
- YANG, W. Y., CAO, W., CHUNG, T., MORRIS, J., 2005, *-Applied Numerical Methods Using MATLAB*. 1 ed. USA, Wiley-Interscience.
- YAPICI, K., KARASOZEN, B., ULUDAG, Y., 2009, "Finite volume simulation of viscoelastic laminar flow in a lid-driven cavity", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mech.* v. 164, pp. 51-65.

- YOO, J. Y., NA, Y., 1991, "A Numerical Study of the Planar Contraction Flow of Viscoelastic Fluids Using the SIMPLER Algorithm", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 39, pp. 89-106.
- ZHANG, Y., JIA, Y., WANG, S. S. Y., 2007, "A Conservative Multi-block Algorithm for Two-dimensional Numerical Model", *International Journal of Computational and Mathematical Science*, v. 2, pp. 100-112.