TEMA Tend. Mat. Apl. Comput., **7**, No. 1 (2006), 63-74.

Um Método Numérico para Simular Escoamentos Incompressíveis de Fluidos de Segunda Ordem

J.L. DORICIO[1], M.F. TOMÉ[2], Laboratório de Computação de Alto Desempenho (LCAD), Instituto de Ciências da Computação e Matemática Computacional, USP, 13560-970 São Carlos, SP, Brasil.

Resumo. Neste trabalho apresenta-se um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos com superfícies livres de fluidos de segunda ordem com elasticidade moderada. As equações governantes são resolvidas utilizando uma técnica de diferenças finitas baseada na metodologia GENSMAC. Uma malha deslocada é empregada e partículas marcadoras são usadas para representar a superfície livre do fluido. O método numérico apresentado nesse trabalho é validado utilizando escoamento totalmente desenvolvido entre duas placas paralelas.

1. Introdução

O estudo numérico de escoamentos de fluidos poliméricos é de interesse industrial, ganhando popularidade a partir de aplicações em processamento de polímeros, como por exemplo em processos de extrusão de fibras, enchimento de recipientes, encapamento de fios, entre outros. Atualmente, existem muitas técnicas capazes de resolver escoamentos complexos de fluidos newtonianos com superfícies livres (ver por exemplo os trabalhos de Shy [14] e Gabriel *et al.* [7]. Fluidos não-newtonianos descritos pelos modelos de Maxwell e Oldroyd-B têm sido estudados por muitos pesquisadores e uma ampla variedade de técnicas para simular escoamentos governados por esses modelos podem ser encontrados nos trabalhos de Ryan e Dutta [13], Yoo e Na [18] e Liang e Özetkin [10], entre outros. Escoamentos viscoelásticos governados pelo modelo de fluidos de segunda ordem (SOF) foram estudados por Gast e Ellingson [8] que utilizaram o código Fidap e os resultados numéricos foram apresentados para o problema do inchamento do extrudado de fluidos com baixa elasticidade (ver também Crochet *et al.* [3] - [4] e Mitsoulis [11]).

Motivados pelo estudo de escoamentos incompressíveis de fluidos de segunda ordem com elasticidade moderada, apresentamos uma técnica numérica baseada na metodologia GENSMAC utilizando diferenças finitas em uma malha deslocada, descrita no trabalho de Tomé *et al.* [15] para fluidos newtonianos. O método desenvolvido é validado através de soluções exatas para o escoamento bidimensional entre duas placas paralelas.

[1]josedoricio@yahoo.com.br
[2]mftome@lcad.icmc.usp.br

2. Equações Básicas

As equações governantes para escoamentos incompressíveis de fluidos de segunda ordem são, conforme Bird [2], a equação de conservação de quantidade de movimento (2.1), a equação de conservação de massa (2.2) e a equação constitutiva para fluidos de segunda ordem (2.3), como segue:

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{uu}\right) = -\nabla p + \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} + \rho\mathbf{g}\ , \tag{2.1}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0 \quad \text{e} \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{\tau} = \eta_0\left[\mathbf{D} + \lambda_2 \overset{\triangledown}{\mathbf{D}} + \lambda_4\left(\mathbf{D}\cdot\mathbf{D}\right)\right]\ , \tag{2.3}$$

onde η_0, λ_2 e λ_4 são propriedades materiais e $\mathbf{D}$ é o tensor taxa de deformação. O tensor $\mathbf{D}$ e a derivada convectiva $\overset{\triangledown}{\mathbf{D}}$ são definidos por:

$$\mathbf{D} = (\nabla\mathbf{u}) + (\nabla\mathbf{u})^T \qquad \text{e} \qquad \overset{\triangledown}{\mathbf{D}} = \frac{D}{Dt}\mathbf{D} - (\nabla\mathbf{u})^T\mathbf{D} - \mathbf{D}(\nabla\mathbf{u})\ . \tag{2.4}$$

O operador derivada material é definido por $\frac{D}{Dt}\mathbf{D} = \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \nabla\cdot(\mathbf{uD})$. Para resolver as equações (2.1), (2.2) e (2.3) são necessárias condições de contorno e iniciais para o campo de velocidades $\mathbf{u}$. Nas fronteiras rígidas é suficiente a condição de não escorregamento ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) e nos injetores a velocidade é prescrita por $\mathbf{u} = \mathbf{U_{inj}}$. Considera-se um fluido viscoso escoando em uma atmosfera passiva (onde assume-se pressão zero), de forma que as componentes normal e tangencial da tensão devem ser contínuas através da superfície livre. Assume-se também que os efeitos da tensão superficial podem ser desprezados e na superfície livre as seguintes condições, apresentadas no trabalho de Batchelor [1], devem ser satisfeitas:

$$\mathbf{n}\cdot(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}) = 0 \quad \text{e} \quad \mathbf{m}\cdot(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}) = 0, \tag{2.5}$$

onde $\mathbf{n}$ e $\mathbf{m}$ denotam os vetores unitários normal e tangencial à superfície livre e $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$ é o tensor de tensões. Investigar-se-á escoamentos bidimensionais com superfícies livres em coordenadas cartesianas. Assim a equação constitutiva (2.3) pode ser escrita na forma:

$$\tau^{xx} = \eta_0\ \left(\mathrm{D}^{xx} + \Phi^{xx}\right)\ , \quad \tau^{xy} = \eta_0\ \left(\mathrm{D}^{xy} + \Phi^{xy}\right) \quad \text{e} \quad \tau^{yy} = \eta_0\ \left(\mathrm{D}^{yy} + \Phi^{yy}\right)\ . \tag{2.6}$$

onde as funções Φ^{xx}, Φ^{xy} e Φ^{yy} são dadas por:

$$\Phi^{xx} = \lambda_4\left[4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right] - \lambda_2\left[\frac{D(\mathrm{D}^{xx})}{Dt} + 4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + 2\frac{\partial u}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]\ , \tag{2.7}$$

$$\Phi^{xy} = -2\lambda_2\left[\frac{D(\mathrm{D}^{xy})}{Dt} + \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y}\right] \quad \text{e} \tag{2.8}$$

$$\Phi^{yy}=\lambda_4\left[4\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right]-\lambda_2\left[\frac{D(\mathrm{D}^{yy})}{Dt}+4\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2+2\frac{\partial v}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right] . \quad (2.9)$$

As componentes do tensor taxa de deformação, definido na equação (2.4), são:

$$\mathrm{D}^{xx}=2\frac{\partial u}{\partial x}\ , \qquad \mathrm{D}^{xy}=\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x} \quad \text{e} \quad \mathrm{D}^{yy}=2\frac{\partial v}{\partial y}\ . \qquad (2.10)$$

Introduzindo a equação (2.6) na equação (2.1) obtém-se:

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial(u^2)}{\partial x}+\frac{\partial(uv)}{\partial y}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\eta_0}{\rho}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial\Phi^{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\Phi^{xy}}{\partial y}\right]+g_x \quad \text{e} \qquad (2.11)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial(uv)}{\partial x}+\frac{\partial(v^2)}{\partial y}=-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{\eta_0}{\rho}\left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}+\frac{\partial\Phi^{xy}}{\partial x}+\frac{\partial\Phi^{yy}}{\partial y}\right]+g_y\ . \qquad (2.12)$$

Sejam L e U valores de referência para o comprimento e para a velocidade. Para resolver as equações (2.7)-(2.12) emprega-se a seguinte adimensionalização:

$$x=L\,\bar{x},\ y=L\,\bar{y},\ u=U\,\bar{u},\ v=U\,\bar{v},\ t=\frac{L}{U}\bar{t} \quad \text{e} \quad p=\rho U^2\bar{p}\ . \qquad (2.13)$$

Introduzindo essas variáveis adimensionais nas equações (2.6)-(2.12) obtém-se as seguintes equações adimensionais[3]:

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0\ , \qquad (2.14)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial(u^2)}{\partial x}+\frac{\partial(uv)}{\partial y}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{1}{Re}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial\Phi^{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\Phi^{xy}}{\partial y}\right]+\frac{1}{Fr^2}g_x\ , \qquad (2.15)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{\partial(uv)}{\partial x}+\frac{\partial(v^2)}{\partial y}=-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{1}{Re}\left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}+\frac{\partial\Phi^{xy}}{\partial x}+\frac{\partial\Phi^{yy}}{\partial y}\right]+\frac{1}{Fr^2}g_y\ , \qquad (2.16)$$

$$\tau^{xx}=\frac{1}{Re}\left(\mathrm{D}^{xx}+\Phi^{xx}\right),\ \tau^{xy}=\frac{1}{Re}\left(\mathrm{D}^{xy}+\Phi^{xy}\right) \quad \text{e} \quad \tau^{yy}=\frac{1}{Re}\left(\mathrm{D}^{yy}+\Phi^{yy}\right)\ , \qquad (2.17)$$

onde $\mathrm{D}^{xx}, \mathrm{D}^{xy}$ e D^{yy} são definidos pelas equações em (2.10) e as funções não-newtonianas podem ser escritas como:

$$\Phi^{xx}=\kappa\left[4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right]-De\left[-\frac{D(\mathrm{D}^{xx})}{Dt}+4\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+2\frac{\partial u}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\right]\ , \qquad (2.18)$$

[3]As barras foram removidas para simplificar a notação.

$$\Phi^{xy} = -2De\left[-\frac{D(\mathrm{D}^{xy})}{Dt} + \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y}\right] \quad \text{e} \tag{2.19}$$

$$\Phi^{yy} = \kappa\left[4\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right] - De\left[-\frac{D(\mathrm{D}^{yy})}{Dt} + 4\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + 2\frac{\partial v}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)\right], \tag{2.20}$$

onde $Re = \frac{\rho U L}{\eta_0}$, $Fr = \frac{U}{\sqrt{Lg}}$ e $De = \frac{\lambda_2 U}{L}$ são os números adimensionais de Reynolds, Froude e Deborah, respectivamente. O número adimensional κ é definido como $\kappa = \frac{\lambda_4 U}{L}$. Para escoamentos cisalhantes simples em regime permanente, os parâmetros materiais λ_2 e λ_4 são conhecidos como o primeiro e o segundo coeficientes de diferença de tensões normais, definidos por:

$$\Psi_1 = \frac{N_1}{(\mathrm{D}^{xy})^2} = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{(\mathrm{D}^{xy})^2} = -2\eta_0\lambda_2 \quad \text{e} \quad \Psi_2 = \frac{N_2}{(\mathrm{D}^{xy})^2} = \frac{\tau_{22} - \tau_{33}}{(\mathrm{D}^{xy})^2} = 2\eta_0\lambda_4 \ .$$

De acordo com Bird [2], $|\lambda_4| \approx \frac{1}{10}|\lambda_2|$ e portanto, a contribuição do segundo coeficiente de diferença de tensões normais pode ser desprezada. Além disso, nesse trabalho iremos considerar escoamentos que atingem regime permanente e portanto, o efeito das derivadas materiais que aparecem nos termos não-newtonianos da equação constitutiva, definidos pelas equações (2.18)-(2.20) será desprezado.

3. Método Numérico

Para resolver as equações (2.14)-(2.20) emprega-se uma metodologia baseada no algoritmo GENSMAC, descrita no trabalho de Tomé *et al.* [15] para fluidos newtonianos generalizados. Supõe-se que o campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ é conhecido e que são dadas condições iniciais e de contorno para a velocidade e para a pressão. A velocidade e a pressão no tempo $t = t_n + \delta t$ são calculadas utilizando o seguinte procedimento. Inicialmente, utilizando $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ calcula-se as componentes do tensor taxa de deformação D^{xx}, D^{xy} e D^{yy} e em seguida Φ^{xx}, Φ^{xy} e Φ^{yy}, para todos os pontos da malha. As equações de diferenças finitas para calcular Φ^{xx}, Φ^{xy} e Φ^{yy} são apresentadas na seção 4.1. Seja $\widetilde{p}(\mathbf{x}, t)$ um campo de pressão que coincide com a condição de pressão na superfície livre. Esse campo de pressão é calculado através da equação (2.5). Detalhes sobre os calculos de $\widetilde{p}(\mathbf{x}, t)$ são apresentados na seção 4.2. Inserindo $\widetilde{p}(\mathbf{x}, t)$ em (2.15) e (2.16) calcula-se um campo de velocidades intermediário $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$:

$$\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial t} + \frac{\partial (u^2)}{\partial x} + \frac{\partial (uv)}{\partial y} = -\frac{\partial \widetilde{p}}{\partial x} + \frac{1}{Re}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial \Phi^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial y}\right] + \frac{1}{Fr^2} g_x \quad \text{e} \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial t} + \frac{\partial (uv)}{\partial x} + \frac{\partial (v^2)}{\partial y} = -\frac{\partial \widetilde{p}}{\partial y} + \frac{1}{Re}\left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial \Phi^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \Phi^{yy}}{\partial y}\right] + \frac{1}{Fr^2} g_y \ , \tag{3.2}$$

com $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t_n) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n)$ e as condições de contorno apropriadas para $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ em $t = t_n$. As equações (3.1) e (3.2) são resolvidas através de um método de diferenças finitas explícito. Pode ser mostrado (no trabalho de Tomé *et al.* [15]) que $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ possui a vorticidade correta no tempo t, contudo $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ não conserva massa. Seja $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ definida por:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = -\nabla\psi(\mathbf{x}, t) \ , \tag{3.3}$$

onde $\psi(\mathbf{x}, t)$ é uma função com a seguinte propriedade:

$$\nabla^2\psi(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \ . \tag{3.4}$$

Utilizando (3.4) e (3.3), $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ conserva massa e contém a vorticidade correta no tempo t. Uma equação para a pressão é obtida subtraindo (2.15) de (3.1) e (2.16) de (3.2):

$$\frac{\partial(\mathbf{u} - \widetilde{\mathbf{u}})}{\partial t} = -\nabla(p(\mathbf{x}, t) - \widetilde{p}(\mathbf{x}, t)) \ . \tag{3.5}$$

Introduzindo (3.3) em (3.5) obtém-se:

$$-\frac{\partial}{\partial t}\nabla\psi(\mathbf{x}, t) = -\nabla(p(\mathbf{x}, t) - \widetilde{p}(\mathbf{x}, t)) \ . \tag{3.6}$$

Comutando os operadores na equação (3.6), obtém-se:

$$p(\mathbf{x}, t) = \widetilde{p}(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \ . \tag{3.7}$$

4. Aproximação por Diferenças Finitas

Para resolver as equações (3.1)–(3.7) emprega-se o método de diferenças finitas em uma malha estruturada deslocada, conforme descrito no trabalho de Harlow e Welsh [9]. Nesse tipo de malha, a pressão e as componentes não-newtonianas são posicionadas no centro da célula, enquanto que as componentes da velocidade são deslocadas em fatores de $\frac{\delta x}{2}$ e $\frac{\delta y}{2}$. As células da malha podem ser de vários tipos: células vazias (E) se não contém de fluido; células cheias (F) se contém fluido e não possuem faces em contato com células vazias; células de superfície (S) se contém fluido e possuem pelo menos uma face em contato com faces de células vazias; células de contorno (B) se definem contornos rígidos; células de injetor (I) se definem o injetor e células de ejetor (O) se definem o ejetor.

As derivadas temporais nas equações de quantidade de movimento (3.1) e (3.2) são aproximadas através de um método explícito, por exemplo Euler ou até mesmo um método de Runge-Kutta de quarta ordem, e as derivadas espaciais são discretizadas por diferenças centrais. Os temos convectivos são aproximados por um método *upwind* de alta ordem, nesse trabalho foi empregado o método VONOS descrito no trabalho de Varonos *et al.* [17] e os detalhes da implementação podem ser encontrados em Ferreira *et al.* [6]. Considerando o método de Euler explícito[4], as componentes da velocidade intermediária $\widetilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t)$ são calculadas pelas seguintes equações:

$$\begin{aligned}
\widetilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} &= u_{i+\frac{1}{2},j} + \delta t \Bigg\{ -\mathbf{conv}(uu)\Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \mathbf{conv}(vu)\Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\frac{\widetilde{p}_{i+1,j}-\widetilde{p}_{i,j}}{\delta x}\right) \\
&+ \frac{1}{Re}\left[\frac{u_{i+\frac{3}{2},j}-2u_{i+\frac{1}{2},j}+u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1}-2u_{i+\frac{1}{2},j}+u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{\delta y^2} + \frac{\Phi^{xx}_{i+1,j}-\Phi^{xx}_{i,j}}{\delta x} \right. \\
&\left. + \frac{\Phi^{xy}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}-\Phi^{xy}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\delta y}\right] + \frac{1}{Fr_2} g_x \Bigg\} \quad \text{e}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

$$\begin{aligned}
\widetilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} &= v_{i,j+\frac{1}{2}} + \delta t \Bigg\{ -\mathbf{conv}(uv)\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \mathbf{conv}(vv)\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\widetilde{p}_{i,j+1}-\widetilde{p}_{i,j}}{\delta y}\right) \\
&+ \frac{1}{Re}\left[\frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}}-2v_{i,j+\frac{1}{2}}+v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} + \frac{v_{i,j+\frac{3}{2}}-2v_{i,j+\frac{1}{2}}+v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y^2} \right. \\
&\left. + \frac{\Phi^{xy}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}-\Phi^{xy}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\delta x} + \frac{\Phi^{yy}_{i,j+1}-\Phi^{yy}_{i,j}}{\delta y}\right] + \frac{1}{Fr_2} g_y \Bigg\} \ .
\end{aligned} \tag{4.2}$$

onde os termos $\mathbf{conv}(uu)\big|_{i+\frac{1}{2},j}$, $\mathbf{conv}(vu)\big|_{i+\frac{1}{2},j}$, $\mathbf{conv}(uv)\big|_{i,j+\frac{1}{2}}$ and $\mathbf{conv}(vv)\big|_{i,j+\frac{1}{2}}$ representam os termos convectivos, respectivamente.

A equação de Poisson (3.4) é discretizada no centro da célula através do operador laplaciano de cinco pontos:

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

As velocidades finais são obtidas discretizando a equação (3.3):

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

4.1. Cálculo das Funções Φ^{xx}, Φ^{xy} e Φ^{yy}

No cálculo das velocidades intermediárias (4.1)-(4.2) deve-se calcular as funções Φ^{xx}, Φ^{xy} e Φ^{yy}. A discretização das equações (2.18)-(2.20) é dada por:

[4]Para simplificar os cálculos foi utilizado o método de Euler explícito, porém nas implementações foi utilizado o método de Runge Kutta de quarta ordem.

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

$$\Phi^{xy}_{i,j} = -2De\left[\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j}\left.\frac{\partial v}{\partial x}\right|_{i,j} + \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j}\left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_{i,j}\right] \quad \text{e}$$

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

Nessas equações é necessário calcular as derivadas $\frac{\partial u}{\partial x}$ e $\frac{\partial v}{\partial y}$ que são aproximadas através de diferenças centrais:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} \quad \text{e} \quad \left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} \ .$$

Para calcular as derivadas cruzadas $\frac{\partial u}{\partial y}$ e $\frac{\partial v}{\partial x}$ aplica-se diferenças centrais, se possível, como segue:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} \quad \text{e} \quad \left.\frac{\partial v}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} \ , \quad \text{com}$$

$$u_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\left(u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1}\right) \quad \text{e}$$

$$v_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4}\left(v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}}\right) \ .$$

Expressões similares para $u_{i,j-\frac{1}{2}}$ e $u_{i-\frac{1}{2},j}$ são obtidas. Contudo, se a célula (i,j) possui uma ou mais faces em contato com faces de células vazias, então $\frac{\partial v}{\partial x}$ e $\frac{\partial u}{\partial y}$ são calculadas por um método de diferenças regressivas ou progressivas, de acordo com a face que está em contato com a face da célula vazia.

Por exemplo, se as faces $\left(i, j+\frac{1}{2}\right)$ e $\left(i+\frac{1}{2}, j\right)$ estão em contato com uma face de célula vazia, têm-se:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\delta y} \quad \text{e} \quad \left.\frac{\partial v}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{v_{i,j} - v_{i-1,j}}{\delta x} \ , \quad \text{com}$$

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

4.2. Aproximação das Tensões na Superfície Livre

Sejam $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ e $\mathbf{m} = (n_y, -n_x)$ os vetores normal e tangencial à superfície livre, respectivamente. As tensões na superfície livre (2.5) podem ser escritas como:

$$p - \frac{1}{Re}\left[\Phi^{xx}n_x^2 + \Phi^{yy}n_y^2 + 2n_xn_y\left(\Phi^{xy} + \mathrm{D}^{xy}\right)\right] = 0 \quad \text{e} \tag{4.3}$$

$$\left(\mathrm{D}^{xx} - \mathrm{D}^{yy} + \Phi^{xx} - \Phi^{yy}\right)n_xn_y + \left(\mathrm{D}^{xy} + \Phi^{xy}\right)\left(n_x^2 - n_y^2\right) = 0 \ . \tag{4.4}$$

Para aplicar essas condições, assume-se que a malha é fina o suficiente de tal forma que a superfície livre possa ser representada localmente por uma superfície linear paralela a um dos eixos coordenados ou é inclinada a 45^o. Nesse caso, as condições (4.3) e (4.4) são aplicadas como segue:

i) Células de superfície contendo somente uma face em contato com face de célula vazia: nessas células assume-se que a superfície livre é horizontal ou vertical, de acordo com a face que está em contato com a célula vazia. Nesse caso, o vetor normal pode ser escrito como $\mathbf{n} = (\pm 1, 0)$ ou $\mathbf{n} = (0, \pm 1)$. Considerando $\mathbf{n} = (1, 0)$, por exemplo, as equações (4.3) e (4.4) se reduzem a:

$$\widetilde{p} + \frac{1}{Re}\left(\mathrm{D}^{xx} + \Phi^{xx}\right) = 0 \quad \text{e} \tag{4.5}$$

$$\mathrm{D}^{xy} + \Phi^{xy} = 0 \; . \tag{4.6}$$

Nesse caso, para calcular a velocidade $\widetilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}$ são necessários $\widetilde{p}_{i,j}$, $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$, que são obtidos como segue: calcula-se $u_{i+\frac{1}{2},j}$ aplicando a equação de conservação de massa no centro da célula de superfície:

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i-\frac{1}{2},j} + \frac{\delta x}{\delta y}\left(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}\right) \; . \tag{4.7}$$

O valor de $v_{i+1,j+\frac{1}{2}}$ é então calculado aproximando (4.6) no canto $(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})$ da célula:

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

A derivada $\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ é aproximada por diferenças regressivas, enquanto que $\left.\frac{\partial v}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ é aproximada por diferenças centrais em $(i, j+\frac{1}{2})$. A pressão $\widetilde{p}_{i,j}$ é calculada aplicando (4.5) no centro da célula, logo $\widetilde{p}_{i,j} = \frac{1}{Re}\left(\mathrm{D}^{xx}_{i,j} + \Phi^{xx}_{i,j}\right)$.

ii) Células de superfície contendo duas faces adjacentes em contato com faces de células vazias: nessas células assume-se que a superfície é 45^o inclinada entre os eixos coordenados. O vetor normal toma a forma $\mathbf{n} = \left(\pm\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$. Por exemplo, considerando $\mathbf{n} = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ pode ser mostrado que as condições (4.3) e (4.4) são escritas como:

$$\widetilde{p} = \frac{1}{2Re}\left(\mathrm{D}^{xy}_{i,j} + \Phi^{xx} + \Phi^{yy} + \Phi^{xy}\right) \quad \text{e} \tag{4.8}$$

$$\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} + De\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 - De\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 = 0 \; . \tag{4.9}$$

A equação (4.9) pode ser aproximada por:

$$\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}-v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}-\frac{u_{i+\frac{1}{2},j}-u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x}+De\left\{\left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j}+u_{i-\frac{1}{2},j}-u_{i+\frac{1}{2},j-1}-u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{2\delta y}\right)^2\right.$$
$$\left.\left(\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}+v_{i,j-\frac{1}{2}}-v_{i-1,j+\frac{1}{2}}-v_{i-1,j-\frac{1}{2}}}{2\delta x}\right)^2\right\}=0\ . \tag{4.10}$$

A equação (4.10) e a equação de conservação de massa (4.7) geram um sistema não linear 2×2 nas incógnitas $u_{i+\frac{1}{2},j}$ e $v_{i,j+\frac{1}{2}}$. Para resolver esse sistema, introduz-se $u_{i+\frac{1}{2},j}$ de (4.7) em (4.10), obtendo-se uma equação de segundo grau. Essa equação gera duas soluções para $v_{i,j+\frac{1}{2}}$. Contudo, se $\delta x=\delta y=h$ pode ser mostrado que o termo quadrático se anula e nesse caso $v_{i,j+\frac{1}{2}}$ é unicamente determinado. Após calcular $v_{i,j+\frac{1}{2}}$, o valor de $u_{i+\frac{1}{2},j}$ é obtido utilizando-se a equação da continuidade. A pressão é calculada aplicando (4.8) no centro da célula de superfície, logo $\widetilde{p}_{i,j}=\frac{1}{2Re}\left(\mathrm{D}^{xy}_{i,j}+\Phi^{xx}_{i,j}+\Phi^{yy}_{i,j}+\Phi^{xy}_{i,j}\right)$.

iii) Células de superfície contendo duas faces opostas ou mais faces em contato com faces de células vazias: essas células não fornecem informações para aproximar o vetor normal. Nessas células assume-se que a pressão é nula e utiliza-se a equação de conservação de massa para ajustar uma velocidade. Por exemplo, se a célula de superfície possui três faces em contato com faces de células vazias assume-se $\widetilde{p}_{i,j}=0$ e $u_{i+\frac{1}{2},j}=u_{i-\frac{1}{2},j}-v_{i,j+\frac{1}{2}}+v_{i,j-\frac{1}{2}}$, considerando $\delta x=\delta y$. Quando células desse tipo aparecem na simulação deve-se refinar a malha.

4.3. Controle do Passo no Tempo e Movimento das Partículas Marcadoras

Utiliza-se um procedimento de controle do passo no tempo durante todo ciclo computacional. Esse procedimento foi apresentado no trabalho de Tomé *et al.* [16] para escoamentos newtonianos e é baseado na restrição de estabilidade $\delta t=\zeta\min(\delta t_1,\delta t_2)$ onde $\delta t_1<\frac{\delta\mathbf{x}}{\max|\mathbf{u}_{max}|}$, $\delta t_2<\frac{\delta x^2}{4}Re$, $\delta x=\delta y$ e $0<\zeta<1$.

O fator ζ é empregado como uma medida de segurança para permitir que a estabilidade seja satisfeita pois $\max|\mathbf{u}_{max}|$ não é conhecido a priori. Detalhes sobre a implementação desse procedimento de controle de tempo são apresentados no trabalho de Tomé *et al.* [16]. Normalmente, em escoamentos de fluidos newtonianos o fator ζ assume o valor de 0.5. Contudo, para simulações de fluidos de segunda ordem um valor mais restritivo é empregado, dependendo do valor do número de Deborah. Nos resultados apresentados nesse trabalho utiliza-se $\zeta=0.1$.

Após o cálculo das velocidades finais, o último passo do método numérico descrito na seção 3 é atualizar a posição das partículas marcadoras. A nova posição das partículas marcadoras é obtida resolvendo $\frac{d\mathbf{x}_p}{dt}=\mathbf{u}_p$ através do método de Euler explícito. A velocidade $\mathbf{u}_p$ da partícula é determinada através de uma interpolação bilinear utilizando as quatro velocidades mais próximas. Detalhes dos movimentos das partículas podem ser encontrados no trabalho de Tomé *et al.* [16].

5. Validação

As equações descritas na seção 4 foram implementadas no código FreeFlow-2D, descrito no trabalho de Oliveira e Castelo Filho [12]. O método numérico foi validado através da simulação do escoamento entre placas paralelas. Considera-se que a distância entre as placas é L e o comprimento é $15L$. No injetor prescreve-se um escoamento completamente desenvolvido definido por $u(y) = -4\frac{U}{L}\left(y - \frac{L}{2}\right)^2 + U$. O campo de velocidades nas paredes satisfaz a condição de não escorregamento, enquanto que no ejetor utiliza-se condições de Neumann. A simulação inicia com o espaço entre as placas vazio e em seguida o fluido é injetado até que esse espaço esteja completamente preenchido. Pode ser verificado sob condições de cisalhamento simples em regime permanente, que as componentes do tensor de tensão extra se reduzem a:

$$\tau^{xx} = -\frac{2}{Re}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \ , \ \tau^{xy} = \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) \quad \text{e} \quad \tau^{yy} = 0 \ . \tag{5.1}$$

Para simular esse problema foi utilizado os seguintes dados: $L = 1\text{cm}$, $U = 1\text{ms}^{-1}$ e $g_x = g_y = 0$.[5] As propriedades materiais são: $\nu_0 = \frac{\eta_0}{\rho} = 0.01\text{m}^2\text{s}^{-1}$ e $\lambda_2 = 0.0045\text{s}$. Os parâmetros de escala são L, U e ν_0 gerando $Re = UL/\nu_0 = 1$ e $De = \lambda_2 U/L = 0.45$. Para demonstrar a convergência do método numérico, apresentado nesse trabalho, o problema foi simulado em três malhas distintas até atingir regime permanente. Na primeira malha $\delta x = \delta y = 0.125\text{cm}$ (8×120 células), na segunda malha $\delta x = \delta y = 0.0625\text{cm}$ (16×240 células) e na terceira malha $\delta x = \delta y = 0.03125\text{cm}$ (32×480 células).

Os erros foram calculados na norma l_2 e são definidos pelas seguintes equações:

$$E(\tau^{xx}) = \frac{\sum(\tau^{xx} - \tau^{xx}_{numer})^2}{\sum \tau^{xx}} \quad \text{e} \quad E(\tau^{xy}) = \frac{\sum(\tau^{xy} - \tau^{xy}_{numer})^2}{\sum \tau^{xy}} \ , \tag{5.2}$$

onde τ^{xx} e τ^{xy} são dados por (5.1).

Tabela 1: Erros calculados na norma l_2 para a validação do método numérico.

	Malha 1	**Malha 2**	**Malha 3**
$E(\tau^{xx})$	$6.92\,10^{-2}$	$9.52\,10^{-3}$	$1.22\,10^{-3}$
$E(\tau^{xy})$	$1.56\,10^{-2}$	$1.74\,10^{-3}$	$2.02\,10^{-4}$

A **Tabela 1** mostra os erros entre a solução exata e a numérica utilizando os resultados numéricos das simulações e as equações em (5.2). Podemos observar na **Tabela 1** o decaimento dos erros com o refinamento da malha, demonstrando a convergência do método numérico apresentado nesse trabalho.

[5] Os efeitos da gravidade podem ser desprezados nesse caso.

6. Conclusões

Nesse trabalho foi apresentado um método numérico para simular escoamentos incompressíveis de fluidos de segunda ordem com elasticidade moderada. A validação foi realizada através da simulação de um escoamento entre duas placas planas e paralelas. Os resultados obtidos foram comparados com a respectiva solução analítica e através do refinamento da malha o decaimento dos erros mostraram a convergência do método numérico. Resultados numéricos demonstrando a capacidade dessa nova técnica para resolver problemas viscoelásticos para os problemas do inchamento do extrudado e da contração planar para $De \leq 0.8$ podem ser encontrados em Doricio [5].

Abstract. This work presents a numerical method for simulating viscoelastic free surface flows of a second order fluid with moderate elasticity. The governing equations are solved by a finite difference technique based on a GENSMAC type method. A staggered grid is employed and marker particles are used to represent the fluid free surface. The numerical method presented in this paper is validated by simulating the flow between two parallel plates and the results are compared to the respective analytic solution.

Referências

[1] G. K. Batchelor. “An Introduction to Fluid Dynamics”. Cambridge Univ. Press, 1967.

[2] R. B. Bird, R. C. Armstrong, e O. Hassager. “Dynamics of Polymeric Liquids”. John Wiley & Sons, 1987.

[3] M. J. Crochet e R. Keunings. Finite element analysis of die-swell of a highly elastic fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **10** (1982), 339-356.

[4] M. J. Crochet e K. Walters. Numerical simulation of non-newtonian flow. *Elsevier*, 1984.

[5] J. L. Doricio. “GENSMAC-SOF: Um Método Numérico para Simular Escoamentos Incompressíveis de Fluidos de Segunda Ordem”, Dissertação de Mestrado, ICMC, USP, São Carlos, SP, 2003.

[6] V. G. Ferreira, M. F. Tomé, N. Mangiavacchi, N. Castelo e J. A. Cuminato. High order upwinding and the hydraulic jump. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, **39** (2002), 549-583.

[7] M. Gabriel, T. Dornseifer e T. Neunhoeffer. Numerical simulation in fluid dynamics: a practical experiments. *Society of Industrial and Applied Mathematics*, 1998.

[8] L. Gast e W. Ellingson. Die swell measurements of second-order fluids: Numerical experiments. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **29** (1999), 1-18.

[9] F. H. Harlow e J. E. Welsh. Numerical calcularion of a time dependent viscous incompressible flow. *Phys. Fluids*, **8** (1965), 2182-2189.

[10] Y. Liang, A. Özetkin e S. Neti. Dynamics of viscoelastic jets of polymeric liquid extrudate. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **81** (1999), 105-132.

[11] E. Mitsoulis. Three-dimensional non-newtonian computations of extrudate swell with the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **180** (1999), 333-344.

[12] J. Oliveira e A. Castelo Filho. Um sistema de simulação de fluidos com superfícies livres bidimensionais, em "Seleta do XXII CNMAC"(J.M. Balthazar, S.M. Gomes e A. Sri Ranga, eds.). *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, vol. 1, pp. 179-192, SBMAC, 2000.

[13] M. E. Ryan e A. Dutta. A finite difference simulation of extrudate swell. *Proc. 2nd. World Congr. Chem. Eng.*, VI:277-281, 1981.

[14] W. Shyy. "Computational Techniques for Complex Transport Phenomena", Cambridge University Press, 1997.

[15] M. F. Tomé, B. Duffy e S. McKee. A numerical method for solving unsteady non-newtonian free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **62** (1996), 9-34.

[16] M. F. Tomé e S. McKee. GENSMAC: A computational marker-and-cell method for free surface. *Journal of Computational Physics*, **110** (1994), 171-189.

[17] A. Varonos e G. Bergeles. Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **26** (1998), 1-16.

[18] J. Yoo e Y. Na. A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the simpler algorithm. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, **30** (1991), 89-106.