

Mestrado Integrado em Engenharia Química

Instabilidades térmicas de fluidos não newtonianos

Tese de Mestrado

desenvolvida no âmbito da disciplina de

Dissertação em Ambiente Académico

Fabrice Antony Vinhas Moreira

FEUP



Universidade do Porto

Faculdade de Engenharia

FEUP

Departamento de Engenharia Química

Orientador na FEUP: **Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho**

Co-Orientador na FEUP: **Manuel António Moreira Alves**

Fevereiro de 2010

Agradecimentos

Quero deixar aqui o meu especial agradecimento aos meus orientadores, o Professor Fernando Manuel Coutinho Tavares de Pinho e Professor Manuel António Moreira Alves pela orientação e acompanhamento ao longo deste trabalho, e ainda pela disponibilidade no esclarecimento de dúvidas e resolução de problemas. Quero agradecer também ao meu colega Alexandre Miguel Prior Afonso por me ter ajudado na integração e na melhor compreensão deste mundo da reologia computacional. Finalmente quero agradecer à Fundação para a Ciência e Tecnologia pelo financiamento ao projecto “PTDC/MEM-MFE/70186/2006 - UNSTABLE”.

Resumo

A instabilidade de Rayleigh-Bénard é um tema bastante frequente em estudos teóricos, experimentais e numéricos. Estes fenómenos são caracterizados pela ocorrência de células de convecção no escoamento de um fluido em espaços confinados, quando sujeitos a um gradiente de temperaturas suficientemente elevado. Nesta tese foi realizado um estudo de “benchmark”, em cavidades bidimensionais de diversas razões de forma, de modo a obter com elevada precisão o número de Rayleigh crítico, tanto para um caso de um fluido newtoniano como para um fluido não-newtoniano representado pelo modelo constitutivo reológico de Phan-Thien-Tanner. Foram obtidos resultados para cavidades com razões de forma $AR = 1, 2, 5, 8, 16$ e 20 . Para cada cavidade foram também efectuadas simulações para malhas com diferentes níveis de refinamento. Por fim, apresentam-se resultados dos valores do número de Rayleigh crítico obtidos através da técnica da extrapolação para o limite de Richardson.

Palavras Chave (Tema): Reologia computacional, convecção Rayleigh-Bénard, método dos volumes finitos, fluido Phan-Thien-Tanner.

Abstract

There are many studies of the Rayleigh-Bénard convection instability due to its wide technical application in science and engineering. When a fluid contained in a enclosure is heated from below, above a certain critical value of the temperature gradient imposed the formation of convection cells occurs. This flow instability depends on the Rayleigh number and on the aspect ratio of the enclosure, for a two dimensional cavity filled with a Newtonian fluid. In this work several aspect ratio enclosures were investigated, with the goal of obtaining benchmark values of the critical Rayleigh number. Both Newtonian and non-Newtonian fluids were simulated, with the non-newtonian fluid being described by a Phan-Thien-Tanner rheological constitutive equation. Results were obtained for aspect ratios $AR = 1, 2, 5, 8, 16$ and 20 , and for each aspect ratio mesh refinement studies were done. Finally, results for the critical values of the Rayleigh number obtained by the Richardson extrapolation are presented.

Keywords:

Computational Rheology, Rayleigh-Bénard convection, finite volume method, Phan-Thien-Tanner fluid.

Índice de Figuras

<i>Figura 1 - (a) Esquema de uma cavidade e sistema de coordenadas; (b) Campo de temperaturas de uma cavidade aquecida na parede inferior e arrefecida na parede superior em condições subcríticas, quando a transferência de calor é promovida apenas por condução.</i>	<i>2</i>
<i>Figura 2 - Células de Convecção de Rayleigh Bénard.</i>	<i>3</i>
<i>Figura 3 - Representação gráfica de um excerto das histórias das oscilações da temperatura obtidas para o refinamento no tempo; (a) para três tempos de integração em que $C > B > A$; (b) para três tempos de integração em que $A > D > E$. (ver tabela 1)</i>	<i>11</i>
<i>Figura 4 - Representação gráfica de um excerto das histórias das oscilações da temperatura obtidos para o caso A, e para uma malha duplamente refinada A^*.</i>	<i>12</i>
<i>Figura 5 - Representação dos valores de temperatura ao longo de uma oscilação de temperatura obtidos por três técnicas diferentes. A - valores no centro da célula mais próxima do ponto 1; A' - instantes de A para o qual são retirados os restantes pontos; Int - valores obtidos nas coordenadas do ponto 1 por interpolação linear; Tec - valores obtidos nas coordenadas do ponto 1 por interpolação de Kriging.</i>	<i>13</i>
<i>Figura 6 - Comparação dos resultados obtidos com os resultados de “benchmark” de Guo e Bathe (2002), (a) perfil de temperaturas; (b) perfil de velocidades.</i>	<i>14</i>
<i>Figura 7 - (a) Malha de $AR = 2$, 51×25; Ampliação da zona assinalada em (a); (a) malha 51×25; (b) malha 101×51; (c) malha 201×101.</i>	<i>16</i>
<i>Figura 8 - (a) Malha de $AR = 5$; Ampliação da zona assinalada em (a); (b) malha 63×13; (c) malha 95×19; (d) malha 125×25; (e) malha 189×39; (f) malha 251×51.</i>	<i>17</i>
<i>Figura 9 - Esquema da técnica de extrapolação para o limite de Richardson.</i>	<i>20</i>
<i>Figura 10 - Ajuste linear para obtenção do R_c, para $AR = 1$.</i>	<i>21</i>
<i>Figura 11 - Valores de R_c para cada nível de refinamento em função de $\Delta y/H$ ($AR = 1$).</i>	<i>22</i>
<i>Figura 12 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e linhas de corrente para uma malha 201×201 e de $AR = 1$.</i>	<i>23</i>
<i>Figura 13 - Ajuste linear para obtenção do R_c, para $AR = 2$.</i>	<i>23</i>
<i>Figura 14 - Valores de R_c para cada refinamento em função de $\Delta y/H$ ($AR = 2$).</i>	<i>24</i>
<i>Figura 15 - Representação gráfica da evolução do parâmetro δ ao longo de uma simulação (a) para $AR = 1$; (b) para $AR = 2$.</i>	<i>25</i>
<i>Figura 16 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e linhas de corrente para uma malha 201×101 e de $AR = 2$.</i>	<i>26</i>

<i>Figura 17 - Ajuste linear para obtenção do R_c, para o caso de $AR = 5$.</i>	26
<i>Figura 18 - Valores de R_c para diferentes níveis de refinamento da malha.</i>	27
<i>Figura 19 - Erro absoluto entre R_c^{ext} e R_c obtido em cada refinamento em função de $\Delta y/H$.</i>	29
<i>Figura 20 - Mapas de temperatura e linhas de corrente para uma malha 251 x 51 e de $AR = 5$.</i>	29
<i>Figura 21 - Ajuste linear para obtenção do R_c, para o caso de $AR = 8$.</i>	30
<i>Figura 22 - Valores de R_c para cada refinamento em função de $\Delta y/H$.</i>	31
<i>Figura 23 - Erro absoluto entre R_c^{ext} e R_c obtido em cada nível de refinamento para $AR = 8$.</i>	32
<i>Figura 24 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e linhas de corrente para uma malha 401 x 51 e de $AR = 8$.</i>	33
<i>Figura 25 - Comparação dos resultados para o valor crítico do número de Rayleigh obtidos por Park e Ryu (2001a) com os resultados obtidos neste trabalho.</i>	33
<i>Figura 26 - Ajuste linear para obtenção do R_c, para o caso de $AR = 1$.</i>	34
<i>Figura 27 - Ajuste linear para obtenção do R_c, para o caso de $AR = 5$.</i>	35
<i>Figura 28 - Valores de R_c para cada refinamento em função de $\Delta y/H$.</i>	36
<i>Figura 29 - Erro relativo entre R_c^{ext} e R_c obtido em cada refinamento em função de $\Delta y/H$.</i>	37
<i>Figura 30 - Representação gráfica de δ em função de R para gamas de R supercríticas.</i>	38
<i>Figura 31 - mapas de temperatura (isotérmicas) e células de convecção para uma cavidade de $AR = 5$, para valores de R supercríticos; (a) $R = 323$; (b) $R = 357$; (c) $R = 1700$; (d) $R = 2250$; (e) $R = 3400$; (f) $R = 4250$; (g) $R = 8500$; (h) $R = 12750$.</i>	39
<i>Figura 32 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e células de convecção para uma cavidade de, (a) $AR = 16$; (b) $AR = 20$.</i>	40

Índice de Tabelas

<i>Tabela 1 - Valores do refinamento no tempo das simulações da figura 3.</i>	<i>12</i>
<i>Tabela 2 - Malhas usadas para cada razão de forma (AR) e características dos refinamentos.</i>	<i>15</i>
<i>Tabela 3 - Resultados de R_c para AR = 1, e comparação com os valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijckx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).</i>	<i>21</i>
<i>Tabela 4 - Resultados de R_c para AR = 2, e comparação com os valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijckx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).</i>	<i>24</i>
<i>Tabela 5 - Resultados de R_c para AR = 5, e comparação com valores da literatura.</i>	<i>27</i>
<i>Tabela 6 - Resultados da extrapolação para o limite de Richardson para AR = 5.</i>	<i>28</i>
<i>Tabela 7 - Resultados de R_c para AR = 8, e respectivo valor obtido por Park e Ryu (2001a).</i>	<i>30</i>
<i>Tabela 8 - Resultados da extrapolação para o limite de Richardson para AR = 8.</i>	<i>31</i>
<i>Tabela 9 - Resultados de R_c para AR = 5.</i>	<i>35</i>
<i>Tabela 10 - Resultados da extrapolação para o limite de Richardson para AR = 5.</i>	<i>36</i>

Índice

Índice de Figuras	vi
Índice de Tabelas	viii
Índice	i
Notação e Glossário	iii
1 Introdução e Estado da Arte	1
1.1 Enquadramento e Apresentação do Projecto	1
1.2 Organização da Tese	5
2 Teoria e Método Numérico	7
2.1 Equações Principais	7
2.1.1 Método Numérico.....	8
3 Validação do Método.....	11
3.1 Escoamentos com convecção natural.....	11
4 Apresentação e Discussão dos Resultados.....	15
4.1 Malhas.....	15
4.2 Fluido newtoniano.....	17
4.2.1 Razão de Forma, $AR = 1$	20
4.2.2 Razão de forma, $AR = 2$	23
4.2.3 Razão de forma, $AR = 5$	26
4.2.4 Razão de forma, $AR = 8$	29
4.3 Fluido não-newtoniano	34
4.3.1 Razão de Forma, $AR = 1$	34
4.3.2 Razão de forma, $AR = 5$	35
4.4 Outros Estudos	38
4.4.1 Rayleigh supercrítico em razão de forma, $AR = 5$	38
4.4.2 Células de convecção em razões de forma superiores	40
5 Conclusões	41
6 Avaliação do trabalho realizado.....	43

6.1	Objectivos Realizados	43
6.2	Outros Trabalhos Realizados	43
6.3	Limitações e Trabalho Futuro.....	44
	Referências	45
Anexo 1	Discretização das Equações Principais	49
1.1.1	Equação da conservação de massa	50
1.1.2	Equação da quantidade de movimento	51
1.1.3	Equação da conservação da energia térmica	54
1.1.4	Equação constitutiva reológica do modelo PTT	56

Notação e Glossário

AR	razão de forma	-
C_p	calor específico	J/(kg.K)
d	meia altura da geometria	m
F	caudal mássico	m ³ /s
g	aceleração gravítica	m/s ²
g_i	componente do vector aceleração da gravidade na direcção i	m/s ²
H	altura da cavidade	m
k	condutividade térmica	W/(m.K)
P_r	número adimensional de Prandtl	-
R	número adimensional de Rayleigh	-
R_c	número adimensional de Rayleigh crítico	-
R_c^{ext}	número adimensional de Rayleigh obtido por extrapolação	-
S_{ij}	taxa de deformação do tensor nas coordenadas ij	s ⁻¹
t	tempo	s
T	temperatura	K
T_a	temperatura da parede superior	K
T_f	temperatura da parede inferior	K
T^*	temperatura no ponto (x,y) da cavidade	K
T_i	temperatura na célula i	K
T_i^{cond}	temperatura esperada em condições de condução pura na célula i	K
$T^{média}$	temperatura média das paredes da cavidade	K
u_i	componente do vector velocidade na direcção i	m/s
V_i	volume da célula i	m ³
W	comprimento da cavidade	m
x_i	coordenada cartesiana segundo a direcção i	m

Letras gregas

α	parâmetro da equação da energia	-
β	coeficiente de expansão térmica	K ⁻¹
δ	parâmetro adimensional usado na quantificação da instabilidade de-Rayleigh-Bénard	-
ε	parâmetro do modelo PTT	-
ε_h^d	erro de discretização	*
η_p	viscosidade polimérica	Pa.s
η_s	viscosidade newtoniana (do solvente)	Pa.s
λ	tempo de relaxação	s
μ	viscosidade	Pa.s
ξ	parâmetro do modelo PTT	-
ρ	massa volúmica	kg/m ³
τ_{ij}	Componente ij da tensão extra	Pa
τ_h	erro de truncatura	*
ϕ	representação simbólica da solução de uma equação discretizada	*
Φ	representação simbólica da solução exacta de uma equação diferencial	*

* - a dimensão depende da variável em estudo.

Índices

i, j, k índices das coordenadas cartesianas

Lista de Siglas

CEFT Centro de Estudos de Fenómenos de Transporte

CFD Dinâmica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics)

CUBISTA Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection

PTT modelo de Phan-Thien-Tanner

FEUP Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

UDS Esquema de diferenças de montante de 1ª ordem (Upwind Differencing Scheme)

1 Introdução e Estado da Arte

1.1 Enquadramento e Apresentação do Projecto

São frequentes os sistemas de engenharia onde um fluido está contido num espaço confinado através do qual existe transmissão de calor. Algumas aplicações relevantes são, por exemplo, aquecimento e arrefecimento de edifícios, processos de drenagem de energia, colectores de energia solar, ou mesmo em técnicas de controlo de qualidade na indústria alimentar, nas indústrias farmacêuticas e de cosméticos, e também na indústria de polímeros. Nestas condições pode ocorrer o aparecimento de instabilidades que originam padrões de escoamento bem definidos e uma consequente variação dos coeficientes de transferência de calor. Os escoamentos que resultam desta instabilidade, conhecida como convecção de Rayleigh-Bénard, são também importantes do ponto de vista teórico e científico, daí que tenham sido alvo de vários estudos teóricos, experimentais e numéricos. Neste trabalho realizou-se um estudo numérico de precisão e referência (*benchmark*) à convecção de Rayleigh-Bénard numa cavidade horizontal 2D com várias razões de forma, $AR = W/H$ (ver figura 1(a) onde estão representadas a geometria e o sistema de coordenadas a usar neste trabalho), tanto para fluidos newtonianos, como para fluidos não newtonianos representados pelo modelo constitutivo reológico de Phan-Thien-Tanner (PTT) para fluidos viscoelásticos, considerando viscosidade do solvente nula. O estudo de instabilidades com estes fluidos com comportamentos não-lineares constitui aliás o objectivo último da linha de investigação em que se insere esta tese.

Considere-se uma cavidade horizontal aquecida na parede inferior, e arrefecida na parede superior. Este gradiente de temperaturas imposto vai causar a expansão térmica do fluido mais próximo da parede inferior, tornado este menos denso que o fluido no topo da cavidade. Enquanto o gradiente de temperatura for pequeno, as forças viscosas inibem qualquer movimento do fluido (Chandrasekhar, 1961) e a transferência de calor dá-se apenas por condução. Contudo, este arranjo é potencialmente instável e o potencial gravítico tenta forçar a redistribuição do fluido, que vai ocorrer a partir de uma condição crítica. Em condições subcríticas, teremos a situação da figura 1(b) onde se representa o campo de temperaturas numa situação em que não há movimento de fluido e a transferência de calor ocorre exclusivamente por condução.

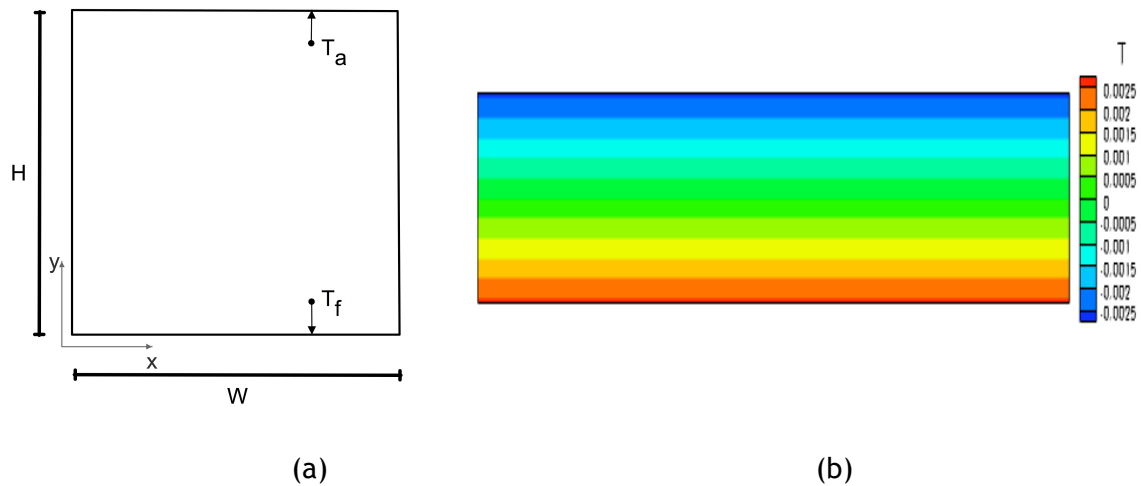


Figura 1 - (a) Esquema de uma cavidade e sistema de coordenadas; (b) Campo de temperaturas de uma cavidade aquecida na parede inferior e arrefecida na parede superior em condições subcríticas, quando a transferência de calor é promovida apenas por condução.

Os primeiros estudos experimentais sobre as instabilidades térmicas de fluidos newtonianos foram realizados por Bénard em 1900. Bénard basicamente concluiu que para que ocorra a instabilidade de um fluido, primeiro é necessário atingir um certo gradiente de temperaturas crítico. Bénard também observou que o movimento do fluido criado pela ocorrência da instabilidade originava o aparecimento de um padrão periódico de células de convecção onde o fluido se deslocava de forma bem definida (Drazin, 2002). Posteriormente, Rayleigh mostrou que numa camada de fluido aquecida por baixo o parâmetro quantitativo que permite verificar a ocorrência de instabilidade é dado por:

$$R = \frac{g\beta\Delta T d^3 \rho^2 C_p}{\mu k} \quad (1)$$

em que g representa a aceleração gravítica, β o coeficiente de expansão térmica, ΔT a diferença de temperaturas imposta ($\Delta T = T_f - T_a$), d o comprimento característico da geometria, que no caso vertente é a altura H , ρ a massa volúmica, C_p o calor específico, μ a viscosidade, e k a condutividade térmica; R é então uma quantidade física adimensional, denominado número de Rayleigh. De notar que neste trabalho, usou-se como dimensão característica da geometria a sua meia altura. O valor para o qual ocorre instabilidade e consequentemente movimento de fluido é chamado de número de Rayleigh crítico, R_c . Na Figura 2 pode ser observado um esquema de uma cavidade no interior da qual o movimento de fluido induzido por acção de um gradiente de temperatura, formou cinco células de

convecção de Rayleigh-Bénard. Note-se que ao longo deste trabalho sempre que se representarem mapas de temperatura, a temperatura apresentada é $T = T^* - T^{média}$ em que T^* é a temperatura nesse ponto, e $T^{média}$ a temperatura média das duas paredes.

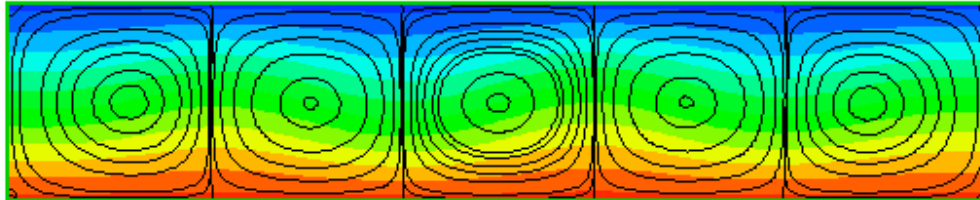


Figura 2 - Células de Convecção de Rayleigh Bénard.

À medida que se vai aumentando o número de Rayleigh, logo após a formação das primeiras células de convecção de Rayleigh-Bénard, o escoamento vai adoptando diferentes configurações no seu movimento, acabando por gerar um escoamento cada vez mais complexo e dependente do tempo, resultando posteriormente em turbulência. Ao longo destas transições podem ocorrer bifurcações no comportamento do fluido, e o caminho que o seu escoamento adopta desde a estabilidade até à turbulência pode variar.

Gollub e Benson (1980) mostraram no seu trabalho diferentes trajectórias de instabilidade que um fluido pode adoptar até à turbulência na convecção de Rayleigh-Bénard. Mukutmoni e Yang (1993a, 1993b, 1995) também estudaram este fenómeno das bifurcações, verificando diferentes transições no escoamento à medida que variavam o número de Rayleigh. Para cavidades de razão de forma superiores a 5, verifica-se que aumentando R para valores pouco superiores ao valor crítico o escoamento torna-se imediatamente turbulento, como foi demonstrado experimentalmente por Behringer (1985). O número de células de convecção numa cavidade depende da razão de forma e de R , e é inversamente proporcional ao número adimensional de comprimento de onda. O número de comprimento de onda é proporcional à razão entre o diâmetro da célula de convecção e a altura da cavidade (H), ou seja, é um parâmetro quantitativo da característica da célula de convecção. O estudo numérico de Schlutter et al. (1965) prevê para uma determinada razão de forma, a diminuição do número de comprimento de onda (aumento do número de células de convecção), com o aumento de R em condições supercríticas, contudo, resultados experimentais contraditórios a estes resultados numéricos foram obtidos por Koschmieder (1969). Motivado por estas diferenças, e tendo em conta os resultados de Mukutmoni e Yang (1992), Hernandez (1995) realizou um estudo em regime transiente que verificasse a influência do aumento do gradiente de temperaturas imposto na evolução do escoamento. Gelfgat (1999) apresenta no seu trabalho um estudo paramétrico de “benchmark” 2D e 3D ao

problema da convecção de Rayleigh-Bénard em que são representadas curvas que mostram a variação do número de Rayleigh crítico em função da razão de forma da cavidade. Dentro dos estudos numéricos também se pode citar o trabalho de Getling (2003) que numa geometria 3D estudou a evolução dos movimentos de fluido nas células de convecção num plano horizontal, verificando que ao longo do tempo as células de convecção iam adoptando várias formas procurando evoluir para o estado de equilíbrio. Lir e Lin (2001) também procuraram observar experimentalmente num plano horizontal, a formação das células de convecção e os padrões geométricos por elas formados numa cavidade. Devido à vasta gama de aplicações técnicas são vários os estudos de transferência de calor em cavidades. Por exemplo, Bairi (2008) apresenta resultados experimentais e numéricos para diferentes configurações de uma cavidade com o objectivo de apresentar correlações que permitam o projecto de situações reais da indústria. Embora na sua maioria estes trabalhos explorem cavidades cuja face de maiores dimensões está orientada horizontalmente, existem outros que exploram cavidades “verticais” como por exemplo o estudo de D’Orazio et al. (2004). Podem ainda ser enumerados outros exemplos de estudos numéricos de transferência de calor em cavidades, como por exemplo Kao e Yang (2007), Ouertatani et al. (2008) e Brito et al. (2009).

Mais recentemente estas investigações começaram a ser efectuadas em sistemas operando com fluidos não-newtonianos, embora estes não sejam tão frequentes como para fluidos newtonianos. Park et al. (2001a, 2001b, 2002, 2004) estudaram numericamente o problema da convecção de Rayleigh-Bénard numa cavidade horizontal 2D para um fluido não-newtoniano representado por uma equação constitutiva geral, que engloba os modelos convectivo superior de Maxwell, Oldroyd-B e Phan-Thien-Tanner. Nos seus trabalhos foram analisados os efeitos da razão de forma, do gradiente de temperaturas imposto, do número de Débora, e do tempo de retardação adimensional no valor crítico do número de Rayleigh e no tamanho das células de convecção. Infelizmente estes trabalhos não são totalmente explícitos em relação a alguns parâmetros e definições de números adimensionais, tornando a sua compreensão bastante complexa. Outro exemplo é o trabalho de Demir (2003), em que se estudou numericamente o escoamento de um fluido viscoelástico descrito pelo modelo de Criminale-Erikson-Filbey (CEF) numa cavidade quadrada.

Neste trabalho procurou-se validar e comparar os resultados obtidos com os trabalhos de Park et al. (2001a, 2001b, 2002, 2004) e de Gelfgat (1999). Gelfgat (1999) compara os seus resultados com os de Luijkx e Platten (1981), como tal também iremos incluir estes resultados nas comparações efectuadas. As simulações numéricas foram realizadas num código de simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos descrito pelo modelo constitutivo de Phan-Thien-Tanner (Oliveira et al. 1998; Alves et al. 2003).

1.2 Organização da Tese

No capítulo 2, é feita a descrição das equações principais inerentes à simulação de escoamentos de fluidos. Após a apresentação das equações principais é feita uma descrição do método numérico utilizado na resolução destas equações que aí figuram na sua forma discretizada.

No capítulo 3, é descrito um estudo de validação da implementação da equação da conservação da energia térmica no código de simulação. Esta validação é feita através da simulação do escoamento de um fluido por convecção natural no interior de uma cavidade vertical. Estes resultados são validados através da comparação com os resultados de referência de Guo e Bathe (2002).

No capítulo 4, é feita a descrição do processo de obtenção de resultados bem como os valores obtidos para cada situação estudada. São ainda referidos dois estudos adicionais que apenas servem de referência a eventuais futuros aprofundamentos no tema.

Finalmente nos capítulos 5 e 6 descrevem-se as conclusões e resultados finais obtidos, e tecem-se as considerações finais relativas a este trabalho.

2 Teoria e Método Numérico

2.1 Equações Principais

As equações principais necessárias à simulação numérica do escoamento e da transferência de calor do fluido PTT são a equação da conservação de massa,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2)$$

a equação da quantidade de movimento,

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \eta_s \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (3)$$

e a equação da conservação de energia térmica,

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho C_p u_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \eta_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \alpha \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + (1-\alpha) \frac{\tau_{ij}}{2\lambda} f(\tau_{kk}) \quad (4)$$

em que u_i representa o vector velocidade no sistema cartesiano x_i , p a pressão, t o tempo, T a temperatura do fluido, g_i o vector aceleração da gravidade. O fluido é representado pela soma da contribuição de um solvente newtoniano de viscosidade η_s com uma contribuição polimérica cujo tensor extra das tensões é τ_{ij} , que é descrito pela equação constitutiva reológica. A equação da conservação de energia térmica inclui o efeito da dissipação viscosa do solvente newtoniano, bem como os dois últimos termos do ramo direito da equação que representam a energia mecânica do fluido de PTT.

A equação constitutiva reológica adoptada é a do modelo de Phan-Thien-Tanner,

$$\phi(T) f(\tau_{kk}) + \lambda \left[\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \xi (\tau_{jk} S_{kj} + S_{ik} \tau_{kj}) \right] - \lambda TH_T \left(\tau_{ij} + \frac{\eta_p}{\lambda} \delta_{ij} \right) = \eta_p \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5)$$

em que λ representa o tempo de relaxação do fluido, η_p o coeficiente da viscosidade do polímero, $S_{ij} = (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i) / 2$ é o tensor taxa de deformação e ξ é um parâmetro adimensional que contabiliza o deslizamento entre a rede molecular e o meio contínuo. Este modelo caracteriza-se pelo facto de prever o aparecimento de tensões normais na direcção transversal num escoamento de corte, de que resulta uma segunda diferença de tensões

normais (N_2) não-nula. É possível obter o modelo simplificado de PTT fazendo $\xi = 0$ (neste caso $N_2 = 0$). A função $f(\tau_{kk})$ é uma função exponencial do traço do tensor das tensões,

$$f(\tau_{kk}) = \exp\left(\frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{kk}\right) \quad (6)$$

que aqui é utilizada numa forma linearizada alternativa,

$$f(\tau_{kk}) = 1 + \frac{\varepsilon\lambda}{\eta_p} \tau_{kk} \quad (7)$$

em que nesta função ε é um parâmetro que limita a viscosidade elongacional (esta é inversamente proporcional a ε para valores baixos de ε).

Em simulações com convecção natural o termo gravítico do lado direito da equação (3), tem de ser contabilizado e a variação da massa volúmica com a temperatura é descrita segundo a aproximação de Boussinesq,

$$\rho g_i = \rho_0 g_i + \beta(T - T_0)g_i \quad (8)$$

em que o índice 0, é utilizado de forma a indicar um estado de referência.

2.1.1 Método Numérico

Existem três métodos principais para discretizar as equações diferenciais usadas no cálculo de escoamentos: o método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos, e o método dos volumes finitos. A vantagem deste último reside por um lado na conservação de quantidades físicas inerente à integração que é feita inicialmente e nos menores recursos computacionais necessários, um aspecto de grande relevância especialmente quando se trata de fluidos viscoelásticos devido ao aumento de equações a resolver. No entanto, os métodos de elementos e volumes finitos hoje já não são sempre utilizados na sua forma original, mas incorporam aspectos específicos dos seus concorrentes.

No método dos volumes finitos as equações são integradas em cada volume de controlo da malha onde o escoamento é processado garantindo a conservação das propriedades físicas. As equações integrais são então discretizadas com diferenças finitas a substituir as derivadas, transformando-se num conjunto de equações algébricas em que as incógnitas são os valores nodais de cada uma das propriedades do escoamento (velocidades, pressão, tensões e temperaturas) em cada volume de controlo. As equações (2) a (5) estão escritas para um sistema de coordenadas ortogonais. A sua discretização numa malha geral

em volumes finitos, em células de 6 faces não ortogonais, requer que sejam reescritas para um sistema mais geral de coordenadas não-ortogonal, após o que é feita a sua integração e posterior discretização como está descrito em Oliveira et al. (1998) e no anexo 1 desta tese. Desse conjunto de procedimentos resultam as seguintes equações algébricas.

- equação da conservação de massa,

$$\sum_{f=1}^6 F_f = 0 \quad (9)$$

- equação da quantidade de movimento,

$$a_p u_{i,p} - \sum_F a_F u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,p}^o \quad (10)$$

- a equação da conservação de energia térmica,

$$a_p T_p - \sum_F a_F T_F = S_T + \frac{\rho C_p V_P}{\delta t} T_p^o \quad (11)$$

- a equação constitutiva reológica do modelo PTT,

$$a_p \tau_{ij,p} - \sum_{F=1}^6 a_F \tau_{ij,F} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_p V_P}{\delta t} \tau_{ij,p}^o \quad (12)$$

De notar que Oliveira et al. (1998) não inclui a resolução da equação da energia térmica, mas a sua inclusão no processo foi feita por Nóbrega (2004), e a sua validação pode ser encontrada em Nóbrega et al (2004). Este conjunto de equações é então resolvido sequencialmente de acordo com o algoritmo SIMPEC de Van Doormal e Raithby (1984) descrito de forma sucinta no parágrafo seguinte, já incluindo a equação da energia.

Inicialmente são resolvidas as seis equações constitutivas de forma implícita, para se obter as componentes da tensão τ_{ij} . Isto é feito anteriormente à resolução das três equações da quantidade de movimento visto que estas necessitam da informação do campo de tensões. Em seguida são resolvidas as três equações da quantidade de movimento para obter cada componente da velocidade u_i^* , no entanto estes valores calculados das componentes da velocidade geralmente não satisfazem a equação da conservação da massa, portanto o próximo passo do algoritmo de resolução passa por fazer uma correcção à velocidade, u_i^* , e à pressão, p^* , de forma a que os valores corrigidos, u_i^{**} e p^{**} , satisfaçam simultaneamente a equação da conservação de massa e a equação da quantidade de movimento. Segue-se a

resolução implícita da equação da energia térmica que permite obter novos valores da temperatura. O algoritmo é repetido para o novo passo no tempo e assim sucessivamente.

Estas equações e método estão implementados num código de simulação de escoamentos de fluidos complexos desenvolvido no Centro de Estudos de Fenómenos de Transporte (CEFT), da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto (FEUP). Uma descrição mais detalhada deste código e do método numérico pode ser encontrada em Oliveira et al. (1998), Alves et al. (2003) e Peres et al. (2009).

3 Validação do Método

3.1 Escoamentos com convecção natural

A implementação da convecção natural no algoritmo de cálculo foi testada simulando o caso “benchmark” de Guo e Bathe (2002), que consiste no escoamento de um fluido newtoniano dentro uma cavidade de razão de forma igual a 1:8. Para além do trabalho prévio realizado por Peres et al. (2009), foram aqui realizadas simulações em estado transiente que são as que reproduzem adequadamente o escoamento dependente do tempo analisado por Guo e Bathe (2002). Nesta situação, é imposta uma diferença de temperaturas de 1°C nas paredes verticais, estando uma à temperatura de -0.5°C e outra à temperatura de 0.5°C . As paredes horizontais são adiabáticas. O fluxo foi estudado para as condições supercríticas de $R = 3.4 \times 10^5$ e de $Pr = \mu C_p / k = 0.71$.

Foram também efectuados refinamentos no tempo e no espaço de forma a garantir maior confiança nos resultados e garantir a independência dos resultados com o grau de refinamento da malha e do passo de integração temporal. Na figura 3 mostra-se o estudo feito para o refinamento no tempo para uma malha com 61×271 células ($\Delta x/W = 0.0164$ e $\Delta y/W = 0.0295$).

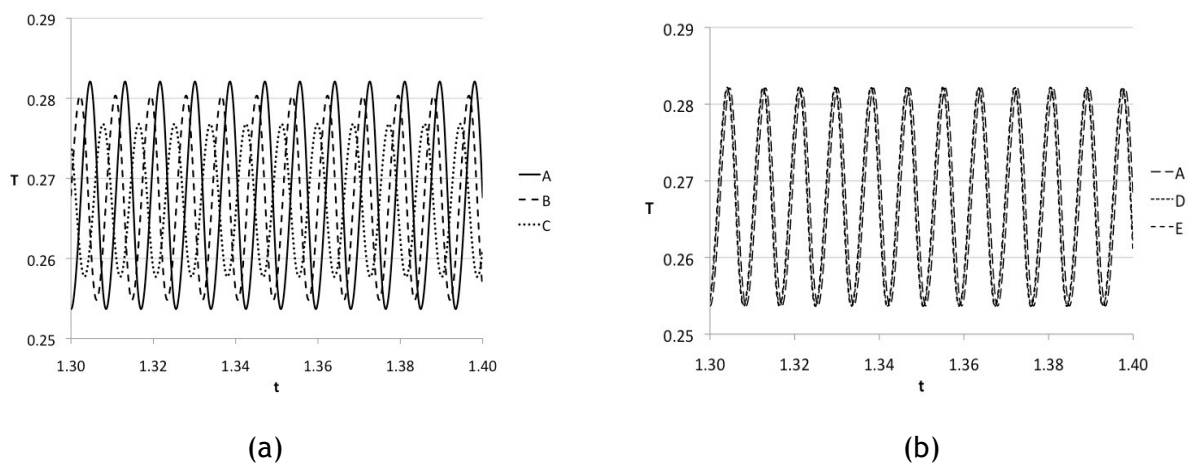


Figura 3 - Representação gráfica de um excerto das histórias das oscilações da temperatura obtidas para o refinamento no tempo; (a) para três tempos de integração em que $C > B > A$; (b) para três tempos de integração em que $A > D > E$. (ver tabela 1)

Na figura 3 estão representados as histórias das oscilações da temperatura, T , no ponto 1 ($x/W = 0.1810$ e $y/W = 7.3700$) (Christon et al., 2002) ao longo do tempo de simulação, t . Pela visualização da figura 3 (a) é possível verificar que à medida de que se diminui o passo no tempo ($C > B > A$), as oscilações tendem para um resultado constante, que pode ser verificado na figura 3(b) ($A > D > E$). Na tabela 1 estão representados os valores usados no refinamento no tempo apresentados na figura 3.

Tabela 1 - Valores do refinamento no tempo das simulações da figura 3.

Simulação	$\Delta t/s$
E	1.25×10^{-5}
D	2.5×10^{-5}
A	5×10^{-5}
C	25×10^{-5}
B	35×10^{-5}

Na figura 4 mostram-se os resultados obtidos para o refinamento no espaço em duas malhas de refinamentos diferentes.

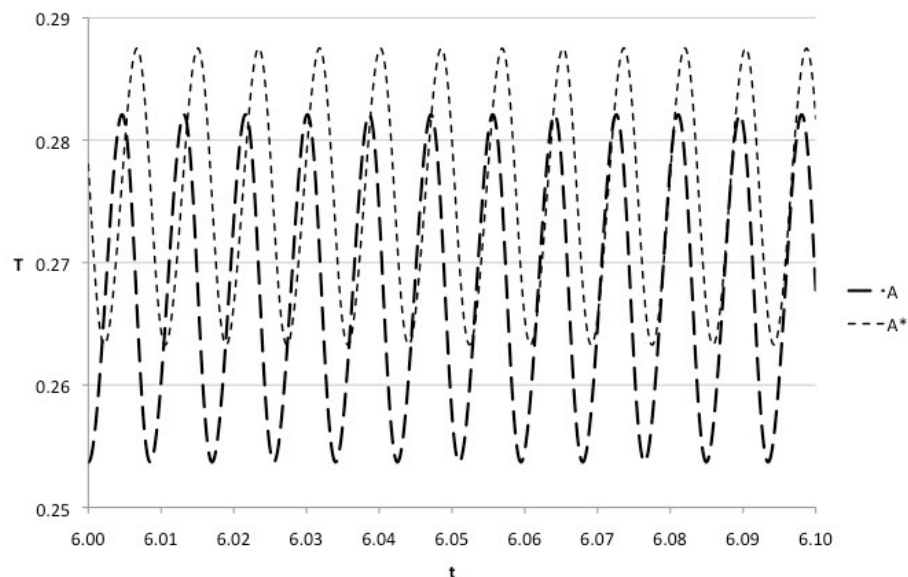


Figura 4 - Representação gráfica de um excerto das histórias das oscilações da temperatura obtidos para o caso A, e para uma malha duplamente refinada A*.

Pode-se verificar pela análise da figura 4 que os resultados obtidos para o caso A (mesma malha usada no refinamento no tempo), e para o caso de uma malha duplamente refinada A* (de 123 x 543 células com $\Delta x/W = 0.00813$ e $\Delta y/W = 0.00147$), não são exactamente concordantes. Isto verifica-se devido ao facto de os resultados aqui apresentados serem os valores para a história das temperaturas no centro da célula mais próxima do *ponto 1*, para a respectiva malha. Quando a malha é refinada o local onde são retirados os valores difere ligeiramente. Esta análise pode ser verificada com mais detalhe na figura 5, em que se apresentam os valores de temperatura obtidos na malha com 61 x 271 células por três métodos diferentes ao longo de um ciclo oscilatório de temperatura para a simulação A já apresentada nas figuras anteriores relativas ao refinamento no espaço e no tempo.

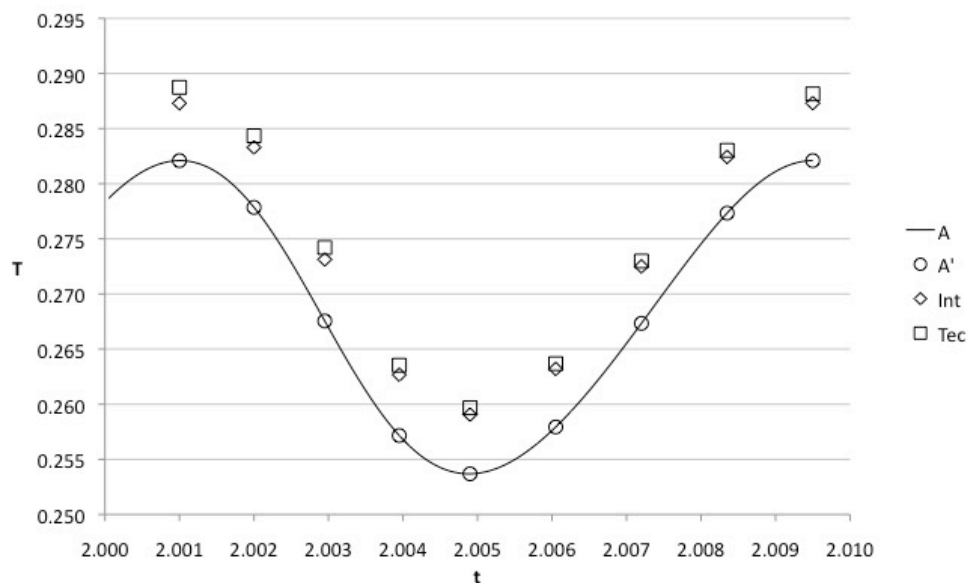


Figura 5 - Representação dos valores de temperatura ao longo de uma oscilação de temperatura obtidos por três técnicas diferentes. A - valores no centro da célula mais próxima do *ponto 1*; A' - instantes de A para o qual são retirados os restantes pontos; Int - valores obtidos nas coordenadas do ponto 1 por interpolação linear; Tec - valores obtidos nas coordenadas do *ponto 1* por interpolação de Kriging.

Pela figura 5 é possível observar que os valores de temperatura ao longo um ciclo oscilatório são diferentes consoante o método usado para os obter devido a cada um destes métodos retirarem a informação em diferentes locais da célula. Os resultados obtidos em A foram obtidos pelo ficheiro de resultados da simulação, e os seus valores são retirados no centro da célula mais próxima do *ponto 1*. Os pontos A' apenas estão presentes para identificar o instante do ciclo oscilatório A em que foram retirados os valores pelos restantes métodos. Em

Int os valores são calculados por interpolação linear nas coordenadas exactas do *ponto 1*. Finalmente em *Tec* usou-se o software *Tecplot 10* para tratar o ficheiro de resultados e retirar o valor da temperatura nas coordenadas do *ponto 1*, sendo o método usado neste software a interpolação de Kriging.

Na figura 6 mostram-se os resultados obtidos para este estudo, comparados com os de Guo e Bathe (2002).

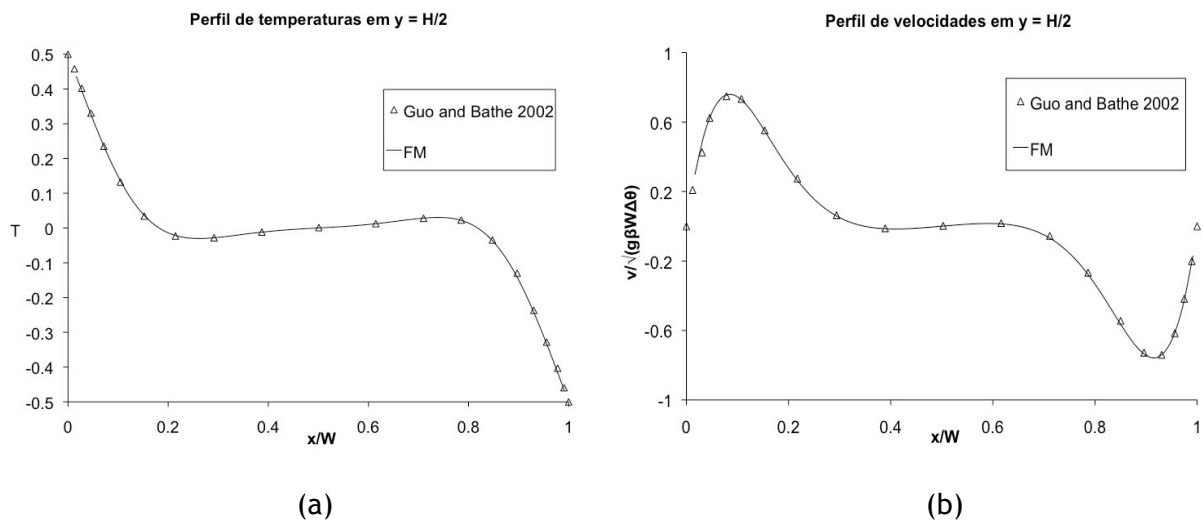


Figura 6 - Comparação dos resultados obtidos com os resultados de “benchmark” de Guo e Bathe (2002), (a) perfil de temperaturas; (b) perfil de velocidades.

Como é possível observar na figura 6, as simulações realizadas reproduziram de forma satisfatória os resultados obtidos por Guo e Bathe (2002), tanto para o perfil de velocidades, como para o perfil de temperaturas no plano $y = H/2$. Na figura 6 representa-se os valores médios de cada grandeza ao longo de um ciclo de oscilação.

Os resultados apresentados nesta secção mostram a boa precisão numérica que é possível alcançar com o código de simulação, ficando assim demonstrado a implementação adequada da equação da conservação de energia.

4 Apresentação e Discussão dos Resultados

Ao longo deste capítulo será feita a descrição do trabalho realizado e dos resultados obtidos. Para o caso do escoamento de um fluido newtoniano foram estudadas diversas malhas com refinamentos diferentes para as razões de forma $AR = 1$, $AR = 2$, $AR = 5$ e $AR = 8$. Para o caso de um fluido não newtoniano apresentam-se os resultados nas mesmas malhas do caso newtoniano para as razões de forma $AR = 1$ e de $AR = 5$. São ainda apresentados resultados de uma análise ao padrão do escoamento quando o número de Rayleigh é aumentado para elevados valores supercríticos, para a razão de forma $AR = 5$, e ainda ao número de células de convecção à medida que se aumenta a razão de forma. De notar que estes últimos estudos são aqui incluídos numa forma ainda bastante superficial, e que apenas servem de referência para eventuais futuros aprofundamentos neste tema.

4.1 Malhas

Nesta secção mostram-se todas as malhas uniformes criadas que foram usadas nas simulações numéricas ao longo deste trabalho. Na tabela 2 exhibe-se a lista integral de todas as razões de forma e respectivos refinamentos usados.

Tabela 2 - Malhas usadas para cada razão de forma (AR) e características dos refinamentos.

Malha	$AR = 1$	$\Delta x/H$	$AR = 2$	$\Delta x/H$	$AR = 5$	$\Delta x/H$	$AR = 8$	$\Delta x/H$
		$\Delta y/H$		$\Delta y/H$		$\Delta y/H$		$\Delta y/H$
A	51 x 51	0.0196	51 x 25	0.0392	63 x 13	0.0794	101 x 13	0.0792
		0.0196		0.0400		0.0769		0.0769
B	101 x 101	0.0099	101 x 51	0.0198	95 x 19	0.0526	201 x 25	0.0769
		0.0099		0.0196		0.0526		0.0400
C	201 x 201	0.0050	201 x 101	0.0100	125 x 25	0.0400	401 x 51	0.0200
		0.0050		0.0099		0.0400		0.0196
D	---	---	---	---	189 x 39	0.0265	---	---
		---		---		0.0256		---
E	---	---	---	---	251 x 51	0.0199	---	---
		---		---		0.0196		---

Na Figura 7 ilustra-se a malha menos refinada para $AR = 2$ e um zoom dos refinamentos usados na vizinhança do canto $(x,y) = (0,0)$.

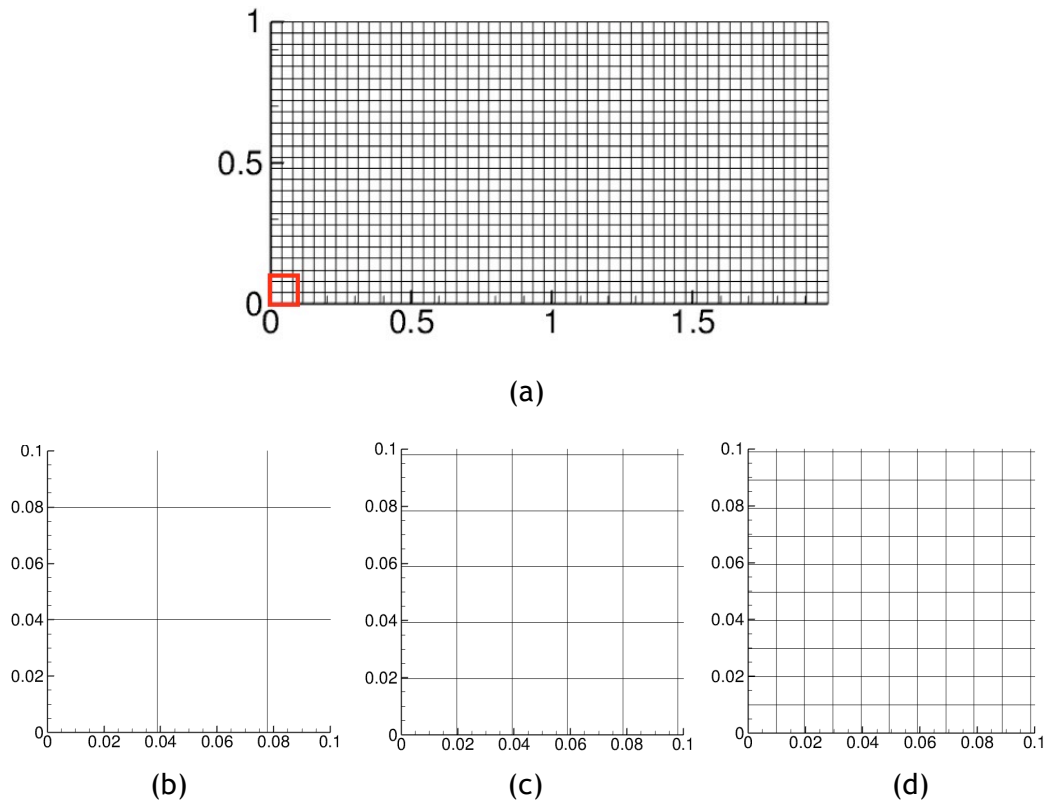


Figura 7 - (a) Malha de $AR = 2$, 51×25 ; Ampliação da zona assinalada em (a); (a) malha 51×25 ; (b) malha 101×51 ; (c) malha 201×101 .

Na figura 8 mostra-se a malha menos refinada para $AR = 5$, e um zoom dos respectivos refinamentos utilizados na vizinhança do canto $(x,y) = (0,0)$.

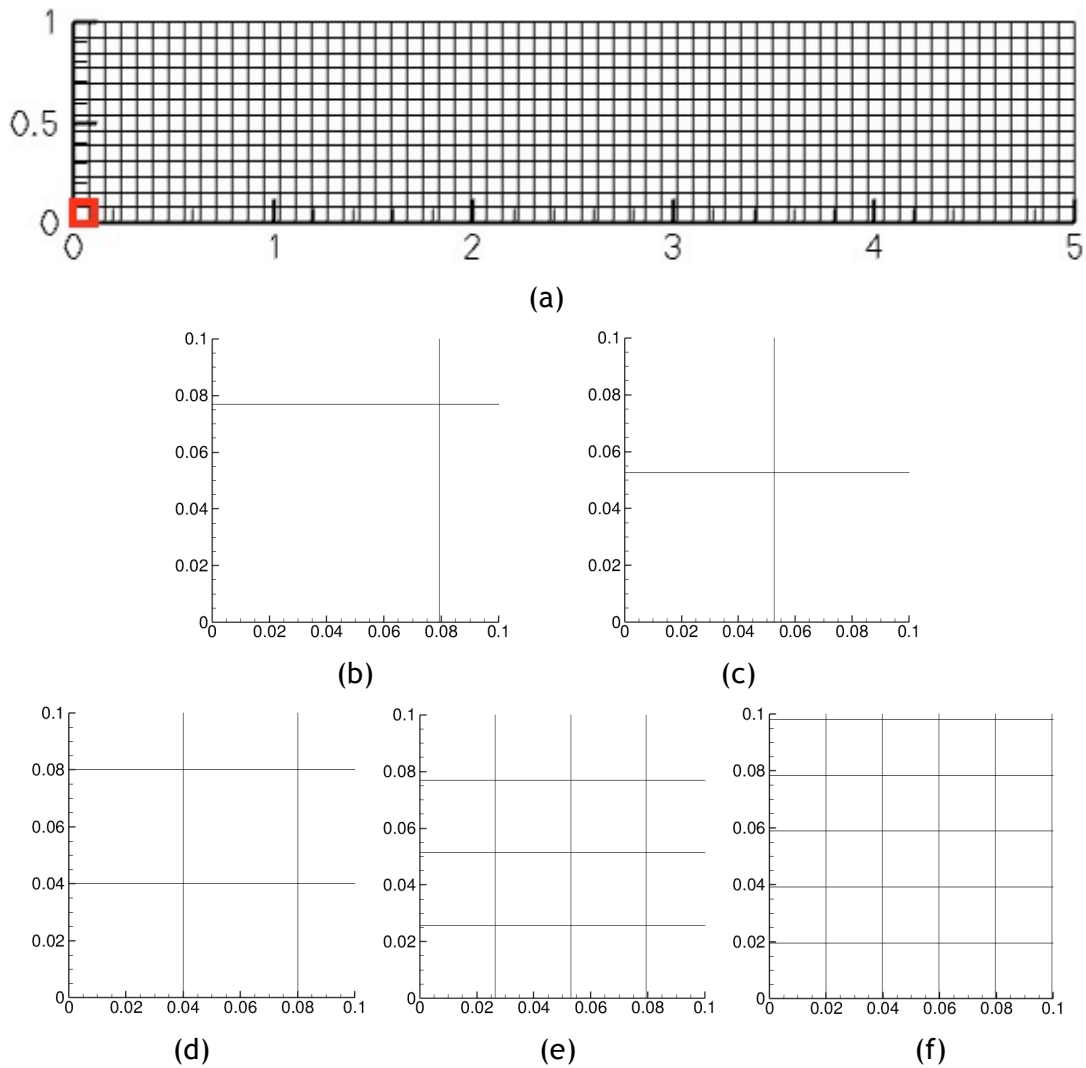


Figura 8 - (a) Malha de $AR = 5$; Ampliação da zona assinalada em (a); (b) malha 63×13 ; (c) malha 95×19 ; (d) malha 125×25 ; (e) malha 189×39 ; (f) malha 251×51 .

4.2 Fluido newtoniano

Nesta secção analisam-se os resultados obtidos nas simulações para o caso de um fluido newtoniano.

Para determinar o valor de R_c relativo a cada geometria foram realizadas várias simulações em que se variava a diferença de temperaturas imposta, ΔT , analisando-se, na solução convergida, o desvio no perfil de temperaturas em relação ao perfil de temperatura para condução pura, que é a solução térmica para condições estáticas (ausência de escoamento). Esse desvio é quantificado pelo parâmetro δ , definido por

$$\delta = \frac{1}{\Delta T^2} \frac{\sum_{i=1}^{\text{n}^\circ \text{células}} (T_i - T_i^{\text{Cond}})^2 V_i}{\sum_{i=1}^{\text{n}^\circ \text{células}} V_i} \quad (13)$$

em que T_i e T_i^{Cond} , são a temperatura na célula i , e a temperatura esperada em condições de condução pura na célula i , respectivamente, e V_i é o volume da célula i . Como se verá mais adiante, para malhas bastante refinadas e desde que a simulação numérica seja feita acima do valor crítico, δ varia de forma aproximadamente linear com o número de Rayleigh. Assim, para cada malha efectuaem-se várias simulações em condições supercríticas sendo possível determinar o valor de R_c , extrapolando a recta de ajuste para $\delta = 0$. Podemos repetir este processo para outras malhas diferentes, mas suficientemente refinadas para estarmos em condições de convergência monótona. A partir deste conjunto de valores de R_c para diversas malhas utilizou-se ainda a técnica de extrapolação para o limite de Richardson (Ferziger, 1981) para se obter um valor ainda mais preciso de R_c .

As equações discretizadas são uma aproximação das equações diferenciais, como tal, a solução destas últimas, Φ , não satisfaz as primeiras de forma exacta. A esta diferença entre as soluções das equações diferenciais e algébricas é chamada de erro de truncatura. Para uma malha de espaçamento h , o erro de truncatura, τ_h é definido como sendo,

$$L(\Phi) = L_h(\Phi) + \tau_h = 0, \quad (14)$$

em que L e L_h são operadores simbólicos representando a equação diferencial e a equação discretizada para a malha h , respectivamente. A solução exacta das equações discretizadas, ϕ_h , pode ser escrita de forma linearizada como (Ferziger e Perić, 1996),

$$L_h(\phi_h) = (A\phi - Q)_h = 0. \quad (15)$$

Como tal, a solução discretizada, irá diferir da solução exacta da equação diferencial, num erro de discretização, ε_h^d ,

$$\Phi = \phi_h + \varepsilon_h^d. \quad (16)$$

Das equações (14) e (15) é possível aferir que,

$$L_h(\varepsilon_h^d) = -\tau_h. \quad (17)$$

Assim, é possível usar a informação sobre a magnitude do erro de truncatura como forma de orientação de modo a saber qual o refinamento da malha mais adequado ao caso em estudo, mas a solução exacta, Φ , não é conhecida, logo não é possível obter o erro de truncatura,

contudo é possível obter uma aproximação de τ_h a partir de uma malha mais refinada (ou menos grosseira). Esta estimativa nem sempre permite obter valores correctos, mas pode permitir averiguar se a zona em que se está a trabalhar, requer uma malha mais refinada de modo a diminuir os erros associados. Para malhas suficientemente refinadas, o erro de truncatura, bem como o erro de discretização, são proporcionais ao termo de ordem menos elevada da aproximação usada, que numa série de Taylor é

$$\varepsilon_h^d \approx \alpha h^p + H, \quad (18)$$

em que H representa o conjunto dos termos de ordem superior que foram desprezados, e α depende das derivadas locais da função erro que é independente de h . O erro de discretização pode ser agora estimado através da diferença entre os resultados obtidos para várias malhas com refinamentos sistemáticos por duplicação do número de células. Pelas equações (16) e (18) é possível escrever

$$\Phi = \phi_h + \alpha h^p + H = \phi_{2h} + \alpha (2h)^p + H, \quad (19)$$

onde o expoente p é a ordem do método, e pode ser estimado por (Ferziger e Perić, 1996)

$$p = \frac{\log\left(\frac{\phi_{2h} - \phi_{4h}}{\phi_h - \phi_{2h}}\right)}{\log 2}. \quad (20)$$

Nas equações (19) e (20) os índices h , $2h$ e $4h$ designam as malhas mais refinada, intermédia, e mais grosseira, respectivamente de um qualquer conjunto de três malhas. Da equação (19) também é possível escrever que o erro de discretização, ε_h^d , pode ser aproximado por

$$\varepsilon_h^d \approx \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^p - 1}. \quad (21)$$

Com esta estimativa do erro podemos estimar um valor mais preciso da solução que resulta de se substituir a equação (21) na equação (16) resultando,

$$\Phi = \phi_h + \frac{\phi_h - \phi_{2h}}{2^p - 1} \quad (22)$$

Note-se que se a razão de refinamento em malhas sequenciais for diferente de dois, então o valor 2 nas equações (21) e (22) deverá ser substituído pela razão de refinamento em causa. Quando são obtidas as soluções para 3 malhas com refinamentos sistemáticos é possível obter uma aproximação de Φ , que é um valor mais preciso do que o valor obtido para a malha mais refinada, por contar com a estimativa do erro da equação (21), em ϕ_h . Este método é

chamado de “extrapolação para o limite” de Richardson. Note-se que a ordem de convergência do método estimada pela equação (20), é apenas válida quando a convergência é monótona, e esta situação apenas se manifesta quando as malhas são suficientemente refinadas e estamos relativamente próximos da solução exacta.

A técnica da extrapolação para o limite de Richardson pode utilizar-se várias vezes, numa estrutura em árvore como a que se esquematiza na Figura 9, pois em cada aplicação está-se a eliminar o termo de maior erro, i.e., o primeiro termo que se despreza é de ordem cada vez mais superior. Assim, para cada caso usar-se-á a equação (20) para se calcular a ordem de convergência do método, e depois utiliza-se a equação (22) para se obter um valor mais preciso de R_c . Este processo pode ser repetido consoante o número de refinamentos usados, permitindo com três malhas apenas com refinamentos suficientemente próximos da solução exacta, conseguir um resultado mais preciso, do que seria possível no resultado dumha malha sete vezes mais refinada do que a malha original (Ferziger, 1981).

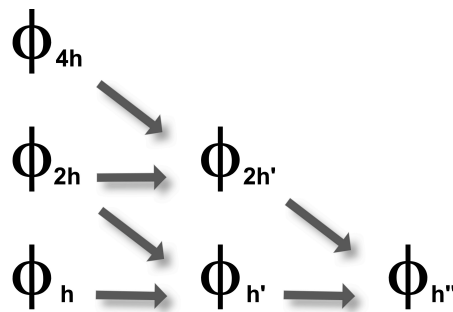


Figura 9 - Esquema da técnica de extrapolação para o limite de Richardson.

4.2.1 Razão de Forma, $AR = 1$

Na figura 10 apresentam-se os resultados obtidos para as diversas malhas usadas para $AR = 1$, e as respectivas rectas de ajuste dos valores supercríticos de δ vs R .

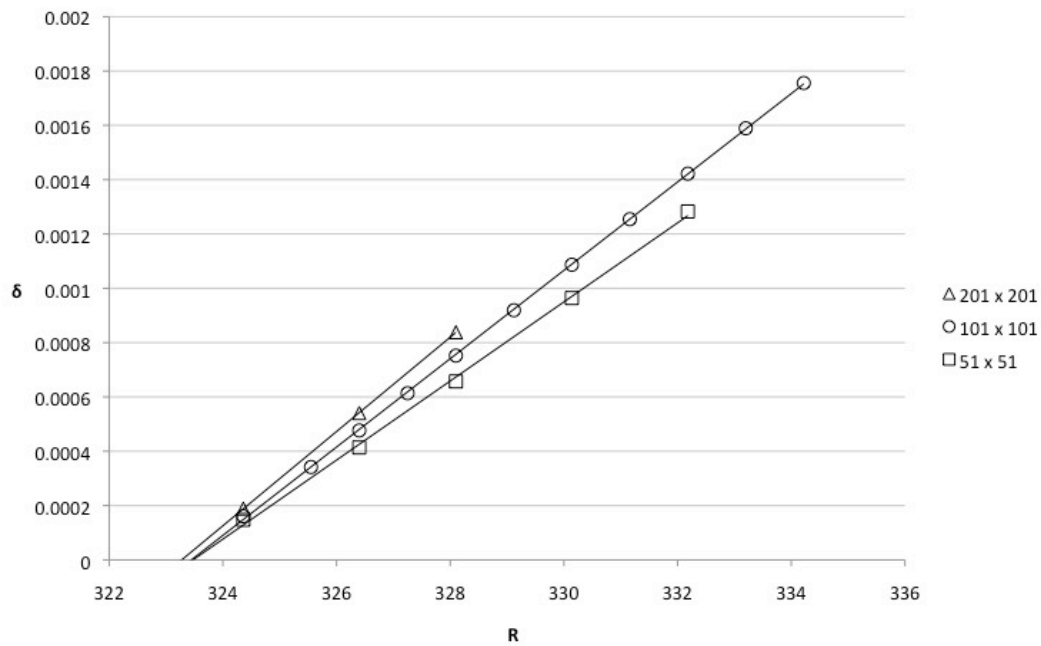


Figura 10 - Ajuste linear para obtenção do R_c , para $AR = 1$.

Na tabela 3 apresentam-se os valores de R_c obtidos para cada refinamento pela extrapolação das rectas de ajuste linear da figura 10, e comparam-se ainda com os correspondentes valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijkx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).

Tabela 3 - Resultados de R_c para $AR = 1$, e comparação com os valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijkx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).

Malha	R_c
51 x 51	323.48
101 x 101	323.45
201 x 201	323.28
Gelfgat (1999)	323.13
Luijkx e Platten (1981)	323.13
Park e Ryu (2001a)	322.09

Pela análise da tabela 3, verifica-se que os valores obtidos estão muito próximos dos trabalhos de Gelfgat (1999) e de Luijkx e Platten (1981).

Na figura 11 apresentam-se os valores de R_c da tabela 3, em função de $\Delta y/H$, obtidos para cada refinamento.

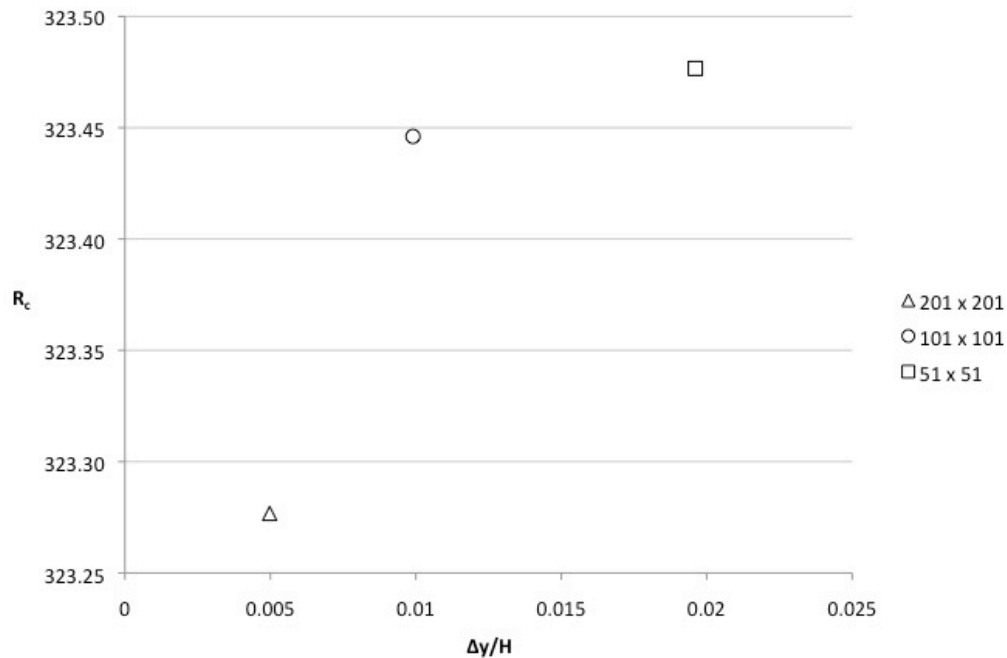


Figura 11 - Valores de R_c para cada nível de refinamento em função de $\Delta y/H$ ($AR = 1$).

Pela análise da figura 11 verifica-se que a extrapolação para o limite de Richardson não deverá ser utilizada no caso de $AR = 1$, visto que os valores obtidos de R_c para refinamentos sequenciais não seguem uma tendência característica de ordem de convergência superior à unidade. De facto, esperava-se que as variações malha-a-malha fossem diminuindo com o refinamento da malha, mas aqui o comportamento é precisamente o oposto. Com apenas estas 3 malhas, não é pois possível tirar mais conclusões acerca do comportamento que os pontos obtidos apresentam. Seria necessário usar malhas mais refinadas e verificar se de facto as malhas usadas encontram-se fora da gama de convergência necessária á obtenção da ordem aparente do método e conseqüentemente uma aproximação ainda mais rigorosa de R_c . De qualquer das formas, os valores da tabela 3 são bastante precisos, diferindo de outras soluções da literatura em menos de 0.1%.

Na figura 12 apresenta-se um exemplo dos mapas de temperatura e das linhas de corrente, descrevendo uma célula de convecção, obtidas para esta razão de forma.

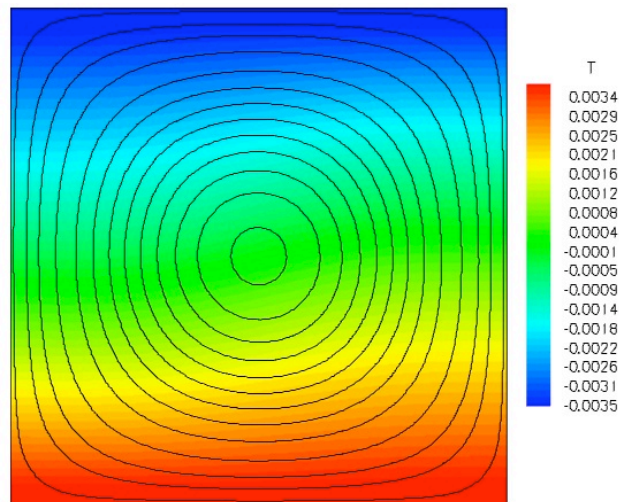


Figura 12 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e linhas de corrente para uma malha 201 x 201 e de AR = 1.

4.2.2 Razão de forma, AR = 2

Na figura 13 estão representados os vários resultados obtidos para as malhas de AR = 2, e as respectivas rectas de ajuste para a obtenção de R_c .

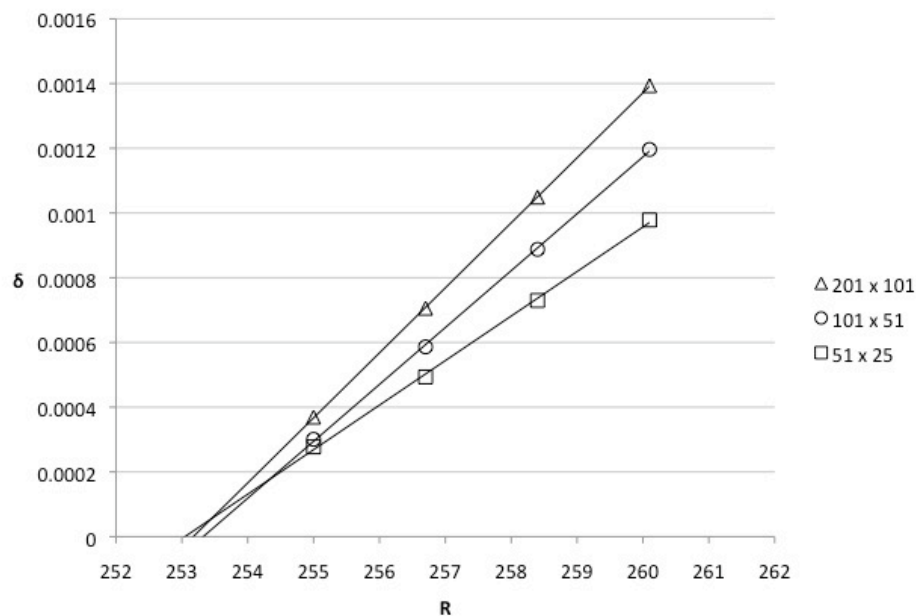


Figura 13 - Ajuste linear para obtenção do R_c , para AR = 2.

Na tabela 4 mostram-se os valores de R_c obtidos através das extrapolações das rectas de ajuste linear da figura 13, bem como os valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijckx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).

Tabela 4 - Resultados de R_c para $AR = 2$, e comparação com os valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijkx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).

Malha	R_c
51 x 25	253.25
101 x 51	253.44
201 x 101	253.21
Gelfgat (1999)	251.65
Luijkx e Platten (1981)	251.66
Park e Ryu (2001a)	251.33

Neste caso os valores de R_c obtidos não são tão próximos dos valores dos restantes investigadores representados na tabela 4, como no caso de $AR = 1$.

Na figura 14 estão representados os valores de R_c da tabela 4 obtidos para cada refinamento, em função de $\Delta y/H$.

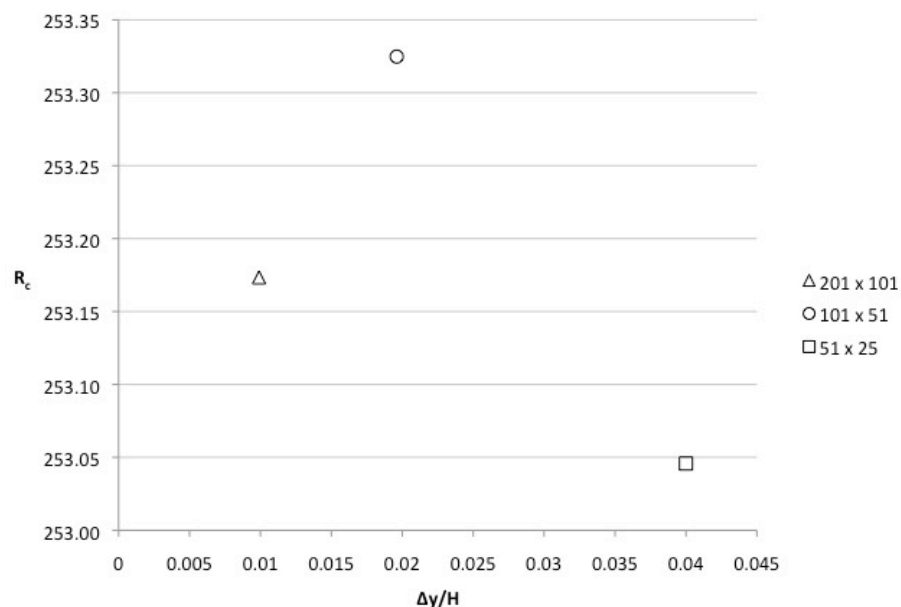


Figura 14 - Valores de R_c para cada refinamento em função de $\Delta y/H$ ($AR = 2$).

Neste caso, tal como para $AR = 1$, os resultados obtidos de R_c , não estão na gama de tendência monótona necessária à aplicação da técnica da extrapolação para o limite de Richardson. Apesar desta situação os resultados obtidos diferem de outras soluções da

literatura em menos de 0.6%. Com estes dois resultados menos positivos tornou-se óbvia a necessidade de novos testes de malha por forma a garantir que a abordagem ao problema estava a ser executada correctamente. Então, para além do código que permite o cálculo do parâmetro δ usando os valores da simulação apenas no ficheiro de dados final, foi também feita uma modificação no código principal de modo a que o parâmetro δ fosse calculado para cada passo no tempo até se alcançar o estado estacionário. Com isto seria possível acompanhar a evolução do parâmetro δ ao longo da simulação à medida que os resíduos iam tendendo para o critério de convergência estabelecido (10^{-9}). Na Figura 15 mostra-se a evolução do parâmetro δ ao longo de uma simulação para os casos de $AR = 1$, e $AR = 2$, à medida que o resíduo mais alto (u_2), tende para o critério de convergência.

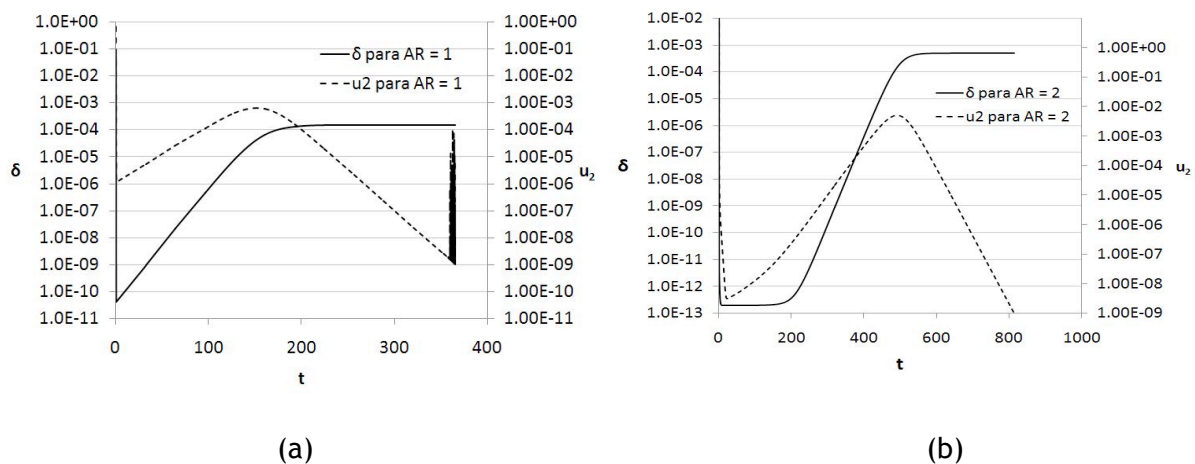


Figura 15 - Representação gráfica da evolução do parâmetro δ ao longo de uma simulação (a) para $AR = 1$; (b) para $AR = 2$.

Pela visualização da figura 15 é possível confirmar que no momento que os resíduos atingem o critério de convergência, o valor do parâmetro δ já está num patamar horizontal praticamente constante, logo pode-se considerar que os valores de R_c que são aqui apresentados estão bem convergidos.

Outra abordagem seria a realização de simulações para valores de R ainda mais próximos do valor crítico de forma a serem incluídos mais pontos nos ajustes lineares, com o objectivo de melhorar as extrapolações obtidas. Contudo, à medida que R se aproxima do valor crítico, o tempo de simulação aumenta de forma exponencial, tornando as simulações para essa gama de valores incomportáveis no âmbito dum trabalho com um limite de tempo como este. Por exemplo no caso de $AR = 1$, uma simulação na malha 51×51 células, demorava menos de 12

horas a concluir enquanto na malha mais refinada de 201 x 201 células, uma simulação para o mesmo R o tempo de cálculo aumentava para 3 a 4 semanas num processador Quad Core Intel Xeon 2x2.8 GHz, e com 10 GB 800 MHz DDR2 FB-DIMM de memória RAM.

Na figura 16 mostra-se um exemplo dos mapas de temperatura (isotérmicas) e das linhas de corrente descrevendo duas células de convecção obtidas para razão de forma $AR = 2$.

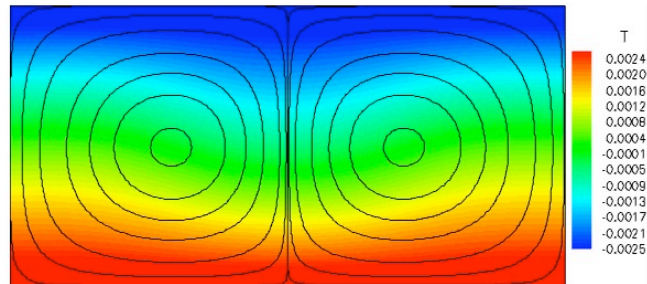


Figura 16 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e linhas de corrente para uma malha 201 x 101 e de $AR = 2$.

4.2.3 Razão de forma, $AR = 5$

Na figura 17 representam-se os resultados obtidos para as simulações nas malhas de $AR = 5$, e as respectivas rectas de ajuste.

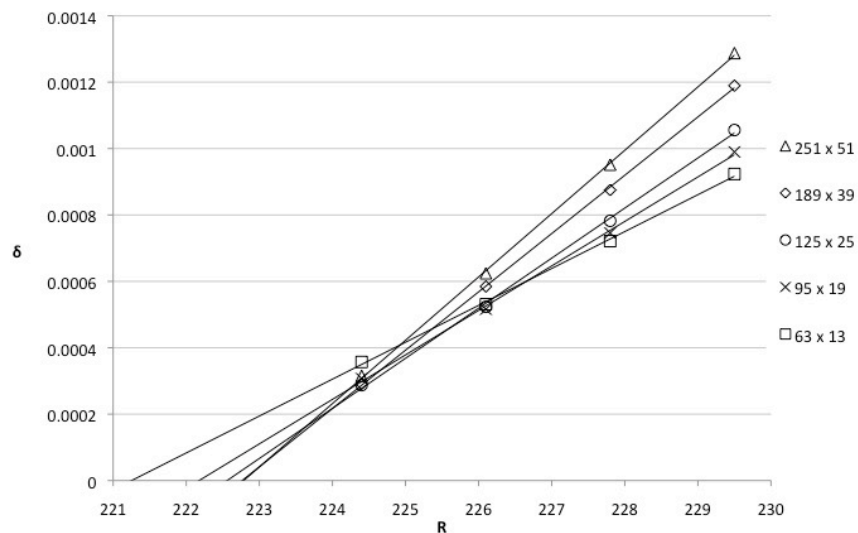


Figura 17 - Ajuste linear para obtenção do R_c , para o caso de $AR = 5$.

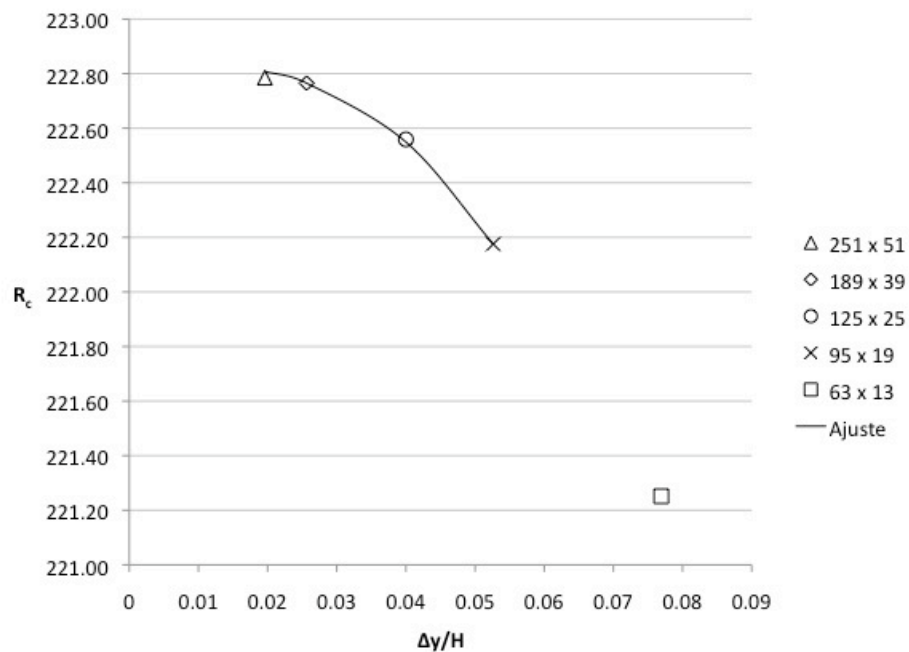
Na tabela 5 apresenta-se os valores de R_c , obtidos por extrapolação através das rectas de ajuste da figura 15, juntamente com os valores obtidos por Gelfgat (1999), Luijckx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).

Tabela 5 - Resultados de R_c para $AR = 5$, e comparação com valores da literatura.

Malha	R_c
63 x 13	221.25
95 x 19	222.18
125 x 25	222.56
189 x 39	222.77
251 x 51	222.78
Gelfgat (1999)	222.32
Luijckx e Platten (1981)	222.38
Park e Ryu (2001a)	222.56

Da análise da tabela 5 verifica-se que os resultados obtidos estão próximos dos resultados de Gelfgat (1999), Luijckx e Platten (1981) e Park e Ryu (2001a).

Na figura 18 estão representados os valores de R_c da tabela 6 obtidos para cada refinamento, em função de $\Delta y/H$.

Figura 18 - Valores de R_c para diferentes níveis de refinamento da malha.

A figura 18 permite verificar que os valores de R_c para $AR = 5$ comportam-se da forma monótona pretendida pelo que será possível aplicar a técnica da extrapolação para o limite de Richardson.

Neste caso não foi possível a utilização directa da equação (20) para o cálculo da ordem do método, como tal foi feito um ajuste aos pontos obtidos do tipo,

$$R_c = R_c^{ext} + b \left(\frac{\Delta y}{H} \right)^p \quad (23)$$

e obtiveram-se os seguintes valores, $R_c^{ext} = 222.84$, $b = -4573.68$ e $p = 3$. Neste ajuste o ponto obtido para a malha 63×13 não foi considerado devido a não se encontrar na zona de convergência monótona. Na tabela 6 apresentam-se os resultados obtidos por extrapolação sucessiva para o limite de Richardson. O valor obtido por este método ($R_c^{ext} = 222.79$) é muito semelhante ao que se obtém por ajuste da equação (18) ($R_c^{ext} = 222.84$).

Tabela 6 - Resultados da extrapolação para o limite de Richardson para $AR = 5$.

Malha	$\Delta y/H$	R_c	R_c'	R_c''	R_c'''
251 x 51	0.0196	222.78	222.79	222.79	222.79
189 x 39	0.0256	222.77	222.85	222.86	...
125 x 25	0.0400	222.56	222.72
95 x 19	0.0526	222.18
63 x 13	0.0769	221.25

Com este valor obtido verifica-se que este apenas difere de outras soluções da literatura em menos de 0.2%.

Na figura 19 ilustram-se os erros absolutos entre $R_c^{ext} = 222.84$ e os valores de R_c obtidos para cada malha usada.

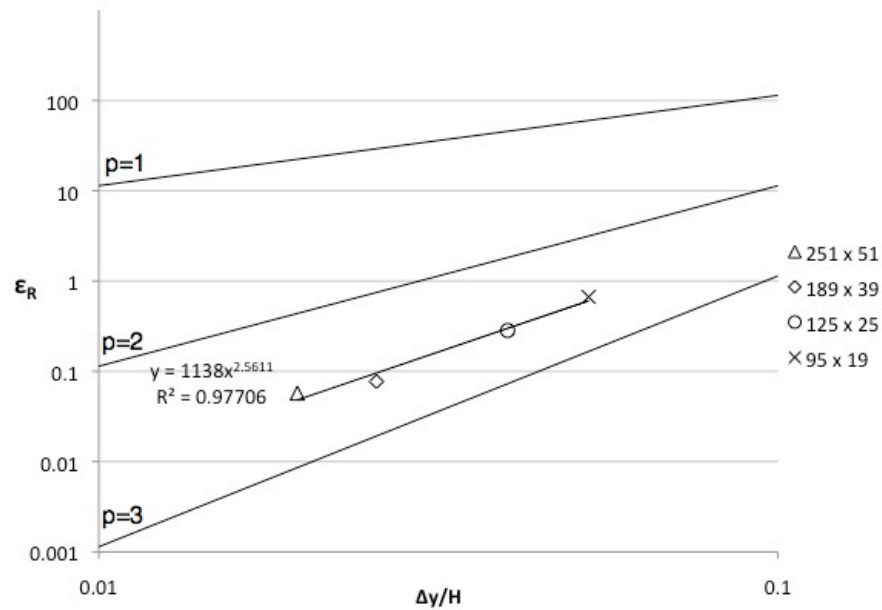


Figura 19 - Erro absoluto entre R_c^{ext} e R_c obtido em cada refinamento em função de $\Delta y/H$.

Na figura 20 ilustram-se os mapas de temperatura (isotérmicas) e as linhas de corrente descrevendo cinco células de convecção obtidas para razão de forma $AR = 5$.

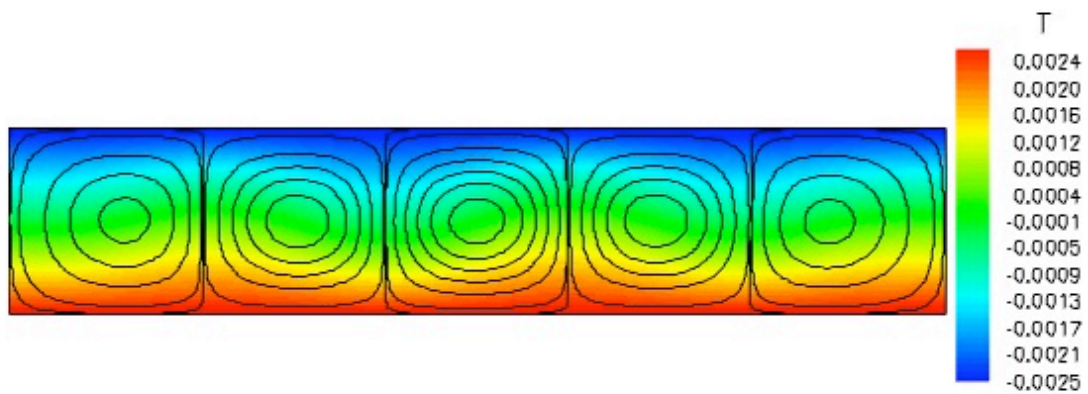


Figura 20 - Mapas de temperatura e linhas de corrente para uma malha 251 x 51 e de $AR = 5$.

4.2.4 Razão de forma, $AR = 8$

Na figura 21 mostram-se os resultados obtidos para as simulações nas malhas de $AR = 8$, e as respectivas rectas de ajuste.

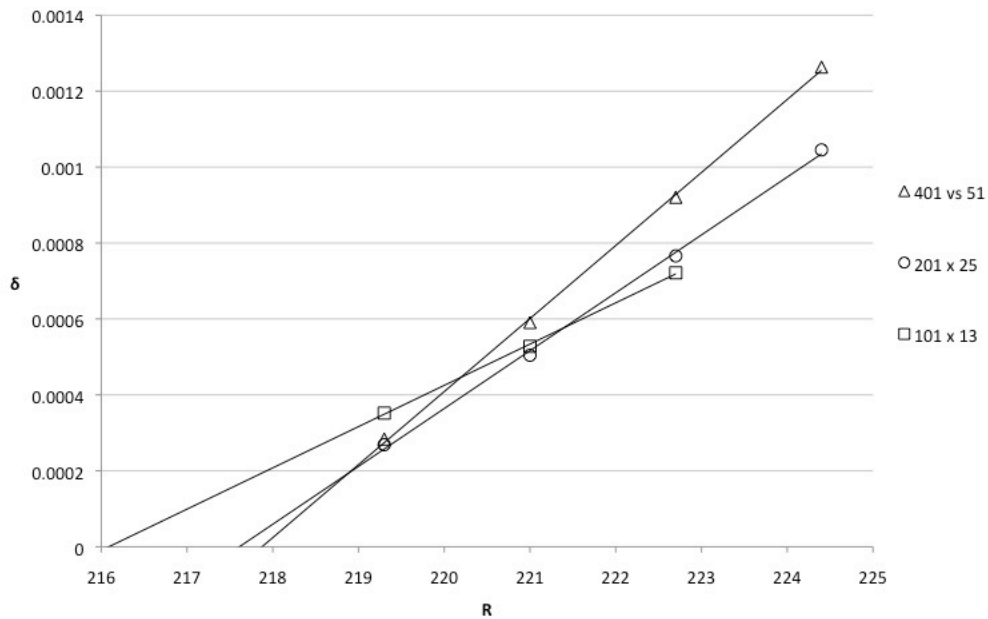


Figura 21 - Ajuste linear para obtenção do R_c , para o caso de $AR = 8$.

Na tabela 7 representam-se os valores de R_c , obtidos por extrapolação através das rectas de ajuste linear da figura 21, juntamente com os valores obtidos por Park e Ryu (2001a). Até aqui tinha-se usado os resultados dos trabalhos de Gelfgat (1999) e Luijckx e Platten (1981) para efeitos de validação, mas estes autores apenas incluem nos seus estudos valores para razões de forma até um máximo de $AR = 5$.

Tabela 7 - Resultados de R_c para $AR = 8$, e respectivo valor obtido por Park e Ryu (2001a).

Malha	R_c
101 x 13	216.09
201 x 25	217.61
401 x 51	217.87
Park e Ryu (2001a)	217.73

Verifica-se pela tabela 7 que foram novamente obtidos resultados bastante próximos dos valores obtidos por Park e Ryu (2001a).

Na figura 22 representam-se os valores de R_c da tabela 8 obtidos para cada refinamento, em função de $\Delta y/H$.

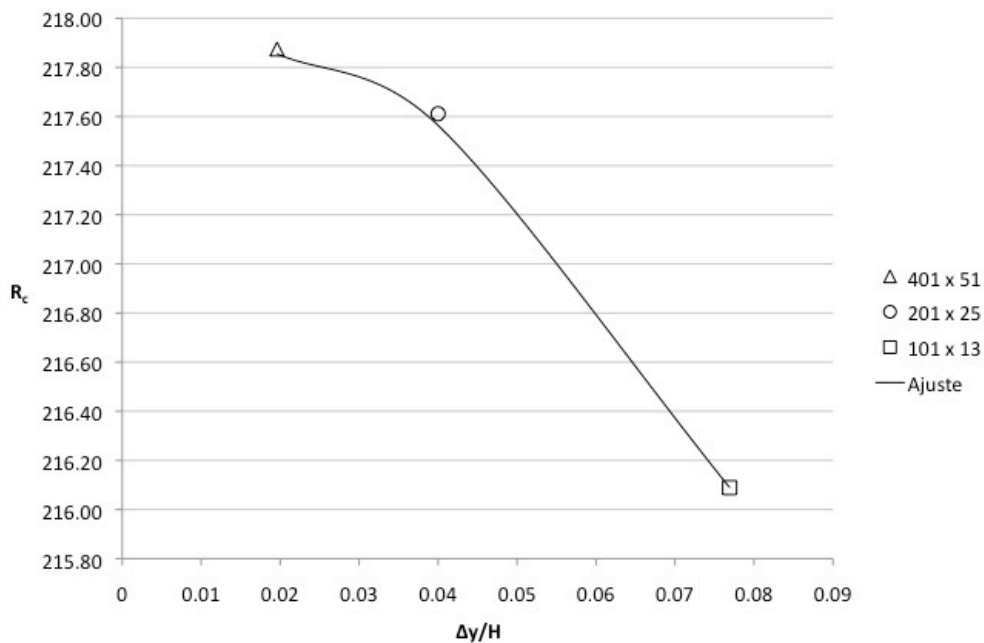


Figura 22 - Valores de R_c para cada refinamento em função de $\Delta y/H$.

Neste caso os resultados também apresentam uma tendência monótona ao longo de refinamentos sequenciais, logo será utilizada a técnica de extrapolação para o limite de Richardson. Usando a equação (20) obtemos a ordem do método, $p = 2.53$, e como o valor de p deverá ser um número inteiro, truncando obtém-se $p = 3$. Em seguida usando a equação (22), e completando uma tabela semelhante ao esquema apresentado na figura 9 obtém-se o valor do número de Rayleigh crítico extrapolado, R_c^{ext} . Na tabela 8 apresentam-se os valores obtidos neste processo.

Tabela 8 - Resultados da extrapolação para o limite de Richardson para $AR = 8$.

Malha	$\Delta y/H$	R_c	R_c'	R_c''
401 x 51	0.0196	217.87	217.91	217.91
201 x 25	0.0400	217.61	217.83	...
101 x 13	0.0769	216.09

Foi também efectuado um cálculo da extrapolação para o limite de Richardson semelhante ao usado na tabela 8 usando o valor da ordem do método, $p = 2$, obtendo-se o resultado de $R_c^{ext} = 217.95$. Portanto pode-se finalmente dizer com um bom nível de precisão que o valor de R_c obtido para $AR = 8$, estará entre $R_c^{ext} = 217.91$ e $R_c^{ext} = 217.95$. Com estes valores obtidos verifica-se que estes apenas diferem da outra solução da literatura em menos de 0.08%.

Na figura 23 mostram-se, em escalas logarítmicas, os erros absolutos entre $R_c^{ext} = 217.91$ e os valores de R_c obtidos para cada malha usada.

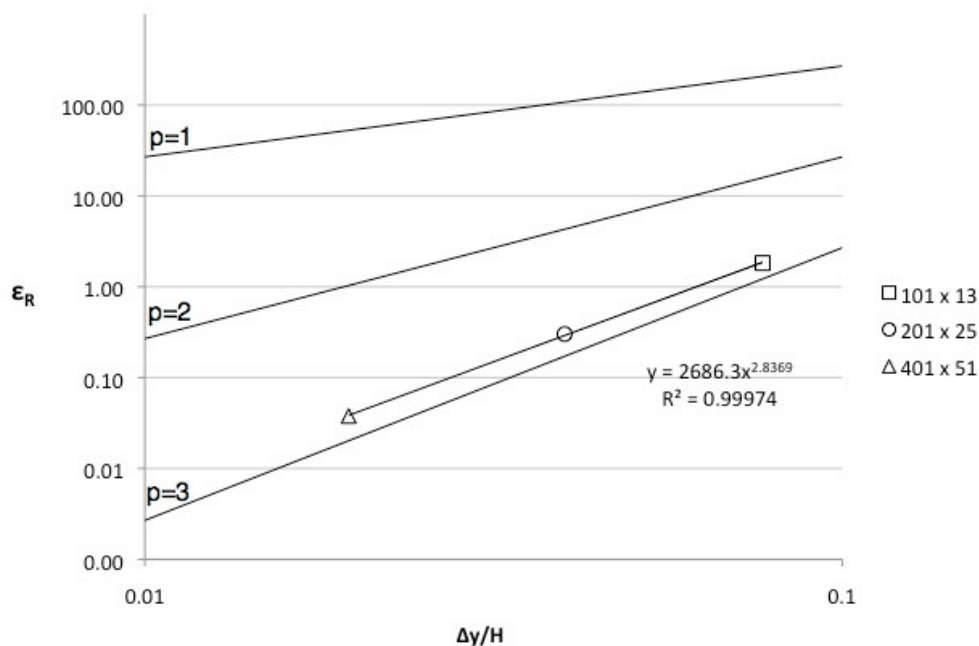


Figura 23 - Erro absoluto entre R_c^{ext} e R_c obtido em cada nível de refinamento para $AR = 8$.

Na figura 24 mostra-se um exemplo dos mapas de temperatura e das linhas de corrente descrevendo oito células de convecção obtidas para razão de forma $AR = 8$.

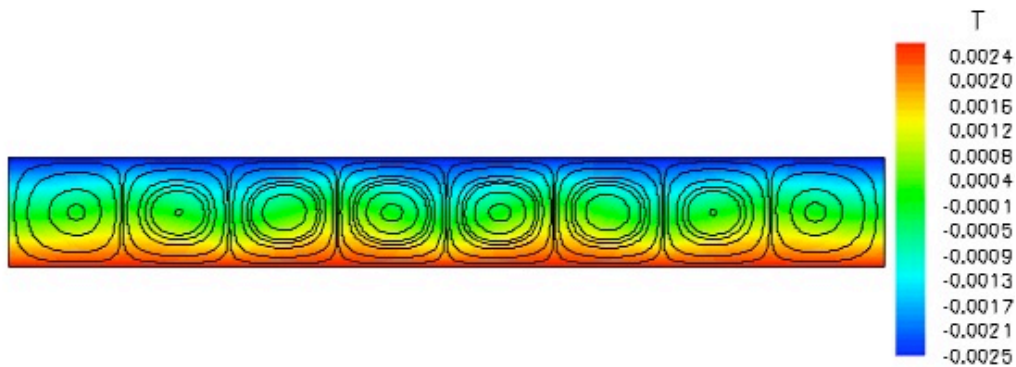


Figura 24 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e linhas de corrente para uma malha 401 x 51 e de $AR = 8$.

Por fim, na figura 25 ilustram-se os resultados obtidos por Park e Ryu (2001a) para o valor crítico do número de Rayleigh, para razões de forma de 1 a 10 juntamente com os resultados obtidos neste trabalho. Note-se que na figura 25, para as razões de forma em que não foi possível aplicar a técnica da extrapolação para o limite de Richardson, são apresentados os resultados obtidos para a malha mais refinada.

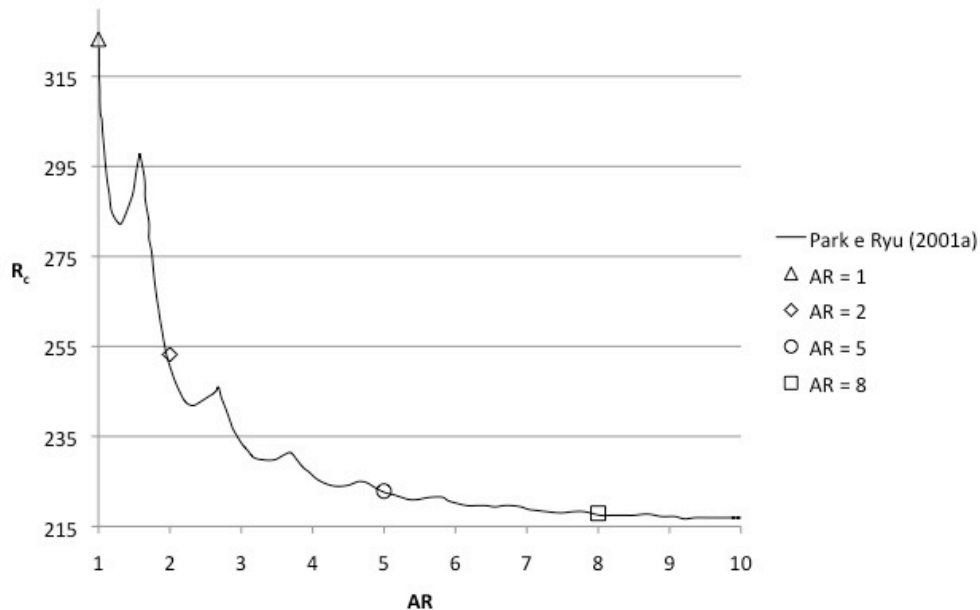


Figura 25 - Comparação dos resultados para o valor crítico do número de Rayleigh obtidos por Park e Ryu (2001a) com os resultados obtidos neste trabalho.

Pela análise da figura 25 verifica-se que os resultados obtidos estão de acordo com o estudo de Park e Ryu (2001a), é possível também visualizar que os picos da linha de resultados de

Park e Ryu (2001a), representam o instante para o qual o escoamento desenvolve uma nova célula de convecção.

4.3 Fluido não-newtoniano

Para as simulações no caso de um fluido não newtoniano, os parâmetros do modelo PTT usados foram, $\xi = 0$, $\varepsilon = 0.2$, $\lambda = 0.1$ s, $\eta_p = 0.71$ Pa.s e $\eta_s = 0$ Pa.s.

4.3.1 Razão de Forma, $AR = 1$

Na figura 26 mostram-se os resultados obtidos para as simulações nas malhas de $AR = 1$, e as respectivas rectas de ajuste.

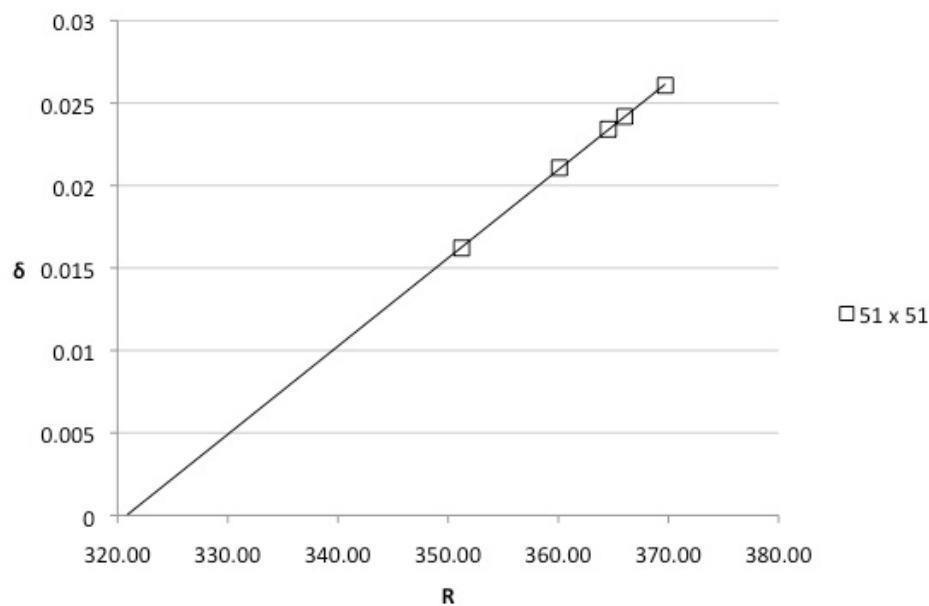


Figura 26 - Ajuste linear para obtenção do R_c , para o caso de $AR = 1$.

Neste caso não foi possível obter mais resultados a tempo do prazo para conclusão deste trabalho, por isso apenas apresentamos a extrapolação da recta de ajuste para a malha mais grosseira. O valor obtido para o número de Rayleigh crítico para este caso foi de $R_c = 320.82$. Os pontos obtidos também estão um pouco mais afastados da zona crítica dos que têm sido apresentado nos casos newtonianos. Isto deve-se ao aumento considerável de tempo de cálculo necessário à convergência das simulações para estes casos em zonas próximas ao crítico.

4.3.2 Razão de forma, $AR = 5$

Para esta razão de forma foi criada uma malha menos refinada com 31×7 células ($\Delta x/H = 0.0323$ e $\Delta y/H = 0.143$), devido ao facto de ainda não ter sido possível obter os resultados para a malha de 251×51 células pelo motivo das simulações para esta malha ainda não permitirem a obtenção do parâmetro δ devidamente convergido. Na figura 27 mostram-se os resultados obtidos para as simulações nas malhas de $AR = 5$, e as respectivas rectas de ajuste.

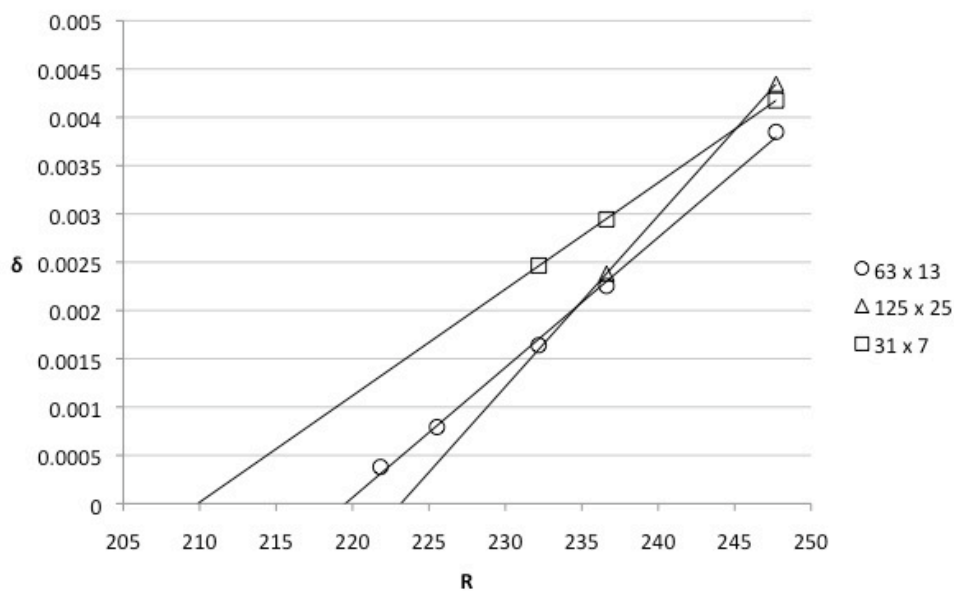


Figura 27 - Ajuste linear para obtenção do R_c , para o caso de $AR = 5$.

Na tabela 9 representam-se os valores de R_c , obtidos por extrapolação através das rectas de ajuste linear da figura 26.

Tabela 9 - Resultados de R_c para $AR = 5$.

Malha	R_c
31 x 7	209.87
63 x 13	219.54
126 x 25	223.17

Na figura 28 representam-se os valores de R_c da tabela 10 obtidos para cada refinamento, em função de $\Delta y/H$.

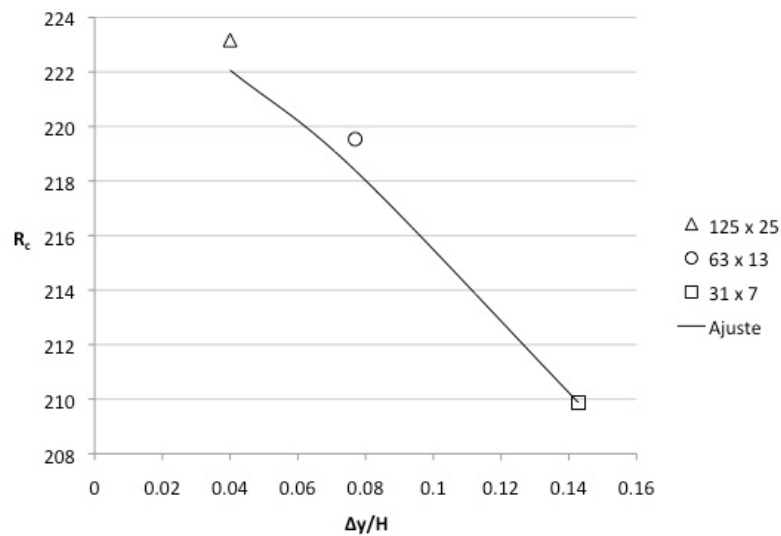


Figura 28 - Valores de R_c para cada refinamento em função de $\Delta y/H$.

Verifica-se que os resultados apresentam uma tendência monótona com os refinamentos sucessivos, embora o facto de se ter omitido a malha 251 x 51 e incluído uma malha menos refinada (31 x 7), poderá significar que os resultados apesar de indicarem a sequência monótona poderão ainda estar longe da solução exacta, e por conseguinte ainda não permitirem a obtenção do valor pela técnica da extrapolação para o limite de Richardson com o nível de precisão pretendido. Tal como seria de esperar pelo uso de malhas pouco refinadas, pela aplicação da equação (20) obtemos a ordem do método, $p = 1.43$. Portanto usar-se-á, para este caso o valor do número inteiro imediatamente a seguir ao valor da ordem do método obtido, resultando $p = 2$. Em seguida usando a equação (22), e completando uma tabela semelhante ao esquema apresentado na figura 9 obtém-se o valor do número de Rayleigh crítico extrapolado, R_c^{ext} . Na tabela 10 mostram-se os valores obtidos neste processo.

Tabela 10 - Resultados da extrapolação para o limite de Richardson para $AR = 5$.

Malha	$\Delta y/H$	R_c	R_c'	R_c''
125 x 25	0.0400	223.17	224.38	224.49
63 x 13	0.0769	219.54	222.76	...
31 x 7	0.143	209.87

Pela construção da tabela 10 obtém-se finalmente o número de Rayleigh crítico pela técnica da extrapolação para o limite de Richardson, $R_c^{ext} = 224.49$. Note-se que este é apenas um valor aproximado pois aquando da obtenção dos resultados para a malha 251×51 , será repetido todo este processo, desta vez com as três malhas mais refinadas e por conseguinte com valores mais próximos da solução exacta. Foi também repetido todo este processo com o valor da ordem do método $p=1$, e foi obtido o valor para o número de Rayleigh crítico extrapolado $R_c^{ext} = 224.40$.

Na figura 29 mostram-se em escalas logarítmicas os erros absolutos entre $R_c^{ext} = 224.49$ e os valores de R_c obtidos para cada nível de refinamento.

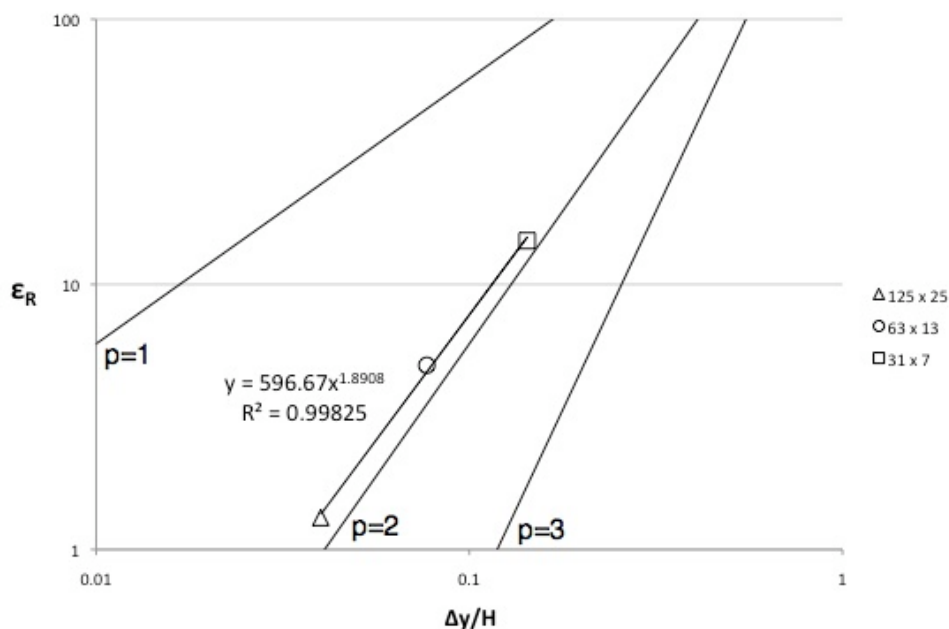


Figura 29 - Erro relativo entre R_c^{ext} e R_c obtido em cada refinamento em função de $\Delta y/H$.

Como é visível a ordem de convergência do método é aproximadamente 2. Para esta razão de forma a viscoelasticidade induziu a instabilidade para um valor superior de R_c ($R_c = 224.49$), comparado com o respectivo valor para newtoniano ($R_c = 222.84$), ao contrário do que se observa para $AR = 1$, se bem que neste caso apenas foi efectuado o estudo numa malha, pelo que este resultado deve ser entendido como aproximado não convergido.

4.4 Outros Estudos

4.4.1 Rayleigh supercrítico em razão de forma, $AR = 5$

Nesta secção mostram-se os resultados obtidos para a evolução do parâmetro δ com o número de Rayleigh R para condições supercríticas de um fluido newtoniano. Na figura 30 ilustram-se os resultados obtidos nesta análise.

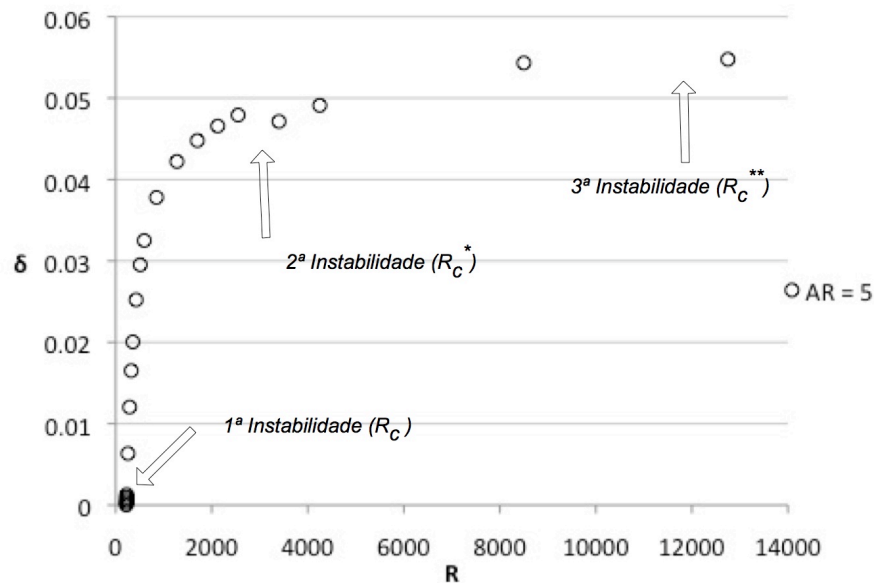


Figura 30 - Representação gráfica de δ em função de R para gamas de R supercríticas.

Para valores superiores a $R = 10000$, o valor de δ passa a ser praticamente independente de R . É também possível observar que quando o número de Rayleigh atinge um valor cerca de $R = 3500$, existe uma ligeira alteração na evolução dos pontos, que corresponde a uma alteração no padrão de escoamento (2ª instabilidade). De facto, se para $R_c < R < R_c^*$ o escoamento é caracterizado por ter cinco células de convecção, para $R \geq R_c^*$ surgem sete células de convecção (ver figura 31 (d) e (e)). Apesar de existirem menos simulações efectuadas para valores mais altos de R , e isto tornar a visualização destes fenómenos menos perceptível, existe uma nova instabilidade na evolução dos pontos entre os dois últimos registos. Isto é também devido ao número de células de convecção ter aumentado de sete para nove (ver figura 31 (g) e (h)). Na figura 30 mostram-se os campos de temperatura (isotérmicas) e as linhas de corrente formadas pelas células de convecção para alguns dos pontos apresentados na figura 30.

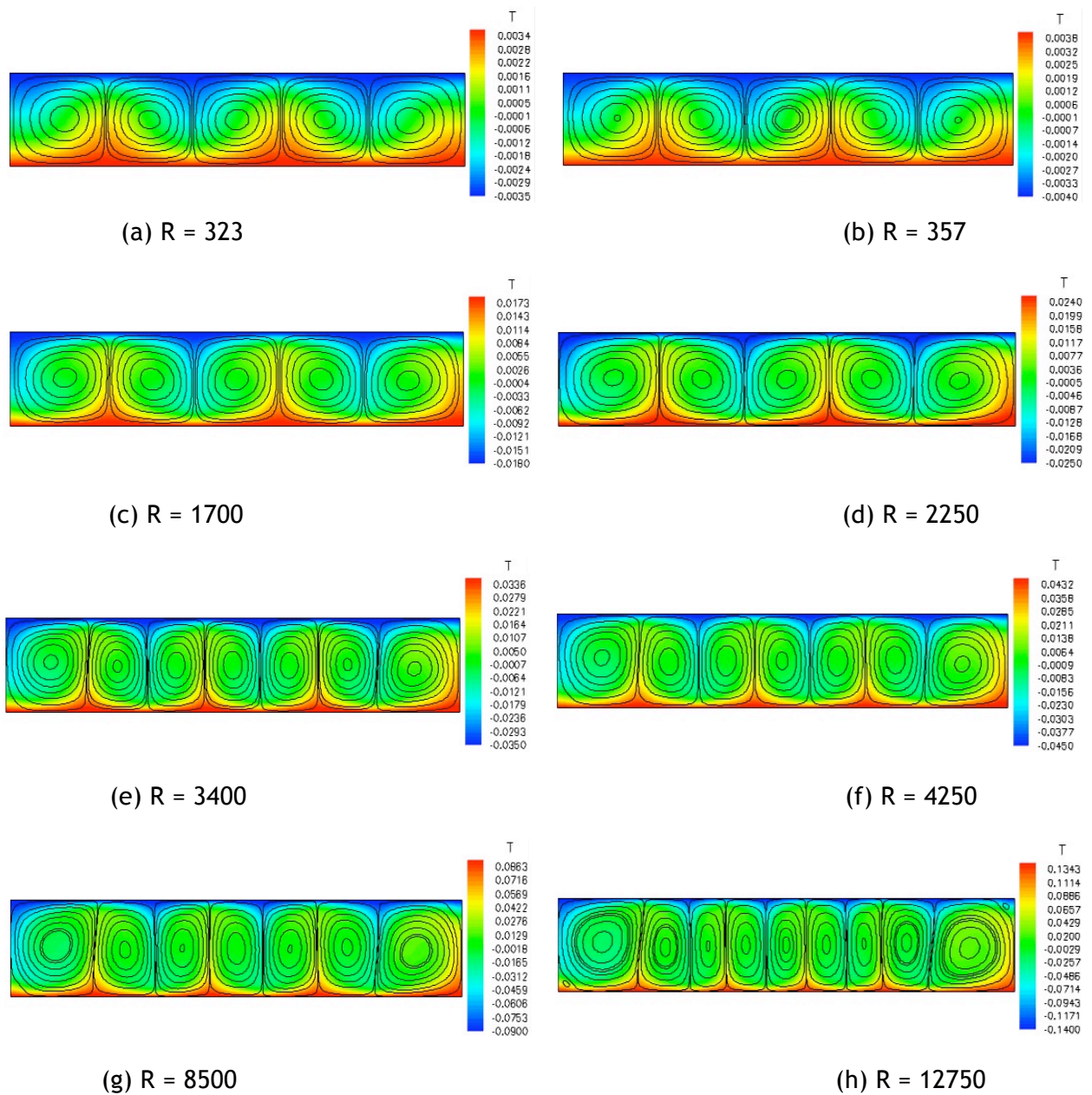


Figura 31 - mapas de temperatura (isotérmicas) e células de convecção para uma cavidade de $AR = 5$, para valores de R supercríticos; (a) $R = 323$; (b) $R = 357$; (c) $R = 1700$; (d) $R = 2250$; (e) $R = 3400$; (f) $R = 4250$; (g) $R = 8500$; (h) $R = 12750$.

Estas simulações corroboram assim os resultados de Schlatter et al. (1965) que mostram a diminuição do número de onda com o aumento do número de Rayleigh em condições supercríticas.

4.4.2 Células de convecção em razões de forma superiores

Na figura 32 ilustram-se as células de convecção formadas para dois casos de razão de forma superior aos apresentados anteriormente neste trabalho ($AR = 16$ e 20).

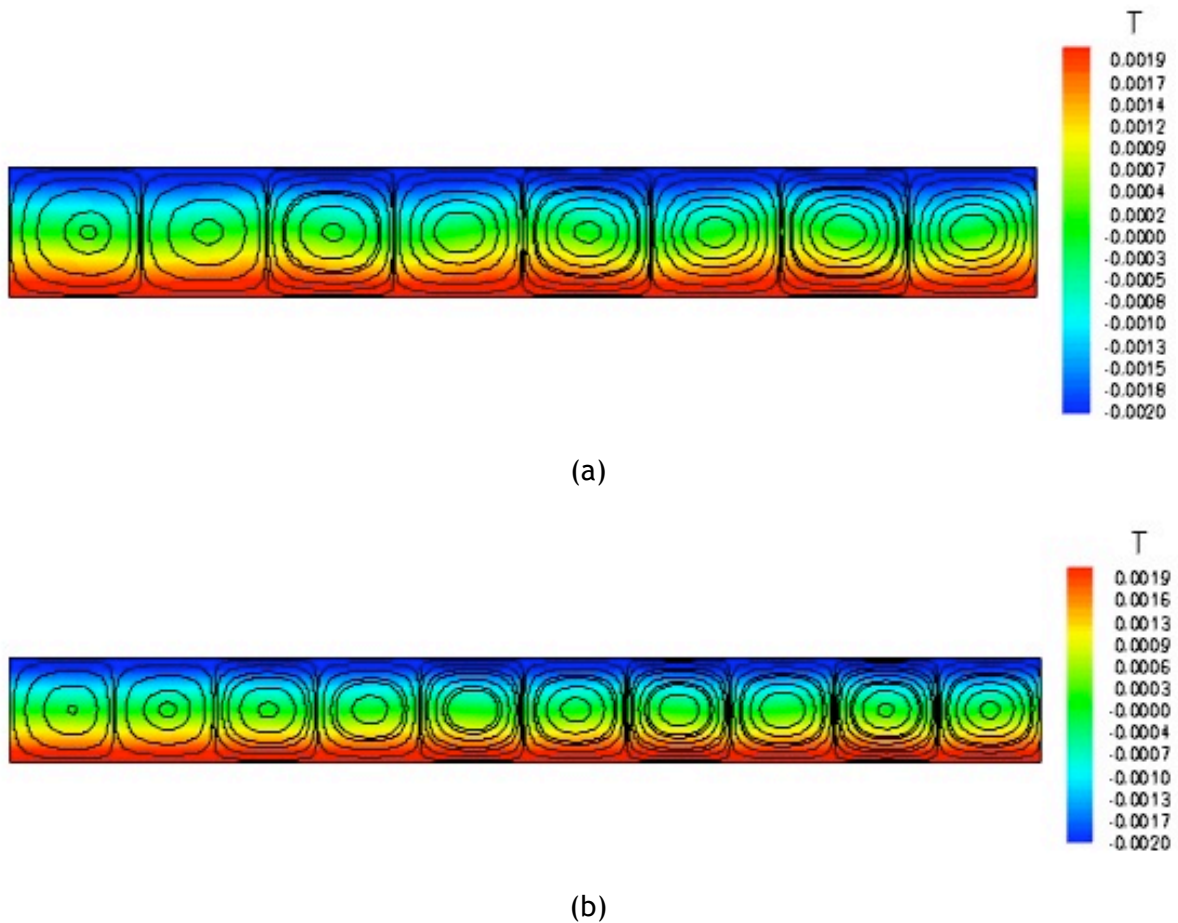


Figura 32 - Mapas de temperatura (isotérmicas) e células de convecção para uma cavidade de, (a) $AR = 16$; (b) $AR = 20$.

Na figura 32 apenas estão representadas metade de cada cavidade, pois foi considerado um eixo de simetria em $y = 8$ para $AR = 16$ e em $y = 10$ para $AR = 20$.

5 Conclusões

Ao longo deste trabalho foi feito um estudo com o objectivo de encontrar valores de referência para o valor crítico do número de Rayleigh em cavidades 2D de várias razões de forma, tanto para o caso de um fluido newtoniano como para o caso de um fluido não-newtoniano, com comportamento viscoelástico representado pelo modelo constitutivo reológico de Phan-Thien-Tanner (PTT), considerando viscosidade do solvente nula.

No caso de um fluido newtoniano verificou-se que para as razões de forma $AR = 1$ e 2 , os resultados obtidos em diferentes malhas não permitiram a aplicação da técnica da extrapolação para o limite de Richardson devido a não cumprirem os pressupostos necessários à sua aplicação. Foram feitos estudos adicionais de forma a garantir que os valores do parâmetro δ , estavam suficientemente convergidos no instante em que era atingido o critério de convergência das simulações. Embora não se tenha chegado ao resultado pretendido, verifica-se que os valores obtidos para o número crítico de Rayleigh diferem de outras soluções da literatura em menos 0.1% para a razão de forma $AR = 1$, e 0.6% para a razão de forma $AR = 2$. Para as razões de forma superiores, nomeadamente $AR = 5$ e $AR = 8$, os valores obtidos para o número de Rayleigh crítico estavam dentro da gama monótona que permite a aplicação da técnica da extrapolação para o limite de Richardson. Como tal, foram obtidos os valores de $R_c^{ext} = 222.79$, para o caso de $AR = 5$ e um valor que estará compreendido entre $R_c^{ext} = 217.91$ e $R_c^{ext} = 217.95$ para $AR = 8$, consoante se use na ordem do método $p = 3$ ou $p = 2$, respectivamente.

Para o caso de um fluido não-newtoniano apenas foram possíveis obter resultados para as razões de forma de $AR = 1$ e $AR = 5$. Para a razão de forma $AR = 1$, apenas foi possível apresentar resultados para a malha menos refinada, com 51×51 células, e o valor do número de Rayleigh crítico obtido foi de $R_c = 320.82$. Para a razão de forma $AR = 5$, não foi possível obter os resultados para a malha mais refinada com 251×51 células, pelo que foi necessário criar uma nova malha menos refinada com 31×7 células. Assim foi possível ter três malhas sequencialmente refinadas que permitissem a aplicação da técnica da extrapolação para o limite de Richardson. Para este caso o valor obtido do número de Rayleigh crítico extrapolado foi, $R_c^{ext} = 224.49$. De referir que este valor deve ser tipo como provisório devido ao facto da malha menos refinada usada neste caso poder estar já bastante afastada da solução exacta e não ser o suficiente para se obter o valor extrapolado com o grau de precisão pretendido.

Foi ainda efectuado um estudo da evolução do parâmetro δ com o número de Rayleigh para condições supercríticas e fluidos newtonianos, que permitiu verificar a

ocorrência de duas alterações no padrão de escoamento, que podem ser explicados pelo aumento do número de células de convecção. Na primeira alteração do padrão escoamento verifica-se um aumento de cinco para sete células de convecção, e na segunda alteração verifica-se o aumento de sete para nove células de convecção. Estes resultados vêm ainda corroborar estudos da literatura que mostram que o número de onda diminui com o aumento do número de Rayleigh, para condições supercríticas.

6 Avaliação do trabalho realizado

6.1 Objectivos Realizados

O objectivo deste trabalho consiste na obtenção de valores de referência (*benchmark*) para o número de Rayleigh crítico em cavidades bidimensionais de diversas razões de forma, tanto para o caso de um fluido newtoniano, como para o caso de um fluido não-newtoniano descrito por uma equação constitutiva viscoelástica de tipo diferencial (modelo PTT).

No caso de um fluido newtoniano foi possível calcular com elevada precisão o número de Rayleigh crítico para os casos $AR = 5$ e 8 , que se estima terem uma incerteza inferior a 0.2% e 0.08% , respectivamente. Para as razões de forma inferiores, nomeadamente $AR = 1$ e 2 , os resultados obtidos apesar de bastante precisos e próximos de resultados encontrados na literatura, não permitiram a utilização da técnica da extrapolação para o limite de Richardson pois não cumpriam os pressupostos necessários à sua aplicação. De qualquer forma, estima-se uma incerteza nos valores finais inferior a 0.1% para $AR = 1$ e 0.6% para $AR = 2$.

Para o caso de um fluido não-newtoniano foi possível calcular com elevada precisão o valor do número de Rayleigh crítico, embora aproximado, para $AR = 5$. Para $AR = 1$ apenas se obteve resultados para um refinamento, não sendo possível a aplicação da técnica da extrapolação para o limite de Richardson.

6.2 Outros Trabalhos Realizados

Foi feito o estudo da variação do parâmetro δ , para valores do número de Rayleigh superiores ao crítico. Verificou-se que à medida que se aumentava o número de Rayleigh, o número de células de convecção de Rayleigh-Bénard ia aumentando, diminuindo portanto o número de onda. Estes estudos vão de encontro ao trabalho realizado por Schlutter et al. (1965).

Foi também efectuado um estudo para contabilizar o número de células de convecção para maiores razões de forma.

Ambos estes estudos encontram-se numa fase preliminar e, como tal, não é possível retirar mais conclusões de momento.

6.3 Limitações e Trabalho Futuro

Ao longo deste trabalho sem dúvida que o maior obstáculo foram os tempos de cálculo necessários à realização das simulações. À medida que se refinam as malhas e as simulações se aproximam do número de Rayleigh crítico os tempos de simulação aumentam consideravelmente. Este foi o factor determinante para que até à data limite deste trabalho, não fosse possível apresentar resultados para todas as razões de forma no caso de um fluido não-newtoniano. Alguns resultados para fluido newtoniano, nomeadamente para $AR = 1$ e $AR = 2$, necessitavam de ser aprofundados com a realização de novas simulações para malhas ainda mais refinadas de forma a conseguirmos obter os valores de referência de elevada qualidade para o número de Rayleigh crítico a que nos propusemos no início deste trabalho.

Como trabalho futuro seria interessante analisar outros tipos de instabilidades na convecção de Rayleigh-Bénard e mesmo modificar a estrutura principal do código de simulação de modo a que este possa efectuar simulações de análise de estabilidade deste escoamento.

Para o caso de fluidos não-newtonianos deverão efectuar-se estudos mais aprofundados, analisando a influência dos parâmetros do modelo PTT no valor crítico do número de Rayleigh. A análise da instabilidade de Rayleigh-Bénard para outras equações constitutivas (modelo convectivo superior de Maxwell, Oldroyd-B e Giesekus) também deverá ser efectuada.

Referências

- Afonso A., Pinho F.T., Numerical investigation of the velocity overshoots in the flow of viscoelastic fluids inside a smooth contaction, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **139**, 1-20 (2006).
- Alves M.A., *Escoamentos de fluidos viscoelásticos em regime laminar*. Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto, Portugal, 2004.
- Alves M.A., Oliveira P.J., Pinho F.T., A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **41**, 47-75 (2003).
- Bairi A., Nusselt-Rayleigh correlations for design of industrial elements: Experimental and numerical investigation of natural convection in tilted square air filled enclosures, *Energy Conversion and Management*, **49**, 771-782 (2008).
- Behringer R.P., Rayleigh-Bénard Convection and Turbulence in Liquid Helium, *Reviews of Modern Physics*, **57**, 657-687 (1985).
- Brito R.F., Menon G.J., Pirani M.J., Turbulent natural convection in enclosures using large-eddy simulation with localized heating from horizontal bottom surface and cooling from vertical surfaces, *J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng*, **31**, 199-209 (2009).
- Chandrasekhar, S. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*, Oxford Univ. Press, London, 1961.
- Criston M.A., Gresho P.M., Sutton S.B., Computational predictability of time-dependent natural convection flows in enclosures (including a benchmark solution), *International journal for Numerical Methods in Fluids*, **40**, 953-980 (2002).
- D’Orazio M.C., Cianfrini C., Corcione M., Rayleigh-Bénard convection in tall rectangular enclosures, *International Journal of Thermal Sciences*, **43**, 135-144 (2004).
- Demir H., Rayleigh-Bénard convection of viscoelastic fluid. *Applied Mathematics and Computation*, **136**, 251-267 (2003).
- Drazin, P.G. *Introduction to hydrodynamic Stability*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2002.
- Ferziger, J.H., *Numerical Methods for Engineering Application*, John Wiley and Sons, New York, 1981.
- Ferziger, J.H., Perić, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer, Berlin, 1986.

- Gelfgat A.Y., Different Modes of Rayleigh-Bénard Instability in Two- and Three-Dimensional Rectangular Enclosures. *Journal of Computational Physics*, **156**, 300-324 (1999).
- Getling A.V., Brausch O., Cellular flow patterns and their evolutionary scenarios in three-dimensional Rayleigh-Bénard convection, *Physical Review*, **67**, 046313 (2003).
- Gollub J.P., Benson S.V., Many Routes to Turbulent Convection. *Journal of Fluid Mechanics*, **100**, 449-470 (1980).
- Guo Y., Bathe K.J., A numerical study of a natural convection flow in a cavity, *International Journal of Num Meth. Fluids*, **40**, 1045-1057 (2002).
- Hernández R., Influence of the heating rate on supercritical Rayleigh-Bénard convection, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **38**, 3035-3051 (1995).
- Kao P.H., Yang R.J., Simulating oscillatory flows in Rayleigh-Bénard convection using the lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **50**, 3315-3328 (2007).
- Koschmieder E.L., On the wavelength of convective motions, *Journal of Fluid Mechanics*, **33**, 527-530 (1969).
- Lir J.T., Lin T.F., Visualization of roll patterns in Rayleigh-Bénard convection of air in rectangular shallow cavity, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **44**, 2889-2902 (2001).
- Luijkx J.M., Platten K.J., On the onset of free convection in a rectangular channel, *J. Non-Equilibrium Thermodynam.*, **6**, 141 (1981).
- Matos H.M., Alves M.A., Oliveira P.J., New formulation for stress calculation: Application to viscoelastic flow in a T-junction, *Numerical Heat Transfer*, **56**, 351-371 (2009).
- Mukutmoni D., Yang K.T., Wave number selection for Rayleigh-Bénard convection in a small aspect ratio box, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **35**, 2145-2159 (1992).
- Mukutmoni D., Yang K.T., Rayleigh-Bénard convection in a small aspect ratio enclosure: part I - bifurcation to oscillatory convection, *Journal of Heat Transfer*, **115**, 360-366 (1993a).
- Mukutmoni D., Yang K.T., Rayleigh-Bénard convection in a small aspect ratio enclosure: part II - bifurcation to chaos, *Journal of Heat Transfer*, **115**, 367-376 (1993b).
- Mukutmoni D., Yang K.T., Thermal convection in small enclosures: an atypical bifurcation sequence, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **38**, 113-126 (1995).

- Nobrega J.M., *Computer Aided Design of Forming Tools for the Production of Extruded Profiles*. Tese de Doutorado, Universidade do Minho, Portugal, 2004.
- Nobrega J.M., Pinho F.T., Oliveira P.J., Carneiro O.S., Accounting for temperature-dependent properties in viscoelastic duct flows, *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*, **47**, 1141-1148 (2004).
- Oliveira P.J., Pinho F.T., Pinto G.A., Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method, *J. Non-Newt. Fluid Mech.*, **79**, 1-43 (1998).
- Pinho F.T., Coelho P.M., Fully developed heat transfer in annuli for viscoelastic fluids with viscous dissipation, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **138**, 7-21 (2006).
- Ouertatani N., Cheikh N.B., Beya B.B., Lili T., Numerical simulation of two-dimensional Rayleigh-Bénard convection in an enclosure, *C. R. Mecanique*, **336**, 464-470 (2008).
- Park, H.M., Ryu, D.H., Rayleigh-Bénard convection of viscoelastic fluids in finite domains. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **98**, 169-184 (2001a).
- Park, H.M., Ryu, D.H., Hopf bifurcation in thermal convection of viscoelastic fluids within finite domains. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **101**, 1-19 (2001b).
- Park, H.M., Ryu, D.H., Nonlinear convective stability problems of viscoelastic fluids in finite domains. *Rheol. Acta*, **41**, 427-440 (2002).
- Park, H.M., Park, K.S., Rayleigh-Bénard convection of viscoelastic fluids in arbitrary finite domains. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **47**, 2251-2259 (2004)
- Peres N., Afonso A.M., Alves M.A., Pinho F.T., Heat transfer enhancement in laminar flow of viscoelastic fluids through a rectangular duct, Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería, Barcelona, Espanha, Julho 2009.
- Rhie C.M., Chow L.W., A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation, *AIAA J.*, **21**, 1525-1532 (1983).
- Schlutter A., Lortz D., Busse F., On the stability of steady finite amplitude convection, *Journal of Fluid Mechanics*, **23**, 129-144 (1965).
- van Doormal J.P., Raithby G.D., Enhancements on the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flow, *Numer. Heat Transfer*, **7**, 147-163 (1984).

Anexo 1 Discretização das Equações Principais

De seguida é feita uma descrição sucinta do processo de discretização das equações (2) a (5), uma vez que este trabalho não teve por objectivo o desenvolvimento de código e/ ou algoritmo, mas somente o estudo de um tipo de escoamentos usando um código já disponível, mas ainda em estado de testes. As equações em coordenadas cartesianas são em primeiro lugar transformadas para coordenadas não ortogonais generalizadas, mas mantendo o vector velocidade e o tensor das tensões no sistema de coordenadas cartesianas. Desta transformação resultam as seguintes equações:

- equação da conservação de massa,

$$\frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j) = 0 \quad (\text{A1.1})$$

- equação da quantidade de movimento,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho J u_i) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j u_i) - \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) = -\beta_{li} \frac{\partial p}{\partial \xi_l} + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} \tau_{ij}) + J \rho g_i - \\ \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) \end{aligned} \quad (\text{A1.2})$$

- a equação da conservação de energia térmica,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_p J T) + \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho C_p u_j \beta_{lj} T) = \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(k \frac{1}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial T}{\partial \xi_m} \right) + \alpha \tau_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\beta_{lj} u_i) + \\ (1 - \alpha) \frac{\tau_{ij}}{2\lambda} f(\tau_{kk}) \end{aligned} \quad (\text{A1.3})$$

em que $J \equiv \det(J)$ e β_{lj} representa os cofactores de $\partial x_i / \partial \xi_l$ na matriz Jacobiana (J) da transformação $x_i = x_i(\xi_l)$, os quais representam componentes de área após integração das equações (Alves, 2004). A separação da energia mecânica entre elasticidade entrópica e energia elástica é quantificada pelo coeficiente α , e depende tanto do polímero como do tipo de escoamento. Neste trabalho foi considerado $\alpha = 1$, pelo que os dois últimos termos do lado esquerdo da equação (A1.3) se anulam e não serão considerados no processo de discretização (Pinho e Coelho, 2006).

- a equação constitutiva reológica do modelo PTT,

$$\begin{aligned}
JY(\tau_{kk,p})\tau_{ij,p} + \lambda \frac{\partial(J\tau_{ij,p})}{\partial t} + \lambda \frac{\partial((\beta_{lk}u_k\tau_{ij,p}))}{\partial \zeta_l} &= \eta_p \left(\beta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} + \beta_{li} \frac{\partial u_j}{\partial \zeta_l} \right) + \\
\lambda \left(\beta_{lk}\tau_{kj,p} \frac{\partial u_i}{\partial \zeta_l} + \beta_{lk}\tau_{ki,p} \frac{\partial u_j}{\partial \zeta_l} \right) - J \frac{\xi\lambda}{2} (\tau_{jk,p}\gamma_{ik} + \tau_{ik,p}\gamma_{jk}) - \frac{2}{3}\eta_p\beta_{lk} \frac{\partial u_k}{\partial \zeta_l} \delta_{ij} &
\end{aligned} \tag{A1.4}$$

em que $Y(\cdot)$, é uma função dependente do traço do tensor extra, $\tau_{kk,p}$ que conforme seja escolhida a versão linear ou exponencial do modelo PTT terá a forma da equação (7) ou a equação (6), respectivamente.

Em seguida mostram-se as equações principais na sua forma discretizada (para melhor compreender a notação utilizada e para uma descrição mais detalhada ver Oliveira et al. 1998; Alves, 2004).

1.1.1 Equação da conservação de massa

Integrando a equação (A1.1), numa célula genérica “P” obtém-se:

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho\beta_{ij}u_j) dV = \sum_{l=1}^3 (-1)^f \left[\Delta \left(\sum_j \rho B_{ij} u_j \right) \right]_l^P = \sum_{f=1}^6 (-1)^f \left(\sum_j \rho B_{ij}^f \tilde{u}_{j,f} \right) \tag{A1.5}$$

Aqui o somatório das diferenças centradas na célula P foi transformado no somatório das contribuições provenientes das 6 faces da célula, f.

Os caudais mássicos que atravessam as faces da célula são definidos por,

$$F_f = \sum_j \rho B_{ij}^f \tilde{u}_{j,f} \tag{A1.6}$$

A notação $\tilde{u}_{j,f}$, para a componente da velocidade u_j na face da célula é aqui usada para assinalar que não pode ser calculada por simples interpolação linear, mas por um esquema especial que assegure um bom acoplamento entre os campos de pressão e velocidade e que é conhecida por esquema de Rhie e Chow (1983). A equação da conservação de massa discretizada pode então ser reescrita como,

$$\sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f = 0 \tag{A1.7}$$

indicando que a soma dos caudais mássicos que entram no volume de controlo P é igual à soma dos caudais mássicos que o abandonam.

1.1.2 Equação da quantidade de movimento

Em seguida proceder-se-á à discretização em separado dos termos da equação (A1.2):

1.1.2.1 Termo inercial

O termo inercial é discretizado usando o método de Euler de 1ª ordem,

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial t} (J \rho u_i) dV = \frac{\rho V_p}{\delta t} (u_{i,p} - u_{i,p}^o) \quad (\text{A1.8})$$

como o método de cálculo utilizado é um método implícito, todas as variáveis que não ostentam índice temporal, referem-se ao novo tempo de integração.

1.1.2.2 Termo convectivo

O termo convectivo tem uma integração semelhante à integração da equação (A1.1),

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho \beta_{lj} u_j u_i) dV = \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_j \rho B_{lj} u_j \right) \right]_l^p = \sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f \hat{u}_{j,f} \quad (\text{A1.9})$$

em que os caudais mássicos nas faces F_f , são calculados com a equação (A1.6). O uso do til indica que a variável na face não é calculada por interpolação linear, mas por um esquema que assegure propriedades de transporte e possua elevada precisão, como o esquema CUBISTA (Alves et al. 2003).

1.1.2.3 Termo difusivo artificial implícito

A integração do termo difusivo adicionado artificialmente à equação (A1.2) fica,

$$-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) dV = -\sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{\eta_f}{V_f} B_f^2 [\Delta u_i]_f = -\sum_{f=1}^6 (-1)^f D_f (u_{i,f} - u_{i,p}) \quad (\text{A1.10})$$

em que $B_f = \|B_f^f\| = \sqrt{\sum_{j=1}^3 B_{fj}^f B_{fj}^f}$ representa a área superficial escalar da face f . O volume da

pseudo-célula centrada na face f é dado por $V_f = \sum_{j=1}^3 B_{fj}^f [\Delta x_j]_f^f$, e $D_{f,p} \equiv \eta_{p,f} B_f^2 / V_f$ representa

a condutância difusiva artificial.

1.1.2.4 Termo difusivo da tensão puramente newtoniana

A integração do termo difusivo da tensão puramente newtoniana resulta em,

$$\begin{aligned}
-\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \zeta_l} (\beta_{ij} \tau_{ij,s}) dV &= \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \left(\sum_{j=1}^3 B_{ij} \tau_{ij,s} \right) \right]_l^p = \\
-\eta_s \sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{1}{V_f} &\left(\sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{jf}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{jf}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right)
\end{aligned} \tag{A1.11}$$

apenas se deverão alinhar os fluxos difusivos com a direcção das faces, sendo as restantes contribuições adicionadas ao termo fonte,

$$S_{u_i - \text{difusão}}^{\text{newtoniana}} = \eta_s \sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{1}{V_f} \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{jf}^f B_{mj}^f [\Delta u_i]_m^f + \sum_{j=1}^3 \sum_{m=1}^3 B_{jf}^f B_{mi}^f [\Delta u_j]_m^f \right) \tag{A1.12}$$

em que os valores conhecidos do tempo de integração anterior são necessários na avaliação das diferenças de velocidade. O termo difusivo normal discretizado de forma implícita é dado por,

$$-\sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{\eta_s}{V_f} \sum_{j=1}^3 B_{jf}^f B_{jj}^f [\Delta u_i]_j^f = -\sum_{f=1}^6 (-1)^f D_{f,s} (u_{i,F} - u_{i,P}) \tag{A1.13}$$

em que $D_{f,s} \equiv \eta_s B_f^2 / V_f$ representa a condutância difusiva devido à tensão puramente newtoniana.

1.1.2.5 Termo do gradiente de pressão

Integrando o termo do gradiente de pressão obtém-se,

$$-\int_{V_p} \beta_{ii} \frac{\partial p}{\partial \zeta_l} dV = \sum_{l=1}^3 B_{ii}^p [\Delta p]_l^p \equiv S_{u_i - \text{pressão}} \tag{A1.14}$$

No cálculo dos gradientes de pressão é necessário o valor da pressão nas seis faces que delimitam a célula P. Estes valores são obtidos por interpolação linear entre o centro da célula P e o centro das células vizinhas.

1.1.2.6 Termo do divergente da tensão extra

O termo do divergente da tensão extra é avaliado explicitamente,

$$-\int_{V_p} \frac{\partial p}{\partial \zeta_l} (\beta_{ij} \tau_{ij}) dV = \sum_{f=1}^6 (-1)^f B_{ij}^f \tilde{\tau}_{ij,f} \equiv S_{u_i - \text{tensão extra}} \tag{A1.15}$$

o valor da tensão extra na face $\tilde{\tau}_{ij,f}$ tem de ser obtido com um método de interpolação apropriado, de forma a evitar o desacoplamento entre os campos de tensão e velocidade e que é inspirado também no método de Rhie e Chow (1983) para as velocidades. Além disso, e

na sequência de trabalhos mais recentes, utiliza-se não o esquema originalmente proposto em Oliveira et al. (1998), em que o fluxo convectivo apresenta uma pequena dependência do tempo, mas um esquema melhorado independente do tempo, o esquema F2 de Matos et al. (2009)

1.1.2.7 Termo difusivo artificial adicionado explicitamente

O termo difusivo adicionado ao membro direito da equação (A1.2), é discretizado da mesma forma que o termo difusivo adicionado ao membro esquerdo da mesma equação,

$$\begin{aligned} -\int_{V_P} \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left(\frac{\eta_p + \eta_p}{J} \beta_{lj} \beta_{lj} \frac{\partial u_i}{\partial \xi_l} \right) dV = \\ -\sum_{f=1}^6 (-1)^f (D_{f,p} + D_{f,s}) (u_{i,F}^{(n)} - u_{i,P}^{(n)}) \equiv S_{u_i - \text{difusão artificial}} \end{aligned} \quad (\text{A1.16})$$

sem bem que neste caso é avaliado explicitamente, ao contrario da equação (A1.1), em que implementa o termo difusivo de forma implícita.

Este termo é utilizado quando o fluido elástico não tem solvente, sendo necessário para dar estabilidade ao método numérico.

1.1.2.8 Assemblagem da equação discretizada

Juntando todos os elementos que figuram na equação da quantidade de movimento obtém-se,

$$a_P u_{i,P} - \sum_F a_F u_{i,F} = S_{u_i} + \frac{\rho V_P}{\delta t} u_{i,P}^o \quad (\text{A1.17})$$

em que os coeficientes a_F são obtidos por,

$$a_F = a_F^C + a_F^D \quad (\text{A1.18})$$

em que a_F^D representa a componente difusiva,

$$a_F^D = D_f \equiv D_{f,s} + D_{f,p} = (\eta_s + \eta_{p,f}) B_f^2 / V_f \quad (\text{A1.19})$$

e a_f^C representa a contribuição convectiva e depende do método de discretização. Para UDS a contribuição convectiva é dada por (Oliveira et al, 1998),

$$\begin{aligned} a_F^C = -F_f^- = -\min(F_f, 0) \text{ para uma face } \textit{positiva}, f^+ \\ a_F^C = +F_f^+ = +\max(F_f, 0) \text{ para uma face } \textit{negativa}, f^- \end{aligned} \quad (\text{A1.20})$$

Os cálculos aqui realizados utilizaram o esquema de alta resolução conhecido por CUBISTA, implementado através do método da correcção diferida. Este método implica que a contribuição convectiva para os coeficientes a_F sejam estes, mas é necessário adicionar ao termo fonte um termo que contabiliza a diferença entre os fluxos convectivos calculados pelos esquemas UDS e CUBISTA, como está explicado em Alves et al. (2003).

O coeficiente central da equação (A1.17) é dado por,

$$a_p = \frac{\rho V_p}{\delta t} + \sum_{F=1}^6 a_F \quad (\text{A1.21})$$

Por fim o termo fonte é obtido através da adição dos vários termos discretizados explicitamente,

$$S_{u_i} = S_{u_i - \text{difusão}}^{\text{newtoniana}} + S_{u_i - \text{pressão}} + S_{u_i - \text{tensão}}^{\text{extra}} + S_{u_i - \text{difusão}}^{\text{artificial}} + S_{u_i - \text{HRS}} \quad (\text{A1.22})$$

1.1.3 Equação da conservação da energia térmica

Em seguida proceder-se-á à discretização em separado dos termos da equação (A1.3):

1.1.3.1 Termo da derivada no tempo

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_p J T) dV = \frac{\rho C_p V_p}{\delta t} (T_p - T_p^o) \quad (\text{A1.23})$$

1.1.3.2 Termo convectivo

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} (\rho C_p u_j \beta_{lj} T) dV = \sum_{l=1}^3 \left[\Delta \sum_j (\rho C_p u_j \beta_{lj}) T \right]_l^p = \sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f C_p \hat{T}_f \quad (\text{A1.24})$$

A temperatura nas faces é interpolada pelo mesmo esquema usado para calcular as velocidades $\hat{u}_{j,f}$ da equação de quantidade de movimento e pelas mesmas razões.

1.1.3.3 Termo difusivo

$$\int_{V_p} \frac{\partial}{\partial \xi_l} \left[\frac{k}{J} \beta_{lj} \beta_{mj} \frac{\partial T}{\partial \xi_m} \right] dV = \sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{k_f}{V_f} B_{lj} B_{mj} [\Delta T]_f = \sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{k_f}{V_f} B_{lj} B_{mj} [T_F - T_p] \quad (\text{A1.25})$$

em que se pode fazer a seguinte simplificação,

$$D_f = \frac{k_f}{V_f} B_{lj} B_{mj} \quad \text{em que } D_f^N \text{ quando } l = m; \quad (A1.26)$$

$$\text{e } D_f^C \text{ quando } l \neq m$$

1.1.3.4 Assemblagem da equação discretizada

$$\frac{\rho C_p V_P}{\delta t} (T_P - T_P^o) + \sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f C_p T_f = \sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{k_f}{V_f} D_f [\Delta T]_f^f \quad (A1.27)$$

agrupando os termos da equação da conservação de energia térmica,

$$a_P T_P - \sum_F a_F T_F = S_T + \frac{\rho C_p V_P}{\delta t} T_P^o \quad (A1.28)$$

em que os termos a_F são obtidos por,

$$a_F = a_F^C + a_F^{DN} \quad (A1.29)$$

em que a_F^C representa a componente convectiva e depende do método de discretização. Para o esquema UDS a contribuição convectiva é dada por,

$$a_F^C = -F_f^- C_p = -C_p \min(F_f, 0) \quad \text{para uma face } \textit{positiva}, f^+ \quad (A1.30)$$

$$a_F^C = +F_f^+ C_p = +C_p \max(F_f, 0) \quad \text{para uma face } \textit{negativa}, f^-$$

O coeficiente central da equação (A1.28), é dado por,

$$a_P = \frac{\rho C_p V_P}{\delta t} + \sum_{F=1}^6 a_F \quad (A1.31)$$

Finalmente o termo fonte é dado por,

$$S_T = - \sum_F a_F^{DC} (T_P - T_F) \quad (A1.32)$$

Usando o método de alta resolução a equação (A1.27) fica,

$$\frac{\rho C_p V_P}{\delta t} (T_P - T_P^o) + \left[\sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f C_p \hat{T}_f \right]_{UDS} = \sum_{f=1}^6 (-1)^f \frac{k_f}{V_f} D_f [\Delta T]_f^f + \quad (A1.33)$$

$$\left[\sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f C_p \hat{T}_f \right]_{UDS} - \left[\sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f C_p \hat{T}_f \right]_{CUBISTA}$$

neste caso a equação discretizada não sofre alteração menos o termo fonte que agora fica,

$$S_T = - \sum_F a_F^{DC} (T_P^* - T_F^*) + \left\{ \sum_F a_F^C (T_P^* - T_F^*) \right\}_{UDS} - \left\{ \sum_F a_F^{DC} (T_P^* - T_F^*) \right\}_{CUBISTA} \quad (A1.34)$$

1.1.4 Equação constitutiva reológica do modelo PTT

A equação (5) é integrada e discretizada de forma semelhante á equação (3). É seguida uma análise termo a termo dos membros que constituem a equação.

1.1.4.1 Primeiro termo

O primeiro termo depois de integrado resulta em,

$$\int_{V_P} JY(\tau_{kk})\tau_{ij}dV = V_P Y[tr(\tau_P)]\tau_{ij,P} \quad (A1.35)$$

em que o traço do tensor das tensões extra no ponto P é dado por, $tr(\tau_P) = \sum_{k=1}^3 \tau_{kk,P}$.

1.1.4.2 Termo inercial

A integração do termo inercial é semelhante ao método usado na equação (2),

$$\int_{V_P} \lambda \frac{\partial}{\partial t} (J\tau_{ij}) dV = \frac{\lambda_P V_P}{\Delta t} (\tau_{ij,P} - \tau_{ij,P}^{(n)}) \quad (A1.36)$$

1.1.4.3 Termo convectivo

O termo convectivo também é integrado da mesma forma que o termo inercial,

$$\int_{V_P} \lambda \frac{\partial}{\partial \zeta_l} (\beta_{lk} u_k \tau_{ij,p}) dV = \frac{\lambda_P}{\rho} \sum_{f=1}^6 (-1)^f F_f \hat{\tau}_{ij,f} \quad (A1.37)$$

1.1.4.4 Restantes termos fonte

Os restantes termos do lado direito da equação (A1.4) são integrados sobre um volume de controlo genérico P , e discretizados de forma explicita. Todas estas contribuições são incluídas num termo fonte,

$$\begin{aligned} S_{\tau_{ij}} = & \eta_{p,P} \sum_{l=1}^3 \left(B_{lj}^P [\Delta u_i]_l^P + B_{li}^P [\Delta u_j]_l^P \right) + \\ & \lambda_p \sum_{l=1}^3 \left\{ \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^P \tau_{kj,P} \right) [\Delta u_i]_l^P + \left(\sum_{k=1}^3 B_{lk}^P \tau_{ki,P} \right) [\Delta u_j]_l^P \right\} - \\ & V_P \frac{\xi \lambda_p}{2} [\tau_{jk} \gamma_{ik} + \tau_{ik} \gamma_{jk}]_P - \frac{2}{3} \eta_{p,P} \left(\sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 B_{lk}^P [\Delta u_k]_l^P \right) \delta_{ij} + S_{\tau_{ij}-HRS} \end{aligned} \quad (A1.38)$$

em que a origem do termo $S_{\tau_{ij}-HRS}$ deve-se à utilização de esquemas de discretização de ordem elevada para o termo convectivo. Ao longo deste trabalho o modelo constitutivo reológico usado foi o de PTT simplificado, como tal o parâmetro $\xi = 0$.

1.1.4.5 Assemblagem da equação discretizada

agrupando os termos da equação constitutiva reológica obtemos,

$$a_P^\tau \tau_{ij,P} - \sum_{F=1}^6 a_F^\tau \tau_{ij,F} = S_{\tau_{ij}} + \frac{\lambda_P V_P}{\delta t} \tau_{ij,P}^{(n)} \quad (\text{A1.39})$$

em que os coeficientes a_F^τ apenas incorporam uma componente convectiva, devido a não existir um termo difusivo na equação constitutiva reológica. O coeficiente central é obtido por,

$$a_P^\tau = V_P \left(1 + \frac{\lambda_P}{\delta t} \right) + \sum_{k=1}^6 a_F^\tau \quad (\text{A1.40})$$

