

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

Cristiano Rodrigues Garibotti

**UMA METODOLOGIA DE VOLUMES FINITOS PARA A
SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS VISCOELÁSTICOS COM
MALHAS NÃO ESTRUTURADAS HÍBRIDAS**

Florianópolis
2014

Cristiano Rodrigues Garibotti

**UMA METODOLOGIA DE VOLUMES FINITOS PARA A
SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS VISCOELÁSTICOS COM
MALHAS NÃO ESTRUTURADAS HÍBRIDAS**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Engenharia Mecânica da Universidade
Federal de Santa Catarina para a obtenção do
grau de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Clovis Raimundo Maliska, Ph. D.
Coorientador: Fernando Sandro Velasco Hur-
tado, Dr. Eng.

Florianópolis
2014

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Garibotti, Cristiano Rodrigues

Uma metodologia de volumes finitos para a simulação de escoamentos viscoelásticos com malhas não estruturadas híbridas / Cristiano Rodrigues Garibotti ; orientador, Clovis Raimundo Maliska ; coorientador, Fernando Sandro Velasco Hurtado. - Florianópolis, SC, 2014.

204 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Modelagem numérica. 3. Fluidos viscoelásticos. 4. Método dos volumes finitos baseado em elementos. 5. Fluência do sal. I. Maliska, Clovis Raimundo. II. Hurtado, Fernando Sandro Velasco. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

Cristiano Rodrigues Garibotti

**UMA METODOLOGIA DE VOLUMES FINITOS PARA A
SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS VISCOELÁSTICOS COM
MALHAS NÃO ESTRUTURADAS HÍBRIDAS**

Esta tese foi julgada aprovada para a obtenção do título de "Doutor em Engenharia Mecânica", e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 24 de março de 2014

Prof. Armando Albertazzi Gonçalves Jr., Dr. Eng.
Coordenador

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph. D.
Orientador

Fernando Sandro Velasco Hurtado, Dr. Eng.
Coorientador

Banca examinadora:

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph. D.
Presidente

Prof. José Alberto Cuminato, Ph. D.
Relator

Prof. Miguel Vaz Júnior, Ph. D.

Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior, Ph. D.

Prof. Antônio Fábio Carvalho Silva, Dr. Eng.

Prof. José Antônio Bellini da Cunha Neto, Dr. Eng.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Clovis R. Maliska, meu Orientador, por ter confiado em mim, dando-me oportunidade de desenvolver este trabalho e de integrar a equipe do SINMEC. Por todos os conhecimentos transmitidos incentivo e sábias sugestões.

Ao pesquisador Fernando S. V. Hurtado, meu Coorientador, pela valiosa orientação na fase crucial do desenvolvimento deste trabalho, principalmente nos aspectos da modelagem física e numérica.

À toda equipe do SINMEC, pelo apoio técnico, companheirismo e colaboração diária. Em especial ao sempre solícito *expert* em C++ Gustavo Ribeiro pela solução dos *build errors*, ao colega Hermínio Honório, por toda sua ajuda na confecção do código computacional e à secretária Tatiane Martins, pelo auxílio e colaboração constantes em nossas atividades cotidianas no laboratório SINMEC.

Ao Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (PRH-ANP), pela bolsa de estudos.

Aos meus pais, Heron e Maria do Carmo, por terem me dado uma excelente educação e valores, por serem modelos de coragem, pelo apoio incondicional, incentivo, amizade e paciência demonstrados e por todo amor e carinho que me deram em todos os momentos da minha vida.

Aos meus irmãos, Alessandro, Daniel e Viviane, por todo apoio psicológico e amizade, pelo incentivo, pela confiança e compreensão no decorrer desses anos. Muito obrigado por serem meus conselheiros e amigos e por terem me dado duas sobrinhas e um sobrinho.

Ao “meu grande amor”, Christiane, por todo apoio, amizade, companheirismo e compreensão. Foram muitas semanas separados e muitas privações que só o amor consegue superar. Por me ensinar que a família é a base de tudo e que o amor é capaz de tornar qualquer sonho real. Enfim, obrigado por estar ao meu lado.

À Deus...

“Motivado pelo desafio”.

RESUMO

Este trabalho apresenta uma metodologia numérica de volumes finitos baseado em elementos para a resolução de escoamentos bidimensionais com aplicação à simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos. O método empregado, o EbFVM-Element-based Finite Volume Method, pode utilizar malhas não estruturadas híbridas, constituídas tanto de elementos quadriláteros como triangulares, o que permite a discretização de geometrias complexas. Para vencer o problema do desacoplamento parcial dos campos de pressão e velocidade devido a uso de um arranjo colocalizado de variáveis, foi empregada uma função de interpolação do tipo FIELDS. O uso desta função de interpolação também promoveu a inclusão da pressão e da tensão na equação de conservação da massa melhorando, com isso, o condicionamento da matriz de coeficientes do sistema de equações discretizadas. Os termos advectivos na equação constitutiva foram aproximados utilizando o esquema SPU (do inglês, *Single Point Upwind*).

A simulação de escoamentos viscoelásticos requer, para um problema 2D, a solução de um problema de seis incógnitas (pressão, velocidades u e v , tensões normais nas direções x e y e a tensão cisalhante) já que não é possível deixar as tensões em termos das velocidades, como feito para fluidos newtonianos. A estratégia de solução é segregada, isto é, resolver o problema do escoamento desacoplado das equações constitutivas e promover a iteração entre estes problemas. Foram considerados para avaliação do algoritmo exemplos clássicos da literatura comumente utilizados para testar diferentes aspectos das soluções numéricas. São eles, escoamento entre placas planas, escoamento em uma cavidade fechada com tampa móvel e o escoamento em uma contração planar 4:1. Além destes exemplos clássicos, o escoamento, com baixo número de Reynolds (creeping flow), de um fluido de Oldroyd-B ao redor de um cilindro foi resolvido de modo a aproximar, de uma maneira muito simplificada, o escoamento do sal em torno de um poço de petróleo perfurado em uma zona salina. Em todos os casos o algoritmo foi eficaz na obtenção de uma solução fisicamente consistente e com robustez numérica.

Palavras-chaves: Fluidos Viscoelásticos. Oldroyd-B. Método dos volumes finitos baseado em elementos. Malhas não estruturadas. Cell-vertex. Fluência do sal.

ABSTRACT

This work presents an element based finite volume methodology (EbFVM) for solving two-dimensional viscoelastic fluid flows. The method can easily deal with hybrid unstructured meshes consisting of both triangular and quadrilateral elements, which allows the discretization of complex geometries. To overcome the checkerboard problem, which arises from the collocated arrangement of variables in the computational grid, it is employed a new interpolation function of the FIELDS type. The use of this interpolation function also promoted the inclusion of pressure and stresses in the mass conservation equation, improving conditioning of the coefficient matrix of the system of discretized equations. The advection terms in the constitutive equations are approximated using the single point upwind scheme. It was adopted a segregated solution procedure, which consists in solving separately the mass-momentum and constitutive equations. For testing different aspects of the numerical solution three classic benchmark problems were solved: flow between fixed parallel plates, lid-driven square cavity flow, and 4:1 planar contraction flow. In addition to these benchmark problems, the creeping flow of an Oldroyd-B fluid around a cylinder was solved in order to approach, in a very simplified manner, the flow of salt around an oil well drilled in sub-salt zone. In all cases, the algorithm was effective in obtaining a physically consistent solution with numerical robustness.

Key-words: Viscoelastic fluids. Oldroyd-B. Element based finite volume method. Unstructured meshes. Cell-vertex. Creeping of salt.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	– Representação esquemática de cargas agindo sobre o poço (modificado de Willson, Fossum e Fredrich (2002))	35
Figura 2	– Representação esquemática do poço de petróleo (modificado de Fossum e Fredrich (2007))	36
Figura 3	– Ensaio típico de fluência de um material viscoso (modificado de Gravina (1997))	49
Figura 4	– Representação do comportamento reológico ideal: (a) Sólido elástico linear, (b) Fluido viscoso newtoniano	50
Figura 5	– Representação do modelo de Maxwell	52
Figura 6	– Ensaio de relaxação das tensões para o modelo de Maxwell	54
Figura 7	– Representação esquemática do modelo de Kelvin-Voigt	54
Figura 8	– Ensaio de recuperação das tensões (modelo de Kelvin-Voigt)	55
Figura 9	– Representação esquemática do modelo de Zener	56
Figura 10	– Representação esquemática do modelo de Jeffreys	57
Figura 11	– Representação esquemática do modelo de Burgers	58
Figura 12	– Ensaio de fluência para o modelo de Burgers (modificado de Barnes (2000))	59
Figura 13	– Ensaio de recuperação das tensões do modelo de Burgers	60
Figura 14	– Solução de um problema de mecânica dos fluidos envolvendo fluido newtoniano	67
Figura 15	– Solução de um problema de mecânica dos fluidos envolvendo fluido não newtoniano	67
Figura 16	– Representação gráfica do tensor das tensões num referencial cartesiano	70
Figura 17	– Entes geométricos associados ao processo de discretização (modificado de Hurtado (2005))	83
Figura 18	– Volume de controle no contorno (modificado de Honório (2013))	83
Figura 19	– Transformação de coordenadas para elemento quadrilátero: (a) Elemento no plano real, (b) Elemento no plano transformado (modificado de Honório (2013))	87
Figura 20	– Transformação de coordenadas para elemento triangular: (a) Elemento no plano real, (b) Elemento no plano transformado (modificado de Honório (2013))	88
Figura 21	– Construção do vetor área da face (modificado de Hurtado (2005))	94

Figura 22 – Interpolação SPU para a face F_0 (modificado de Maliska et al. (2009))	97
Figura 23 – Representação dos volumes de controle atrás e à frente da face. (modificado de Hurtado (2011))	114
Figura 24 – Volume de controle na fronteira do domínio com as faces internas f_i e faces de contorno b_i (modificado de Honório (2013))	115
Figura 25 – Geometria do escoamento entre placas planas	120
Figura 26 – Malha 2-D não estruturada utilizada na simulação do escoamento entre placas paralelas.	122
Figura 27 – Perfis das soluções numérica e analítica da velocidade u para o escoamento viscoelástico entre placas planas para diferentes valores do número de Weissenberg	122
Figura 28 – Perfis das soluções numérica e analítica das tensões para o escoamento viscoelástico entre placas planas para diferentes valores do número de Weissenberg: (a) Tensão normal τ_{xx} , (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	123
Figura 29 – Perfis das soluções numérica e analítica para o escoamento viscoelástico entre placas planas para $We = 1$ e diferentes valores do parâmetro β ao longo da linha $x = 13$: (a) Tensão normal τ_{xx} , (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	125
Figura 30 – Perfis das soluções numérica e analítica para o escoamento viscoelástico entre placas planas para $\beta = 0.8$ e diferentes valores do parâmetro We ao longo da linha $x = 13$: (a) Tensão normal τ_{xx} , (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	126
Figura 31 – Campos de pressão e velocidades para o escoamento entre placas paralelas de um fluido de Oldroyd-B, com velocidade de entrada igual a 1, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$	129
Figura 32 – Perfis das velocidades u e v ao longo das linhas $x = 0$, $x = 1.66$, $x = 3.33$, $x = 5$, $x = 18$, considerando $u = 1$ na entrada, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$: (a) Velocidade u , (b) Velocidade v	130
Figura 33 – Variação da componente u da velocidade ao longo da linha de centro, $y = 0$	131
Figura 34 – Perfil da tensão τ_{xx} ao longo das linhas $x = 1.66$, $x = 3.33$, $x = 5$, $x = 18$, considerando $u = 1$ na entrada, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$	131
Figura 35 – Perfil da tensão τ_{xy} ao longo das linhas $x = 1.66$, $x = 3.33$, $x = 5$, $x = 18$, considerando $u = 1$ na entrada, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$	132
Figura 36 – Representação geométrica da cavidade fechada com tampa móvel	133

Figura 37 – Perfis das velocidade u e v ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Velocidade u , (b) Velocidade v	136
Figura 38 – Perfis das velocidade u e v ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Velocidade u ao longo de $x = 0.5$, (b) Velocidade v ao longo de $y = 0.5$	137
Figura 39 – Perfis das diferenças das tensões ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ ao longo de $x = 0.5$, (b) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ ao longo de $y = 0.5$	138
Figura 40 – Malha 2-D não estruturada utilizada na simulação do escoamento em cavidade fechada com tampa móvel	139
Figura 41 – Perfis das velocidade u e v ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Velocidade u ao longo de $x = 0.5$, (b) Velocidade v ao longo de $y = 0.5$	140
Figura 42 – Campos de velocidades e tensões para $We = 0.1$: (a) Velocidade u , (b) Tensão τ_{xx} , (c) Velocidade v , (d) Tensão τ_{yy} , (e) Linhas de corrente, (f) τ_{xy}	141
Figura 43 – Campos de velocidades e tensões para $We = 0.5$: (a) Velocidade u , (b) Tensão τ_{xx} , (c) Velocidade v , (d) Tensão τ_{yy} , (e) Linhas de corrente, (f) τ_{xy}	142
Figura 44 – Campos de velocidades e tensões para $We = 0.9$: (a) Velocidade u , (b) Tensão τ_{xx} , (c) Velocidade v , (d) Tensão τ_{yy} , (e) Linhas de corrente, (f) τ_{xy}	143
Figura 45 – Perfis das velocidade u e v nas linhas horizontal e vertical: (a) Velocidade u ao longo de $x = 0.5$, (b) Velocidade v ao longo de $y = 0.5$	144
Figura 46 – Primeira diferença das tensões, $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, nas linha vertical e na tampa: (a) $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ em $x = 0.5$, (b) $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ na tampa	145
Figura 47 – Geometria do escoamento em canal com uma contração abrupta 4:1	146
Figura 48 – Malhas consideradas para o escoamento em uma contração: (a) MU1, (b) MNU1, (c) MNU2	147
Figura 49 – Perfis de tensões ao longo da linha $y = -1$ e $We = 0.5$: (a) Primeira diferença das tensões $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	148
Figura 50 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -10 a 20 para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}	149
Figura 51 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -10 a 20 para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	150

Figura 52 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -3 a 3, para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}	151
Figura 53 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -3 a 3, para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	152
Figura 54 – Campos de tensões para o escoamento em uma contração plana para $We = 1.7$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy} , (c) Tensão de cisalhamento τ_{xy}	153
Figura 55 – Perfis das velocidades para escoamento em contração plana 4:1 com $\beta = 1/9$ e diferentes valores de We : (a) Velocidade u , (b) Velocidade v	154
Figura 56 – Perfil da pressão para escoamento em contração plana 4:1 com $\beta = 1/9$ e diferentes valores de We	155
Figura 57 – Campos de velocidade para o escoamento em uma contração plana com $We = 1.7$ e $\beta = 1/9$: (a) Velocidade u , (b) Velocidade v	155
Figura 58 – Campo de pressão para escoamento em contração plana 4:1 com $We = 1.7$ e $\beta = 1/9$	156
Figura 59 – Linhas de corrente para escoamento em contração plana 4:1 com $We = 1.7$ e $\beta = 1/9$	156
Figura 60 – Representação esquemática de um reservatório de petróleo localizado em uma zona salina	160
Figura 61 – Representação esquemática da geometria do problema do escoamento ao redor do poço de extração de petróleo	161
Figura 62 – Malha 2-D não estruturada utilizada na simulação do escoamento em torno de um cilindro	162
Figura 63 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para $\beta = 0.3$ e diferentes valores de We : (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}	163
Figura 64 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para $\beta = 0.3$ e diferentes valores de We : (a) Primeira diferença das tensões normais, (b) Tensão τ_{xy}	164
Figura 65 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para diferentes valores de β e $We = 0.5$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}	165
Figura 66 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para diferentes valores de β e $We = 0.5$: (a) Primeira diferença das tensões normais, (b) Tensão τ_{xy}	166
Figura 67 – Perfil das tensão normal ao longo do cilindro para diferentes valores de We e $\beta = 0.5$	168

Figura 68 – Perfil das tensão de cisalhamento ao longo do cilindro para diferentes valores de We e $\beta = 0.5$	168
Figura 69 – Perfil da pressão ao longo da superfície do poço: (a) Perfil da pressão para o caso de um fluido Newtoniano e para diferentes valores de We com $\beta = 0.3$, (b) Perfil da pressão para diferentes valores de β e $We = 0.5$ e para o caso de um fluido Newtoniano	169
Figura 70 – Campos de tensões e pressão para $We = 3.0$ e $\beta = 0.3$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy} , (c) Tensão de cisalhamento τ_{xy} , (d) Pressão	170
Figura 71 – Volume de controle arbitrário, fixo no espaço (modificado de Bird, Armstrong e Hassager (1987))	193
Figura 72 – Elemento de superfície através do qual a força $\boldsymbol{\pi}_n dS$ é transmitida (modificado de Bird, Armstrong e Hassager (1987)).	196
Figura 73 – Comprimento difusivo em um elemento retangular	200
Figura 74 – Comprimento difusivo em um elemento triangular regular	201
Figura 75 – Representação esquemática do tensor tração	203
Figura 76 – Representação esquemática das tensões em um corpo	204

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Modelos lineares para fluidos viscoelásticos	61
Tabela 2	– Notação empregada nas equações discretizadas pelo EbFVM	85
Tabela 3	– Valores na norma \mathbb{L}_2 do erro para as tensões τ_{xx} e τ_{xy} para diferentes We em $x = 13$, $x = 9$ e $x = 5$	124
Tabela 4	– Erros \mathbb{L}_2 para as tensões τ_{xx} e τ_{xy} para diferentes valores de β em $x = 13$, $x = 9$ e $x = 5$	127
Tabela 5	– Características das malhas utilizadas nos testes de independência de malha no problema cavidade quadrada . . .	135
Tabela 6	– Valores das velocidades mínimas e máximas nas linhas horizontal e vertical da cavidade	135
Tabela 7	– Características das malhas utilizadas no problema da contração	147
Tabela 8	– Propriedades físicas da halita	159

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AVSS	Adaptive Viscoelastic Stress Split
BFC	Contribuição das faces de contorno
CM	Equação de conservação da massa
DEVSS	Discrete Elastic Viscous Split Stress
EbFVM	Element Based Finite Volume Method
EC	Equação constitutiva
EFVLib	Element-based Finite Volume Library
EVSS	Elastic Viscous Split Stress
FDM	Finite Difference Method
FEM	Finite Element Method
FIELDS	Finite Element Differential Scheme
FVM	Finite Volume Method
GMRES	Generalized Minimal Residual Method
GNF	Generalized Newtonian Fluids
HWNP	High Weissenberg Number Problem
IFC	Contribuição das faces internas
Ma	Milhões de anos
PETSc	Portable, Estensible Toolkit for Scientific Computation
PTT	Phan-Thien-Tanner
QM	Equação de conservação da quantidade de movimento linear
QUICK	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics
SIMPLEC	Semi Implicit Linked Equations Consistent

SIMPLER	Semi Implicit Linked Equations Revisited
SINMEC	Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica do Fluido e Transferência de Calor
SPU	Single Point Upwind
SU	Streamline Upwind
SUPG	Streamline Upwind Petrov-Galerkin
UCM	Upper Convected Maxwell
UFSC	Universidade Federal de Santa Catarina

LISTA DE SÍMBOLOS

Grandezas físicas

β	Razão entre os tempos de retardamento e relaxação
η, η_0	Viscosidade aparente (Viscosidade não newtoniana)
η_p	Viscosidade de polímero
η_s	Viscosidade de solvente
\mathbf{g}	Vetor aceleração da gravidade
G	Módulo cisalhante
γ	Deformação
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação
$\dot{\mathbf{\gamma}}$	Tensor taxa de deformação
λ, λ_1	Tempo de relaxação
λ_2	Tempo de retardamento
μ	Viscosidade dinâmica
\mathbf{n}	Vetor normal unitário
p	Pressão
\mathbf{P}	Produto da pressão pelo tensor identidade
Q	Vazão
\mathbf{s}	Vetor tangente unitário
\mathbf{S}	Vetor área
\mathbf{v}	Vetor velocidade
x, y	Coordenadas cartesianas
ξ, η	Coordenadas locais
σ_n	Tensão normal

σ_s	Tensão de cisalhamento
σ_{**}	Componente do tensor tensão
σ	Tensor tensão
t	Tempo
t'	Tempo passado
\mathbf{t}	Vetor de tração
\mathbf{T}	Tensor tensão extra
τ	Tensão
τ_n	Tensão normal
τ_s	Tensão de cisalhamento
τ_{**}	Componente do tensor tensão elástica
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor tensão elástica
Θ	Grandeza escalar genérica
\mathcal{W}	Densidade de fluxo genérica
We	Número de Weissenberg

Entidades geométricas

e	Elemento
\mathbb{E}	Conjunto de elementos
f	Face
\hat{f}	Centroide da face (ponto de integração)
\mathbb{F}	Conjunto de faces
l	Nó (vértice) quando referido a um elemento
n	Nó (vértice)
\mathbb{N}	Conjunto de nós
N_p^e	Número de nós associados ao elemento e

p	Nó (vértice) quando associado a um volume de controle
s	Subelemento
\dot{s}	Baricentro de um subelemento
S	Superfície de controle
V	Volume de controle
V_p	Volume de controle genérico associado ao nó p
b_e	Elemento de contorno
b_f	Face de contorno
$b_{\mathbb{F}}$	Conjunto de faces de contorno
Ω	Domínio
Γ	Contorno

Grandezas associadas à discretização

A	Submatriz de coeficientes que compõe a matriz global de um sistema linear
$(\mathbf{b}_f^e)^T$	Produto do vetor área da face pelo gradiente
\mathbf{D}	Matriz de derivadas parciais das funções de forma
\mathbf{G}	Operador gradiente
\mathbf{J}	Matriz jacobiana
\mathbf{M}_e	Matriz contendo as coordenadas globais dos nós do elemento e
N	Função de forma
\mathbf{N}	Vetor coluna contendo os valores das funções de forma
$\check{\mathbf{V}}$	Matriz que contém os valores nodais das componentes da velocidade
α	Coefficiente associado a um esquema de interpolação local de um elemento

ΔS	Vetor área perpendicular à face
ΔV	Volume de uma entidade geométrica da malha
$[R]$	Matriz de rotação

Operadores matemáticos

∇	Operador gradiente
$\text{div}(*), \nabla \cdot$	Operador divergente
∇^2	Laplaciano
$\frac{D}{Dt}$	Derivada material
$\frac{\delta}{\delta t}$	Derivada convectiva no tempo
$(*)^\nabla$	Derivada contravariante (convectiva superior)
$(*)^\Delta$	Derivada covariante (convectiva inferior)
$(*)^T$	Matriz transposta
$(*)^{-1}$	Matriz inversa

Outros símbolos

\mathbf{I}	Tensor identidade
II_7	Segundo invariante do tensor taxa de deformação
N_1	Primeira diferença das tensões normais
N_2	Segunda diferença das tensões normais
Ψ_1	Primeiro coeficiente das tensões normais
Ψ_2	Segundo coeficiente das tensões normais
$\check{\Theta}$	Vetor coluna de valores nodais da variável Θ
$\check{\Theta}^e$	Vetor coluna de valores nodais da variável Θ no elemento e

SUMÁRIO

1	Introdução	33
1.1	Motivação	33
1.2	Principais desafios na perfuração em formações salinas	34
1.3	Metodologias numéricas	35
1.4	Breve histórico do uso do método dos volumes finitos em escoamentos viscoelásticos	38
1.5	Principais desafios na simulação numérica de fluidos viscoelásticos	39
1.6	Objetivo e contribuições	42
1.7	Estrutura da tese	43
2	Reologia de fluidos	45
2.1	Fluidos newtonianos	45
2.2	Fluidos não newtonianos	46
2.3	Comportamento de fluência dos materiais	47
2.4	Fluidos Viscoelásticos	49
2.4.1	Fluidos Viscoelásticos Lineares	51
2.4.1.1	Modelo de Maxwell e o tempo de relaxação	51
2.4.1.2	Modelo de Kelvin-Voigt e o tempo de retardamento	54
2.4.1.3	Modelo de Zener	56
2.4.1.4	Modelo de Jeffreys	56
2.4.1.5	Modelo de Burgers	57
2.4.2	Fluidos Viscoelásticos Não Lineares	61
2.4.3	Modelos diferenciais não lineares	61
2.4.3.1	Modelo UCM	62
2.4.3.2	Modelo de Oldroyd	63
2.4.3.3	Modelo de Giesekus	64
2.4.3.4	Modelo Phan-Thien-Tanner	64
2.4.4	Modelos Integrais não lineares	64
2.4.5	Diferença entre as estratégias newtoniana e não newtoniana na resolução de um problema de mecânica dos fluidos	66
3	Modelagem matemática	69
3.1	Equações de conservação	70
3.2	Particularização das equações para o problema	72
3.2.1	Escolha da equação constitutiva	73
3.2.2	Condições de contorno	76

3.2.3	Adimensionalização das equações	78
4	Modelagem Numérica	81
4.1	Características gerais do método de volumes finitos baseado em elementos	82
4.2	Notação	84
4.3	Transformação de coordenadas	84
4.4	Aproximação local das variáveis	88
4.5	Aproximação do gradiente de uma variável	89
4.6	Aproximação das integrais de volumes	91
4.7	Aproximação das integrais de superfície	92
4.7.1	Cálculo do vetor área da face	93
4.8	Aproximação da derivada de uma função escalar	94
4.9	Esquemas de interpolação espacial	95
5	Discretização das equações diferenciais	99
5.1	Tratamento do acoplamento pressão-velocidade-tensão	100
5.2	Equação de conservação de quantidade de movimento	101
5.2.1	Função de interpolação espacial para a equação do movimento	102
5.3	Equação da conservação da massa	103
5.3.1	Função de interpolação espacial para a equação de conservação da massa	103
5.3.1.1	Termo da pressão	104
5.3.1.2	Termo da tensão elástica	105
5.3.1.3	Laplaciano da velocidade	105
5.4	Equação constitutiva	107
5.4.1	Integral de τ_{xx} sobre o volume de controle centrado em p	108
5.4.2	Termo de transporte advectivo	109
5.4.3	Integrais volumétricas envolvendo produto de tensões e derivadas da velocidade	110
5.4.4	Integrais volumétricas das derivadas da velocidade	110
5.4.5	Forma final das equações constitutivas	111
5.5	Sistema de equações	111
5.5.1	Montagem do sistema linear	113
5.6	Tratamento dos volumes de controle das fronteiras	114
5.6.1	Equação de conservação da massa	114
5.6.2	Equação de conservação da quantidade de movimento	115
5.6.3	Equações constitutivas	116
5.7	Condições de contorno de Dirichlet	117
5.8	Algoritmo computacional	117
6	Resultados	119
6.1	Escoamento entre placas planas	120

6.1.1	Influência do parâmetro β	124
6.1.2	Influência dos termos da equação constitutiva	127
6.1.3	Velocidade de entrada uniforme	128
6.1.4	Conclusões	132
6.2	Escoamento em cavidade fechada com tampa móvel	132
6.3	Escoamento em contração plana 4:1	144
6.3.1	Conclusões	156
6.4	Escoamento ao redor de um cilindro	156
6.4.1	Evaporitos	157
6.4.1.1	Definição e formação	157
6.4.1.2	Propriedades mecânicas e físicas de rochas salinas	158
6.4.2	Modelagem matemática	159
6.4.3	Resultados numéricos	161
	Conclusão	171
	Referências	175

	Apêndices	189
	APÊNDICE A Alguns teoremas importantes do cálculo vetorial e tensorial	191
	A.1 Teorema do transporte de Reynolds	191
	A.2 Teorema do transporte da divergência	191
	APÊNDICE B Derivação das equações de conservação	193
	B.1 Conservação da massa	193
	B.2 Conservação da quantidade de movimento	194
	APÊNDICE C Operadores diferenciais em coordenadas cartesianas	197
	APÊNDICE D Discretização do operador laplaciano	199
	APÊNDICE E Cálculo da tensão normal e de cisalhamento	203

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

Nos dias de hoje a simulação numérica tem um papel muito importante para a ciência e tecnologia. Isto se deve a grande disponibilidade dos recursos computacionais e, como consequência, do avanço dos métodos numéricos e das linguagens computacionais. A simulação numérica de problemas em engenharia vem sendo empregada de maneira crescente por indústrias das mais diversas áreas, como uma ferramenta de auxílio na tomada de decisões, prognósticos, ajudando assim, a diminuir custos e agilizar processos produtivos reduzindo consideravelmente a margem de erro do projeto final.

A indústria do petróleo e gás é uma grande consumidora das simulações numéricas para as mais diversas aplicações, como por exemplo, a previsão da produção de hidrocarbonetos em um reservatório sob diferentes estratégias de operação, a modelagem computacional dos impactos ambientais associados à água contaminada por produtos químicos utilizada no processo de fraturamento hidráulico em reservatórios, modelagem e simulação numérica de problemas de propagação de ondas em meios porosos, acoplamento poço reservatório, etc. Uma aplicação mais atual, especialmente na indústria de petróleo e gás brasileira, é a modelagem do comportamento geomecânico da camada de sal localizada nos reservatórios recentemente descobertos no Brasil. Para se chegar ao reservatório de petróleo, o poço tem que atravessar uma espessa camada de sal, a qual pode se movimentar horizontalmente por movimentos tectônicos, provocando pressões nas paredes dos poços. Assim, o movimento do sal deve ser previsto para que o projeto do poço seja realizado com eficácia.

Existem pelo menos duas maneiras para descrever comportamento de fluência do sal. No contexto da mecânica estrutural, a fluência do sal é geralmente considerada como um problema evolutivo para o deslocamento, o qual nos leva a equações para o deslocamento. No contexto da dinâmica dos fluidos, o comportamento de fluência é considerado como um problema de escoamento estacionário incompressível com número de Reynolds baixo.

Atualmente, a grande maioria dos pesquisadores aborda o problema da modelagem do comportamento de fluência do sal na indústria do petróleo no contexto da mecânica estrutural (DAWSON, ; MUNSON; DAWSON, 1981; SHEFFIELD; COLLINS; HACKNEY, 1983; COSTA, 1984; GRAVINA, 1997; FOSSUM; FREDRICH, 2002; WILLSON; FOSSUM; FREDRICH, 2002; COSTA et al., 2005; FOSSUM; FREDRICH, 2007; BOTE-

LHO, 2008; MACKAY et al., 2008). Portanto, fica natural a aplicação do método dos elementos finitos, que já é bem desenvolvido no tratamento de problemas estruturais, na simulação numérica da fluência do sal.

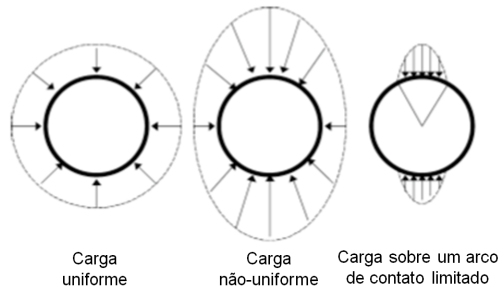
Como o sal encontrado na região acima dos reservatórios de petróleo brasileiros é um material extraordinariamente fluido se comparado com as outras rochas, é possível analisar o seu comportamento de fluência em termos da mecânica dos fluidos (NETTLETON, 1934; CARTER; HANSEN, 1983; MANSSINI et al., 2007). Estes trabalhos estão relacionados à dinâmica de rochas, ao movimento de domos salinos, ou seja, são aplicados à tectônica do sal. Nettleton (1934) apresentou a hipótese da mecânica dos fluidos para a formação de domos salinos, mostrando que o sal e os sedimentos vizinhos se comportam como um fluido altamente viscoso (NETTLETON, 1934). Em seu trabalho, Manssini et al. (2007) modelam os evaporitos (sal) como fluidos não newtonianos e levam em consideração os efeitos térmicos. A estratégia computacional é baseada numa metodologia lagrangeana com adaptatividade de malha.

Como veremos posteriormente, o sal pode ser considerado um material viscoelástico, que pode ser governado pela equação constitutiva de Burgers (SWIFT; REDDISH, 2005; CARCIONE; HELLE; GANGI, 2006; JAEGER; COOK; ZIMMERMAN, 2007) e seu movimento exerce cargas sobre o poço de petróleo, conforme apresentado esquematicamente na Figura 1. Seguindo esta linha de abordagem, este trabalho propõe desenvolver uma metodologia numérica para resolver o escoamento de fluidos viscoelásticos que possa ser aplicada para simular o escoamento do sal ao redor de um poço de petróleo.

1.2 PRINCIPAIS DESAFIOS NA PERFURAÇÃO EM FORMAÇÕES SALINAS

A perfuração de poços de petróleo em zonas de sal representa um grande desafio tecnológico devido a propriedade de fluência do sal, que causa fechamento do poço durante a fase de perfuração. Mesmo depois de o poço ter sido revestido, essa mobilidade pode causar, a longo prazo, o colapso do revestimento, devido a tensões adicionais impostas por esse fechamento (Figura 1). Ou seja, a fluência do sal deve ser considerada em toda a vida útil do poço e não somente na fase de perfuração. Os principais problemas encontrados na perfuração e exploração em zonas salinas, na ordem de ocorrência, são: fechamento do poço, torques elevados, repassamentos, prisão de coluna, desvios e colapso do revestimento, podendo levar a perda do poço e gerar prejuízos de milhões de dólares. Considerações especiais, a partir da seleção

Figura 1 – Representação esquemática de cargas agindo sobre o poço (modificado de Willson, Fossum e Fredrich (2002))



de fluidos de perfuração, implementação de programas de revestimentos e de procedimentos de cimentação são necessárias para poços nesta situação.

Para manter o calibre do poço, os fluidos de perfuração devem minimizar o fechamento do poço. Lamas¹ a base de água e lamas a base de óleo com concentrações saturadas e subsaturadas de sal, bem como fluidos sintéticos tem sido usados para furar o sal, mas não existe um sistema único que seja adequado sempre.

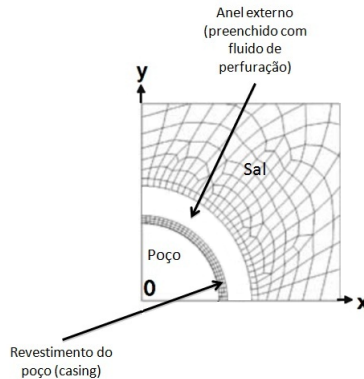
Após a perfuração do sal, restrições, bordas e o movimento do sal exercem cargas não uniformes sobre o revestimento do poço (Figura 1). Para aumentar a resistência do poço a essas cargas, uma alternativa seria o aumento da espessura da parede do poço. Entretanto, esta seria uma boa solução somente para sais com baixas taxas de fluências. Para os casos com altas taxas de fluência do sal, é feita a colocação de uma coluna de revestimento dentro do poço já cimentado. Uma cimentação efetiva no anel entre o revestimento externo e o sal minimiza os efeitos das cargas não uniformes (Figura 2).

1.3 METODOLOGIAS NUMÉRICAS

Para se obter a solução numérica de um conjunto de equações diferenciais elas devem ser discretizadas no espaço e no tempo. Uma grande varie-

¹ *Lama:* Fluido utilizado no poço durante uma operação de perfuração, cuidadosamente controlado no que tange às suas propriedades, servindo para: a) resfriar a broca; b) remover as aparas do poço; c) evitar o desabamento do poço; d) consolidar formações frouxas (areia, cascalho); e) evitar a intrusão de água, gás ou petróleo no poço; f) lubrificar a tubulação de perfuração; g) diminuir a corrosão das tubulações de perfuração e revestimento; h) suspender aparas quando as operações são paralisadas. As propriedades “gel” evitam a sedimentação das aparas; i) permitir sua limpeza na peneira e nos tanques de sedimentação.

Figura 2 – Representação esquemática do poço de petróleo (modificado de Fossum e Fredrich (2007))



dade de métodos podem ser empregados nessa discretização. Na perspectiva de métodos usados na discretização de equações diferenciais somos conduzidos a três grandes grupos, a saber: o método das diferenças finitas, denotado por FDM (do inglês, *Finite Difference Method*), o método dos elementos finitos, denotado por FEM (do inglês, *Finite Element Method*) e o método dos volumes finitos, FVM (do inglês, *Finite Volume Method*).

O método das diferenças finitas, apesar de ser o mais antigo, na sua forma pura é hoje pouco utilizado e uma das razões para isso é que ele normalmente não verifica a conservação das quantidades físicas. No entanto, é usado em combinação com uma metodologia que obriga a conservação das quantidades físicas, como é o caso dos volumes finitos. Outra desvantagem do FDM é que o mesmo requer malhas estruturadas para atingir simplicidade, o que restringe bastante a gama de aplicação. Ao contrário do que se propaga FDM podem ser aplicados à malhas não estruturadas, mas a um custo excessivo de programação.

Para simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos o FDM foi usado por alguns autores como Olsson e Ystrom (1993), Olsson (1995), Webster (1959), Tomé et al. (2002), Sun et al. (2009). Outros exemplos podem ser encontrados nos livros de Crochet, Davies e Walters (1984) e Owens e Phillips (2002).

O método dos volumes finitos utiliza diretamente as leis de conservação na formulação integral. As equações são integradas em cada volume de controle da malha de cálculo para assegurar a conservação das grandezas físicas, procedendo-se então à discretização das equações. As principais

vantagens do FVM é que a discretização espacial é feita diretamente no espaço físico e que pode ser implementado em malhas não estruturadas. Esta característica faz o FVM adequado ao tratamento de geometrias complexas.

No contexto dos escoamentos de fluidos viscoelásticos o FVM tem sido amplamente utilizado desde a década passada. Até agora é o método que provavelmente, tenha conseguido resolver os problemas mais difíceis, especialmente se o fenômeno for dependente do tempo. Os mais recentes trabalhos tem sido feitos por inúmeros grupos de pesquisas, como por exemplo Oliveira (2001), Oliveira e Pinho (1999), Sahin e Owens (2003), Sahin e Wilson (2007), Aboubacar e Webster (2001), Aguayo et al. (2007), Muniz, Secchi e Cardozo (2008), Edussuriya, Williams e Bailey (2004), Nadau e Sequeira (2007), Alves, Pinho e Oliveira (2000), Lemos (2011) dentre inúmeros outros.

No método dos elementos finitos o domínio é dividido em um conjunto de elementos, geralmente de forma não estruturada; em 3D tetraedros e hexaedros são os mais frequentemente usados. A característica distinta do FEM é que as equações são escritas na forma fraca pela multiplicação de uma função teste (fator de ponderação) antes de serem integradas sobre o domínio. A solução é aproximada em cada elemento por uma função, usualmente polinomial, e o resultado é um conjunto de equações algébricas. Uma importante característica do FEM é a habilidade de lidar com geometrias arbitrárias. As malhas são facilmente refinadas, pela divisão de cada elemento. Não garante a conservação das propriedades, uma característica física que sempre se pretende respeitar quando simulações são realizadas.

No cenário dos fluidos viscoelásticos é, sem dúvida, o mais utilizado (CROCHET; DAVIES; WALTERS, 1984; BAAIJENS, 1998; MARCHAL; CROCHET, 1987). O FEM tem sido aplicado principalmente para problemas bidimensionais. Poucas tentativas de resolver problemas tridimensionais foram reportadas na literatura, (YUE et al., 2010). Tanto aproximações polinomiais de baixa ordem (LI; HAN; WANG, 2010; KHOMAMI; TALWAR; GANPULE, 1994) quanto aproximações polinomiais de alta ordem (WARCHET; LEGAT, 1996) foram utilizadas na literatura. Alguns recentes trabalhos são Baaijens (1998), Marchal e Crochet (1987), Chen et al. (2010), Yue et al. (2010), Choi, Hulsen e Meijer (2010), de Araujo, Gomes e Ruas (2010), Hao e Pan (2007), Ganvir et al. (2007), Nadau e Sequeira (2007), Sandri (2004), Sun et al. (2009).

Existem duas questões importantes que precisam ser enfrentadas no FEM para solução de escoamentos viscoelásticos. A primeira diz respeito à escolha dos espaços de aproximação para a velocidade, pressão e tensão. A segunda reside no tratamento do termo convectivo, particularmente para altos valores do número de Weissenberg. O leitor pode encontrar uma discussão muito interessante sobre esses tópicos no capítulo 5 do livro de Owens e

Phillips (2002).

1.4 BREVE HISTÓRICO DO USO DO MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS EM ESCOAMENTOS VISCOELÁSTICOS

Nas décadas de 80 e 90, o método dos elementos finitos dominou o campo da reologia computacional por muitos anos. A maioria das pesquisas focaram na solução do problema do alto número de Weissenberg, referido como HWNP (do inglês *High Weissenberg Number Problem*) que causa instabilidade numérica. Técnicas de estabilização foram utilizadas com sucesso por muitos autores. Para levar em conta a natureza hiperbólica das equações constitutivas, o método de Galerkin descontínuo também foi aplicado nos escoamentos viscoelásticos.

Mais recentemente o interesse no FVM foi renovado para modelar os escoamentos viscoelásticos (seguindo o trabalho pioneiro de Patankar (1980) para fluidos newtonianos) devido às vantagens em termos de recursos computacionais, se comparado ao FEM (EDUSSURIYA; WILLIAMS; BAILEY, 2004; NADAU; SEQUEIRA, 2007). Este interesse começou com Yoo e Na (1991), Sasmal (1995) e Xue, Phan-Thien e Tanner (1995) que usaram malhas ortogonais com arranjo desencontrado das variáveis para resolver o escoamento através de uma contração 4:1. Nesses algoritmos, a pressão e as tensões são colocadas no centro do volume de controle para evitar as instabilidades numéricas relacionadas à singularidade do canto reentrante.

O uso de esquemas de alta ordem com diferentes arranjos desencontrados para escoamentos viscoelásticos foi explorado por Darwish, Whiteman e Bevis (1992) e Mompean e Deville (1997). Neste arranjo de variáveis, a tensão de cisalhamento é colocada nos cantos do volume de controle enquanto que a pressão e as tensões normais são colocadas no centro do volume. Um arranjo similar foi usado por outros autores tais como Gerritsma (1996) e Phillips e Williams (1999). Darwish, Whiteman e Bevis (1992) estudaram o escoamento de um fluido Convectivo de Maxwell em uma expansão abrupta e uma solução analítica foi usada como valor da tensão de cisalhamento no canto reentrante. Mompean e Deville (1997), usaram o esquema de segunda ordem QUICK para aproximar o termo convectivo e estender o método de volumes finitos bidimensional para o caso tridimensional.

Entretanto, o arranjo desencontrado não é de fácil adaptação para geometrias complexas e, para superar essa dificuldade, o arranjo colocalizado começou a ser usado por vários autores tanto para malhas estruturadas quanto para malhas não estruturadas. Na grande maioria das vezes usou-se algoritmos do tipo SIMPLE para resolver o sistema de equações (HUANG; PHAN-

THIEN; TANNER, 1996; OLIVEIRA; PINHO, 1999; ALVES; PINHO; OLIVEIRA, 2000; XUE; PHAN-THIEN; TANNER, 2002; EDUSSURIYA; WILLIAMS; BAILEY, 2004). Dou e Phan-Thien (1999) apresentaram um método de volumes finitos em malhas não estruturadas para simular o escoamento de um fluido de Oldroyd-B em um canal passando por um cilindro estacionário. Utilizou um arranjo colocalizado com o método denominado CVFEM-Control Volume Finite Element Method, junto com o algoritmo SIMPLER. Oliveira, Pinho e Pinto (1998) desenvolveram um método para o arranjo colocalizado em malhas não ortogonais estruturadas em blocos usando coordenadas curvilíneas. O modelo utilizado foi o Convectivo Superior de Maxwell na forma conservativa e um termo de difusão artificial foi acrescentado na equação do movimento para melhorar a estabilidade numérica. A função de interpolação de Rhie e Chow foi utilizada para resolver o desacoplamento entre pressão, velocidade e tensão. Para resolver as equações foi utilizado o SIMPLEC.

Métodos mistos (FEM/FVM) foram desenvolvidos para escoamentos viscoelásticos a fim de tirar proveito das características de ambos os métodos em relação à estrutura mista das equações governantes. Tipicamente o FEM é aplicado nas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento e o FVM nas equações constitutivas hiperbólicas. Neste sentido, pode-se citar as importantes contribuições de Sato e Richardson (1994) e Wapperom e Webster (1999). Em (SATO; RICHARDSON, 1994) os autores usaram um método de volumes finitos com as variáveis localizadas no centro das células (*cell-centered*) para a equação constitutiva, ao passo que em (WAPPEROM; WEBSTER, 1999) foi utilizado o método de elementos finitos baseado em volumes de controle.

Este trabalho propõe aplicar uma metodologia em volumes finitos, denominada EbFVM-Element-based Finite Volume Method para resolver o sistema de equações que governam um escoamento de fluidos viscoelásticos. O acoplamento entre pressão, velocidade e tensão é tratado considerando uma estratégia semelhante à utilizada por Raw (1985) no desenvolvimento do método FIELDS para solução das equações de Navier-Stokes em malhas de quadriláteros. As não linearidades são eliminadas através da iteração de Picard.

1.5 PRINCIPAIS DESAFIOS NA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Fluidos viscoelásticos são definidos como fluidos que possuem tanto propriedades viscosas quanto elásticas.

O escoamento de fluidos viscoelásticos pode ser descrito matematica-

mente por meio das equações de conservação da massa e quantidade de movimento e uma relação constitutiva entre tensão e taxa de deformação. Não existe uma equação constitutiva geral para descrever todos os materiais viscoelásticos, pois a estrutura molecular de líquidos complexos difere largamente de um material para o outro. Entretanto, um grande número de modelos foi desenvolvido ao longo das últimas décadas para entender e prever o comportamento de líquidos viscoelásticos. Para uma visão geral desses modelos pode-se consultar, por exemplo Bird, Armstrong e Hassager (1987), Shaw e MacKnight (2005), Larson (1988).

Escolher, identificar e validar um modelo matemático para um material viscoelástico específico continua uma questão em aberto. Em geral, os modelos matemáticos são ajustados a dados experimentais obtidos para um fluido viscoelástico sofrendo cisalhamento puro ou deformação elongacional, os chamados escoamentos viscométricos (TANNER, 2000; MACOSKO, 1994). Entretanto, o principal desafio da reologia está na extensão dessa identificação e validação a escoamentos complexos, para os quais não estão disponíveis os resultados analíticos. Os métodos numéricos podem ajudar a atacar essa questão fornecendo a conexão ausente entre o modelo e a previsão macroscópica de escoamentos complexos (CLAUS, 2013). O primeiro desafio na simulação numérica de fluidos viscoelásticos é a escolha correta da metodologia numérica capaz de resolver o sistema de equações que descreve o escoamento. A principal dificuldade é que se trata de um sistema misto: conservação de massa e quantidade de movimento são equações do tipo elíptica/parabólica enquanto que a equação constitutiva é hiperbólica (OWENS; PHILLIPS, 2002). Além disso, o sistema pode mudar de classificação dependendo das condições com que o escoamento se propaga (OWENS; PHILLIPS, 2002). Desta forma, a escolha das técnicas numéricas pode incluir a implementação de técnicas de estabilização, tais como SU (do inglês, Streamline Upwind), SUPG (do inglês, Streamline Upwind Petrov-Galerkin) (MARCHAL; CROCHET, 1987; FORTIN; PIERRE, 1989; LUO; TANNER, 1989; ERVIN; MILES, 2004) no método de elementos finitos. Esses autores, em particular, observaram que o aumento da estabilidade usualmente estava associado à deterioração da exatidão da solução. Uma visão geral dessas técnicas pode ser encontrada em (OWENS; PHILLIPS, 2002; BAAIJENS, 1998). Metodologias que aumentam o caráter elíptico da equação do movimento também são utilizadas para estabilizar o método numérico. Parte-se do pressuposto que quanto mais dominante for o termo viscoso em relação à contribuição viscoelástica na equação do movimento, melhor será o desempenho do método. Dentre essas metodologias pode-se citar a EVSS (do inglês, *Elastic Viscous Split Stress*), primeiramente empregada por Perera e Walters (1977) para o método das diferenças finitas e posteriormente para o método dos elementos finitos por Rajagopalan, Armstrong e Brown (1990), a DEVSS

(do inglês, *Discrete Elastic Viscous Split Stress*) de Guénette e Fortin (1995). Mais tarde Sun, Phan-Thien e Tanner (1996) introduziram a AVSS (do inglês, *Adaptive Viscoelastic Stress Split*). Essas técnicas e suas derivações estão discutidas em detalhes no livro de Owens e Phillips (2002).

Apesar de técnicas de estabilização melhorarem a estabilidade da solução numérica, todos os algoritmos numéricos que resolvem escoamentos viscoelásticos enfrentam uma grande questão importante: o chamado problema do alto número de Weissenberg, HWNP. Até agora, todos os esquemas numéricos falham acima de um determinado valor do número de Weissenberg, que é uma medida adimensional da elasticidade do fluido. Esse valor crítico do número de Weissenberg depende de vários fatores: a complexidade geométrica do escoamento; o modelo viscoelástico escolhido; outros parâmetros adimensionais característicos do escoamento, tal como o número de Reynolds; e da malha computacional (CLAUS, 2013; OWENS; PHILLIPS, 2002). De fato, o valor crítico do número de Weissenberg geralmente parece decrescer com o refinamento da malha (KEUNINGS, 1986).

Outro fator que impõe severas restrições sobre o sucesso das simulações numéricas para altos valores de Weissenberg é a dificuldade de resolver as regiões de grandes gradientes da tensão próximo às fronteiras sólidas e cantos singulares. Por exemplo, para uma fronteira com condição de não deslizamento, a velocidade e todas as suas derivadas tangenciais se anulam e portanto os termos advectivos desaparecem na parede. Entretanto, estes termos fazem parte do balanço de forças a uma distância muito pequena da parede. A transição do escoamento viscométrico perto da parede para uma região dominada por advecção longe da parede provoca diferenças substanciais no comportamento da tensão em uma fina camada próxima da parede. Renardy (2000) demonstrou que a espessura desta camada diminui com o aumento do número de Weissenberg.

Nos cantos singulares, os valores da tensão tendem para infinito provocando altos erros de aproximação no ponto singular. Estes erros podem, então, propagar-se e crescer à jusante dessa singularidade, devido a natureza hiperbólica das equações constitutivas (OWENS; PHILLIPS, 2002) causando oscilações de grande escala na solução. Tal comportamento foi verificado por Fontelos e Friedman em (FONTELOS; FRIEDMAN, 2000) para um fluido de Oldroyd-B e que também foi percebido no presente trabalho para solução do problema da contração 4:1. Em contrapartida no modelo PTT, Renardy (1997) não observou nenhum crescimento do erro à jusante. A razão para isso pode ser porque as camadas limites no modelo PTT têm uma escala diferente e são muito maiores (CLAUS, 2013).

1.6 OBJETIVO E CONTRIBUIÇÕES

Este trabalho segue o entendimento de que o sal, localizado acima dos reservatórios de petróleo da costa brasileira, pode ser tratado como um fluido viscoelástico, assim, buscou-se um modelo não newtoniano para representar o sal, e o modelo escolhido, com base nas propriedades do sal, foi de um fluido viscoelástico de Oldroyd-B. O presente trabalho estende a metodologia de volumes finitos baseada em elementos, com bastante experiência na simulação de escoamentos de fluidos newtonianos, para a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos em geometrias 2D arbitrárias. Nesta situação a equação constitutiva é de tal forma que não permite que as tensões sejam representadas pelos gradientes de velocidade, exigindo que as tensões permaneçam como incógnitas na formulação numérica. A formulação considera malhas que podem ser construídas por elementos de forma geométrica diferentes, criando-se malhas bastante genéricas do tipo híbridas. A validação é realizada resolvendo-se problemas padrões cujas soluções são conhecidas. Por fim, será aplicada na simulação do escoamento de um fluido de Oldroyd-B ao redor de um cilindro de modo a aproximar, de maneira muito simplificada, o escoamento do sal (fluido viscoelástico de Oldroyd-B) em torno de um poço de petróleo (cilindro), com propósito de quantificar a pressão e a tensão exercida pelo sal sobre o poço.

Na formulação proposta são utilizadas malhas não estruturadas híbridas formadas por elementos quadriláteros e/ou triangulares. A possibilidade de utilizar malhas híbridas na discretização de um domínio físico confere um grau adicional de flexibilidade a uma formulação numérica para malhas não estruturadas.

O código computacional foi desenvolvido em linguagem de programação C++ com o emprego das bibliotecas EFVLib e PetSc. A biblioteca EFVLib (MALISKA et al., 2009) foi utilizada como base para a manipulação de malhas não estruturadas. Alguns recursos importantes dessa biblioteca são a importação de malhas em diferentes formatos, o gerenciamento da topologia e geometria da malha e o suporte para a discretização de equações diferenciais aplicando o método dos volumes finitos baseado em elementos. Já a biblioteca PetSc permitiu a solução dos sistemas de equações lineares oriundos da discretização, de maneira eficiente, através do método GMRES.

A programação foi inteiramente concebida sob o paradigma de orientação a objetos. Desta forma a incorporação de novos modelos de fluidos viscoelásticos é bastante simples. O simulador pode ser utilizado na solução tanto de escoamentos não newtonianos quanto newtonianos, possibilitando rápidas comparações entre os tipos de escoamentos. Desta forma o código aqui desenvolvido pode servir como base para o desenvolvimento de novas pesquisas mais avançadas na área da dinâmica dos fluidos não newtonianos,

como petróleo e gás, hemodinâmica (SEO, 2013), entre inúmeras outras.

Em resumo, este trabalho avança os conhecimentos na área de simulação de escoamentos viscoelásticos empregando malhas não estruturadas gerais, com um robusto método de volumes finitos com potencialidade de aplicação em problemas de movimentação de sal bem como em outros problemas onde fluidos não-newtonianos são encontrados.

1.7 ESTRUTURA DA TESE

Este trabalho está dividido em seis capítulos. O capítulo 1 apresenta uma introdução ao trabalho, incluindo motivação, metodologias numéricas, histórico do método dos volumes finitos aplicados a escoamentos de fluidos viscoelásticos. Também é feita uma rápida explicação dos principais desafios na simulação numérica de fluidos viscoelásticos.

No Capítulo 2, apresenta-se uma revisão da teoria matemática dos fluidos não newtonianos com foco nos fluidos viscoelásticos, nele estão relacionadas as principais equações constitutivas que modelam o comportamento reológico dos fluidos viscoelásticos.

O Capítulo 3 é dedicado à modelagem matemática do problema de escoamento de fluidos viscoelásticos isotérmicos para um regime quase estático. Faz-se a escolha da equação constitutiva e a adimensionalização da mesma. Por derradeiro, os tipos de condições de contorno utilizados para fluidos viscoelásticos de Oldroyd-B são brevemente apresentados.

No Capítulo 4, o método dos volumes finitos baseado em elementos é apresentado em detalhes e de maneira genérica, possibilitando que as aproximações numéricas apresentadas sejam utilizadas na discretização de equações que modelam um amplo espectro de problemas. Também é descrito um esquema de notação especial baseado no esquema empregado por Hurtado em (HURTADO, 2011).

No Capítulo 5, os conceitos apresentados no capítulo anterior são aplicados na discretização das equações que governam os escoamentos tratados neste trabalho. A discretização é mostrada termo a termo, equação por equação, até a obtenção da forma final das equações discretas a serem resolvidas. A seguir, é descrita de forma breve a montagem do sistema linear e tratada a discretização dos volumes de controle na fronteira e a aplicação das condições de contorno de Dirichlet. Por fim, o algoritmo de solução é descrito.

No Capítulo 6, são apresentados os resultados numéricos em exemplos clássicos utilizados para testar diferentes aspectos do método aqui utilizado. Os problemas escolhidos são: escoamento entre placas planas, escoamento em uma cavidade fechada e o escoamento através de uma contração

4:1. Neste capítulo, também é simulado o escoamento de um fluido viscoelástico ao redor de um cilindro com a finalidade de quantificar e qualificar as cargas exercidas por esse fluido na superfície do cilindro. Esse problema é uma aproximação simplificada do escoamento do sal ao redor de um poço de petróleo.

2 REOLOGIA DE FLUIDOS

Este capítulo tem como objetivo principal descrever matematicamente as características de um fluido viscoelástico. Para isto, primeiramente, para facilitar, define-se o fluido newtoniano. Logo após, é apresentada uma rápida revisão sobre os diferentes tipos de fluidos não newtonianos e suas definições. O comportamento de fluência dos materiais é descrito de forma sucinta na seção posterior. O restante do capítulo é dedicado para a descrição dos fluidos viscoelásticos, onde são apresentadas algumas das principais equações constitutivas que descrevem as propriedades desses fluidos. Nessa parte do capítulo, primeiramente são apresentadas as equações constitutivas lineares, e logo a seguir faz-se a expansão desses modelos lineares para os modelos não lineares.

2.1 FLUIDOS NEWTONIANOS

Para um fluido newtoniano as seguintes hipóteses (CLAUS, 2013) são assumidas:

1. A tensão é independente de qualquer história de distorção, ou seja, depende somente do estado de deformação no tempo presente (tempo presente);
2. A tensão depende somente do estado cinemático local (ação local);
3. A tensão depende linearmente da taxa de deformação (linearidade);
4. O material é considerado isotrópico, isto é, suas propriedades físicas são independentes da direção (isotropia).

Levando em conta essas quatro considerações, a relação entre a taxa de deformação $\dot{\gamma}_{xy}$ e a tensão τ_{xy} é dada por

$$\tau_{xy} = \mu \dot{\gamma}_{xy}. \quad (2.1)$$

A constante de proporcionalidade μ é a viscosidade dinâmica (também chamada de viscosidade newtoniana).

A característica importante de um fluido newtoniano é que a viscosidade dinâmica é independente da taxa de deformação $\dot{\gamma}_{xy}$ ou da tensão de cisalhamento τ_{xy} e depende apenas do material e da sua temperatura e pressão. Sendo assim, a viscosidade é considerada a constante material do fluido.

A equação (2.1) é chamada de equação constitutiva e o gráfico de $\dot{\gamma}_{xy}$ contra τ_{xy} é uma linha reta passando pela origem, cuja inclinação é dada pela viscosidade dinâmica μ . Assim, a constante μ caracteriza completamente o comportamento de um fluido newtoniano escoando a uma temperatura e pressão fixas. Tal gráfico é chamado de curva de fluxo e é uma conveniente maneira de ilustrar as propriedades viscosas de vários tipos de fluidos.

2.2 FLUIDOS NÃO NEWTONIANOS

Um fluido não newtoniano é um fluido cuja tensão de cisalhamento não é diretamente proporcional à taxa de deformação. Ou seja, a tensão de cisalhamento dividida pela taxa de deformação não é constante em uma dada temperatura e pressão mas é dependente das condições do escoamento, tais como geometria do escoamento, taxa de deformação, e as vezes da história cinemática do elemento de fluido em consideração. Assim, ao invés de uma constante de proporcionalidade (constante material), os fluidos não newtonianos ficam caracterizados por funções materiais, que estabelecem relações entre tensão e deformação.

Os fluidos não newtonianos apresentam diversos comportamentos diferentes que possibilitam agrupá-los convenientemente em três classes gerais (CHHABRA; RICHARDSON, 2008):

1. Fluidos para os quais a taxa de deformação em qualquer ponto é determinada somente pelo valor da tensão de cisalhamento naquele ponto e naquele instante; esses fluidos são conhecidos por vários nomes como: *independentes do tempo, puramente viscosos, inelásticos ou fluidos newtonianos generalizados (GNF)*;
2. Fluidos mais complexos para os quais a relação entre a tensão de cisalhamento e a taxa de deformação depende do tempo de aplicação da tensão e da sua história cinemática, são chamados de *fluidos dependentes do tempo*;
3. Substâncias que possuem características tanto de fluidos ideais quanto de sólidos elásticos e apresentam uma recuperação elástica (memória) após a deformação são categorizados como *fluidos viscoelásticos*.

Esta classificação é arbitrária, pois muitos dos materiais reais, frequentemente, apresentam uma combinação de dois ou até mesmo dos três tipos de características não newtonianas. Entretanto, geralmente é possível identificar a característica não newtoniana dominante e assim, tomá-la como base para os cálculos subsequentes.

Embora os fluidos não newtonianos não tenham a propriedade da viscosidade, pelo menos no sentido dos fluidos newtonianos, é conveniente definir uma **viscosidade aparente** (ou viscosidade não newtoniana) como o quociente entre tensão de cisalhamento local e a taxa de deformação no ponto:

$$\eta = \eta(\dot{\gamma}) = \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}_{xy}}. \quad (2.2)$$

A viscosidade aparente não é propriamente uma propriedade dos fluidos não newtonianos, pois o seu valor depende do campo de escoamento ou tensão de cisalhamento. No entanto, é uma quantidade útil e as curvas de escoamento são frequentemente construídas com a viscosidade aparente no eixo das ordenadas e a taxa de deformação no eixo das abscissas. Os valores resultantes da viscosidade aparente para taxas de deformação muito baixas e muito altas são conhecidos como viscosidade de cisalhamento zero, η_0 , e viscosidade de cisalhamento infinita, η_∞ , respectivamente.

Outras duas quantidades úteis são o primeiro e segundo coeficientes das tensões normais Ψ_1 e Ψ_2 , respectivamente. Eles relacionam as diferenças das tensões normais, N_1 e N_2 no escoamento com a taxa de deformação de acordo com as expressões (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987)

$$N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy} = \Psi_1(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xy}^2 \quad (2.3)$$

$$N_2 = \tau_{yy} - \tau_{zz} = \Psi_2(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}_{xy}^2, \quad (2.4)$$

em que N_1 é chamada de primeira diferença das tensões normais e N_2 de segunda diferença das tensões normais.

Os coeficientes de tensões normais e a viscosidade aparente são chamados de funções materiais.

2.3 COMPORTAMENTO DE FLUÊNCIA DOS MATERIAIS

O estudo dos fenômenos de fluência de materiais começou no início do século em pesquisas realizadas com metais, embora diversos outros tipos de materiais apresentem o mesmo tipo de comportamento. Decorrem dessas pesquisas, os modelos físicos e matemáticos desenvolvidos e utilizados até hoje que tratam da fluência.

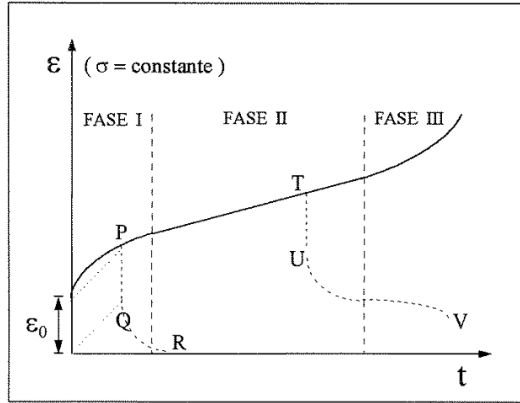
Fluência, ou *creep*, é a tendência que um material possui de se mover lentamente ou deformar permanentemente ao longo do tempo para aliviar a tensão. Esse movimento ou deformação ocorre em consequência do longo período de exposição a níveis de tensão que estão abaixo da tensão limite do material. Nos materiais sujeitados a altas temperaturas por longos períodos,

a fluência ocorre com maior frequência. A taxa de fluência depende das propriedades do material, do tempo e da temperatura de exposição e das tensões aplicadas ao material. Portanto, o entendimento do fenômeno de fluência é de extrema importância na exploração do petróleo em águas ultraprofundas em zonas salinas, uma vez que os poços perfurados nessas áreas operam sob altas tensões e temperaturas.

A fluência dos materiais pode ser abordada no âmbito tanto do micro quanto do macrocomportamento. No campo do microcomportamento, estuda-se a fluência com base na estrutura cristalina do material e redistribuição de átomos na mesma em busca do equilíbrio ótimo das forças interatômicas. No campo do macrocomportamento a explicação do comportamento de fluência pode ser feita através da Figura 3, na qual é ilustrada uma curva da evolução da deformação de um corpo de prova de um material com características viscosas versus tempo quando este é submetido a um estado de tensões desviadoras constante no tempo:

- De imediato, o material deforma quase que instantaneamente após a aplicação da carga o que corresponde a uma deformação elástica que evoluirá para a FASE I do gráfico. Tal fase, denominada fluência primária ou transiente, tem como característica a desaceleração da deformação inicial que representa uma redistribuição da tensão aplicada no esqueleto mineral, apenas parcialmente acomodada na deformação elástica inicial (COSTA; POIATE, 2009). Se, no decorrer desta fase, a tensão for reduzida repentinamente a zero, ocorrerá uma restauração da configuração inicial do corpo de prova, trajetória **PQR**. O trecho **PQ** representa a restauração devido à deformação elástica instantânea e o trecho **QR** representa uma restauração lenta, tendendo a zero, podendo-se dizer que o material retornará ao regime elástico, não restando deformações permanentes (GRAVINA, 1997).
- Depois, tem início a fase de fluência secundária ou estacionária (FASE II do gráfico), a qual tem como característica principal a constância na taxa de deformação do material. Ao reduzir o nível de tensão repentinamente a zero, ocorrerá inicialmente uma restauração imediata da deformação elástica, indicada pelo trecho **TU** e, em seguida, uma restauração lenta (trecho **UV**), tendendo assintoticamente para uma deformação permanente (GRAVINA, 1997).
- Finalmente, pode aparecer a fluência terciária (FASE III do gráfico) caracterizada por uma aceleração da deformação do corpo sólido, conduzindo-o rapidamente à ruptura.

Figura 3 – Ensaio típico de fluência de um material viscoso (modificado de Gravina (1997))



2.4 FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

O modelo de fluido newtoniano generalizado tem a deficiência de não prever o efeito elástico que é característico dos fluidos viscoelásticos. Na teoria clássica de elasticidade, a tensão em um corpo cisalhado, σ_{xy} , é diretamente proporcional à deformação, γ_{xy} . Para a tensão, aplica-se a lei de Hooke e o coeficiente de proporcionalidade é conhecido como módulo elástico cisalhante (MASE; MASE, 1999), G , dado por

$$\sigma_{xy} = -G \frac{dx}{dy} = G \gamma_{xy}, \quad (2.5)$$

onde dx é o deslocamento cisalhante de dois elementos separados por uma distância dy . Quando um sólido perfeito é deformado elasticamente, ele volta a sua forma original assim que cessa a tensão. Entretanto, se a tensão aplicada exceder a tensão limite de escoamento característica do material, a completa recuperação não irá ocorrer e a fluência (*creep*) terá lugar, ou seja, o sólido terá escoado.

No outro extremo, em um fluido newtoniano, a tensão de cisalhamento é proporcional à taxa de deformação. Neste caso, a constante de proporcionalidade entre a tensão de cisalhamento, τ_{xy} , e a taxa de deformação, $\dot{\gamma}_{xy}$, é a viscosidade, η . Matematicamente,

$$\tau_{xy} = \eta \dot{\gamma}_{xy}. \quad (2.6)$$

Um fluido não possui forma geométrica definida e escoa irreversivelmente quando submetido a forças externas. Muitos materiais apresentam um

comportamento mecânico intermediário entre estes dois extremos, evidenciando tanto características viscosas como elásticas e, por este motivo, são conhecidos como viscoelásticos. Estas substâncias quando submetidas à tensão de cisalhamento sofrem uma deformação e quando esta cessa, ocorre certa recuperação da deformação sofrida (comportamento elástico). Portanto, materiais viscoelásticos são aqueles para os quais a relação entre tensão e deformação é dependente do tempo. Alguns exemplos de materiais viscoelásticos incluem polímeros amorfos, polímeros semicristalinos, biopolímeros, metais em temperaturas muito altas, sangue, saliva, muco, etc. Nesta categoria podemos incluir também os evaporitos, encontrados nas camadas de sal que servem de barreiras à saída do petróleo da bacia.

Certamente, a característica mais marcante relacionada com a deformação de uma substância viscoelástica é ter, simultaneamente, características fluidas e sólidas. Assim, não é de todo surpreendente que as primeiras tentativas de descrição quantitativa do comportamento viscoelástico eram articuladas na ideia de uma combinação linear das propriedades elásticas e viscosas usando análogos mecânicos envolvendo molas (componente elástica) e amortecedores (ação viscosa). As molas são, essencialmente, os mecanismos que armazenam energia e os amortecedores são mecanismos que dissipam a energia (produção de entropia). No elemento de mola, a tensão σ_{xy} representa a força que atua na mola e a deformação γ_{xy} corresponde ao deslocamento da mola. O módulo de elasticidade G representa a rigidez k da mola. Já, no elemento amortecedor, a tensão que atua no amortecedor representa a tensão cisalhante τ_{xy} que age sobre o fluido newtoniano; a variação de deslocamento com o tempo ou taxa de amortecimento corresponde à taxa de deformação $\dot{\gamma}_{xy}$. A viscosidade do amortecedor é equivalente à viscosidade η do fluido. Estas relações podem ser vistas na Figura 4.

Figura 4 – Representação do comportamento reológico ideal: (a) Sólido elástico linear, (b) Fluido viscoso newtoniano



A partir da associação dos elementos simples de mola com os elementos de amortecedor é possível formar novos modelos que representam e se ajustam melhor às curvas experimentais de fluência dos materiais. Alguns

desses modelos serão apresentados em seguida. A fim de facilitar a notação suprimiu-se os subíndices da tensão de cisalhamento, da deformação e da taxa de deformação, ou seja, usou-se τ , γ e $\dot{\gamma}$, respectivamente. Importante ressaltar que $\tau = \sigma_{yx} = \tau_{yx}$.

Resumindo, para cada elemento do modelo vale uma das relações:

$$\tau^e = G\gamma^e \quad (2.7)$$

$$\tau^v = \eta\dot{\gamma}^v, \quad (2.8)$$

onde γ^e e τ^e representam a deformação e a tensão agindo na mola, respectivamente, enquanto que γ^v e τ^v representam respectivamente a deformação e tensão viscosas agindo no amortecedor.

2.4.1 Fluidos Viscoelásticos Lineares

O principal objetivo desta seção é mostrar como as ideias de elasticidade e viscosidade podem ser combinadas em uma única equação constitutiva capaz de descrever vários efeitos elásticos e viscosos.

2.4.1.1 Modelo de Maxwell e o tempo de relaxação

O modelo de Maxwell representa o alicerce dos modelos viscoelásticos lineares, apesar de ser imperfeito, no entanto, ele faz a captura das características marcantes do comportamento viscoelástico, pelo menos qualitativamente. Um análogo mecânico deste modelo é obtido pela combinação em série de uma mola com um amortecedor, conforme mostrado esquematicamente na Figura 5. Se as taxas ou velocidades de deformação individuais da mola e do amortecedor são, respectivamente, $\dot{\gamma}_1$ e $\dot{\gamma}_2$, então a taxa de deformação total, $\dot{\gamma}$, é dada pela soma desses dois componentes (JAEGER; COOK; ZIMMERMAN, 2007):

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_1 + \dot{\gamma}_2 = \frac{d\gamma_1}{dt} + \frac{d\gamma_2}{dt}. \quad (2.9)$$

Combinando a equação (2.9) com a lei de Hooke para a elasticidade, equação (2.5), e a lei de Newton da viscosidade, equação (2.6), obtém-se:

$$\tau + \lambda\dot{\tau} = \eta\dot{\gamma}, \quad (2.10)$$

onde $\dot{\tau}$ é a derivada no tempo de τ , η é a viscosidade do fluido do amortecedor e $\lambda (= \eta/G)$ é o *tempo de relaxação*, o qual é característico do fluido. Tal tempo pode ser definido, provisoriamente, como uma medida apropriada do tempo requerido para a tensão de cisalhamento, em um escoamento de um fluido viscoelástico sofrendo cisalhamento puro, retornar a zero sob a

Figura 5 – Representação do modelo de Maxwell



condição de deformação constante. Para o caso de um sólido elástico linear a tensão de cisalhamento nunca retornara para zero sob a condição de uma deformação constante diferente de zero. Daí toma-se o tempo de relaxação como infinito. Para um fluido newtoniano a relaxação da tensão é imediata e o tempo de relaxação é igual a zero. Tempos de relaxação que são infinito ou zero nunca se concretizam na realidade: eles correspondem a idealização matemática de sólidos elásticos de Hooke e líquidos newtonianos. Na prática, a relaxação da tensão após a imposição de uma condição de deformação constante ocorre ao longo de um intervalo de tempo diferente de zero. Esta é a característica que define os materiais viscoelásticos. Visto que a lei de Hooke é válida para gradientes de deslocamentos infinitesimais, parece razoável esperar que a equação de Maxwell esteja sujeita à mesma restrição.

É fácil verificar, a partir da equação (2.10), que caso o amortecedor se torne rígido ($\eta = \infty$), o modelo de Maxwell se reduz à mola e caso a mola seja rígida ($G = \infty$), o modelo se reduz ao fluido newtoniano.

Uma importante característica do modelo de Maxwell é sua resposta predominantemente fluida.

No modelo de Maxwell, a deformação cresce linearmente com o tempo a partir de uma deformação elástica inicial, logo a fluência primária não pode ser captada pelo modelo. Assim sendo, o modelo de Maxwell representa apenas a fluência secundária ou estacionária.

Para muitos propósitos, seria preferível resolver a equação (2.10) para o tensor tensão. Isso é facilmente feito por reconhecer que a equação (2.10) é de primeira ordem e linear para τ como função do tempo, a qual pode ser integrada e manipulada (GRAVINA, 1997; COSTA, 1984), obtendo-se

$$\tau(t) = + \int_{-\infty}^t \left[\frac{\eta_0}{\lambda^2} e^{-(t-t')/\lambda} \right] \dot{\gamma}(t, t') dt'. \quad (2.11)$$

A quantidade entre colchetes é chamada de função de memória para

o fluido de Maxwell, t é o tempo presente e t' é o tempo passado. Nesta forma, o modelo de Maxwell estabelece que a tensão no tempo presente t depende da história da deformação para todos tempos passados $-\infty < t' \leq t$. O fator exponencial no integrando representa a dissipação da memória (*fading memory*). Ou seja, o fluido se lembra muito bem o que sofreu no passado muito recente, mas tem apenas uma vaga lembrança de eventos no passado distante (decaimento exponencial).

A equação de Maxwell desempenhou um papel fundamental no desenvolvimento da viscoelasticidade linear, e também tem servido como ponto inicial no desenvolvimento de modelos não lineares de viscoelasticidade.

Nos ensaios de relaxação das tensões, para os quais o modelo de Maxwell é de interesse, impõe-se uma deformação inicial constante, $\gamma_0 =$ constante, ao corpo de prova, fazendo com que o nível de tensões no sistema se eleve para τ_0 . Caso novas deformações não forem permitidas ocorrerá uma diminuição gradativa, ao longo do tempo, das tensões atuantes no corpo de prova. Matematicamente, isso pode ser confirmado, resolvendo a equação (2.10), para o caso unidimensional. Mas como a deformação inicial é constante e novas deformações são impedidas, a equação (2.10) se torna uma equação diferencial ordinária, homogênea, de primeira ordem, ou seja,

$$\tau + \lambda \dot{\tau} = 0 \quad (2.12)$$

cuja solução é do tipo

$$\tau(t) = C \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right). \quad (2.13)$$

Para encontrar o valor de c , considera-se a condição inicial dada por:

$$\tau = G\gamma_0 \text{ em } t = 0, \quad (2.14)$$

obtendo $C = G\gamma_0 = \tau_m$ (valor máximo da tensão).

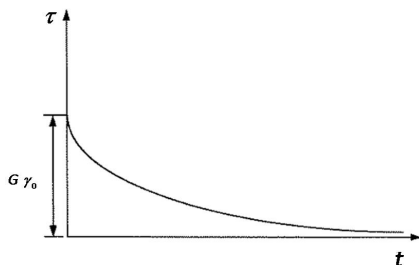
Substituindo na equação (2.13):

$$\tau(t) = \tau_m \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right). \quad (2.15)$$

Para condições de deformação constante, a tensão decai exponencialmente com o tempo, como pode ser verificado no gráfico da Figura 6. Nos estágios iniciais ($t \rightarrow 0$) do ensaio, o termo exponencial, $\exp(-t/\lambda)$, tende a 1 e a resposta é de um fluido elástico (somente a mola). Quando $t = \lambda$, a tensão caiu do seu valor máximo (τ_m) para τ_m/e . Assim, λ controla a taxa de relaxação da tensão. O tempo de relaxação da água é aproximadamente $10^{-12}s$, de um polietileno de baixa densidade é por volta de $10s$ já o do vidro é mais de 28 horas (OWENS; PHILLIPS, 2002). Pode-se concluir que a

tensão agindo no material não cairá necessariamente a zero para um tempo infinito conforme o modelo prevê.

Figura 6 – Ensaio de relaxação das tensões para o modelo de Maxwell



Este modelo é válido apenas em regiões em que a viscoelasticidade apresenta comportamento linear.

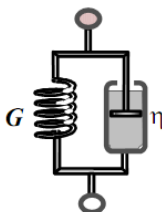
2.4.1.2 Modelo de Kelvin-Voigt e o tempo de retardamento

Este modelo é utilizado para representar um material com características predominantemente de sólido. Um arranjo em paralelo de mola e amortecedor é usado para representá-lo, conforme mostrado esquematicamente na Figura 7.

Neste caso, a deformação nos dois componentes é igual e a equação que descreve a relação entre tensão e deformação deste sistema é obtida pela adição das tensões individuais nos dois elementos conforme:

$$\tau = G\gamma + \eta\dot{\gamma}. \quad (2.16)$$

Figura 7 – Representação esquemática do modelo de Kelvin-Voigt

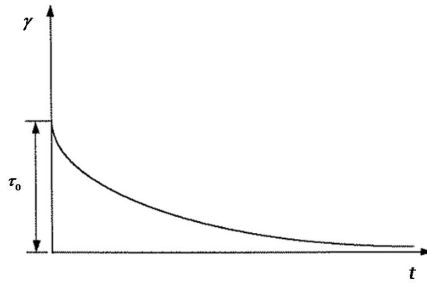


Se a tensão é constante em τ_0 e a deformação inicial é zero, após a remoção da tensão, a deformação decai exponencialmente com uma constante do tempo, $\lambda (= \eta/G)$.

Esse comportamento é mostrado no gráfico da Figura 8.

A resposta predominantemente sólida deste modelo é claramente percebida pelo fato de que ele não exibe escoamento viscoso não recuperável ilimitado e entrará em repouso quando a mola tiver retomado a carga.

Figura 8 – Ensaio de recuperação das tensões (modelo de Kelvin-Voigt)



Se uma tensão ($\tau = \tau_c = \text{constante}$) é subitamente aplicada em ($t = 0$) e mantida constante, a equação (2.16) fica

$$\tau_c = G\gamma + \eta\dot{\gamma}, \quad (2.17)$$

cuja solução, para $t > 0$, é dada por

$$\gamma(t) = \frac{\tau_c}{G} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\lambda}\right) \right), \quad (2.18)$$

onde λ é o *tempo de retardamento* do material e no presente contexto é o tempo tomado para a deformação alcançar $(1 - e^{-1})$ do seu valor final τ_c/G depois da imposição de uma tensão de cisalhamento constante τ_c . Alternativamente, e equivalentemente, é o tempo para a deformação reduzir para e^{-1} do seu valor original quando a tensão de cisalhamento é removida.

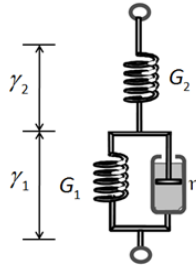
Pela equação (2.18) se observa que a velocidade de deformação tende a zero quando o tempo tende ao infinito. Essa equação pode representar satisfatoriamente a fluência primária de algumas rochas. Entretanto, o modelo de Kelvin-Voigt não é capaz de prever a deformação elástica inicial. Além disso, este modelo não consegue representar a deformação permanente após o descarregamento, fluência terciária e relaxação dependente do tempo.

2.4.1.3 Modelo de Zener

Para resolver o problema da incapacidade do modelo de Kelvin-Voigt de prever a deformação elástica instantânea, acrescenta-se um elemento de mola, em série, ao mesmo, obtendo assim o chamado modelo de Zener ou modelo de sólido linear (Figura 9). A fim de deduzir a equação constitutiva deste modelo se observa que a deformação total é dada pela soma das deformações γ_1 e γ_2 (COSTA, 1984; GRAVINA, 1997), ou seja,

$$\gamma = \gamma_1 + \gamma_2. \quad (2.19)$$

Figura 9 – Representação esquemática do modelo de Zener



As relações válidas para a tensão aplicada ao modelo são as seguintes:

$$\begin{aligned} \tau &= G_1 \gamma_1 + \eta \dot{\gamma}_1 \\ \tau &= G_2 \gamma_2. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Combinando as equações (4.36) e (4.37) para eliminar γ_1 e γ_2 , obtém-se

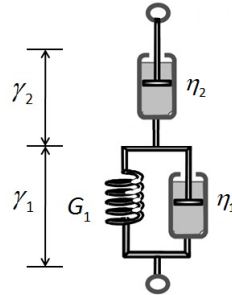
$$\eta \dot{\tau} + (G_1 + G_2) \tau = G_2 (G_1 \gamma + \eta \dot{\gamma}). \quad (2.21)$$

O modelo de Zener representa satisfatoriamente a fluência primária, bem como a deformação elástica inicial. Entretanto, não é capaz de representar a fluência secundária ou estacionária. É usado para representar sólidos viscoelásticos.

2.4.1.4 Modelo de Jeffreys

Acrescentando um elemento de amortecedor, em série, ao modelo de Kelvin-Voigt se obtém o chamado modelo de Jeffreys (Figura 10).

Figura 10 – Representação esquemática do modelo de Jeffreys



As relações válidas para a deformação total e as tensões são as seguintes:

$$\begin{aligned}\gamma &= \gamma_1 + \gamma_2 \\ \tau &= G\gamma_1 + \eta_1\dot{\gamma}_1 \\ \tau &= \eta_2\dot{\gamma}_2\end{aligned}\quad (2.22)$$

Manipulando as equações anteriores se obtém uma expressão em função da tensão e da deformação total γ :

$$\tau + \left(\frac{\eta_1 + \eta_2}{G}\right)\dot{\tau} = \eta_2\left(\dot{\gamma} + \frac{\eta_1}{G}\ddot{\gamma}\right)\quad (2.23)$$

ou

$$\tau + \lambda_2\dot{\tau} = \eta_2(\dot{\gamma} + \lambda_1\ddot{\gamma}),\quad (2.24)$$

onde

$$\lambda_1 = \frac{\eta_1}{G}, \quad \lambda_2 = \frac{\eta_1 + \eta_2}{G}\quad (2.25)$$

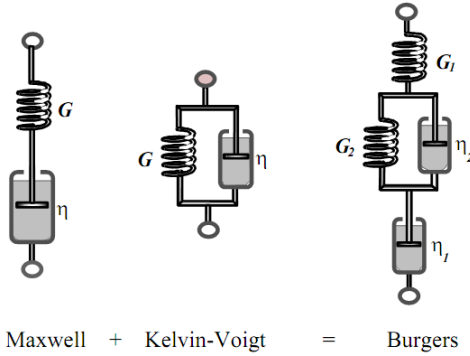
são o tempo de relaxação e o tempo de retardamento, respectivamente.

O modelo de Jeffreys não é capaz de representar a deformação instantânea inicial. Entretanto, representa a fluência transiente e a fluência secundária.

2.4.1.5 Modelo de Burgers

Dentro do contexto de análogos mecânicos, o modelo de Burgers para um fluido viscoelástico pode ser pensado como um sólido de Kelvin-Voigt em série com um fluido de Maxwell, conforme mostra, esquematicamente, a Figura 11. Como os modelos de Maxwell e Kelvin estão acoplados em série,

Figura 11 – Representação esquemática do modelo de Burgers



a deformação total do sistema é dada pela soma das deformações desses dois elementos, ou seja,

$$\gamma = \gamma_M + \gamma_{KV}, \quad (2.26)$$

onde γ_M é a deformação do elemento de Maxwell e γ_{KV} é a deformação do elemento de Kelvin-Voigt.

A tensão atuante em cada um dos elementos é a mesma:

$$\tau = \tau_M = \tau_{KV}. \quad (2.27)$$

A equação constitutiva para o modelo de Maxwell pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\tau_M}{\eta_1} + \frac{\dot{\tau}_M}{G_1} = \dot{\gamma}. \quad (2.28)$$

Analogamente, reescreve-se a equação para o modelo de Kelvin-Voigt, conforme:

$$\tau_{KV} = G_2 \gamma_{KV} + \eta_2 \dot{\gamma}_{KV}. \quad (2.29)$$

Substituindo as equações (2.28) e (2.29) na equação (2.27), e utilizando (2.26) para eliminar γ_M e γ_{KV} das equações resultantes, chega-se à seguinte equação constitutiva (MASE; MASE, 1999; RIANDE et al., 2000; IRGENS, 2008):

$$\eta_2 \ddot{\gamma} + G_2 \dot{\gamma} = \left(\frac{\eta_2}{G_1} \right) \ddot{\tau} + \left(1 + \frac{G_2}{G_1} + \frac{\eta_2}{\eta_1} \right) \dot{\tau} + \left(\frac{G_2}{\eta_1} \right) \tau. \quad (2.30)$$

Rearranjando:

$$\eta_1 \left(\frac{\eta_2}{G_2} \ddot{\gamma} + \dot{\gamma} \right) = \left(\frac{\eta_1 \eta_2}{G_1 G_2} \right) \ddot{\tau} + \left(\frac{\eta_1}{G_1} + \frac{\eta_1 + \eta_2}{G_2} \right) \dot{\tau} + \tau \quad (2.31)$$

ou

$$\eta_1 (\lambda_1 \dot{\gamma} + \dot{\gamma}) = (\lambda_1 \beta) \ddot{\tau} + (\beta + \lambda_2) \dot{\tau} + \tau, \quad (2.32)$$

onde

$$\lambda_1 = \frac{\eta_2}{G_2}, \quad \lambda_2 = \frac{\eta_1 + \eta_2}{G_2} \quad (2.33)$$

são o tempo de relaxação e o tempo de retardamento, respectivamente e $\beta = \eta_1/G_1$ é outra constante de tempo. Com um pouco mais de álgebra, a equação (2.32) pode ser escrita como

$$q_1 \dot{\gamma} + q_2 \ddot{\gamma} = \tau + p_1 \dot{\tau} + p_2 \ddot{\tau}, \quad (2.34)$$

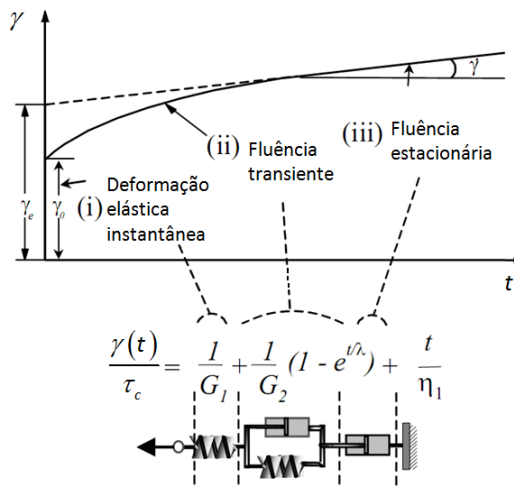
onde

$$p_1 = \beta \left(1 + \frac{G_1}{G_2} \right) + \lambda_1, \quad p_2 = \lambda_1 \beta, \quad (2.35)$$

$$q_1 = \beta G_1, \quad q_2 = \lambda_1 \eta_1.$$

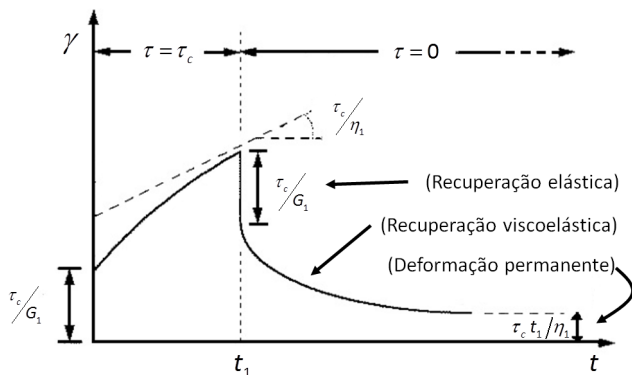
O comportamento de fluência de um material utilizando o modelo de Burgers é mostrado na Figura 12 onde se pode observar que o modelo de Burgers consegue reproduzir a deformação instantânea elástica inicial ($\gamma_0 = \tau_c/G_1$), a deformação na fase de fluência transiente e, ainda, a deformação da fluência secundária com velocidade de deformação constante ($\dot{\gamma} = \tau_c/\eta_1$).

Figura 12 – Ensaio de fluência para o modelo de Burgers (modificado de Barnes (2000))



A representação do ensaio de recuperação de deformações (impõe-se uma deformação instantânea de magnitude γ_0 , mantendo-a nesse valor até um tempo t_1 enquanto a tensão resultante é medida e armazenada como função do tempo) é mostrada na Figura 13 na qual se observa que o modelo de Burgers representa além da deformação instantânea, da fluência primária ou transiente e da fluência secundária ou estacionária, também as deformações permanentes no modelo. Dentre os modelos reológicos vistos até o momento, o modelo de Burgers é aquele que melhor representa o comportamento de um material viscoelástico em regime de fluência.

Figura 13 – Ensaio de recuperação das tensões do modelo de Burgers



Cada um dos modelos apresentados anteriormente é governado por uma equação diferencial linear. Uma das principais virtudes de tais modelos lineares é que eles podem ser convenientemente sobrepostos através da introdução de um espectro de tempo de relaxamento, como exibido na prática, através de sistemas poliméricos ou superior ou pela inclusão de derivadas de ordem mais alta. A limitação mais notável desses modelos é a restrição para pequenas deformações e pequenas taxas de deformação.

Importante ressaltar que o efeito da temperatura não aparece explicitamente nas equações constitutivas dos modelos reológicos. Entretanto, sabe-se que a fluência de um material viscoelástico é profundamente afetada pela temperatura a qual o mesmo está submetido.

Por simplicidade, os modelos viscoelásticos apresentados nesta seção foram deduzidos para o caso unidimensional. A fim de estender esses modelos para os casos multidimensionais independente do sistema de coordenadas, todos os modelos vistos até o momento são apresentados na Tabela 1 em sua formulação tensorial.

Tabela 1 – Modelos lineares para fluidos viscoelásticos

Modelo	Equação constitutiva
Maxwell	$\mathbf{T} + \lambda \frac{d}{dt} \mathbf{T} = \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}}$
Kelvin-Voigt	$\mathbf{T} = G\boldsymbol{\gamma} + \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}}$
Zener	$\eta \frac{d}{dt} \mathbf{T} + (G_1 + G_2) \mathbf{T} = G_2 (G_1 \boldsymbol{\gamma} + \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}})$
Jeffreys	$\mathbf{T} + \lambda_2 \frac{d}{dt} \mathbf{T} = \eta_2 \left(\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_1 \frac{d}{dt} \dot{\boldsymbol{\gamma}} \right)$
Burgers	$\eta_1 \left(\lambda_2 \frac{d}{dt} (\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \boldsymbol{\gamma}) \right) = \mathbf{T} + (\beta + \lambda_1) \frac{d}{dt} (\mathbf{T}) + (\lambda_2 \beta) \frac{d^2}{dt^2} (\mathbf{T})$

Obs: \mathbf{T} é o tensor tensão extra (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987), $\boldsymbol{\gamma}$ é o tensor deformação e $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ é o tensor taxa de deformação.

2.4.2 Fluidos Viscoelásticos Não Lineares

Nesta seção, descreve-se mais equações constitutivas que possam ser usadas para escoamentos arbitrários. Modelos não lineares permitem descrever, ao menos qualitativamente, o comportamento reológico não linear de materiais com a melhor precisão possível. Por meio de reformulações dos modelos lineares são obtidos alguns modelos não lineares amplamente utilizados para descrever comportamento viscoelástico de materiais. Tais modelos obtidos a partir dos modelos lineares são os chamados *modelos quase lineares*. A alteração desses modelos quase lineares para descrever uma variedade maior de propriedades reológicas leva aos *modelos não lineares* propriamente ditos, capazes de descrever a viscosidade não newtoniana, os efeitos elásticos e a diferença de tensões normais ao longo do escoamento. Existe uma grande variedade de modelos, sendo que cada um é capaz de prever um determinado conjunto de propriedades. Do ponto de vista matemático, os modelos para os fluidos viscoelásticos não lineares podem ser classificados em dois grupos: modelos diferenciais, que são descritos por equações diferenciais, e modelos integrais, descritos por equações integrais.

2.4.3 Modelos diferenciais não lineares

Uma das formas de se obter alguns modelos diferenciais não lineares é pela substituição da derivada temporal nas equações constitutivas lineares pela derivada convectiva no tempo e/ou na inclusão de termos não lineares e parâmetros nas equações. A derivada temporal, proposta por Oldroyd (1950), e aqui denotada por $\delta/\delta t$, é definida como uma combinação linear das deri-

vadas temporais covariante e contravariante de um tensor, isto é,

$$\frac{\delta}{\delta t} (*) = a(*)^\nabla + (1-a)(*)^\Delta, \quad (2.36)$$

em que a é uma constante ($0 \leq a \leq 1$), $(*)^\nabla$ e $(*)^\Delta$ representam a derivada contravariante (ou derivada convectiva superior) e covariante (ou derivada convectiva inferior), respectivamente, definidas por

$$(*)^\nabla = \frac{D}{Dt} (*) - \left\{ (*) \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot (*) \right\}, \quad (2.37)$$

$$(*)^\Delta = \frac{D}{Dt} (*) + \left\{ (*) \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot (*) \right\}, \quad (2.38)$$

onde $D(*)/Dt$ é a derivada material, definida na seção 3.1.

A definição da derivada convectiva parte do princípio que a equação constitutiva deve satisfazer certos critérios de admissibilidade (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987). Oldroyd propôs que as equações constitutivas devem ser independentes:

- (i) do sistema de referência;
- (ii) da posição no espaço, do movimento translacional e do movimento rotacional do elemento de fluido;
- (iii) da tensão e deformação na vizinhança dos elementos de fluidos.

A seguir são apresentados alguns dos mais populares modelos viscoelásticos não lineares.

2.4.3.1 Modelo UCM

O modelo diferencial mais conhecido e o mais simples, matematicamente falando, que combina efeitos transientes e não linearidades, é o modelo UCM (do inglês, *Upper-Convected Maxwell*). O modelo UCM é obtido pela generalização do modelo de Maxwell, substituindo-se a derivada no tempo, na equação (2.10), pela derivada convectiva superior, resultando

$$\mathbf{T} + \lambda \mathbf{T}^\nabla = \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (2.39)$$

O modelo UCM tem sido largamente utilizado para escoamentos viscoelásticos devido a sua simplicidade. É também usado para testar metodologias numéricas, já que a ausência da viscosidade newtoniana no modelo torna mais crítica a estabilidade numérica do problema.

2.4.3.2 Modelo de Oldroyd

Outro modelo muito conhecido é o modelo de Oldroyd (OLDROYD, 1950), obtido pela generalização do modelo linear de Jeffreys, considerando a derivada temporal do tensor tensão e do tensor taxa de deformação como sendo uma derivada convectiva de Oldroyd. Assim, sua equação constitutiva é dada por

$$\mathbf{T} + \lambda_2 \frac{\delta}{\delta t} \mathbf{T} = \eta_2 \left(\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_1 \frac{\delta}{\delta t} \dot{\boldsymbol{\gamma}} \right). \quad (2.40)$$

Dependendo da escolha da derivada convectiva, existe duas possibilidades para este modelo:

- Fluido de Oldroyd-A:

$$\mathbf{T} + \lambda_2 \mathbf{T}^\Delta = \eta_2 \left(\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_1 \dot{\boldsymbol{\gamma}}^\Delta \right). \quad (2.41)$$

- Fluido de Oldroyd-B:

$$\mathbf{T} + \lambda_2 \mathbf{T}^\nabla = \eta_2 \left(\dot{\boldsymbol{\gamma}} + \lambda_1 \dot{\boldsymbol{\gamma}}^\nabla \right). \quad (2.42)$$

Somente a comparação com dados experimentais ou teorias moleculares podem capacitar uma escolha entre as duas equações acima. Os dois modelos produzem valores constantes da viscosidade de cisalhamento em relação à taxa de deformação. A equação (2.41) fornece $N_2 = -N_1$, enquanto que a equação (2.42) fornece $N_1 = 0$. O modelo de Oldroyd-B está mais próximo dos dados experimentais, portanto, é preferido (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

O modelo de Oldroyd 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.

Do ponto de vista prático, o modelo Oldroyd-B ficou popular por apresentar de maneira adequada o comportamento de alguns fluidos em determinadas situações, os chamados fluidos de Boger que apresentam uma viscosidade constante, Ψ_1 aproximadamente constante e ainda Ψ_2 nulo. Os fluidos de Boger são, regra geral, soluções poliméricas diluídas em solventes newtonianos de elevada viscosidade, mas também é possível fabricá-los com solventes de viscosidade moderada desde que estes sejam solventes pobres.

A convergência numérica deste modelo é geralmente mais fácil, se comparada com a do modelo UCM, devido à presença do solvente que introduz uma difusão na equação da quantidade de movimento, conforme será visto no próximo capítulo.

Existe uma classe de modelos similares ao Oldroyd-B e UCM, mas consideram que a viscosidade e o tempo de relaxação são funções do segundo invariante, $II_{\dot{\gamma}} = \sqrt{\frac{1}{2}(\dot{\gamma} : \dot{\gamma})}$, do tensor taxa de deformação $\dot{\gamma}$. Um exemplo desse tipo de modelo é o de White-Metzner, cuja equação é

$$\mathbf{T} + \lambda (II_{\dot{\gamma}}) \mathbf{T}^{\nabla} = -\eta (II_{\dot{\gamma}}) \dot{\gamma}. \quad (2.43)$$

Existe uma grande quantidade de funções que relacionam a viscosidade e o tempo de relaxação com o segundo invariante do tensor taxa de deformação, dentre elas, pode-se citar os modelos de Cross, Carreau-Yasuda e Larson (LARSON, 1988).

2.4.3.3 Modelo de Giesekus

Giesekus, utilizando teorias moleculares, desenvolveu um modelo com três constantes ($\eta_0, \lambda_1, \alpha$), que é não linear nas tensões. Este modelo descreve as regiões das leis de potência para a viscosidade e diferenças de tensões normais. Ele também fornece uma razoável descrição da viscosidade elongacional (BIRD; WIEST, 1995). A equação constitutiva para este modelo é

$$\mathbf{T} + \lambda_1 \mathbf{T}^{\nabla} - (\alpha \lambda_1 / \eta_0) \{\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}\} = -\eta_0 \dot{\gamma}. \quad (2.44)$$

2.4.3.4 Modelo Phan-Thien-Tanner

É um modelo de quatro constantes derivado da teoria de rede de soluções concentradas e polímeros fundidos (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987) e é também não linear nas tensões:

$$Y \mathbf{T} + \lambda \mathbf{T}^{\nabla} + \frac{1}{\lambda} \xi \lambda \{\dot{\gamma} \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \cdot \dot{\gamma}\} = -\eta_0 \dot{\gamma}, \quad (2.45)$$

onde

$$Y = \exp[-\varepsilon (\lambda / \eta_0) tr \mathbf{T}] \approx 1 - \varepsilon (\lambda / \eta_0) tr \mathbf{T}. \quad (2.46)$$

Uma listagem mais completa de modelos para fluidos viscoelásticos não lineares, com uma abordagem mais ampla e detalhada, podem ser encontrados nos trabalhos de Bird, Armstrong e Hassager (1987), Larson (1988).

2.4.4 Modelos Integrais não lineares

Nesta seção será considerado brevemente algumas equações constitutivas integrais, as quais são generalizações não lineares do modelo de Maxwell.

A fórmula geral para esses modelos, chamados quase lineares, é dada pela equação

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t M(t-t') \boldsymbol{\Upsilon}_{[0]}(\mathbf{x}, t, t') dt', \quad (2.47)$$

onde $\boldsymbol{\Upsilon}_{[0]}$ é o tensor de deformação relativa, dado pela expressão

$$\gamma_{[0]}(\mathbf{x}, t, t') = \delta_{ij} - \sum_m \frac{\partial x_i}{\partial x'_m} + \frac{\partial x_j}{\partial x'_m}, \quad (2.48)$$

em que \mathbf{x} é o vetor posição de uma partícula no tempo t e δ_{ij} é o operador delta de Kroenecker. Aqui, M é a função de memória.

Cada tipo de modelo possui uma função de memória característica. Algumas dessas funções de memória são apresentadas a seguir.

- Modelo convectivo de Maxwell:

$$M(t-t') = \frac{\eta_0}{\lambda^2} \exp\left(-\frac{t-t'}{\lambda}\right). \quad (2.49)$$

- Modelo de Oldroyd-B:

$$M(t-t') = \frac{\eta_0}{\lambda_1^2} \left[\left(1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right) \exp\left(-\frac{t-t'}{\lambda_1}\right) + \lambda_1 \lambda_2 \frac{\partial}{\partial t'} \delta(t-t') \right]. \quad (2.50)$$

- Modelo convectivo de Maxwell generalizado:

$$M(t-t') = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\eta_i}{\lambda_i^2} \exp\left(-\frac{t-t'}{\lambda_i}\right). \quad (2.51)$$

Introduzindo não linearidades na equação (2.47), chega-se a modelos não lineares propriamente ditos. Os termos normalmente introduzidos na equação são os invariantes do tensor da deformação de Finger na função memória, produtos do tipo $\boldsymbol{\Upsilon}_{[0]} \boldsymbol{\Upsilon}_{[0]}$, entre outras possibilidades (BIRD; ARMS-TRONG; HASSAGER, 1987).

Um dos mais conhecidos exemplos é a equação K-BKZ, do qual se derivam diversos modelos, dada pela expressão

$$\mathbf{T} = \int_{-\infty}^t \left[\Psi_1(t-t', I_1, I_2) \boldsymbol{\Upsilon}_{[0]} + \Psi_2(t-t', I_1, I_2) \boldsymbol{\Upsilon}^{[0]} \right] dt', \quad (2.52)$$

onde I_1 e I_2 são respectivamente, o primeiro invariante do tensor de deformação de Finger e o Tensor de deformação de Cauchy-Green. Aqui, Ψ_1 e Ψ_2 são

funções escalares de I_1 e I_2 . O tensor $\boldsymbol{\gamma}_{[0]}$ é dado pela equação (2.48) enquanto que o tensor $\boldsymbol{\gamma}^{[0]}$ é dado pela expressão

$$\boldsymbol{\gamma}^{[0]}(\mathbf{x}, t, t') = \sum_m \frac{\partial x'_m}{\partial x_i} + \frac{\partial x'_m}{\partial x_j} - \delta_{ij}. \quad (2.53)$$

Geralmente os modelos integrais apresentam melhores previsões quantitativas quando comparados aos seus análogos diferenciais e são mais completos em relação ao número e tipos de funções materiais que se pode prever. Do ponto de vista numérico, a solução destes modelos é mais difícil e exige um maior esforço computacional (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

2.4.5 Diferença entre as estratégias newtoniana e não newtoniana na resolução de um problema de mecânica dos fluidos

Nas seções anteriores foi dada uma breve descrição das propriedades dos fluidos e dos modelos reológicos que evidenciam as diferenças entre os fluidos newtonianos e não newtonianos. Essas diferenças também se traduzem na necessidade de se adotar estratégias diferentes na solução dos problemas de mecânica dos fluidos.

Para o caso dos fluidos newtonianos não existe necessidade de se escolher uma equação constitutiva a utilizar. As diferenças entre os resultados dos cálculos numéricos devem-se a erros de aproximações grosseiras na discretização das equações de conservação, de malhas insuficientemente refinadas, método numérico, etc. Se o regime for laminar não deverá sequer haver erros de caráter físico. A estratégia de solução de escoamentos newtonianos pode ser representada esquematicamente na Figura 14.

Quando se trata de um fluido não newtoniano, além das fontes de erro relatadas para o caso newtoniano, que se tornam mais agudas devido a elasticidade dos fluidos, é ainda necessário selecionar uma equação constitutiva adequada. Como não existe uma equação constitutiva única capaz de representar as propriedades reológicas de todos os fluidos, esta seleção deve ser feita cuidadosamente, identificando as propriedades que são relevantes no escoamento em estudo. Muitas vezes se escolhe um modelo inadequado para a situação em análise sendo necessário selecionar um novo modelo constitutivo. Nem sempre são óbvias as vantagens e desvantagens de um determinado modelo. A Figura 15 ilustra a estratégia de solução de um problema envolvendo um fluido não newtoniano.

Figura 14 – Solução de um problema de mecânica dos fluidos envolvendo fluido newtoniano

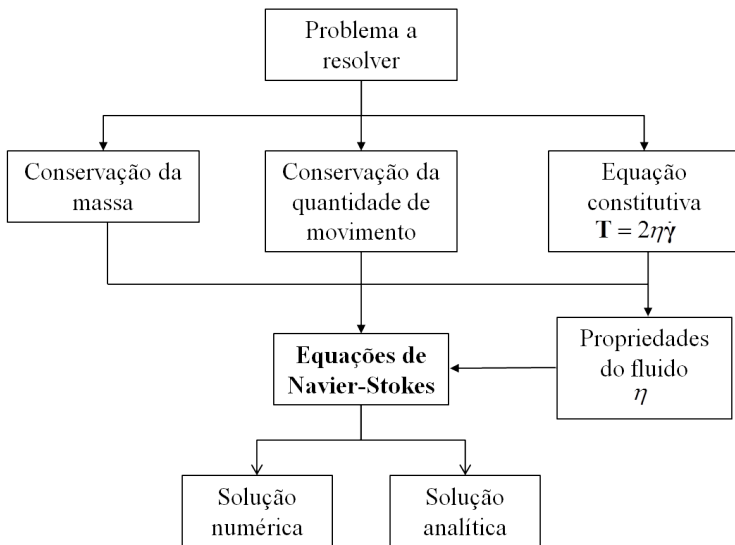
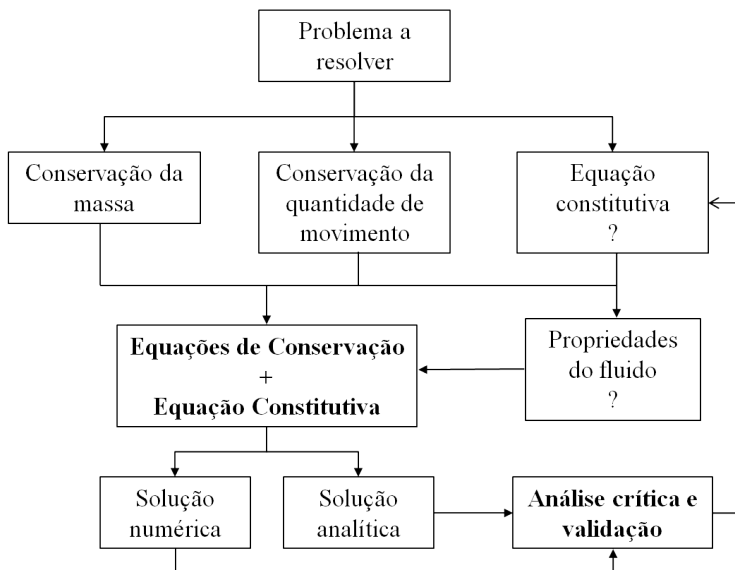


Figura 15 – Solução de um problema de mecânica dos fluidos envolvendo fluido não newtoniano



A solução de um problema de escoamento de um fluido viscoelástico, além das equações de conservação de massa e quantidade de movimento, requer a resolução de equações diferenciais parciais para cada uma das componentes das tensões. Ou seja, não é possível a substituição das tensões na equação da quantidade de movimento para se obter uma equação final explícita para o campo de velocidades. Isto evidencia o elevado grau de dificuldade na resolução do problema em relação ao caso newtoniano.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo são apresentadas as equações fundamentais que regem o escoamento de um fluido. A sua resposta depende ainda das leis constitutivas que modelam o seu comportamento dinâmico, leis estas dependentes da caracterização reológica do fluido, conforme visto na seção 2.4. Neste capítulo também se fará a escolha da equação constitutiva que será utilizada nas simulações numéricas.

A descrição do escoamento de um fluido pressupõe o conhecimento, em cada instante e posição, da velocidade, estado de tensão, pressão, e temperatura (caso este não seja isotérmico) a que se encontra sujeito um ponto material qualquer. A velocidade é uma grandeza vetorial; seja \mathbf{v} esse vetor: u , v , w serão as componentes que a definem num referencial cartesiano. Já a tensão, devido à sua definição, é uma grandeza tensorial que depende não só da posição mas também da orientação do plano sobre o qual é avaliada; concebendo a forma poliédrica mais simples, a de um tetraedro, facilmente se intuiu que para determinar a tensão atuante num plano de orientação arbitrária se exige o conhecimento de pelo menos três outras tensões.

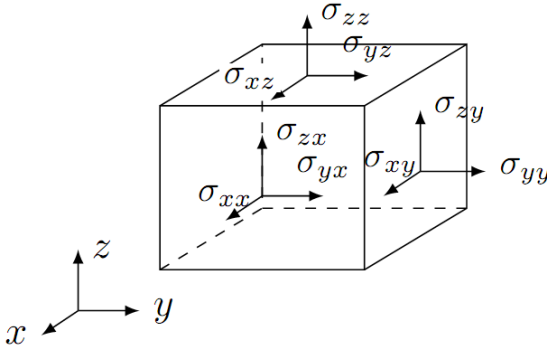
O estado de tensão em um ponto de um material pode ser descrito sob a forma de um tensor desde que se conheçam seis das suas componentes de tensão, não dependentes entre si. Num referencial cartesiano, esse tensor, denominado tensor tensão, $\boldsymbol{\sigma}$, escreve-se,

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

Este tensor apresenta as componentes das tensões atuantes nas faces de um volume material mostrado na Figura 16. O primeiro índice identifica a face de atuação pela sua normal e o outro a direção atuante. Das nove componentes deste tensor, apenas seis, como já foi referido, são independentes, sendo idênticas as tensões com índices permutados para manter o equilíbrio de momentos. O tensor é por isso simétrico.

Portanto, conclui-se que o escoamento de um fluido incompressível fica caracterizado, em cada instante e posição, por três componentes de velocidade, seis componentes de tensão, pressão e temperatura, ao todo 11 variáveis.

Figura 16 – Representação gráfica do tensor das tensões num referencial cartesiano



3.1 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

O movimento de qualquer fluido é descrito pelas equações da conservação da massa (continuidade), conservação da quantidade de movimento e, se os efeitos térmicos são importantes, conservação da energia. Neste trabalho, tem-se interesse em tratar apenas com problemas onde a temperatura é assumida constante. A dedução das equações de conservação, empregadas neste trabalho, pode ser consultada em maiores detalhes no Apêndice B.

A primeira lei a considerar é a de *conservação de massa*, expressa pela equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \mathbf{v}), \quad (3.2)$$

onde \mathbf{v} é o vetor velocidade e ρ a massa específica.

Se o fluido tem massa específica constante, a equação anterior fica

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0. \quad (3.3)$$

A determinação do campo de velocidades sugere, naturalmente, o recurso à segunda lei de Newton. No caso do estudo do movimento de um fluido, esta lei traduz-se, na forma vetorial, pela *equação de conservação de quantidade de movimento linear*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad (3.4)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é o *tensor tensão de Cauchy* e \mathbf{g} são as chamadas forças de campo.

Para fluidos incompressíveis, o tensor tensão $\boldsymbol{\sigma}$ é convenientemente separado em uma parte isotrópica, $p\mathbf{I}$, onde p é a pressão, e uma parte chamada de *tensor tensão desviador* ou *tensor tensão extra* denotado por \mathbf{T} . Assim,

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}, \quad (3.5)$$

onde \mathbf{I} é o tensor identidade. Isto posto, a equação (3.4) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{T} - \nabla \cdot \mathbf{P} + \rho \mathbf{g}, \quad (3.6)$$

em que $\mathbf{P} = p\mathbf{I}$.

Conforme visto na seção 2.1, para caso de fluidos newtonianos incompressíveis a tensão viscosa é diretamente proporcional à taxa de deformação por cisalhamento. Isto permite que as tensões possam ser expressas em termos de gradientes de velocidade de acordo com

$$\mathbf{T} = \eta \dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T. \quad (3.7)$$

Sendo assim, a equação de conservação da quantidade de movimento linear para um escoamento incompressível com viscosidade constante é dada pela expressão

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} - \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla p + \rho \mathbf{g}. \quad (3.8)$$

As equações de conservação podem ser reescritas utilizando a noção de derivada material, a qual representa a taxa de variação temporal de uma quantidade vista por um observador se movendo com o fluido. Isto é, adotando um sistema de referência cartesiano fixo com os vetores de base ortonormais \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 considera-se um elemento infinitesimal de fluido (partícula) com vetor posição

$$\mathbf{x}(t') = (x_1(t'), x_2(t'), x_3(t')) \equiv x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + x_3 \mathbf{e}_3$$

em algum tempo t' . Então, definindo-se a velocidade do elemento no tempo $t' = t$ como

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}(t), t) = \left. \frac{d\mathbf{x}(t')}{dt'} \right|_{t'=t}. \quad (3.9)$$

A aceleração da partícula de fluido no tempo $t' = t$ é dada por

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}(t), t) = \left. \frac{D}{Dt'} \mathbf{v}(\mathbf{x}(t'), t') \right|_{t'=t}. \quad (3.10)$$

O operador D/Dt' é chamado de *derivada material* ou *derivada substantiva* ou *derivada espacial*. Usando a regra da cadeia para diferenciação, obtém-se

$$\frac{D}{Dt'} = \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{dx_i}{dt'} \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial t'} + \mathbf{v}(\mathbf{x}(t'), t') \cdot \nabla. \quad (3.11)$$

As equações de conservação escritas em termos da derivada material, são

(i) *Conservação da Massa*

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}. \quad (3.12)$$

(ii) *Conservação da quantidade de movimento linear*

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T} - \nabla \cdot \mathbf{P} + \rho \mathbf{g}. \quad (3.13)$$

De posse de todas as informações anteriores, pode-se construir o modelo matemático a ser utilizado na solução dos problemas de mecânica dos fluidos de interesse deste trabalho.

3.2 PARTICULARIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES PARA O PROBLEMA

Sempre que o número de Reynolds é muito pequeno, suficientemente menor que a unidade, as forças de inércia podem ser desprezadas na equação do movimento. Assim, para fluidos newtonianos, equação do movimento (3.6), se reduz a

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = \mu \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (3.14)$$

Escoamentos que satisfazem a equação (3.14) são chamados de *creeping flows*.

Naturalmente, *creeping flows* acontecem também para fluidos não newtonianos. De fato, visto que os fluidos não newtonianos são mais “viscosos” que os fluidos newtonianos ordinários (no sentido que, em condições cinemáticas comparáveis, eles exibem uma tensão interna maior), *creeping flows* são possivelmente a categoria de escoamentos de fluidos não newtonianos mais interessante (ASTARITA; MARRUCCI, 1974).

Assumindo que o problema trata de um escoamento quase-estático, pode-se desprezar o termo de inércia na equação do movimento. As forças de campo também são assumidas nulas. Aplicando estas hipóteses na equação (3.13), tem-se

$$\nabla \cdot \mathbf{T} - \nabla \cdot \mathbf{P} = 0. \quad (3.15)$$

Os fluidos de interesse deste trabalho são considerados incompressíveis, assim a equação da continuidade fica

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (3.16)$$

Para produzir um modelo fechado, é necessário que se especifique como o tensor tensão desviador está relacionado com as propriedades do fluido, ou seja, precisa-se relacionar a tensão desviadora com o tensor taxa de deformação, $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$, definido como

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T. \quad (3.17)$$

Tal relação entre $\dot{\boldsymbol{\gamma}}$ e \mathbf{T} é a equação constitutiva do fluido.

3.2.1 Escolha da equação constitutiva

Conforme visto no capítulo Capítulo 2, existem diferentes grupos de equações constitutivas que podem ser utilizadas para descrever o comportamento reológico de fluidos não newtonianos. Apesar do grande número de equações constitutivas encontradas na literatura, não existe uma equação constitutiva única capaz de descrever completamente o escoamento de fluidos viscoelásticos. Geralmente, para se obter um modelo que prediz um maior número de propriedades do fluido com mais qualidade, se aumenta a complexidade da equação constitutiva. Consequentemente, o esforço matemático e/ou computacional para a solução do problema também aumenta.

Diante do exposto, fica evidente que a escolha da equação constitutiva é um ponto de suma importância antes de começar a resolver o problema de escoamento. Deve-se levar em conta qual o tipo de função material a ser predita ou o tipo de função material de maior importância no processo, necessidade de resultados qualitativos ou quantitativos, precisão requerida, metodologia numérica a ser empregada e esforço computacional requerido para a solução.

Neste trabalho, é usada a equação constitutiva de Oldroyd-B. Tal escolha foi motivada pelos seguintes aspectos:

- Contém os termos não lineares mais comuns que aparecem nos modelos diferenciais em geral. Isto possibilita a extensão da metodologia utilizada às equações constitutivas do mesmo grupo;
- É uma boa aproximação para modelar os evaporitos (sal) (COSTA, 1984; CARCIONE; HELLE; GANGI, 2006), objetivo do desenvolvimento do modelo numérico do presente trabalho;
- É um dos modelos mais usados na literatura em simulações numéricas de escoamentos não newtonianos, o que possibilita a rápida comparação de resultados.

De acordo com a seção 2.4, a equação constitutiva para o modelo viscoelástico de Oldroyd-B é dada por

$$\eta_0 \left(\lambda_2 (\dot{\mathbf{Y}})^\nabla + \dot{\mathbf{Y}} \right) = \mathbf{T} + \lambda_1 (\mathbf{T})^\nabla, \quad (3.18)$$

onde η_0 é a viscosidade do fluido, λ_1 é o tempo de relaxação e λ_2 é o tempo de retardamento.

O tensor das tensões extras pode ser expresso em termos de uma contribuição dita de *polímero* (não newtoniana), e uma outra, dita de *solvente* (newtoniana), de acordo com

$$\mathbf{T} = \eta_s \dot{\mathbf{Y}} + \boldsymbol{\tau}, \quad (3.19)$$

onde $\boldsymbol{\tau}$ é o tensor tensão elástica e $\eta_s = (\lambda_2/\lambda_1)\eta_0$ é a viscosidade de solvente.

Substituindo a equação (3.19) na equação (3.18), obtém-se

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 (\boldsymbol{\tau})^\nabla = \eta_p \dot{\mathbf{Y}}, \quad (3.20)$$

onde $\eta_p = (1 - \lambda_2/\lambda_1)\eta_0$ é a viscosidade de polímero. A viscosidade do fluido é dada pela soma da viscosidade de polímero com a viscosidade de solvente, isto é,

$$\eta_p + \eta_s = \eta_0. \quad (3.21)$$

A equação do movimento pode ser escrita em termos da tensão elástica tomando o divergente de (3.19) e substituindo na equação (3.15):

$$-\eta_s \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (3.22)$$

Do ponto de vista físico, tomar o divergente de \mathbf{T} equivale a avaliar a força resultante produzida pela ação da tensão, por unidade de volume, que atua numa superfície de controle infinitesimal. O operador diferencial divergente aplicado a um tensor reduz sua ordem, e neste caso, fornece as componentes do vetor da força resultante.

Para mais fácil referência, condensamos abaixo as equações governantes para o problema de fluência (*creeping flow*) de um fluido viscoelástico de Oldroyd-B:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.23)$$

$$-\eta_s \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (3.24)$$

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 (\boldsymbol{\tau})^\nabla = \eta_p \dot{\mathbf{Y}}. \quad (3.25)$$

Para uma situação bidimensional define-se

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} u & v \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} \end{bmatrix}. \quad (3.26)$$

Lembrando a simetria do tensor tensão, as equações governantes (3.23) - (3.25) formam um sistema de seis equações diferenciais parciais para as seis incógnitas p , u , v , τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{xy} . Com o uso dos operadores diferenciais tensoriais em coordenadas cartesianas (Apêndice C), o sistema (3.23) - (3.25) pode ser escrito como

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{xy} - \frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yy} - \frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (3.29)$$

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial}{\partial t} \tau_{xx} + u \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} + v \frac{\partial}{\partial y} \tau_{xx} \right) - 2(\lambda_1 \tau_{xx} + \eta_p) \frac{\partial u}{\partial x} - 2\lambda_1 \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xx} = 0, \quad (3.30)$$

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial}{\partial t} \tau_{yy} + u \frac{\partial}{\partial x} \tau_{yy} + v \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yy} \right) - 2(\lambda_1 \tau_{yy} + \eta_p) \frac{\partial v}{\partial y} - 2\lambda_1 \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} = 0, \quad (3.31)$$

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial}{\partial t} \tau_{xy} + u \frac{\partial}{\partial x} \tau_{xy} + v \frac{\partial}{\partial y} \tau_{xy} \right) - (\lambda_1 \tau_{xx} + \eta_p) \frac{\partial v}{\partial x} - (\lambda_1 \tau_{yy} + \eta_p) \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{xy} = 0. \quad (3.32)$$

As equações do movimento contêm somente termos elípticos e as equações constitutivas incluem somente termos hiperbólicos. Observa-se também que neste sistema de equações estão envolvidos apenas os gradientes de pressão e não a pressão absoluta, significando que o sistema tem solução a menos de uma constante.

O problema governado pelas equações (3.27) - (3.32) opera sobre um domínio espacial com condições, em termos das variáveis dependentes e suas derivadas, prescritas sobre o contorno. Uma solução fechada analítica das equações governantes produz uma função contínua, portanto, para qualquer ponto dado no domínio do problema os valores das variáveis dependentes podem ser calculados de forma exata. Tais soluções fechadas, entretanto, estão restritas a um número limitado de casos especiais e, em geral, soluções numéricas necessitam ser construídas. A característica essencial de uma solução numérica é a obtenção de uma solução, cujos valores das variáveis dependentes são obtidos apenas em um conjunto de pontos distribuídos em todo o domínio (os pontos nodais). A solução em outros pontos pode ser obtida por interpolação dos valores nodais próximos. Os valores nodais das variá-

veis dependentes são obtidos a partir da solução de um conjunto de equações algébricas que relaciona as variáveis dependentes em um dado ponto nodal com os valores em pontos nodais vizinhos, de acordo com o esquema de interpolação adotado.

3.2.2 Condições de contorno

Nesta seção, serão descritas condições de contorno de modo a fechar o sistema de equações (3.27) - (3.32). Para as equações de conservação, pode-se distinguir entre dois tipos de condições de contorno: condições de contorno de Dirichlet, para as quais as variáveis são prescritas na fronteira e as condições de Neumann, para as quais a derivada normal da solução é especificada na fronteira. Isto é, para a parte do contorno de Dirichlet, denotada por Γ_D , impõe-se

$$\Theta = \mathbf{g}_\Theta, \quad (3.33)$$

e para a parte do contorno de Neumann, denotado por Γ_N , é imposto

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \Theta = \mathbf{h}, \quad (3.34)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário apontando para fora do contorno.

As condições utilizadas neste trabalho foram:

- **Condições de contorno de não deslizamento:** Nas paredes e obstáculos, Γ_w , são prescritas condições de não deslizamento para a velocidade $\mathbf{v} = (u, v)$, isto é, especifica que a velocidade na direção paralela a parede é igual a velocidade com que a parede se move. No caso de paredes impermeáveis a velocidade na direção normal à parede também é zero. A derivada da velocidade na direção normal à parede também é zero (FERZIGER; PERIC,). Para uma parede fixa, tem-se

$$u = v = 0 \quad \text{em } \Gamma_w. \quad (3.35)$$

O tensor tensão elástica é obtido a partir da equação constitutiva pela substituição das velocidades.

- **Condições de contorno de simetria:** A condição de simetria é uma combinação das condições de Dirichlet e Neumann dada por

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma_{sl}, \quad (3.36)$$

$$\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma_{sl}, \quad (3.37)$$

que significa que o fluido não pode penetrar no contorno e a tensão de cisalhamento é nula. Aqui \mathbf{s} é o vetor tangencial unitário ao contorno e \mathbf{n} é o vetor normal unitário.

- **Condições de entrada:** na entrada do domínio Γ_{in} , o campo de velocidade é prescrito. Para fluidos viscoelásticos, os valores das componentes do tensor tensão elástica também são necessários, porque representa a informação carregada com o fluido dos estados de deformações prévios. Portanto, são impostas condições de contorno de Dirichlet para o campo de velocidade e para as tesões elásticas na entrada

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{in} \quad \text{em } \Gamma_{in}, \quad (3.38)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_{in} \quad \text{em } \Gamma_{in}. \quad (3.39)$$

Deve-se ter consciência de que não é possível simplesmente prescrever valores de tensão arbitrários na entrada, porque eles têm de ser coerentes com as equações constitutivas. Se não é conhecida a resposta da tensão ao campo de velocidade prescrito assume-se que a tensão polimérica é nula na entrada, ou seja,

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0} \quad \text{em } \Gamma_{in}. \quad (3.40)$$

Renardy (1988) mostrou que, enquanto para o modelo de Oldroyd-B todas as componentes do tensor tensão elástica devem ser prescritas, para o modelo UCM prescrever todas as componentes da tensão resulta em um sistema sobre-determinado, o qual pode levar a erros. Entretanto, neste trabalho não será utilizado o modelo UCM e portanto sempre serão prescritas condições de Dirichlet para as tensões na entrada.

- **Condições de contorno de saída:** Na saída Γ_{out} , geralmente considera-se que o escoamento está plenamente desenvolvido (aproximação localmente parabólica). Não existe fluxo difusivo nessa face. Desta forma, tem-se que as derivadas normais em relação a direção do escoamento são iguais a zero. Se for necessário o valor da variável na fronteira, o mesmo deverá ser extrapolado de valores internos. Assim, na fronteira de saída tem-se

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{s} = 0 \quad \text{em } \Gamma_{out}, \quad (3.41)$$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = v^* \quad \text{em } \Gamma_{out}, \quad (3.42)$$

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla v \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma_{out}, \quad (3.43)$$

$$\nabla \tau_{xx} \cdot \mathbf{n} = \nabla \tau_{yy} \cdot \mathbf{n} = \nabla \tau_{xy} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{em } \Gamma_{out}, \quad (3.44)$$

$$\tau_{xx} = \tau_{xx}^*, \quad \tau_{yy} = \tau_{yy}^*, \quad \tau_{xy} = \tau_{xy}^* \quad \text{em } \Gamma_{out}, \quad (3.45)$$

onde o sobrescrito (*) significa que o valor da variável é extrapolado.

Em conjunto deve-se prescrever um valor para a pressão na saída.

3.2.3 Adimensionalização das equações

Esta seção tem por objetivo escrever o sistema de equações (3.23) - (3.25) na forma adimensional, de modo que todas as variáveis tenham a mesma ordem grandeza. Este procedimento traz algumas vantagens. A principal delas é o surgimento de números adimensionais que expressam importantes características do fluido e do escoamento, como por exemplo, o número de Reynolds e o número de Weissenberg, importante em escoamentos de fluidos viscoelásticos. Desta forma, pode-se fazer comparações de um modo mais eficiente variando tais números ao invés de variar os parâmetros da equação. Uma outra vantagem é evitar dificuldades numéricas na resolução das equações do problema, trazidas pela diferença de ordem de grandeza das variáveis.

Introduzindo a adimensionalização (SAHIN; WILSON, 2007; WAPEROM; WEBSTER, 1999; GROSSI et al., 2002; OWENS; PHILLIPS, 2002)

$$\mathbf{v} = V\bar{\mathbf{v}}, \quad \mathbf{x} = L\bar{\mathbf{x}}, \quad p = \eta_0 \frac{V}{L} \bar{p}, \quad t = \frac{L}{V} \bar{t}, \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\eta_0 V}{L} \bar{\boldsymbol{\tau}},$$

reescreve-se o sistema de equações (3.23)-(3.25) na forma adimensional conforme (as barras foram abandonadas por conveniência):

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.46)$$

$$-\beta \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} + We \left[\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T \right] \\ = (1 - \beta) \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Nestas equações, $\boldsymbol{\tau}$ é a contribuição viscoelástica do tensor tensão extra \mathbf{T} , onde

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau} + \beta \dot{\boldsymbol{\gamma}} \quad (3.49)$$

e We é o número de Weissenberg definido como

$$We = \frac{\lambda_1 U}{L}, \quad (3.50)$$

onde L representa um comprimento de referência e U a velocidade característica do escoamento. Tal número pode ser considerado como a medida da elasticidade do fluido no escoamento. Para números de Weissenberg elevados, o fluido se comporta como um sólido elástico enquanto que para baixos números de Weissenberg se comporta como um fluido newtoniano. Por sua vez, o parâmetro β é definido por

$$\beta = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{\eta_s}{\eta_0}, \quad (3.51)$$

isto é, a razão entre os tempos de retardamento e relaxação do fluido (primeira igualdade). Pela ótica da segunda igualdade, pode-se dizer que este parâmetro está medindo a proporção da viscosidade newtoniana, com relação a viscosidade total.

Neste trabalho será considerado o escoamento em regime permanente. Supondo um tempo suficientemente grande, a derivada temporal na equação constitutiva pode ser desconsiderada, obtendo-se

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (3.52)$$

$$-\beta \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (3.53)$$

$$\boldsymbol{\tau} + We \left[\mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T \right] = (1 - \beta) \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right). \quad (3.54)$$

4 MODELAGEM NUMÉRICA

A solução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais envolve duas condições: consistência e estabilidade. Primeiramente as equações governantes são discretizadas, espera-se com um algoritmo consistente, para que a aproximação discreta convirja para a solução exata na medida em que se refina a malha. Note que, para os sistemas de equações que governam escoamentos viscoelásticos, não se sabe *a priori* se esta condição é satisfeita para uma dada discretização. Para que a solução seja convergente é necessário estabilidade, isto é, a capacidade de se resolver com precisão o sistema de equações discretas.

Dificuldades particulares associadas à discretização das equações governantes para escoamentos viscoelásticos estão relacionadas à característica mista do sistema de equações diferenciais parciais e ao tratamento do termo advectivo. É preciso ter cuidado quando este sistema é discretizado para garantir que os vários operadores nas equações sejam tratados de uma maneira apropriada, levando-se em conta a característica de cada termo. Isto é, termos com característica elíptica devem ser tratados de maneira diferente dos termos de característica parabólica ou hiperbólica. Os termos com característica hiperbólica ou parabólica não necessitam de condições de contorno a jusante, já os termos de caráter elípticos necessitam de condições de contorno tanto a montante quanto a jusante. As características de cada termo influenciam, por exemplo, na escolha do esquema de interpolação.

Conforme mencionado anteriormente será utilizado o método dos volumes finitos baseado em elementos (EbFVM) na solução do problema proposto. O EbFVM utiliza a flexibilidade geométrica do método dos elementos finitos, por utilizar malhas não estruturadas com as interpolações nos elementos realizadas via funções de forma, e a robustez (conserva a massa tanto local quanto globalmente) do método dos volumes finitos por derivar as equações aproximadas a partir de balanços de massa e quantidade de movimento nos volumes discretos (volumes de controle). Uma característica notável desta classe de métodos é a relativa facilidade com que eles podem ser aplicados a ambos os problemas de sólidos e de fluidos (PATANKAR, 1980; OÑATE; CERVERA; ZIENKIEWICZ, 1994; IDELSOHN; NATE, 1994; ZIENKIEWICZ; TAYLOR; ZHU, 2005). A seguir, será apresentado o método dos volumes finitos baseado em elementos para o caso bidimensional.

4.1 CARACTERÍSTICAS GERAIS DO MÉTODO DE VOLUMES FINITOS BASEADO EM ELEMENTOS

Para a aplicação do EbFVM na discretização de equações diferenciais que modelam o escoamento, o domínio de solução deve ser dividido em subdomínios chamados *elementos* (e), os quais cobrem completamente todo o domínio sem se sobrepor ou deixar espaços vazios, formando a malha computacional. Neste trabalho, a malha computacional é formada, por elementos quadriláteros e/ou triangulares. As incógnitas do problema são calculadas nos *nós* (p), localizados nos vértices de cada elemento. Esta característica dá ao EbFVM a característica de ser um método *cell-vertex*. Ao redor de cada nó é construído um *volume de controle*, formado pelas porções de todos os elementos que compartilham um dado nó, tais porções serão denominadas de *subvolumes de controle* ou, quando nos referimos ao elemento essas porções chamam-se *subelementos*. Sendo assim, os volumes de controle também preenchem completamente o domínio de solução determinado pela malha computacional, sem deixar espaços vazios ou se sobrepor.

A integração das equações diferenciais de conservação é realizada nos volumes de controle e cada volume de controle é delimitado por um certo número de *faces* (f), que são obtidas ligando o centro de cada elemento vizinho com o ponto médio de um lado compartilhando o nó em volta do qual o volume de controle é construído (método das medianas). Ou seja, o contorno de cada volume de controle é formado pela união das faces de todos os subvolumes que o formam. Esta construção permite que os fluxos que atravessam as faces, as quais estão localizadas no interior dos elementos, sejam determinados mediante aproximações locais da variação das variáveis em cada elemento.

Os pontos centrais das faces de um volume de controle são denominados *pontos de integração* (\hat{f}). A superfície de cada face será representada por um vetor normal à face apontando para fora do subvolume de controle, com módulo igual a sua área. A representação esquemática de todos os entes geométricos descritos acima pode ser visualizada na Figura 17, para uma malha de elementos quadriláteros.

A configuração dos volumes de controle na fronteira do domínio é diferente, pois dois pontos de integração estarão situados nas arestas dos elementos coincidentes com as fronteiras do domínio, como mostra a Figura 18. Portanto, estas arestas tornam-se as próprias faces, que, juntamente com as faces internas dos elementos, delimitam os volumes de controle. Outro detalhe que pode ser observado é o posicionamento do nó central do volume de controle, destacado na Figura 18, exatamente sobre a fronteira do domínio, o que não acontece nos métodos *cell-center*. Este fato tem influência direta na aplicação das condições de contorno.

Figura 17 – Entes geométricos associados ao processo de discretização (modificado de Hurtado (2005))

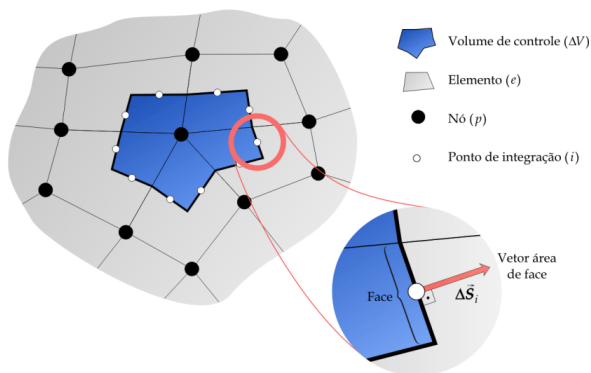
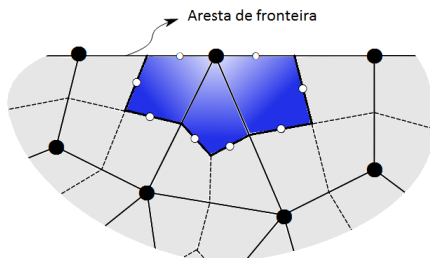


Figura 18 – Volume de controle no contorno (modificado de Honório (2013))



No método de volumes finitos baseado em elementos, todos os cálculos requeridos para a construção das equações discretizadas são realizados em nível de elemento, daí o nome “baseado em elementos”. Depois, mediante a um processo de montagem, varrendo o domínio visitando todos os elementos, semelhante ao empregado no método dos elementos finitos, obtém-se as equações de balanço referidas aos volumes de controle. Para tanto, em cada elemento é considerado um sistema de coordenadas locais, no qual são expressos todos os termos das equações diferenciais discretizadas. Após serem calculadas elemento por elemento, todas as contribuições são somadas a fim de construir as equações de balanço de todos os volumes de controle na malha computacional. Essa é a ideia básica do método de volumes finitos baseado

em elementos. No restante deste capítulo, são apresentadas as ferramentas básicas do método de volumes finitos baseado em elementos que será aplicado no presente trabalho à simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

4.2 NOTAÇÃO

Na seção anterior, foram apresentadas as principais entidades geométricas utilizadas no EbFVM. Como muitas das operações relativas à discretização das equações envolvem diversos tipos de conjuntos de tais entidades, uma notação especial para esses conjuntos, baseada na notação empregada em (HURTADO, 2011), será utilizada neste trabalho e está definida na Tabela 2. A utilização desta notação facilita a escrita e compreensão das equações discretizadas. Por exemplo, considere que Θ é uma grandeza envolvida na descrição do problema considerado, para denotar o valor dessa grandeza associada ao nó p , escreve-se $\check{\Theta}_p$. Já, quando se fizer referência ao valor nodal em um nó l localizado no elemento e , escreve-se $\check{\Theta}_l^e$. Neste âmbito, l pode ser interpretado como o índice local que identifica o nó no elemento, ou seja, $l \in \{1, 2, \dots, N_p^e\}$, onde N_p^e é o número de nós associados ao elemento em questão. Neste trabalho, fez-se uso do sinal diacrítico braquia ($\check{}$) para indicar que uma dada variável discretizada está associada a um nó. A notação para associação com outras entidades segue convenção similar. Por exemplo, $\check{\Theta}_f^e$ indica que a grandeza está associada à face f , localizada no elemento e .

4.3 TRANSFORMAÇÃO DE COORDENADAS

Em um método de volumes finitos os balanços de conservação para se obter as equações aproximadas são realizados sobre os volumes de controle. Entretanto, conforme mencionado anteriormente, a base da metodologia do método de volumes finitos baseado em elementos é realizar os todos os cálculos em nível de elementos, e não trabalhar diretamente com os volumes de controle. Sendo assim, é conveniente definir um sistema local de coordenadas para o elemento, o que permite um tratamento independente para este elemento, seja qual for sua forma geométrica específica. Este elemento de tamanho e forma arbitrário em relação ao sistema global, transforma-se em um elemento regular de tamanho e forma fixos, quando representado num sistema de coordenadas local apropriado. Consequentemente, a representação, em coordenadas locais, de qualquer expressão matemática envolvida nas equações de conservação, se torna idêntica para qualquer elemento da malha.

As equações de conservação e a geometria da malha estão definidas

Tabela 2 – Notação empregada nas equações discretizadas pelo EbFVM

Símbolo	Interpretação
p	Nó
e	Elemento
f	Face de um volume de controle interno
b	Face de um volume de controle no contorno
s	Subelemento
s_p^e	Subelemento do elemento e adjacente ao nó p
\hat{f}	Centroide da face
\hat{s}	Centroide do subelemento
\hat{b}	Centroide da face de contorno
V_p	Volume de controle ao redor do nó p
S_p	Superfície de controle associada ao volume V_p
\mathbb{E}_p	Conjunto de todos os elementos que contribuem para a formação do volume de controle ao redor do nó p .
\mathbb{F}_p	Conjunto das faces que formam a superfície de controle do volume ao redor do nó p .
\mathbb{F}_p^e	Conjunto das faces que formam a superfície de controle do volume ao redor do nó p , localizadas no interior do elemento e .
\mathbb{S}_p	Conjunto dos subelementos que formam o volume de controle ao redor do nó p .
\mathbb{T}_p	Conjunto de nós que formam o estêncil associado ao nó p .
\mathbb{N}^e	Conjunto de todos os nós associados ao elemento e .
${}^b\mathbb{E}_p$	Conjunto dos elementos de contorno que compartilham o nó p .
${}^b\mathbb{F}_p^{b_e}$	Conjunto das faces no elemento de contorno ${}^b e$, adjacentes ao nó p .

com base nas coordenadas globais (cartesianas) (x, y) , sendo assim, é necessário que as equações sejam transformadas para o sistema de coordenadas

local do elemento, denotado como (ξ, η) , através de relações matemáticas. Precisa-se definir relações que mapeiem qualquer ponto no interior ou sobre as fronteiras de um elemento, do espaço físico (coordenadas globais) para um elemento regular do espaço transformado (coordenadas locais) e deste poder retornar ao espaço físico, por meio da relação inversa. Ambos os sistemas de coordenadas podem ser relacionados por equações de transformação escritas na forma

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta) &= \sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_l(\xi, \eta) \check{x}_l^e, \\ y(\xi, \eta) &= \sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_l(\xi, \eta) \check{y}_l^e, \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde $N(\xi, \eta)$ são as denominadas *funções de forma*, \check{x}_l^e e \check{y}_l^e são as coordenadas globais dos nós localizados nos vértices do elemento em questão, ordenados de acordo com um sistema de numeração local. As expressões matemáticas para as funções de forma dependem do tipo do elemento.

As funções de forma satisfazem algumas propriedades básicas:

- Variam sempre no intervalo $[0, 1]$, no interior e sobre o contorno do elemento;
- A função de forma N_l adquire o valor 1 no nó de índice l e valor zero nos outros nós;
- Os valores das funções de forma em um ponto qualquer do elemento satisfazem a relação

$$\sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_l(\xi, \eta) = 1. \quad (4.2)$$

Essa propriedade é conhecida como uma partição da unidade (ZIENKIEWICZ; TAYLOR, 2000).

A Figura 19 ilustra a transformação de coordenadas para os elementos quadriláteros. Nesse caso específico, as funções de forma são bilineares e mapeiam os quatro nós nos pontos $(1,1)$, $(-1,1)$, $(-1,-1)$, $(1,-1)$, respectivamente, no plano transformado.

Considerando o sistema de coordenadas da Figura 19 as expressões

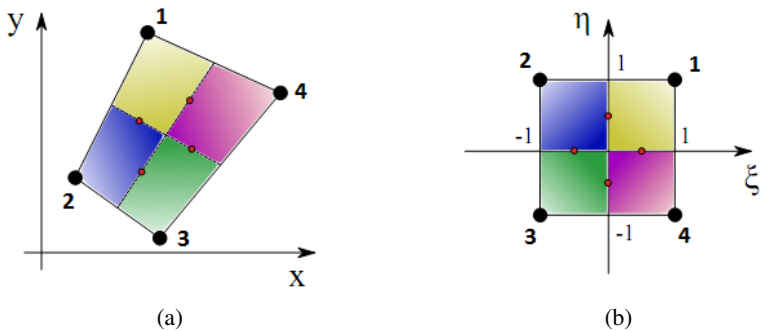
que produzem este efeito para os elementos quadriláteros são

$$\begin{aligned} N_1(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta), \\ N_2(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta), \\ N_3(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta), \\ N_4(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Similarmente, considerando o sistema de coordenadas da Figura 20, as expressões que produzem este efeito para os elementos triangulares são

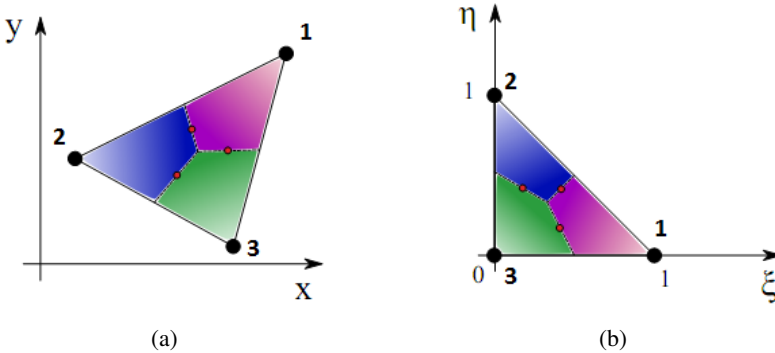
$$\begin{aligned} N_1(\xi, \eta) &= 1 - \xi - \eta, \\ N_2(\xi, \eta) &= \xi, \\ N_3(\xi, \eta) &= \eta. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Figura 19 – Transformação de coordenadas para elemento quadrilátero: (a) Elemento no plano real, (b) Elemento no plano transformado (modificado de Honório (2013))



É fácil ver que as funções de forma são nada mais do que funções peso normalizadas que interpolam no interior do elemento as diversas quantidades em função de seus valores nos nós deste elemento.

Figura 20 – Transformação de coordenadas para elemento triangular: (a) Elemento no plano real, (b) Elemento no plano transformado (modificado de Honório (2013))



4.4 APROXIMAÇÃO LOCAL DAS VARIÁVEIS

Suponha que Θ é uma variável local genérica, que pode representar uma dada componente da velocidade, do tensor tensão elástica ou a pressão. Pode-se descrever a sua variação local no interior de um elemento por meio das funções de forma definidas na seção 4.3 conforme

$$\Theta(\xi, \eta) = \sum_{I \in \mathbb{N}^e} N_I(\xi, \eta) \check{\Theta}_I^e, \quad (4.5)$$

onde $N_I(\xi, \eta)$ são as funções de forma, e $\check{\Theta}_I^e$ são os valores nodais correspondentes à variável genérica no elemento e .

Empregando a notação matricial, a equação (4.5) pode ser escrita na de maneira equivalente como

$$\Theta = \mathbf{N}^T \check{\Theta}^e, \quad (4.6)$$

onde \mathbf{N} é o vetor coluna cujas componentes são os valores das funções de forma em uma dada posição dentro do elemento e , enquanto que $\check{\Theta}^e$ é um vetor coluna contendo os valores nodais da variável Θ no elemento em questão, ou seja,

$$\check{\Theta}^e \equiv \begin{bmatrix} \check{\Theta}_1 \\ \check{\Theta}_2 \\ \vdots \\ \check{\Theta}_{N_p^e} \end{bmatrix}_e. \quad (4.7)$$

4.5 APROXIMAÇÃO DO GRADIENTE DE UMA VARIÁVEL

No procedimento de obtenção das equações discretizadas, surge a necessidade de aproximar o operador gradiente de uma grandeza física. Este operador está presente no termo de transporte difusivo dessa grandeza. Consequentemente, toda vez que for preciso aproximar numericamente um termo de transporte difusivo em uma equação de conservação, será necessário aproximar o gradiente em determinadas direções.

Com base na aproximação de uma variável genérica Θ dada pela equação (4.6), é possível obter o gradiente dessa variável em um ponto dado no interior de um elemento através da diferenciação da equação (4.6) em relação às coordenadas cartesianas, ou seja,

$$[\vec{\nabla}\Theta] = \begin{bmatrix} \partial_x \Theta \\ \partial_y \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\partial_x N]^T \\ [\partial_y N]^T \end{bmatrix} \check{\Theta}^e. \quad (4.8)$$

As funções de forma são contínuas nas coordenadas locais (ξ, η) , portanto para computar as suas derivadas em relação as coordenadas cartesianas (x, y) recorre-se à regra da cadeia. Desta maneira, as derivadas das funções de forma ficam

$$\begin{bmatrix} [\partial_\xi N]^T \\ [\partial_\eta N]^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial_{\xi x} & \partial_{\xi y} \\ \partial_{\eta x} & \partial_{\eta y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [\partial_x N]^T \\ [\partial_y N]^T \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Examinando a equação (4.9), verifica-se que a matriz de dimensão 2×2 do lado direito é a transposta da matriz Jacobiana da transformação de coordenadas (4.1). Logo, a matriz Jacobiana da transformação é definida como

$$\mathbf{J} \equiv \begin{bmatrix} \partial_{\xi x} & \partial_{\eta x} \\ \partial_{\xi y} & \partial_{\eta y} \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Definindo a matriz de derivadas das funções de forma em relação às coordenadas locais,

$$\mathbf{D}^T \equiv \begin{bmatrix} [\partial_\xi N]^T \\ [\partial_\eta N]^T \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \partial_\xi N_1 & \dots & \partial_\xi N_{N_n^e} \\ \partial_\eta N_1 & \dots & \partial_\eta N_{N_n^e} \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

é possível escrever, a partir da equação (4.9)

$$\begin{bmatrix} [\partial_x N]^T \\ [\partial_y N]^T \end{bmatrix} = [\mathbf{J}^T]^{-1} \mathbf{D}^T. \quad (4.12)$$

Substituindo esta última expressão na equação (4.8), obtém-se a forma final para a aproximação do gradiente,

$$[\vec{\nabla}\Theta] = [\mathbf{J}^T]^{-1} \mathbf{D}^T \check{\Theta}^e \quad (4.13)$$

Conforme sugerido em (MALISKA et al., 2009), o produto de matrizes do lado direito da equação (4.13) pode ser interpretado como um operador matricial que, atuando sobre o vetor de valores nodais de uma dada variável num elemento, fornece o gradiente dessa variável num ponto interior ao elemento ou no contorno. Este operador é definido a seguir:

$$\mathbf{G}^T \equiv [\mathbf{J}^T]^{-1} \mathbf{D}^T. \quad (4.14)$$

Note-se que este operador depende exclusivamente da geometria do elemento em questão e da posição dentro do elemento onde o gradiente está sendo aproximado.

A matriz Jacobiana para a transformação de coordenadas definida pelas equações (4.1) pode ser calculada a partir da expressão

$$\mathbf{J}^T = \mathbf{D}^T \mathbf{M}_e, \quad (4.15)$$

onde \mathbf{M}_e é a matriz contendo as coordenadas dos nós do elemento, ordenados de acordo com o esquema de numeração local,

$$\mathbf{M}_e = \begin{bmatrix} \check{x}_1 & \check{y}_1 \\ \check{x}_2 & \check{y}_2 \\ \vdots & \vdots \\ \check{x}_{N_n^e} & \check{y}_{N_n^e} \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

Na discretização das equações de conservação, necessita-se aproximar o fluxo difusivo nas faces de um volume de controle. Esse fluxo está definido pelo produto escalar do gradiente e o vetor área de face, ou seja

$$\Gamma_f \equiv (\nabla \Theta)_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f = (\nabla \Theta)_f^T \Delta \mathbf{S}_f. \quad (4.17)$$

Empregando as equações (4.13) e (4.14), e levando em conta a comutatividade do produto escalar de vetores, pode-se escrever a equação (4.17) conforme

$$\Gamma_f = \left(\mathbf{G}_f^T \check{\Theta}^e \right)^T \Delta \mathbf{S}_f = (\Delta \mathbf{S}_f)^T (\mathbf{G}_f^T \check{\Theta}^e). \quad (4.18)$$

A partir da equação (4.18), é possível definir um novo operador, denotado como $(\mathbf{b}_f^e)^T$, que representa o produto do vetor área da face pelo operador gradiente. Tal operador, atuando sobre o vetor dos valores nodais, fornece o fluxo difusivo numa dada face de um elemento. Matematicamente, este operador é definido conforme

$$(\mathbf{b}_f^e)^T \equiv (\Delta \mathbf{S}_f)^T \mathbf{G}_f^T. \quad (4.19)$$

Desta forma, o fluxo difusivo pode ser calculado diretamente sem a necessidade de calcular previamente o gradiente.

Assim como o operador gradiente, o operador $(\mathbf{b}_f^e)^T$ depende apenas da geometria do elemento.

4.6 APROXIMAÇÃO DAS INTEGRAIS DE VOLUMES

No processo de discretização de equações diferenciais, surge a necessidade do cálculo de integrais sobre um volume de controle. Isto é, necessita-se aproximar uma integral da forma

$$\int_{V_p} \Theta dV, \quad (4.20)$$

onde Θ é uma variável genérica e V_p é um volume de controle genérico.

Um método simples para aproximar essas integrais de volume seria substituí-las pelo produto do valor médio do integrando com o volume do volume de controle. Aplicando essa aproximação na equação (4.20), obtém-se

$$\int_{V_p} \Theta dV \approx \check{\Theta}_p \Delta V_p, \quad (4.21)$$

onde $\check{\Theta}$ é o valor nodal do integrando e ΔV_p é o volume do volume de controle, ambos associados ao nó p .

Para uma malha cartesiana regular, o nó p está localizado no centroide do volume de controle e, a aproximação (4.21) terá precisão de segunda ordem (FERZIGER; PERIC,). Em malhas não estruturadas, raramente o nó se encontra no centroide do volume de controle e, assim, a precisão da aproximação (4.21) se reduz a primeira ordem (MALISKA et al., 2009; HURTADO, 2011). Caso seja necessário preservar a aproximação de segunda ordem, pode-se realizar uma aproximação por meio de subelementos, uma vez que, no método de volumes finitos baseado em elementos, um volume de controle encontra-se formado por certo número de subelementos. Portanto, é possível escrever

$$\int_{V_p} \Theta dV \approx \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \Theta_{s_p}^e \Delta V_{s_p}^e, \quad (4.22)$$

onde $\Theta_{s_p}^e$ é avaliado no centroide de cada subelemento s_p^e e multiplicado pelo volume do subelemento $\Delta V_{s_p}^e$ e depois esses produtos são somados para aproximar a integral estendida em todo volume de controle. Na formulação empregada neste trabalho, as variáveis estão armazenadas nos nós da malha computacional, desta forma, caso não exista uma expressão explícita para o integrando em função das coordenadas espaciais, pode-se utilizar esquemas de interpolação para relacionar $\Theta_{s_p}^e$ com os valores nodais.

Para a aproximação da integral de volume ficar completa, ainda é necessário calcular o volume do volume de controle ao redor do nó p , ΔV_p . Como cada volume de controle é formado por um conjunto de subelementos, então o volume do volume de controle é formado pela soma dos volumes de

cada subelemento que o formam, assim

$$\Delta V_p = \sum_{s \in \mathbb{E}_p} \Delta V_s^e. \quad (4.23)$$

É possível mostrar (RAW, 1985), que a relação entre um volume diferencial no plano real, dV^{xy} e um volume diferencial no plano transformado, $dV^{\xi\eta}$, é dada pelo módulo do determinante da matriz jacobiana da transformação de coordenadas, ou seja,

$$dV^{xy} = |\mathbf{J}| dV^{\xi\eta}. \quad (4.24)$$

Portanto, para determinar o volume de um subelemento, utiliza-se a expressão

$$\Delta V_s = \int_s |\mathbf{J}| dV^{\xi\eta}. \quad (4.25)$$

O valor da integral acima pode ser aproximado pela regra do ponto médio. Aplicando essa aproximação na equação (4.25) se obtém

$$\Delta V_s \approx |\mathbf{J}|_s \Delta V_s^{\xi\eta}, \quad (4.26)$$

onde $|\mathbf{J}|_s$ é o jacobiano avaliado no centroide do subelemento e $\Delta V_s^{\xi\eta}$ é a magnitude do volume do subelemento no espaço transformado. Para a transformação de coordenadas da seção 4.3 com as funções de forma ali definidas, a equação (4.26) resulta no valor exato do volume que seria obtido a partir da equação (4.25).

Por fim, a expressão final para a integral de volume 4.21 é escrita como

$$\int_{V_p} \Theta dV \approx \check{\Theta} |\mathbf{J}|_s \Delta V_s^{\xi\eta}. \quad (4.27)$$

4.7 APROXIMAÇÃO DAS INTEGRAIS DE SUPERFÍCIE

Nas equações de conservação, as integrais de superfície representam os fluxos advectivos e/ou difusivos atravessando a superfície de controle. Portanto, o fluxo total através de uma superfície de controle pode ser expresso por uma integral da forma

$$\int_{S_p} \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S}, \quad (4.28)$$

onde \mathcal{W} representa o fluxo difusivo ou o fluxo advectivo e $d\mathbf{S}$ um elemento diferencial de área, sendo ambas as grandezas vetoriais.

No EbFVM a superfície de controle é formada por um conjunto de faces, portanto a integral de superfície anterior pode ser escrita como a soma das integrais em todas essas faces da superfície de controle. Assim, tem-se

$$\int_{S_p} \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{f \in \mathbb{F}_p} \int_f \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.29)$$

Da maneira como os volumes de controle são construídos no método EbFVM aqui apresentado, as faces que formam a superfície de controle se encontram distribuídas no interior dos diferentes elementos que contribuem para a formação do volume de controle em questão. Desta forma, pode-se escrever a equação (4.29), de forma equivalente, conforme

$$\int_{S_p} \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \int_f \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.30)$$

Agora, precisa-se aproximar numericamente as integrais definidas em cada uma das faces que formam essa superfície. Novamente optou-se pela regra do ponto médio, ou seja, cada uma das integrais é aproximada pelo produto do integrando avaliado no centroide da face e o valor da área da face. Ou seja,

$$\int_f \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S} \approx \mathcal{W}_f \cdot \Delta\mathbf{S}_f, \quad (4.31)$$

onde \mathcal{W}_f é o valor da densidade de fluxo no centroide da face f e $\Delta\mathbf{S}_f$ é o vetor área da referida face, com orientação positiva relativa ao volume de controle V_p do qual a face faz parte, isto é, $\Delta\mathbf{S}_f$ aponta para fora do volume de controle V_p (Figura 21). Tal vetor é o produto da área da face pelo vetor normal unitário apontando para fora do volume de controle.

Do ponto de vista da implementação computacional, como uma mesma face faz parte da formação de dois volumes de controle adjacentes, o vetor área $\Delta\mathbf{S}_f$ só precisa ser calculado para um dos dois volumes adjacentes, pois para o outro volume ele terá a mesma magnitude porém com o sinal trocado.

Com esta aproximação, a equação (4.29) torna-se

$$\int_{S_p} \mathcal{W} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \mathcal{W}_f \cdot \Delta\mathbf{S}_f. \quad (4.32)$$

4.7.1 Cálculo do vetor área da face

Para obter $\Delta\mathbf{S}_f$, constrói-se um vetor coincidindo com a face em questão e se aplica uma simples rotação em ângulo reto, conforme mostra Figura 21. Matematicamente,

$$\Delta\mathbf{S}_f = \begin{bmatrix} \Delta S_f^x \\ \Delta S_f^y \end{bmatrix} = [R] \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}_f, \quad (4.33)$$

onde $[R]$ é uma matriz de rotação, dada por

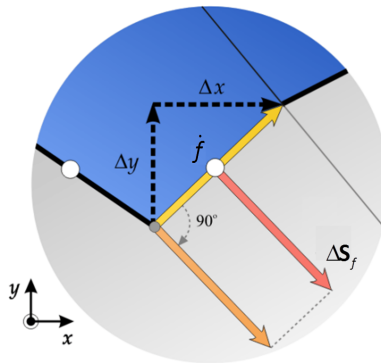
$$[R] = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

enquanto que Δx e Δy são as componentes cartesianas de um vetor construído de forma a coincidir com a face. Tais componentes estão relacionadas com as correspondentes componentes locais, $\Delta\xi$ e $\Delta\eta$, através da expressão

$$\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}_f = \begin{bmatrix} \partial_{\xi}x & \partial_{\eta}x \\ \partial_{\xi}y & \partial_{\eta}y \end{bmatrix}_f \begin{bmatrix} \Delta\xi \\ \Delta\eta \end{bmatrix}_f, \quad (4.35)$$

somente válida para funções bilineares, as quais possuem derivadas lineares em relação às coordenadas locais.

Figura 21 – Construção do vetor área da face (modificado de Hurtado (2005))



4.8 APROXIMAÇÃO DA DERIVADA DE UMA FUNÇÃO ESCALAR

Durante o processo de discretização, muitas vezes surge a necessidade de aproximar a derivada de uma variável em um determinado ponto do volume de controle. Ou seja, necessita-se, por exemplo, aproximar a derivada de uma variável Θ no nó p

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial x} \right)_p. \quad (4.36)$$

No contexto de um método de volumes finitos baseado em elementos, a abordagem usual para a determinação dessa derivada é a utilização do teorema da divergência (Apêndice A.2) para função escalar, que indica que a

integral de superfície de uma função escalar é igual à integral de volume (em relação ao volume limitado pela superfície) do gradiente da função escalar, isto é,

$$\int_V \nabla \Theta dV = \int_S \Theta dS. \quad (4.37)$$

Assumindo que $\nabla \Theta$ é constante sobre o volume de controle, a equação de Green-Gauss (4.37) pode ser reescrita como

$$\int_V \nabla \Theta dV = (\nabla \Theta) V = \int_S \Theta dS. \quad (4.38)$$

Fazendo uso da aproximação (4.38), pode-se escrever

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial x} \right)_p \approx \frac{1}{\Delta V_p} \int_{S_p} \Theta dS^x. \quad (4.39)$$

Por sua vez, a integral de superfície que aparece no lado direito da equação (4.39) é aproximada empregando a equação (4.32), ou seja,

$$\int_{S_p} \Theta dS^x \approx \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \Theta_f \Delta S_f^x. \quad (4.40)$$

Substituindo a equação (4.40) na equação (4.39) chega-se à expressão final para a aproximação da derivada em um ponto nodal, conforme

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial x} \right)_p \approx \frac{1}{\Delta V_p} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \Theta_f \Delta S_f^x. \quad (4.41)$$

Para a derivada em relação y , basta substituir x por y na equação (4.41)

4.9 ESQUEMAS DE INTERPOLAÇÃO ESPACIAL

Na discretização das equações de conservação pelo método dos volumes finitos, exige-se o cálculo de valores das variáveis nas interfaces dos volumes de controle. Porém a forma final das equações discretizadas apenas pode conter valores nodais das variáveis. Consequentemente, torna-se necessário o emprego de esquemas de interpolação para relacionar os valores das variáveis nas faces do volume de controle com os valores nodais. Tais esquemas serão empregados de acordo com a natureza dos termos e das equações. Por exemplo, para os termos de transporte difusivo, pode-se utilizar as próprias funções de forma como funções de interpolação, entretanto para o termo advectivo o uso de uma função do tipo *upwind* é mais apropriado.

Sendo assim, é conveniente escrever uma equação genérica para um esquema de interpolação restrito aos valores nodais associados ao elemento:

$$\Theta_f \approx \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \alpha_{f,l}^e \check{\Theta}_l^e, \quad (4.42)$$

onde $\alpha_{f,l}^e$ são coeficientes escalares que ponderam a influência de cada valor nodal sobre o valor interpolado na face.

A escolha do coeficiente $\alpha_{f,l}^e$ na equação (4.42) vai definir o esquema de interpolação que se quer utilizar. Por exemplo, a interpolação usada para aproximar o gradiente de uma variável, dada pela equação (4.5), pode ser considerada como um caso especial da equação (4.42) em que os valores dos coeficientes $\alpha_{f,l}^e$ coincidem com os valores das funções de forma avaliadas no centroide da face f . Conforme mencionado na seção 4.5 termos de transporte difusivo necessitam da aproximação do gradiente da variável nas faces, desta forma o coeficiente $\alpha_{f,l}^e$ para esses termos é dado por

$$\alpha_{f,l}^e = N_{f,l}. \quad (4.43)$$

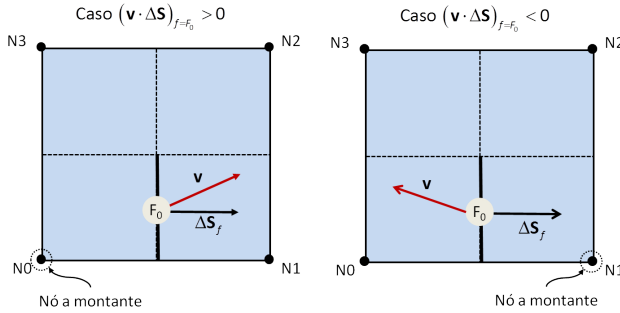
O termo de transporte advectivo representa uma propriedade genérica Θ , que pode ser velocidade, tensão, temperatura, etc, sendo transportada por advecção. Isto é, a velocidade \mathbf{v} do escoamento transporta a propriedade em questão. Sendo assim, a integral de superfície que representa o fluxo advectivo pode ser escrita conforme

$$\int_{S_p} \mathbf{v} \Theta \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.44)$$

Aplicando a equação (4.32) na integral anterior, fica evidente a necessidade de se aproximar os valores das variáveis nas faces. Consequentemente, deve-se escolher um esquema de interpolação.

Conforme comentado acima, um esquema de interpolação muito usado nesses casos é o SPU (do inglês, *Single Point Upwind*), que consiste em aproximar o valor numa interface entre dois volumes adjacentes pelo valor nodal localizado a montante dessa interface. Essa aproximação possui precisão de primeira ordem e preserva a monotonicidade das soluções discretas inicialmente monotônicas (VAN LEER, 2006) e, portanto, produz soluções numéricas fisicamente coerentes, embora apresentando forte difusão numérica (MALISKA, 2004).

Para o emprego do esquema SPU no contexto do EbFVM, deve-se levar em conta que as faces encontram-se no interior dos elementos, como por exemplo, a face F_0 mostrada na Figura 22 para um elemento quadrilátero.

Figura 22 – Interpolação SPU para a face F_0 (modificado de Maliska et al. (2009))

Dito isto, o valor interpolado da variável Θ seria dado por

$$(\Theta)_{f=F_0}^{SPU} = \begin{cases} (\check{\Theta})_{p=N0} & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S})_{f=F_0} > 0, \\ (\check{\Theta})_{p=N1} & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S})_{f=F_0} < 0. \end{cases} \quad (4.45)$$

Dependendo do sentido com que o escoamento atravessa a face, o qual é determinado por meio do sinal da vazão $\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S}$, atribui-se o valor nodal correspondente ao nó mais próximo localizado a montante da face, como é mostrado nos dois casos da Figura 22. Equações equivalentes à equação (4.45) são facilmente obtidas para outras faces do elemento, apenas permutando ciclicamente os índices dos nós.

Todos os coeficientes $\alpha_{f,I}^e$, definidos na equação (4.42), associados ao esquema SPU são nulos, exceto aquele associado ao nó a montante, o qual adquire o valor um. Para o caso da interpolação especificada na equação (4.45), tem-se

$$\begin{cases} \alpha_{f,N0}^e = 1, \alpha_{f,N1}^e = 0, \alpha_{f,N2}^e = 0, \alpha_{f,N3}^e = 0, & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S})_{f=F_0} < 0 \\ \alpha_{f,N0}^e = 0, \alpha_{f,N1}^e = 1, \alpha_{f,N2}^e = 0, \alpha_{f,N3}^e = 0, & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \Delta\mathbf{S})_{f=F_0} > 0 \end{cases}$$

Neste capítulo foram apresentadas as principais aproximações numéricas utilizadas no método dos volumes finitos baseado em elementos. De posse dessas ferramentas é possível passar para o próximo estágio, que é a aplicação de tais ferramentas na discretização das equações que governam o escoamento de fluidos viscoelásticos. Isto será apresentado no próximo capítulo.

5 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

O objetivo deste capítulo é a transformação das equações diferenciais contínuas, válidas em um domínio contínuo, para equações discretas que são resolvidas em um número finito de pontos desse domínio contínuo. A esse processo damos o nome de discretização. No contexto dos volumes finitos baseados em elementos, esse procedimento é feito integrando as equações diferenciais sobre o volume de controle em função dos valores nos nós da malha computacional (domínio discreto).

Neste trabalho, será considerado o escoamento em regime permanente, incompressível e isotérmico de um fluido de Oldroyd-B governado pelas equações (3.52)-(3.54). Porém, essas equações não estão escritas de forma adequada para serem utilizadas com as técnicas de volumes finitos. Antes de integrar as referidas equações, deve-se colocá-las na forma conservativa, dada por

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

$$-\beta \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (5.2)$$

$$\boldsymbol{\tau} + We \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau}) + We \left[-(\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T \right] = (1 - \beta) \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right), \quad (5.3)$$

onde $\operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau})$ é o produto diádico¹.

Integrando as equações (5.1) - (5.3) sobre um volume de controle (V_p) poligonal tal como o representado na Figura 17, tem-se

$$\int_{V_p} (\nabla \cdot \mathbf{v}) dV = 0, \quad (5.4)$$

$$-\beta \int_{V_p} \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} dV + \int_{V_p} \nabla \cdot \mathbf{P} dV = \int_{V_p} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} dV, \quad (5.5)$$

$$\int_{V_p} \boldsymbol{\tau} dV + We \int_{V_p} \nabla \cdot (\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau}) dV + We \left[\int_{V_p} -(\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T dV \right] = (1 - \beta) \int_{V_p} \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) dV, \quad (5.6)$$

¹ Usando notação indicial (Einstein): $\operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau}) = \tau_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + v_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k}$, onde v_k é a componente da velocidade na direção x_k

Considera-se que V_p é um volume de controle poligonal, formado por porções de diferentes elementos e limitado pela superfície de controle S_p , formada, por sua vez, por um conjunto de faces.

Algumas integrais de volume podem ser transformadas, convenientemente, em integrais de superfície pela aplicação do teorema da divergência (Apêndice A.2). Deste modo, as equações (5.4), (5.5) e (5.6) podem ser reescritas conforme

$$\int_{S_p} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (5.7)$$

$$-\beta \int_{S_p} \nabla \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} + \int_{S_p} \mathbf{P} \cdot d\mathbf{S} = \int_{S_p} \boldsymbol{\tau} \cdot d\mathbf{S}, \quad (5.8)$$

$$\int_{V_p} \boldsymbol{\tau} dV + We \int_{S_p} (\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{S} + We \left[\int_{V_p} -(\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T dV \right] = (1 - \beta) \int_{V_p} (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) dV, \quad (5.9)$$

onde $d\mathbf{S}$ é o vetor diferencial área da face.

O próximo estágio é a aproximação das integrais de superfície e volume, que aparecem nas equações (5.7)-(5.9), por valores discretos. Isto é feito aplicando-se as aproximações apresentadas no capítulo 4.

5.1 TRATAMENTO DO ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE-TENSÃO

Antes de prosseguir com a discretização, é importante discutir a forma de solução do sistema de equações algébricas gerado após a aproximação das integrais nas equações acima. Basicamente, deve-se decidir se o sistema será resolvido de forma totalmente acoplada, ou de forma segregada.

Na solução acoplada, todas as equações algébricas são organizadas em um único sistema de equações. Esse sistema é então resolvido para a obtenção de todas as variáveis simultaneamente. Neste caso, como o sistema é não linear, um método para tratar as não linearidades deve ser empregado, como por exemplo o método de Newton. Na prática, o sistema totalmente acoplado não converge rapidamente e é bastante difícil de construir preconditionadores robustos (SAHIN; WILSON, 2007; BAAIJENS, 1998) o que

torna o custo computacional elevado. Neste tipo de abordagem, o sistema de equações resultante tem uma dimensão $(6N_{\text{nós}}) \times (6N_{\text{nós}})$, isto para um problema bidimensional. A solução de um problema tridimensional requer ainda mais capacidade de armazenamento para lidar com sistemas muito grandes.

Uma maneira de reduzir os custos computacionais, especialmente no que diz respeito a memória computacional requerida, é a utilização de uma solução segregada, na qual é feito o cálculo das tensões viscoelásticas separadamente do cálculo dos campos de velocidade e pressão. O acoplamento entre os dois conjuntos de equações é feito iterativamente utilizando-se a metodologia de Picard. No entanto, esse método enfrenta alguns problemas de convergência e pode limitar significativamente o valor crítico do número de Weissemberg. Porém, o problema do número de Weissemberg elevado pode ser tratado de outras formas, tais como a utilização de técnicas de estabilização, como por exemplo, o aumento da característica elíptica da equação do movimento.

Neste trabalho, optou-se pela formulação segregada, em que são resolvidos dois sistemas separadamente, um para as tensões e outro para as velocidades e pressão. Ainda poderíamos resolver o sistema velocidade/pressão também de forma segregada, como é feito para escoamentos de fluidos newtonianos, onde as tensões já estão embutidas nas equações do movimento. Esta escolha transforma o sistema de equações não lineares em dois sistemas de equações lineares. Isto fica evidente observando que as velocidades presentes na equação constitutiva são tratadas como dados de entrada conhecidos, e as tensões que aparecem nas equações de conservação da quantidade de movimento também são tratadas como dados de entrada conhecidos. Por sua vez, cada um dos dois sistemas lineares resultantes é resolvido de forma acoplada.

A definição da forma de tratamento do acoplamento pressão-velocidade-tensão condiciona a forma das equações discretizadas. Isto é, influencia diretamente no tratamento que é dado aos diferentes termos das equações (5.7)-(5.9). Isto ficará claro no decorrer das próximas seções.

5.2 EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Para aproximar numericamente as integrais de superfície da equação (5.8) aplica-se a equação (4.32). Assim, chega-se a

$$\sum_{e \in \mathbb{E}_p} \left[-\beta \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\nabla \mathbf{v})_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f + \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\mathbf{P}_i^*)_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f \right] = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\boldsymbol{\tau}_i^*)_f \Delta \mathbf{S}_f, \quad (5.10)$$

onde $i = x, y$ e $\boldsymbol{\tau}_i^*$ é um vetor equivalente a uma linha do tensor tensão elástica $\boldsymbol{\tau}$. Por exemplo, $\boldsymbol{\tau}_x^*$ tem as componentes (τ_{xx}, τ_{xy}) . A mesma convenção é adotada para denotar \mathbf{P}_i^* que representa uma linha do tensor \mathbf{P} . Logo, \mathbf{P}_x^* e \mathbf{P}_y^* possuem componentes $(p, 0)$ e $(0, p)$, respectivamente.

Para introduzir o esquema de interpolação é mais conveniente considerar, separadamente, as equações das componentes cartesianas de quantidade de movimento. Cada uma destas equações pode ser escrita como

$$\sum_{e \in \mathbb{E}_p} \left[-\beta \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\nabla v^i)_f \Delta \mathbf{S}_f + \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\mathbf{P}_i^*)_f \Delta \mathbf{S}_f \right] = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\boldsymbol{\tau}_i^*)_f \Delta \mathbf{S}_f, \quad (5.11)$$

onde $i = x, y$ representa cada uma das direções coordenadas.

Após substituir a aproximação de (∇v^i) através da equação (4.13), e também a interpolação genérica dada pela equação (4.42), obtém-se

$$\begin{aligned} -\beta \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} b_{f,l}^e v_l^i + \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \alpha_{f,l}^e (\dot{\mathbf{P}}_i^*)_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f = \\ \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \alpha_{f,l}^e (\boldsymbol{\tau}_i^*)_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \end{aligned} \quad (5.12)$$

onde $b_{f,l}^e$ são as componentes do operador \mathbf{b}_f^e que aproxima o fluxo difusivo numa face f .

Nesta equação usou-se a seguinte notação para o vetor área da face

$$\Delta \mathbf{S}_f = \begin{bmatrix} \Delta S_f^x \\ \Delta S_f^y \end{bmatrix}. \quad (5.13)$$

Já que a forma usada na equação de conservação de quantidade de movimento é linear na velocidade, pressão e tensão, a sua forma discretizada resultou também em uma relação linear incluindo os valores nodais das componentes da velocidade, da pressão e da tensão, na direção i .

5.2.1 Função de interpolação espacial para a equação do movimento

Para se obter a forma final da equação de conservação da quantidade de movimento (5.12), deve-se escolher o esquema de interpolação espacial a ser utilizado na aproximação segundo termo do lado esquerdo e no termo do lado direito da equação (5.12). Esses termos representam, respectivamente, o gradiente de pressão e o gradiente de tensão aplicado no volume de controle centrado em p e possuem natureza elíptica. Em geral, a escolha do esquema de interpolação deve concordar com essa característica. Conforme sugerido

em (HURTADO, 2011), um esquema de segunda ordem é adequado neste caso. No contexto do método dos volumes finitos baseado em elementos, isso é conseguido realizando a interpolação por meio das funções de forma, ou seja,

$$\alpha_{f,l}^e \approx N_{f,l}, \quad (5.14)$$

onde $N_{f,l} = N_l(\xi_f, \eta_f)$, isto é, os valores das funções de forma avaliadas nos centroides das faces.

Aplicando essa aproximação na equação (5.12), e expandindo os produtos internos, com um pouco de algebrismo, chega-se

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \left[-\beta b_{f,l}^e \check{u}_l^e + N_{f,l} \check{p}_l^e \Delta S_f^x \right] = \\ \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \left[N_{f,l}(\check{\tau}_{xx})_l^e \Delta S_f^x + N_{f,l}(\check{\tau}_{xy})_l^e \Delta S_f^y \right], \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \left[-\beta b_{f,l}^e \check{v}_l^e + N_{f,l} \check{p}_l^e \Delta S_f^y \right] = \\ \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}_e} \left[N_{f,l}(\check{\tau}_{xy})_l^e \Delta S_f^x + N_{f,l}(\check{\tau}_{yy})_l^e \Delta S_f^y \right], \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde $b_{f,l}^e$ são as componentes do vetor \mathbf{b}_f^e .

5.3 EQUAÇÃO DA CONSERVAÇÃO DA MASSA

Para a aproximação numérica da equação da conservação da massa (5.7), aplica-se a equação (4.32), com $\mathcal{W} = \mathbf{v}$, obtendo-se

$$\sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \mathbf{v}_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f = 0. \quad (5.17)$$

A forma fechada da equação é obtida após introduzir a aproximação para a velocidade nas faces em função de variáveis nodais.

5.3.1 Função de interpolação espacial para a equação de conservação da massa

Para aproximar a velocidade nos centroides das faces, poderia-se utilizar as funções de forma que seria uma aproximação linear válida, conforme foi feito na equação de conservação da quantidade de movimento.

Apesar disto, não é aconselhável este tipo de aproximação, pois causaria que apenas coeficientes associados às componentes de velocidade existissem na equação de conservação da massa. Isso pode produzir um severo mal-condicionamento na matriz de coeficientes do sistema de equações discretizadas. Além disso, existe o potencial problema do desacoplamento parcial dos campos de pressão e velocidade devido ao uso de um arranjo colocalizado de variáveis, conhecido como *checkerboard problem* (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004). A inserção da pressão na equação de conservação da massa evita essas complicações e diversas são as possibilidades de se fazê-la. A mais comum é aquela em que é tomado o divergente do vetor velocidade, a partir das equações do movimento, e introduzido na equação de conservação da massa, gerando uma equação de Poisson para a pressão. Esta alternativa, entretanto, não garante a conservação da massa e as velocidades aparecem apenas explicitamente no termo fonte dessa equação, porém o desejado é que a pressão e as velocidades nodais apareçam implicitamente na equação de conservação da massa. Uma estratégia a ser considerada é a inserção dos efeitos da pressão via função de interpolação para a velocidade na equação de conservação da massa. É uma estratégia semelhante àquela utilizada por Raw (1985) no desenvolvimento do método FIELDS para a solução das equações de Navier-Stokes em malhas de quadriláteros. O método proposto por Raw utiliza uma aproximação pontual da equação da quantidade de movimento como base para a construção da função de interpolação. Desta forma, para o caso considerado aqui, parte-se da equação de conservação da quantidade de movimento (5.2) aplicada no centroide de uma face

$$(\beta \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{P} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau})_f, \quad (5.18)$$

e busca-se uma expressão aproximada para a velocidade em função das variáveis nodais.

Para isso, deve-se aproximar cada um dos termos da equação (5.18) em função dos seus respectivos valores nodais. Isso é feito nas subseções a seguir.

5.3.1.1 Termo da pressão

O termo da pressão pode ser aproximado na face via funções de forma. Sendo assim, tem-se

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = - [\mathbf{J}^T]^{-1} \mathbf{D}^T (\dot{\mathbf{P}}_i^*)^e = \mathbf{G}^T (\dot{\mathbf{P}}_i^*)^e, \quad (5.19)$$

onde \mathbf{G} é o operador gradiente definido na equação (4.14).

5.3.1.2 Termo da tensão elástica

Como feito para o termo da pressão, o termo da tensão elástica é aproximado no ponto central de uma face via funções de forma, ou seja,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = - [\mathbf{J}^T]^{-1} \mathbf{D}^T (\boldsymbol{\tau}_i^*)^e = \mathbf{G}^T (\boldsymbol{\tau}_i^*)^e. \quad (5.20)$$

5.3.1.3 Laplaciano da velocidade

Raw (1985) propôs uma aproximação para o laplaciano da forma

$$(\nabla^2 \mathbf{v})_j \approx \frac{\check{\mathbf{V}}_e^T \mathbf{N}_j - \mathbf{v}_j}{L_d^2}. \quad (5.21)$$

onde \mathbf{N}_j é o vetor de valores das funções de forma no ponto central de cada face e L_d é uma escala de comprimento para a difusão, a qual pode ser relacionada com as dimensões do elemento considerado e é definida em cada ponto de integração do elemento. A discretização detalhada do operador laplaciano, bem como a expressão analítica para o comprimento L_d , para elementos quadriláteros e triangulares estão apresentadas no apêndice D. A matriz $\check{\mathbf{V}}_e^T$ contém os valores nodais das componentes da velocidade, ou seja,

$$\check{\mathbf{V}}_e^T = \begin{bmatrix} \check{u}_1 & \check{u}_2 & \cdots & \check{u}_{N_n^e} \\ \check{v}_1 & \check{v}_2 & \cdots & \check{v}_{N_n^e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \check{\mathbf{u}}_e^T \\ \check{\mathbf{v}}_e^T \end{bmatrix}. \quad (5.22)$$

Sem os termos da pressão e da tensão elástica, a equação (5.18) se reduz a uma equação de Laplace para a velocidade, ou seja,

$$\nabla^2 \mathbf{v} = 0. \quad (5.23)$$

Assim, a equação (5.21) implica que nesse caso \mathbf{v}_j será aproximada como uma interpolação bilinear dos valores nodais de velocidade, que é uma boa aproximação para a velocidade em qualquer ponto interior a um elemento. A presença de termos adicionais na equação (5.18) produzirá, então, um desvio da interpolação bilinear obtida usando funções de forma.

Substituindo as aproximações (5.19), (5.20) e (5.21) na equação (5.18), chega-se a aproximação completa para a equação de Stokes (5.18):

$$\beta \frac{\check{\mathbf{V}}_e^T \mathbf{N}_j - \mathbf{v}_j}{L_d^2} - \mathbf{G}^T (\check{\mathbf{P}}_i^*)^e + \mathbf{G}^T (\boldsymbol{\tau}_i^*)^e \approx 0. \quad (5.24)$$

Isolando \mathbf{v}_j nesta equação, obtém-se

$$\mathbf{v}_j \approx \check{\mathbf{V}}_e^T \mathbf{N}_j - \frac{L_d^2}{\beta} \mathbf{G}^T (\check{\mathbf{P}}_i^*)^e + \frac{L_d^2}{\beta} \mathbf{G}^T (\boldsymbol{\tau}_i^*)^e, \quad (5.25)$$

Portanto, conforme afirmado anteriormente, a interpolação da velocidade é igual a uma interpolação bilinear dos valores nodais de velocidade mais um certo desvio provocado pelos termos associados à pressão e à tensão. A participação de valores nodais da pressão e da tensão na função de interpolação da velocidade promove o acoplamento entre os campos de velocidade, pressão e tensão, ademais, causará o aparecimento de coeficientes associados à pressão e à tensão na forma discretizada da equação de conservação da massa. Isto melhora o condicionamento da matriz de coeficientes do sistema global de equações (RAW, 1985; HONÓRIO, 2013).

Substituindo a aproximação (5.25) na equação de conservação da massa (5.17), obtém-se

$$\begin{aligned}
 \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \mathbf{v}_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f &\approx \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \Delta \mathbf{S}_f^T \cdot \check{\mathbf{V}}_e^T \mathbf{N}_f \\
 &- \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \frac{L_d^2}{\beta} \Delta \mathbf{S}_f^T \cdot \mathbf{G}^T (\check{\mathbf{r}}_i^*)^e \\
 &+ \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \frac{L_d^2}{\beta} \Delta \mathbf{S}_f^T \cdot \mathbf{G}^T (\check{\mathbf{r}}_i^*)^e.
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Fazendo uso do operador $(\mathbf{b}_f^e)^T$ a equação (5.26) pode ser reescrita conforme

$$\begin{aligned}
 \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \mathbf{v}_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f &\approx \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \Delta \mathbf{S}_f^T \cdot \check{\mathbf{V}}_e^T \mathbf{N}_f \\
 &- \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\mathbf{b}_f^e)^T (\check{\mathbf{r}}_i^*)^e \\
 &+ \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\mathbf{b}_f^e)^T (\check{\mathbf{r}}_i^*)^e.
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

Considerando que, segundo a equação (5.22), a matriz \mathbf{V}_e^T é formada pelos vetores de valores nodais associados às duas componentes da veloci-

dade, a equação (5.26) pode ser reescrita na forma equivalente

$$\begin{aligned}
 \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \mathbf{v}_{\hat{f}} \cdot \Delta \mathbf{S}_f &\approx \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \Delta S_f^x N_{f,l} \check{u}_l^e + \Delta S_f^y N_{f,l} \check{v}_l^e \\
 &- \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \left(\Delta S_f^x \frac{\partial N_{f,l}}{\partial x} + \Delta S_f^y \frac{\partial N_{f,l}}{\partial y} \right) \check{p}_l^e \\
 &+ \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \left(\Delta S_f^x \frac{\partial N_{f,l}}{\partial x} + \Delta S_f^y \frac{\partial N_{f,l}}{\partial y} \right) (\check{\tau}_{xy})_l^e \\
 &+ \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \left(\Delta S_f^x \frac{\partial N_{f,l}}{\partial x} (\check{\tau}_{xx})_l^e + \Delta S_f^y \frac{\partial N_{f,l}}{\partial y} (\check{\tau}_{yy})_l^e \right).
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

As tensões são tratadas como parte de um termo fonte da equação, assim, rearranjando a equação anterior se obtém a forma final da equação de conservação

$$\begin{aligned}
 \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \left[\Delta S_f^x N_{f,l} \check{u}_l^e + \Delta S_f^y N_{f,l} \check{v}_l^e - \frac{L_d^2}{\beta} \left(\Delta S_f^x \frac{\partial N_{f,l}}{\partial x} + \Delta S_f^y \frac{\partial N_{f,l}}{\partial y} \right) \check{p}_l^e \right] = \\
 + \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \left(\Delta S_f^x \frac{\partial N_{f,l}}{\partial x} + \Delta S_f^y \frac{\partial N_{f,l}}{\partial y} \right) (\check{\tau}_{xy})_l^e \\
 + \frac{L_d^2}{\beta} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} \left(\Delta S_f^x \frac{\partial N_{f,l}}{\partial x} (\check{\tau}_{xx})_l^e + \Delta S_f^y \frac{\partial N_{f,l}}{\partial y} (\check{\tau}_{yy})_l^e \right).
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

Consequentemente, a contribuição de um dado elemento na equação discretizada de conservação de massa de um dado volume de controle possui parcelas associadas às duas componentes da velocidade, às três componentes da tensão e também à pressão, segundo foi comentado anteriormente.

5.4 EQUAÇÃO CONSTITUTIVA

Por conveniência, repetiremos a equação constitutiva na forma integral (5.9) abaixo

$$\begin{aligned}
 \int_{V_p} \boldsymbol{\tau} dV + We \int_{S_p} (\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau}) \cdot d\mathbf{S} + We \left[\int_{V_p} -(\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T dV \right] = \\
 (1 - \beta) \int_{V_p} \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) dV.
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Lembrando da simetria do tensor tensão elástica, pode-se decompor a equação anterior em três equações, conforme

$$\int_{V_p} \tau_{xx} dV + We \int_{S_p} (\mathbf{v}\tau_{xx}) \cdot d\vec{\mathbf{S}} - 2We \int_{V_p} \left[\tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right] dV = 2(1-\beta) \int_{V_p} \frac{\partial u}{\partial x} dV, \quad (5.31)$$

$$\int_{V_p} \tau_{yy} dV + We \int_{S_p} (\mathbf{v}\tau_{yy}) \cdot d\vec{\mathbf{S}} - 2We \int_{V_p} \left[\tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right] dV = 2(1-\beta) \int_{V_p} \frac{\partial v}{\partial y} dV, \quad (5.32)$$

$$\int_{V_p} \tau_{xy} dV + We \int_{S_p} (\mathbf{v}\tau_{xy}) \cdot d\vec{\mathbf{S}} - We \int_{V_p} \left[\tau_{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right] dV = (1-\beta) \int_{V_p} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dV. \quad (5.33)$$

Observando as equações acima, percebe-se que os termos em cada uma delas se repetem nas outras mudando apenas a incógnita em questão. Em vista disto, somente será feita a discretização detalhada de cada termo da equação (5.31). Para as outras duas equações o processo é análogo e nos limitaremos apenas a escrevê-las diretamente no final desta seção.

5.4.1 Integral de τ_{xx} sobre o volume de controle centrado em p

Deseja-se aproximar primeiro termo do lado esquerdo da equação (5.31), ou seja,

$$\int_{V_p} \tau_{xx} dV. \quad (5.34)$$

Conforme visto na seção 4.6, a aproximação de uma integral de volume de é realizada pela aplicação direta da regra do ponto médio, isto é, o produto do valor médio do integrando no domínio de integração multiplicado pelo volume desse domínio. Portanto, utilizando a equação (4.21) com $\Theta = \tau_{xx}$, obtém-se a aproximação da equação (5.34) conforme

$$\int_{V_p} \tau_{xx} dV \approx (\check{\tau}_{xx})_p \Delta V_p, \quad (5.35)$$

onde $(\check{\tau}_{xx})_p$ é o valor nodal do integrando e ΔV_p é o volume do volume de controle, ambos associados ao nó p .

5.4.2 Termo de transporte advectivo

A integral contida no segundo termo do lado esquerdo da equação (5.31) tem caráter advectivo. Os termos advectivos são de natureza parabólica, o que significa que a direção do escoamento, particularmente os valores a montante, tem grande influência no valor da propriedade transportada por advecção (MALISKA, 2004). Para discretizar esse termo, primeiramente emprega-se a equação (4.32) com $\mathcal{W} = \mathbf{v}\tau_{xx}$, para se obter a seguinte aproximação

$$\int_{S_p} (\mathbf{v}\tau_{xx}) \cdot d\vec{S} = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} (\mathbf{v}\tau_{xx})_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \quad (5.36)$$

O produto escalar da velocidade, avaliada no centroide da face, pelo vetor área da face é uma aproximação da vazão volumétrica através da face, isto é,

$$Q_f \approx \mathbf{v}_f \cdot \Delta \mathbf{S}_f. \quad (5.37)$$

Desta forma, a equação (5.36) é reescrita, de forma mais compacta conforme

$$\int_{S_p} (\mathbf{v}\tau_{xx}) \cdot d\vec{S} = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} Q_f (\tau_{xx})_f. \quad (5.38)$$

Admitindo que o campo de velocidade é conhecido, a única incógnita é τ_{xx} . Portanto, necessita-se relacionar $(\tau_{xx})_f$ com os valores nodais no elemento, mediante algum esquema de interpolação. De maneira geral isso pode ser feito pelo emprego da equação (4.42), com a qual se obtém

$$\int_{S_p} (\mathbf{v}\tau_{xx}) \cdot d\vec{S} = \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} Q_f \alpha_{f,l}^e (\check{\tau}_{xx})_l^e. \quad (5.39)$$

Em função da importância da velocidade no transporte de τ_{xx} no domínio, não é possível utilizar as funções de forma para interpolar $(\tau_{xx})_f$, pois a aproximação resultante seria bilinear, caracterizando uma aproximação em diferenças centrais, sabidamente inapropriada para modelar os termos advectivos (MALISKA, 2004). Funções de interpolação desse tipo para os termos advectivos dão origem a coeficientes negativos nas equações discretizadas e, conforme é extensamente relatado na literatura (LEVEQUE, 2004; MALISKA, 2004; PATANKAR, 1980; RAW, 1985), problemas de monotonicidade e de oscilações nas soluções são produzidas nesses casos. Geralmente, a opção adotada para prevenir esse problema é o emprego do esquema de interpolação SPU (*Single point upwind*). Portanto, no presente trabalho será utilizada a função de interpolação SPU, dada pela equação (4.45).

5.4.3 Integrais volumétricas envolvendo produto de tensões e derivadas da velocidade

Esse tipo de integral aparece no terceiro termo do lado esquerdo da equação (5.31). Sendo uma integral de volume, usa-se a aproximação dada na equação (4.42), ou seja,

$$\int_{V_p} \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} dV \approx (\check{\tau}_{xx})_p \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_p \Delta V_p. \quad (5.40)$$

Por sua vez, a derivada de u com respeito a x é aproximada pela aplicação da equação (4.41), obtendo-se a expressão

$$\int_{V_p} \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} dV \approx (\check{\tau}_{xx})_p \left(\frac{1}{\Delta V_p} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} u_j \Delta S_f^x \right) \Delta V_p. \quad (5.41)$$

Apesar da integral acima estar na forma discretizada, necessita-se o valor da velocidade nos pontos nodais, o que pode ser facilmente obtido fazendo uso das funções de forma definidas no Capítulo 4. Sendo assim, a aproximação final da integral (5.40) é escrita conforme

$$\int_{V_p} \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} dV \approx (\check{\tau}_{xx})_p \left(\frac{1}{\Delta V_p} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_{f,l} \check{u}_l^e \Delta S_f^x \right) \Delta V_p. \quad (5.42)$$

5.4.4 Integrais volumétricas das derivadas da velocidade

A integral do lado direito da equação (5.31), a qual é uma integral de volume, pode ser aproximada de maneira similar à integral (5.34). Ou seja, o produto do valor do integrando avaliado no nó do volume de controle em questão pelo volume do volume de controle. Matematicamente,

$$\int_{V_p} \frac{\partial u}{\partial x} dV \approx \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_p \Delta V_p. \quad (5.43)$$

Para concluir a aproximação, necessita-se aproximar as derivada da velocidade no nó p . Para tanto, emprega-se a equação (4.41). Desta maneira, a forma final para a integral do lado direito fica

$$\int_{V_p} \frac{\partial u}{\partial x} dV \approx \left(\frac{1}{\Delta V_p} \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_{f,l} \check{u}_l^e \Delta S_f^x \right) \Delta V_p. \quad (5.44)$$

5.4.5 Forma final das equações constitutivas

Tendo-se discretizado todos os termos da equação (5.31), pode-se escrever a forma final da discretização das equações constitutivas conforme

$$\begin{aligned} \left(1 - 2We \frac{\partial u}{\partial x}\right) \Delta V_p(\check{\tau}_{xx})_p + \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} Q_f \alpha_{f,l}^e(\check{\tau}_{xx})_l^e \\ - 2We \frac{\partial u}{\partial y} \Delta V_p(\check{\tau}_{xy})_p = 2(1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial x} \Delta V_p, \end{aligned} \quad (5.45)$$

$$\begin{aligned} \left(1 - 2We \frac{\partial v}{\partial y}\right) \Delta V_p(\check{\tau}_{yy})_p + \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} Q_f \alpha_{f,l}^e(\check{\tau}_{yy})_l^e \\ - 2We \frac{\partial v}{\partial x} \Delta V_p(\check{\tau}_{xy})_p = 2(1 - \beta) \frac{\partial v}{\partial y} \Delta V_p, \end{aligned} \quad (5.46)$$

$$\begin{aligned} \Delta V_p(\check{\tau}_{xy})_p + \sum_{e \in \mathbb{E}_p} \sum_{f \in \mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} Q_f \alpha_{f,l}^e(\check{\tau}_{xy})_l^e - We \frac{\partial v}{\partial x} \Delta V_p(\check{\tau}_{xx})_p \\ - We \frac{\partial u}{\partial y} \Delta V_p(\check{\tau}_{yy})_p = (1 - \beta) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Delta V_p. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Por clareza, decidiu-se não escrever explicitamente as discretizações das derivadas da velocidade. Esta forma de apresentação das equações facilita na implementação, uma vez que essas derivadas são calculadas à partir da solução das equações de conservação da massa e da quantidade de movimento e, portanto, são constantes. Isto ficará claro na seção 5.8.

5.5 SISTEMA DE EQUAÇÕES

O resultado da discretização de uma equação diferencial linear, é uma equação algébrica, também linear, para cada volume de controle na malha. Quando reunidas as equações associadas a todos os volumes de controle em uma dada malha se obtém um sistema de equações lineares. A solução deste sistema proporciona uma aproximação numérica da solução da equação diferencial no domínio de solução.

As equações discretizadas (5.15), (5.16), (5.29) (5.45), (5.46) e (5.47) apresentam uma dependência mútua entre si. Por conseguinte, todas as incógnitas \check{u} , \check{v} , \check{p} , $\check{\tau}_{xx}$, $\check{\tau}_{yy}$ e $\check{\tau}_{xy}$ devem satisfazer simultaneamente as seis equações. Deste modo, tais equações, que estão definidas em cada um dos $N_{\text{nós}}$ da malha

computacional, dão origem a um sistema de equações lineares de dimensão $(6N_{\text{nós}}) \times (6N_{\text{nós}})$.

Conforme discutido na seção 5.1, neste trabalho optou-se por resolver primeiramente as equações (5.15), (5.16), e (5.29), que formam o sistema de Stokes, e depois as equações (5.45), (5.46) e (5.47), que formam o sistema das equações constitutivas. Desta forma resolve-se dois sistemas lineares de $(3N_{\text{nós}}) \times (3N_{\text{nós}})$.

Para construir cada um dos sistemas lineares, primeiramente, deve-se definir a forma como as equações serão organizadas. A forma de organização das equações empregada neste trabalho consiste no armazenamento consecutivo de todas as equações de cada um dos volumes de controle (MALISKA, 2004; HONÓRIO, 2013). Por exemplo, para a montagem do sistema de Stokes, nas três primeiras linhas do sistema linear serão armazenadas, respectivamente, a equação (5.15), (5.16), e (5.29), do primeiro volume de controle; na 4ª 5ª e 6ª linhas, são armazenadas as mesmas três equações do 2º volume de controle e assim sucessivamente. Desta forma, obtém-se um sistema linear com a seguinte forma (HONÓRIO, 2013),

$$\begin{bmatrix} A_{11}^{\ominus} & \cdots & A_{1N_{\text{nós}}}^{\ominus} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N_{\text{nós}}1}^{\ominus} & \cdots & A_{N_{\text{nós}}N_{\text{nós}}}^{\ominus} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \check{\Theta}_1 \\ \vdots \\ \check{\Theta}_{N_{\text{nós}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1^{\ominus} \\ \vdots \\ B_{N_{\text{nós}}}^{\ominus} \end{bmatrix}, \quad (5.48)$$

em que os coeficientes A_{lf}^{\ominus} são matrizes de dimensão 3×3 e os coeficientes $\check{\Theta}_l$ e B_l são vetores de dimensão 3×1 , definidos da seguinte maneira

$$A_{lf}^{\ominus} = \begin{bmatrix} A_{lf}^{uu} & 0 & A_{lf}^{up} \\ 0 & A_{lf}^{vv} & A_{lf}^{vp} \\ A_{lf}^{pu} & A_{lf}^{pv} & A_{lf}^{pp} \end{bmatrix} \quad \check{\Theta}_l = \begin{bmatrix} \check{u}_l \\ \check{v}_l \\ \check{p}_l \end{bmatrix} \quad B_l^{\ominus} = \begin{bmatrix} B_l^u \\ B_l^v \\ B_l^p \end{bmatrix}, \quad (5.49)$$

onde os coeficientes da matriz A_{lf}^{\ominus} representam a conexão entre a equação definida no nó p e as demais equações dos nós l 's do elemento, através da face f contida nesse elemento. A equação à qual pertence o coeficiente é indicada pelo primeiro superíndice e qual incógnita está multiplicando é indicada pelo segundo superíndice. Por exemplo, o coeficiente A_{lf}^{up} pertence à equação do movimento em x e está multiplicando a variável \check{p} . Ademais, ele representa a influência da da pressão, definida no nó l , através da face f na equação da componente u da velocidade definida no nó p .

Por utilizar malhas não estruturadas, o método EbFVM apresenta uma configuração onde o número de vizinhos dos volumes de controle não é fixo, podendo assim, cada linha da matriz da equação (5.48) possuir um número arbitrário de matrizes não nulas, sendo uma para os coeficientes centrais das

variáveis em cada equação e as outras para os coeficientes de conexão com os volumes vizinhos.

Similarmente, para as equações constitutivas se obtém um sistema linear da forma (5.48), onde coeficientes A_{lf}^\ominus , Θ_l e B_l são definidos da seguinte forma

$$A_{lf}^\ominus = \begin{bmatrix} A_{lf}^{\tau_{xx}\tau_{xx}} & 0 & A_{lf}^{\tau_{xx}\tau_{xy}} \\ 0 & A_{lf}^{\tau_{yy}\tau_{yy}} & A_{lf}^{\tau_{yy}\tau_{xy}} \\ A_{lf}^{\tau_{xy}\tau_{xx}} & A_{lf}^{\tau_{xy}\tau_{yy}} & A_{lf}^{\tau_{xy}\tau_{xy}} \end{bmatrix} \quad \Theta_l = \begin{bmatrix} (\tau_{xx})_l \\ (\tau_{yy})_l \\ (\tau_{xy})_l \end{bmatrix} \quad B_l^\ominus = \begin{bmatrix} B_l^{\tau_{xx}} \\ B_l^{\tau_{yy}} \\ B_l^{\tau_{xy}} \end{bmatrix}. \quad (5.50)$$

Observe-se que das seis equações diferenciais sendo resolvidas apenas 3 são equações de conservação e para as quais as integrações foram feitas na forma conservativa, reproduzindo o balanço das propriedades, no caso quantidade de movimento e massa. As outras três equações são relações constitutivas e não necessitam de cuidados especiais em relação a conservação, pois não representam equações de conservação.

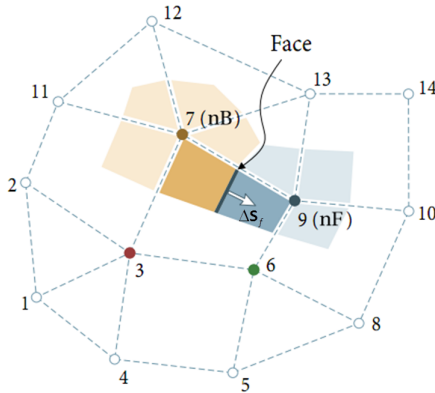
5.5.1 Montagem do sistema linear

Na implementação do método de volumes finitos baseado em elementos costuma-se realizar a montagem do sistema de equações seguindo um procedimento de varredura por elementos, no qual cada vez que um elemento é visitado, todas as contribuições associadas a ele sejam calculadas e adicionadas em suas posições adequadas da matriz de coeficientes. Esta abordagem é a mais adequada, pois o próprio método de discretização está baseado em aproximações locais por elemento.

Desta forma, o procedimento de montagem da matriz de coeficientes inicia-se com uma varredura em todos os elementos da malha computacional. Em cada elemento e acessado, são percorridas todas as suas faces internas f nas quais deve-se aproximar uma certa grandeza, porém essa grandeza necessita dos valores nodais para ser calculada. Portanto, para a cada face f do elemento e é feita uma varredura nos vértices l 's deste elemento. Dentro desta varredura calcula-se todos os valores que compõem o coeficiente A_{lf}^\ominus . Cada coeficiente deve ser adicionado na sua respectiva equação referente ao volume de controle correspondente ao nó localizado atrás da face, nB , e subtraído da equação referente ao volume de controle do nó localizado à frente da face, nF , como indicado na Figura 23. A equação referente ao nó à frente ou atrás define em qual linha do sistema o coeficiente deve ser inserido. A coluna é determinada por qual vértice do elemento está sendo acessado, isto é, qual variável nodal o coeficiente deve multiplicar.

Para inserir os fluxos dos volumes de controle de fronteira é realizada uma nova varredura nas faces de contorno. O procedimento de montagem do

Figura 23 – Representação dos volumes de controle atrás e à frente da face. (modificado de Hurtado (2011))



sistema linear pode ser encontrado com mais detalhes em (HURTADO, 2011; HONÓRIO, 2013; COOK et al., 2001; HUGHES, 2000).

5.6 TRATAMENTO DOS VOLUMES DE CONTROLE DAS FRONTEIRAS

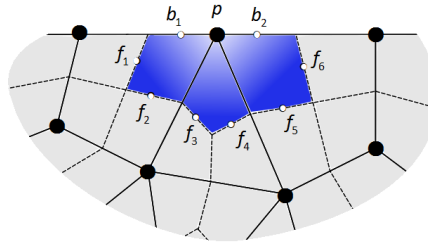
Nos capítulos anteriores as equações foram derivadas para volumes de controle genéricos localizados no interior do domínio. Se o nó p estiver localizado na fronteira do domínio, conforme mostrado na Figura 24, as equações para o volume de controle ao redor do referido nó devem conter, além das contribuições das faces internas (*IFC*), as contribuições das faces de contorno (*BFC*). Considerando-se um volume de contorno conforme o mostrado na Figura 24, são apresentadas, a seguir, as contribuições das faces de contorno para as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, bem como das equações constitutivas.

5.6.1 Equação de conservação da massa

A equação de conservação da massa, para um volume de controle na fronteira, é dada pela soma das contribuições das faces internas e das contribuições das faces de contorno, ou seja,

$$(IFC)_{CM} + (BFC)_{CM} = 0, \quad (5.51)$$

Figura 24 – Volume de controle na fronteira do domínio com as faces internas f_i e faces de contorno b_i (modificado de Honório (2013))



em que (IFC) é dado pela equação (5.29) e o termo (BFC) pode ser escrito conforme

$$(BFC)_{CM} = \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} (u_b S_b^x + v_b S_b^y). \quad (5.52)$$

Para obter a forma fechada da equação (5.52), deve-se decidir como serão avaliadas as velocidades u e v nas faces. A função de interpolação do tipo FIELDS poderia ser utilizada, porém neste trabalho optou-se pelo uso das funções de forma, obtendo-se resultados satisfatórios. Assim, a forma final da contribuição das faces do contorno fica,

$$(BFC)_{CM} = \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_{b,l} (\check{u}_l^e \Delta S_b^x + \check{v}_l^e \Delta S_b^y). \quad (5.53)$$

5.6.2 Equação de conservação da quantidade de movimento

A equação de conservação da quantidade de movimento para um volume de controle pode ser escrita conforme:

$$(IFC)_{QM} + (BFC)_{QM}. \quad (5.54)$$

As contribuições das faces internas são dadas pela equações (5.15) e (5.16). Similarmente ao que foi feito para a equação de conservação da massa, as contribuições das faces do contorno para a equação do movimento podem ser

escritas conforme

$$\begin{aligned}
 (BFC)_{QM} = & -\beta \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} (\nabla v^j)_b \Delta \mathbf{S}_b \\
 & + \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} (\mathbf{P}_i^*)_b \cdot \Delta \mathbf{S}_b \\
 & - \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} (\boldsymbol{\tau}_i^*)_b \cdot \Delta \mathbf{S}_b.
 \end{aligned} \tag{5.55}$$

As equações de conservação da quantidade de movimento são construídas apenas para volumes de controle de fronteiras com entrada ou saída de massa em que as velocidades não estejam prescritas como condições de contorno. Essas fronteiras estão localizadas em uma região onde se possa garantir que não exista fluxo difusivo (MALISKA, 2004). Sendo assim, não é necessário computar as contribuições do termo difusivo da equação (5.55). Portanto, para computar as contribuições das faces de contorno para a equação do movimento basta escolher uma aproximação para a pressão e para as tensões nas faces de contorno. Isso pode ser feito com o uso das funções de forma. Deste modo, obtém-se

$$(BFC)_{CM} = \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^e} N_{b,l} (\check{\mathbf{P}}_i^*)_b \cdot \Delta \mathbf{S}_b - N_{b,l} (\check{\boldsymbol{\tau}}_i^*)_b \cdot \Delta \mathbf{S}_b. \tag{5.56}$$

5.6.3 Equações constitutivas

As equações constitutivas também devem ser discretizadas para os volumes de controle da fronteira. Observando a equação (5.45) percebe-se que o único termo que inclui somatório nas faces é o termo advectivo, logo é o único termo que deve ser avaliado nas faces do contorno. Ou seja, a contribuição das faces de contorno para a equação (5.45) resume-se a:

$$(BFC)_{EC\tau_{xx}} = We \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} Q_b (\tau_{xx})_b. \tag{5.57}$$

Conforme visto anteriormente, e repetido aqui por completeza, o produto escalar da velocidade, avaliada no centroide da face, pelo vetor área da face é uma aproximação da vazão volumétrica Q_b através da face, ou seja,

$$Q_b \approx \mathbf{v}_b \cdot \Delta \mathbf{S}_b. \tag{5.58}$$

Aqui as componentes do vetor velocidade, \mathbf{v} , podem ser aproximadas pelas funções de forma avaliadas no ponto de integração da face. Já o valor da propriedade τ_{xx} deverá ser extrapolado de valores internos de τ_{xx} ou utilizando

algum esquema de interpolação adequado. Neste trabalho foi empregado o esquema SPU. Assim, o termo com as contribuições das faces internas para a equação (5.45) é dado por

$$(BFC)_{EC_{\text{xxx}}} = We \sum_{e \in {}^b\mathbb{E}_p} \sum_{b \in {}^b\mathbb{F}_p^e} \sum_{l \in \mathbb{N}^{b_e}} Q_b \alpha_{b,l}^e(\check{\tau}_{\text{xx}})_l^e. \quad (5.59)$$

Procedendo de maneira análoga é fácil obter as contribuições das faces de contorno para as equações (5.46) e (5.47).

5.7 CONDIÇÕES DE CONTORNO DE DIRICHLET

Em uma condição de contorno de Dirichlet os valores da variável da equação são conhecidos em uma fronteira. Em formulações numéricas com nós localizados nos vértices (*cell-vertex*) existem nós sobre as fronteiras do domínio, desta forma os valores nodais em nós localizados sobre uma fronteira com condições de contorno de Dirichlet deixam de ser incógnitas do problema.

Existem diferentes maneiras de se aplicar condições de Dirichlet em formulações numéricas com nós localizados nos vértices, vide (HURTADO, 2011; HONÓRIO, 2013). Neste trabalho, a aplicação das condições de Dirichlet no sistema de equações é feita impondo-se o valor prescrito diretamente no sistema linear. Para isto, insere-se o valor zero em todos os coeficientes da linha referente a equação de conservação do nó em que se deseja aplicar a condição de contorno, exceto na diagonal principal, em que se insere um valor igual a 1. Por fim, o valor prescrito é colocado na mesma linha no vetor independente (lado direito).

5.8 ALGORITMO COMPUTACIONAL

O procedimento adotado para resolver o problema de escoamentos de fluidos viscoelásticos é brevemente descrito nesta seção.

Conforme mencionado anteriormente, foi usado o método de Picard para reduzir o problema não linear à uma sequência de problemas lineares. Desta forma, o procedimento de cálculo é dado a seguir:

1. Inicializa as variáveis;
2. Resolve as equações da continuidade e conservação da quantidade de movimento, de forma acoplada, para obter (\mathbf{v}, p) ;

3. Com os valores da velocidade obtidos no passo 2 compute as derivadas da velocidade que aparecem nas equações constitutivas e a vazão mássica;
4. Resolve as equações constitutivas, de forma acoplada, para obter $\boldsymbol{\tau}$;
5. Relaxa as tensões através da fórmula

$$\boldsymbol{\tau}^{k+1} = (1 - \alpha)\boldsymbol{\tau}^k - \alpha\boldsymbol{\tau}^{k+1}, \quad (5.60)$$

onde $\boldsymbol{\tau}^{k+1}$ denota a mais recente aproximação da incógnita na iteração externa e $\alpha \in (0, 1)$ é uma constante de relaxação. Estes valores são utilizados nos termos fontes das equações de conservação da massa e quantidade de movimento.

6. Volta ao passo 2 e repita até a convergência.

O solver GMRES, com pré-condicionador Jacobi, foi aplicado na solução dos sistemas lineares dos passos (2) e (3) com uma tolerância de 10^{-8} . O critério de parada para as iterações de Picard é dado por

$$\frac{\|\Phi^{k+1} - \Phi^k\|_2}{\|\Phi^{k+1}\|_2} < Tol, \quad (5.61)$$

onde $\|\cdot\|_2$ é a norma \mathbb{L}^2 discreta, Φ^{k+1} denota a mais recente aproximação da incógnita na iteração externa, Φ^k é a aproximação anterior, em que $\Phi = (u, v, p, \tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{xy})^T$ e $Tol = 10^{-8}$. O uso do limite $Tol = 10^{-8}$ na equação (5.61) garante que cada uma das variáveis satisfaz a equação (5.61) com, pelo menos $Tol = 10^{-5}$.

6 RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados diversos problemas resolvidos pela aplicação da metodologia proposta neste trabalho. Foram considerados para avaliação do algoritmo exemplos clássicos da literatura comumente utilizados para testar diferentes aspectos das soluções numéricas, são eles: escoamento entre placas planas, escoamento em uma cavidade fechada com tampa móvel e o escoamento em uma contração planar 4:1. O problema do escoamento de um fluido viscoelástico ao redor de um cilindro é também resolvido.

Todas as simulações foram realizadas em computador com processador Intel Core i7 de 2.0 GHz e 6.0 GB de memória RAM. Conforme comentado anteriormente, o código computacional foi desenvolvido em linguagem C++. Fez-se uso da biblioteca EFVLib (MALISKA et al., 2009), desenvolvida no Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC) da Universidade Federal de Santa Catarina, como base para a manipulação de malhas não estruturadas, e da biblioteca PETSc (BALAY et al., 2013), que foi utilizada para resolver os sistemas lineares.

Em todos os exemplos, o fluido considerado é modelado pela equação constitutiva de Oldroyd-B. O tipo de escoamento é um *creeping flow* em regime permanente, ou seja, governado pelas equações (5.1)-(5.3) que são reescritas abaixo por completudeza:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (6.1)$$

$$-\beta \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla p = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (6.2)$$

$$\boldsymbol{\tau} + We \operatorname{div}(\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\tau}) + We \left[-(\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T \right] = (1 - \beta) \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right). \quad (6.3)$$

Em coordenadas cartesianas, para o caso bidimensional, obtém-se

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{xy} - \frac{\partial p}{\partial x} + \beta \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (6.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \tau_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \tau_{yy} - \frac{\partial p}{\partial y} + \beta \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = 0, \quad (6.6)$$

$$\tau_{xx} + We \left(\frac{\partial}{\partial x} (u \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (v \tau_{xx}) - 2 \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} - 2 \tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 2(1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (6.7)$$

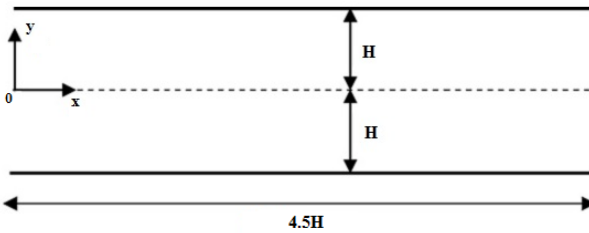
$$\tau_{yy} + We \left(\frac{\partial}{\partial x} (u \tau_{yy}) + \frac{\partial}{\partial y} (v \tau_{yy}) - 2 \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - 2 \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 2(1 - \beta) \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (6.8)$$

$$\tau_{xy} + We \left(\frac{\partial}{\partial x} (u \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y} (v \tau_{xy}) - \tau_{xx} \frac{\partial v}{\partial x} - \tau_{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = (1 - \beta) \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]. \quad (6.9)$$

6.1 ESCOAMENTO ENTRE PLACAS PLANAS

Este exemplo considera um fluido viscoelástico escoando entre duas placas planas paralelas. As simulações são realizadas em uma malha não estruturada com elementos mistos para demonstrar a capacidade do algoritmo em lidar com este tipo de malha. A Figura 25 mostra a geometria 2D, com comprimento $4.5H$ e altura $2H$. Neste trabalho é utilizado $H = 4$.

Figura 25 – Geometria do escoamento entre placas planas



O escoamento é considerado totalmente desenvolvido na entrada. Portanto, um perfil de velocidade parabólico é imposto na entrada, conforme a equação (6.10), abaixo

$$u = \frac{3}{128}(16 - y^2), \quad v = 0. \quad (6.10)$$

A solução analítica para as tensões em todo o domínio é dada por (WEBSTER, 1959; WEBSTER; TAMADDON-JAHROMI; ABOUBACAR, 2004; TOMÉ et al., 2002; YOO; NA, 1991; NA; YOO, 1991) :

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2We(1 - \beta) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \\ \tau_{yy} &= 0, \\ \tau_{xy} &= (1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Usando o perfil de velocidades assumido na entrada, equação (6.10), obtém-se as condições para as tensões na entrada conforme

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= We(1 - \beta) \frac{9}{2048} y^2, \\ \tau_{yy} &= 0, \\ \tau_{xy} &= -(1 - \beta) \frac{3}{64} y. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Condições de não deslizamento foram impostas nas paredes sólidas, ou seja, a velocidade na direção tangente a parede é nula. Como não existe fluxo através da parede, a parede é impermeável e a velocidade 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. Portanto, *na parede*, tem-se

$$u = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (6.13)$$

Substituindo essas condições de contorno nas equações constitutivas, as tensões devem satisfazer as seguintes condições na parede:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2We(1 - \beta) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \\ \tau_{yy} &= 0, \\ \tau_{xy} &= (1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Na fronteira de saída é considerado que o escoamento está plenamente desenvolvido. Para que se possa aplicar corretamente este tipo de condição, é necessário assegurar que a região do domínio do problema, onde essa condição é imposta não existem mais mudanças das variáveis em relação à direção normal ao escoamento. A pressão foi definida com zero nesta fronteira.

Para iniciar o processo de solução numérica, assume-se como estimativa inicial para todas as variáveis como sendo zero.

As simulações foram realizadas na malha mostrada na Figura 26, que consiste em 6800 elementos quadriláteros regulares, 3438 elementos triangulares não regulares e 8717 nós. A utilização desta malha permite avaliar a capacidade do método para lidar com malhas não estruturadas híbridas.

Para avaliar a exatidão do método, as soluções obtidas numericamente são comparadas com as soluções analíticas apresentadas nas equações (6.10) e (6.12).

Nas Figuras 28 e 27 são mostrados o perfil de velocidade u e os perfis de tensão elástica τ_{xx} e τ_{xy} , respectivamente. Os resultados foram gerados para diferentes valores de We ao longo das linhas $x = 5$ e $x = 9$, nas quais ocorre a transição dos elementos retangulares para triangulares, e da linha $x = 13$. O parâmetro β é feito igual a $1/9$ por motivo de comparação com a literatura. Os gráficos mostram excelente concordância entre os resultados numéricos e os das soluções analíticas. Para a tensão de cisalhamento, τ_{xy} , os resultados são os mesmos para os diferentes valores do número de Weissenberg, We .

Figura 26 – Malha 2-D não estruturada utilizada na simulação do escoamento entre placas paralelas.

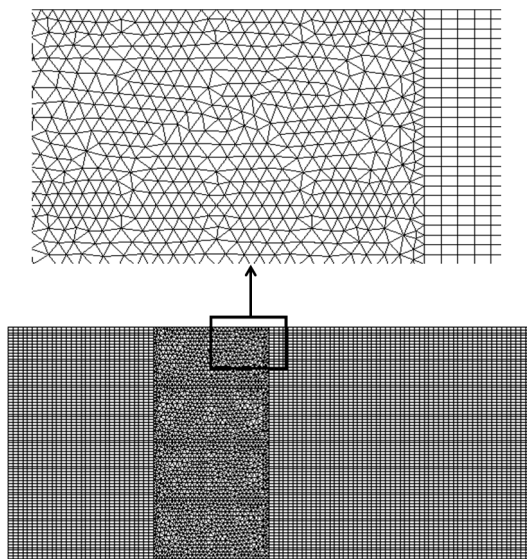


Figura 27 – Perfis das soluções numérica e analítica da velocidade u para o escoamento viscoelástico entre placas planas para diferentes valores do número de Weissenberg

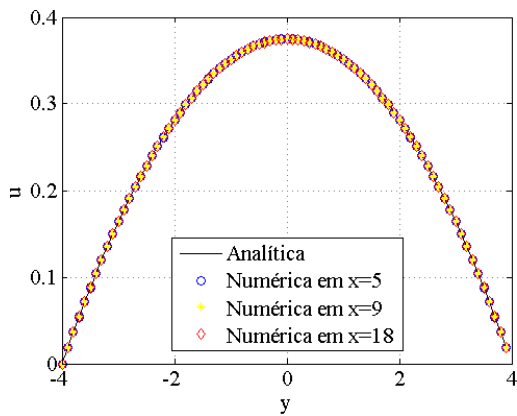
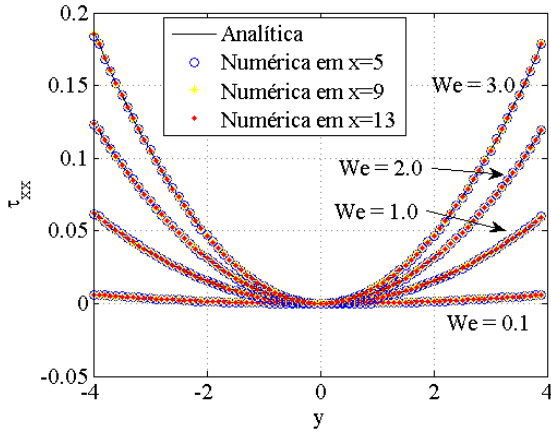
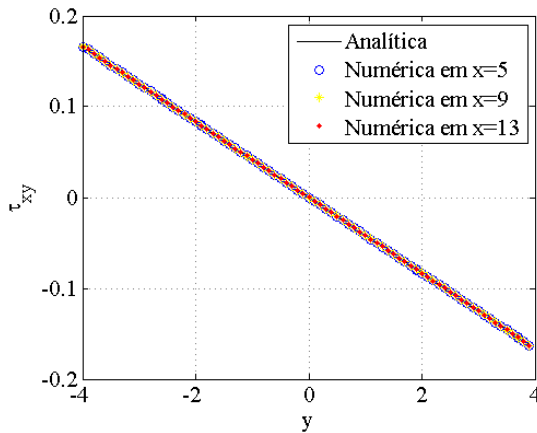


Figura 28 – Perfis das soluções numérica e analítica das tensões para o escoamento viscoelástico entre placas planas para diferentes valores do número de Weissenberg: (a) Tensão normal τ_{xx} , (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}



(a)



(b)

Na Tabela 3 são apresentados valores na norma \mathbb{L}_2 do erro para as componentes do tensor tensão elástica utilizando diferentes valores do número de Weissenberg. Verifica-se que a aplicação do método dos volumes

finitos baseado em elementos é capaz de produzir soluções muito próximas às respostas analíticas, mesmo utilizando malhas não estruturadas híbridas. Pode-se observar, também, na Tabela 3 que quanto maior o valor de We maior o erro obtido, especialmente para a componente τ_{xx} do tensor tensão elástica.

Tabela 3 – Valores na norma \mathbb{L}_2 do erro para as tensões τ_{xx} e τ_{xy} para diferentes We em $x = 13$, $x = 9$ e $x = 5$

Tensão	We = 0.1			We = 1.0		
	x = 13	x = 9	x = 5	x = 13	x = 9	x = 5
τ_{xx}	8.1×10^{-6}	2.5×10^{-4}	1.4×10^{-4}	8.2×10^{-5}	2.7×10^{-4}	1.6×10^{-4}
τ_{xy}	1.1×10^{-4}	2.8×10^{-4}	2.3×10^{-4}	1.1×10^{-4}	2.9×10^{-4}	2.2×10^{-4}
tensão	We = 2.0			We = 3.0		
	x = 13	x = 9	x = 5	x = 13	x = 9	x = 5
τ_{xx}	1.6×10^{-4}	3.4×10^{-4}	2.4×10^{-4}	2.4×10^{-4}	4.5×10^{-4}	3.7×10^{-4}
τ_{xy}	1.1×10^{-4}	3.2×10^{-4}	2.2×10^{-4}	1.1×10^{-4}	3.5×10^{-4}	2.2×10^{-4}

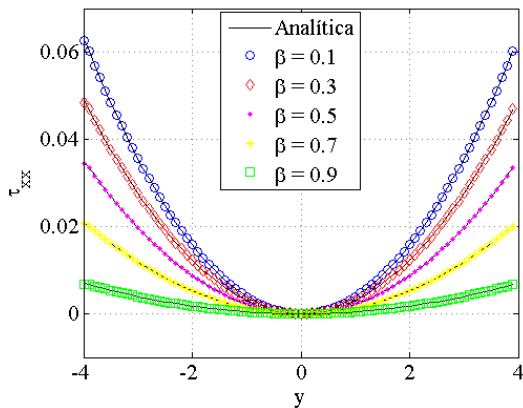
6.1.1 Influência do parâmetro β

Nesta seção é avaliada a influência do parâmetro β , o qual reflete a contribuição polimérica na viscosidade do fluido, sendo que quanto menor este valor, mais acentuada é a característica elástica e, portanto, maior a tensão existente no escoamento. Na Figura 29 é apresentado o efeito de β nos perfis de tensão τ_{xx} e τ_{xy} considerando o valor do número de Weissenberg fixo igual a 1.

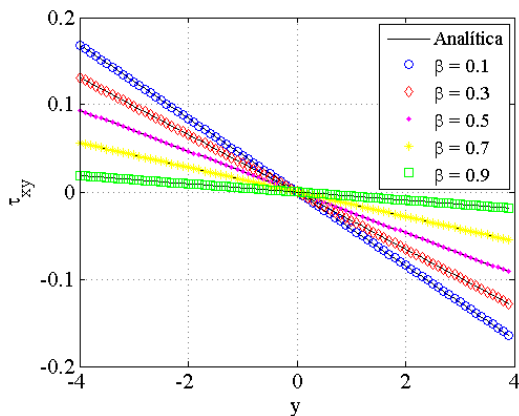
É possível constatar, analisando-se os perfis de tensões na Figura 29, que quanto menor o valor de β maior será o módulo da tensão, ou seja, quanto mais pronunciado é o efeito elástico maior é o valor absoluto da tensão existente no escoamento. Por consequência, quanto menor o valor deste parâmetro mais difícil será a obtenção da solução. Isto pode ser observado na Figura 30, a qual mostra que, com um valor de $\beta = 0.8$, foi possível resolver o escoamento para elevados números de Weissenberg ($We = 60$). Para $\beta = 1/9$ obteve-se um We crítico próximo de 6.

Analisando a Tabela 4, pode ser observado que, novamente, o EbFVM é capaz de obter soluções muito próximas as soluções analíticas, utilizando malhas não estruturadas.

Figura 29 – Perfis das soluções numérica e analítica para o escoamento viscoelástico entre placas planas para $We = 1$ e diferentes valores do parâmetro β ao longo da linha $x = 13$: (a) Tensão normal τ_{xx} , (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}

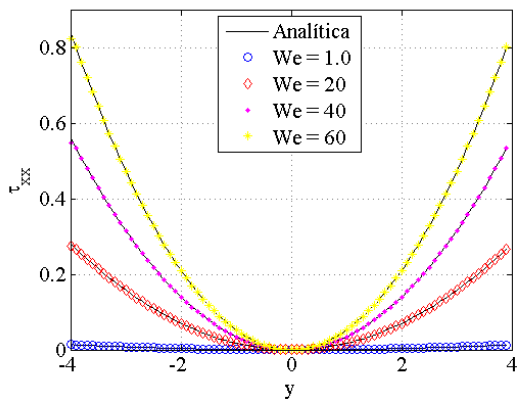


(a)

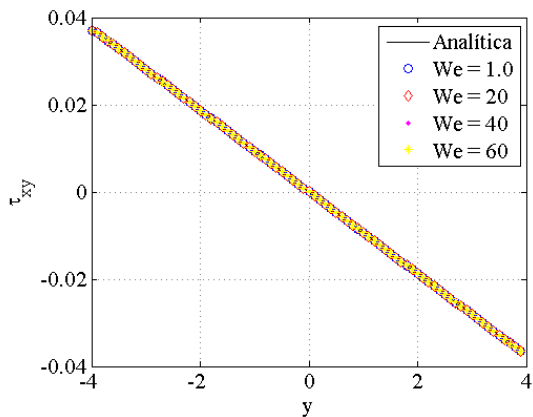


(b)

Figura 30 – Perfis das soluções numérica e analítica para o escoamento viscoelástico entre placas planas para $\beta = 0.8$ e diferentes valores do parâmetro We ao longo da linha $x = 13$: (a) Tensão normal τ_{xx} , (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}



(a)



(b)

Tabela 4 – Erros \mathbb{L}_2 para as tensões τ_{xx} e τ_{xy} para diferentes valores de β em $x = 13$, $x = 9$ e $x = 5$

Tensão	$\beta = 0.1$			$\beta = 0.3$		
	$x = 13$	$x = 9$	$x = 5$	$x = 13$	$x = 9$	$x = 5$
τ_{xx}	8.1×10^{-5}	2.8×10^{-4}	1.7×10^{-4}	7.7×10^{-5}	1.7×10^{-4}	1.1×10^{-4}
τ_{yy}	1.1×10^{-4}	3.0×10^{-4}	2.2×10^{-4}	1.0×10^{-4}	2.4×10^{-4}	1.7×10^{-4}
Tensão	$\beta = 0.5$			$\beta = 0.7$		
	$x = 13$	$x = 9$	$x = 5$	$x = 13$	$x = 9$	$x = 5$
τ_{xx}	6.2×10^{-5}	1.2×10^{-4}	7.7×10^{-5}	4.1×10^{-5}	7.4×10^{-5}	4.7×10^{-5}
τ_{yy}	8.5×10^{-5}	1.7×10^{-4}	1.3×10^{-4}	5.6×10^{-5}	1.1×10^{-4}	8.1×10^{-5}
Tensão	$\beta = 0.9$					
	$x = 13$	$x = 9$	$x = 5$			
τ_{xx}	1.5×10^{-5}	2.5×10^{-5}	2.7×10^{-5}			
τ_{xy}	2.0×10^{-5}	3.7×10^{-5}	2.7×10^{-5}			

6.1.2 Influência dos termos da equação constitutiva

Conforme comentado na seção 6.1.1, utilizando-se o valor do parâmetro β igual a $1/9$ foi possível obter uma solução até um valor crítico de $We \approx 6$. Para valores mais elevados do número de Weissenberg o método se mostrou instável não sendo possível a obtenção de uma solução.

Para identificar a origem da instabilidade na simulação numérica de fluidos viscoelásticos, dois casos de teste simples foram feitos. Como explicado no algoritmo numérico, a equação constitutiva é integrada utilizando a velocidade obtida na solução das equações de conservação de massa e quantidade de movimento. Logo este tensor tensão viscoelástico atua como um termo fonte nas equações de conservação da quantidade de movimento e da massa. O primeiro teste foi feito usando os valores analíticos para o campo de velocidade. Isto significa que ao invés da solução de um sistema de equações, incluindo as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e constitutivas, apenas a equação constitutiva, com os valores de velocidade de escoamento plenamente desenvolvidos prescritos, foi resolvida. Uma simulação estável pôde ser realizada para altos valores do número de Weissenberg, porém a magnitude do erro relativo da tensão viscoelástica é grande, $O(10^{-1})$, para elevados números de Weissenberg. Nesta situação pode-se chegar a $We = 205$ com erros relativos muito elevados para as variáveis computadas.

No segundo caso de teste, uma expressão do perfil totalmente desenvolvido do tensor de tensão viscoelástico é prescrito nas equações da massa e quantidade de movimento que, então, são resolvidas. Como esperado as variáveis computadas são obtidas com uma precisão mais elevada, $O(10^{-4})$. Portanto, considerando tanto a tensão quanto a velocidade como campos prescritos obtém-se uma computação estável. Estes dois simples casos de teste

revelam que a geração de instabilidade é certamente devido à equação constitutiva e o acoplamento entre as equações do escoamento e as equações constitutivas.

Considerando o termo de deformação elástica, $(\nabla \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{v})^T$, como um termo analítico é possível obter-se uma solução estável para altos valores do número de Weissenberg, ou seja, o termo advectivo não tem nenhum efeito sobre a instabilidade do modelo viscoelástico considerado neste trabalho. Este resultado está de acordo com o exposto na referência (JAFARI, 2011).

6.1.3 Velocidade de entrada uniforme

Agora é considerado o escoamento entre placas planas com uma condição de entrada não plenamente desenvolvida, isto é, é aplicada uma condição uniforme para a componente u da velocidade, como por exemplo $u = 1$.

A substituição dessa condição nas equações (6.12) gera o conjunto de condições de Dirichlet homogêneas para as tensões, ou seja, na entrada têm-se as seguintes condições de entrada

$$u = 1, \quad v = 0, \quad \tau_{xx} = 0, \quad \tau_{yy} = 0, \quad \tau_{xy} = 0. \quad (6.15)$$

A solução analítica para a velocidade na região de escoamento totalmente desenvolvido é dada por

$$u = \frac{3}{32} (16 - y^2). \quad (6.16)$$

Na região de escoamento totalmente desenvolvido, as tensões são obtidas substituindo-se o perfil de velocidade (6.16) nas equações (6.11). Ou seja,

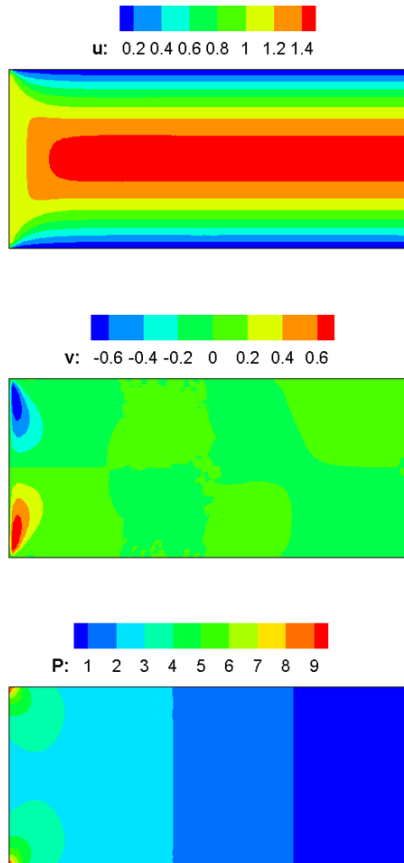
$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= We(1 - \beta) \frac{9}{256} y^2, \\ \tau_{yy} &= 0, \\ \tau_{xy} &= -(1 - \beta) \frac{3}{32} y. \end{aligned} \quad (6.17)$$

A malha utilizada é a mesma ilustrada na Figura 26, ou seja, uma malha não estruturada que consiste em 8717 nós, 6800 elementos quadriláteros regulares e 3438 elementos triangulares não regulares.

Os campos de pressão e das componentes da velocidade são mostrados na Figura 31, utilizando $We = 0.7$, e $\beta = 0.1$. Na região próxima à fronteira de entrada, observa-se que o campo de pressão é afetado pela parede, fazendo

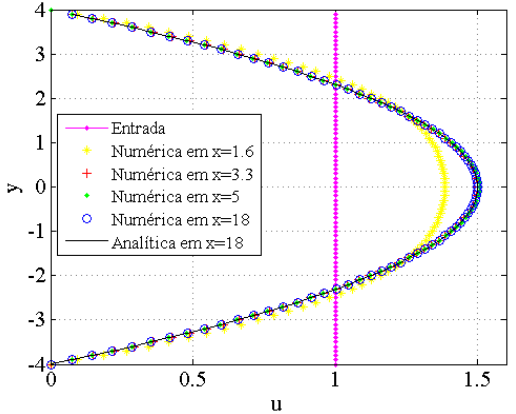
com que surja um gradiente de pressão na direção y . Como consequência, surgem componentes verticais da velocidade diferentes de zero nessa região.

Figura 31 – Campos de pressão e velocidades para o escoamento entre placas paralelas de um fluido de Oldroyd-B, com velocidade de entrada igual a 1, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$

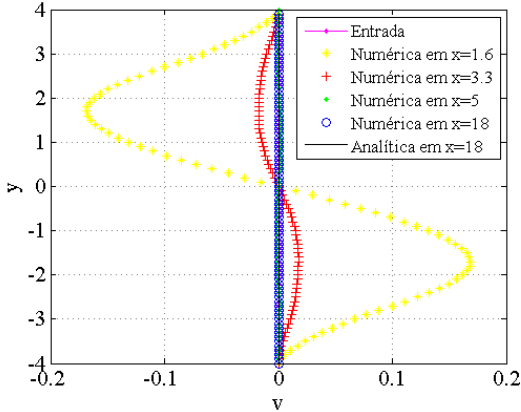


Na região plenamente desenvolvida a velocidade vertical, v , é nula, pois existem apenas gradientes de pressão na direção x . Já a velocidade normal u deve apresentar um perfil parabólico nessa região. Isto pode ser constatado na Figura 32, na qual são mostradas as componentes u e v da velocidade ao longo das linhas $x = 0$, $x = 1.66$, $x = 3.33$, $x = 5$, $x = 18$.

Figura 32 – Perfis das velocidades u e v ao longo das linhas $x = 0, x = 1.66, x = 3.33, x = 5, x = 18$, considerando $u = 1$ na entrada, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$: (a) Velocidade u , (b) Velocidade v



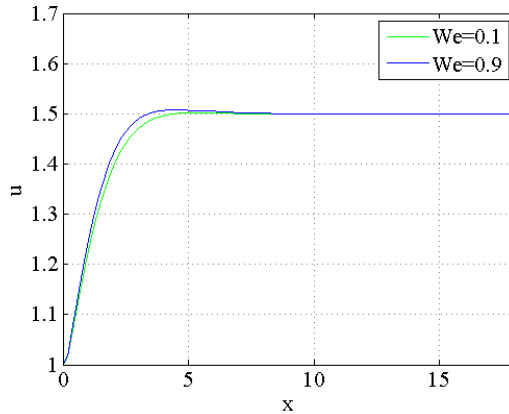
(a)



(b)

Na Figura 33 é mostrada a influência de We na componente u da velocidade ao longo da linha central, $y = 0$, para $We = 0.1$ e $We = 0.9$. Na região plenamente desenvolvida, o valor máximo de u é 1.5 para ambos os valores do parâmetro We . Esse valor foi atingido para $x \approx 7$.

Figura 33 – Variação da componente u da velocidade ao longo da linha de centro, $y = 0$



A variação das tensões para diferentes valores de x é mostrada nas Figuras 34 e 35. Observa-se que na região de escoamento plenamente desenvolvido a solução numérica tem uma excelente concordância com a solução analítica.

Figura 34 – Perfil da tensão τ_{xx} ao longo das linhas $x = 1.66$, $x = 3.33$, $x = 5$, $x = 18$, considerando $u = 1$ na entrada, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$

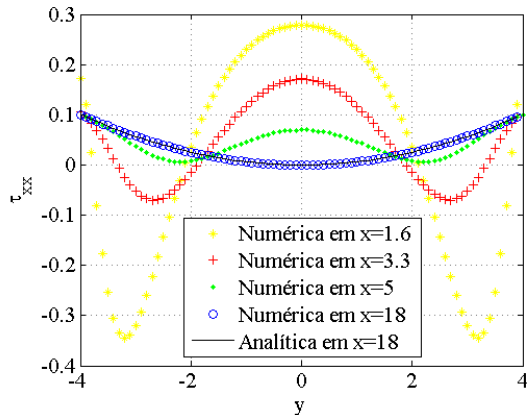
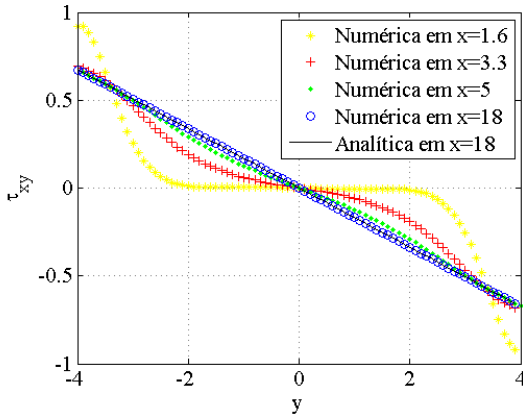


Figura 35 – Perfil da tensão τ_{xy} ao longo das linhas $x = 1.66$, $x = 3.33$, $x = 5$, $x = 18$, considerando $u = 1$ na entrada, $\beta = 0.1$ e $We = 0.7$



6.1.4 Conclusões

Nesta seção, foi modelado o escoamento entre placas planas paralelas, usando uma malha computacional mista, para diferentes números de Weissenberg. Os resultados foram comparados com a solução analítica. A exatidão dos resultados demonstra a robustez do algoritmo para lidar com escoamentos viscoelásticos em malhas não estruturadas. Também foi avaliado o efeito do parâmetro β na solução do escoamento. Verificou-se que quanto menor o valor de β , maior o caráter elástico do escoamento e mais difícil a obtenção da solução.

Por meio da análise da influência dos termos da equação constitutiva, foi possível verificar que a origem da instabilidade dos fluidos viscoelásticos está no termo proveniente da derivada convectiva de um tensor, que representa o termo de deformação elástica.

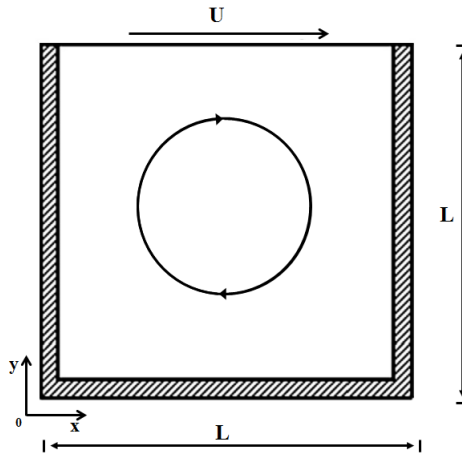
Para o escoamento com velocidade de entrada uniforme $u = 1$ obteve-se a mesma qualidade nos resultados. O escoamento entrou em regime plenamente desenvolvido aproximadamente a partir de $x = 7$.

6.2 ESCOAMENTO EM CAVIDADE FECHADA COM TAMPA MÓVEL

O escoamento incompressível de fluidos newtonianos dentro de uma cavidade fechada com tampa móvel é um problema muito estudado na me-

cânica dos fluidos computacional para testar metodologias numéricas. Ele descreve o fluxo dentro de uma caixa retangular, devido a translação tangencial de uma parede, conforme ilustrado na Figura 36. As aplicações podem ser encontradas em abundância, como por exemplo, em revestimento e dispositivos de mistura. A simplicidade geométrica do problema faz com que seja ideal para a discretização numérica. Já, a condição de contorno matemática descontínua da velocidade leva a propriedades singulares perto dos cantos da tampa móvel e das duas paredes estacionárias vizinhas. Estas características fizeram com que a cavidade com tampa móvel se tornasse um caso teste para a validação de diferentes técnicas numéricas para resolver as equações de Navier-Stokes. O mais interessante neste contexto, é que este escoamento tem um comportamento rico do ponto de vista de instabilidades em sistemas fechados.

Figura 36 – Representação geométrica da cavidade fechada com tampa móvel



Pelo nosso conhecimento, pouquíssimos estudos foram feitos a respeito da análise da simulação e da estabilidade de fluidos não-newtonianos em uma cavidade com tampa móvel, apesar da importância em muitas aplicações. Isso decorre, em parte do fato de que a simulação de escoamentos de fluidos viscoelásticos é significativamente mais desafiadora do que a simulação de escoamentos newtonianos. Isto é devido, em parte, à natureza hiperbólica da equação constitutiva, bem como à dependência implícita do tensor tensão elástica com o tensor taxa de deformação. Grillet et al. (1999) simularam o escoamento viscoelástico em uma cavidade para entender como a elasticidade influencia a cinemática do escoamento. Estes autores também introduziram uma lei de escala para a relação entre a razão de aspecto e a ins-

tabilidade elástica. O escoamento na cavidade também tem sido usado para validar métodos numéricos para fluidos não-newtonianos. Nesse contexto, Pan e Hao (2007) apresentaram um método para estabilização de um código de elementos finitos usado para escoamentos à altos números de Weissenberg. Outros exemplos de fluidos não newtonianos dentro de cavidade podem ser encontrados em (YAPICI; KARASOZEN; ULUDAG, 2009; PAN; HAO, 2007; PAN; HAO; GLOWINSKI, 2009).

Para a solução do escoamento de um fluido viscoelástico de Oldroyd-B em uma cavidade fechada com tampa móvel, representada na Figura 36, será considerado $L = 1$ e as seguintes condições de contorno:

- *Tampa:*

$$u = U(x), \quad v = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (6.18)$$

Substituindo essas condições na equações constitutivas (6.7)-(6.7), as tensões na tampa devem satisfazer as seguintes equações

$$\begin{aligned} \left(1 - 2We \frac{\partial U(x)}{\partial x}\right) \tau_{xx} + We \frac{\partial}{\partial x} (u\tau_{xx}) &= 2We \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) \tau_{xy} + 2(1 - \beta) \frac{\partial U(x)}{\partial x}, \\ \tau_{yy} + We \frac{\partial}{\partial x} (u\tau_{yy}) &= 0, \\ \tau_{xy} + We \frac{\partial}{\partial x} (u\tau_{xy}) &= We \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) \tau_{yy} + (1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

- *Parede paralela ao eixo x:*

As mesmas condições dadas pelas equações (6.13) e (6.14)

- *Paredes paralelas ao eixo y:*

$$u = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (6.20)$$

sendo assim, as tensões devem satisfazer

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 0, \\ \tau_{yy} &= 2We(1 - \beta) \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2, \\ \tau_{xy} &= (1 - \beta) \frac{\partial v}{\partial x}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Para validar o método e escolher uma malha adequada foi feita a comparação dos resultados numéricos obtidos para $We = 0$, equivalente a um fluido newtoniano, com os resultados para $Re = 0$ e velocidade da tampa igual a 1 obtidos em (YAPICI; KARASOZEN; ULUDAG, 2009) e (SAHIN; OWENS, 2003), usando-se 5 diferentes malhas. As informações a respeito de cada malha utilizada na simulação estão descritas na Tabela 5.

Tabela 5 – Características das malhas utilizadas nos testes de independência de malha no problema cavidade quadrada

Malha	Tipo	Nº de nós	Nº de Elementos Triangulares	Nº de Elementos Retangulares
MRQ1	Estruturada	1681	0	1600
MRQ2	Estruturada	2601	0	2500
MRQ3	Estruturada	3481	0	3364
MNEM	Ñ Estruturada	6753	4056	4532
MNEQ	Ñ Estruturada	11811	0	11610

Analisando-se os valores dos extremos das velocidades nas linhas horizontal e vertical da cavidade, apresentados na Tabela 6, se verifica que, a medida que a malha é refinada, os resultados obtidos neste trabalho se aproximam mais dos resultados referenciados, porém sem muita variação. A Figura 37, onde são apresentadas as velocidades nas linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$, corrobora a afirmação anterior, pois, pode-se observar que as componentes da velocidade variam muito pouco para as diferentes malhas empregadas. Isso mostra que o método é quase independente da malha para o caso newtoniano e as condições consideradas. Entretanto, uma análise semelhante deve ser feita para o caso de um fluido não-newtoniano, neste caso o fluido de Oldroyd-B.

Tabela 6 – Valores das velocidades mínimas e máximas nas linhas horizontal e vertical da cavidade

Referência	Malha	u_{min}	y_{min}	v_{min}	x_{min}	v_{max}	x_{max}
Presente	MRQ1	-0.2074	0.5250	-0.1840	0.8000	0.1840	0.2000
	MRQ2	-0.2076	0.5400	-0.1841	0.8000	0.1841	0.2000
	MRQ3	-0.2077	0.5345	-0.1844	0.7931	0.1844	0.2069
	MNEM	-0.2078	0.5310	-0.1844	0.7913	0.1844	0.2087
	MNEQ	-0.2077	0.5400	-0.1845	0.7900	0.1845	0.2100
Yapici et al. (2009)	305x305	-0.2077	0.5356	-0.1844	0.7890	0.1844	0.2109
Sahin e Owens (2003)	257x257	-0.2077	0.5376	-0.1863	0.7894	0.1863	0.2105

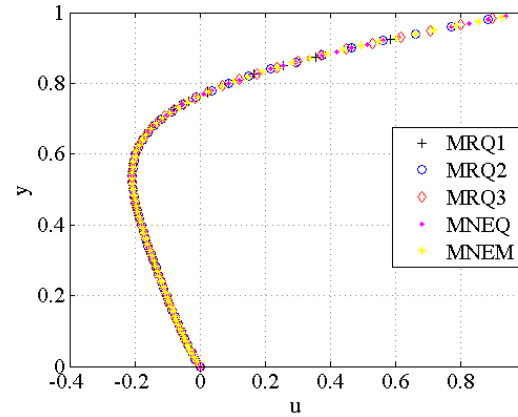
Um fluido viscoelástico não pode suportar deformações em um ponto de estagnação, portanto o movimento da tampa deve ser regularizado de forma que $\nabla \mathbf{u}$ tenda a zero nos cantos (BOTELLA, 1997; BOTELLA; PEYRET,

1998; PAN; HAO; GLOWINSKI, 2009). Especificamente, o perfil de velocidade da tampa é tomado como sendo

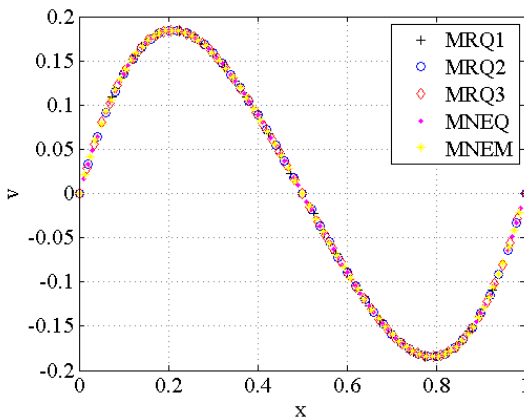
$$U(x) = U16x^2(1-x)^2, \quad (6.22)$$

onde U é a velocidade máxima da tampa, que ocorre em $x = 1/2$. Em todas as nossas simulações considera-se $U = 1$.

Figura 37 – Perfis das velocidade u e v ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Velocidade u , (b) Velocidade v



(a)



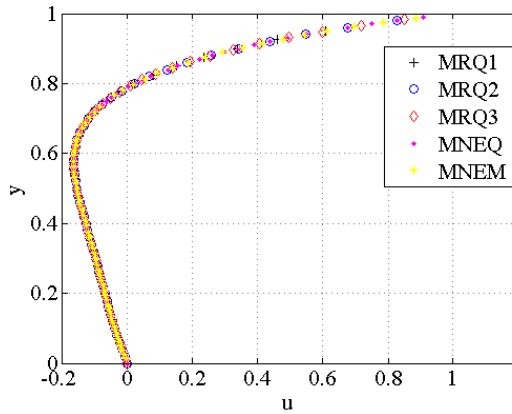
(b)

As simulações foram feitas com as mesmas malhas caracterizadas na

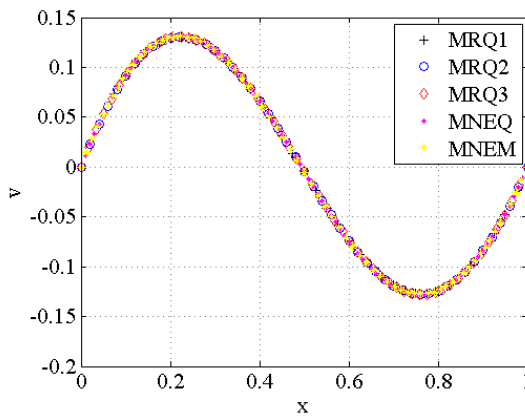
Tabela 5, com parâmetros $\beta = 0.5$ e $We = 0.5$. Tais parâmetros foram escolhidos para ser possível a comparação com os resultados de Pan, Hao e Glowinski (2009).

Analisando os gráficos apresentados nas Figuras 38 e 39, percebe-se que a diferença entre as malhas é pequena, porém o custo computacional aumenta consideravelmente quando se passa da malha MNEM para a malha MNEQ.

Figura 38 – Perfis das velocidade u e v ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Velocidade u ao longo de $x = 0.5$, (b) Velocidade v ao longo de $y = 0.5$



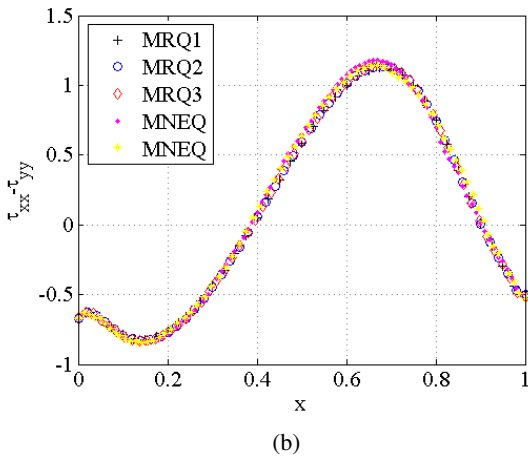
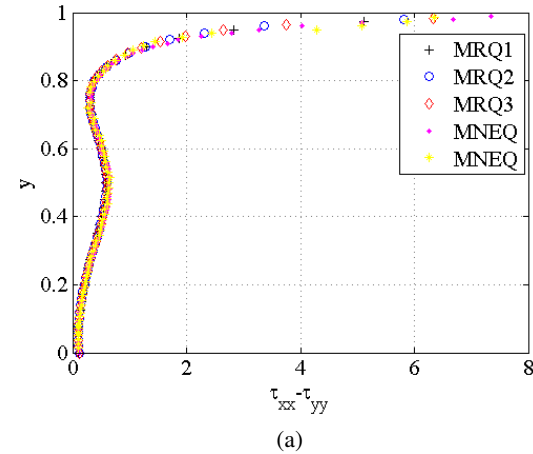
(a)



(b)

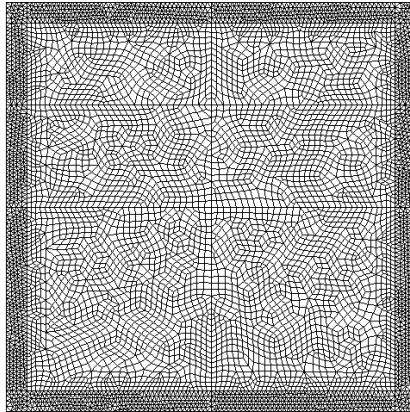
Por conseguinte, escolheu-se a malha MNEM, pois é não estruturada com elementos mistos, o que demonstra a capacidade do método em lidar com tais tipos de malhas. A malha MNEM está mostrada na Figura 40.

Figura 39 – Perfis das diferenças das tensões ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ ao longo de $x = 0.5$, (b) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ ao longo de $y = 0.5$



Na Figura 41 o perfil de velocidade u na linha central vertical ($x = 0.5$) e o perfil de velocidade v na linha horizontal central ($y = 0.5$) extraídos do trabalho de Pan, Hao e Glowinski (2009) são comparados aos perfis obtidos pela aplicação do EbFVM na malha MNEM. Pode-se verificar uma boa

Figura 40 – Malha 2-D não estruturada utilizada na simulação do escoamento em cavidade fechada com tampa móvel



concordância entre os perfis de velocidade. Neste trabalho usou-se uma malha menos refinada, se comparada com a malha empregada por Pan, Hao e Glowinski (2009), que empregou o método dos elementos finitos em uma malha estruturada não uniforme com 12800 nós. Mesmo assim os resultados apresentaram uma boa qualidade.

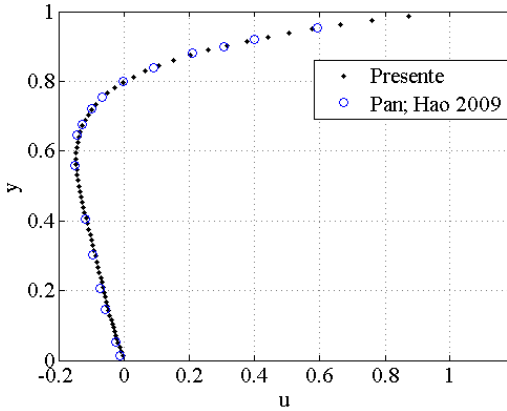
Para avaliar a influência do número de Weissenberg na solução do escoamento, simulações foram feitas para $\beta = 0.5$ e diferentes valores de We . Nas Figuras 42-44 são apresentados os campos de velocidades, as linhas de corrente e os campos de tensões para $We = 0.1$, $We = 0.5$ e $We = 0.9$.

Observando os gráficos dos campos de velocidades percebe-se que a medida que We aumenta o vórtice central é deslocado na direção do canto esquerdo superior, o que está de acordo com o relatado por outros autores (PAN; HAO, 2007; YAPICI; KARASOZEN; ULUDAG, 2009).

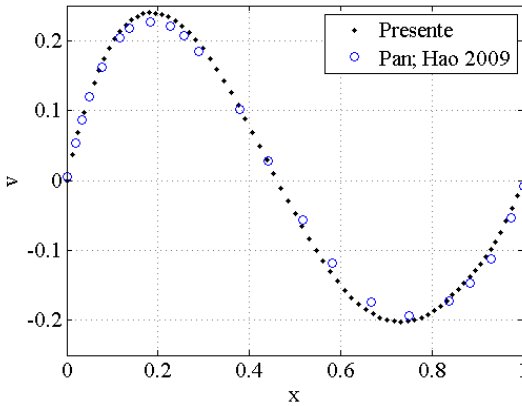
A Figura 45 mostra o efeito de We sobre a componente horizontal (u) e vertical (v) da velocidade em $x = 0.5$ e $y = 0.5$, respectivamente. Com o aumento de We as magnitudes máximas das componentes da velocidade diminuem como esperado. A posição vertical dos u_{min} é deslocada para cima, por outro lado, as posições horizontais de v_{max} e v_{min} são deslocadas para a esquerda em função do aumento de We .

Com respeito às tensões, nota-se altos gradientes somente na região perto da tampa. Para $We = 0.5$ percebe-se uma estreita camada limite ao longo da tampa para τ_{xx} , e todas as três componentes do tensor tensão apresentam altos gradientes próximo dos cantos superiores.

Figura 41 – Perfis das velocidade u e v ao longo das linhas $x = 0.5$ e $y = 0.5$: (a) Velocidade u ao longo de $x = 0.5$, (b) Velocidade v ao longo de $y = 0.5$



(a)



(b)

Na Figura 46 é mostrada a influência de We na primeira diferença de tensões $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, para a região da tampa móvel e para a linha central vertical. Fica claro que a tensão na tampa é maior que a tensão em qualquer outro ponto da cavidade.

O método utilizado foi capaz de obter convergência até um valor crítico de We próximo a 1. Os resultados mostram que a discretização ora empregada, foi capaz de resolver os altos gradientes com uma boa concordância com a literatura, apesar de utilizar uma malha menos refinada e com um maior grau de complexidade geométrica, pois possui elementos triangulares

e retangulares distribuídos de forma não estruturada.

Figura 42 – Campos de velocidades e tensões para $We = 0.1$: (a) Velocidade u , (b) Tensão τ_{xx} , (c) Velocidade v , (d) Tensão τ_{yy} , (e) Linhas de corrente, (f) τ_{xy}

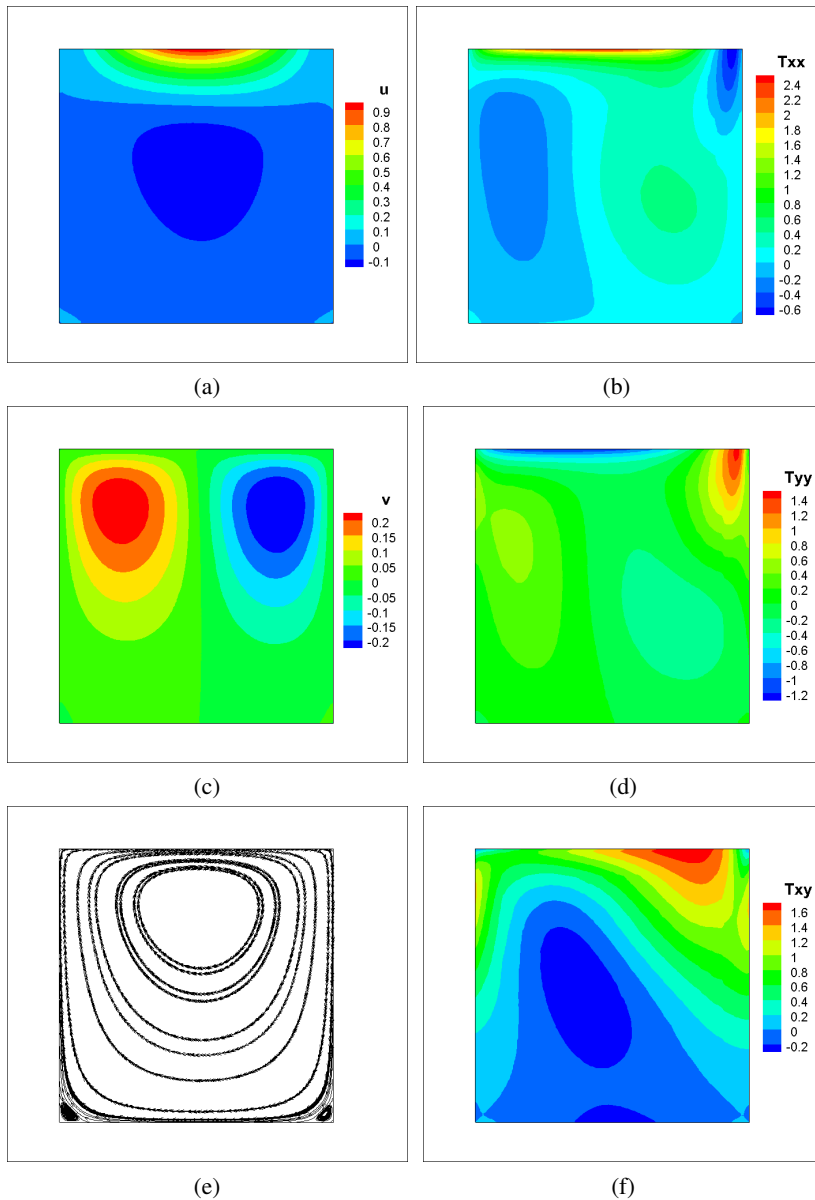


Figura 43 – Campos de velocidades e tensões para $We = 0.5$: (a) Velocidade u , (b) Tensão τ_{xx} , (c) Velocidade v , (d) Tensão τ_{yy} , (e) Linhas de corrente, (f) τ_{xy}

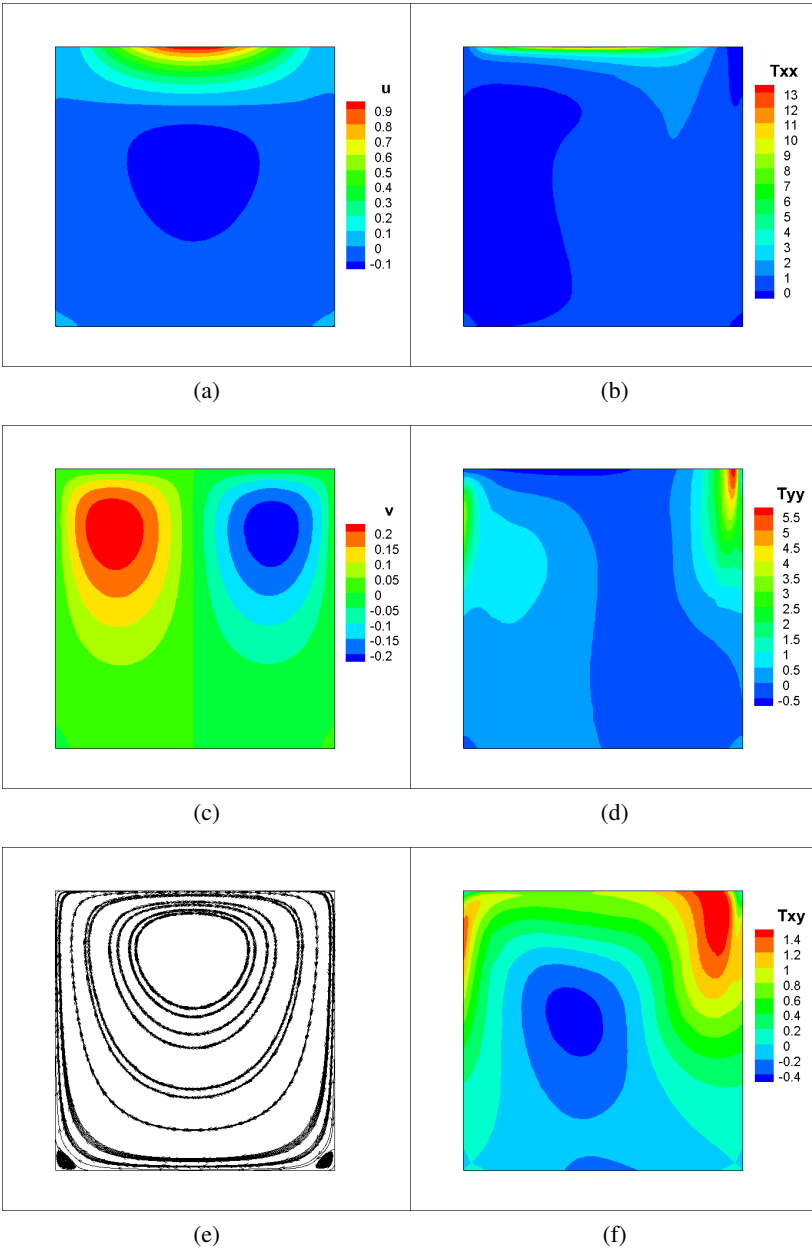


Figura 44 – Campos de velocidades e tensões para $We = 0.9$: (a) Velocidade u , (b) Tensão τ_{xx} , (c) Velocidade v , (d) Tensão τ_{yy} , (e) Linhas de corrente, (f) τ_{xy}

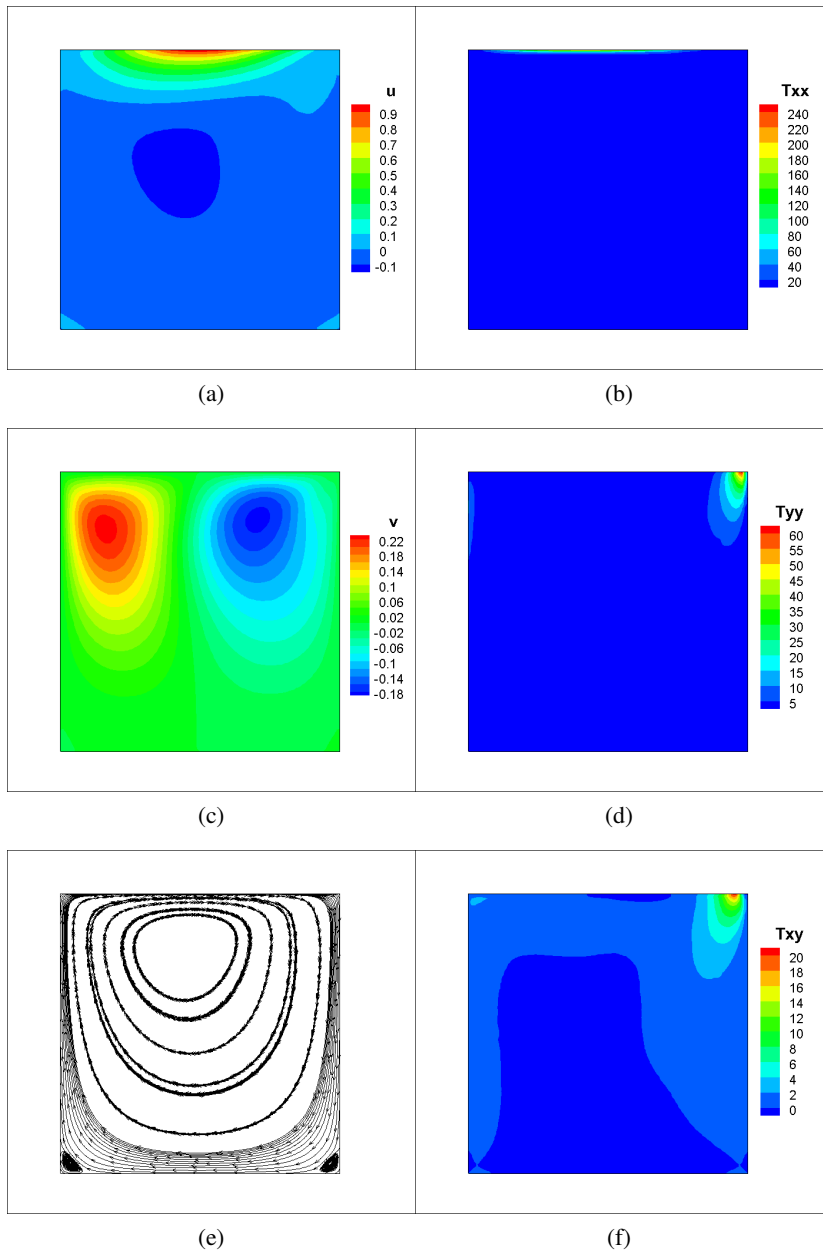
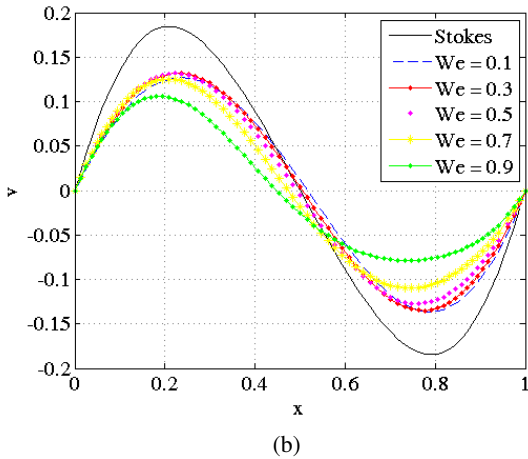
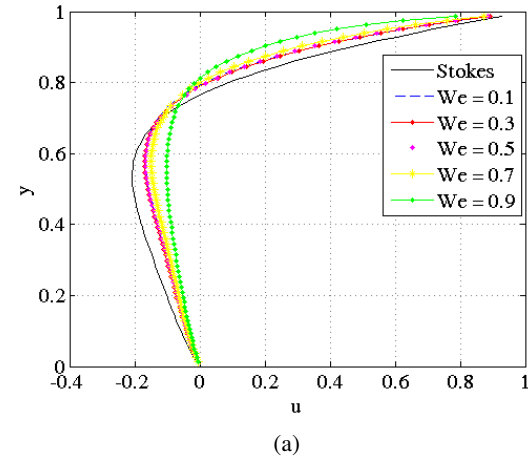


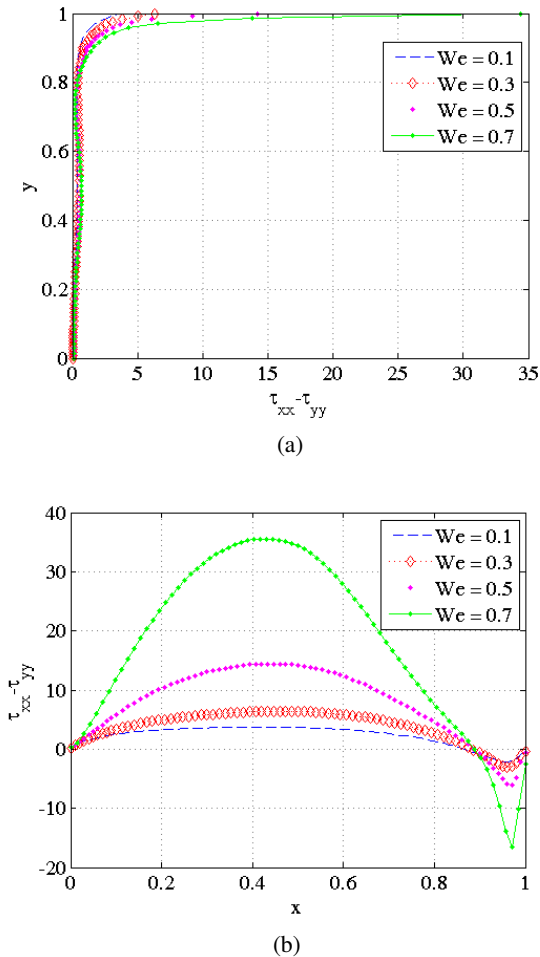
Figura 45 – Perfis das velocidade u e v nas linhas horizontal e vertical: (a) Velocidade u ao longo de $x = 0.5$, (b) Velocidade v ao longo de $y = 0.5$



6.3 ESCOAMENTO EM CONTRAÇÃO PLANA 4:1

Nesta seção, considera-se o escoamento de um fluido de Oldroyd-B através de um canal com uma contração abrupta em que a relação entre as larguras do canal antes e depois da contração é 4:1. Este é, sem dúvidas, o

Figura 46 – Primeira diferença das tensões, $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, nas linha vertical e na tampa: (a) $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ em $x = 0.5$, (b) $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ na tampa



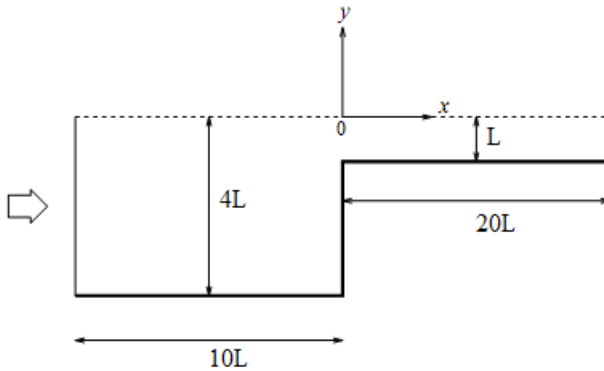
problema mais utilizado para testar metodologias numéricas empregadas na solução de escoamentos de fluidos viscoelásticos.

A geometria do escoamento está mostrada na Figura 47. Geometrias que apresentam contrações abruptas são facilmente encontradas em diversos processos de transformação de materiais poliméricos, como por exemplo os processos de injeção e extrusão. A grande dificuldade para a simulação deste tipo de problema está na região da contração porque é onde ocorrem os

maiores gradientes das variáveis e se observa a presença de singularidades e oscilações na solução.

Na região de entrada prescreve-se um perfil de velocidade de Poiseuille e, devido aos efeitos de memória dos fluidos viscoelásticos, todas as componentes viscoelásticas do tensor tensão elástica também devem ser prescritas. Além disso, assume-se que o comprimento de saída a jusante é suficientemente longo para que na saída um fluxo de Poiseuille totalmente desenvolvido também seja prescrito. Condições de não deslizamento são impostas nas paredes e condições de simetria são especificadas sobre o eixo de simetria.

Figura 47 – Geometria do escoamento em canal com uma contração abrupta 4:1



O problema da contração é sensível aos padrões de refinamento da malha, conforme reportado por Alves, Oliveira e Pinho (2003). Sendo assim, para ser capaz de seguir o padrão de refinamento em (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003) decidiu-se por utilizar malhas com elementos quadriláteros. Neste trabalho foram consideradas três malhas diferentes, que estão mostradas na Figura 48, ou seja, uma malha estruturada uniforme, formada por elementos retangulares, denominada MU1, e duas malhas estruturadas não uniformes com refino na região da contração, denominadas MNU1 e MNU2. As características de cada malha são exibidas na Tabela 7.

Primeiramente, o escoamento é simulado com os parâmetros $\beta = 1/9$, $We = 0.5$ e $L = 1$ para as três malhas descritas anteriormente. Os perfis da primeira diferença das tensões normais e da tensão de cisalhamento ao longo da linha $y = -1$ podem ser visualizados na Figura 49. Observa-se que quanto mais refinada a malha ao redor do canto reentrante maior será o pico. A malha utilizada nas demais simulações desta seção é a MNU1, pois conseguiu cap-

turar todas as características do escoamento a um custo computacional baixo. Mais uma vez é utilizado o parâmetro $\beta = 1/9$, pois é o valor mais empregado na literatura.

Figura 48 – Malhas consideradas para o escoamento em uma contração: (a) MU1, (b) MNU1, (c) MNU2

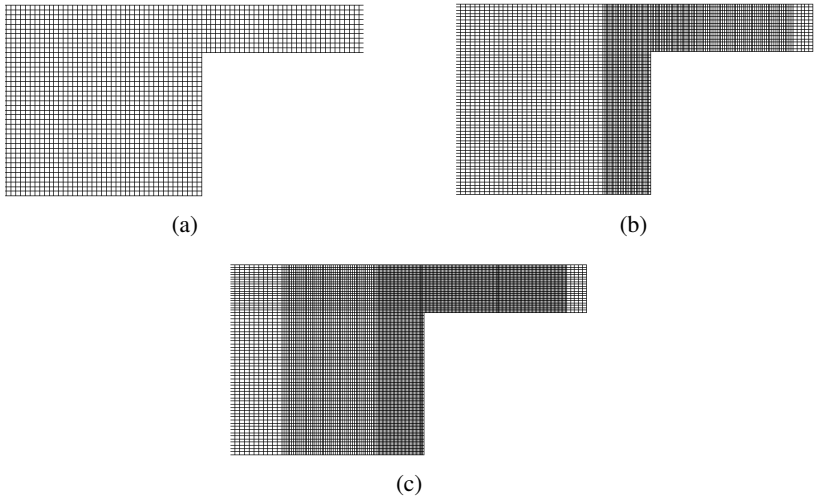
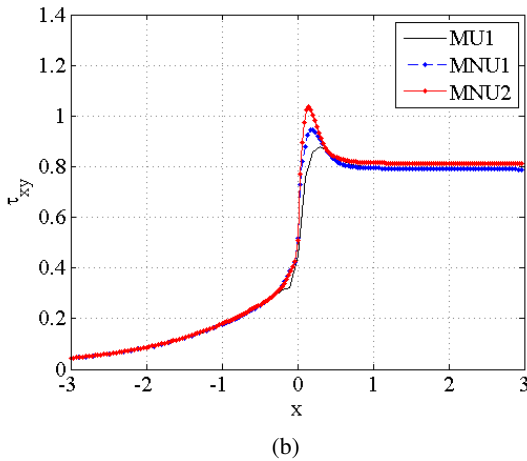
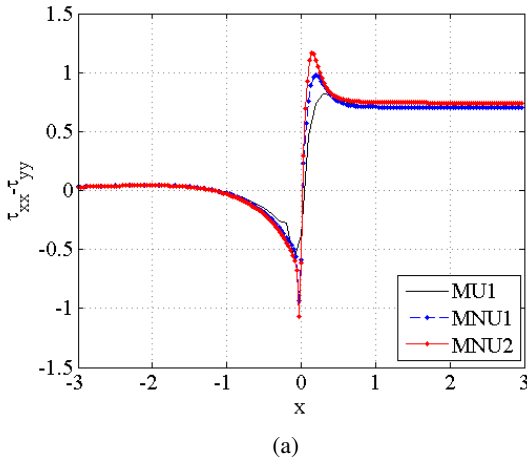


Tabela 7 – Características das malhas utilizadas no problema da contração

Malha	Tipo	Nº de nós	Nº de Elementos Retangulares
MU1	Uniforme	6341	6000
MNU1	Não uniforme	11861	11400
MNU2	Não uniforme	16701	16175

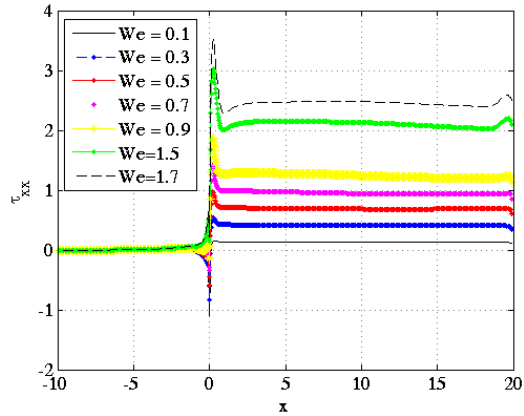
A variação das componentes das tensões ao longo da linha $y = -1$, para diferentes valores de We , é apresentada nas Figuras 50 e 51 para x variando de -10 a 20. Nas Figuras 52 e 53 foi feito um zoom na região da contração para melhor visualizar o efeito de We no ponto de singularidade. Pode-se verificar que os valores das tensões voltam a se estabilizar na parede da seção posterior à contração, o que está de acordo com outros trabalhos (NADAU; SEQUEIRA, 2007; PHILLIPS; WILLIAMS, 1999) e é fisicamente coerente. Para a segunda e terceira componentes do tensor tensão, as curvas são quase idênticas, configurando a independência em relação ao número de

Figura 49 – Perfis de tensões ao longo da linha $y = -1$ e $We = 0.5$: (a) Primeira diferença das tensões $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}

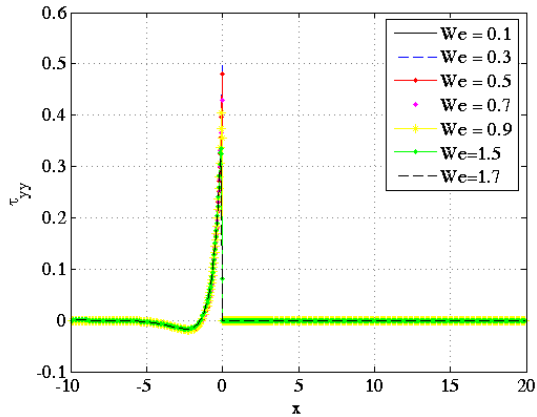


Weissenberg (PHILLIPS; WILLIAMS, 1999; NADAU; SEQUEIRA, 2007). Também percebe-se claramente que todas as componentes do tensor tensão elástica atingem o valor máximo no ponto de singularidade, ou seja, no canto reentrante. A componente τ_{xx} continua crescendo à medida que a elasticidade aumenta, começando a aparecer pequenas oscilações logo após o canto reentrante. Um comportamento similar é observado para a tensão τ_{xy} , entretanto as oscilações são mais pronunciadas.

Figura 50 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -10 a 20 para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}



(a)

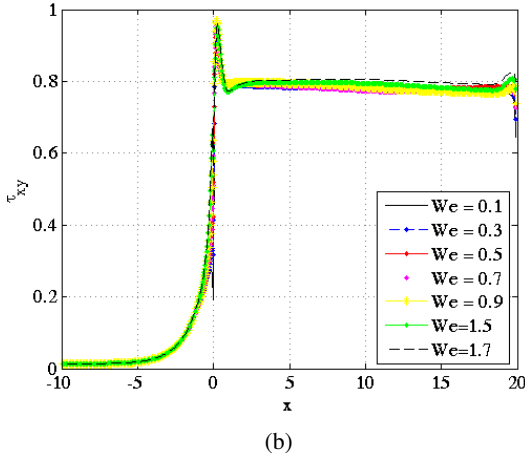
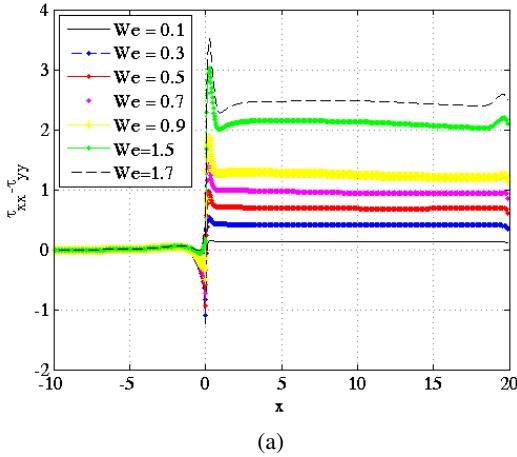


(b)

A primeira diferença das tensões normais tem um comportamento praticamente idêntico a τ_{xx} , indicando a dominância de tal componente do tensor tensão no escoamento. Comparando-se a primeira diferença das tensões normais com a tensão de cisalhamento verifica-se que o efeito das tensões normais é maior.

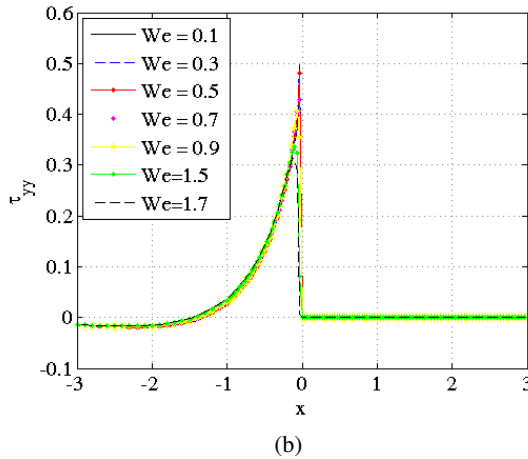
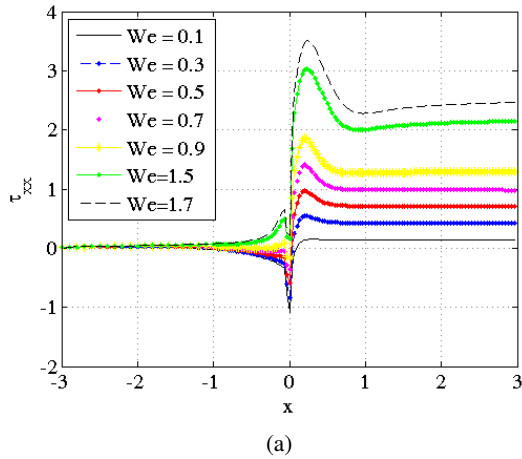
A Figura 54 mostra os campos de tensões, utilizando a malha MNU1, para o número de Weissenberg igual a 1.7. Enquanto os contornos são suaves

Figura 51 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -10 a 20 para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}



ao redor do canto reentrante, à jusante há um acúmulo de camadas limites de tensões. Um pouco além do canto reentrante na parede do canal se forma uma região de concentração de altas tensões para as componentes τ_{xx} e τ_{xy} . Esta característica, compara-se qualitativamente com os trabalhos de Aboubacar e Webster (2001), Edussuriya, Williams e Bailey (2004), onde um com-

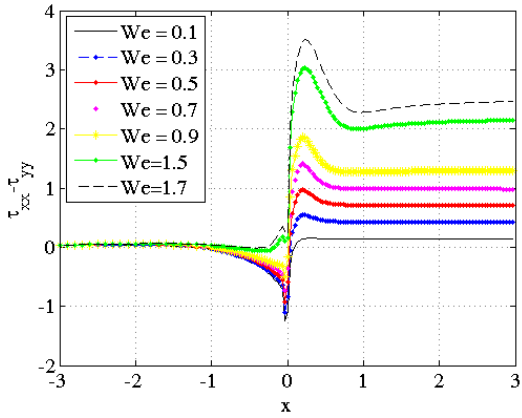
Figura 52 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -3 a 3 , para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}



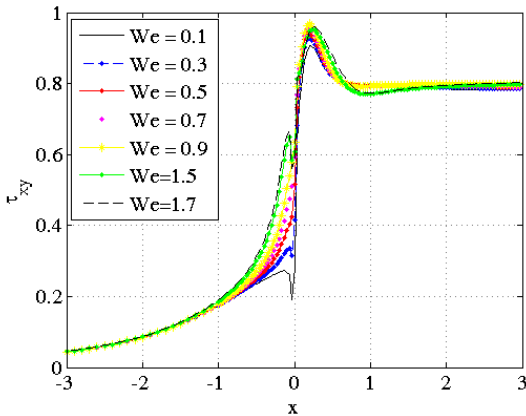
portamento similar é observado para $We = 1.0$, $We = 2.0$ e $We = 3$. Neste trabalho, assim como em outros (EDUSSURIYA; WILLIAMS; BAILEY, 2004; KESHTIBAN; BELBLIDIA; WEBSTER, 2005; PHILLIPS; WILLIAMS, 2002), foi observado que os contornos das tensões não mudam qualitativamente com o aumento do número de Weissenberg.

Os perfis de velocidade e pressão ao longo das linhas $y = -1$ e $y = 0$

Figura 53 – Perfis das tensões ao longo de $y = -1$ e x variando de -3 a 3 , para diferentes valores de We com $\beta = 1/9$: (a) Primeira diferença das tensões normais $\tau_{xx} - \tau_{yy}$, (b) Tensão de cisalhamento τ_{xy}



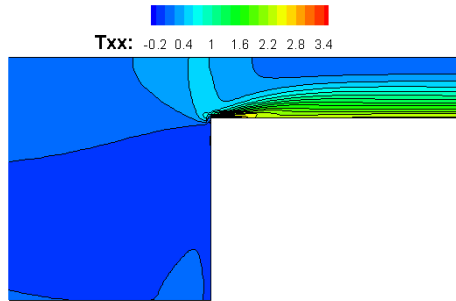
(a)



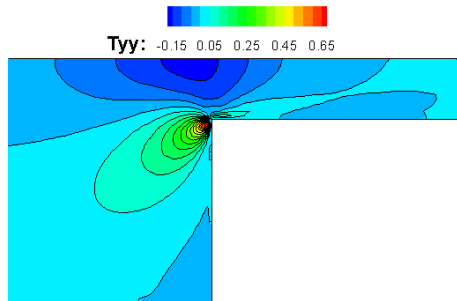
(b)

são apresentados nas Figuras 55 e 56, respectivamente, para diferentes valores de We , onde novamente observa-se os valores máximos no ponto de singularidade. Porém, esses valores não crescem com o aumento de We , ou seja, são independentes de We .

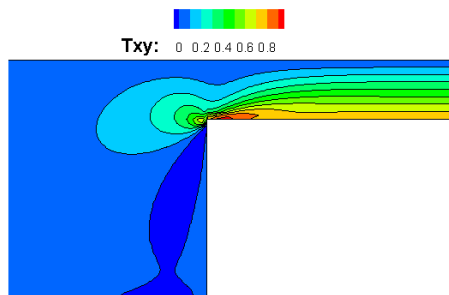
Figura 54 – Campos de tensões para o escoamento em uma contração plana para $We = 1.7$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy} , (c) Tensão de cisalhamento τ_{xy}



(a)

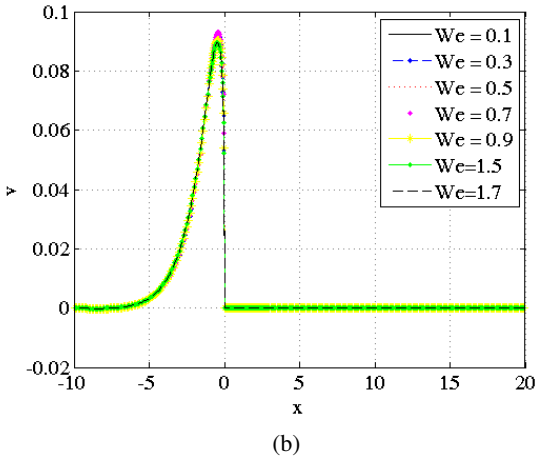
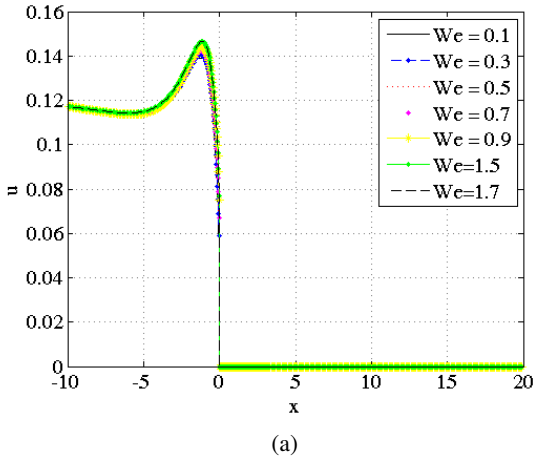


(b)



(c)

Figura 55 – Perfis das velocidades para escoamento em contração plana 4:1 com $\beta = 1/9$ e diferentes valores de We : (a) Velocidade u , (b) Velocidade v



Os campos de velocidade podem ser visualizados na Figura 57, onde observa-se que a velocidade u é maior na região de simetria à jusante da contração. Componentes da velocidade vertical v surgem próximo ao canto reentrante devido a influência da parede. O campo de pressão é mostrado na Figura 58 onde pode se observar uma região de alta pressão próximo ao canto reentrante. As linhas de corrente mostradas na Figura 59 evidenciam o surgimento de uma região de recirculação no canto inferior, o que está de acordo com o esperado.

Figura 56 – Perfil da pressão para escoamento em contração plana 4:1 com $\beta = 1/9$ e diferentes valores de We

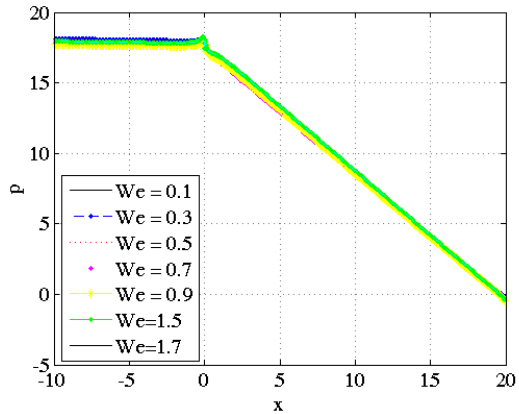
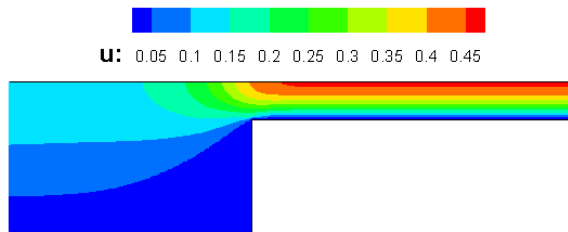
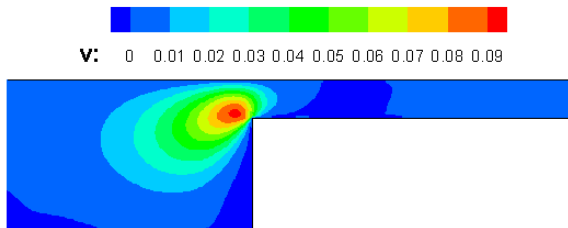


Figura 57 – Campos de velocidade para o escoamento em uma contração plana com $We = 1.7$ e $\beta = 1/9$: (a) Velocidade u , (b) Velocidade v



(a)



(b)

Figura 58 – Campo de pressão para escoamento em contração plana 4:1 com $We = 1.7$ e $\beta = 1/9$

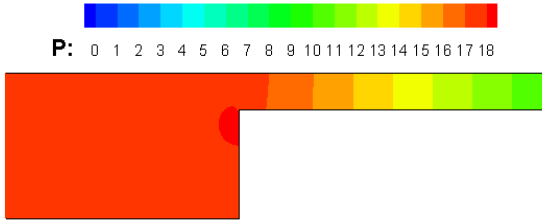
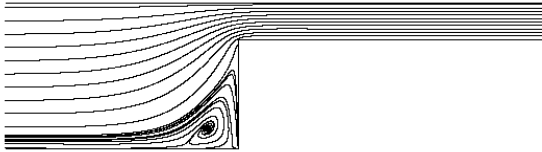


Figura 59 – Linhas de corrente para escoamento em contração plana 4:1 com $We = 1.7$ e $\beta = 1/9$



6.3.1 Conclusões

Analisando os resultados desta seção se pode concluir que a metodologia desenvolvida foi eficaz na obtenção da solução com todas as características relevantes. O método foi capaz de resolver o problema da contração até um valor máximo de $We = 1.7$. A implementação de técnicas específicas de estabilização em conjunto com o procedimento proposto poderia ser capaz de aumentar consideravelmente o We crítico.

Nota: É importante comentar que o aparecimento de oscilações a jusante da contração foi intensificado com a utilização de malhas não estruturadas. Essas oscilações podem ser minimizadas com o refino da malha próximo da parede após a contração.

6.4 ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO

O objetivo principal desta seção é a aplicação da metodologia apresentada na simulação do escoamento de um fluido viscoelástico ao redor de um

cilindro, com a intenção de quantificar a tensão exercida pelo fluido sobre as paredes do cilindro. Conforme mencionado anteriormente, o sal encontrado na camada acima dos reservatórios de petróleo é uma rocha evaporítica que pode ser modelada como um material viscoelástico (COSTA, 1984). Desta forma, o problema aqui simulado fornece uma ideia do comportamento do sal (fluido viscoelástico) ao redor de um poço de petróleo (cilindro). Como o sal é classificado como um evaporito, é apresentada uma revisão dos conceitos básicos sobre essas rochas, dentre os quais se incluem definição, formação, classificação e propriedades mecânicas e físicas. Logo em seguida, é feita a escolha do modelo do sal. Por fim, apresenta-se a simulação numérica de um problema em que se tenta determinar o efeito da camada de sal sobre as paredes de um poço de extração de petróleo.

6.4.1 Evaporitos

Esta subseção apresenta uma revisão dos conceitos básicos sobre rochas evaporíticas dentre os quais se incluem definição, formação, classificação e propriedades mecânicas e físicas.

6.4.1.1 Definição e formação

Em geologia, evaporitos são sedimentos minerais que resultam da evaporação de corpos de água confinados na superfície da terra. São considerados rochas sedimentares. Dentre os principais minerais evaporíticos se destacam os halogenetos (tais como halita e cloreto de sódio), sulfetos, nitratos, carbonatos e boratos. Apesar de todos os corpos d'água na superfície e nos aquíferos conterem sais dissolvidos, a água deve evaporar para a atmosfera a fim de que os minerais precipitem. Para que isso aconteça, o corpo d'água deve entrar em um ambiente restrito onde a entrada de água para esse ambiente permaneça abaixo da taxa líquida de evaporação. Isso geralmente é um ambiente árido, com uma pequena bacia alimentada por uma entrada limitada de água. Quando ocorre a evaporação, a água remanescente se enriquece em sais, tornando-se saturada de forma que alguns sais começam a precipitar em estado sólido, formando, assim, os depósitos evaporíticos que são encontrados nas bacias sedimentares, formado por diversos minerais. Essa precipitação ocorre em uma sequência progressiva bem definida, de acordo com as leis químicas, com diferentes minerais se formando em função das solubilidades (SILVA; SCHREIBER; SANTOS, 2000).

Os evaporitos se classificam como primários e secundários. Evaporitos primários foram precipitados a partir de um corpo rígido da superfície de uma salmoura mantendo evidências cristalográficas do processo de deposição. Fora uns poucos exemplos do Neogêneo (período geológico que precede

o período quaternário, se estendeu 23,5 a 1,75 Ma) existem poucas formações de evaporitos que conservam uma estrutura completamente primária. Quase todas as estruturas evaporíticas subterrâneas são secundárias, isto é, diageneticamente modificadas ¹. Um estudo mais aprofundado da classificação, deposição, fontes de formação, etc, das rochas evaporíticas pode ser encontrado em (WARREN, 2006).

6.4.1.2 Propriedades mecânicas e físicas de rochas salinas

O comportamento mecânico dos evaporitos tem sido investigado, experimental e teoricamente, nos anos recentes. A partir desses trabalhos, muitas leis constitutivas para o sal foram derivadas e são usadas para a predição do comportamento da rocha salina.

A principal propriedade das rochas salinas, a qual as diferencia de outras rochas sedimentares, é a ductibilidade, ou seja, a capacidade de suportar a deformação plástica, sob ação de cargas, sem se romper ou fraturar. A ductibilidade é caracterizada pelo fluxo do material sob ação de uma tensão cisalhante. Isso nos permite analisar a deformação do sal sob o ponto de vista da mecânica dos fluidos (CARTER; HANSEN, 1983). Conforme Serata, Adachi e Sakurai (1968) o sal tem um comportamento isotrópico e possui uma homogeneidade nas características de tensão e deformação.

Em termos de propriedades físicas, as mais importantes propriedades do sal (halita) são a grande solubilidade em água, a dureza relativamente baixa (2,5 na escala de Mohs), a densidade baixa a moderada (2,16 g/cm³), que não muda com a profundidade, e a alta condutividade térmica. Algumas propriedades físicas da halita são mostradas na Tabela 8.

O sal também possui baixas porosidade e permeabilidade (DE LAS CUEVAS, 1997), o que o torna impermeável a hidrocarbonetos funcionando como selante. Muitos reservatórios de petróleo se encontram aprisionados em estruturas salinas.

O comportamento de fluência dos evaporitos pode ser explicado de acordo com a seção 2.3. Cabe aqui ressaltar, que nem todos os evaporitos possuem esse tipo de comportamento. Alguns evaporitos, tais como a dolomita e a anidrita, possuem um comportamento mecânico similar ao de uma rocha sedimentar normal. Já a carnalita e a taquidrita possuem elevadas taxas de fluência.

¹ Diagenese é o processo físico de reestruturação interna no qual um sistema granular evolui, em escala de tempo geológica, partindo de um arranjo não consolidado e altamente poroso para uma outra estrutura, consolidada e de menor porosidade.

Tabela 8 – Propriedades físicas da halita

Propriedade	Valor típico	Varição (Pa.s)
Densidade	2,2 g/cm ³	2,11 - 2,22
Viscosidade	10 ¹⁴ Pa.s	10 ¹⁴ – 10 ¹⁷ Pa.s
Condutividade termal	4,5 W/m/°C	
Ponto de fusão	804 °C	
Velocidade sísmica	4500 m/s	4200 5000 m/s
Sucetibilidade magnética	-0 cgs	

Fonte: Mohriak e Sztatmari (2009)

6.4.2 Modelagem matemática

Como visto anteriormente rochas salinas ou evaporíticas se comportam diferente de outras rochas no que diz respeito a sua habilidade de fluir significativamente com o tempo (*creeping flow*). Em função das suas características reológicas, as rochas evaporíticas promovem o fechamento dos poços com o tempo, podendo induzir o aprisionamento da coluna de perfuração e o colapso de revestimentos, tendo como consequência campanhas de perfuração exploratória e de produção de altos custos e a necessidade de aplicação de novas tecnologias para vencer estas barreiras. Portanto, são evidentes os benefícios significativos que podem ser obtidos a partir da quantificação da magnitude de carregamento do sal sobre um poço de petróleo.

No Brasil, além da complexidade de perfurar espessas camadas de rochas salinas ou evaporíticas, tem-se o fato dos poços estarem localizados em lâminas d'água superiores a 2.000 m, tornando os custos de exploração ainda mais elevados. Dependendo das condições do poço (tensão tectônica, temperatura, peso do fluido de perfuração), o sal apresenta um comportamento de fluência estacionária ou secundária, o qual pode causar o fechamento do poço ou perda de circulação.

Segundo Costa (1984), o modelo de Burgers foi o modelo que obteve a melhor resposta quando comparado às curvas experimentais obtidas a partir de ensaios de laboratório em evaporitos. Em seu estudo teórico sobre a estabilidade de poços perfurados em zonas salinas, Carcione, Helle e Gangi (2006) fizeram uso do modelo de Burgers para representar o comportamento de fluência estacionária do sal. A equação constitutiva de Burgers para o caso multidimensional pode ser escrita como:

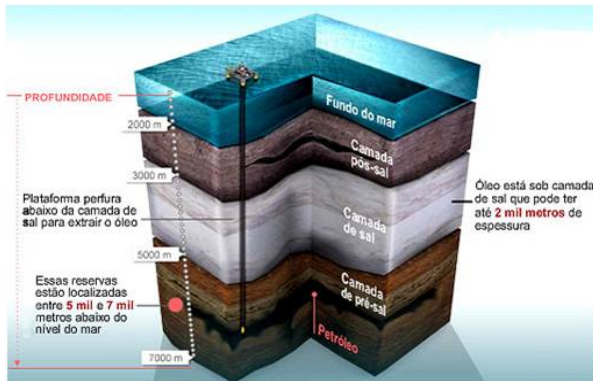
$$\eta_1 \left(\lambda_2 \frac{d}{dt} (\dot{\mathbf{Y}}) + \dot{\mathbf{Y}} \right) = \mathbf{T} + (\beta + \lambda_1) \frac{d}{dt} (\mathbf{T}) + (\lambda_2 \beta) \frac{d^2}{dt^2} (\mathbf{T}) \quad (6.23)$$

Como a fluência terciária não é de interesse deste trabalho, o modelo

de Burgers pode ser simplificado para se obter uma descrição matemática mais simples do problema que está sendo estudado. Fazendo $\beta = 0$ ($G_1 \rightarrow \infty$) na equação (6.23) e considerando a derivada temporal dada pela equação (2.36) com $a = 1$ é obtido um modelo (Oldroyd-B) que satisfaz as condições que se quer simular, ou seja, as fluências primária e secundária do sal.

Portanto, o problema do escoamento do sal ao redor de um poço de petróleo perfurado em uma zona de sal será modelado simplificada e idealisticamente, como sendo o escoamento em torno de um cilindro imerso em um fluido viscoelástico, do tipo Oldroyd-B. A representação esquemática de um poço perfurado na camada de sal é mostrada na Figura 60.

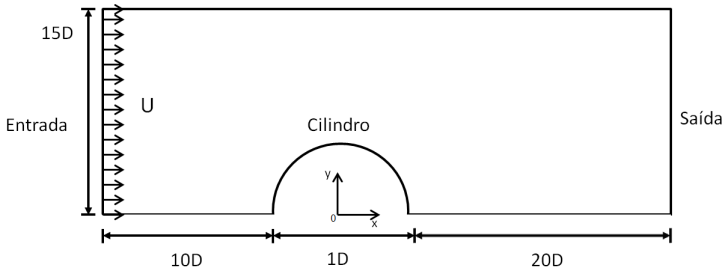
Figura 60 – Representação esquemática de um reservatório de petróleo localizado em uma zona salina



Fonte: desconhecida

No estudo de tensões em corpos soterrados profundos, tal como o poço na camada de sal representado na Figura 60, é considerado que a tensão vertical, atuante no poço (cilindro), é função apenas das cargas sobrepostas a ele, sendo constante ao longo da seção transversal do poço em cada profundidade. É assumido, também, que a perfuração do poço não altera essa condição. Com isso, pode-se considerar que as variações das tensões horizontais atuantes sobre o cilindro, devido à perfuração do poço, são independentes do eixo. Essas condições nos permitem tratar o problema tridimensional como um caso bidimensional. Portanto, a simulação pode ser feita apenas em uma seção transversal do poço. Devido à simetria do problema, será resolvido somente a metade do domínio, conforme apresentado na Figura 61.

Figura 61 – Representação esquemática da geometria do problema do escoamento ao redor do poço de extração de petróleo



6.4.3 Resultados numéricos

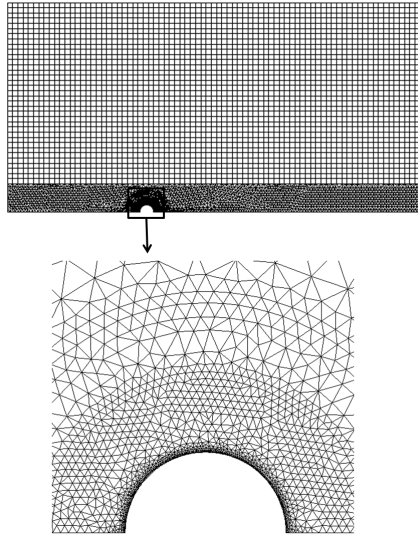
Antes de apresentar os resultados é importante ressaltar que esta é uma aproximação muito simplificada do problema real, utilizada apenas para demonstrar a potencialidade da formulação. Aqui está sendo considerado um movimento unidirecional do sal. Entretanto, no problema real não se sabe a priori como o sal se movimenta, mas provavelmente esse escoamento seria radial, pois a carga atuante sobre a camada provocaria uma tendência a ela escoar na direção do poço. Entretanto, a formulação que seria empregada para o problema real é exatamente a mesma, mas em 3D. A extensão para 3D é complexa e trabalhosa, sim, mas a formulação numérica em si é a mesma.

Para a simulação numérica do escoamento do sal ao redor do poço de extração de petróleo, as condições de contorno consistem em velocidade uniforme na entrada, todos os componentes do tensor tensão iguais a zero e o gradiente de pressão nulo. Na saída a pressão é feita constante. Neste contorno, ainda, o gradiente de velocidade e os componentes do tensor tensão são considerados nulos. O contorno superior está suficientemente afastado do cilindro podendo ser considerado paralelo e inalterado pela dinâmica interna, sendo assim a velocidade é conhecida. No contorno do cilindro aplicam-se condições de contorno de não deslizamento com parede fixa e condições de simetria são especificadas sobre o eixo de simetria.

Uma malha computacional não estruturada híbrida foi escolhida para a simulação numérica do problema (Figura 62). Essa escolha facilita a construção de uma malha refinada na região próxima ao poço e uma malha mais grosseira na região mais afastada, otimizando os recursos computacionais.

Nas Figuras 63 e 64 são apresentados os perfis do tensor tensão elástica na superfície do cilindro, para diferentes valores de We e um β fixo igual a 0.3, a pressão foi considerada nula na saída.

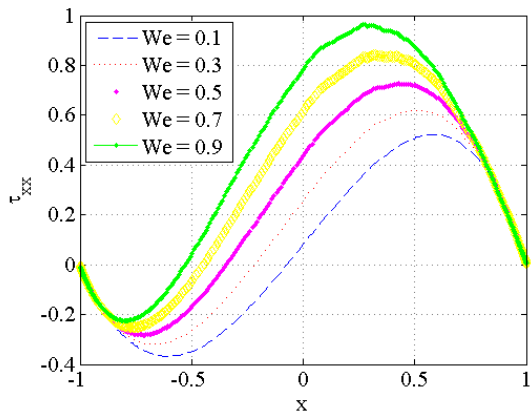
Figura 62 – Malha 2-D não estruturada utilizada na simulação do escoamento em torno de um cilindro



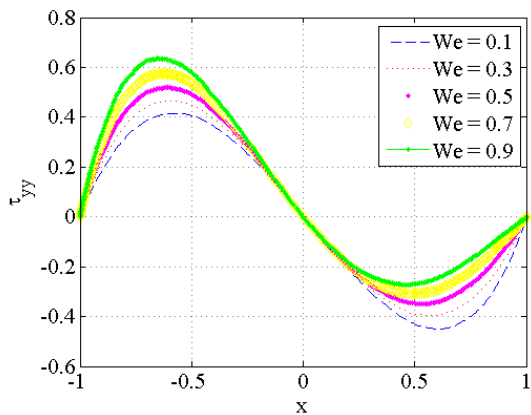
Analisando as figuras, verifica-se que o poço esta sujeito à cargas não uniformes, como esperado. Na Figura 63 percebe-se que as componentes τ_{xx} e τ_{yy} do tensor tensão atingem o ponto máximo para o maior valor do número de Weissenberg e o ponto mínimo para o menor valor de We , isto é, conforme We cresce o valor máximo da tensão aumenta e o valor mínimo diminui. Já, para a tensão de cisalhamento, tanto o ponto máximo quanto o mínimo ocorrem para o maior valor de We , ou seja, a medida que We é incrementado a amplitude de tensão τ_{xy} também é incrementada, conforme pode ser observado na Figura 64. Da comparação dos gráficos 64a e 64b conclui-se que as tensões τ_{xx} e τ_{yy} tem uma amplitude maior que a tensão τ_{xy} , aumentando a importância do efeito dessas tensões sobre o poço. As Figuras 65 e 66 mostram a influência do parâmetro β nas tensões ao longo da superfície do cilindro, onde observa-se que quanto menor o valor de β maiores as amplitudes das tensões. Também verifica-se que as tensões normais tem um efeito maior no escoamento, se comparadas com a tensão de cisalhamento.

Quando se está projetando um poço de petróleo que atravessará uma camada de sal extremamente fluida tem-se como principal preocupação a fratura e a falha da estrutura do poço. Em vista disso, é importante saber em quais pontos da estrutura a tensão normal e a tensão de cisalhamento atingem

Figura 63 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para $\beta = 0.3$ e diferentes valores de We : (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}

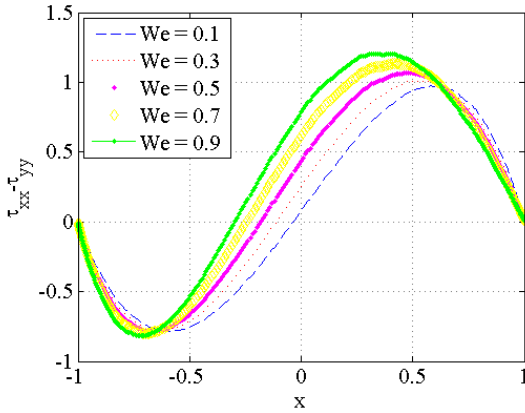


(a)

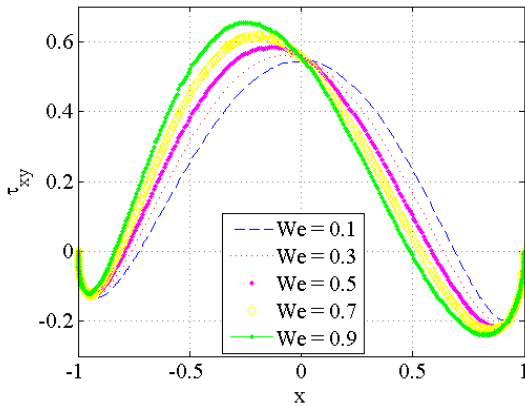


(b)

Figura 64 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para $\beta = 0.3$ e diferentes valores de We : (a) Primeira diferença das tensões normais, (b) Tensão τ_{xy}

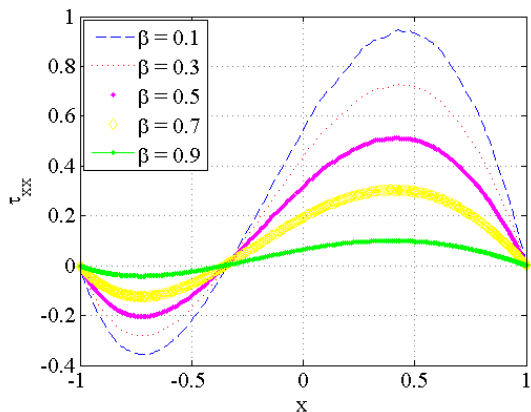


(a)

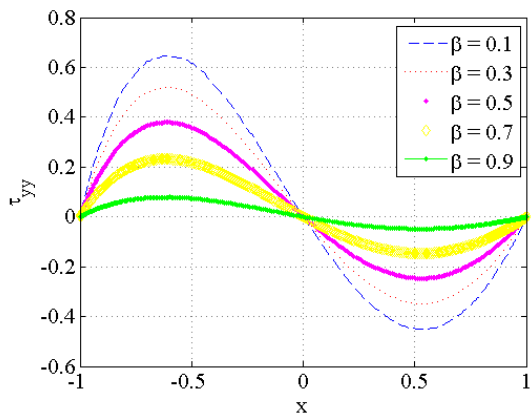


(b)

Figura 65 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para diferentes valores de β e $We = 0.5$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy}

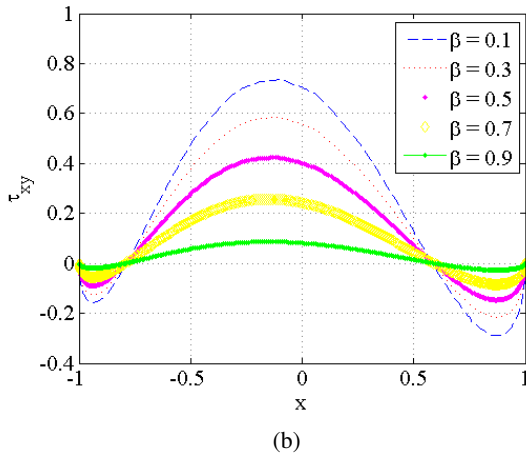
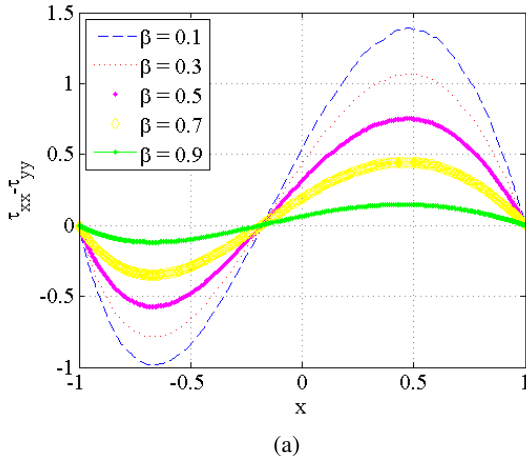


(a)



(b)

Figura 66 – Perfis das tensões ao longo da superfície do cilindro, para diferentes valores de β e $We = 0.5$: (a) Primeira diferença das tensões normais, (b) Tensão τ_{xy}



seus valores máximos. Para se obter a tensão normal e a tensão de cisalhamento na superfície do cilindro basta fazer uma transformação de coordenadas (vide Apêndice E) que possibilite encontrar as componentes do tensor tensão elástica normal e tangente à superfície do cilindro.

Procedendo a transformação mencionada sobre o tensor tensão elástica $\boldsymbol{\tau}$, no sentido anti-horário, pode-se visualizar, nas Figuras 67 e 68 as tensões normais (τ_n) e de cisalhamento (τ_s) na superfície do cilindro para diferentes valores de We e $\beta = 0.3$. Observa-se que a tensão de cisalhamento atinge seu valor máximo, em módulo, em aproximadamente $x = 0$. O que é fisicamente coerente. Já a tensão normal atinge seus valores extremos em $x = -1$ e $x = 1$. Em $x = -1$ tem-se o valor máximo para a tensão normal exercida pelo fluido no cilindro (sinal negativo) e em $x = 1$ ocorre o valor mínimo da tensão normal exercida pelo fluido no cilindro.

A pressão na superfície do cilindro também sofre influência do número de Weissenberg. Na Figura 69a, pode-se verificar que a pressão na superfície do cilindro cresce com o aumento do valor de We . Desta forma, quanto mais elástico for o meio mais pressão é exercida no poço. Por sua vez, o parâmetro β não tem muita influência na variação da magnitude da pressão ao longo da superfície do cilindro, conforme se observa na Figura 69b.

Comparando a pressão ao redor do cilindro para o caso do fluido de Oldroyd-B com o caso newtoniano, no qual o sal estaria sendo considerado um fluido de Stokes, verifica-se uma diferença significativa nessa pressão. Dito isto, fica claro que é fundamental fazer uma modelagem correta do sal para que o projeto do poço seja bem sucedido. Caso a previsão da pressão na superfície do poço seja subestimada (caso newtoniano), pode ocorrer um mau dimensionamento do poço levando ao colapso do mesmo antes do completo esgotamento do reservatório.

Figura 67 – Perfil das tensão normal ao longo do cilindro para diferentes valores de We e $\beta = 0.5$

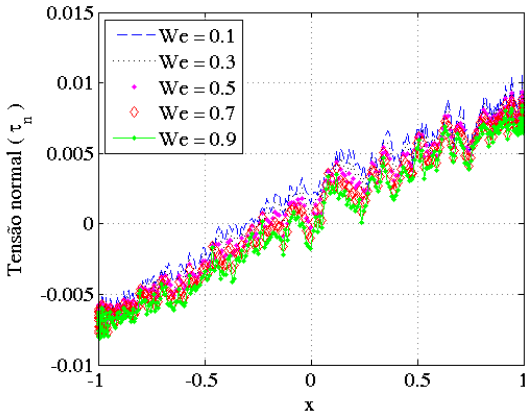
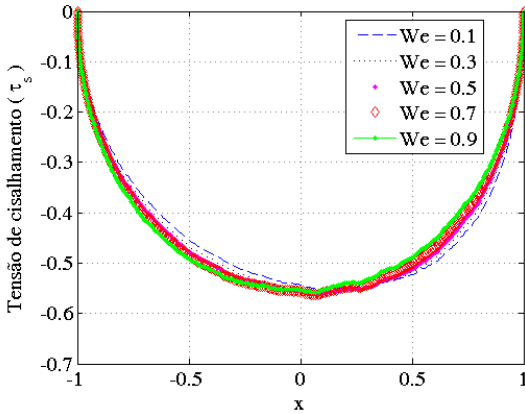


Figura 68 – Perfil das tensão de cisalhamento ao longo do cilindro para diferentes valores de We e $\beta = 0.5$



Por fim, a Figura 70 mostra os campos de tensões e da pressão para $We = 3.0$ e $\beta = 0.3$.

Figura 69 – Perfil da pressão ao longo da superfície do poço: (a) Perfil da pressão para o caso de um fluido Newtoniano e para diferentes valores de We com $\beta = 0.3$, (b) Perfil da pressão para diferentes valores de β e $We = 0.5$ e para o caso de um fluido Newtoniano

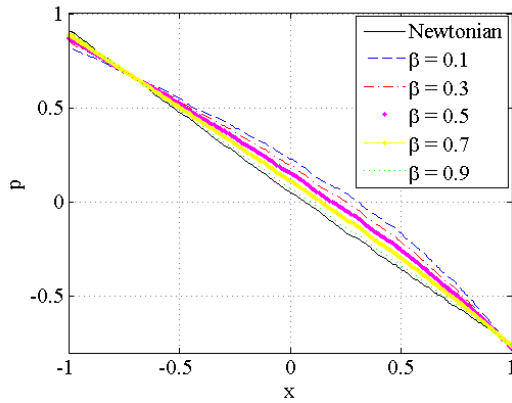
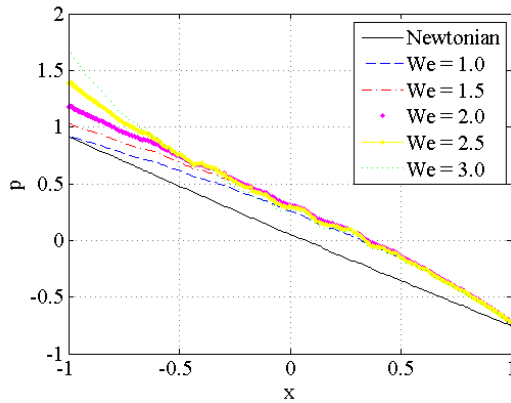
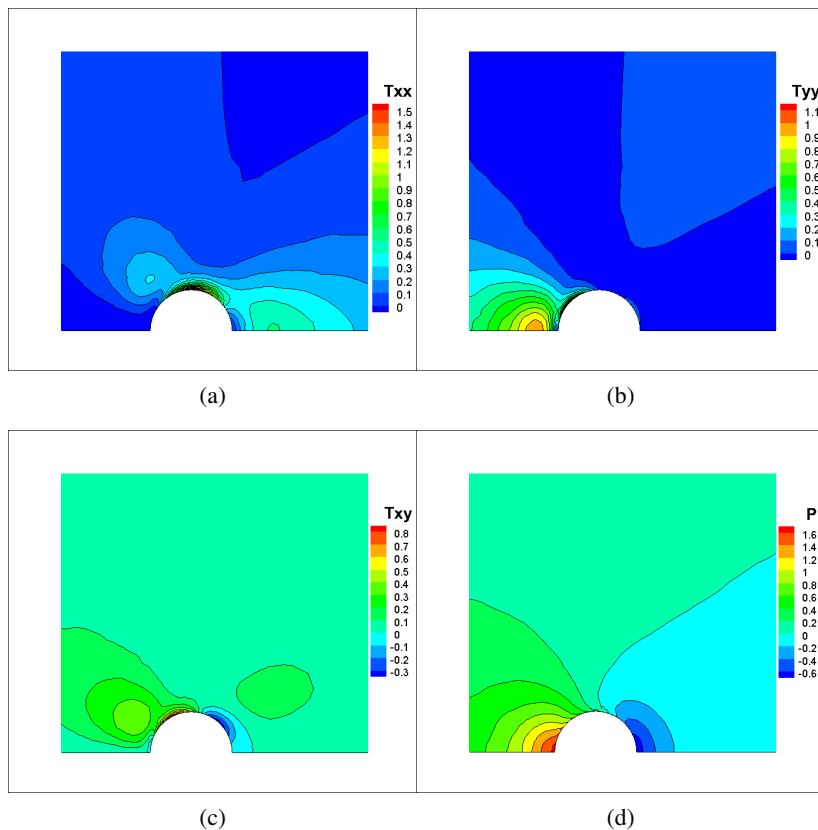


Figura 70 – Campos de tensões e pressão para $We = 3.0$ e $\beta = 0.3$: (a) Tensão τ_{xx} , (b) Tensão τ_{yy} , (c) Tensão de cisalhamento τ_{xy} , (d) Pressão



CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada uma formulação numérica para a solução de escoamentos bidimensionais de fluidos viscoelásticos. Entre estes fluidos destacam-se os evaporitos encontrados nas formações salinas que servem de represas para o petróleo. Determinar o campo de tensões sobre poços de petróleo causados pelo lento movimento do sal foi a motivação deste trabalho. As equações governantes foram discretizadas pelo método dos volumes finitos baseado em elementos, o qual admite a utilização de malhas não estruturadas híbridas formadas por triângulos e/ou quadriláteros. Além de facilitar a discretização em domínios com geometrias complexas, a formulação é conservativa no nível discreto, característica fundamental para respeitar a física do fenômeno em todos os níveis de discretização.

A utilização de uma função de interpolação especial, adaptada do método FIELDS, para aproximar as velocidades nas faces na equação de conservação da massa, permitiu tratar o acoplamento entre a pressão, velocidade e tensão, fazendo com que a tensão e a pressão surjam como variáveis da equação de conservação da massa. Com isso o condicionamento da matriz de coeficientes do sistema linear que reúne as equações discretizadas de conservação da massa e da quantidade de movimento também melhorou.

O conceito de elemento permite que todos os cálculos sejam realizados para um elemento, criando-se equações para os volumes de controle através do somatório das influências dos respectivos subvolumes de controle em cada elemento. A montagem elemento por elemento facilita de forma significativa a implementação computacional do método.

Neste contexto, este trabalho desenvolveu a base teórica para a aplicação do EbFVM aos escoamentos viscoelásticos. Fica patente o grau de dificuldade comparado ao caso newtoniano:

- O cálculo do tensor das tensões \mathbf{T} requer a resolução de equações diferenciais parciais para cada uma das suas componentes;
- O estado de tensão num ponto já não depende só do estado de deformação local, é também dependente das condições do escoamento: a “advecção” de tensões é agora relevante, introduzindo um efeito de “memória” na evolução das mesmas;
- A equação constitutiva é de tal forma que não permite que as tensões sejam representadas pelos gradientes de velocidade e substituídas na equação do movimento. Sendo assim, não é possível obter uma equação

final explícita para o campo de velocidades (como a equação de Navier-Stokes);

- O sistema a ser resolvido é misto, ou seja, as equações para as tensões são hiperbólicas, enquanto que as equações de conservação da quantidade de movimento são elípticas.

Os resultados apresentados no capítulo 6 permitem demonstrar o potencial da formulação na solução de escoamentos viscoelásticos. Nesse capítulo foram utilizados problemas padrão para se avaliar diferentes aspectos do algoritmo numérico. Para isto foi utilizada a equação constitutiva de Oldroyd-B, pois é um modelo que se ajusta à descrição do sal e também apresenta, nas suas equações, diferentes tipos de termos não lineares comuns a outros modelos.

Na avaliação dos resultados referentes ao problema do escoamento entre placas planas verificou-se uma excelente concordância entre a solução numérica e a solução analítica. Essa comparação foi feita em partes do domínio onde ocorre a transição entre os tipos de elementos mostrando a robustez do método em lidar com malhas não estruturadas híbridas. Também pôde-se constatar que a instabilidade dos fluidos viscoelásticos se origina na aproximação do termo da derivada convectiva do tensor tensão elástica, o qual representa a deformação elástica do fluido.

No escoamento em uma cavidade quadrada foi necessária uma regularização do perfil de velocidade na tampa móvel para eliminar a singularidade nos cantos junto a tampa. Apesar de se ter utilizado uma malha relativamente grosseira foi possível alcançar resultados de boa qualidade se comparado aos existentes na literatura. O número de Weissenberg crítico observado foi próximo de 1.

No problema da contração foi avaliada a capacidade do método em capturar os altos gradientes que ocorrem nos cantos reentrantes. O maior desafio percebido por este autor no problema foi o surgimento de oscilações a jusante da contração. Essas oscilações tornam-se mais evidentes quando uma malha não estruturada é utilizada.

O problema tratado na seção 6.4 apresentou uma nova abordagem para modelar o comportamento reológico do sal em problemas envolvendo poços que atravessam camadas geológicas desse material. Nestes problemas o sal, devido ao seu comportamento de fluência, exerce cargas sobre o poço de petróleo, o que pode causar, a longo prazo, o colapso do revestimento do mesmo. Uma análise das propriedades do sal levou à descrição do comportamento desse material através de um modelo viscoelástico. Os resultados apresentados forneceram uma ideia qualitativa das cargas exercidas sobre o revestimento de um poço de petróleo perfurado em uma zona de sal. A grande diferença de escala entre o poço e o domínio físico torna muito conveniente

a utilização de uma malha não estruturada capaz de capturar de forma satisfatória a solução na parede do poço sem a necessidade de refiná-la em todo o domínio. Isto demonstra a vantagem de utilizar uma formulação capaz de manipular malhas não estruturadas.

A abordagem do problema da fluência do sal aplicado à indústria do petróleo por meio da dinâmica dos fluidos é um tema novo e de importância relevante para o projeto bem sucedido de um poço de petróleo em regiões salinas.

A metodologia numérica utilizada na simulação dos problemas aqui estudados é importante para o desenvolvimento teórico do método EbFVM na solução do problema de simulação numérica de escoamentos de fluidos viscoelásticos. A utilização de um único método numérico para obter a solução tanto das equações constitutivas quanto das equações de conservação da massa e quantidade de movimento facilita o tratamento do acoplamento entre a tensão e a velocidade bem como o desenvolvimento do código computacional.

Não há dúvidas que a metodologia apresentada é muito promissora na solução de escoamentos viscoelásticos. Porém vários pontos podem ser melhorados, além dos já citados, em especial na parte referente à utilização de técnicas de estabilização. Como exemplo, as técnicas para aumentar a característica elíptica da equação de conservação da quantidade de movimento.

Muito recentemente o método dos volumes finitos baseado em elementos tem sido empregado para resolver problemas estruturais. Estas novas pesquisas e as aqui apresentadas, certamente vão no caminho de permitir que problemas acoplados sejam resolvidos com metodologias semelhantes, se não as mesmas, com malhas que são as mesmas, facilitando a transferência de informações entre os problemas. Como exemplo de um problema acoplado pode-se citar a interação do sal (fluido) com o poço de petróleo (estrutura).

Neste trabalho foram efetuadas simulações para um fluido de Oldroyd-B, porém futuramente pretende-se implementar novos modelos constitutivos que possam ser aplicados em uma gama maior de problemas físicos. Também planeja-se estender a metodologia para o caso de escoamentos viscoelásticos tridimensionais.

REFERÊNCIAS

- ABOUBACAR, M.; WEBSTER, M. F. A cell-vertex finite volume/element method on triangles for abrupt contraction viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 98, n. 2–3, p. 83–106, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 150.
- AGUAYO, J. P.; PHILLIPS, P. M.; PHILLIPS, T. N.; TAMADDON-JAHROMI, H. R.; SNIGEREV, B. A.; WEBSTER, M. F. The numerical prediction of planar viscoelastic contraction flows using the pom–pom model and higher-order finite volume schemes. *Journal of Computational Physics*, v. 220, n. 2, p. 586–611, 2007. Citado na página 37.
- ALVES, M. A.; OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T. Benchmark solutions for the flow of oldroyd-b and {PTT} fluids in planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 110, n. 1, p. 45–75, 2003. Citado na página 146.
- ALVES, M. A.; PINHO, F. T.; OLIVEIRA, P. J. Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 93, n. 2–3, p. 287–314, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 39.
- ASTARITA, G.; MARRUCCI, G. *Principles of non-Newtonian fluid mechanics*. Maidenhead, UK: McGraw-Hill, 1974. Citado na página 72.
- BAAIJENS, F. P. T. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 79, n. 2–3, p. 361–385, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 37, 40 e 100.
- BALAY, S.; BROWN, J.; BUSCHELMAN, K.; GROPP, W. D.; KAUSHIK, D.; KNEPLEY, M. G.; MCINNES, L. C.; SMITH, B. F.; ZHANG, H. *PETSc Web page*. 2013. [Http://www.mcs.anl.gov/petsc](http://www.mcs.anl.gov/petsc). Citado na página 119.
- BARNES, H. A. *A handbook of elementary rheology*. 1. ed. Aberystwyth: The University of Wales Institute of Non-Newtonian Fluid, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 59.
- BIRD, B. R.; ARMSTRONG, C.; HASSAGER, O. *Dynamics of Polymeric Liquids, Fluid Mechanics (Dynamics of Polymer Liquids Vol. 1)*. 2. ed. USA: Wiley-Interscience, 1987. Citado 11 vezes nas páginas 19, 40, 47, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 193 e 196.

- BIRD, R. B.; WIEST, J. M. Constitutive Equations for Polymeric Liquids. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 27, n. 1, p. 169–193, 1995. Citado na página 64.
- BOTELHO, F. C. *Análise Numérica e do Comportamento Mecânico do Sal em Poços de Petróleo*. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) — PUC, Rio de Janeiro, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- BOTELLA, O. On the solution of the navier-stokes equations using chebyshev projection schemes with third-order accuracy in time. *Computers and Fluids*, v. 26, n. 2, p. 107–116, 1997. ISSN 0045-7930. Citado 2 vezes nas páginas 135 e 136.
- BOTELLA, O.; PEYRET, R. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. *Computers and Fluids*, v. 27, n. 4, p. 421–433, maio 1998. ISSN 00457930. Citado 2 vezes nas páginas 135 e 136.
- CARCIONE, J. M.; HELLE, H. B.; GANGI, A. F. Theory of borehole stability when drilling through salt formations. *Geophysics*, v. 71, n. 3, p. F31–F47, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 34, 73 e 159.
- CARTER, N. L.; HANSEN, F. D. Creep of rocksalt. *Tecnophysics*, v. 92, p. 275–333, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 158.
- CHEN, T. F.; COX, C. L.; LEE, H. C.; TUNG, K. L. Least-squares finite element methods for generalized newtonian and viscoelastic flows. *Applied Numerical Mathematics*, v. 60, n. 10, p. 1024–1040, 2010. Citado na página 37.
- CHHABRA, R. P.; RICHARDSON, J. F. *Non-Newtonian Flow and Applied Rheology*. 2. ed. Oxford: Elsevier, 2008. Citado na página 46.
- CHOI, Y. J.; HULSEN, M. A.; MEIJER, H. E. H. An extended finite element method for the simulation of particulate viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 165, n. 11–12, p. 607–624, 2010. Citado na página 37.
- CLAUS, S. *Numerical Simulation of Complex Viscoelastic Flows using Discontinuous Galerkin Spectral/hp Element Methods*. 249 f. Tese (PhD in Mathematics) — School of Mathematics, Cardiff University, Cardiff, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 40, 41 e 45.
- COOK, R. D.; MALKUS, D. S.; PLESHA, M. E.; WITT, R. J. *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*. 4. ed. USA: John Wiley & Sons, 2001. Citado na página 114.

COSTA, A. M. *Uma Aplicação de Métodos Computacionais e Princípios de Mecânica das Rochas no Projeto e Análise de Escavações destinadas a Mineração Subterrânea*. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) — UFRJ, Rio de Janeiro, 1984. Citado 7 vezes nas páginas 33, 34, 52, 56, 73, 157 e 159.

COSTA, A. M.; POIATE, E. Rocha salina na industria do petróleo: aspectos relacionados à reologia e à perfuração de rochas. In: MOHRIAK, W.; SZATMARI, P.; ANJOS, S. C. (Ed.). *Sal: Geologia e Tectônica - Exemplos nas Bacias Brasileiras*. 2. ed. São Paulo: Beca, 2009. p. 362–385. Citado na página 48.

COSTA, A. M.; POIATE, E.; FALCÃO, J. L.; COELHO, L. F. M. Triaxial creep tests in salt applied drilling through thick salt layers in campos basin-brazil. In: *SPE/IADC Drilling Conference*. Amsterdam, The Netherlands: [s.n.], 2005. (Proceedings...). Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.

CROCHET, M.; DAVIES, A.; WALTERS, K. *Numerical simulation of non-Newtonian flow*. Amsterdam: Elsevier, 1984. (Rheology series). Citado 2 vezes nas páginas 36 e 37.

DARWISH, M.; WHITEMAN, J.; BEVIS, M. Numerical modelling of viscoelastic liquids using a finite-volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 45, n. 3, p. 311–337, 1992. Citado na página 38.

DAWSON, P. R. Constitutive models applied in the analysis of creep of rock salt. *SAND79-0137*. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.

DE ARAUJO, J. H. C.; GOMES, P. D.; RUAS, V. Study of a finite element method for the time-dependent generalized stokes system associated with viscoelastic flow. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 234, n. 8, p. 2562–2577, 2010. Citado na página 37.

DE LAS CUEVAS, C. Pore structure characterization in rock salt. *Engineering Geology*, v. 47, n. 1-2, p. 17–30, 1997. Citado na página 158.

DOU, H.; PHAN-THIEN, N. The flow of an oldroyd-b fluid past a cylinder in a channel: adaptive viscosity vorticity (davss-w) formulation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 87, n. 1, p. 47–73, 1999. Citado na página 39.

EDUSSURIYA, S. S.; WILLIAMS, A. J.; BAILEY, C. A cell-centred finite volume method for modelling viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 117, n. 1, p. 47–61, 2004. Citado 5 vezes nas páginas 37, 38, 39, 150 e 151.

ERVIN, V. J.; MILES, W. W. Approximation of time-dependent viscoelastic fluid flow: Supg approximation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v. 41, n. 2, p. 457–486, 2004. Citado na página 40.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. 3. ed. Berlin: Springer. Paperback. Citado 2 vezes nas páginas 76 e 91.

FONTELOS, M. A.; FRIEDMAN, A. The flow of a class of oldroyd fluids around a re-entrant corner. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 95, n. 2–3, p. 185–198, 2000. Citado na página 41.

FORTIN, M.; PIERRE, R. On the convergence of the mixed method of crochet and marchal for viscoelastic flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, v. 73, n. 3, p. 341–350, 1989. Citado na página 40.

FOSSUM, A. F.; FREDRICH, J. T. Technical Report - SAND2002-2063, *Salt Mechanics Primer for Near-Salt and Sub-Salt Deepwater Gulf of Mexico. Field Developments*. 2002. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.

FOSSUM, A. F.; FREDRICH, J. T. Probabilistic analysis of borehole closure for through-salt well design. *Acta Geotechnica*, v. 2, n. 1, p. 41–51, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 15, 33, 34 e 36.

GANVIR, V.; LELE, A.; THAOKAR, R.; GAUTHAM, B. Simulation of viscoelastic flows of polymer solutions in abrupt contractions using an arbitrary lagrangian eulerian (ALE) based finite element method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 143, n. 2–3, p. 157–169, 2007. Citado na página 37.

GERRITSMA, M. I. *Time dependent numerical simulations of a viscoelastic fluid on a staggered grid*. Tese(PhD) — Rijksuniversiteit Groningen, The Netherlands, 1996. Citado na página 38.

GRAVINA, C. C. *Simulação Numérica do Comportamento Mecânico do Sal em Poços de Petróleo*. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Petróleo) — Faculdade de Engenharia Mecânica, Unicamp, Campinas, 1997. Citado 7 vezes nas páginas 15, 33, 34, 48, 49, 52 e 56.

GRILLET, A. M.; YANG, B.; KHOMAMI, B.; SHAQFEH, E. S. G. Modeling of viscoelastic lid driven cavity flow using finite element simulations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 88, n. 1–2, p. 99–131, 1999. Citado na página 133.

GROSSI, L.; TOMÉ, M. F.; CASTELO, A. F.; MANGIAVACCHI, N.; CUMINATO, J. A. Técnicas numéricas para simulação da contração planar

de fluidos oldroyd-b. *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, v. 3, n. 1, p. 131–140, 2002. Citado na página 78.

GUÉNETTE, R.; FORTIN, M. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 60, n. 1, p. 27–52, 1995. Citado na página 41.

HAO, J.; PAN, T-W. Simulation for high weissenberg number: Viscoelastic flow by a finite element method. *Applied Mathematics Letters*, v. 20, n. 9, p. 988–993, 2007. Citado na página 37.

HONÓRIO, H. T. *Análise de Métodos Segregados e Acoplados de Solução de Escoamentos Utilizando Malhas Não-Estruturadas Híbridas*. 165 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis, 2013. Citado 10 vezes nas páginas 15, 16, 83, 87, 88, 106, 112, 114, 115 e 117.

HUANG, X.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. Viscoelastic flow between eccentric rotating cylinders: unstructured control volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 64, n. 1, p. 71–92, 1996. Citado na página 39.

HUGHES, T. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. USA: Dover Publications, 2000. (Dover Civil and Mechanical Engineering Series). Citado na página 114.

HURTADO, F. S. V. *Uma Formulação de Volumes finitos Baseada em Elementos para a Simulação do Deslocamento Bifásico Imiscível em Meios Porosos*. 165 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 15, 83 e 94.

HURTADO, F. S. V. *Formulação tridimensional de volumes finitos Baseada para a Simulação de reservatórios de petróleo com malhas não-estruturadas*. 174 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) — Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis, 2011. Citado 7 vezes nas páginas 16, 43, 84, 91, 103, 114 e 117.

IDELSOHN, S. R.; NATE, E. O. Finite volumes and finite elements: Two good friends. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 37, n. 19, p. 3323–3341, 1994. Citado na página 81.

IRGENS, F. *Continuum mechanics*. 1. ed. Berlin: Springer, 2008. Citado na página 58.

JAEGER, J. C.; COOK, N. G. W.; ZIMMERMAN, R. W. *Fundamentals of rock mechanics*. 4. ed. Malden, MA: Blackwell Pub., 2007. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 51.

JAFARI, A. *Simulation of Time-Dependent Viscoelastic Fluid Flows by Spectral Elements*. 188 f. Tese (Doctoral en Mécanique) — Faculté Sciences et Techniques de L'Ingenieur, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, 2011. Citado na página 128.

KESHTIBAN, I. J.; BELBLIDIA, F.; WEBSTER, M. F. Computation of incompressible and weakly-compressible viscoelastic liquids flow: finite element/volume schemes. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 126, n. 2–3, p. 123–143, 2005. Citado na página 151.

KEUNINGS, R. On the high weissenberg number problem. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 20, n. 0, p. 209–226, 1986. Citado na página 41.

KHOMAMI, B.; TALWAR, K. K.; GANPULE, H. K. A comparative study of higher and lower-order finite element techniques for computation of viscoelastic flows. *Journal of Rheology (1978-present)*, v. 38, n. 2, p. 255–289, 1994. Citado na página 37.

LARSON, R. *Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*. Stoneham: Butterworths, 1988. (Biotechnology Series). Citado 2 vezes nas páginas 40 e 64.

LEMOS, E. M. *Implementação de um método de volumes finitos de ordem superior com tratamento multibloco aplicado à simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos*. 165 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) — Programa de Pós-graduação em Engenharia Química - COPPE, Rio de Janeiro, 2011. Citado na página 37.

LEVEQUE, R. J. *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. Citado na página 109.

LI, X.; HAN, X.; WANG, X. Numerical modeling of viscoelastic flows using equal low-order finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 199, n. 9–12, p. 570–581, 2010. Citado na página 37.

LUO, X.-L.; TANNER, R. A decoupled finite element streamline-upwind scheme for viscoelastic flow problems. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 31, n. 2, p. 143–162, 1989. Citado na página 40.

MACKAY, F.; INOUE, N.; FONTOURA, S. A. B.; BOTELHO, F. C. Analyzing geomechanical effects while drilling sub salt wells through numerical modeling. *SPE 113216*, p. 1–12, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.

MACOSKO, C. W. *Rheology: Principles, Measurements, and Applications*. 1. ed. New York: Wiley-VCH, 1994. Citado na página 40.

MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004. Citado 5 vezes nas páginas 96, 104, 109, 112 e 116.

MALISKA, C. R.; HURTADO, F. S. V.; DONATTI, C. N.; PESCADOR, A. B.; SILVA, A. F. C. Relatório Técnico SIGER-4, parte1, *Desenvolvimento da biblioteca EFVLib - Conclusão*. 2009. Citado 6 vezes nas páginas 16, 42, 90, 91, 97 e 119.

MANSSINI, P.; QUARTERONI, A.; SALERI, F.; SCROFANI, G. Modeling of salt tectonics. *Comput. Methods Appl. Engrg.*, v. 197, p. 281–293, 2007. Citado na página 34.

MARCHAL, J.; CROCHET, M. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 26, n. 1, p. 77–114, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 40.

MASE, G. T.; MASE, G. E. *Continuum Mechanics for Engineers*. 2. ed. Boca Raton: CRC Press, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 58.

MINKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R. H. *Handbook of Numerical Heat Transfer*. New York: Wiley, 1988. 379–421 p. (A Wiley-interscience publication). Citado na página 199.

MOHRIAK, W.; SZATMARI, P. Introdução às propriedades químicas e físicas dos evaporitos. In: MOHRIAK, W.; SZATMARI, P.; ANJOS, S. C. (Ed.). *Sal: Geologia e Tectônica - Exemplos nas Bacias Brasileiras*. 2. ed. São Paulo: Beca, 2009. p. 18–41. Citado na página 159.

MOMPEAN, G.; DEVILLE, M. Unsteady finite volume simulation of oldroyd-b fluid through a three-dimensional planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 72, n. 2–3, p. 253–279, 1997. Citado na página 38.

MUNIZ, A. R.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M. High-order finite volume method for solving viscoelastic fluid flows. *Braz. J. Chem. Eng.*, v. 25, n. 1, p. 153–166, 2008. Citado na página 37.

- MUNSON, D. E.; DAWSON, P. R. Salt constitutive modeling using mechanism maps. In: HARDY, H. R.; LANGER, M. (Ed.). *CONF. MECH. BEHAVOIUR OF SALT ROCKS*. Clausthal, Germany: Trans Tech, 1981. (Proceedings...), p. 717–738. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- NA, Y.; YOO, J. Y. A finite volume technique to simulate the flow of a viscoelastic fluid. *Computational Mechanics*, Springer-Verlag, v. 8, n. 1, p. 43–55, 1991. Citado na página 120.
- NADAU, L.; SEQUEIRA, A. Numerical simulations of shear dependent viscoelastic flows with a combined finite element–finite volume method. *Comput. Math. Appl.*, v. 53, n. 3-4, p. 547–568, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 37, 38, 147 e 148.
- NETTLETON, L. L. Fluid mechanics of salt domes. *AAPG Bulletin*, v. 18, n. 9, p. 1175–1204, 1934. Citado na página 34.
- OLDROYD, J. G. On the Formulation of Rheological Equations of State. *Proceedings of the Royal Society of London A*, v. 200, p. 523–541, 1950. Citado 2 vezes nas páginas 61 e 63.
- OLIVEIRA, P. J. Method for time-dependent simulations of viscoelastic flows: vortex shedding behind cylinder. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 101, n. 1, p. 113–137, 2001. Citado na página 37.
- OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T. Plane contraction flows of upper convected maxwell and phan-thien–tanner fluids as predicted by a finite-volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 88, n. 1–2, p. 63–88, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 39.
- OLIVEIRA, P. J.; PINHO, F. T.; PINTO, G. A. Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 79, n. 1, p. 1–43, 1998. Citado na página 39.
- OLSSON, F. Technical Report - Royal Institute of Technology, *A numerical method for modeling time-dependent viscoelastic fluid flow*. 1995. Citado na página 36.
- OLSSON, F.; YSTROM, J. Some properties of the upper convected maxwell model for viscoelastic fluid flow. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 48, n. 1–2, p. 125–145, 1993. Citado na página 36.
- OÑATE, E.; CERVERA, M.; ZIENKIEWICZ, O. C. A finite volume format for structural mechanics. *International Journal for Numerical Methods in*

Engineering, John Wiley & Sons, Ltd, v. 37, n. 2, p. 181–201, 1994. Citado na página 81.

OWENS, R. G.; PHILLIPS, T. N. *Computational Rheology*. London: World Scientific Publishing Company, 2002. Citado 6 vezes nas páginas 36, 38, 40, 41, 53 e 78.

PAN, T.-W.; HAO, J. Numerical simulation of a lid-driven cavity viscoelastic flow at high weissenberg numbers. *Comptes Rendus Mathematique*, v. 344, n. 4, p. 283–286, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 134 e 139.

PAN, T.-W.; HAO, J.; GLOWINSKI, R. On the simulation of a time-dependent cavity flow of an Oldroyd-B fluid. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, v. 60, n. 7, p. 791–808, 2009. Citado 6 vezes nas páginas 134, 135, 136, 137, 138 e 139.

PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. (Series in computational methods in mechanics and thermal sciences). Citado 4 vezes nas páginas 38, 81, 104 e 109.

PERERA, M. G. N.; WALTERS, K. Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry: Part i: flows associated with i-shaped and t-shaped geometries. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 2, n. 1, p. 49–81, 1977. Citado na página 40.

PHILLIPS, T. N.; WILLIAMS, A. J. Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-lagrangian finite volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 87, n. 2–3, p. 215–246, 1999. Citado 3 vezes nas páginas 38, 147 e 148.

PHILLIPS, T. N.; WILLIAMS, A. J. Comparison of creeping and inertial flow of an oldroyd b fluid through planar and axisymmetric contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 108, n. 1–3, p. 25–47, 2002. Citado na página 151.

RAJAGOPALAN, D.; ARMSTRONG, R. C.; BROWN, R. A. Finite element methods for calculation of steady, viscoelastic flow using constitutive equations with a newtonian viscosity. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 36, n. 0, p. 159–192, 1990. Citado na página 40.

RAW, M. J. *A new control-volume based finite element procedure for the numerical solution of the fluid flow and scalar transport equations*. Tese (PhD in Mechanical Engineering) — University of Waterloo, 1985. Citado 6 vezes nas páginas 39, 92, 104, 105, 106 e 109.

- RENARDY, M. Inflow boundary conditions for steady flow of viscoelastic fluids with differential constitutive laws. *Rocky Mountain Journal of Mathematics*, Rocky Mountain Mathematics Consortium, v. 18, n. 2, p. 445–454, 06 1988. Citado na página 77.
- RENARDY, M. Re-entrant corner behavior of the {PTT} fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 69, n. 1, p. 99–104, 1997. Citado na página 41.
- RENARDY, M. *Mathematical Analysis of Viscoelastic Flows*. [S.l.]: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000. (CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics). Citado na página 41.
- RIANDE, E.; DÍAZ-CALLEJA, R.; PROLONGO, M. G.; MASEGOSA, R. M.; SALOM, C. *Polymer Viscoelasticity: Stress and Strain in Practice*. 1. ed. New York: Marcel Dekker, 2000. Citado na página 58.
- SAHIN, M.; OWENS, R. G. A novel fully implicit finite volume method applied to the lid-driven cavity problem. Part I: High Reynolds number flow calculations. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, v. 42, p. 57–77, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 135.
- SAHIN, M.; WILSON, H. J. A semi-staggered dilation-free finite volume method for the numerical solution of viscoelastic fluid flows on all-hexahedral elements. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 147, n. 1–2, p. 79–91, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 37, 78 e 100.
- SANDRI, D. Numerical study of a new finite element method for the approximation of viscoelastic fluid flow problems. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 118, n. 2–3, p. 103–120, 2004. Citado na página 37.
- SASMAL, G. P. A finite volume approach for calculation of viscoelastic flow through an abrupt axisymmetric contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 56, n. 1, p. 15–47, 1995. Citado na página 38.
- SATO, T.; RICHARDSON, S. M. Explicit numerical simulation of time-dependent viscoelastic flow problems by a finite element/finite volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 51, n. 3, p. 249–275, 1994. Citado na página 39.
- SEO, T. Numerical simulations of blood flow in arterial bifurcation models. *Korea-Australia Rheology Journal*, Springer Berlin Heidelberg, v. 25, n. 3, p. 153–161, 2013. Citado na página 43.

SERATA, S.; ADACHI, T.; SAKURAI, S. Theory of aggregate rock behavior based on absolute three-dimensional testing (att) of rock salt. In: *U.S. SYMPOSIUM ON ROCK MECHANICS*. Austin: [s.n.], 1968. (Proceedings...). Citado na página 158.

SHAW, M. T.; MACKNIGHT, W. J. *Introduction to Polymer Viscoelasticity*. Hoboken: Wiley, 2005. Citado na página 40.

SHEFFIELD, J. S.; COLLINS, K. B.; HACKNEY, R. M. Salt drilling in rocky mountains. *IADC/SPE 11374*, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.

SILVA, M. A. M.; SCHREIBER, B. C.; SANTOS, C. L. Evaporitos como recursos minerais. *Revista Brasileira de Geofísica*, v. 18, p. 338–350, 2000. Scielo. Citado na página 157.

SUN, C.; XIAO, Y.; YIN, X.; PENG, H. Stability condition of finite difference solution for viscoelastic wave equations. *Earthquake Science*, Seismological Society of China, v. 22, n. 5, p. 479–485, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 37.

SUN, J.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. I. An adaptive viscoelastic stress splitting scheme and its applications: Avss/si and avss/supg. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 65, n. 1, p. 75–91, 1996. Citado na página 41.

SWIFT, G. M.; REDDISH, D. J. Underground excavations in rock salt. *Geotechnical and Geological Engineering*, v. 23, n. 1, p. 17–42, 2005. Citado na página 34.

TANNER, R. I. *Engineering Rheology*. 2. ed. New York: Oxford University Press, 2000. Citado na página 40.

TOMÉ, M. F.; MANGIACACCHI, N.; CUMINATO, J. A.; CASTELO, A.; MCKEE, S. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 106, n. 2–3, p. 61–106, 2002. ISSN 0377-0257. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 120.

VAN LEER, B. Upwind and high-resolution methods for compressible flow: From donor cell to residual-distribution schemes. *Comm. Comp. Phys.*, v. 1, n. 2, p. 192–206, April 2006. Citado na página 96.

WAPPEROM, P.; WEBSTER, M. Simulation for viscoelastic flow by a finite volume/element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and*

Engineering, v. 180, n. 3–4, p. 281–304, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 78.

WARICHET, V.; LEGAT, V. Adaptive hp-finite element viscoelastic flow calculations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 136, n. 1–2, p. 93–110, 1996. Citado na página 37.

WARREN, J. K. *Evaporites : sediments, resources, and hydrocarbons*. Berlin, New York: Springer, 2006. Citado na página 158.

WEBSTER, M. F. *The numerical solution of rheological flow problems*. Tese (PhD in Mathematics) — University of Wales, Aberystwyth, 1959. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 120.

WEBSTER, M. F.; TAMADDON-JAHROMI, H. R.; ABOUBACAR, M. Transient viscoelastic flows in planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 118, n. 2–3, p. 83–101, 2004. Citado na página 120.

WILLSON, S. M.; FOSSUM, A. F.; FREDRICH, J. T. Assessment of salt loading on well casings. In: *IADC/SPE Drilling Conference*. Dallas, Texas: [s.n.], 2002. (Proceedings...). Citado 4 vezes nas páginas 15, 33, 34 e 35.

XUE, S.-C.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. Numerical study of secondary flows of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 59, n. 2–3, p. 191–213, 1995. Citado na página 38.

XUE, S.-C.; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. Upwinding with deferred correction (updc): an effective implementation of higher-order convection schemes for implicit finite volume methods. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 108, n. 1–3, p. 1–24, 2002. Citado na página 39.

YAPICI, K.; KARASOZEN, B.; ULUDAG, Y. Finite volume simulation of viscoelastic laminar flow in a lid-driven cavity. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 164, n. 1–3, p. 51–65, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 134, 135 e 139.

YOO, J. Y.; NA, Y. A numerical study of the planar contraction flow of a viscoelastic fluid using the {SIMPLER} algorithm. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 39, n. 1, p. 89–106, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 120.

YUE, M.; ZHAO, G.; ZHANG, C.; CHEN, A.; LI, H. Three-dimensional simulation of planar contraction viscoelastic flow by penalty finite element

method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 63, n. 7, p. 811–827, 2010. Citado na página 37.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method: The basis*. 5. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. Citado na página 86.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. 6. ed. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. Citado na página 81.

Apêndices

APÊNDICE A – ALGUNS TEOREMAS IMPORTANTES DO CÁLCULO VETORIAL E TENSORIAL

A.1 TEOREMA DO TRANSPORTE DE REYNOLDS

Seja $V(t)$ um volume material e $G(\mathbf{x}, t)$ uma função escalar ou vetorial. então

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} G dV = \int_{V(t)} \left(\frac{DG}{Dt} + G \nabla \cdot \mathbf{u} \right) dV. \quad (\text{A.1})$$

A.2 TEOREMA DO TRANSPORTE DA DIVERGÊNCIA

Seja $V(t)$ uma região limitada por uma simples superfície fechada S com um vetor normal unitário \mathbf{n} apontando para fora. Então se \mathbf{F} (vetor ou tensor) e seu divergente são definidos em V

$$\int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{F} dS = \int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV. \quad (\text{A.2})$$

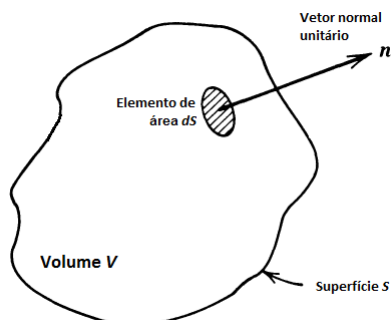
APÊNDICE B – DERIVAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

Na derivação dessas equações se considera uma região arbitrária, fixa no espaço, de volume V e superfície S , como mostrado na Figura 71. Essa região matemática é referida como “volume de controle”. Sobre cada elemento de área dS na superfície está associado um vetor normal unitário \mathbf{n} apontando para fora. Considera-se que esta região fixa está no interior do campo de escoamento do fluido e que o mesmo se move através das suas fronteiras. As leis de conservação de massa, quantidade de movimento e energia serão aplicadas para o fluido contido nessa região fixa.

B.1 CONSERVAÇÃO DA MASSA

Suponha que, em um elemento infinitesimal de superfície, dS , o fluido está atravessando a superfície de V com uma velocidade \mathbf{v} . Então, a taxa volumétrica local do escoamento do fluido através de dS é $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})dS$. Se o escoamento é para fora de V , então $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})dS$ é positivo. Caso contrário $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})dS$ é negativo. A taxa de fluxo de massa local é, então, $(\mathbf{n} \cdot \rho\mathbf{v})dS$. Note que $\rho\mathbf{v}$ é o fluxo de massa, isto é, massa por unidade de tempo. As deduções aqui apresentadas foram baseadas no livro de Bird (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

Figura 71 – Volume de controle arbitrário, fixo no espaço (modificado de Bird, Armstrong e Hassager (1987))



De acordo com a lei da conservação da massa, a massa não é criada nem destruída em escoamentos de interesse da engenharia, ou seja, a massa total do fluido dentro do volume V aumentará somente por causa do fluxo líquido de fluido entrando através da fronteira dS . Matematicamente, isso é escrito como

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho dV}_{\text{Taxa de aumento de massa de fluido dentro de } V} = - \underbrace{\int_S (\mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v}) dS}_{\text{Taxa de adição de massa através da superfície } S}. \quad (\text{B.1})$$

Aplicando o Teorema da Divergência de Gauss, a integral de superfície poder ser transformada em integral de volume:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \int_V (\nabla \cdot \rho \mathbf{v}) dV. \quad (\text{B.2})$$

Como o volume de controle V é fixo, pode-se trazer a derivada temporal para dentro da integral, obtendo-se

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \right] dV = 0. \quad (\text{B.3})$$

Portanto, tem-se agora, uma integral sobre um volume arbitrário e essa integral é igual a zero e como consequência da arbitrariedade do volume, o integrando é igual a zero. Isso nos dá:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - (\nabla \cdot \rho \mathbf{v}). \quad (\text{B.4})$$

a qual é chamada de *equação da continuidade*. Se o fluido tem uma densidade constante, a equação anterior fica

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0. \quad (\text{B.5})$$

B.2 CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

A taxa volumétrica de escoamento do fluido através do elemento de superfície dS é $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) dS$. Multiplicando por $\rho \mathbf{v}$ (quantidade de movimento por unidade de volume) e rearranjando, obtém-se $(\mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dS$, que é a taxa de quantidade de movimento através do elemento de superfície dS . A quantidade $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$ é o fluxo de quantidade de movimento do fluido (transporte convectivo).

Neste momento, cabe ressaltar que a ordem tensorial das quantidades envolvidas no primeiro parágrafo da seção B.1 e no primeiro parágrafo desta

seção são diferentes. Na seção B.1 a quantidade transportada é a massa (escalar), e o fluxo de massa é um vetor. Nesta seção, a quantidade sendo transportada é $\rho \mathbf{v}$ (quantidade de movimento por unidade de volume de fluido) que é um vetor, e o fluxo de quantidade de movimento $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$ é um tensor de segunda ordem.

Além da quantidade de movimento transportada pelo escoamento (forças de campo), existe também a quantidade de movimento linear transferido em virtude do movimento molecular e interações dentro do fluido. Denotaremos essa quantidade por $\boldsymbol{\sigma}$. Assim, a taxa de escoamento da quantidade de movimento, devido movimentos moleculares, através do elemento de superfície com orientação \mathbf{n} é $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) dS$. Será assumido que $\boldsymbol{\sigma}$ é um tensor simétrico ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$). De acordo com a lei da conservação da quantidade de movimento, a quantidade de movimento total do fluido dentro de V aumentará por causa do fluxo líquido de quantidade de movimento entrando através da fronteira S e também por causa da força da gravidade agindo externamente no fluido. Matematicamente, tem-se

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV}_{\text{Taxa de crescimento da quantidade de movimento do fluido dentro de } V} = - \underbrace{\int_S (\mathbf{n} \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dS}_{\text{Taxa de acréscimo de quantidade de movimento através de } S \text{ devido ao escoamento.}} - \underbrace{\int_S (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) dS}_{\text{Taxa de acréscimo de quantidade de movimento através de } S \text{ devido ao movimento molecular.}} + \underbrace{\int_V \rho \mathbf{g} dV}_{\text{Força sobre o fluido dentro de } V \text{ pela gravidade.}}, \quad (\text{B.6})$$

onde \mathbf{g} é a força por unidade de área devida à gravidade. Aplicando, novamente, o teorema da divergência de Gauss, tem-se

$$\int_V \frac{d}{dt} \rho \mathbf{v} dV = - \int_V (\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dV - \int_V (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV + \int_V \rho \mathbf{g} dV. \quad (\text{B.7})$$

Para V arbitrário, resulta

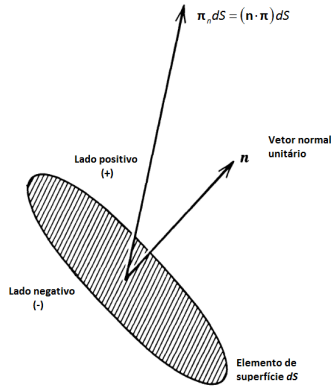
$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad (\text{B.8})$$

a qual é chamada de *equação do movimento* ou *equação de conservação da quantidade de movimento*.

O tensor $\boldsymbol{\sigma}$ pode ser interpretado fisicamente de uma maneira diferente daquela usada na dedução da equação. Isto é, pode-se assumir que a quantidade de movimento total do fluido dentro do volume V aumenta por causa do fluxo líquido para dentro, através da fronteira, de quantidade de movimento devido a forças de campo, e por causa de forças externas agindo sobre o fluido (força de corpo exercida pela gravidade e força de superfície exercida pelo fluido ao redor volume). Portanto, o termo representando a força de superfície na equação teria a forma $-\int_S \boldsymbol{\pi}_n dS$ onde $\boldsymbol{\pi}_n dS$ é o vetor descrevendo

a força exercida pelo fluido no lado negativo de dS , conforme mostrado na Figura 72. Ou seja, $\boldsymbol{\pi}_n = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, logo, a força $\boldsymbol{\pi}_n dS$ correspondente a qualquer orientação \mathbf{n} de dS pode ser obtida a partir do vetor $\boldsymbol{\sigma}$. Usando essa interpretação, é mais natural se referir a $\boldsymbol{\sigma}$ como *tensor tensão de Cauchy*. A componente σ_{ij} desse tensor é a força por unidade de área agindo na direção positiva j sobre uma superfície perpendicular à direção i .

Figura 72 – Elemento de superfície através do qual a força $\boldsymbol{\pi}_n dS$ é transmitida (modificado de Bird, Armstrong e Hassager (1987)).



APÊNDICE C – OPERADORES DIFERENCIAIS EM COORDENADAS CARTESIANAS

Nabla:

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} \quad (\text{C.1})$$

Tensor gradiente de velocidade:

$$(\nabla \mathbf{u})_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (\text{C.2})$$

$$(\nabla \mathbf{u})_{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} \quad (\text{C.3})$$

$$(\nabla \mathbf{u})_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (\text{C.4})$$

$$(\nabla \mathbf{u})_{yx} = \frac{\partial u}{\partial y} \quad (\text{C.5})$$

Laplaciano da velocidade:

$$(\nabla^2 \mathbf{u})_x = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (\text{C.6})$$

$$(\nabla^2 \mathbf{u})_y = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \quad (\text{C.7})$$

Derivada convectiva de um tensor:

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau})_{xx} = u \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial y} \quad (\text{C.8})$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau})_{xy} = u \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \quad (\text{C.9})$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau})_{yx} = u \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \quad (\text{C.10})$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau})_{yy} = u \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \quad (\text{C.11})$$

APÊNDICE D – DISCRETIZAÇÃO DO OPERADOR LAPLACIANO

A aproximação do laplaciano feita por Schneider (MINKOWYCZ et al., 1988) será apresentada aqui. Neste sentido, considere o laplaciano de um escalar Θ dado por

$$L(\phi) = \nabla^2 = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} \quad (D.1)$$

Considerando a Figura 73, obtém-se aproximações para os termos da equação (D.1) no ponto de integração f como

$$\left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} \right)_f = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{\left(\frac{3}{4} \check{\Theta}_1 + \frac{1}{4} \check{\Theta}_4 \right) - \check{\Theta}_1}{\Delta x} - \frac{\check{\Theta}_1 - \left(\frac{3}{4} \check{\Theta}_2 + \frac{1}{4} \check{\Theta}_3 \right)}{\Delta x} \right\}, \quad (D.2)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} \right)_f = \frac{1}{\Delta y} \left\{ \frac{\left(\frac{1}{2} \check{\Theta}_1 + \frac{1}{2} \check{\Theta}_2 \right) - \check{\Theta}_1}{\frac{1}{2} \Delta y} - \frac{\check{\Theta}_1 - \left(\frac{1}{2} \check{\Theta}_3 + \frac{1}{2} \check{\Theta}_4 \right)}{\frac{3}{2} \Delta y} \right\}. \quad (D.3)$$

Substituindo estas expressões na equação (D.1), após algumas manipulações se obtém

$$\nabla^2 \Theta_f = \frac{\sum_{j=1}^4 N_j \check{\Theta}_j - \Theta_f}{(L_d^2)}, \quad (D.4)$$

onde o comprimento difusivo, L_d^2 , é definido como

$$(L_d^2)_f = \left\{ \frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{8}{3(\Delta y)^2} \right\}_f^{-1}. \quad (D.5)$$

Conforme é possível observar, a aproximação do laplaciano derivada acima satisfaz o caso limite dos escoamentos puramente difusivos. Em outras palavras, quando

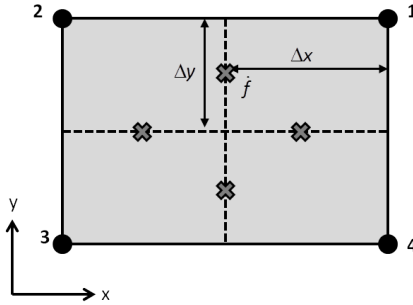
$$\nabla^2 \Theta_f = 0 \quad (D.6)$$

a equação (D.4) é reduzida à função de interpolação bilinear dos valores nodais, isto é,

$$\Theta_j = \sum_{j=1}^4 N_j \check{\Theta}_j. \quad (D.7)$$

A equação (D.4) foi derivada baseada no elemento retangular da Figura 73. Entretanto, não resulta em uma aproximação correta para um elemento quadrilátero genérico, os quais são utilizados neste trabalho. Para elementos quadriláteros de forma genérica, usa-se a equação (D.4) com um L_d

Figura 73 – Comprimento difusivo em um elemento retangular



corrigido. Ou seja, Δx e Δy são substituídos por escalas de comprimento perpendicular e tangencial, respectivamente, à face em questão. Isso significa que Δy é considerado o comprimento da face em questão e Δx é determinado por,

$$\Delta x = \frac{|J|}{\Delta y}, \quad (\text{D.8})$$

onde $|J|$ é a magnitude do jacobiano da transformação (4.1).

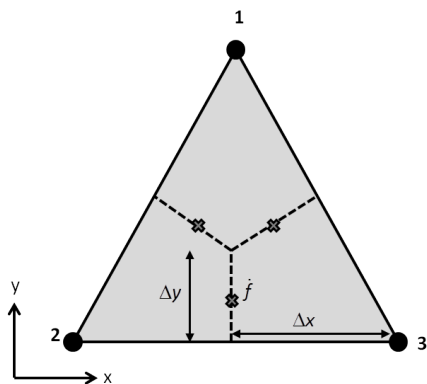
De forma similar, pode-se obter o comprimento difusivo em um ponto de integração de um elemento triangular regular, o qual está mostrado na Figura 74. Ou seja, faz-se as expansões em série de Taylor das derivadas de segunda ordem em um elemento regular e substitui na equação (D.1) para obter (D.4), onde L_d^2 é definido por

$$(L_d^2)_{\hat{f}} = \left\{ \frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{12}{5(\Delta y)^2} \right\}_{\hat{f}}^{-1}. \quad (\text{D.9})$$

Para um elemento triangular genérico, Δy é o comprimento da face em questão e Δx é determinado por,

$$\Delta x = \frac{|J|}{6\Delta y}. \quad (\text{D.10})$$

Figura 74 – Comprimento difusivo em um elemento triangular regular



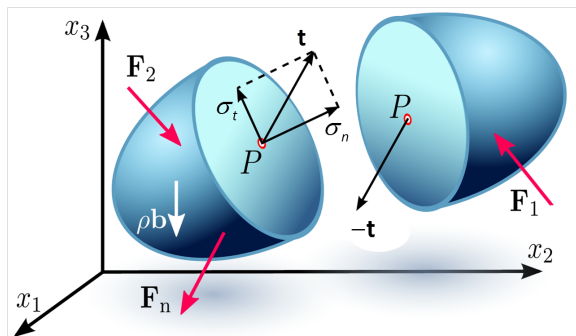
APÊNDICE E – CÁLCULO DA TENSÃO NORMAL E DE CISCALHAMENTO

O vetor tração, \mathbf{t} , é simplesmente a força interna sobre uma seção transversal dividida pela área dessa seção, ou seja,

$$\mathbf{t} = \frac{\mathbf{F}_{\text{interna}}}{\text{Área}}. \quad (\text{E.1})$$

Desta forma, \mathbf{t} tem unidade de tensão, como MPa, mas é absolutamente um vetor, não um tensor tensão. A representação esquemática de \mathbf{t} é mostrada na Figura 75.

Figura 75 – Representação esquemática do tensor tração



Fonte: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Stress_vector.svg

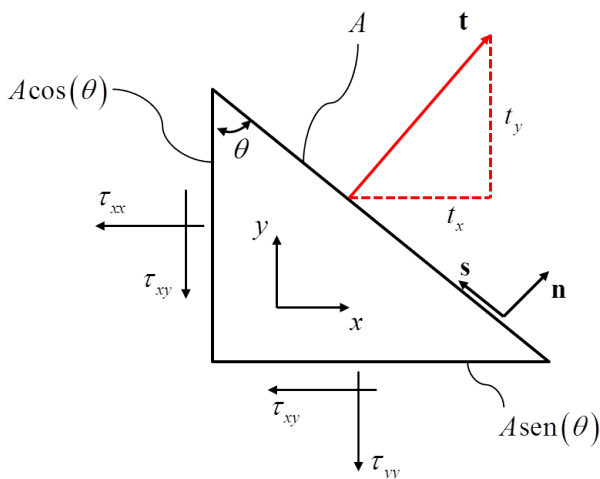
As tensões normal e de cisalhamento são simplesmente as componentes do vetor de tração $\mathbf{t} = (t_x, t_y)$ que são normal e paralela ao elemento de área na superfície da estrutura, como mostrado na Figura 76. Usando \mathbf{n} e \mathbf{s} para denotar o vetor normal unitário e o vetor tangente unitário, respectivamente, escreve-se

$$\sigma_n = \mathbf{t} \cdot \mathbf{n} \quad e \quad \sigma_t = \mathbf{t} \cdot \mathbf{s}. \quad (\text{E.2})$$

É importante reconhecer que a tensão normal σ_n e a tensão de cisalhamento σ_t são valores escalares.

A relação entre o vetor de tração \mathbf{t} e o estado de tensões em um ponto resulta a partir da imposição da condição do equilíbrio, ou seja, o somatório

Figura 76 – Representação esquemática das tensões em um corpo



das forças agindo em um objeto é igual a zero:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}A\cos(\theta) + \sigma_{xy}A\sin(\theta) &= t_x A, \\ \sigma_{xy}A\cos(\theta) + \sigma_{yy}A\sin(\theta) &= t_y A.\end{aligned}\quad (\text{E.3})$$

Reconhecendo que $\mathbf{n} = (\cos(\theta), \sin(\theta)) = (n_x, n_y)$ e simplificando, obtém-se as equações

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}n_x + \sigma_{xy}n_y &= t_x, \\ \sigma_{xy}n_x + \sigma_{yy}n_y &= t_y,\end{aligned}\quad (\text{E.4})$$

as quais podem ser reescritas conforme

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}.\quad (\text{E.5})$$

A transformação acima permite encontrar o estado de tensões para um sistema de coordenadas rotacionado em um ângulo θ .