



**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**  
**“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”**  
Faculdade de Ciências e Tecnologia  
Câmpus de Presidente Prudente

# Técnica para dedução do modelo algébrico PTT, aplicações e análises numéricas em escoamentos bidimensionais

Daiane Iglesia Dolci

Orientador: Profa. Dra. Gilcilene Sanchez de Paulo

Programa: Matemática Aplicada e Computacional

Presidente Prudente, maio de 2014.



**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

**Técnica para dedução do modelo algébrico  
PTT, aplicações e análises numéricas em  
escoamentos bidimensionais**

Daiane Iglesia Dolci

Orientador: Profa. Dra. Gilcilene Sanchez de Paulo

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, maio de 2014.

## FICHA CATALOGRÁFICA

D684t Dolci, Daiane Iglesia.  
Técnica para dedução do modelo algébrico PTT, aplicações e análises numéricas em escoamentos bidimensionais / Daiane Iglesia Dolci. - Presidente Prudente : [s.n.], 2014  
113 f.

Orientador: Gilcilene Sanchez de Paulo  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências e Tecnologia  
Inclui bibliografia

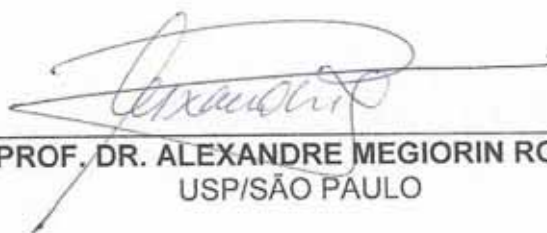
1. Modelo algébrico PTT. 2. Escoamentos viscoelásticos. 3. Análise numérica. I. Paulo, Gilcilene Sanchez de. II. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências e Tecnologia. III. Título.

BANCA EXAMINADORA



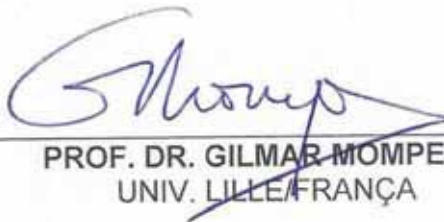
---

PROF.<sup>a</sup>. DR.<sup>a</sup>. GILCILENE SANCHEZ DE PAULO  
ORIENTADORA



---

PROF. DR. ALEXANDRE MEGIORIN ROMA  
USP/SÃO PAULO



---

PROF. DR. GILMAR MOMPEAN  
UNIV. LILLE/FRANÇA



---

DAIANE IGLESIA DOLCI

Presidente Prudente (SP), 15 de maio de 2014.

RESULTADO: Aprovada

*Dedico as pessoas que mais amo: Minha família*

# Agradecimentos

---

Agradeço primeiramente a Deus por estar ao meu lado nos momentos de alegria e de dificuldades, pois sem ele eu nada seria.

A minha Família, especialmente a minha mãe Rosa pelo amor, compreensão e apoio em todos os momentos da minha vida. As minhas irmãs Joice e Patrícia pelo amor, companheirismo e amizade.

Ao meu namorado Vagner pelo amor, companheirismo, compreensão e apoio nesses momentos finais do mestrado.

A minha orientadora e amiga Gilcilene que sempre esteve disponível a me ajudar com muita paciência. Agradeço pelo apoio, confiança e principalmente pelos ensinamentos e orientação.

Ao Prof. Dr. Gilmar Mompean, responsável pelo artigo utilizado como base nesse trabalho, pelas sugestões e contribuições durante o desenvolvimento do projeto.

Aos meus amigos Marieli, Rodrigo, Karina e Roberta que me aconselharam e apoiaram em todas as decisões e pela amizade verdadeira.

A minha querida amiga Beatriz (Bia) que foi uma mãe, me dando sua amizade, conselhos e força em todos os momentos.

Aos amigos do Pós-MAC: Hemily, José, Marília, Clóvis (Choquinho), Rafael (Pão), Juliano, Pedro, Reginaldo, Alisson, Gabriela, Patrícia, Renata, Wesley, Adriano, Bruno, Caroline (Carol), Crislaine, Gustavo, Heloísa, Jonas, Junior, Rafael, Luciene, Mariane (Xu) e os demais. Agradeço a todos pela ajuda, compreensão e principalmente pelos momentos de descontração.

Aos professores do Pós-MAC, agradeço pelo ensinamento e apoio de cada um.

Aos professores da UEMS pelo ensinamento e pela força em todo o curso de graduação.

Aos funcionários da FCT/UNESP pela ajuda e disponibilidade, principalmente aos funcionários do escritório da pós graduação pela ajuda e compreensão. Ao Fernando Pacanelli por esclarecer minhas dúvidas sempre com paciência e disponibilidade.

A FAPESP pelo apoio financeiro.

Finalmente agradeço a todos que diretamente e indiretamente me ajudaram a realizar este trabalho.

*“ Tudo vale a pena se alma não é pequena”.*  
*Fernando Pessoa*

# Resumo

---

Neste trabalho é apresentado o desenvolvimento teórico do modelo algébrico PTT (Phan-Thien-Tanner) e aplicação na simulação de escoamentos viscoelásticos. A implementação e obtenção das soluções numéricas são realizadas no ambiente de simulação FREEFLOW-2D. A metodologia numérica a ser empregada para resolver o modelo algébrico PTT é baseada no método de diferenças finitas, com discretização em uma malha deslocada. O fluido é modelado utilizando a técnica MAC (*Marker-and-Cell*) o que permite visualizar e localizar a superfície livre do fluido. As derivadas temporais da equação de quantidade de movimento e do modelo algébrico PTT são aproximadas pelos métodos de Euler implícito e Euler explícito, respectivamente. Os termos convectivos são aproximados pelo método ‘upwind’ de alta ordem CUBISTA (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection) e as derivadas espaciais por diferenças centrais. A verificação da metodologia numérica é feita na simulação de um escoamento confinado totalmente desenvolvido em um canal, comparando os resultados da solução numérica com a solução analítica que, neste trabalho, é obtida a partir do modelo algébrico PTT. Ainda considerando um escoamento viscoelástico no canal, é comparado o esforço computacional das simulações que utilizam o modelo algébrico e o modelo diferencial. Outro problema proposto para verificar o desempenho do modelo algébrico PTT é a contração abrupta 4:1, nessa geometria também expõem-se comparações do esforço computacional das simulações dadas pelo modelo algébrico e pelo modelo diferencial. Como aplicação em escoamentos com superfície livre, o modelo algébrico é testado em simulações de uma gota viscoelástica em uma placa rígida (*Impacting Drop*). Os resultados numéricos são comparados com os previstos pelo modelo diferencial PTT.

Palavras-Chave: *Modelo Algébrico PTT, Escoamentos Viscoelásticos, Análise Numérica.*



# Abstract

---

This work presents the theoretical development of the algebraic model PTT (Phan-Thien-Tanner) and its application to the simulation of viscoelastic flows. The implementation and numerical solutions are obtained in the simulation framework FREEFLOW-2D. The numerical methodology used to solve the algebraic PTT model is based on the finite difference method with discretization on a staggered grid. The fluid is modeled using the MAC (Marker-and-Cell) technique which allows for visualization and location the free surface of the fluid. The temporal derivative of the momentum equation and of the algebraic PTT model are approximated by the implicit and explicit Euler's methods. The convective term are approximate by the 'upwind' high order method CUBISTA (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection) and spatial derivatives by central differences. The numerical methodology verification is performed in a simulation of a confined flow fully developed in a channel, comparing the numerical solution with the analytical solution which is obtained by the algebraic PTT model. Still considering a viscoelastic flow in the channel, is compared the computational effort of the simulations using the algebraic model and differential model. Another problem proposed to verify the performance of the algebraic PTT model is the planar contraction 4:1. This geometry also they expose themselves comparisons of the computational effort of the simulations given by the algebraic model and the differential model. As application of free surface flows, the algebraic model is tested in simulations of a viscoelastic drop in a rigid plate (Impacting Drop). The numerical results are compared with the expected results obtained by the differential PTT model.

Keywords: *Algebraic Model PTT, Viscoelastic Flows, Numerical Analysis.*



# Sumário

---

<b>Resumo</b>	<b>7</b>
<b>Abstract</b>	<b>9</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>12</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>14</b>
<b>Introdução</b>	<b>15</b>
<b>Capítulos</b>	
<b>1 Formulação matemática do modelo algébrico para o tensor extra-tensão</b>	<b>21</b>
1.1 Equações governantes . . . . .	21
1.1.1 Modelo viscoelástico diferencial PTT . . . . .	22
1.2 Parâmetros adimensionais adotados . . . . .	23
1.3 Modelo viscoelástico algébrico PTT . . . . .	25
1.3.1 Escolha e justificativa da hipótese assumida para a variação do tensor $\mathbf{\Gamma}$ . . . . .	27
1.3.2 Modelo algébrico explícito para o tensor extra-tensão . . . . .	29
1.4 Condições auxiliares . . . . .	33
1.4.1 Condição inicial . . . . .	33
1.4.2 Condições de contorno . . . . .	33
1.4.3 Superfície livre . . . . .	35
<b>2 Metodologia numérica</b>	<b>37</b>
2.1 Metodologia GENSMAC para escoamentos viscoelásticos . . . . .	37
2.1.1 Malha computacional . . . . .	37
2.1.2 Identificação de células . . . . .	38
2.1.3 Método da projeção . . . . .	39
2.1.4 Integração temporal aplicada na equação de quantidade de movimento	40
2.1.5 Integração temporal aplicada no modelo algébrico PTT . . . . .	41
2.2 Discretização espacial por diferenças finitas . . . . .	42
2.2.1 Equação de quantidade de movimento . . . . .	42
2.2.2 Equações do modelo algébrico . . . . .	45
2.2.3 Equações do modelo algébrico em fronteiras rígidas . . . . .	47
2.2.4 Equações do modelo algébrico no injetor e ejetor . . . . .	50
2.2.5 Equação de Poisson para $\psi$ . . . . .	52
2.2.6 Equação para velocidade solenoidal . . . . .	54
2.2.7 Equação para a pressão final . . . . .	56
2.3 Algoritmo Computacional utilizado neste trabalho . . . . .	56

<b>3</b>	<b>Resultados analíticos e numéricos</b>	<b>59</b>
3.1	Escoamento totalmente desenvolvido em um canal . . . . .	59
3.1.1	Solução analítica a partir do modelo algébrico PTT para escoamentos totalmente desenvolvidos em um canal . . . . .	59
3.1.2	Verificação da metodologia numérica . . . . .	64
3.1.3	Esforço computacional . . . . .	68
3.1.4	Estabilidade . . . . .	72
3.2	Problema contração 4:1 . . . . .	75
3.2.1	Verificação numérica . . . . .	76
3.2.2	Simulações de um fluido PTT . . . . .	78
3.3	Modelo algébrico aplicado em escoamentos com superfície livre . . . . .	82
3.3.1	Escoamento entre placas paralelas . . . . .	82
3.3.2	Impacto de uma gota numa superfície rígida . . . . .	83
3.3.3	Influência de $\epsilon$ . . . . .	87
3.3.4	Influência de $\beta$ . . . . .	89
	<b>Considerações finais</b>	<b>92</b>
	<b>Referências</b>	<b>94</b>
	<b>Apêndices</b>	
<b>A</b>	<b>Equações governantes em coordenadas cartesianas bidimensionais</b>	<b>99</b>
A.1	Equações que descrevem escoamentos newtonianos . . . . .	99
A.2	Equação que descrevem o escoamento de um fluido PTT . . . . .	100
<b>B</b>	<b>Operações matemáticas para obtenção do modelo algébrico explícito</b>	<b>103</b>
B.1	Equação diferencial PTT em termos dos tensores $\mathbf{S}$ e $\mathbf{W}$ . . . . .	103
B.2	Matrizes resultantes de $(\mathbf{S}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{S})$ e de $\mathbf{S}^2$ . . . . .	104
B.3	Cálculo dos valores $\{\mathbf{S}^2\}$ e $\{\mathbf{W}^2\}$ . . . . .	104
B.4	Cálculo dos valores $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}^2\}$ , $\{\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{S}^2\}$ , $\{\mathbf{S}^3\}$ , $\{\mathbf{S}\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^2\}$ e $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^3\}$ . . . . .	105
B.4.1	Cálculo do valor $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^3\}$ pelo Teorema de Caley-Hamilton . . . . .	106
B.5	Cálculo dos valores $\{\mathbf{S}\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}^2\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ e $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\mathbf{W}\}$ . . . . .	107

---

# Lista de Figuras

1.1	Ilustração dos tipos de fronteiras considerada neste trabalho. . . . .	34
2.1	Estrutura de uma célula deslocada no caso bidimensional. . . . .	38
2.2	Ilustração do Caso 1 (Figura (a)), Caso 2 (Figuras (b) e (c)) e Caso 3 (Figuras (d) e (e)). . . . .	45
2.3	Ilustração de uma célula de contorno rígido paralelo ao eixo $x$ (Figura (a)), $y$ (Figura (b)) e quina (Figura (c)). . . . .	50
2.4	Ilustração de uma célula do injetor paralelo ao eixo $x$ (Figura (a)) e paralelo ao eixo $y$ (Figura (b)). . . . .	51
2.5	Ilustração de uma célula do ejetor paralelo ao eixo $x$ (Figura (a)) e paralelo ao eixo $y$ (Figura (b)). . . . .	52
2.6	Ilustração de uma célula do injetor ou fronteira rígida paralelo ao eixo $x$ (Figura (a)) e paralelo ao eixo $y$ (Figura (b)) . . . . .	53
2.7	Ilustração de célula de superfície livre com uma aresta em contato com células vazias (Figura (a)) e de uma célula de superfície livre com duas arestas em contato com células vazias (Figura (b)). . . . .	54
2.8	Ilustração de célula de superfície livre com uma aresta em contato com células vazias (Figura (a)) e de uma célula de superfície livre com duas arestas em contato com células vazias (Figura (b)). . . . .	56
3.1	Ilustração da largura no canal, onde a solução analítica depende da coordenada $y$ . . . . .	61
3.2	Ilustração do canal paralelo ao eixo $x$ . . . . .	65
3.3	Comparação da solução numérica com a solução analítica das componentes $T^{xy}$ (a), $T^{xx}$ (b) e velocidade $u$ (c), em $x = 5L$ e $t = 50s$ com os parâmetros adimensionais $Re = 10^{-2}$ e $W_i = 0.2$ , $\beta = 0.6$ e $\epsilon = 0.5$ . . . . .	66
3.4	Teste de convergência das malhas espaciais das componente $u$ , $T^{xx}$ e $T^{xy}$ . . . . .	67
3.5	Menor determinante de $\mathbf{A}$ e o menor $I_{\mathbf{T}}$ no domínio de simulação variando o passo temporal $\delta t$ , com os parâmetros adimensionais $\beta = 0.4$ , $Re = 10^{-2}$ , $W_i = 0.2$ e $\epsilon = 0.5$ (Caso 1). . . . .	73
3.6	Menor determinante de $\mathbf{A}$ e o menor valor de $I_{\mathbf{T}}$ no domínio de simulação variando o passo temporal $\delta t$ , com os parâmetros adimensionais $\beta = 0.6$ , $Re = 10^{-2}$ , $W_i = 0.2$ e $\epsilon = 0.05$ (Caso 2). . . . .	74
3.7	Comparação da solução numérica com a solução analítica com os parâmetros adimensionais $\beta = 0.4$ , $Re = 10^{-2}$ , $W_i = 0.2$ e $\epsilon = 0.5$ (Caso 1), com $\delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ em $t = 50s$ . . . . .	74
3.8	Comparação da solução numérica com a solução analítica com os parâmetros adimensionais $\beta = 0.6$ , $Re = 10^{-2}$ , $W_i = 0.2$ e $\epsilon = 0.05$ (Caso 2), com $\delta t = 5.0 \times 10^{-4}$ em $t = 50s$ . . . . .	75
3.9	Geometria da contração planar 4:1 no caso bidimensional. Fonte [20]. . . . .	76

3.10	Resultados obtidos neste trabalho das componentes do tensor extra-tensão dadas pelos modelos algébrico e diferencial PTT reduzidos a Oldroyd-B (Figuras (a), (c) e (e)) e resultados do modelo diferencial Oldroyd-B extraídos do trabalho [20] (Figuras (b), (d) e (f)). . . . .	77
3.11	Comparação das componentes $T^{xx}$ , $T^{yy}$ , $T^{xy}$ e $u$ e $v$ obtidas pelos modelos algébrico e diferencial PTT, em $y = 1.0$ e $0.0 \leq x \leq 6.0$ . . . . .	78
3.12	Campo de velocidade dado pelo modelo algébrico e pelo modelo diferencial. . . . .	79
3.13	Comparação das linhas de contorno da diferença $(T^{xx} - T^{yy})$ , com $\delta x = \delta y = 0.025$ em $t = 50s$ . . . . .	80
3.14	Comparação das linhas de contorno da componente $T^{xy}$ , com $\delta x = \delta y = 0.025$ em $t = 50s$ . . . . .	80
3.15	Figura retirada de [20] caracterizando as regiões de diferentes escoamentos. . . . .	81
3.16	Ilustração do escoamento de um fluido viscoelástico entre placas paralelas em $t = 5s$ e $t = 10s$ . . . . .	83
3.17	Comparação da solução numérica com a solução analítica das componentes $u$ , $T^{xx}$ e $T^{xy}$ em $x = 5L$ e $t = 50s$ . . . . .	84
3.18	Verificação numérica da variação do comprimento de uma gota de um fluido dada pelo modelo diferencial PTT reduzido a Oldroyd-B ( $\epsilon = 0.0$ ). . . . .	85
3.19	Verificação numérica da variação do comprimento de uma gota de um fluido dada pelos modelos diferencial PTT e algébrico PTT, ambos reduzidos a Oldroyd-B, isto é, $\epsilon = 0.0$ , juntamente com os dados obtidos pelo modelo Oldroyd-B. . . . .	85
3.20	Variação do comprimento de uma gota viscoelástica com relação ao tempo: Comparação do modelo diferencial com o modelo algébrico PTT variando $W_i$ . . . . .	86
3.21	Variação do comprimento de uma gota viscoelástica com relação ao tempo: Comparação do modelo diferencial com o modelo algébrico PTT variando $\epsilon$ . . . . .	88
3.22	(a) Comparação do comprimento de uma gota viscoelástica dada pelo modelo algébrico PTT variando o parâmetro $\epsilon$ ; (b) zoom da Figura (a); (c) Comparação do comprimento de uma gota viscoelástica dada pelo modelo diferencial PTT variando o parâmetro $\epsilon$ ; (d) zoom da Figura (c). . . . .	88
3.23	Gráfico superior: variação da viscosidade elongacional em função da taxa de elongação. Gráfico inferior: variação da viscosidade cisalhante em função da taxa de cisalhamento. Fonte: Tomé et al. [33]. . . . .	89
3.24	Variação do comprimento de uma gota viscoelástica com relação ao tempo: Comparação do modelo diferencial com o modelo algébrico PTT variando $\beta$ . . . . .	90
3.25	Visualização bidimensional do escoamento de uma gota analisando o perfil da componente de velocidade $u$ dada pelo modelo algébrico PTT e pelo modelo diferencial PTT, com $\beta = 0.6$ , $Re = 5.0$ , $W_i = 1.0$ , $\epsilon = 0.2$ , $Fr \cong 2.26$ . . . . .	92

# Lista de Tabelas

---

3.1	Erros relativos obtidos da solução numérica dada pelo modelo algébrico comparados com o erros relativos obtidos da solução numérica dada pelo modelo diferencial. . . . .	67
3.2	Ordem de convergência espacial obtida a partir do modelo algébrico PTT comparada com a convergência espacial obtida a partir do modelo diferencial PTT. . . . .	68
3.3	Comparação do esforço computacional variando a constante $\beta$ . . . . .	70
3.4	Comparação do esforço computacional variando a constante $W_i$ . . . . .	71
3.5	Comparação do esforço computacional variando a constante $\epsilon$ . . . . .	71
3.6	Comparação do esforço computacional no problema da contração 4:1. . . . .	82
3.7	Diferença do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico PTT e diferencial PTT. . . . .	87
3.8	Diferença do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico PTT e diferencial PTT. . . . .	88
3.9	Diferença do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico PTT e diferencial PTT . . . . .	90



# Introdução

---

Um fluido é uma substância que se deforma continuamente quando submetida a uma tensão de cisalhamento, não importando o quão pequena possa ser essa tensão. Os fluidos podem ser classificados como newtonianos ou não-newtonianos. Nos fluidos newtonianos cada componente de tensão cisalhante aplicada é linearmente proporcional a taxa de deformação. A constante de proporcionalidade é a viscosidade dinâmica. Em fluidos não-newtonianos essa proporcionalidade não acontece.

Uma classe de fluidos não-newtonianos são os viscoelásticos. Esses fluidos possuem características de líquidos viscosos com propriedades elásticas, ou seja, possuem propriedades elásticas e viscosas acopladas. Estas substâncias quando submetidas à tensão de cisalhamento sofrem uma deformação e quando esta cessa, ocorre uma certa recuperação da deformação sofrida (comportamento elástico).

Os fluidos viscoelásticos vêm ocupando um espaço cada vez maior nas comunidades científica e tecnológica uma vez que em aplicações industriais muitos materiais no processo de fabricação, se comportam como fluidos viscoelásticos, tais como os polímeros que são materiais que apresentam comportamento viscoelástico com ampla utilização: plásticos, tinta, fluido de perfuração na indústria do petróleo, etc.

As equações que descrevem o escoamento de um fluido são as equações de Navier-Stokes. Para escoamentos isotérmicos essas equações representam dois princípios Físicos:

- Conservação da massa.
- Conservação de quantidade de movimento, ou também conhecida conservação de momento.

As equações diferenciais de Navier-Stokes não-lineares, permitem determinar os campos de velocidade e pressão num escoamento. Tratando-se de escoamentos de fluidos viscoelásticos, além das equações de Navier-Stokes, faz-se necessário uma equação constitutiva que possa representar a viscoelasticidade de um escoamento. Essa equação é dada por modelos diferenciais, dentre eles, o modelo UCM (*Upper Convected Maxwell*), Oldroyd-B, PTT (*Phan-Thien-Tanner*), FENE-P (*Finitely Extensible Non-linear Elastic*) e Giesekus, entre outras [38].

No presente trabalho pretende-se analisar numericamente os casos em que a viscoelasticidade é representada por um modelo algébrico, o qual é formulado a partir do modelo diferencial PTT [37].

O estudo e o desenvolvimento de um modelo algébrico para escoamentos viscoelásticos a partir da equação constitutiva diferencial Oldroyd-B foi proposto em 1998 por Gilmar Mompean e co-autores [19]. Em 2002, Mompean estendeu essa técnica para o modelo diferencial não-linear PTT [20].

No trabalho pioneiro [19], as comparações entre o modelo algébrico e o modelo diferencial Oldroyd-B para o caso do problema da contração 4 : 1 foram satisfatórias, no sentido de que a formulação algébrica reproduz as componentes do tensor extra-tensão para escoamentos puramente elongacional e puramente cisalhantes. Outros trabalhos que

apresentam resultados numéricos do modelo algébrico Oldroyd-B foram desenvolvidos por Thais e colaboradores ([25], [24]). No trabalho [20], Mompean não apresentou resultados numéricos originais, portanto, neste trabalho os estudos da metodologia numérica serão originais. Recentemente, Mompean e co-autores aplicaram outra técnica para se obter um modelo algébrico para escoamentos tridimensionais com superfícies livres do tipo UCM (Upper-Convected Maxwell) [18].

No presente trabalho, a implementação das rotinas necessárias advindas da metodologia numérica desenvolvida é realizada na plataforma FREEFLOW-2D, sendo a mesma composta por três módulos:

- Modflow-2D: responsável pela inserção dos dados que caracterizam um escoamento a ser simulado.
- Simflow-2D: resolve as equações governantes em duas dimensões para um fluido incompressível, cuja geometria do problema e do local onde ocorre o escoamento já foram anteriormente modelados no modflow-2D.
- Visflow-2D: permite visualizar os resultados obtidos no Simflow-2D.

O interessante é que esta plataforma permite que o usuário insira novas rotinas, escritas em linguagem C de programação, para assim estudar o tema particular de interesse. Mais detalhes dessa plataforma podem ser encontrados em [42]. Em resumo, a metodologia utilizada na plataforma FREEFLOW-2D é baseada em métodos de projeção, originalmente proposto por Chorin [3] e Temam [40]. Tal método tem como ideia central desacoplar velocidade e pressão nas equações de Navier-Stokes e resolver essas variáveis separadamente. Com o objetivo de simular escoamentos viscoelásticos, faz-se a inserção de um tratamento para a solução do tensor extra-tensão de acordo com as equações do novo modelo. O método numérico implementado nesta plataforma é obtido pela técnica de diferenças finitas em uma malha deslocada seguindo as extensões da formulação MAC (Marker-and-Cell) (ver, por exemplo, [9], [34], [42]).

No presente trabalho, a verificação da metodologia numérica implementada é realizada utilizando o problema do escoamento confinado totalmente desenvolvido em um canal. Para esta verificação, compara-se os resultados numéricos obtidos das simulações com a solução analítica que pode ser obtida a partir do modelo diferencial PTT [11] e do modelo algébrico PTT, sendo que, ambos os modelos fornecem um sistema de equações cujas soluções analíticas são coincidentes.

Um segundo problema apresentado neste trabalho é o problema da contração 4:1. Inicialmente, os resultados das simulações que utilizam os modelos algébrico e diferencial PTT reduzidos a Oldroyd-B são comparados com os resultados do trabalho realizado por Mompean (2002). Em seguida, são realizadas simulações numéricas dadas pelos modelos algébrico e diferencial PTT com o objetivo de comparar os resultados obtidos dessas simulações.

Na aplicação do modelo algébrico em escoamentos com superfície livre são realizadas simulações do escoamento de uma gota viscoelástica incidindo numa placa rígida (*impacting drop*), inicialmente comparando os resultados obtidos nesse trabalho com os resultados da literatura [8], em seguida compara-se os resultados numéricos obtidos pelos modelo algébrico e diferencial PTT. Também é verificado a influência das constantes adimensionais  $W_i$ ,  $\beta$  e do parâmetro  $\epsilon$  presente em ambos os modelos.

O presente trabalho é composto pelos seguintes capítulos:

- Capítulo 1: expõem-se as equações básicas que descrevem escoamentos newtonianos e não-newtonianos, incompressíveis e isotérmicos. Os escoamentos viscoelásticos são

escritos na forma conservativa dimensional e adimensional. A formulação matemática do modelo algébrico PTT é apresentada e por fim são expostas as condições auxiliares utilizadas neste trabalho.

- Capítulo 2: apresentam-se a metodologia adotada para resolver o campo de velocidade e pressão, as aproximações das derivadas espaciais e temporais das equações de Navier-Stokes e do modelo algébrico PTT, por fim o algoritmo computacional.
- Capítulo 3: apresentam-se a obtenção da solução analítica dada pelo modelo algébrico PTT de um escoamento totalmente desenvolvido em um canal, os resultados numéricos obtidos do escoamento confinado e com superfície livre entre placas paralelas, da contração 4:1 e de uma gota viscoelástica numa placa rígida.

Em seguida, nas considerações finais serão expostos os comentários sobre os resultados obtidos das simulações em que o modelo algébrico PTT representa a viscoelasticidade.

Para um maior detalhamento deste trabalho, os Apêndices A e B expõem as equações básicas em coordenadas cartesianas e cálculos realizados para a obtenção do modelo algébrico PTT.



# Formulação matemática do modelo algébrico para o tensor extra-tensão

## 1.1 Equações governantes

Considere escoamentos isotérmicos e incompressíveis, as equações na forma dimensional que modelam esse tipo de escoamento são

- Equação da continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.1)$$

e

- Equação do momento

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^\top) \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad (1.2)$$

onde, para escoamentos bidimensionais  $\mathbf{u} = [u \ v]^\top$  é o vetor velocidade dependente das coordenadas cartesianas  $\mathbf{x} = [x \ y]^\top$  e do tempo  $t$ , ou seja,  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(x, y, t)$ , com  $t > 0$ . O tensor tensão total  $\boldsymbol{\sigma}$  é dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}, \quad (1.3)$$

onde  $p$  é a pressão,  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade, e  $\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau^{xx} & \tau^{xy} \\ \tau^{xy} & \tau^{yy} \end{bmatrix}$  é o tensor simétrico das tensões. A pressão  $p$  e o tensor das tensões  $\boldsymbol{\tau}$  também estão em função das coordenadas cartesianas e o do tempo, ou seja,  $p = p(x, y, t)$  e  $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}(x, y, t)$ . A densidade  $\rho$  por hipótese é constante (pelo fato do escoamento ser incompressível) e  $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, t)$  é o campo gravitacional.

O tensor das tensões  $\boldsymbol{\tau}$  em escoamentos newtonianos é linearmente proporcional ao tensor taxa de deformação. Dessa forma, considerando um escoamento incompressível  $\boldsymbol{\tau}$  é escrito da seguinte maneira

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{S}, \quad (1.4)$$

onde  $\eta_s$  representa a viscosidade do fluido newtoniano e  $\mathbf{S}$  é o tensor simétrico taxa de deformação escrito na forma vetorial como,

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top), \quad (1.5)$$

ou seja, em coordenadas cartesianas bidimensionais

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left( \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{array} \right] \right) = \left[ \begin{array}{cc} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{array} \right]. \quad (1.6)$$

Assim, reescrevendo o tensor  $\boldsymbol{\sigma}$ , tem-se

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta_s \mathbf{S} - p\mathbf{I}. \quad (1.7)$$

Portanto, a equação (1.2) para escoamentos newtonianos, isotérmicos e incompressíveis e a equação da continuidade (1.1) são escritas em coordenadas cartesianas bidimensionais na forma conservativa da seguinte maneira

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \rho g_x, \quad (1.8)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left[ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] + \rho g_y, \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (1.10)$$

Detalhes de como obter as equações (1.8)-(1.10) são encontrados no Apêndice A.

### 1.1.1 Modelo viscoelástico diferencial PTT

Considerando escoamentos viscoelásticos, supõe-se que  $\boldsymbol{\tau}$  é dado por

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{S} + \mathbf{T}, \quad (1.11)$$

onde  $\eta_s$  é a viscosidade dinâmica do solvente newtoniano,  $\mathbf{S}$  é o tensor taxa de deformação dado pela equação (1.5) e  $\mathbf{T}$  é o tensor extra-tensão conhecido como contribuição não-newtoniana, representado matricialmente por

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix},$$

o qual obedece a equação constitutiva não-linear PTT [37]

$$f(I_{\mathbf{T}})\mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2\eta_p \mathbf{S}, \quad (1.12)$$

onde  $\lambda$  é o tempo de relaxação do fluido,  $\eta_p$  representa a viscosidade polimérica do fluido. Neste trabalho, a função  $f(I_{\mathbf{T}})$  é dada pela expressão

$$f(I_{\mathbf{T}}) = 1 + \frac{\lambda\epsilon}{\eta_p} I_{\mathbf{T}} \quad (1.13)$$

sendo que, o parâmetro  $\epsilon$  está relacionado com o comportamento elongacional do modelo, quando  $\epsilon = 0$  implica em  $f(I_{\mathbf{T}}) = 1$  e a equação (1.12) representa o modelo Oldroyd-B.

A notação  $I_{\mathbf{T}}$  é usada para representar o traço do tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$  e o símbolo  $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}$  representa a derivada convectada, dada por

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \frac{D\mathbf{T}}{Dt} - \mathbf{T} \cdot (\nabla \mathbf{u})^{\top} - (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{T}, \quad (1.14)$$

onde

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = \left( \frac{\partial\mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{T}) \right) \quad (1.15)$$

é a derivada material.

Assim, as equações que descrevem escoamentos viscoelásticos, isotérmicos e incompressíveis na forma dimensional e conservativa em coordenadas cartesianas bidimensionais, são dadas por

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} + \rho g_x, \quad (1.16)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} + \rho g_y, \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.18)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})T^{xx} + \lambda \left( \frac{DT^{xx}}{Dt} - 2T^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} - 2T^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 2\eta_p \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1.19)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})T^{xy} + \lambda \left( \frac{DT^{xy}}{Dt} - T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} - T^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \eta_p \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (1.20)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})T^{yy} + \lambda \left( \frac{DT^{yy}}{Dt} - 2T^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + 2T^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -2\eta_p \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (1.21)$$

Detalhes de como obter as equações (1.16)-(1.21) são encontrados no Apêndice A.

## 1.2 Parâmetros adimensionais adotados

As grandezas dimensionais podem ser agrupadas em parâmetros adimensionais que passam a caracterizar os escoamentos. Considerando escoamentos isotérmicos, incompressíveis e viscoelásticos é necessário definir as variáveis adimensionais (acrescidas do índice \*).

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L}, \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U}, t^* = \frac{tU}{L}, \mathbf{g}^* = \frac{\mathbf{g}}{g_0}, \mathbf{p}^* = \frac{\mathbf{p}}{\rho_0 U^2}, \boldsymbol{\tau}^* = \frac{\boldsymbol{\tau}}{\rho_0 U^2}, \mathbf{T}^* = \frac{\mathbf{T}}{\rho_0 U^2} \quad (1.22)$$

onde  $L$ ,  $U$  e  $\rho_0$  são os valores de referência do comprimento, velocidade e densidade, respectivamente. Como o escoamento é incompressível, pode-se tomar  $\rho = \rho_0$ .

Existem vários números adimensionais que caracterizam os escoamentos. Os números adimensionais que surgem neste trabalho são:

- *Número de Reynolds (Re)*: é um quociente entre forças inerciais ( $U\rho$ ) e as forças viscosas  $\eta_0/L$ . Desta forma,  $Re$  é expresso por

$$Re = \frac{\rho U L}{\eta_0},$$

onde  $\eta_0$  é a viscosidade total do fluido à taxa de nula de cisalhamento, que é dada pela soma da viscosidade do solvente newtoniano  $\eta_s$  com a viscosidade do polímero não-newtoniano  $\eta_p$ , isto é,

$$\eta_0 = \eta_s + \eta_p.$$

- *Número de Froude ( $Fr$ )*: estabelece a razão entre as forças inerciais e as forças gravitacionais, sendo útil para caracterizar escoamentos nos quais força gravitacional tem papel importante. Assim, o número de Froude é dado por

$$Fr = \frac{U^2}{gL}. \quad (1.23)$$

- *Número de Weissenberg ( $W_i$ )*: esse número adimensional é usado em escoamentos viscoelásticos, sendo o quociente entre a escala de tempo característica de um fluido ( $\lambda$ ) e a escala de tempo característica do escoamento ( $L/U$ ). Assim o número Weissenberg é dado por:

$$W_i = \frac{\lambda U}{L}. \quad (1.24)$$

- Constante  $\beta$ :

A constante  $\beta \in (0, 1)$  é uma quantidade que controla a contribuição do solvente newtoniano, dada por

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0}.$$

Quanto menor  $\beta$ , menor a quantidade de solvente adicionada ao fluido viscoelástico.

Desta forma, substituindo as variáveis adimensionais (1.22) em (1.2), (1.1) e (1.12) e agrupando os valores de  $Re$ ,  $W_i$  e  $Fr$ , as equações da quantidade de movimento, da continuidade e constitutiva PTT, na forma adimensional são dadas, respectivamente, por (os asteriscos foram omitidos por simplicidade)

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^\top) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \quad (1.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.26)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})\mathbf{T} + W_i \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2 \frac{(1-\beta)}{Re} \mathbf{S}, \quad (1.27)$$

onde  $f(I_{\mathbf{T}})$  linear é dada por

$$f(I_{\mathbf{T}}) = 1 + \epsilon \frac{Re W_i}{(1-\beta)} I_{\mathbf{T}}. \quad (1.28)$$

As equações (1.25) - (1.27) em coordenadas cartesianas bidimensionais são escritas da seguinte maneira:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} + \frac{1}{Fr^2} g_x, \quad (1.29)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} + \frac{1}{Fr^2} g_y, \quad (1.30)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (1.31)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})T^{xx} + W_i \left( \frac{DT^{xx}}{Dt} - 2T^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} - 2T^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 2 \frac{(1-\beta)}{Re} \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1.32)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})T^{xy} + W_i \left( \frac{DT^{xy}}{Dt} - T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} - T^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{(1-\beta)}{Re} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (1.33)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})T^{yy} + W_i \left( \frac{DT^{yy}}{Dt} - 2T^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + 2T^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 2 \frac{(1-\beta)}{Re} \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (1.34)$$

### 1.3 Modelo viscoelástico algébrico PTT

A formulação do modelo algébrico para o tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$  foi obtida originalmente a partir da equação constitutiva Oldroyd-B por Mompean et al. [19]. Em seguida, no trabalho [20] o autor formulou um modelo algébrico a partir da equação constitutiva não-linear PTT. Assim, neste trabalho será exposta a formulação de um modelo algébrico a partir da equação constitutiva PTT.

Para dedução do modelo algébrico, define-se o tensor taxa de rotação  $\mathbf{W}$  na forma vetorial dado por

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^\top), \quad (1.35)$$

que escrito matricialmente vem,

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \frac{1}{2} \left( \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Além disso, usa-se o conceito de decomposição do tensor extra-tensão, isto é, o tensor  $\mathbf{T}$  pode ser decomposto da seguinte maneira

$$\mathbf{T} = \underbrace{\mathbf{T} - \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}\mathbf{I}}_{\mathbf{\Gamma}} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}\mathbf{I}, \quad (1.37)$$

$$(1.38)$$

onde

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{T} - \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}\mathbf{I} \quad (1.39)$$

é denominado tensor deviatórico e o tensor  $\frac{I_{\mathbf{T}}}{3}\mathbf{I}$  é denominado tensor hidrostático.

O modelo algébrico consiste em calcular o tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$  a partir da equação (1.37), onde o valor de  $\mathbf{\Gamma}$  e de  $I_{\mathbf{T}}$  serão previamente conhecidos. Então, o que se faz é representar  $\mathbf{\Gamma}$  não pela equação (1.39), mas por um polinômio em função dos tensores taxa de deformação  $\mathbf{S}$  e taxa de rotação  $\mathbf{W}$  (ver [41] e [44]), isto é,

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}(\mathbf{S}, \mathbf{W}) = \sum_{n=1}^N \gamma^n \mathbf{P}^{(n)}, \quad (1.40)$$

onde os tensores da base  $\mathbf{P}^{(n)}$  são simétricos com traço nulo em função de  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{W}$ . Os coeficientes  $\gamma^n$  são escalares em função do traço de  $\mathbf{\Gamma}$ ,  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{W}$ .

No caso de escoamentos bidimensionais a representação do tensor  $\mathbf{\Gamma}$  é dada pela expansão [43]

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{\{\mathbf{\Gamma S}\}}{\{\mathbf{S}^2\}} \mathbf{S} + \frac{\{\mathbf{\Gamma W S}\}}{\{\mathbf{S}^2\} \{\mathbf{W}^2\}} (\mathbf{S W} - \mathbf{W S}) + \frac{6 \{\mathbf{\Gamma S}^2\}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left( \mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right), \quad (1.41)$$

onde,

$$\mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{S}, \quad \mathbf{P}^{(2)} = \mathbf{S}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{S}, \quad \mathbf{P}^{(3)} = \mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I}$$

e

$$\gamma^1 = \frac{\{\mathbf{S}\mathbf{S}\}}{\{\mathbf{S}^2\}}, \quad \gamma^2 = \frac{\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}}{\{\mathbf{S}^2\} \{\mathbf{W}^2\}}, \quad \gamma^3 = \frac{6 \{\mathbf{S}\mathbf{S}^2\}}{\{\mathbf{S}^2\}}.$$

Os valores  $\{\mathbf{S}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\mathbf{S}^2\}$ ,  $\{\mathbf{W}^2\}$  e  $\{\mathbf{S}\mathbf{S}^2\}$  são os traços dos tensores  $\mathbf{S}\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{S}^2$ ,  $\mathbf{W}^2$  e  $\mathbf{S}\mathbf{S}^2$ , respectivamente, sendo que,  $\{\mathbf{S}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$  e  $\{\mathbf{S}\mathbf{S}^2\}$  podem ser calculados de maneira que a equação (1.41) torne-se explícita em  $\mathbf{T}$ . Para o cálculo desses escalares, inicialmente trabalha-se com a equação (1.27), reescrita na forma

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{T} + 2 \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \mathbf{S} + \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\top}, \quad (1.42)$$

ou ainda, em termos dos tensores  $\mathbf{S}$  e  $\mathbf{W}$ ,

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{T} + 2 \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \mathbf{S} + (\mathbf{S}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{S}) - (\mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{T}). \quad (1.43)$$

Detalhes sobre a passagem da equação (1.42) para a equação (1.43) é encontrada no Apêndice B (equação (B-2)).

Substituindo a equação (1.37) na equação (1.43), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \left( \mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} \right) &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \left( \mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} \right) + 2 \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \mathbf{S} + \left[ \mathbf{S} \left( \mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} \right) \mathbf{S} \right] - \left( \left( \mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} \right) \mathbf{W} \right) - \mathbf{W} \left( \mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} \right) \\ \Rightarrow \frac{D\mathbf{T}}{Dt} &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{T} - \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{I} + 2 \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \mathbf{S} + (\mathbf{S}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{S}) - (\mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{T}) \\ &\quad + \frac{2}{3} I_{\mathbf{T}} \mathbf{S} - \frac{1}{3} \frac{D I_{\mathbf{T}}}{Dt} \mathbf{I}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Note que a equação (1.44) depende de  $I_{\mathbf{T}}$ , o qual pode ser obtido tomando-se o traço da equação (1.43), ou seja,

$$\frac{D I_{\mathbf{T}}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \{\mathbf{S}\} + \{\mathbf{S}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{S}\} - \{\mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{T}\}. \quad (1.45)$$

Pela hipótese do escoamento incompressível, tem-se  $\{\mathbf{S}\} = 0$ . Além disso,  $\{\mathbf{S}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{S}\} = 2 \{\mathbf{S}\mathbf{T}\}$  e  $\{\mathbf{W}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{W}\} = 0$ . De fato, a equação (1.37) multiplicada por  $\mathbf{S}$  resulta em

$$\mathbf{T}\mathbf{S} = \mathbf{S}\mathbf{T} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \mathbf{S}. \quad (1.46)$$

Tomando o traço da equação (1.46), tem-se

$$\{\mathbf{T}\mathbf{S}\} = \{\mathbf{S}\mathbf{T}\}. \quad (1.47)$$

Das propriedades do traço de uma matriz quadrada e da equação (1.47), vem

$$\{\mathbf{S}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{S}\} = \{\mathbf{S}\mathbf{T}\} + \{\mathbf{T}\mathbf{S}\} = \{\mathbf{T}\mathbf{S}\} + \{\mathbf{T}\mathbf{S}\} = 2 \{\mathbf{T}\mathbf{S}\} = 2 \{\mathbf{S}\mathbf{T}\}. \quad (1.48)$$

Analogamente, das propriedades do traço de uma matriz quadrada, obtém-se

$$\{\mathbf{TW} - \mathbf{WT}\} = \{\mathbf{TW}\} - \{\mathbf{WT}\} = \{\mathbf{TW}\} - \{\mathbf{TW}\} = 0. \quad (1.49)$$

Portanto, a equação de evolução do traço é dada por

$$\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2\{\mathbf{GS}\}. \quad (1.50)$$

Dessa maneira, substituindo a equação (1.50) na equação (1.44), obtém-se

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \mathbf{\Gamma} + \left( \mathbf{S}\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}\mathbf{S} - \frac{2}{3}\{\mathbf{GS}\} \right) - (\mathbf{\Gamma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{\Gamma}) + 2 \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \mathbf{S}. \quad (1.51)$$

Note que resolver a combinação das equações (1.51) e (1.50) é equivalente a resolver a equação constitutiva (1.42).

Portanto para escoamentos bidimensionais, a combinação das equações (1.51) e (1.50) deve conduzir a  $T^{zz} = 0$ . De fato, a equação (1.51) para a componente  $\Gamma^{zz}$  é dada por

$$\begin{aligned} \frac{D\Gamma^{zz}}{Dt} &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \Gamma^{zz} + \left[ (\mathbf{S}\mathbf{\Gamma})^{zz} + (\mathbf{\Gamma}\mathbf{S})^{zz} - \frac{2}{3}\{\mathbf{GS}\} \right] - [(\mathbf{\Gamma}\mathbf{W})^{zz} - (\mathbf{W}\mathbf{\Gamma})^{zz}] \\ &\quad + 2 \left[ \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right] S^{zz}, \end{aligned} \quad (1.52)$$

em escoamentos bidimensionais

$$(\mathbf{S}\mathbf{\Gamma})^{zz} = (\mathbf{\Gamma}\mathbf{S})^{zz} = 0, \quad (\mathbf{\Gamma}\mathbf{W})^{zz} = (\mathbf{W}\mathbf{\Gamma})^{zz} = 0 \quad \text{e} \quad S^{zz} = 0, \quad (1.53)$$

assim,

$$\frac{D\Gamma^{zz}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \Gamma^{zz} - \frac{2}{3}\{\mathbf{GS}\} \quad (1.54)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{DT^{zz}}{Dt} &= \frac{D}{Dt} \left( \Gamma^{zz} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} I \right) = \frac{D\Gamma^{zz}}{Dt} + \frac{1}{3} \frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} \\ &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \Gamma^{zz} - \frac{2}{3}\{\mathbf{GS}\} + \frac{1}{3} \left( -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2\{\mathbf{GS}\} \right) \\ &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \left( \Gamma^{zz} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \right) \\ &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} T^{zz}, \end{aligned} \quad (1.55)$$

para condição inicial homogênea, a equação (1.55) permite a solução  $T^{zz} = 0$ .

O próximo passo é determinar os valores  $\{\mathbf{GS}\}$ ,  $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$  e  $\{\mathbf{GS}^2\}$  a fim de obter uma equação algébrica explícita para o tensor  $\mathbf{\Gamma}$ . Para isso, Mompean et al. [19] assumiu duas hipóteses para  $D\mathbf{\Gamma}/Dt$ , porém, apenas uma delas garantiu uma modelagem consistente, como será visto na próxima subseção.

### 1.3.1 Escolha e justificativa da hipótese assumida para a variação do tensor $\mathbf{\Gamma}$

A seguir apresenta-se a aplicação de duas hipóteses e suas consequências em escoamentos viscoelásticos bidimensionais.

• **Hipótese 1:**

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = 0 \quad (1.56)$$

Assumindo a hipótese (1.56), a equação (1.51) é escrita como

$$0 = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\Gamma + \left( \mathbf{S}\Gamma + \Gamma\mathbf{S} - \frac{2}{3}\{\Gamma\mathbf{S}\} \right) - (\Gamma\mathbf{W} - \mathbf{W}\Gamma) + 2 \left( \frac{(1-\beta)}{W_i\mathbf{R}e} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}} \right) \mathbf{S}. \quad (1.57)$$

A análise da viabilidade da equação (1.57) é feita verificando se a componente  $T^{zz}$  é nula. De fato, a equação algébrica (1.57) para a componente  $\Gamma^{zz}$  é dada por

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\Gamma^{zz} + \left[ (S\Gamma)^{zz} + (\Gamma S)^{zz} - \frac{2}{3}\{\Gamma\mathbf{S}\} \right] - [(\Gamma W)^{zz} - (W\Gamma)^{zz}] \\ &\quad + 2 \left[ \frac{(1-\beta)}{W_i\mathbf{R}e} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}} \right] S^{zz} \\ 0 &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\Gamma^{zz} - \frac{2}{3}\{\Gamma\mathbf{S}\}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Substituindo a equação (1.39) na equação (1.58) para a componente  $(z, z)$ , tem-se

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \left( T^{zz} - \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}} \right) - \frac{2}{3}\{\Gamma\mathbf{S}\} \\ &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}T^{zz} + \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\frac{1}{3}I_{\mathbf{T}} - \frac{2}{3}\{\Gamma\mathbf{S}\} \\ &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}T^{zz} - \frac{1}{3}\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}, \end{aligned} \quad (1.59)$$

implicando em

$$T^{zz} = -\frac{W_i}{3f(I_{\mathbf{T}})}\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}. \quad (1.60)$$

Uma análise da equação (1.60) mostra que, em geral  $\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} \neq 0$  acarretará em  $T^{zz} \neq 0$ , o que não é aceitável, uma vez que gera a componente  $T^{zz}$  ilegítima para escoamentos bidimensionais. Por outro lado, se  $\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} = 0$  os efeitos convectivos são negligenciados, o que também é inaceitável, pois a equação de evolução para  $I_{\mathbf{T}}$  é essencial na obtenção do tensor extra-tensão. Portanto, a hipótese

$$\frac{D\Gamma}{Dt} = 0 \quad (1.61)$$

torna-se inviável.

• **Hipótese 2**

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = \alpha\mathbf{\Gamma} \quad (1.62)$$

Assumindo a hipótese dada pela equação (1.62), a equação (1.51) é reescrita da seguinte forma:

$$\alpha\mathbf{\Gamma} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\mathbf{\Gamma} + \left(\mathbf{S}\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}\mathbf{S} - \frac{2}{3}\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}\right) - (\mathbf{\Gamma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{\Gamma}) + 2\left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}\right)\mathbf{S}. \quad (1.63)$$

Analisando a componente  $(z, z)$ ,

$$\alpha\Gamma^{zz} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\Gamma^{zz} - \frac{2}{3}\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}. \quad (1.64)$$

Substituindo a equação (1.37) na equação (1.64), tem-se

$$\begin{aligned} \alpha\left[T^{zz} - \frac{I_{\mathbf{T}}}{3}\right] &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\left[T^{zz} - \frac{I_{\mathbf{T}}}{3}\right] - \frac{2}{3}\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} \\ \alpha T^{zz} + \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}T^{zz} &= \alpha\frac{I_{\mathbf{T}}}{3} + \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\frac{I_{\mathbf{T}}}{3} - \frac{2}{3}\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\} \\ \left[\alpha + \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\right]T^{zz} &= \frac{I_{\mathbf{T}}}{3}\left[\alpha - \frac{1}{I_{\mathbf{T}}}\left(\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}I_{\mathbf{T}} + \frac{2}{3}\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}\right)\right]. \end{aligned} \quad (1.65)$$

Desta forma, a componente  $T^{zz}$  é dada por

$$T^{zz} = \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}\left[\alpha - \frac{1}{I_{\mathbf{T}}}\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}\right]\left[\alpha + \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\right]^{-1}. \quad (1.66)$$

Assumindo

$$\alpha = \frac{1}{I_{\mathbf{T}}}\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}, \quad (1.67)$$

a componente  $T^{zz}$  torna-se nula sem que nenhuma restrição seja colocada em  $\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}$ , e então, os efeitos convectivos ainda estão presentes na equação de evolução para  $I_{\mathbf{T}}$ .

Substituindo a equação (1.67) na hipótese dada pela (1.62), tem-se

$$\frac{D\mathbf{\Gamma}}{Dt} = \frac{\mathbf{\Gamma}}{I_{\mathbf{T}}}\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt}. \quad (1.68)$$

Diante das análises feitas para as hipóteses 1 e 2, Mompean e colaboradores descartaram a hipótese 1 e trabalharam com a hipótese 2 a fim de obter um modelo algébrico explícito. Tecnicamente, assumindo a hipótese 2 encontra-se os valores de  $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$  e  $\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^2\}$  de maneira que a equação (1.41) seja explícita em  $\mathbf{\Gamma}$ .

### 1.3.2 Modelo algébrico explícito para o tensor extra-tensão

Depois de encontrada uma aproximação consistente para  $D\mathbf{\Gamma}/Dt$ , dada por (1.68), a equação (1.63) pode ser reescrita da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\mathbf{\Gamma}}{I_{\mathbf{T}}}\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} - \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\mathbf{\Gamma} + \left(\mathbf{S}\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma}\mathbf{S} - \frac{2}{3}\{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}\right) - (\mathbf{\Gamma}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{\Gamma}) \\ &\quad + 2\left(\frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}\right)\mathbf{S}, \end{aligned} \quad (1.69)$$

Substituindo a equação (1.50) na equação (1.69), tem-se

$$\begin{aligned}
0 &= -\frac{\Gamma}{I_{\mathbf{T}}} \left( -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \{ \Gamma \mathbf{S} \} \right) - \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} \Gamma + \left( \mathbf{S} \Gamma + \Gamma \mathbf{S} - \frac{2}{3} \{ \Gamma \mathbf{S} \} \right) - (\Gamma \mathbf{W} - \mathbf{W} \Gamma) \\
&\quad + 2 \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \mathbf{S}, \\
&= -\frac{\Gamma}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{ \Gamma \mathbf{S} \} + \left( \mathbf{S} \Gamma + \Gamma \mathbf{S} - \frac{2}{3} \{ \Gamma \mathbf{S} \} \right) - (\Gamma \mathbf{W} - \mathbf{W} \Gamma) + 2 \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \mathbf{S}.
\end{aligned} \tag{1.70}$$

A partir da equação (1.69) obtêm-se os valores  $\{ \Gamma \mathbf{S} \}$ ,  $\{ \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \}$  e  $\{ \Gamma \mathbf{S}^2 \}$  para que a equação (1.41) torne-se explícita em  $\Gamma$ .

- Determinação de  $\{ \Gamma \mathbf{S}^2 \}$

Multiplicando a equação (1.69) por  $\mathbf{S}^2$  e tomando o traço, tem-se

$$\begin{aligned}
0 &= -\frac{1}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \Gamma \mathbf{S}^2 \} + \left( \{ \mathbf{S} \Gamma \mathbf{S}^2 \} + \{ \Gamma \mathbf{S}^3 \} - \frac{2}{3} \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \mathbf{S}^2 \} \right) + \{ \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S}^2 \} \\
&\quad - \{ \mathbf{W} \Gamma \mathbf{S}^2 \} + 2 \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \{ \mathbf{S}^3 \}.
\end{aligned} \tag{1.71}$$

Sendo que  $\{ \mathbf{S} \Gamma \mathbf{S}^2 \} = \{ \Gamma \mathbf{S}^3 \}$  e  $\{ \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S}^2 \} = \{ \mathbf{W} \Gamma \mathbf{S}^2 \} = \{ \mathbf{S}^3 \} = 0$  (veja equações (B-17), (B-12), (B-13) e (B-14), respectivamente, no Apêndice B). Então, a equação (1.71) pode ser simplificada por

$$0 = -\frac{1}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \Gamma \mathbf{S}^2 \} + 2 \{ \Gamma \mathbf{S}^3 \} - \frac{2}{3} \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \mathbf{S}^2 \}. \tag{1.72}$$

Utilizando o Teorema de Cayley-Hamilton (ver Apêndice B, equação (B-24)), tem-se

$$\{ \Gamma \mathbf{S}^3 \} = \frac{1}{2} \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \mathbf{S}^2 \}. \tag{1.73}$$

Substituindo (1.73) em (1.72), obtêm-se um dos valores requeridos

$$\{ \Gamma \mathbf{S}^2 \} = \frac{I_{\mathbf{T}}}{6} \{ \mathbf{S}^2 \}. \tag{1.74}$$

- Determinar  $\{ \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \}$

Multiplicando (1.69) por  $\mathbf{W} \mathbf{S}$  e tomando o traço, vem

$$\begin{aligned}
0 &= -\frac{1}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \} + \left( \{ \mathbf{S} \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \} + \{ \Gamma \mathbf{S} \mathbf{W} \mathbf{S} \} - \frac{2}{3} \{ \Gamma \mathbf{S} \} \{ \mathbf{W} \mathbf{S} \} \right) \\
&\quad - (\{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \} - \{ \mathbf{W} \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \}) + 2 \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \{ \mathbf{S} \mathbf{W} \mathbf{S} \}
\end{aligned} \tag{1.75}$$

De acordo com as equações (B-29)-(B-36) expostas no Apêndice B, os valores  $\{ \mathbf{S} \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \}$ ,  $\{ \Gamma \mathbf{S} \mathbf{W} \mathbf{S} \}$ ,  $\{ \mathbf{W} \mathbf{S} \}$  e  $\{ \mathbf{S} \mathbf{W} \mathbf{S} \}$  são nulos e  $\{ \mathbf{W} \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \} = -\{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \}$ . Assim,

$$\{ \mathbf{W} \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \} = -\{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \} \Rightarrow \{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \} - \{ \mathbf{W} \Gamma \mathbf{W} \mathbf{S} \} = \{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \} + \{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \} = 2 \{ \Gamma \mathbf{W}^2 \mathbf{S} \}.$$

Então, a equação (1.75) pode ser simplificada por

$$0 = -\frac{1}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{\mathbf{\Gamma S}\} \{\mathbf{\Gamma W S}\} - 2 \{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\}, \quad (1.76)$$

Da equação (B-36), o valor  $\{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\}$  pode ser reescrito da maneira

$$\{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\} = 2 \{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\} + \{\mathbf{\Gamma W S W}\} \quad (1.77)$$

e da equação (B-37), tem-se

$$2 \{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\} + \{\mathbf{\Gamma W S W}\} = \frac{1}{2} \{\mathbf{\Gamma S}\} \{\mathbf{W}^2\}. \quad (1.78)$$

Assim, substituindo (1.78) em (1.76), obtém-se

$$0 = -\frac{1}{I_{\mathbf{T}}} 2 \{\mathbf{\Gamma S}\} \{\mathbf{\Gamma W S}\} - 2 \left( \frac{1}{2} \{\mathbf{\Gamma S}\} \{\mathbf{W}^2\} \right) \quad (1.79)$$

Portanto,

$$\{\mathbf{\Gamma W S}\} = -\frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \{\mathbf{W}^2\}. \quad (1.80)$$

- Determinar  $\{\mathbf{\Gamma S}\}$ .

Para determinar  $\{\mathbf{\Gamma S}\}$  basta multiplicar a equação (1.69) por  $\mathbf{S}$  e tomar o traço, obtendo

$$0 = -\frac{1}{I_{\mathbf{T}}} \{\mathbf{\Gamma S}\}^2 + \{\mathbf{\Gamma S}^2\} - \{\mathbf{\Gamma W S}\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \{\mathbf{S}^2\}, \quad (1.81)$$

que pode ser reescrita como:

$$\{\mathbf{\Gamma S}\}^2 = I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{\Gamma S}^2\} - I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{\Gamma W S}\} + I_{\mathbf{T}} \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \{\mathbf{S}^2\}, \quad (1.82)$$

ou

$$\{\mathbf{\Gamma S}\} = \pm \sqrt{I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{\Gamma S}^2\} - I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{\Gamma W S}\} + I_{\mathbf{T}} \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \right) \{\mathbf{S}^2\}}. \quad (1.83)$$

Substituindo (1.74) e (1.80) em (1.83), tem-se

$$\{\mathbf{\Gamma S}\} = \pm \sqrt{\frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\}}. \quad (1.84)$$

Uma escolha apropriada da raiz da equação (1.84) é discutida em [19], resultando em

$$\{\mathbf{\Gamma S}\} = + \sqrt{\frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\}}. \quad (1.85)$$

Substituindo as equações (1.74), (1.80) e (1.85) em (1.41), obtém-se a expressão algébrica explícita para  $\mathbf{\Gamma}$ ,

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{S} - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ (\mathbf{S W} - \mathbf{W S}) - 2 \left( \mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right) \right], \quad (1.86)$$

que em coordenadas cartesianas bidimensionais e na forma adimensional é dado por

$$\begin{aligned} \Gamma^{xx} = & \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}^{xx} \\ & - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ \left( (\mathbf{S}\mathbf{W})^{xx} - (\mathbf{W}\mathbf{S})^{xx} + \frac{1}{2} \right) - 2 \left( (\mathbf{S}^2)^{xx} + \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \right) \right], \end{aligned} \quad (1.87)$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{xy} = & \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}^{xy} \\ & - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ ((\mathbf{S}\mathbf{W})^{xy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})^{xy}) - 2 (\mathbf{S}^2)^{xy} \right], \end{aligned} \quad (1.88)$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{yy} = & \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}^{yy} \\ & - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ ((\mathbf{S}\mathbf{W})^{yy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})^{yy}) - 2 \left( (\mathbf{S}^2)^{yy} - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \right) \right], \end{aligned} \quad (1.89)$$

onde

$$\mathbf{S}^{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1.90)$$

$$\mathbf{S}^{xy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (1.91)$$

$$\mathbf{S}^{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (1.92)$$

$$(\mathbf{S}\mathbf{W})^{xx} - (\mathbf{W}\mathbf{S})^{xx} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \quad (1.93)$$

$$(\mathbf{S}\mathbf{W})^{yy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})^{yy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2, \quad (1.94)$$

$$(\mathbf{S}\mathbf{W})^{xy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})^{xy} = \frac{\partial u}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (1.95)$$

$$(\mathbf{S}^2)^{xx} = \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2, \quad (1.96)$$

$$(\mathbf{S}^2)^{yy} = \left( \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2, \quad (1.97)$$

$$\{\mathbf{S}^2\} = 2 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2, \quad (1.98)$$

$$\{\mathbf{W}^2\} = \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2, \quad (1.99)$$

Detalhes de como obter os valores dados nas equações (1.93)-(1.99) podem ser encontrados no Apêndice B (equações (B-4) - (B-8)).

Em resumo, o modelo algébrico consiste em calcular a equação diferencial para o traço  $I_{\mathbf{T}}$  dada por (1.50) com  $\{\mathbf{T}\mathbf{S}\}$  vindo de (1.85), resolver a equação algébrica (1.86) para  $\Gamma$  e

por fim resolver a equação (1.37) para obter o tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$ , que em coordenadas cartesianas bidimensionais é dado por

$$T^{xx} = \Gamma^{xx} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}, \quad (1.100)$$

$$T^{xy} = \Gamma^{xy}, \quad (1.101)$$

$$T^{yy} = \Gamma^{yy} + \frac{1}{3}I_{\mathbf{T}}. \quad (1.102)$$

Portanto, o sistema de equações a ser resolvido neste trabalho é dado por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^{\top}) &= -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} &= -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\}, \\ \mathbf{\Gamma} &= \frac{1}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}^2}{2} \{\mathbf{W}^2\} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \{\mathbf{S}^2\} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}, \\ &\quad -\frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}}{\{\mathbf{S}^2\}} \left[ (\mathbf{S}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{S}) - 2 \left( \mathbf{S}^2 - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{I} \right) \right], \\ \mathbf{T} &= \mathbf{\Gamma} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \mathbf{I}, \end{aligned}$$

mediante as condições iniciais e de contorno como definidas a seguir.

## 1.4 Condições auxiliares

As condições auxiliares são de fundamental importância para a formulação de qualquer problema modelado por equações diferenciais, pois o comportamento físico de cada caso depende das condições auxiliares. Assim, para o sistema a ser resolvido neste trabalho é necessário impor condições auxiliares para  $\mathbf{u}$ ,  $p$ ,  $\mathbf{T}$  e  $I_{\mathbf{T}}$ . A seguir serão expostas as condições auxiliares utilizadas neste trabalho.

### 1.4.1 Condição inicial

As condições iniciais fornecem as informações iniciais do problema, devendo ser especificadas em todo o domínio de simulação. A condição inicial para o campo de velocidade  $\mathbf{u}$  deve satisfazer a equação da continuidade  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ . A pressão e a contribuição não-newtoniana precisam ser escolhidas de forma a satisfazer o campo de velocidade, sendo geralmente nulas no instante inicial [38]. Assim, as condições iniciais considerada neste trabalho são as seguintes:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{T} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{\Gamma} = \mathbf{0}, \quad I_{\mathbf{T}} = 1.0 \times 10^{-12}, \quad p = 0. \quad (1.103)$$

### 1.4.2 Condições de contorno

As condições de contorno especificam o que ocorre na fronteira da região de definição do problema, isto é, informam sobre o estado da solução no contorno espacial da região onde o problema está sendo simulado em todo tempo  $t$ . As condições de contorno na região espacial a ser considerada são as seguintes: Injetor ou *inflow* (entrada do fluido), ejetor ou *outflow* (saída do fluido), contorno rígido e superfície livre. Na Figura 1.1 está ilustrada os tipos de contorno.

A seguir serão especificados os tipos de contorno no domínio de simulação.

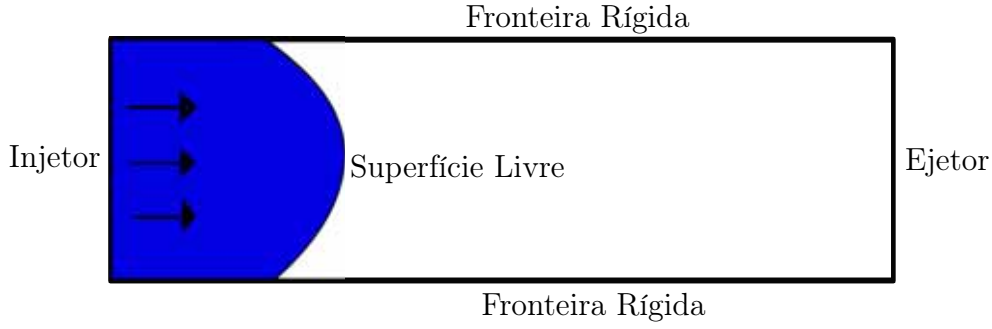


Figura 1.1: Ilustração dos tipos de fronteiras considerada neste trabalho.

- **Injetor ou *Inflow***: É onde ocorre a entrada do fluido no domínio de simulação, nesse tipo de contorno temos as seguintes condições:

$$u_{\vec{n}} = U_{inflow}, \quad u_{\vec{t}} = 0, \quad (1.104)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{0} \quad \text{e consequentemente} \quad \mathbf{I}_{\mathbf{T}} = \mathbf{0}. \quad (1.105)$$

onde  $u_{\vec{n}}$  e  $u_{\vec{t}}$  são as componentes de velocidade normal e tangencial à região de entrada do fluido, respectivamente. A velocidade  $U_{inflow}$  é a velocidade de entrada de fluido.

- **Ejetor ou *Outflow***: É a fronteira onde ocorre a saída do fluido do domínio de simulação. A condição considerada no *outflow* é do tipo Neumann homogênea para as componentes da velocidade, para o tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$  e consequentemente para  $I_{\mathbf{T}}$ , que são dadas, respectivamente, por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \vec{n}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \vec{n}} = \mathbf{0} \quad \text{e} \quad \frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (1.106)$$

onde  $\vec{n}$  é a direção normal à fronteira de ejeção.

- **Fronteira Rígida**: Também conhecida como fronteira impermeável, onde a velocidade normal ( $u_{\vec{n}}$ ) a esse tipo de fronteira é nula, ou seja, não há fluxo de massa nessa fronteira.

Quanto à velocidade tangencial  $u_{\vec{t}}$  ao longo dessa fronteira, adota-se

- Não-escorregamento (*no-slip*): O fluido adjacente à superfície sólida deve estar em repouso com relação a mesma. Assim,

$$u_{\vec{t}} = u_f, \quad (1.107)$$

onde  $u_f$  é a velocidade de fronteira do fluido. Considerando que a fronteira rígida está em repouso, então

$$u_{\vec{t}} = 0. \quad (1.108)$$

Devido as condições de contorno na fronteira rígida para a velocidade, os cálculos do traço  $I_{\mathbf{T}}$  e do tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$  podem ser simplificados considerando a direção da fronteira rígida. No caso de escoamentos bidimensionais considera-se dois casos:

### 1. Fronteira rígida paralela ao eixo $x$

Pela condição de impermeabilidade,

$$v = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (1.109)$$

e pela condição de não-escorregamento

$$u = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1.110)$$

Consequentemente, pela hipótese de incompressibilidade a condição dada pela equação (1.110) leva a

$$\frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (1.111)$$

Portanto, diante das hipóteses derivadas das equações (1.109) - (1.111) a equação (1.50), que depende da equação (1.85), ao longo da fronteira rígida é dada por

$$\frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial t} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{1}{2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.112)$$

Os valores das componentes dos tensores  $\mathbf{\Gamma}$  e  $\mathbf{T}$  não são requeridos ao longo da fronteira rígida pelo fato do cálculo dos mesmos serem feitos algebricamente.

## 2. Fronteira rígida paralela ao eixo $y$

Semelhante ao caso anterior, pela condição de impermeabilidade,

$$u = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (1.113)$$

e pela condição de não-escorregamento

$$v = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad \text{Incompressibilidade} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1.114)$$

Portanto, o cálculo de  $I_{\mathbf{T}}$  ao longo da fronteira rígida paralela ao eixo  $y$  deve ser efetuado pela equação

$$\frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial t} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{1}{2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.115)$$

a qual foi obtida pela simplificação da equação (1.50) juntamente com a equação (1.85) considerando as hipóteses derivadas das equações (1.113)-(1.114).

### 1.4.3 Superfície livre

Neste trabalho, entende-se que a superfície livre é a interface entre o fluido e a atmosfera, onde essa atmosfera é considerada passiva, isto é, a tensão superficial<sup>1</sup> é considerada nula. Dessa maneira as condições de contorno na superfície livre são dadas pelas equações [17]

$$\mathbf{m}^{\top} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{0} \quad (1.116)$$

e

$$\mathbf{n}^{\top} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{0}, \quad (1.117)$$

<sup>1</sup>Tensão superficial é uma propriedade que se apresenta quando existe uma interface.

onde  $\mathbf{m} = \begin{bmatrix} -n_y \\ n_x \end{bmatrix}$  é o versor tangencial e para escoamentos viscoelásticos  $\boldsymbol{\sigma}$  é escrito matricialmente da seguinte maneira,

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{2\beta}{Re} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} \quad (1.118)$$

Desenvolvendo as equações (1.116) e (1.117), obtém-se respectivamente condições para a velocidade e pressão na superfície livre, que no caso de escoamentos viscoelásticos são dadas por

$$\frac{\beta}{Re} \left[ 2n_x n_y \left( \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) + (n_x^2 - n_y^2) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] = n_x n_y (T^{xx} - T^{yy}) + (n_y^2 - n_x^2) T^{xy}, \quad (1.119)$$

$$p = \frac{2\beta}{Re} \left[ n_x^2 \frac{\partial u}{\partial x} + n_x n_y \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + n_y^2 \frac{\partial v}{\partial y} \right] + n_x^2 T^{xx} + 2n_x n_y T^{xy} + n_y^2 T^{yy}. \quad (1.120)$$

# Metodologia numérica

Neste Capítulo, serão apresentadas as metodologias numéricas utilizadas nas simulações de escoamentos bidimensionais viscoelásticos, incompressíveis e isotérmicos, expondo o conceito da metodologia GENSMAC, as integrações temporais aplicadas nas equações de quantidade de movimento e na equação diferencial para o traço do tensor extra-tensão. Também são expostas as aproximações aplicadas nas derivadas espaciais das equações governantes e o algoritmo computacional utilizado neste trabalho.

## 2.1 Metodologia GENSMAC para escoamentos viscoelásticos

A metodologia GENSMAC proposta por Tomé e McKee [34] generaliza as ideias do SMAC (*Simplified-Marker-And-Cell*) [1] para domínios arbitrários com fronteiras curvas. Além disso, o GENSMAC passa a empregar partículas virtuais (langrangianas) para representar apenas a superfície livre do fluido.

Inicialmente o GENSMAC foi empregado na simulação de escoamentos transientes newtonianos bidimensionais com superfície livre, onde a integração temporal da equação de quantidade de movimento era feita de forma explícita. Em um trabalho de dissertação de mestrado feito por Oishi [5] foi desenvolvido esquemas semi-implícitos para resolver equações governantes de escoamentos newtonianos. Esses esquemas utilizam os métodos de Euler implícito e Cranck-Nicolson na integração temporal da equação de quantidade de movimento [5].

Com o objetivo de estender a aplicabilidade do ambiente de simulação FREEFLOW, foram feitos vários trabalhos ([10], [15], [21], [29], [31]) que tinham como objetivo simular outros tipos de escoamentos. Com relação aos escoamentos viscoelásticos, o primeiro resultado numérico foi apresentado no trabalho [32].

### 2.1.1 Malha computacional

A metodologia GENSMAC utiliza dois tipos de malha, uma é a malha fixa (euleriana) e outra é a malha móvel (lagrangeana).

A malha fixa é onde discretiza-se as equações que descrevem um escoamento. Com espaçamento uniforme em cada direção e considerando  $\delta x = \delta y$  ( $\delta x$  espaçamento da malha com relação ao eixo  $x$  e  $\delta y$  espaçamento da malha com relação ao eixo  $y$ ), a malha fixa é composta por células deslocadas (*staggered grid*). Assim, de acordo com a Figura

2.1 o campo de velocidade  $\mathbf{u} = (\mathbf{u}, \mathbf{v})$  é calculado na face da célula  $(i, j)$ , enquanto as outras grandezas (representada por  $\phi$ ) são calculadas no centro da célula  $(i, j)$ .

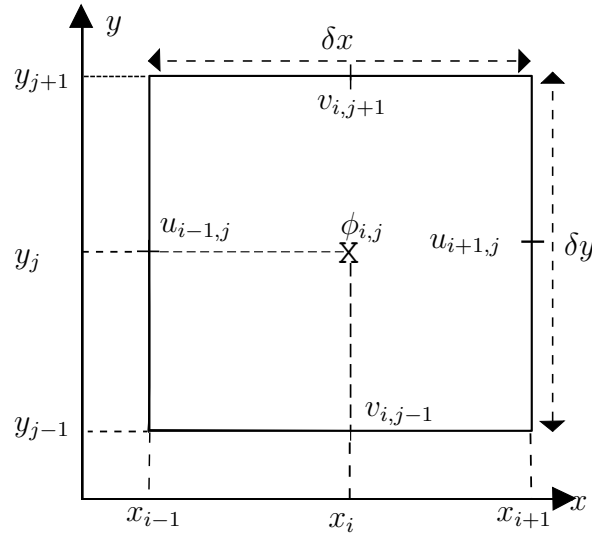


Figura 2.1: Estrutura de uma célula deslocada no caso bidimensional.

A malha móvel representa a superfície livre do fluido, que é movimentada no tempo  $t$  para novas posições no tempo posterior de acordo com o campo de velocidade  $\mathbf{u}$ , ou seja,

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \quad (2.1)$$

### 2.1.2 Identificação de células

Em escoamentos com superfície livre fazem-se necessárias a identificação da posição da superfície livre e das demais fronteiras na malha fixa. Essa identificação é feita com a seguinte classificação:

- Células [**B**] (*boundary*): são células que definem fronteiras rígidas.
- Células [**I**] (*inflow*): são células do injetor, definem a entrada de fluido no domínio de simulação.
- Células [**O**] (*outflow*): são células do ejetor, definem a saída do fluido do domínio computacional.
- Células [**E**] (*empty*): são as células vazias, ou seja, as células que não têm fluido em seu interior.
- Células [**F**] (*full*): são as células cheias, ou seja, possuem fluido em seu interior e suas interfaces não apresentam contato com célula do tipo [**E**].
- Células [**S**] (*surface*): são células que contém fluido e tem no mínimo uma interface com células do tipo [**E**].

A cada ciclo computacional é necessário fazer mudanças na classificação das células, isso porque a cada passo temporal ( $\delta t$ ) há uma movimentação da superfície livre. A atualização na classificação das células ocorre apenas na vizinhança de [**S**]. Desta forma, seguindo a classificação feitas nos trabalhos [6] e [14], a nova classificação é feita da seguinte maneira:

- Se identificadas partículas marcadoras em células do tipo **[E]**, estas são alteradas para tipo **[S]**.
- Se identificadas partículas marcadoras em células do tipo **[F]**, e a mesma tem interface com células do tipo **[E]**, então esta célula torna-se do tipo **[S]**.
- Células que era do tipo **[S]** no ciclo anterior, e agora não contém partícula marcadora, se tornam tipo **[F]** ou **[E]**, dependendo da classificação das células vizinhas.

### 2.1.3 Método da projeção

Devido a restrição de incompressibilidade as equações de Navier-Stokes acoplam os campos de velocidade e pressão. No caso de escoamentos transientes a equação de quantidade de movimento tem o papel de informar qual o comportamento do campo de velocidade  $\mathbf{u}$  com a evolução temporal, no entanto não se sabe como isso acontece com a pressão  $p$ .

A metodologia GENSMAC baseada em métodos de projeção tem como ideia central o desacoplamento da velocidade e pressão, isto é,  $\mathbf{u}$  e  $p$  são resolvidos separadamente. O método de projeção, originalmente proposto por [3] e [40] se fundamenta no Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge (TDHH), cuja demonstração pode ser consultada em [3].

**Teorema 2.1** (*Decomposição de Helmholtz-Hodge*): *Seja  $\Omega$  uma região com fronteira  $\partial\Omega$  suave e  $\tilde{\mathbf{u}}$  um campo vetorial, definido em  $\Omega$ . Nestes termos, a decomposição de  $\tilde{\mathbf{u}}$  na forma*

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \nabla\psi, \quad (2.2)$$

*existe e é única, sendo  $\psi$  um campo escalar, também definido em  $\Omega$ . O campo vetorial  $\mathbf{u}$  é solenoidal ( $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ) e ao longo da fronteira  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ , onde  $\mathbf{n}$  é a normal exterior a  $\partial\Omega$ .*

Desta maneira, utilizando o método da projeção primeiramente aproxima-se um valor para a pressão, em seguida calcula-se o campo de velocidade intermediária  $\tilde{\mathbf{u}}$  utilizando a equação de quantidade de movimento (1.25). As condições iniciais e de contorno para a velocidade intermediária são as mesmas que as condições adotadas para a velocidade  $\mathbf{u}$  (ver subseções 1.4.1 e 1.4.2).

Pelo fato de considerar a pressão como uma aproximação, a velocidade não é necessariamente solenoidal. Neste caso, considera-se

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla^2\psi, \quad (2.3)$$

e impondo a restrição do TDHH ( $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ), obtém-se a equação de Poisson para o potencial auxiliar  $\psi$

$$\nabla^2\psi = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}, \quad (2.4)$$

cujas condições de contorno, de acordo com [30], em fronteiras rígidas e no injetor é

$$\frac{\partial\psi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (2.5)$$

e no ejetor

$$\psi = 0. \quad (2.6)$$

Após o cálculo de  $\psi$ , a velocidade  $\mathbf{u}$  pode ser obtida através da equação

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} - \nabla\psi. \quad (2.7)$$

Note que o campo de pressão obtido até este momento é aproximado, sendo assim, faz-se necessário a correção do valor da pressão  $p$ , essa correção é feita usando o potencial auxiliar  $\psi$  e a velocidade  $\mathbf{u}$ , sendo que o valor da pressão corrigida depende da integração temporal adotada na resolução da equação de quantidade de movimento, como será visto a seguir.

### 2.1.4 Integração temporal aplicada na equação de quantidade de movimento

No presente trabalho, a integração temporal da equação de quantidade de movimento para a velocidade intermediária é feita pelo método de Euler implícito (EI). Essa integração será exposta a seguir

#### • Euler implícito

Utilizando o método de Euler implícito (EI) na integração temporal da equação de quantidade de movimento (1.25), tem-se

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} = \frac{\mathbf{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n - \nabla p^{n+1} + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}. \quad (2.8)$$

Reescrevendo a equação (2.8) para o campo de velocidade intermediária  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ ,

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \frac{\mathbf{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n - \nabla \tilde{p}^{n+1} + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \quad (2.9)$$

tem-se o cálculo da velocidade intermediária nas células  $[\mathbf{F}]$  e  $[\mathbf{S}]$ . As condições de contorno para a velocidade é necessária no cálculo dos termos advectivos, detalhes da imposição dessas condições implementadas no ambiente de simulação FREEFLOW2D podem ser encontrados em [6] e [14].

No caso em que a derivada temporal da equação de quantidade de movimento é aproximada por Euler implícito, a correção da pressão é realizada substituindo a equação (2.7) na equação (2.9),

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{u} + \nabla\psi)^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 (\mathbf{u} + \nabla\psi)^{n+1} &= \frac{\mathbf{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n - \nabla \tilde{p}^{n+1} + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \\ \Rightarrow \frac{\mathbf{u}^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} &= \frac{\mathbf{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n - \nabla \left( \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi \right) \\ &\quad + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Subtraindo a equação (2.10) da equação (2.8), obtém-se o valor da pressão corrigida

$$p^{n+1} = \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1}. \quad (2.11)$$

Em escoamentos com superfície livre é necessário impor condições de contorno para a pressão  $p$  e para o potencial auxiliar  $\psi$  nessa superfície. Com o objetivo de tornar os métodos semi-implícitos mais estáveis Oishi [6] propôs um novo tratamento da pressão ao

longo da superfície livre, isto é, o tratamento da pressão passou a ser de maneira implícita, sendo que, a condição de contorno da pressão ao longo da superfície livre, assim como a correção da pressão nas células  $[\mathbf{F}]$ , depende da discretização temporal adotada. Assim, considerando um escoamento com superfície livre bidimensional, conforme [6] o primeiro passo para o tratamento implícito da pressão ao longo superfície livre é a construção de uma equação implícita para  $p$ . Assim, a equação (1.120) utilizada para o cálculo da pressão na superfície livre é escrita implicitamente, isto é,

$$p^{n+1} = \frac{2\beta}{Re} \left[ n_x^2 \frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} + n_x n_y \left( \frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial x} \right) + n_y^2 \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} \right] + n_x^2 (T^{xx})^{n+1} + 2n_x n_y (T^{xy})^{n+1} + n_y (T^{yy})^{n+1}. \quad (2.12)$$

Observe que a equação (2.12) acopla os campos de velocidade e pressão. Afim de desacoplar esses campos, substitui-se a equação (2.11) na equação (2.12) e utiliza a hipótese de campo solenoidal para a velocidade, obtendo

$$\tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1} = \frac{2\beta}{Re} \left[ -n_x^2 \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} + n_x n_y \left( \frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial x} \right) - n_y^2 \frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right] + n_x^2 (T^{xx})^{n+1} + 2n_x n_y (T^{xy})^{n+1} + n_y (T^{yy})^{n+1}. \quad (2.13)$$

Agora, substituindo a equação (2.7) na equação (2.13), tem-se

$$\tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi = \frac{2\beta}{Re} \left[ -n_x^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \tilde{v} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^{n+1} + n_x n_y \left( \frac{\partial}{\partial y} \left( \tilde{u} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^{n+1} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \tilde{v} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^{n+1} \right) - n_y^2 \frac{\partial}{\partial y} \left( \tilde{u} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^{n+1} \right] + n_x^2 (T^{xx})^{n+1} + 2n_x n_y (T^{xy})^{n+1} + n_y (T^{yy})^{n+1}. \quad (2.14)$$

Isolando  $\psi$  do lado esquerdo da equação (2.14), vem

$$\frac{\psi^{n+1}}{\delta t} + \frac{2\beta}{Re} \left[ n_x^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2n_x n_y \frac{\partial^2 \psi}{\partial xy} + n_y^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right]^{n+1} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1} = -\tilde{p}^{n+1} + n_x^2 (T^{xx})^{n+1} + 2n_x n_y (T^{xy})^{n+1} + n_y^2 (T^{yy})^{n+1} + \frac{2\beta}{Re} \left[ -n_x^2 \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} + n_x n_y \left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) - n_y^2 \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right]^{n+1}. \quad (2.15)$$

Portanto, a formulação implícita utilizando EI, consiste em:

- Calcular a velocidade intermediária pela equação (2.9).
- Calcular a pressão pela equação (2.11) tanto nas células  $[\mathbf{F}]$  quanto nas células  $[\mathbf{S}]$  e agora a condição de contorno para  $\psi$  nas células  $[\mathbf{S}]$  é dada pela equação (2.15).

## 2.1.5 Integração temporal aplicada no modelo algébrico PTT

No modelo algébrico PTT, a única equação diferencial a ser resolvida é para o traço do tensor extra-tensão,  $I_{\mathbf{T}}$ , a qual no presente trabalho a aproximação da derivada temporal é feita pelo método de Euler explícito.

O método de Euler explícito aplicado no tratamento da derivada temporal da equação (1.50) se insere na metodologia GENSMAC com as ideias de [32]. Assim, aproximando  $I_{\mathbf{T}}$  no tempo  $t_{n+1} = t_n + \delta t$  obtém-se a expressão

$$I_{\mathbf{T}}^{n+1} = I_{\mathbf{T}}^n + \delta t F(\mathbf{u}^n, I_{\mathbf{T}}^n, \{\mathbf{GS}\}^n), \quad (2.16)$$

onde

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}^n, I_{\mathbf{T}}^n, \{\mathbf{GS}\}^n) = -\frac{\partial u^n I_{\mathbf{T}}^n}{\partial x} - \frac{\partial v^n I_{\mathbf{T}}^n}{\partial y} - \frac{f(I_{\mathbf{T}}^n)}{W_i} I_{\mathbf{T}}^n + 2 \{\mathbf{GS}\}^n. \quad (2.17)$$

## 2.2 Discretização espacial por diferenças finitas

### 2.2.1 Equação de quantidade de movimento

Pelo conceito de malha deslocada a equação de quantidade de movimento ao longo do eixo  $x$  e  $y$  é avaliada nos pontos  $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$  e  $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ . Assim, seguindo as idéias apresentadas em [31], [32], [16] e [14] considere as equações

$$\begin{aligned} H_x|_{i+\frac{1}{2},j} = & -\frac{\partial(uu)}{\partial x}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{\partial(uv)}{\partial y}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{\partial p}{\partial x}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} \right) + \\ & + \frac{\partial T^{xx}}{\partial x}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{Fr^2} g_x \end{aligned} \quad (2.18)$$

e

$$\begin{aligned} H_y|_{i,j+\frac{1}{2}} = & -\frac{\partial(uv)}{\partial x}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\partial(vv)}{\partial y}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\partial p}{\partial y}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \right) + \\ & + \frac{\partial T^{xy}}{\partial x}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{Fr^2} g_y, \end{aligned} \quad (2.19)$$

que apresentam somente as derivadas espaciais da equação de quantidade de movimento.

O gradiente da pressão e o termos difusivos das equações (2.18) e (2.19) são aproximados pelo método de diferenças centradas de segunda ordem, isto é,

$$\frac{\partial p}{\partial x}\Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\delta x}, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y}\Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\delta y}, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{u_{i+\frac{3}{2},j} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1}}{(\delta y)^2}, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{(\delta x)^2} + \frac{v_{i,j+\frac{3}{2}} - 2v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{(\delta y)^2}. \quad (2.23)$$

A aproximação do divergente do tensor extra-tensão depende da localização do ponto, sendo necessário avaliar as células vizinhas. Dessa maneira, conforme os trabalhos [31] e [14] considere os casos expostos a seguir:

- **Caso 1:** Neste caso, a vizinhança de células de fluido e de superfície livre são do tipo **[F]** ou **[S]** (ver Figura 2.2 (a)). Assim, a aproximação do divergente do tensor extra-tensão das equações (2.18) e (2.19) é feita pelo método de diferenças centradas de segunda ordem, ou seja,

$$\frac{\partial T^{xx}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{T_{i+1,j}^{xx} - T_{i,j}^{xx}}{\delta x} + \frac{T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} - T_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy}}{\delta y} \quad (2.24)$$

e

$$\frac{\partial T^{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} - T_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy}}{\delta x} + \frac{T_{i,j+1}^{yy} - T_{i,j}^{yy}}{\delta y}. \quad (2.25)$$

Pelo fato do tensor  $\mathbf{T}$  não estar definido nos pontos que estão na aresta de uma célula, o que se faz é aproximar  $T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy}$ ,  $T_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy}$  e  $T_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy}$  por uma média aritmética dos quatro pontos mais próximos, isto é,

$$T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{1}{4} (T_{i,j}^{xy} + T_{i+1,j}^{xy} + T_{i,j+1}^{xy} + T_{i+1,j+1}^{xy}), \quad (2.26)$$

$$T_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{1}{4} (T_{i,j}^{xy} + T_{i+1,j}^{xy} + T_{i,j-1}^{xy} + T_{i+1,j-1}^{xy}), \quad (2.27)$$

$$T_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{1}{4} (T_{i,j}^{xy} + T_{i-1,j}^{xy} + T_{i,j+1}^{xy} + T_{i-1,j+1}^{xy}). \quad (2.28)$$

- **Caso 2:** Quando a aresta superior das células do tipo **[F]** ou **[S]** tem contato com as células do tipo **[B]**, **[I]**, **[O]** ou **[E]** (ver Figura 2.2 (b)) e a aproximação do divergente do tensor  $\mathbf{T}$  é feita no ponto  $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$  utiliza-se o método de diferenças regressivas. O mesmo método de diferenças finitas é usado quando a aresta à direita das células **[F]** ou **[S]** tem contato com as células do tipo **[B]**, **[I]**, **[O]** ou **[E]** (ver Figura 2.2 (c)) e quando a aproximação do divergente é feita no ponto  $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ . Assim,

$$\frac{\partial T^{xx}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{T_{i+1,j}^{xx} - T_{i,j}^{xx}}{\delta x} + \frac{T_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} - T_{i+\frac{1}{2},j-1}^{xy}}{\delta y} \quad (2.29)$$

e

$$\frac{\partial T^{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{T_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} - T_{i-1,j+\frac{1}{2}}^{xy}}{\delta x} + \frac{T_{i,j+1}^{yy} - T_{i,j}^{yy}}{\delta y}, \quad (2.30)$$

onde  $T_{i+\frac{1}{2},j}^{xy}$ ,  $T_{i+\frac{1}{2},j-1}^{xy}$ ,  $T_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy}$  e  $T_{i-1,j+\frac{1}{2}}^{xy}$  são aproximados por uma média aritmética de dois pontos vizinhos, isto é,

$$T_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \frac{1}{2} (T_{i,j}^{xy} + T_{i+1,j}^{xy}), \quad T_{i+\frac{1}{2},j-1}^{xy} = \frac{1}{2} (T_{i,j-1}^{xy} + T_{i+1,j-1}^{xy}), \quad (2.31)$$

$$T_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{1}{2} (T_{i,j}^{xy} + T_{i,j+1}^{xy}), \quad T_{i-1,j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{1}{2} (T_{i-1,j}^{xy} + T_{i-1,j+1}^{xy}). \quad (2.32)$$

- **Caso 3:** Neste caso, quando as células **[F]** ou **[S]** tem a aresta inferior em contato com as células do tipo **[B]**, **[I]**, **[O]** ou **[E]** (veja Figura 2.2 (d)) e a aproximação é feita no ponto  $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$ , utiliza-se o método de diferenças progressivas. O mesmo método ocorre quando as células **[F]** ou **[S]** tem a aresta à esquerda em contato com

as células **[B]**, **[I]**, **[O]** ou **[E]** (veja Figura 2.2 (e)) e a aproximação é feita no ponto  $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ . Desta maneira,

$$\frac{\partial T^{xx}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{T^{xx}_{i+1,j} - T^{xx}_{i,j}}{\delta x} + \frac{T^{xy}_{i+\frac{1}{2},j+1} - T^{xy}_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta y} \quad (2.33)$$

e

$$\frac{\partial T^{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{T^{xy}_{i+1,j+\frac{1}{2}} - T^{xy}_{i,j+\frac{1}{2}}}{\delta x} + \frac{T^{yy}_{i,j+1} - T^{yy}_{i,j}}{\delta y}, \quad (2.34)$$

onde  $T^{xy}_{i+\frac{1}{2},j+1}$  e  $T^{xx}_{i+1,j+\frac{1}{2}}$  são aproximados por uma média aritmética de dois pontos vizinhos, isto é,

$$T^{xy}_{i+\frac{1}{2},j+1} = \frac{1}{2} (T^{xy}_{i,j+1} + T^{xy}_{i+1,j+1}) \quad \text{e} \quad T^{xx}_{i+1,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (T^{xx}_{i+1,j} + T^{xx}_{i+1,j+1}). \quad (2.35)$$

- **Caso 4:** Se nenhum dos casos expostos acima acontece, então os divergentes do tensor extra-tensão ao longo dos eixos  $x$  e  $y$  são dados respectivamente por

$$\frac{\partial T^{xx}}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{T^{xx}_{i+1,j} - T^{xx}_{i,j}}{\delta x} \quad (2.36)$$

e

$$\frac{\partial T^{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{T^{yy}_{i,j+1} - T^{yy}_{i,j}}{\delta y}. \quad (2.37)$$

Considerando a condição de Neumann homogênea para as derivadas  $\frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j}$  e  $\frac{\partial T^{xy}}{\partial x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}$ .

Na aproximação dos termos advectivos das equações (2.18) e (2.19) utiliza-se o método CUBISTA [26].

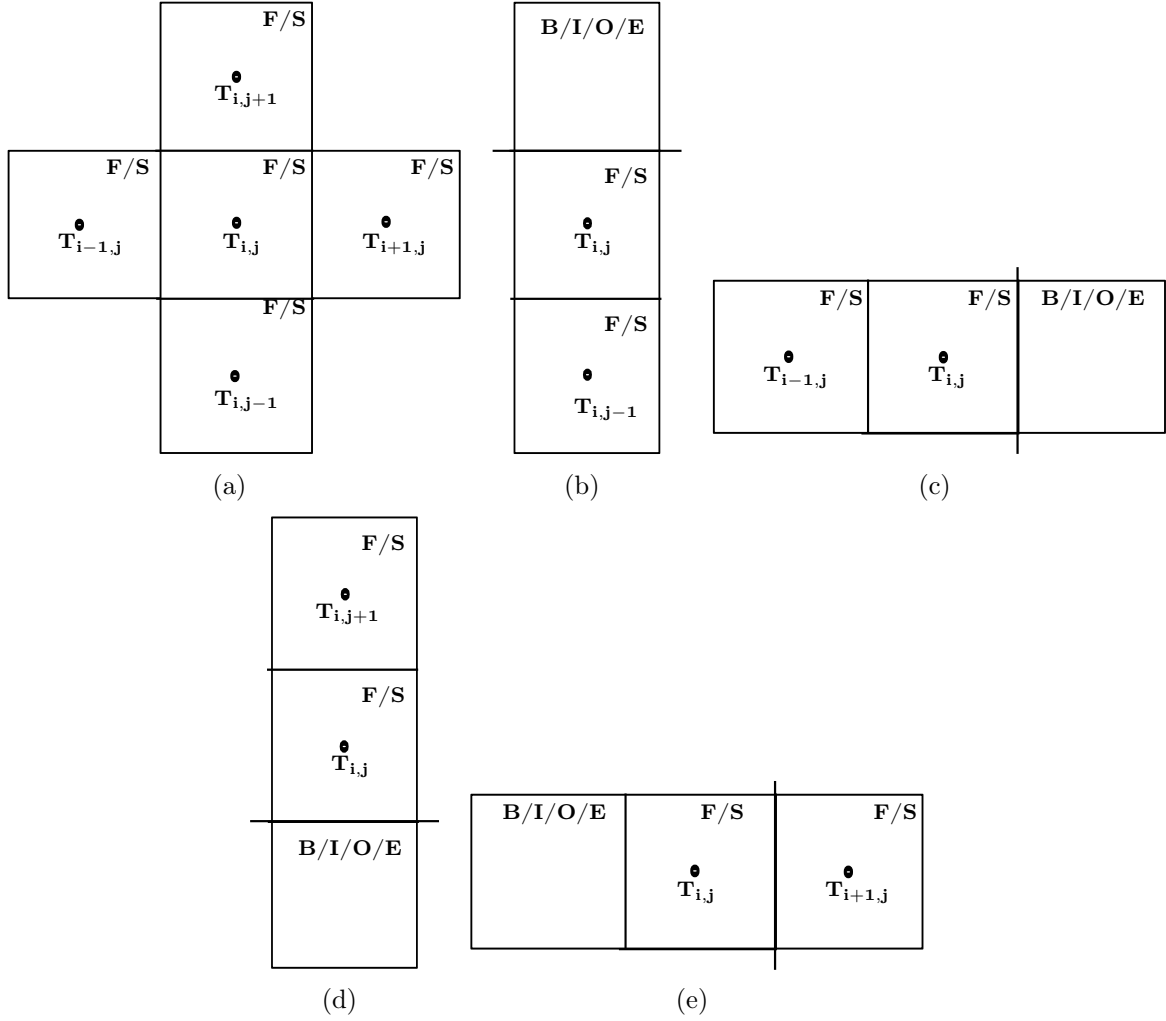


Figura 2.2: Ilustração do Caso 1 (Figura (a)), Caso 2 (Figuras (b) e (c)) e Caso 3 (Figuras (d) e (e)).

## 2.2.2 Equações do modelo algébrico

Como foi dito na Seção 1.3 o uso modelo algébrico PTT para representar o tensor extra-tensão consiste em calcular o traço  $I_{\mathbf{T}}$  pela equação (1.50), em seguida calcula-se o tensor deviatórico  $\mathbf{\Gamma}$  pela equação (1.86) e por fim atualiza-se o tensor  $\mathbf{T}$  pela equação (1.37). Desta forma, considere a equação de evolução para o traço  $I_{\mathbf{T}}$  avaliada no ponto  $(x_i, y_j)$  nas células  $[\mathbf{F}]$  e  $[\mathbf{S}]$  dada por

$$\frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial t} = - \left( \frac{\partial u I_{\mathbf{T}}}{\partial x} \right)_{i,j} - \left( \frac{\partial v I_{\mathbf{T}}}{\partial y} \right)_{i,j} - \frac{f(I_{\mathbf{T}})_{i,j}}{W_i} I_{\mathbf{T}}|_{i,j} + 2 \{\mathbf{GS}\}_{i,j}, \quad (2.38)$$

sendo que,  $\{\mathbf{GS}\}_{i,j}$  e a função  $f(I_{\mathbf{T}})_{i,j}$  na forma linear são dadas respectivamente pelas equações

$$\{\mathbf{GS}\}_{i,j} = \left[ \frac{1}{2} (I_{\mathbf{T}})^2 \Big|_{i,j} \{\mathbf{W}^2\}_{i,j} + \left( \frac{(1-\beta)}{W_i Re} + \frac{1}{2} I_{\mathbf{T}} \right) I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j} \{\mathbf{S}^2\}_{i,j} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.39)$$

$$f(I_{\mathbf{T}})_{i,j} = 1 + \epsilon \frac{Re W_i}{(1-\beta)} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j}, \quad (2.40)$$

onde

$$\{\mathbf{W}^2\}_{i,j} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} - \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right)^2, \quad (2.41)$$

$$\{\mathbf{S}^2\}_{i,j} = \left( \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \right)^2. \quad (2.42)$$

As derivadas espaciais das equações (2.41) e (2.42) são discretizadas por diferenças centradas,

$$\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{v_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i,j+\frac{1}{2}} - u_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x}, \quad \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} = \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}. \quad (2.44)$$

As velocidades não definidas na malha espacial podem ser obtidas a partir da média aritmética usando os quatros pontos mais próximos [31], isto é,

$$u_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left( u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1} \right), \quad (2.45)$$

$$u_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left( u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1} + u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} \right), \quad (2.46)$$

$$v_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4} \left( v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}} \right), \quad (2.47)$$

$$v_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{1}{4} \left( v_{i-1,j+\frac{1}{2}} + v_{i-1,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} \right). \quad (2.48)$$

Os termos advectivos  $\frac{\partial u I_{\mathbf{T}}}{\partial x} \Big|_{i,j}$  e  $\frac{\partial u I_{\mathbf{T}}}{\partial x} \Big|_{i,j}$  são aproximados pelo método CUBISTA [26].

Entretanto, quando a aproximação é feita nas células **[F]** ou **[S]** que estão próximas das células **[I]**, **[O]**, **[B]** ou **[E]** utiliza-se o método 'upwind' de primeira ordem FOU.

O tensor extra-tensão é atualizado pela equação (1.37) avaliado no centro de células tipo **[F]** e **[S]** em coordenadas cartesianas é dado por

$$T_{i,j}^{xx} = \Gamma_{i,j}^{xx} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j}, \quad (2.49)$$

$$T_{i,j}^{xy} = \Gamma_{i,j}^{xy}, \quad (2.50)$$

$$T_{i,j}^{yy} = \Gamma_{i,j}^{yy} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j}, \quad (2.51)$$

onde as componentes  $\Gamma_{i,j}^{xx}$ ,  $\Gamma_{i,j}^{xy}$  e  $\Gamma_{i,j}^{yy}$ , são dadas respectivamente pelas equações

$$\Gamma_{i,j}^{xx} = \frac{\{\mathbf{FS}\}_{i,j}}{\{\mathbf{S}^2\}_{i,j}} \mathbf{S}_{i,j}^{xx} \dots \quad (2.52)$$

$$\dots - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j}}{\{\mathbf{S}^2\}_{i,j}} \left[ ((\mathbf{SW})_{i,j}^{xx} - (\mathbf{WS})_{i,j}^{xx}) - 2 \left( (\mathbf{S}^2)_{i,j}^{xx} - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\}_{i,j} \right) \right],$$

$$\Gamma_{i,j}^{xy} = \frac{\{\mathbf{FS}\}_{i,j}}{\{\mathbf{S}^2\}_{i,j}} \mathbf{S}_{i,j}^{xy} - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j}}{\{\mathbf{S}^2\}_{i,j}} \left[ ((\mathbf{SW})_{i,j}^{xy} - (\mathbf{WS})_{i,j}^{xy}) - 2 (\mathbf{S}^2)_{i,j}^{xx} \right], \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{i,j}^{yy} &= \frac{\{\Gamma\mathbf{S}\}_{i,j}}{\{\mathbf{S}^2\}_{i,j}} \mathbf{S}_{i,j}^{yy} \dots \\ &\dots - \frac{1}{2} \frac{I_{\mathbf{T}}|_{i,j}}{\{\mathbf{S}^2\}_{i,j}} \left[ ((\mathbf{S}\mathbf{W})_{i,j}^{yy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})_{i,j}^{yy}) - 2 \left( (\mathbf{S}^2)_{i,j}^{yy} - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\}_{i,j} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde

$$\mathbf{S}_{i,j}^{xx} = \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j}, \quad (2.55)$$

$$\mathbf{S}_{i,j}^{xy} = \frac{1}{2} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} + \left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i,j} \right), \quad (2.56)$$

$$\mathbf{S}_{i,j}^{yy} = \left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_{i,j}, \quad (2.57)$$

$$(\mathbf{S}\mathbf{W})_{i,j}^{xx} - (\mathbf{W}\mathbf{S})_{i,j}^{xx} = \frac{1}{2} \left( \left. \frac{\partial x}{\partial x} \right|_{i,j} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} \right)^2, \quad (2.58)$$

$$(\mathbf{S}\mathbf{W})_{i,j}^{yy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})_{i,j}^{yy} = \frac{1}{2} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} \right)^2, \quad (2.59)$$

$$(\mathbf{S}\mathbf{W})_{i,j}^{xy} - (\mathbf{W}\mathbf{S})_{i,j}^{xy} = \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} - \left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i,j} \right), \quad (2.60)$$

$$(\mathbf{S}^2)_{i,j}^{xx} = \left( \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} + \left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i,j} \right)^2, \quad (2.61)$$

$$(\mathbf{S}^2)_{i,j}^{yy} = \left( \left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_{i,j} \right)^2 + \frac{1}{4} \left( \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i,j} + \left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i,j} \right)^2, \quad (2.62)$$

As aproximações das derivadas espaciais apresentadas nas equações (2.55)-(2.62) nas células do tipo  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  estão expostas nas equações (2.43) e (2.44).

### 2.2.3 Equações do modelo algébrico em fronteiras rígidas

No modelo algébrico PTT, faz-se necessário definir somente o traço do tensor extra-tensão  $I_{\mathbf{T}}$  nas fronteiras rígidas, pois os tensores  $\Gamma$  e  $\mathbf{T}$  são calculados pontualmente, isto é, para obter esses tensores na célula  $(i, j)$  não é necessário o valor dos mesmos em células vizinhas. Assim, o valor de  $I_{\mathbf{T}}$  no centro da célula  $[\mathbf{B}]$  é exigido quando há a aproximação dos termos convectivos próximos a esta célula.

Na Subseção 1.4.2, é visto que a equação de evolução para  $I_{\mathbf{T}}$  na face das células  $[\mathbf{B}]$  é calculada considerando a hipótese de fronteira impermeável e de não-escorregamento para o campo de velocidade  $\mathbf{u}$ . Assim, seguindo as ideias de [14] e adaptando-as para o cálculo do traço do tensor extra-tensão  $I_{\mathbf{T}}$ , neste trabalho, para o caso bidimensional  $I_{\mathbf{T}}$  será avaliado nos pontos  $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$  e  $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$  se a fronteira rígida for paralela ao eixo- $y$  e avaliado no ponto  $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$  e  $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$  se a fronteira rígida for paralela ao eixo- $x$ . Veja os casos a seguir:

### 1. Fronteira rígida paralela ao eixo $x$

Considere a fronteira rígida paralelo ao eixo- $x$ , assim a aproximação da equação de evolução para o traço  $I_{\mathbf{T}}$  na interface desta célula no ponto  $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ , é dada por

$$\frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial t} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})_{i,j+\frac{1}{2}}}{W_i} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \left[ \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}}{2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.63)$$

Discretizando a derivada espacial da equação (2.63) por diferenças centradas de segunda ordem, tem-se

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta y}, \quad (2.64)$$

com

$$u_{i,j} = \frac{1}{2} (u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j}) \quad \text{e} \quad u_{i,j+1} = \frac{1}{2} (u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1}). \quad (2.65)$$

Mediante a condição de não-escorregamento da velocidade  $u$  na fronteira rígida,

$$\frac{1}{2} (u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i+\frac{1}{2},j}) = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{i+\frac{1}{2},j+1} = -u_{i+\frac{1}{2},j}, \quad (2.66)$$

$$\frac{1}{2} (u_{i-\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j}) = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{i-\frac{1}{2},j+1} = -u_{i-\frac{1}{2},j}. \quad (2.67)$$

Portanto, pelas equações (2.65)-(2.67),

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1}}{\delta y}. \quad (2.68)$$

Após o cálculo de  $I_{\mathbf{T}}$  na aresta da célula  $[\mathbf{B}]$  faz-se uma extrapolação quadrática para obter  $I_{\mathbf{T}}$  no centro desta célula, ou seja,

$$I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j} = \frac{8}{3} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - 2 I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j+1} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i,j+2}. \quad (2.69)$$

Observe pela Figura 2.3 (a) que as células do tipo  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  tem a aresta superior adjacente com a célula do tipo  $[\mathbf{B}]$ . No caso em que a aresta inferior das células  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  é adjacente com a célula  $[\mathbf{B}]$  faz-se o processo análogo ao que foi descrito acima, e por isso neste trabalho foi omitido.

### 2. Fronteira rígida paralelo ao eixo- $y$ :

Considere as células  $[\mathbf{B}]$ , cuja a aresta tenha interface a esquerda das células do tipo  $[\mathbf{S}]$  ou  $[\mathbf{F}]$  como ilustrado na Figura 2.3 (b). A aproximação da equação de evolução simplificada para  $I_{\mathbf{T}}$  é dada por

$$\frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial t} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})_{i+\frac{1}{2},j}}{W_i} I_{\mathbf{T}} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \left[ \frac{(1-\beta)}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}} \Big|_{i+\frac{1}{2},j}}{2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.70)$$

onde a derivada espacial da velocidade  $v$  é discretizada por diferenças centradas de segunda ordem,

$$\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{\delta x}, \quad (2.71)$$

com

$$v_{i,j} = \frac{1}{2} \left( v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \quad \text{e} \quad v_{i+1,j} = \frac{1}{2} \left( v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}} \right). \quad (2.72)$$

Pela condição de não-escorregamento, tem-se

$$\frac{1}{2} \left( v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad v_{i+1,j+\frac{1}{2}} = -v_{i,j+\frac{1}{2}}, \quad (2.73)$$

$$\frac{1}{2} \left( v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad v_{i+1,j-\frac{1}{2}} = -v_{i,j-\frac{1}{2}}. \quad (2.74)$$

Assim, pelas equações (2.72)-(2.74),

$$\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta x}. \quad (2.75)$$

Após o cálculo de  $I_{\mathbf{T}}$  na aresta da célula  $[\mathbf{B}]$ , calcula-se  $I_{\mathbf{T}}|_{i,j}$  via extrapolação quadrática dada por

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = \frac{8}{3} I_{\mathbf{T}}|_{i+\frac{1}{2},j} - 2 I_{\mathbf{T}}|_{i+1,j} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}}|_{i+2,j}. \quad (2.76)$$

O caso em que a interface da célula  $[\mathbf{B}]$  é a direita das células  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  é análogo ao caso descrito acima, e por isso omitido.

### 3. Quina no contorno:

A quina no contorno ocorre quando duas arestas da célula  $[\mathbf{B}]$  tem contato com células  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$ . Assim, de acordo com a Figura 2.3 (c) calcula-se  $I_{\mathbf{T}}$  ao longo da fronteira do eixo- $x$  (equação (2.69)) e eixo- $y$  (equação (2.76)) de forma independente. Por fim, calcula-se a média das extrapolações em cada direção, obtendo

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{8}{3} I_{\mathbf{T}}|_{i,j+\frac{1}{2}} - 2 I_{\mathbf{T}}|_{i,j+1} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}}|_{i,j+2} \right) + \left( \frac{8}{3} I_{\mathbf{T}}|_{i+\frac{1}{2},j} - 2 I_{\mathbf{T}}|_{i+1,j} + \frac{1}{3} I_{\mathbf{T}}|_{i+2,j} \right) \right]. \quad (2.77)$$

Os outros caso de quina são omitidos, pelo fato de serem análogos.

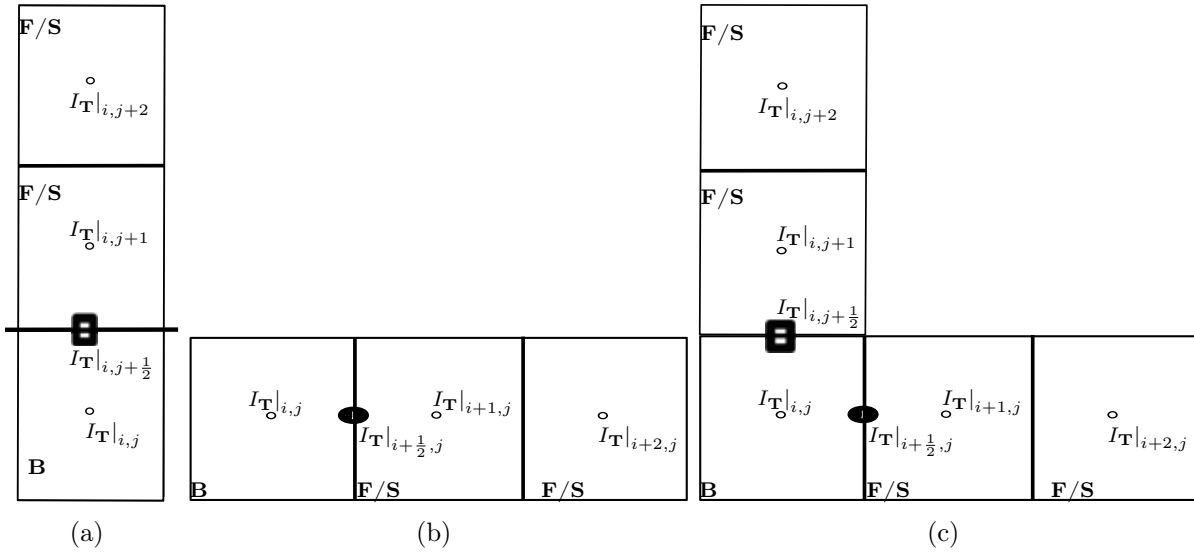


Figura 2.3: Ilustração de uma célula de contorno rígido paralelo ao eixo  $x$  (Figura (a)),  $y$  (Figura (b)) e quina (Figura (c)).

## 2.2.4 Equações do modelo algébrico no injetor e ejetor

A fronteira do injetor ou *inflow* responsável pela entrada de fluido num determinado domínio é coincidente com alguma interface da célula  $[\mathbf{I}]$ , sendo que, a solução deve ser especificada nesta fronteira de acordo com o problema a ser modelado. Seguindo as ideias de [21] e [14], considere duas situações ilustradas pela Figura 2.7, sendo as demais omitidas pelo fato de serem análogas.

Conforme a Figura 2.4 (a) a aresta da célula  $[\mathbf{I}]$  em contato com células  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  é paralelo ao eixo- $x$ . Assim, para determinar  $I_{\mathbf{T}}$  no centro das células  $[\mathbf{I}]$ , primeiramente especifica-se  $I_{\mathbf{T}}$  na aresta e depois utiliza-se extrapolação linear, obtendo

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = 2 I_{\mathbf{T}}|_{i,j+\frac{1}{2}} - I_{\mathbf{T}}|_{i,j+1}. \quad (2.78)$$

Desta maneira, quando considera-se a condição de Dirichlet homogênea ao longo da fronteira do injetor (aresta da célula  $[\mathbf{I}]$ ), ou seja,  $I_{\mathbf{T}}|_{i,j+\frac{1}{2}} = 0$  a equação (2.78) é dada por

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = - I_{\mathbf{T}}|_{i,j+1}. \quad (2.79)$$

Outra situação é ilustrada pela Figura 2.4 (b), onde a aresta da célula  $[\mathbf{I}]$  em contato com células  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  é paralelo ao eixo- $y$ . De maneira análoga, especifica-se  $I_{\mathbf{T}}$  ao longo do injetor e utiliza-se extrapolação linear para determinar  $I_{\mathbf{T}}$  no centro da célula  $[\mathbf{I}]$ . Assim, considerando a condição de Dirichlet homogênea ao longo da fronteira do injetor

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = - I_{\mathbf{T}}|_{i+1,j}. \quad (2.80)$$

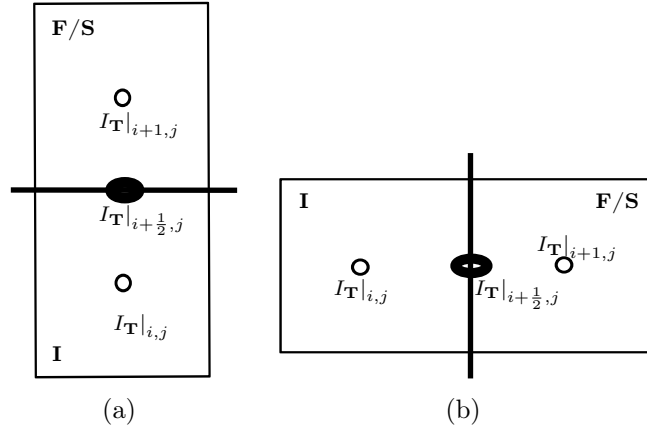


Figura 2.4: Ilustração de uma célula do injetor paralelo ao eixo  $x$  (Figura (a)) e paralelo ao eixo  $y$  (Figura (b)).

O ejetor ou *outflow* responsável pela saída do fluido de um determinado domínio coincide com a aresta de células do tipo [O], que em contato com células [F] ou [S] tem a condição de contorno para  $I_{\mathbf{T}}$  derivada da equação (1.106), isto é,

$$\frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (2.81)$$

com  $\vec{n}$  orientado na direção em que fluido escoar.

De acordo com a Figura 2.5 (a) a aresta da célula [O] em contato com células [F] ou [S] é paralelo ao eixo- $x$ . Assim, para obter  $I_{\mathbf{T}}$  no centro da célula [O] utiliza-se a condição de contorno de  $I_{\mathbf{T}}$  ao longo do ejetor derivada da equação 2.81,

$$\left. \frac{\partial I_{\mathbf{T}}}{\partial y} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} = 0 \quad (2.82)$$

e usando o método de diferenças centradas de segunda ordem, tem-se

$$\frac{I_{\mathbf{T}}|_{i,j} - I_{\mathbf{T}}|_{i,j+1}}{\delta y} = 0 \quad (2.83)$$

implicando em

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = I_{\mathbf{T}}|_{i,j+1}. \quad (2.84)$$

Conforme a Figura 2.5 (b) a aresta da célula [O] em contato com células [F] ou [S] é paralelo ao eixo- $y$ . De maneira análoga ao caso anterior, aproxima-se  $I_{\mathbf{T}}$  na aresta da célula [O] utilizando o método diferenças centradas de segunda ordem e obtém-se  $I_{\mathbf{T}}$  no centro da célula. Assim,

$$I_{\mathbf{T}}|_{i,j} = I_{\mathbf{T}}|_{i+1,j}. \quad (2.85)$$

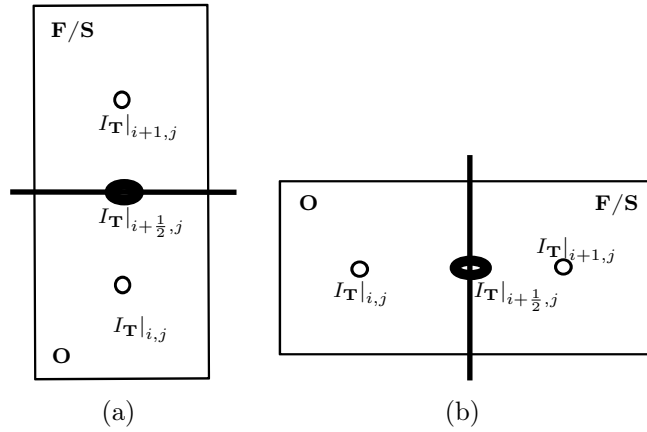


Figura 2.5: Ilustração de uma célula do ejetor paralelo ao eixo  $x$  (Figura (a)) e paralelo ao eixo  $y$  (Figura (b)).

### 2.2.5 Equação de Poisson para $\psi$

Na metodologia GENSMAC o potencial auxiliar  $\psi$  é essencial para o cálculo da velocidade solenoidal. A solução de  $\psi$  é derivada da equação (2.4) cuja discretização das derivadas espaciais no centro da célula é feita utilizando o método de diferenças centradas de segunda ordem. Assim, a aproximação da equação de Poisson para  $\psi$  em células  $[\mathbf{F}]$  é dada por

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{(\delta y)^2} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}. \quad (2.86)$$

A equação (2.86) discretizada próximo aos contornos exige a imposição de condições nas fronteiras rígidas, injetores e ejetores.

Ao longo da fronteira rígida e injetores, considera-se a condição de Neuman homogênea [30], ou seja, na aresta da célula  $[\mathbf{B}]$  e  $[\mathbf{I}]$  em contato com células  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  tem-se a seguinte condição

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{n}} = 0. \quad (2.87)$$

Considere duas situações:

1. A aresta superior da célula  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  em contato com célula  $[\mathbf{B}]$  ou  $[\mathbf{I}]$  (ver Figura 2.6 (a)).

Nesse caso, seguindo as ideias de [14] a discretização por diferenças centradas da equação (2.87) ao longo da fronteira rígida ou injetor é dada por

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1}}{\delta y} = 0. \quad (2.88)$$

Assim, obtém-se o valor de  $\psi$  no centro da célula  $[\mathbf{B}]$  ou  $[\mathbf{I}]$ ,

$$\psi_{i,j} = \psi_{i,j-1}. \quad (2.89)$$

2. A aresta a direita da célula  $[\mathbf{F}]$  ou  $[\mathbf{S}]$  em contato com célula  $[\mathbf{B}]$  ou  $[\mathbf{I}]$  (ver Figura 2.6 (b)).

Desta maneira, a discretização por diferenças centradas da equação (2.87) ao longo da fronteira rígida ou injetor é dada por

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}}{\delta x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_{i,j} = \psi_{i-1,j} \quad (2.90)$$

O caso em que a aresta inferior ou a esquerda das células **[F]** ou **[S]** em contato com células **[B]** ou **[I]** é feito de maneira análoga aos casos 1 e 2, respectivamente.

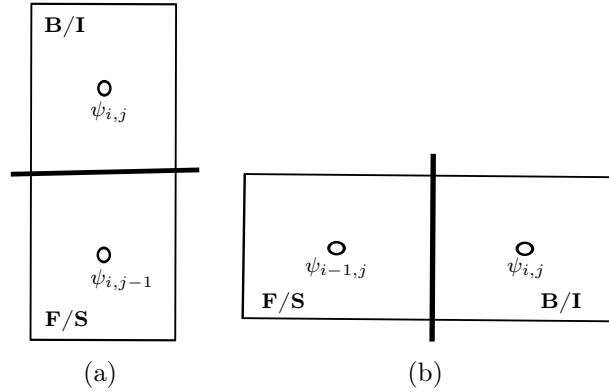


Figura 2.6: Ilustração de uma célula do injetor ou fronteira rígida paralelo ao eixo  $x$  (Figura (a)) e paralelo ao eixo  $y$  (Figura (b))

No ejetor considera-se a condição de Dirichlet homogênea, isto é,

$$\psi_{i,j} = 0. \quad (2.91)$$

Na formulação implícita proposta no trabalho [6], o cálculo de  $\psi$  nas células **[S]** é feito pelas equações (2.15) quando a equação de quantidade de movimento é integrada por EI, considerando  $\psi = 0$  nas células **[E]**. A seguir será exposta a discretização da equação (2.15) conforme os trabalhos [6] e [14].

1. No cálculo de  $\psi$  nas células **[S]** quando utiliza-se EI na integração temporal da equação de quantidade de movimento para a velocidade intermediária, considere os casos em que o vetor normal à superfície livre  $\mathbf{n} = \begin{bmatrix} n_x \\ n_y \end{bmatrix}$  assume os seguintes valores:

- No caso em que  $\mathbf{n} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ , ou seja, somente uma aresta da célula da **[S]** tem contato com célula **[E]** (ver Figura 2.7 (a)), a equação (2.15) reduz a

$$\frac{\psi}{\delta t} + \frac{2\beta}{Re} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1} = -\tilde{p}^{n+1} + T^{xx} - \frac{2\beta}{Re} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y}, \quad (2.92)$$

discretizada por diferenças centradas de segunda ordem, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\psi_{i,j}}{\delta t} + \frac{\beta}{Re} \left[ \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{(\delta x)^2} - \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{(\delta y)^2} \right] = \dots \\ \dots = -\tilde{p}_{i,j} + T_{i,j}^{xx} - \frac{2\beta}{Re} \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y}. \end{aligned} \quad (2.93)$$

- No caso em que  $\mathbf{n} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$ , ou seja, duas arestas da célula [S] tem contato com células [E] (ver Figura 2.7 (b)), a equação (2.15) é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\psi}{\delta t} + \frac{\beta}{Re} \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial xy} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right] - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi = -\tilde{p} + \frac{1}{2} [(T^{xx}) + \dots \\ \dots + 2(T^{xy}) + (T^{yy})] + \frac{\beta}{Re} \left[ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (2.94)$$

cuja discretização é dada pela equação

$$\frac{\psi}{\delta t} + \frac{2\beta}{Re} \frac{\partial^2 \psi}{\partial xy} \Big|_{i,j} = -\tilde{p}_{i,j} - \frac{\beta}{Re} \left[ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \Big|_{i,j} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \Big|_{i,j} \right] + \frac{1}{2} [T_{i,j}^{xx} + 2T_{i,j}^{xy} + T_{i,j}^{yy}], \quad (2.95)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \Big|_{i,j} &= \frac{\tilde{u}_{i,j} - \tilde{u}_{i,j-1}}{\delta y}, \quad \tilde{u}_{i,j} = \frac{1}{2} (\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} + \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}), \quad u_{i,j-1} = \frac{1}{2} (u_{i+\frac{1}{2},j-1} + u_{i-\frac{1}{2},j-1}), \\ \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \Big|_{i,j} &= \frac{\tilde{v}_{i,j} + \tilde{v}_{i-1,j}}{\delta x}, \quad \tilde{v}_{i,j} = \frac{1}{2} (\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}), \quad \tilde{v}_{i-1,j} = \frac{1}{2} (\tilde{v}_{i-1,j+\frac{1}{2}} + \tilde{v}_{i-1,j-\frac{1}{2}}), \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial xy} \Big|_{i,j} &= \frac{(\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j}) - (\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1})}{(\delta x)(\delta y)}. \end{aligned} \quad (2.96)$$

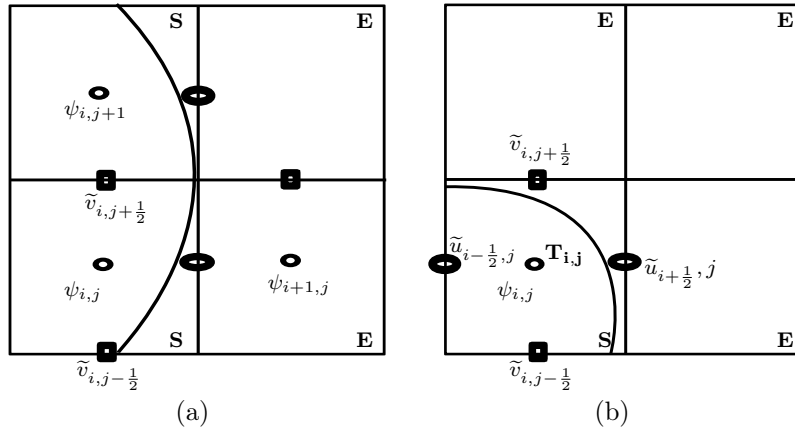


Figura 2.7: Ilustração de célula de superfície livre com uma aresta em contato com células vazias (Figura (a)) e de uma célula de superfície livre com duas arestas em contato com células vazias (Figura (b)).

## 2.2.6 Equação para velocidade solenoidal

A velocidade solenoidal discretizada por diferenças centradas em todas as arestas das células [F] ou [S] em contato com células [F], ou [S] ou [O] é dada por

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}}{\delta x}, \quad v_{i,j+\frac{1}{2}} = \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}}{\delta y}. \quad (2.97)$$

Em escoamentos com superfície livre é necessário impor condições nesse tipo de contorno para o campo de velocidade, esta condição é derivada da equação (1.119), isto é,

$$\frac{\beta}{Re} \left[ 2n_x n_y \left( \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) + (n_x^2 - n_y^2) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] = n_x n_y (T^{xx} - T^{yy}) + (n_y^2 - n_x^2) T^{xy}, \quad (2.98)$$

juntamente com a equação da continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.99)$$

Para impor essas condições, considere dois casos:

1. No caso em que a célula [S] tem somente uma aresta em contato com a célula [E] e o versor normal  $\mathbf{n} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$  (veja Figura 2.8 (a)), inicialmente discretiza-se a equação da continuidade no centro da célula por diferenças centradas. Dessa maneira, obtém-se a velocidade normal à superfície livre, isto é,

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i-\frac{1}{2},j} - \delta x \left( \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta y} \right). \quad (2.100)$$

Em seguida calcula-se a velocidade tangencial pela equação (1.119) que neste caso se reduz a

$$\frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + T^{xy} = 0, \quad (2.101)$$

discretizando a equação (2.101) no ponto  $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}})$  obtém-se

$$v_{i+1,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} - \delta x \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta y} - \frac{Re}{\beta} T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} \right), \quad (2.102)$$

onde

$$T_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{3}{4} (T_{i,j}^{xy} + T_{i,j+1}^{xy}) - \frac{1}{4} (T_{i-1,j}^{xy} + T_{i-1,j+1}^{xy}), \quad (2.103)$$

seguindo a estratégia adotada em [21].

2. No caso em que a célula [S] tem duas arestas em contato com a célula [E] e o versor normal  $\mathbf{n} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$  (ver Figura 2.8 (b)), a equação (1.119) reduz a

$$\frac{\beta}{Re} \left[ \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{1}{2} (T^{xx} - T^{yy}) = 0. \quad (2.104)$$

Discretizado a equação da continuidade e a equação (2.104) no centro da célula por diferenças centradas, obtém-se

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i-\frac{1}{2},j} + \frac{\delta x}{\delta y} \left( v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \right). \quad (2.105)$$

$$v_{i,j-\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} - \delta y \frac{Re}{4\beta} (T_{i,j}^{yy} - T_{i,j}^{xx}), \quad (2.106)$$

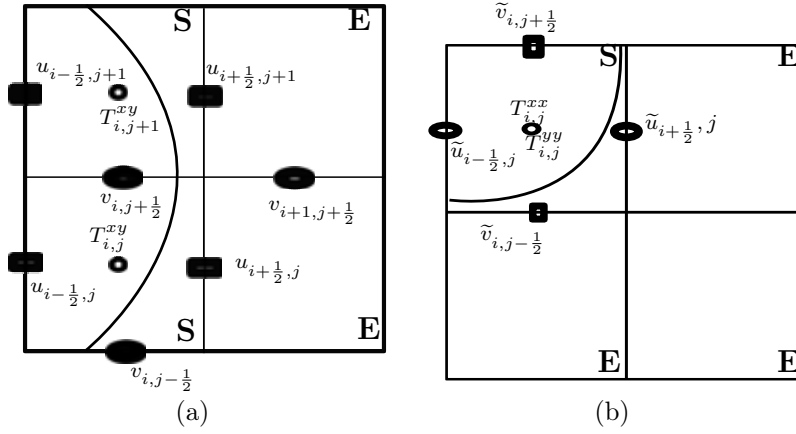


Figura 2.8: Ilustração de célula de superfície livre com uma aresta em contato com células vazias (Figura (a)) e de uma célula de superfície livre com duas arestas em contato com células vazias (Figura (b)).

### 2.2.7 Equação para a pressão final

O cálculo da pressão final nas células de fluido depende da integração temporal da equação de quantidade de movimento. Além disso, o tratamento da pressão na superfície livre é feito de maneira distinta nas formulações explícita e implícita. As discretizações em cada caso será exposto a seguir.

Seguindo a estratégia apresentada em [6], a discretização da pressão final nas células [F] e [S] aplicando a integração temporal de Euler implícito (EI) é dada por

$$p_{i,j} = \tilde{p}_{i,j} + \frac{\psi_{i,j}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \left[ \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{(\delta y)^2} \right]. \quad (2.107)$$

## 2.3 Algoritmo Computacional utilizado neste trabalho

Supondo que o campo de velocidade  $u$  e  $v$  solenoidal, o traço do tensor extra-tensão  $I_{\mathbf{T}}$ , a pressão  $p$  sejam conhecidos no tempo  $t^n$  e considerando o modelo algébrico PTT para o cálculo do tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$ , tem-se os seguintes passos computacionais:

**Passo 1:** Calcula-se o traço do tensor extra-tensão  $I_{\mathbf{T}}^{n+1}$  por Euler explícito,

$$I_{\mathbf{T}}^{n+1} = I_{\mathbf{T}}^n + \delta t F(\mathbf{u}^n, I_{\mathbf{T}}^n, \{\mathbf{GS}\}^n). \quad (2.108)$$

**Passo 2:** Calcula-se o tensor deviatórico  $\mathbf{\Gamma}^{n+1}$  por (1.86), isto é,

$$\mathbf{\Gamma}^{n+1} = \frac{\{\mathbf{GS}\}^n}{\{\mathbf{S}^2\}^n} \mathbf{S}^n - \frac{1}{2} \frac{(I_{\mathbf{T}})^{n+1}}{\{\mathbf{S}^2\}^n} \left[ ((\mathbf{SW})^n - (\mathbf{WS})^n) - 2 \left( (\mathbf{S}^2)^n - \frac{1}{3} \{\mathbf{S}^2\}^n \mathbf{I} \right) \right] \quad (2.109)$$

**Passo 3:** Calcula-se o tensor extra-tensão  $\mathbf{T}^{n+1}$  por

$$\mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{\Gamma}^{n+1} + \frac{1}{3} (I_{\mathbf{T}})^{n+1} \mathbf{I}. \quad (2.110)$$

**Passo 4:** Atualiza-se as condições de contorno de  $I_{\mathbf{T}}^{n+1}$  e  $\mathbf{T}^{n+1}$  nas fronteiras rígidas, no injetor e ejetor.

**Passo 5:** Calcula-se a velocidade intermediária  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  pela equação (2.9), isto é,

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \frac{\mathbf{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n - \nabla \tilde{p}^{n+1} + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}. \quad (2.111)$$

O sistema linear derivado da expressão (2.111) é resolvido pelo método BiCGstab-SOR.

**Passo 6:** Resolve-se a equação de Poisson por

$$\nabla^2 \psi^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}, \quad (2.112)$$

com as condições de contorno de  $\psi^{n+1}$  no injetor e fronteira rígida do tipo Neumann homogênea, no ejetor considera-se a condição de Dirichlet homogênea e na superfície livre calcula-se

$$\begin{aligned} \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} + \frac{2\beta}{Re} \left[ n_x^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2n_x n_y \frac{\partial^2 \psi}{\partial xy} + n_y^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right]^{n+1} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1} = -\tilde{p}^{n+1} + n_x^2 (\bar{T}^{xx})^{n+1} + \\ + 2n_x n_y (\bar{T}^{xy})^{n+1} + n_y^2 (\bar{T}^{yy})^{n+1} + \frac{2\beta}{Re} \left[ -n_x^2 \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} + n_x n_y \left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) - n_y^2 \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right]^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.113)$$

O sistema linear derivado da expressão (2.112) é resolvido pelo método BiCGstab-SOR.

**Passo 7:** Atualiza-se a velocidade  $\mathbf{u}^{n+1}$  no interior do domínio pela expressão

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \nabla \psi^{n+1}. \quad (2.114)$$

Se o escoamento é com superfície livre, calcula-se a velocidade normal e tangencial à essa superfície no tempo  $n + 1$  pelas respectivas expressões

$$\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} = 0, \quad (2.115)$$

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{Re} \left[ 2n_x n_y \left( \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} + (n_x^2 - n_y^2) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1} \right] = \dots \\ \dots = n_x n_y (T^{xx} - T^{yy})^{n+1} + (n_y^2 - n_x^2) (T^{xy})^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.116)$$

Em seguida atualiza-se as velocidades na fronteira rígida e a velocidade normal ao injetor e ejetor.

**Passo 8:** Atualiza-se a pressão  $p^{n+1}$  pela equação

$$p^{n+1} = \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1}. \quad (2.117)$$

nas células **[F]** e **[S]**.

**Passo 9:** Se o escoamento é com superfície livre, faz-se necessário a atualização das partículas marcadoras na nova posição  $\mathbf{x}^{n+1}$  que é dada pela equação

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \quad (2.118)$$

cuja integração é feita usando o Runge-Kutta de 2ª ordem [14], isto é,

$$\frac{\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}^n}{\delta t} = \mathbf{u}(\mathbf{x}^n, \mathbf{t}^n) \quad (2.119)$$

$$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\delta t} = \frac{1}{2} [\mathbf{u}(\mathbf{x}^n, \mathbf{t}^n) + \mathbf{u}(\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{t}^{n+1})]. \quad (2.120)$$

**Passo 9:** Impõe-se as condições de contorno para o proximo ciclo, definindo as grandezas na vizinhanca da região ocupada pelo fluido. Assim, se o escoamento é com superfície livre atualiza-se as velocidades normal e tangencial à essa superfície. Também atualiza-se a velocidade na fronteira rígida, velocidade normal ao injetor e ejetor. Por fim, atualiza-se as condições do contorno de  $I_T$  e  $\mathbf{T}$  em fronteiras rígidas, injetor e ejetor.



## Resultados analíticos e numéricos

Neste capítulo será apresentada a obtenção da solução analítica para um escoamento totalmente desenvolvido em um canal utilizando o modelo algébrico PTT. Ainda, considerando um escoamento em um canal serão expostos a verificação da metodologia numérica, o esforço computacional e resultados numéricos com objetivo de avaliar a estabilidade do modelo algébrico PTT. Também, serão exibidos os resultados de simulações numéricas no problema da contração 4:1, comparando com os resultados obtidos pelo modelo diferencial PTT (já implementado na plataforma FREEFLOW-2D) afim de avaliar se o modelo algébrico reproduz resultados satisfatórios. A aplicação do modelo algébrico PTT em escoamentos com superfície livre é realizada através da simulação do impacto de uma gota viscoelástica numa placa rígida.

Nas simulações, a integração temporal da equação de quantidade de movimento foi feita empregando o método de Euler implícito, enquanto na equação de evolução para o  $I_T$  foi empregado o método de Euler explícito. Os termos convectivos foram aproximados pelo método ‘upwind’ de alta ordem CUBISTA e as derivadas espaciais por diferenças centrais (ver Seção 2.2). Os sistemas lineares para o cálculo da velocidade intermediária e do potencial auxiliar  $\psi$  são resolvidos pelo método BiCGstab-SOR (detalhes sobre esse método podem ser encontrados em [46]).

### 3.1 Escoamento totalmente desenvolvido em um canal

Nesta Seção serão apresentadas a obtenção da solução analítica considerando um escoamento totalmente desenvolvido em um canal e simulações numéricas nesse tipo de geometria, visando a verificação da metodologia numérica. Além disso, uma análise do esforço computacional do modelo algébrico em comparação com o modelo diferencial será apresentada em termos de tempo de processamento. Por fim é exposta uma análise numérica da estabilidade do modelo algébrico PTT.

#### 3.1.1 Solução analítica a partir do modelo algébrico PTT para escoamentos totalmente desenvolvidos em um canal

Foi visto na Seção 1.3 a obtenção do modelo algébrico a partir da equação constitutiva diferencial PTT. O sistema de equações para esse modelo algébrico juntamente com as equações de quantidade de movimento e da continuidade na forma adimensional e em coordenadas cartesianas bidimensionais são dadas por

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

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

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.3)$$

$$T^{xx} = \Gamma^{xx} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \quad (3.4)$$

$$T^{xx} = \Gamma^{xy} \quad (3.5)$$

$$T^{yy} = \Gamma^{yy} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \quad (3.6)$$

$$\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \{ \mathbf{GS} \}, \quad (3.7)$$

onde  $\Gamma^{xx}$ ,  $\Gamma^{xy}$  e  $\Gamma^{yy}$  são dados pelas equações (1.87)-(1.89) e  $\{ \mathbf{GS} \}$  é dada pela equação (1.85).

Considere um escoamento totalmente desenvolvido em um canal paralelo ao eixo  $x$  e de altura  $L$ . Assume-se que as velocidades, o tensor extra-tensão e o gradiente da pressão não variam ao longo do canal, isto é, essas propriedades são independentes da coordenada  $x$ . Desta maneira,

$$\frac{\partial u}{\partial x} \equiv \frac{\partial(uv)}{\partial x} \equiv \frac{\partial T^{xx}}{\partial x} \equiv \frac{\partial(uI_{\mathbf{T}})}{\partial x} \equiv \frac{\partial v}{\partial x} \equiv 0. \quad (3.8)$$

A equação da continuidade juntamente com a condição de não-escorregamento na parede implica imediatamente em

$$\frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow v = 0. \quad (3.9)$$

Além disso, desconsiderando a ação da gravidade, as equações (3.1)-(3.7) se reduzem em

$$0 = -\Delta p_x + \frac{\beta}{Re} \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \quad (3.10)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \quad (3.11)$$

$$T^{xx} = \Gamma^{xx} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \quad (3.12)$$

$$T^{xy} = \Gamma^{xy} \quad (3.13)$$

$$T^{yy} = \Gamma^{yy} + \frac{I_{\mathbf{T}}}{3} \quad (3.14)$$

$$0 = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \{\mathbf{GS}\}. \quad (3.15)$$

onde a constante  $\Delta p_x = \frac{\partial p}{\partial x}$ .

Para este modelo algébrico,  $\Gamma^{xx}$ ,  $\Gamma^{xy}$ ,  $\Gamma^{yy}$  e  $\{\mathbf{GS}\}$  com as simplificações mencionadas acima, reduzem-se a

$$\Gamma^{xx} = \frac{2}{3} I_{\mathbf{T}} \quad (3.16)$$

$$\Gamma^{xy} = \left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.17)$$

$$\Gamma^{yy} = -\frac{1}{3} I_{\mathbf{T}} \quad (3.18)$$

$$\{\mathbf{GS}\} = \frac{du}{dy} \left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \right]^2. \quad (3.19)$$

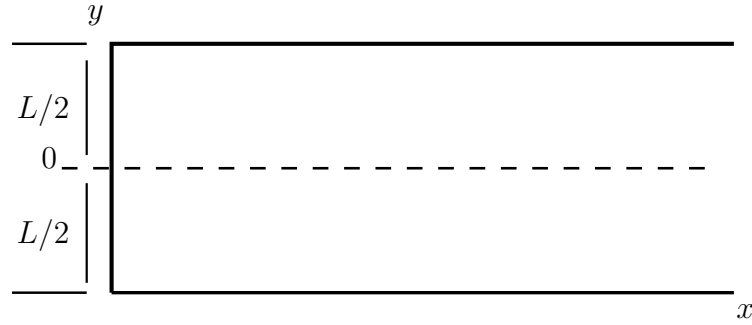


Figura 3.1: Ilustração da largura no canal, onde a solução analítica depende da coordenada  $y$ .

Substituindo a equação (3.19) na equação (3.15), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} &= 2 \frac{du}{dy} \left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow I_{\mathbf{T}} &= 2 \frac{W_i}{f(I_{\mathbf{T}})} \frac{du}{dy} \left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow \frac{I_{\mathbf{T}}}{\left[ \frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}}}{2} \right]^{\frac{1}{2}}} &= 2 \frac{W_i}{f(I_{\mathbf{T}})} \frac{du}{dy} \\ \Rightarrow \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}^2}{\frac{(1-\beta) I_{\mathbf{T}}}{W_i Re} \frac{I_{\mathbf{T}}}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} &= 2 \frac{W_i}{f(I_{\mathbf{T}})} \frac{du}{dy} \\ \Rightarrow \left[ \frac{I_{\mathbf{T}}}{\frac{(1-\beta)}{2W_i Re}} \right]^{\frac{1}{2}} &= 2 \frac{W_i}{f(I_{\mathbf{T}})} \frac{du}{dy} \\ \Rightarrow I_{\mathbf{T}} &= 2 \frac{W_i (1-\beta)}{f(I_{\mathbf{T}})^2 Re} \left( \frac{du}{dy} \right)^2. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Agora, substituindo a equação (3.20) na equação (3.17), obtém-se

$$\begin{aligned}\Gamma^{xy} &= \left[ \frac{(1-\beta) 2W_i(1-\beta)}{W_i Re \ 2f(I_{\mathbf{T}})^2 Re} \left( \frac{du}{dy} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{(1-\beta) du}{2f(I_{\mathbf{T}}) Re dy}\end{aligned}\quad (3.21)$$

Substituindo as equações (3.16), (3.18) e (3.21) nas respectivas equações (3.12), (3.14) e (3.13), o sistema a ser resolvido se reduz à

$$0 = -\Delta p_x + \frac{\beta}{Re} \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} \quad (3.22)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \quad (3.23)$$

$$T^{xx} = I_{\mathbf{T}} = 2 \frac{W_i(1-\beta)}{f(I_{\mathbf{T}})^2 Re} \left( \frac{du}{dy} \right)^2 \quad (3.24)$$

$$T^{xy} = \frac{(1-\beta) du}{2f(I_{\mathbf{T}}) Re dy} \quad (3.25)$$

$$T^{yy} = 0 \quad (3.26)$$

O canal é centrado no eixo  $y = 0$  (figura 3.1). Assume-se a condição de não-escorregamento na fronteira, isto é,  $u(-\frac{L}{2}) = u(\frac{L}{2}) = 0$  e velocidade máxima no eixo de simetria,

$$\frac{du}{dy}(0) = 0. \quad (3.27)$$

Para resolver o sistema de equações (3.22)-(3.26) primeiramente integra-se a equação (3.22) no intervalo  $[0, y]$ , obtendo

$$0 = -\Delta p_x(y-0) + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{du(y)}{dy} - \frac{du(0)}{dy} \right) + T^{xy}(y) - T^{xy}(0), \quad (3.28)$$

pelas equações (3.27) e (3.25) a componente  $T^{xy}(0) = 0$ . Assim, a equação (3.28) é dada por

$$0 = -\Delta p_x y + \frac{\beta}{Re} \frac{du}{dy} + T^{xy} \quad (3.29)$$

A componente  $T^{xx}$  é obtida primeiramente escrevendo-a em função da componente  $T^{xy}$ , isto é,

$$\begin{aligned}T^{xx} &= 2 \frac{W_i(1-\beta)}{f(I_{\mathbf{T}})^2 Re} \left( \frac{du}{dy} \right)^2 \\ &= 2 \frac{W_i}{f(I_{\mathbf{T}})} \left( \frac{(1-\beta) du}{f(I_{\mathbf{T}}) Re dy} \right) \frac{du}{dy} \\ &= 2 \frac{W_i}{f(I_{\mathbf{T}})} T^{xy} \frac{du}{dy}.\end{aligned}\quad (3.30)$$

Dividindo (3.30) por (3.25),

$$\frac{T^{xx}}{T^{xy}} = 2 \frac{W_i Re}{(1-\beta)} T^{xy}$$

obtém-se a solução analítica da componente  $T^{xx}$  dada por

$$T^{xx} = 2 \frac{W_i Re}{(1 - \beta)} (T^{xy})^2. \quad (3.31)$$

Conseqüentemente, por (3.24) o traço do tensor extra-tensão

$$I_{\mathbf{T}} = T^{xx} = 2 \frac{W_i Re}{(1 - \beta)} (T^{xy})^2. \quad (3.32)$$

A solução analítica de  $T^{xy}$  pode ser obtida substituindo as equações (3.29) e (1.28) na equação (3.25). Assim,

$$\left(1 + \epsilon \frac{Re W_i}{(1 - \beta)} I_{\mathbf{T}}\right) T^{xy} = \frac{(1 - \beta)}{Re} \left(\frac{Re}{\beta} \Delta p_{xy} - \frac{Re}{\beta} T^{xy}\right), \quad (3.33)$$

agora substitui-se a equação (3.43) na equação (3.58), obtendo

$$\left(1 + 2\epsilon \frac{(Re W_i)^2}{(1 - \beta)^2} (T^{xy})^2\right) T^{xy} - \frac{(1 - \beta)}{\beta} (\Delta p_{xy} - T^{xy}) = 0. \quad (3.34)$$

Reorganizando os termos da equação (3.34), pode-se chegar em uma forma padrão para a equação cúbica,

$$\begin{aligned} \left(1 + 2\epsilon \frac{(Re W_i)^2}{(1 - \beta)^2} (T^{xy})^2\right) T^{xy} - \frac{(1 - \beta)}{\beta} (\Delta p_{xy} - T^{xy}) &= 0. \\ 2\epsilon \frac{(Re W_i)^2}{(1 - \beta)^2} (T^{xy})^3 + T^{xy} \left(1 + \frac{(1 - \beta)}{\beta}\right) - \frac{(1 - \beta)}{\beta} \Delta p_{xy} &= 0 \\ (T^{xy})^3 + T^{xy} \frac{(1 - \beta)^2}{2\beta\epsilon(Re W_i)^2} - \frac{(1 - \beta)^3}{2\beta\epsilon(Re W_i)^2} \Delta p_{xy} &= 0 \\ (T^{xy})^3 + a_1 (T^{xy})^2 + a_2 T^{xy} + a_3 &= 0, \end{aligned} \quad (3.35)$$

onde  $a_1 = 0$ ,  $a_2 = 3A$  e  $a_3 = -2B$  com

$$A = \frac{(1 - \beta)^2}{6\beta\epsilon(Re W_i)^2} \quad \text{e} \quad B = \left(\frac{(1 - \beta)^3}{4\beta\epsilon(Re W_i)^2} \Delta p_x\right) y = Cy \quad (3.36)$$

A solução real da equação cúbica (3.35) é dada por

$$T^{xy} = \sqrt[3]{C + \sqrt{B^3 + A^2}} + \sqrt[3]{C - \sqrt{B^3 + A^2}}. \quad (3.37)$$

Por fim, para obter a solução analítica da velocidade  $u(y)$  substitui-se a equação (3.37) na equação (3.29), obtendo

$$\frac{du}{dy} = \frac{Re}{\beta} \Delta p_{xy} - \frac{Re}{\beta} \left(\sqrt[3]{C + \sqrt{B^3 + A^2}} + \sqrt[3]{C - \sqrt{B^3 + A^2}}\right) \quad (3.38)$$

e integrando a equação (3.38) com relação a coordenada  $y$  no intervalo  $[0, \frac{L}{2}]$  considerando a condição de não-escorregamento na parede ( $u(L/2) = 0$ ), a velocidade  $u(y)$  é dada por

$$\begin{aligned} u(y) &= -\frac{Re \Delta p_x}{8\beta} (1 - 4y^2) + \frac{3\epsilon}{2\Delta p_x Re W_i^2 (1 - \beta)^3} \left[ \left(\sqrt[3]{C - \sqrt{D^3 + C^2}}\right) \right. \\ &\quad \left. \left(3C + \sqrt{D^3 + C^2}\right) + \left(\sqrt[3]{2Cy + \sqrt{D^3 + (2Cy)^2}}\right) \left(-3(2Cy) + \sqrt{D^3 + (2Cy)^2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\sqrt[3]{C + \sqrt{D^3 + C^2}}\right) \left(-3C + \sqrt{D^3 + C^2}\right) - \left(\sqrt[3]{2Cy - \sqrt{D^3 + (2Cy)^2}}\right) \right. \\ &\quad \left. \left(3(2Cy) + \sqrt{D^3 + (2Cy)^2}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde  $A$  e  $C$  são dados por (3.36) e

$$D = \frac{(1 - \beta)^3}{6\epsilon\beta}. \quad (3.40)$$

A integração do segundo termo do lado direito da equação (3.38) pode ser resolvida utilizando o software Mathematica.

Portanto, a solução do sistema dado pelas equações (4.4) - (4.7) quando considera-se um canal paralelo ao eixo  $x$  é dada por

$$\begin{aligned} u(y) = & -\frac{Re\Delta p_x}{8\beta} (1 - 4y^2) + \frac{3\epsilon}{2\Delta p_x Re W_i^2 (1 - \beta)^3} \left[ \left( \sqrt[3]{C - \sqrt{D^3 + C^2}} \right) \right. \\ & \left( 3C + \sqrt{D^3 + C^2} \right) + \left( \sqrt[3]{2Cy + \sqrt{D^3 + (2Cy)^2}} \right) \left( -3(2Cy) + \sqrt{D^3 + (2Cy)^2} \right) \\ & - \left( \sqrt[3]{C + \sqrt{D^3 + C^2}} \right) \left( -3C + \sqrt{D^3 + C^2} \right) - \left( \sqrt[3]{2Cy - \sqrt{D^3 + (2Cy)^2}} \right) \\ & \left. \left( 3(2Cy) + \sqrt{D^3 + (2Cy)^2} \right) \right], \quad (3.41) \end{aligned}$$

$$v(y) = 0, \quad (3.42)$$

$$T^{xx}(y) = 2 \frac{W_i Re}{(1 - \beta)} (T^{xy})^2, \quad (3.43)$$

$$T^{xy}(y) = \sqrt[3]{C + \sqrt{B^3 + A^2}} + \sqrt[3]{C - \sqrt{B^3 + A^2}}, \quad (3.44)$$

$$T^{yy}(y) = 0, \quad (3.45)$$

$$I_{\mathbf{T}}(y) = T^{xx}(y). \quad (3.46)$$

A solução analítica para as componentes da velocidade e do tensor extra-tensão também podem ser encontrados no trabalho feito por Cruz et al. ([11] e [12]), onde essa solução é obtida a partir do modelo diferencial PTT. O modelo algébrico e o modelo diferencial fornecem um sistema de equações cujas soluções analíticas são coincidentes para escoamentos totalmente desenvolvidos em um canal.

### 3.1.2 Verificação da metodologia numérica

Na simulação de um escoamento viscoelástico entre placas paralelas ao eixo  $x$ , serão utilizados os seguintes dados de entrada:

- Distância entre as placas:  $L = 1m$ .
- Comprimento das placas:  $10L$ .
- viscosidade cinemática:  $100.0m^2s^{-1}$ .
- Número de Reynolds e Weissenberg:  $Re = 10^{-2}$  e  $W_i = 0.2$ .
- Parâmetro:  $\epsilon = 0.5$ .
- Constante adimensional:  $\beta = 0.6$ .
- Velocidade média do escoamento:  $U = 1.0ms^{-1}$

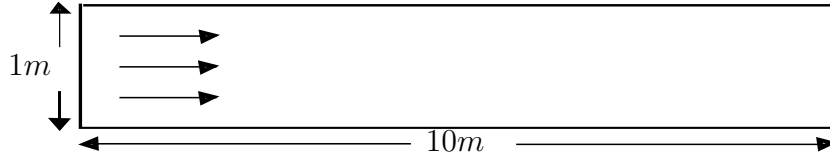


Figura 3.2: Ilustração do canal paralelo ao eixo  $x$ .

No injetor do canal paralelo ao eixo  $y$  serão impostas as soluções analíticas da velocidade e do traço do tensor extra-tensão (ver SubSeção 3.1.1). Em contornos rígidos foram aplicadas a condição de não-escorregamento (*no-slip*) e de impermeabilidade para o vetor velocidade. O traço do tensor extra-tensão  $I_{\mathbf{T}}$  é calculado a partir da equação (1.112) considerando a posição do contorno rígido (ver SubSeção 1.4.2). Na saída do canal, adotada-se a condição homogênea de Neumann para a velocidade  $\mathbf{u}$  e o traço  $I_{\mathbf{T}}$ .

A simulação em um canal totalmente cheio de fluido é feita até que o escoamento atinja o estado estacionário, em seguida faz-se um corte transversal no meio do canal ( $x = 5L$ ) e compara-se a solução numérica com a solução analítica. As Figuras 3.3(a) - 3.3(c) descrevem os perfis das componentes  $T^{xy}$ ,  $T^{xx}$  e velocidade  $u$ .

A convergência do método numérico é analisada a partir do cálculo dos erros relativos entre a solução numérica e a solução analítica. O erro relativo foi calculado na norma da soma  $L_1$ , definida por

$$\|E_h\|_1 = \frac{\sum |SolEx - SolNum|}{\sum |SolEx|}, \quad (3.47)$$

onde  $h$  representa o tamanho da malha espacial, que neste trabalho é dada por  $h = \delta x = \delta y$ .

Uma estimativa para o erro  $\|E_h\|_1$ , nas aproximações numéricas é dada da seguinte maneira (veja Tomas [23])

$$\|E_h\|_1 \approx Ch^O, \quad (3.48)$$

em que  $C$  representa uma constante dependente dos dados do problema e  $O$  é uma estimativa para ordem de convergência.

Para o cálculo da ordem  $O$ , estima-se o erro relativo  $\left\|E_{\frac{h}{2}}\right\|_1$

$$\left\|E_{\frac{h}{2}}\right\|_1 \approx C \left(\frac{h}{2}\right)^O, \quad (3.49)$$

em seguida, divide-se a equação (3.48) por (3.49) obtendo-se

$$\frac{\|E_h\|_1}{\left\|E_{\frac{h}{2}}\right\|_1} \approx \frac{Ch^O}{C \left(\frac{h}{2}\right)^O} = 2^O \quad (3.50)$$

e aplica-se o  $\log$  em ambos os membros da equação (3.50). Assim, a ordem de convergência da solução numérica pode ser calculada pela expressão

$$O \approx \frac{\log\left(\frac{E_h}{E_{\frac{h}{2}}}\right)}{\log(2)}. \quad (3.51)$$

A verificação da metodologia numérica será realizada utilizando as seguintes malhas computacionais:

- M10:  $10 \times 100$  células ( $\delta x = \delta y = 0.1$ ).

- M20:  $20 \times 200$  células ( $\delta x = \delta y = 0.05$ ).
- M40:  $40 \times 400$  células ( $\delta x = \delta y = 0.025$ ).
- M80:  $80 \times 800$  células ( $\delta x = \delta y = 0.0125$ ).

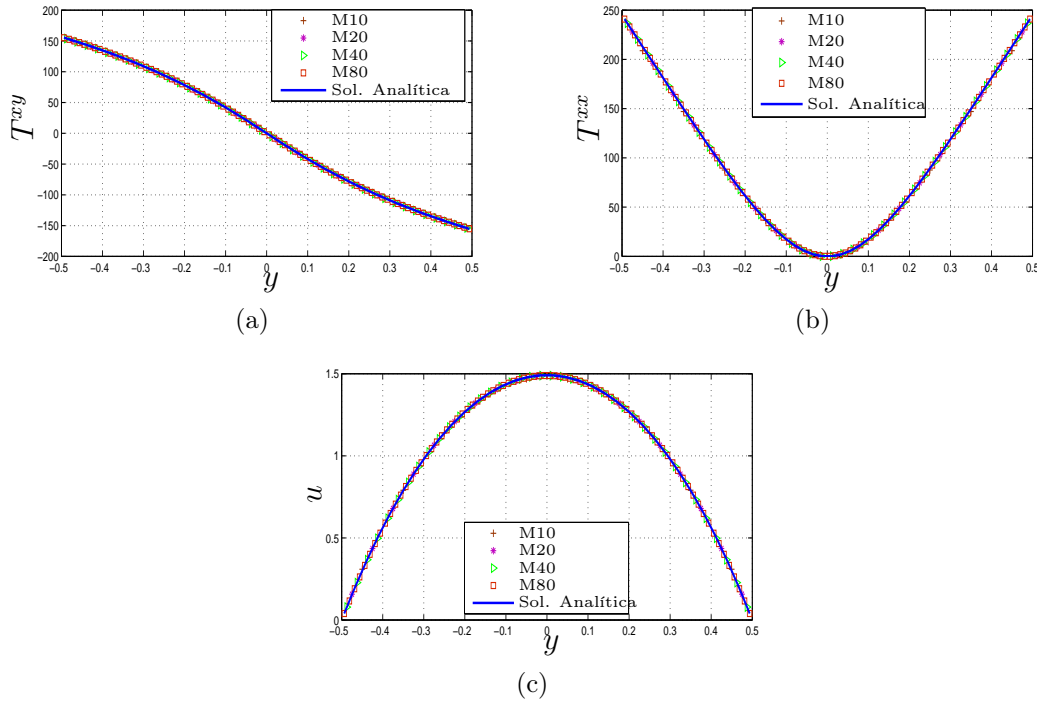


Figura 3.3: Comparação da solução numérica com a solução analítica das componentes  $T^{xy}$  (a),  $T^{xx}$  (b) e velocidade  $u$  (c), em  $x = 5L$  e  $t = 50s$  com os parâmetros adimensionais  $Re = 10^{-2}$  e  $W_i = 0.2$ ,  $\beta = 0.6$  e  $\epsilon = 0.5$ .

Afim de investigar se há a convergência da solução numérica com o refinamento da malha espacial das simulações que utilizam o modelo algébrico, serão expostos os erros relativos na Tabela 3.1.2 e o comportamento assintótico dos mesmos nas Figuras 3.4(a) - 3.4(c). Também serão realizadas comparações dos erros relativos e da ordem de convergência obtidas das simulações que utilizam os modelos algébrico e diferencial. O objetivo é verificar se as soluções numéricas dadas por ambos os modelos apresentam comportamentos análogos ou se distinguem.

O comportamento assintótico do erro de discretização depende do tamanho da malha espacial e da ordem de convergência. Conhecendo a ordem do método de discretização e as malhas espaciais é possível saber qual o comportamento desses erros, como será visto a seguir (mais detalhes sobre o comportamento assintótico dos erros e teste de convergência podem ser encontrados em [2]).

Dessa maneira, para conhecer o comportamento que os erros devem assumir numa discretização espacial de segunda ordem, divide-se a equação (3.49) pela equação (3.48), obtendo

$$\frac{\|E_{\frac{h}{2}}\|_1}{\|E_h\|_1} \approx \frac{C \left(\frac{h}{2}\right)^2}{Ch^2} = \frac{1}{4}. \quad (3.52)$$

Assim, a redução à metade do tamanho da malha espacial reduz  $\frac{1}{4}$  do erro. As Figuras 3.4(a) - 3.4(c) comparam a reta do comportamento assintótico obtidas dos erros relativos

derivados dos modelos algébrico e diferencial com a reta de segunda ordem de convergência obtida da equação (3.52) em escala logarítmica.

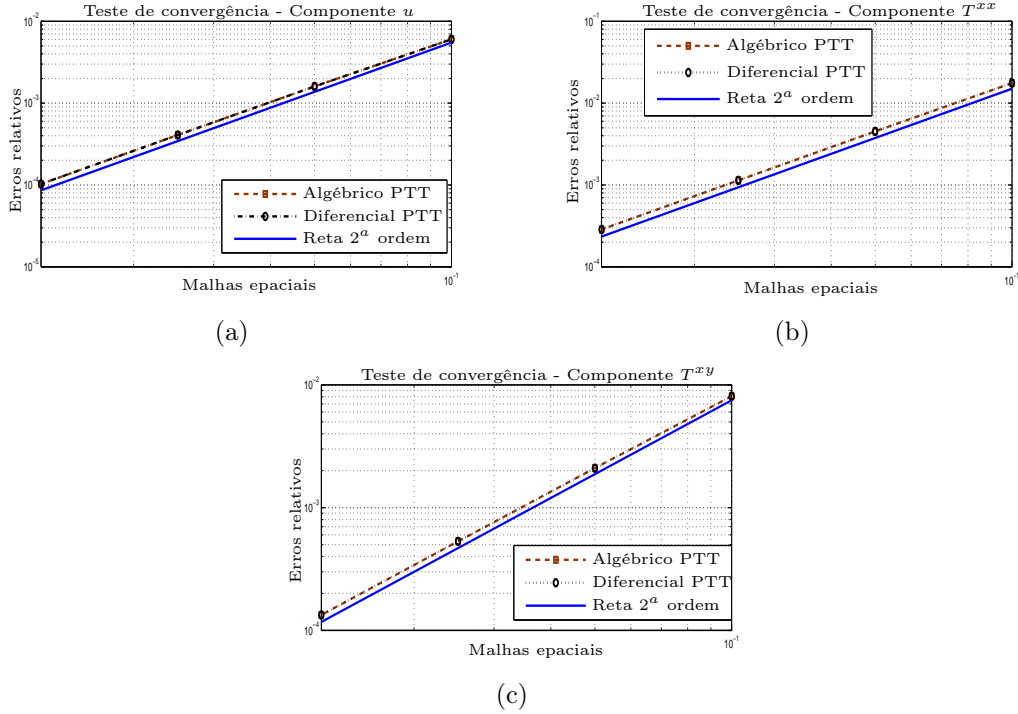


Figura 3.4: Teste de convergência das malhas espaciais das componente  $u$ ,  $T^{xx}$  e  $T^{xy}$ .

Tabela 3.1: Erros relativos obtidos da solução numérica dada pelo modelo algébrico comparados com o erros relativos obtidos da solução numérica dada pelo modelo diferencial.

Erro Relativo	M10		M20	
	Algébrico PTT	Diferencial PTT	Algébrico PTT	Diferencial PTT
$E(u)$	$6.027530 \times 10^{-3}$	$6.027530 \times 10^{-3}$	$1.597944 \times 10^{-3}$	$1.597939 \times 10^{-3}$
$E(T^{xx})$	$1.758150 \times 10^{-2}$	$1.758150 \times 10^{-2}$	$4.516545 \times 10^{-3}$	$4.516409 \times 10^{-3}$
$E(T^{xy})$	$8.091567 \times 10^{-3}$	$8.093974 \times 10^{-3}$	$2.098316 \times 10^{-3}$	$2.097720 \times 10^{-3}$
Erro Relativo	M40		M80	
	Algébrico PTT	Diferencial PTT	Algébrico PTT	Diferencial PTT
$E(u)$	$4.078612 \times 10^{-4}$	$4.078589 \times 10^{-4}$	$1.027640 \times 10^{-4}$	$1.029056 \times 10^{-4}$
$E(T^{xx})$	$1.139792 \times 10^{-3}$	$1.139735 \times 10^{-3}$	$2.859680 \times 10^{-4}$	$2.859642 \times 10^{-4}$
$E(T^{xy})$	$5.315781 \times 10^{-4}$	$5.311771 \times 10^{-4}$	$1.335565 \times 10^{-4}$	$1.335586 \times 10^{-4}$

Os resultados de verificação da metodologia numérica com a viscoelasticidade representada pelo modelo algébrico, indicam que há uma convergência da solução numérica com o refinamento da malha espacial. Além disso, nota-se que essa convergência ocorre de maneira análoga às simulações numéricas onde a viscoelasticidade é representada pelo modelo diferencial como pode ser visto na Tabela 3.1, em que a maior diferença entre erros relativos calculada pela expressão  $(E(u)_{Alg} + E(T^{xx})_{Alg} + E(T^{xy})_{Alg}) - (E(u)_{Dif} + E(T^{xx})_{Dif} + E(T^{xy})_{Dif})$  é  $2.407 \times 10^{-6}$  na malha M10 e a menor diferença é  $1.399 \times 10^{-7}$  na malha M80. Observa-se também, que a ordem de convergência espacial tanto do modelo algébrico quanto do modelo diferencial tende a dois com o refinamento da malha espacial, como pode ser visto na Tabela 3.2 e nas Figuras 3.4(a) - 3.4(c). Com

Tabela 3.2: Ordem de convergência espacial obtida a partir do modelo algébrico PTT comparada com a convergência espacial obtida a partir do modelo diferencial PTT.

Variáveis	$O = \log \left( \frac{E_{M10}}{E_{M20}} \right) / \log(2)$		$O = \log \left( \frac{E_{M20}}{E_{M40}} \right) / \log(2)$	
	Algébrico PTT	Diferencial PTT	Algébrico PTT	Diferencial PTT
$u(y)$	1.9153	1.9153	1.9700	1.9692
$T^{xx}$	1.9607	1.9608	1.9865	1.9873
$T^{xy}$	1.9471	1.9480	1.9808	1.9815

Variáveis	$O = \log \left( \frac{E_{M40}}{E_{M80}} \right) / \log(2)$	
	Algébrico PTT	Diferencial PTT
$u(y)$	1.9887	1.9867
$T^{xx}$	1.9948	1.9947
$T^{xy}$	1.9928	1.9917

ilustração os comportamentos assintóticos dos erros relativos das soluções numéricas dadas pelos modelos algébrico e diferencial (veja Figuras 3.4(a) - 3.4(c)), nota-se que o comportamento das retas obtidas das simulações dadas por ambos modelos apresentam comportamentos análogos.

### 3.1.3 Esforço computacional

Esta Seção apresenta o esforço computacional das simulações numéricas no escoamento totalmente desenvolvido em um canal dadas pelo modelo algébrico e pelo modelo diferencial. O objetivo é comparar o Tempo de CPU das simulações que utilizam ambos os modelos, essas comparações serão realizadas até  $t = 50s$  variando os parâmetros adimensionais  $\beta$ ,  $W_i$  e  $\epsilon$  em cinco malhas espaciais:

- M10:  $10 \times 100$  células ( $\delta x = \delta y = 0.1$ ).
- M20:  $20 \times 200$  células ( $\delta x = \delta y = 0.05$ ).
- M40:  $40 \times 400$  células ( $\delta x = \delta y = 0.025$ ).
- M60:  $60 \times 600$  células ( $\delta x = \delta y = 1/60$ ).
- M80:  $80 \times 800$  células ( $\delta x = \delta y = 0.0125$ ).

Pelo fato da derivada temporal da equação de quantidade de movimento ser aproximada por Euler Implícito (veja SubSeção 2.1.4), em todas as simulações o passo temporal  $\delta t$  foi adotado respeitando somente a restrição relacionada aos termos não-lineares da equação de quantidade de movimento. Essa restrição deve satisfazer a seguinte expressão:

$$\delta t \leq \min \{ \delta t_{CFL_x}, \delta t_{CFL_y} \}, \quad (3.53)$$

em que

$$\delta t_{CFL_x} = \frac{\delta x}{u_{max}} \quad e \quad \delta t_{CFL_y} = \frac{\delta y}{v_{max}}. \quad (3.54)$$

Os termos  $u_{max}$  e  $v_{max}$  representam os valores máximos das componentes de velocidade  $u$  e  $v$ , respectivamente. A restrição dada pela equação (3.53) é conhecida como condição de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

Assim, considerando um escoamento totalmente desenvolvido em um canal e assumindo que o valor máximo da componente de velocidade é  $u_{max} = 1.5$ , o passo temporal  $\delta t$  nas cinco malhas serão adotados respeitando a seguintes condições:

$$\delta t_{M10} \leq 6.6 \times 10^{-2}, \quad \delta t_{M20} \leq 3.3 \times 10^{-2}, \quad \delta t_{M40} \leq 1.6 \times 10^{-2}, \quad \delta t_{M60} \leq 1.1 \times 10^{-2}, \\ \delta t_{M80} \leq 8 \times 10^{-3}.$$

em que  $\delta t_{M10}$ ,  $\delta t_{M20}$ ,  $\delta t_{M40}$ ,  $\delta t_{M60}$  e  $\delta t_{M80}$  representam o passo temporal nas malhas M10, M20, M40, M60 e M80, respectivamente. Dessa maneira, o passo temporal a ser fixado nas cinco malhas espaciais serão os seguintes:

- Malha M10: Passo temporal  $\delta t = 1 \times 10^{-2}$ .
- Malha M20: Passo temporal  $\delta t = 5 \times 10^{-3}$ .
- Malha M40: Passo temporal  $\delta t = 2.5 \times 10^{-3}$ .
- Malha M60: Passo temporal  $\delta t = 1 \times 10^{-3}$ .
- Malha M80: Passo temporal  $\delta t = 5 \times 10^{-4}$ .

A diferença do esforço computacional derivados das simulações que utilizam os modelos algébrico e diferencial é calculada pela equação

$$D_T = \frac{(T_A - T_D)}{T_A} \times 100, \quad (3.55)$$

em que  $T_D$  e  $T_A$  são os esforços computacionais das simulações dadas pelos modelos diferencial e algébrico, respectivamente. A partir da equação (3.55) pode-se obter a diferença do esforço computacional em porcentagem, então:

- Se  $D_T > 0$ , então a simulação dada pelo modelo algébrico apresenta um esforço computacional maior.
- Se  $D_T < 0$ , então a simulação dada pelo modelo diferencial apresenta um esforço computacional maior.
- Se  $D_T = 0$ , então as simulações dadas por ambos os modelos apresentam o mesmo esforço computacional.

### 3.1.3.1 Variando a constante $\beta$

Nessas simulações varia-se a constante adimensional  $\beta$  e fixa-se as constantes adimensionais

$$Re = 10^{-2}, \quad W_i = 0.2, \quad \epsilon = 0.5.$$

Na Tabela 3.3 estão expostas as comparações do esforço computacional com a variação da constante  $\beta$ .

Tabela 3.3: Comparação do esforço computacional variando a constante  $\beta$ .

$\beta$	$D_T$				
	M10	M20	M40	M60	M80
0.9	0%	-11%	-10%	***	***
0.8	0%	-6%	-10%	***	***
0.7	0%	-2%	-12%	-36%	***
0.6	0%	1%	-7%	-34%	***
0.5	13%	—	—	—	—

**Observação 3.1** O símbolo — indica que as simulações dadas pelo modelo algébrico não apresentaram uma solução numérica convergente com o passo temporal  $\delta t$  adotado, no entanto as soluções obtidas pelo modelo diferencial convergiram. Por outro lado, o símbolo \*\*\* indica que as simulações dadas pelo modelo diferencial não apresentaram uma solução numérica convergente com o passo temporal adotado, diferente das simulações dadas pelo modelo algébrico. Nos lugares em que não estão preenchidos indica-se que as soluções numéricas dadas por ambos os modelos não convergem.

Inicialmente, esta Seção tinha como objetivo principal a comparação do esforço computacional, entretanto diante de alguns resultados expostos na Tabela 3.3, verifica-se que os modelos algébrico e diferencial apresentam restrições com a variação do parâmetro  $\beta$  e das malhas espaciais relacionadas ao passo temporal.

Conforme a Tabela 3.3, na malha M10 nota-se que o esforço computacional das simulações dadas pelos modelos algébrico e diferencial não apresentam diferenças de  $\beta = 0.9$  a  $\beta = 0.6$ . Entretanto com a diminuição do solvente newtoniano, isto é, com a diminuição do parâmetro  $\beta$  especificamente com  $\beta < 0.5$  o tempo de CPU dado pelo modelo algébrico é maior e a partir da malha M20 não é possível realizar comparação do tempo de CPU, pois a solução numérica dada pelo modelo algébrico não converge com o  $\delta t$  escolhido, indicando que tal modelo apresenta uma restrição relacionada ao  $\delta t$  mais acentuada que o modelo diferencial quando há a diminuição do parâmetro  $\beta$ .

Nas malhas M20 e M40 observa-se que o esforço computacional das simulações dadas pelo modelo diferencial é maior. Entretanto, a questão da estabilidade é novamente evidenciada nos casos em que  $\beta \leq 0.5$ .

Considerando as malhas M60 e M80, nota-se que o modelo algébrico é capaz de simular escoamentos com até 40% de polímero e apresenta vantagens com relação ao esforço computacional. Além disso, nas simulações em que  $\beta = 0.9$  e  $\beta = 0.8$  não é possível obter uma solução numérica convergente quando utiliza-se o modelo diferencial, isto é, a questão da estabilidade agora é evidenciada por este modelo e se acentua com o refinamento de malha espacial como pode ser visto na malha M80, onde em nenhum dos casos as soluções numéricas dadas pelo modelo diferencial apresentam uma solução numérica convergente.

### 3.1.3.2 Variando a constante $W_i$

Nos resultados das simulações a seguir, serão fixadas as seguintes constantes adimensionais:  $\beta = 0.6$ ,  $Re = 10^{-2}$ ,  $\epsilon = 0.5$ .

Tabela 3.4: Comparação do esforço computacional variando a constante  $W_i$ .

$W_i$	$D_T$				
	M10	M20	M40	M60	M80
0.1	0%	-0.8%	1%	-33%	****
0.2	0%	-1%	-7%	-34%	****
0.4	0%	-7%	-3%	-36%	****
0.8	0%	14%	19%	—	
1.0	0%	14%	13%	—	
2.0	5%	17%	6%	—	

Conforme a Tabela 3.4, na malha M10 o esforço computacional dos modelos diferencial e algébrico apresentam o mesmo tempo de CPU de  $W_i = 0.1$  a  $W_i = 1.0$  e para a constante  $W_i = 2.0$  a simulação dada pelo modelo algébrico apresenta um tempo de CPU um pouco maior. Nas malhas M20 e M40, as simulações dadas pelo modelo algébrico apresentam um tempo de CPU menor com as constantes  $W_i = 0.1$  à  $W_i = 0.4$  e a partir de  $W_i = 0.8$  ocorre uma inversão do tempo de processamento, isto é, nestes casos são as simulações dadas pelo modelo diferencial que apresentam menor tempo de CPU.

Novamente, em malhas mais finas o modelo algébrico apresenta vantagens com relação ao tempo de processamento, como pode ser visto nas malhas M60 e M80. Embora o modelo algébrico não tenha simulado o problema na malha M60 para  $W_i = 0.8$ , o modelo diferencial não conseguiu simular nenhum dos problemas propostos na malha M80, o que mostra uma restrição de estabilidade maior que o modelo algébrico (ver Tabela 3.4).

### 3.1.3.3 Variando a constante $\epsilon$

As simulações expostas a seguir utiliza os parâmetros:  $\beta = 0.6$ ,  $Re = 10^{-2}$ ,  $W_i = 0.2$ .

Tabela 3.5: Comparação do esforço computacional variando a constante  $\epsilon$ .

$\epsilon$	$D_T$				
	M10	M20	M40	M60	M80
0.8	8%	24%	24%	-36%	***
0.4	11%	28%	31%	-34%	***
0.2	13%	28%	—	—	
0.1	16%	28%	—	—	
0.05	25%	—	—	—	

De acordo com a Tabela 3.5, nota-se que o esforço computacional das simulações dadas pelos modelos algébrico e diferencial não apresentam diferenças significativas, nesses casos o modelo diferencial demonstra um tempo de processamento um pouco inferior. Na malha M40 observa-se que o modelo algébrico apresenta maior esforço computacional com a diminuição do parâmetro  $\epsilon$ . Entretanto quando adota-se uma melhor precisão espacial, ou seja, com o refinamento da malha espacial o modelo algébrico apresenta um esforço computacional menor.

Embora o modelo algébrico apresente dificuldades em simular escoamentos com menores valores de  $\epsilon$ , na malha M80 o modelo diferencial não é capaz de simular nenhum caso como pode ser visto na Tabela 3.5.

### 3.1.4 Estabilidade

Na SubSeção 3.1.3, o objetivo inicial era analisar apenas o tempo de processamento, entretanto boas informações de estabilidade puderam ser extraídas dessas simulações. Observou-se através das variações dos parâmetros adimensionais  $\beta$ ,  $W_i$  e  $\epsilon$ , que em alguns casos não foi possível comparar o esforço computacional, pois as simulações numéricas que utilizavam o modelo algébrico não apresentaram convergência, indicando que a região de estabilidade da equação de evolução para o traço

$$\frac{DI_{\mathbf{T}}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i} I_{\mathbf{T}} + 2 \{\Gamma \mathbf{S}\}$$

aproximada temporalmente por Euler explícito depende dos parâmetros adimensionais empregados.

Afim de propor um critério para o controle do tamanho do passo no tempo, será utilizado o tensor conformação  $\mathbf{A}$  o qual se relaciona linearmente com o tensor extra-tensão  $\mathbf{T}$ . Conforme os trabalhos [4] e [36], para um fluido PTT essa relação é dada por

$$\mathbf{A} = \frac{\text{Re}W_i}{1-\beta} \mathbf{T} + \mathbf{I}, \quad (3.56)$$

onde para escoamentos bidimensionais  $\mathbf{A}$  é escrito matricialmente como

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A^{xx} & A^{xy} & 0 \\ A^{xy} & A^{yy} & 0 \\ 0 & 0 & A^{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\text{Re}W_i}{1-\beta} T^{xx} + 1 & \frac{\text{Re}W_i}{1-\beta} T^{xy} & 0 \\ \frac{\text{Re}W_i}{1-\beta} T^{xy} & \frac{\text{Re}W_i}{1-\beta} T^{yy} + 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.57)$$

O tensor  $\mathbf{A}$  tem a propriedade de ser simétrico definido positivo ([27], [28]). Diante dessa propriedade, considere os resultados a seguir.

**Teorema 3.1** *Seja  $\mathbf{A}$  uma matriz simétrica  $n \times n$ . Então,  $\mathbf{A}$  é positiva definida se e somente se todos os seus autovalores são positivos.*

Uma consequência imediata do Teorema 3.1 que será utilizada nessa Seção é o seguinte corolário:

**Corolário 3.1** *Se  $\mathbf{A}_{n \times n}$  é uma matriz simétrica positiva definida, então  $\det(\mathbf{A}) > 0$ .*

Considere os seguintes casos da Seção anterior em que não foi possível obter a convergência do método numérico:

- Caso 1:  $Re = 10^{-2}$ ,  $W_i = 0.2$ ,  $\epsilon = 0.5$ ,  $\beta = 0.4$ ,  $\delta t = 0.01$  e  $\delta x = \delta y = 0.1$  (M10).
- Caso 2:  $Re = 10^{-2}$ ,  $W_i = 0.2$ ,  $\beta = 0.6$ ,  $\epsilon = 0.05$ ,  $\delta t = 0.005$  e  $\delta x = \delta y = 0.05$  (M20).

O menor determinante do tensor conformação  $\mathbf{A}$  ( $\det(\mathbf{A})$ ) e o menor valor de  $I_{\mathbf{T}}$  serão monitorados no interior do domínio de simulação

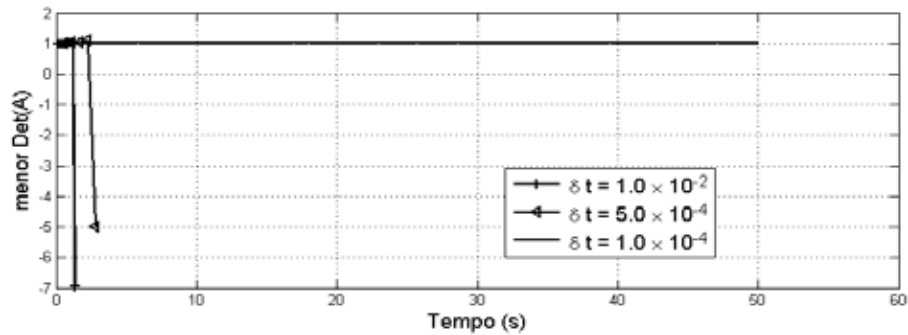
O menor valor de  $I_{\mathbf{T}}$  é monitorado, pois num escoamento totalmente desenvolvido em um canal se conhece o limite inferior desse valor, ou seja, de acordo com a solução analítica apresentada na SubSeção 3.1.1 vem

$$I_{\mathbf{T}}(y) = T^{xx}(y) = 2 \frac{W_i Re}{(1-\beta)} (T^{xy})^2. \quad (3.58)$$

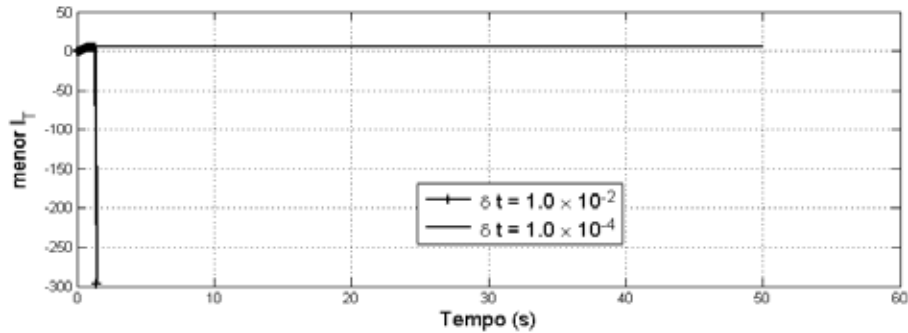
Assim,  $I_{\mathbf{T}}$  é sempre positivo e assume valor mínimo de zero na linha central de simetria de canal.

As Figuras 3.5(a) e 3.6(a) ilustram o menor determinante no interior do domínio de simulação com a variação do passo temporal nos Casos 1 e 2, respectivamente. Nesses casos, observou-se que para os  $\delta t$ 's considerados inicialmente, o método numérico não convergiu e não preservou a positividade do tensor  $\mathbf{A}$ . Entretanto, com a diminuição de  $\delta t$ , os determinantes do tensor conformação não apresentaram mais os valores negativos, ou seja, condição necessária de positividade do tensor  $\mathbf{A}$  passou a ser satisfeita e, além disso, as Figuras 3.7(a) - 3.8(c) ilustram uma concordância entre as soluções numéricas e analíticas, indicando que houve uma diminuição suficiente do passo temporal.

Na Figura 3.5(b) nota-se que, com a diminuição do passo temporal a condição necessária de positividade do traço de  $\mathbf{T}$  também passou a ser satisfeita, pois para o maior  $\delta t$  considerado o tensor apresentou traço negativo. Entretanto, na Figura 3.6(b) nota-se que o tensor  $\mathbf{T}$  apresenta traço positivo porém oscilante, o que indica que  $I_{\mathbf{T}}$  não convergiu para a solução estacionária do problema. Além disso, nesse caso, nota-se que o menor determinante de  $\mathbf{A}$  também tornou-se negativo (ver Figura 3.6(a)).

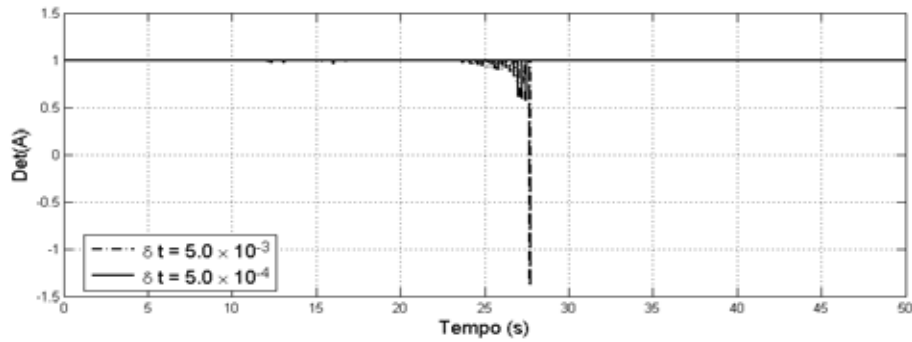


(a)

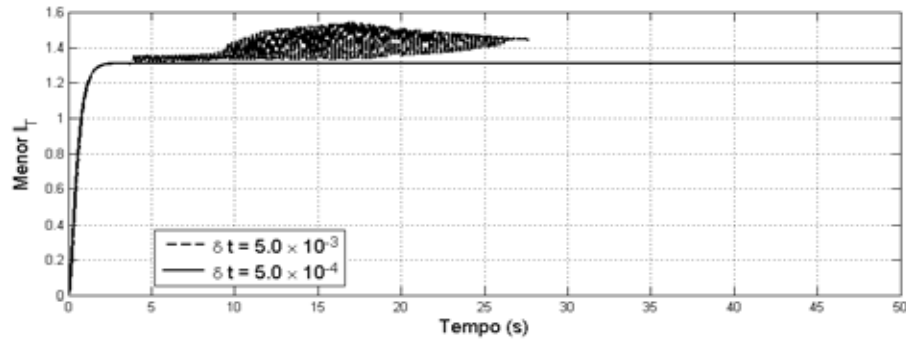


(b)

Figura 3.5: Menor determinante de  $\mathbf{A}$  e o menor  $I_{\mathbf{T}}$  no domínio de simulação variando o passo temporal  $\delta t$ , com os parâmetros adimensionais  $\beta = 0.4$ ,  $Re = 10^{-2}$ ,  $Wi = 0.2$  e  $\epsilon = 0.5$  (Caso 1).

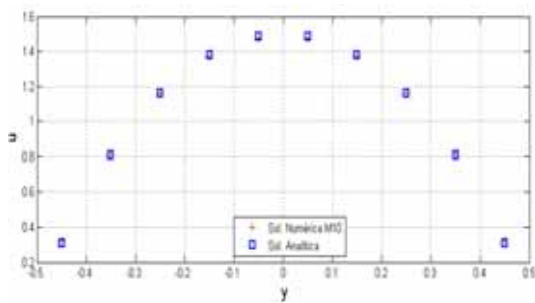


(a)

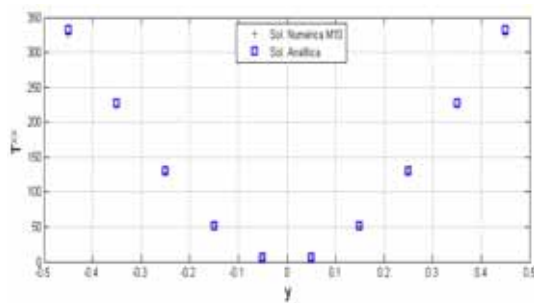


(b)

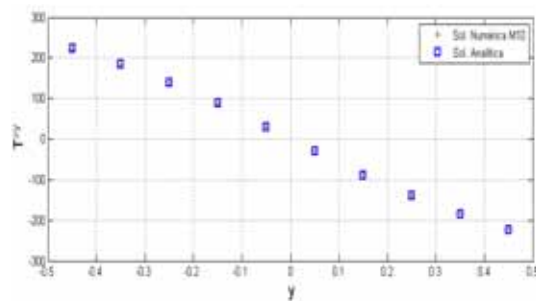
Figura 3.6: Menor determinante de  $\mathbf{A}$  e o menor valor de  $I_T$  no domínio de simulação variando o passo temporal  $\delta t$ , com os parâmetros adimensionais  $\beta = 0.6$ ,  $Re = 10^{-2}$ ,  $W_i = 0.2$  e  $\epsilon = 0.05$  (Caso 2).



(a)



(b)



(c)

Figura 3.7: Comparação da solução numérica com a solução analítica com os parâmetros adimensionais  $\beta = 0.4$ ,  $Re = 10^{-2}$ ,  $W_i = 0.2$  e  $\epsilon = 0.5$  (Caso 1), com  $\delta t = 1.0 \times 10^{-4}$  em  $t = 50s$ .

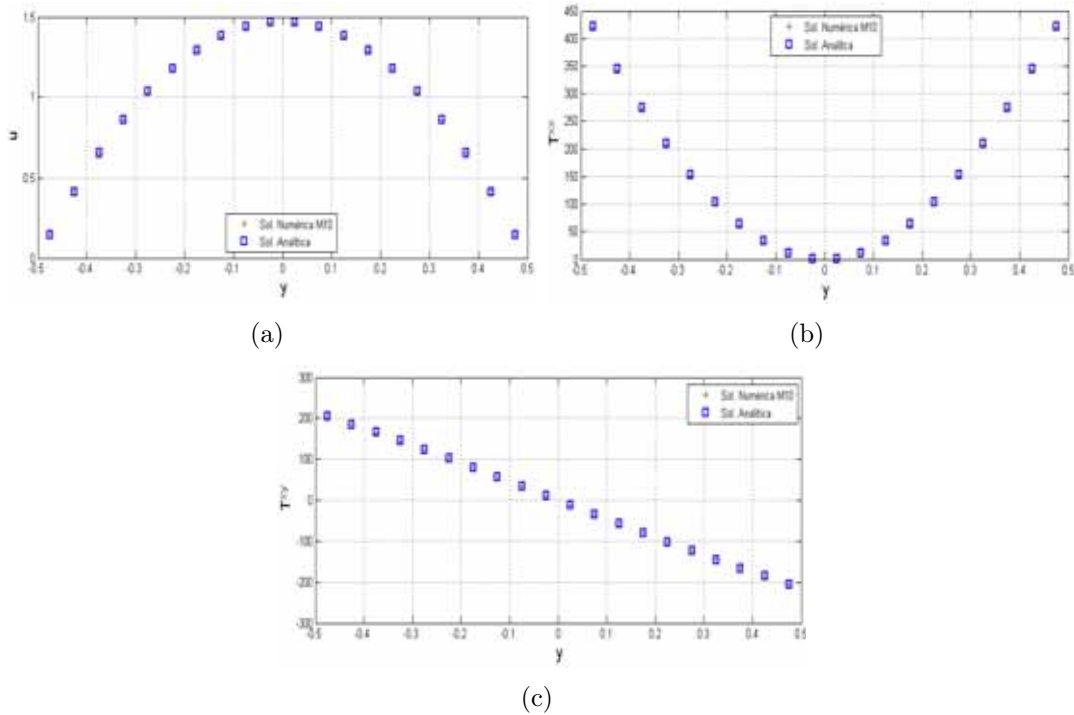


Figura 3.8: Comparação da solução numérica com a solução analítica com os parâmetros adimensionais  $\beta = 0.6$ ,  $Re = 10^{-2}$ ,  $W_i = 0.2$  e  $\epsilon = 0.05$  (Caso 2), com  $\delta t = 5.0 \times 10^{-4}$  em  $t = 50s$ .

Até onde sabemos, não há estudos que relacione a preservação da positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  com a região de estabilidade da equação constitutiva, ou seja, ser estável é equivalente a obter o tensor conformação positivo? Especificamente no sentido, será que é possível o tensor conformação ser positivo e o  $\delta t$  estar fora da região de estabilidade? Neste trabalho não responderemos essas questões, pois seria necessário um estudo minucioso desse assunto, o que foge o escopo do projeto inicial.

Diante das considerações expostas nesta Seção, para garantir pelo menos que o tensor conformação seja positivo podemos empregá-lo para determinar se o tamanho do passo no tempo deve ser diminuído usando o seguinte algoritmo para o controle do  $\delta t$ :

*Se  $\det(\mathbf{A}) < \mathbf{0}$  então  $\delta t = \alpha \times \delta t$ ;  $0 < \alpha < 1$ .*

Com esse algoritmo tem-se ao menos a garantia de preservação da positividade de  $\mathbf{A}$  e, em adição, ele fará com que  $\delta t$  esteja mais próximo ou até mesmo dentro da região de estabilidade.

## 3.2 Problema contração 4:1

Nesta Seção, serão apresentados resultados numéricos obtidos das simulações de um escoamento viscoelástico em uma contração 4:1. A viscoelasticidade dessas simulações foram representadas pelos modelos algébrico e diferencial PTT, comparando os resultados para estudar a capacidade do modelo algébrico em reproduzir os fenômenos previstos para este caso pelo modelo diferencial.

Para a contração considera-se a hipótese de não-escorregamento e de impermeabilidade para a velocidade na fronteira rígida. O traço do tensor extra-tensão  $I_{\mathbf{T}}$  é calculado a partir da equação (1.112) considerando a posição do contorno rígido (ver SubSeção 1.4.2). Na saída da geometria adota-se a condição homogênea de Neumann para a velocidade  $\mathbf{u}$  e o traço  $I_{\mathbf{T}}$ . No injetor impõe-se o perfil parabólico para a velocidade. A seguir será ilustrada a geometria da contração planar 4:1 no caso bidimensional. Quanto as medidas dessa

geometria, adota-se neste trabalho a largura de  $L = 0.5m$  para o ejetor ( $0.75 \leq y \leq 1.25$ ) e , então, a entrada passa a medir  $D_u = 2H_u = 4L = 2m$  ( $0.0 \leq y \leq 2.0$ ). Assim o eixo de simetria está localizado em  $y = 1.0$  e os comprimentos  $L_e$  e  $L_o$  possuem a mesma medida,  $L_e = L_o$ .

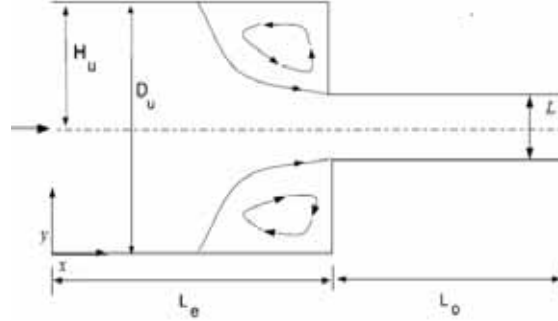


Figura 3.9: Geometria da contração planar 4:1 no caso bidimensional. Fonte [20].

As simulações da contração são iniciadas com a geometria cheia de fluido, considerando as condições iniciais para a velocidade e para as componentes do tensor extra-tensão de acordo com a Seção 1.4.1 e segue até o escoamento atingir o estado estacionário.

### 3.2.1 Verificação numérica

O artigo de Mompean [20] é a referência para verificação da metodologia numérica apresentada neste trabalho aplicada no problema da contração 4:1. Em [20], Mompean expõe resultados numéricos da contração obtidos pelos modelos diferencial e algébrico Oldroyd-B. Portanto, nesta Seção a constante  $\epsilon$  do modelo PTT é considerada nula, para que os modelos algébrico e diferencial PTT possam ser reduzidos ao modelo Oldroyd-B, tornando possível a verificação numérica.

No injetor da contração impõe-se o perfil parabólico para a componente de velocidade  $u$ , isto é,

$$u(y) = ay(2 - y), \quad (3.59)$$

onde  $a$  indica o valor máximo que a velocidade pode assumir do domínio de simulação que é em  $y = 1.0$  (eixo de simetria). As componentes do tensor extra-tensão são dadas pela solução analítica do modelo diferencial Oldroyd-B entre placas paralelas. Assim,

$$T^{xx}(y) = \frac{2W_i(1 - \beta)}{Re} \frac{du}{dy}, \quad (3.60)$$

$$T^{xy}(y) = \frac{(1 - \beta)}{Re} \frac{du}{dy}, \quad (3.61)$$

$$T^{yy}(y) = 0.0, \quad (3.62)$$

$$I_{\mathbf{T}} = T^{xx}. \quad (3.63)$$

Os seguintes dados de entrada foram utilizados para as simulações.

- Velocidade máxima do escoamento:  $1.0 \times 10^{-3}ms^{-1}$
- Velocidade média do escoamento:  $U = 7.5 \times 10^{-4}ms^{-1}$
- Malha espacial:  $\delta x = \delta y = 0.025$ .

- Diâmetro do injetor:  $D_U = 2.0m$ .
- Diâmetro do canal menor:  $L = 0.5m$ .
- Distância entre o injetor e ejetor:  $L_e + L_o = 3.0m$ , onde  $L_e = L_o = 1.5m$ .
- Constantes adimensionais:  $\beta = 0.1$ ,  $Re = 0.01$ ,  $W_i = 0.11$ .

Conforme Mompean [20], considere um corte horizontal em  $y = 0.75$  e  $0.5 \leq x \leq 2.5$  para analisar o tensor extra-tensão. As Figuras 3.10(a), 3.10(c) e 3.10(e) ilustram os comportamentos das componentes  $T^{xx}$ ,  $T^{yy}$  e  $T^{xy}$  obtidos nas simulações realizadas neste trabalho e as Figuras 3.10(b), 3.10(d) e 3.10(f) ilustram os comportamentos obtidos no trabalho [20].

Conforme as Figuras 3.10(a) - 3.10(e) o comportamento das componentes  $T^{xx}$ ,  $T^{yy}$  e  $T^{xy}$  dadas pelos modelos algébrico e diferencial reduzidos a Oldroyd-B em  $y = 0.75$  e  $0.5 \leq x \leq 2.5$  estão em concordância com o comportamento obtido no trabalho [20] (Figuras 3.10(b) - 3.10(f)). Pode-se observar claramente a presença da singularidade e do aumento no valor das tensões perto do canto da contração ( $y = 0.75$  e  $x = 1.5$ ).

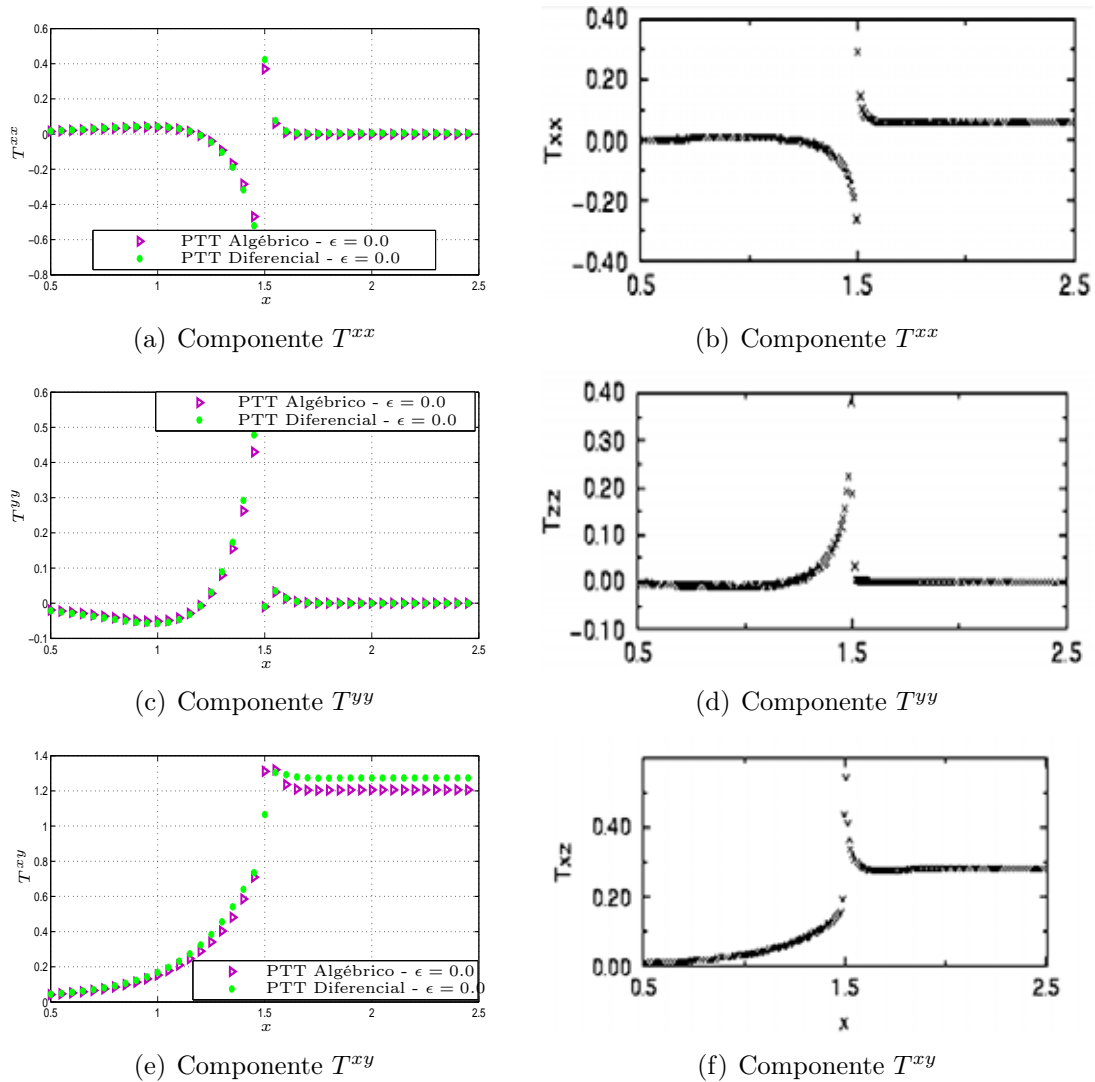


Figura 3.10: Resultados obtidos neste trabalho das componentes do tensor extra-tensão dadas pelos modelos algébrico e diferencial PTT reduzidos a Oldroyd-B (Figuras (a), (c) e (e)) e resultados do modelo diferencial Oldroyd-B extraídos do trabalho [20] (Figuras (b), (d) e (f)).

### 3.2.2 Simulações de um fluido PTT

O objetivo desta SubSeção é realizar simulações que utilizam o modelo algébrico PTT comparando com os resultados obtidos das simulações que utilizam o modelo diferencial PTT. Dessa maneira, considere os dados de entrada:

- Velocidade máxima do escoamento:  $0.5\text{ms}^{-1}$ .
- Velocidade média do escoamento:  $U = 0.33\text{ms}^{-1}$ .
- Diâmetro do injetor:  $D_{\text{U}} = 2.0\text{m}$ .
- Diâmetro do ejetor:  $L = 0.5\text{m}$ .
- Distância entre o injetor e ejetor:  $L_e + L_o = 6.0\text{m}$ , onde  $L_e = L_o = 3.0\text{m}$ .

No injetor da contração impõe-se o perfil parabólico, onde a componente da velocidade  $u$  é dada pela equação 3.59 e as componentes do tensor extra-tensão são dadas pelas equações (3.60)-(3.63).

As Figuras 3.11(a) - 3.11(d) expõe comparações dos valores das componentes de velocidade e do tensor extra-tensão, esses valores são obtidos ao longo do eixo de simetria ( $y = 1.0$  e  $0.0 \leq x \leq 6.0$ ) com as constantes adimensionais  $\beta = 0.5$ ,  $Re = 0.01$ ,  $W_i = 0.2$  e  $\epsilon = 0.5$ .

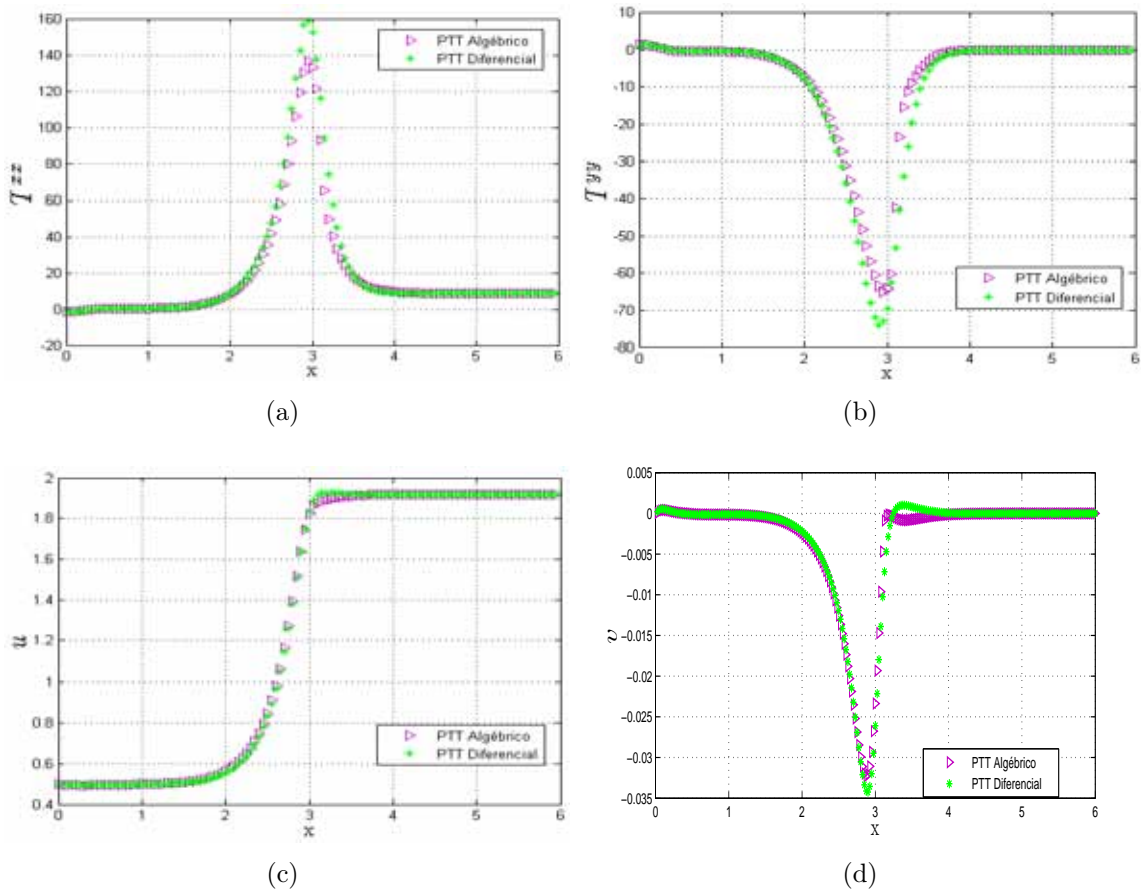
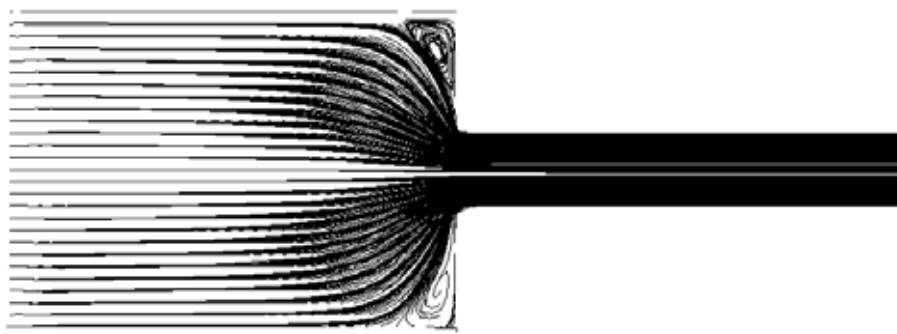


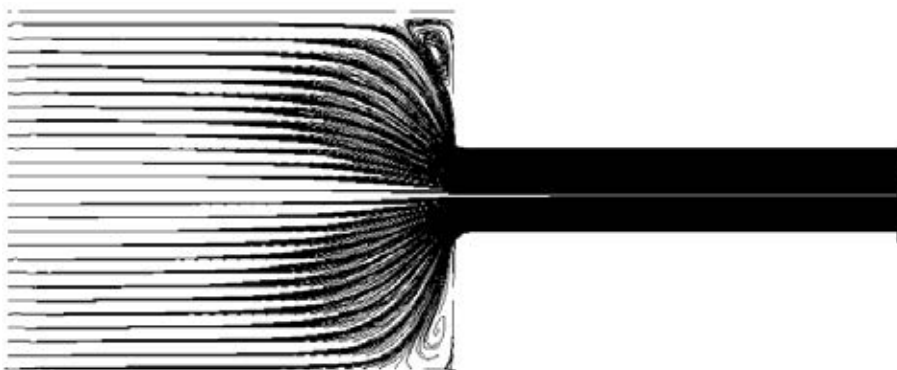
Figura 3.11: Comparação das componentes  $T^{xx}$ ,  $T^{yy}$ ,  $T^{xy}$  e  $u$  e  $v$  obtidas pelos modelos algébrico e diferencial PTT, em  $y = 1.0$  e  $0.0 \leq x \leq 6.0$ .

Conforme as Figuras 3.11(a) - 3.11(d) nota-se que o modelo algébrico reproduz resultados análogos aos obtidos pela equação constitutiva diferencial. Também pode-se observar

que o campo de velocidade dado pelos modelos diferencial e algébrico estão em excelente concordância (ver Figuras 3.12(a) e 3.12(b)). A máxima diferença que pode ocorrer nos valores da componente  $T^{xx}$ , essa diferença é aproximadamente 12%.

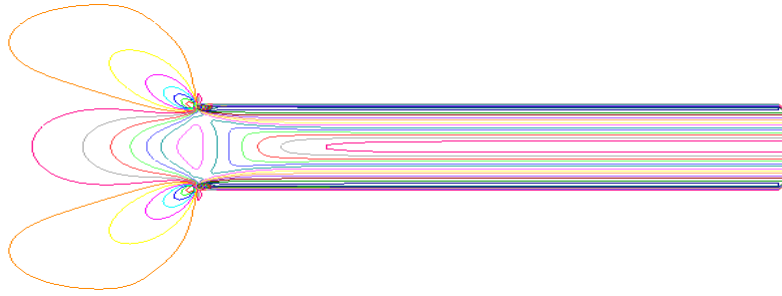


(a) Modelo Algébrico

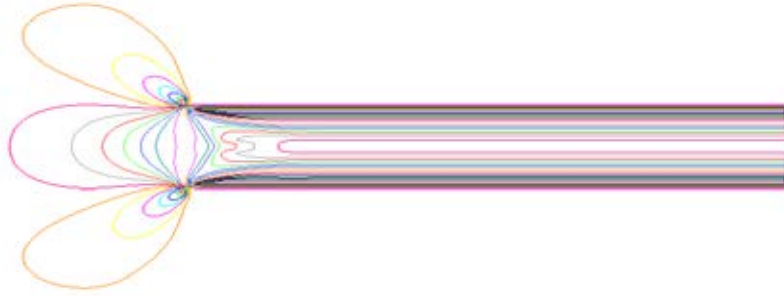


(b) Modelo Diferencial

Figura 3.12: Campo de velocidade dado pelo modelo algébrico e pelo modelo diferencial.

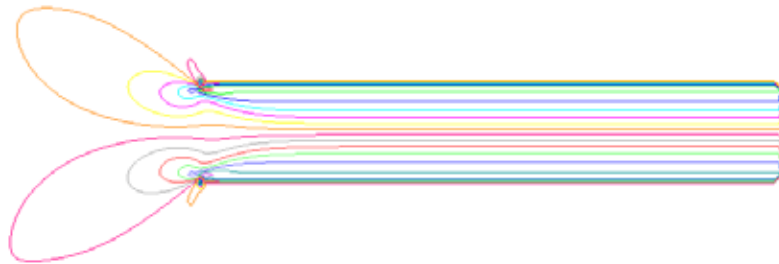


(a) Linhas de contorno da diferença  $(T^{xx} - T^{yy})$  obtida pelo modelo diferencial.

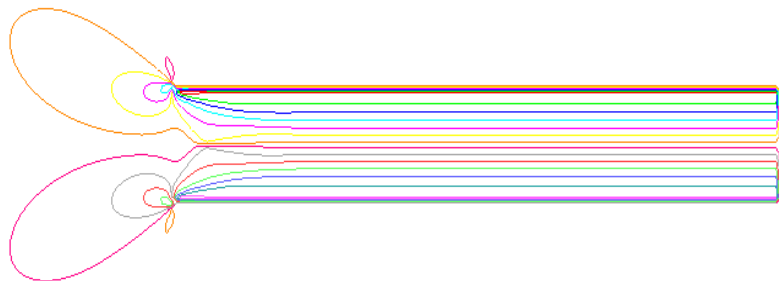


(b) Linhas de contorno da diferença  $(T^{xx} - T^{yy})$  obtida pelo modelo algébrico.

Figura 3.13: Comparação das linhas de contorno da diferença  $(T^{xx} - T^{yy})$ , com  $\delta x = \delta y = 0.025$  em  $t = 50s$ .



(a) Linhas de contorno da componente  $T^{xy}$  obtida pelo modelo diferencial.



(b) Linhas de contorno da componente  $T^{xy}$  obtida pelo modelo algébrico.

Figura 3.14: Comparação das linhas de contorno da componente  $T^{xy}$ , com  $\delta x = \delta y = 0.025$  em  $t = 50s$ .

Para discutir os resultados das Figuras 3.13(a) - 3.14(b), inicialmente serão ilustrados os tipos de escoamento e as respectivas regiões em que eles ocorrem na geometria da contração, seguindo a didática da Figura 3.15 extraída de [20]. As regiões de interesse

para essa discussão são as regiões cinza que representam o escoamento cisalhante (S) e as região mais clara que representam um escoamento puramente elongacional (E). Esse estudo dos tipos de escoamento na regiões da contração é realizado considerando o número de  $De = 0.32$  ( $De$  é denominado número de Deborah que é equivalente ao número  $Wi$  para fluidos estacionários).

De acordo com as Figuras 3.13(a) - 3.14(b) nota-se que as linhas de contorno obtidas pelo modelo algébrico reproduzem resultados coerentes com as linhas de contorno dadas pelo modelo diferencial. Entretanto na região próxima a contração a primeira diferença das tensões normais ( $T^{xx} - T^{yy}$ ) não é bem prevista pelo modelo algébrico, este fato também é relatado no trabalho [20]. Observa-se que em regiões de transição entre escoamento cisalhante e elongacional, as formas das linhas de contorno dado pelo modelo algébrico diferem das linhas de contorno dada pelo modelo diferencial como pode ser visto nas Figuras 3.13(b) e 3.14(b).

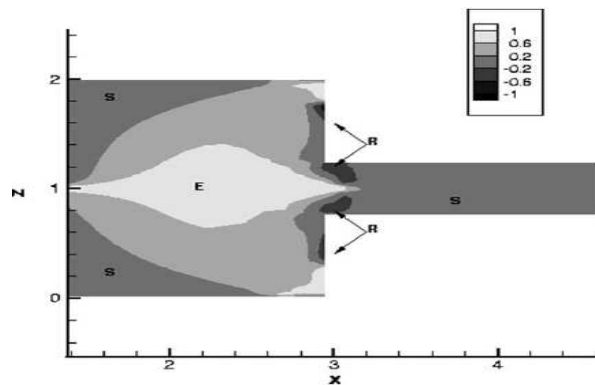


Figura 3.15: Figura retirada de [20] caracterizando as regiões de diferentes escoamentos.

### 3.2.2.1 Esforço computacional

Nesta Seção, serão expostos resultados com objetivo de comparar o esforço computacional das simulações que utilizam os modelos algébrico e diferencial.

Assim, considere uma simulação de um fluido PTT com os seguintes dados de entrada:

- Constantes adimensionais:  $\beta = 0.6$ ,  $Re = 0.01$ ,  $Wi = 0.2$  e  $\epsilon = 0.5$ .
- Diâmetro do canal maior:  $D_U = 2.0m$
- Diâmetro do canal menor:  $L = 0.5m$ .
- Distância entre o injetor e ejetor:  $L_e + L_o = 6.0m$ , onde  $L_e = L_o = 3.0m$ .

No injetor da contração impõe-se o perfil parabólico, onde a componente da velocidade  $u$  é dada pela equação (3.59) e as componentes do tensor extra-tensão são dadas pelas equações (3.60)-(3.63).

As simulações são realizadas como em duas malhas computacionais:

- M1:  $\delta x = \delta y = 1/60$ .
- M2:  $\delta x = \delta y = 1/80$ .

Os passos no tempo adotados nas simulações respeitam a condição CFL. A comparação do esforço computacional está exposta na Tabela 3.6. A diferença do esforço computacional derivados das simulações que utilizam os modelos algébrico e diferencial é calculada pela equação (3.55), isto é,

$$D_T = \frac{(T_A - T_D)}{T_A} \times 100,$$

em que  $T_D$  e  $T_A$  são os esforços computacionais das simulações dadas pelos modelos diferencial e algébrico, respectivamente.

Tabela 3.6: Comparação do esforço computacional no problema da contração 4:1.

$D_T$	
M1	M2
-0.8%	-59%

Como discutido na Seção 3.1.3, os resultados da Tabela 3.6 eram esperados, ou seja, é possível observar que o tempo de processamento das simulações que utilizam o modelo algébrico é consideravelmente inferior em malhas mais finas se comparado com o modelo diferencial. Lembrando que se  $D_T < 0$ , as simulações dadas pelo modelo algébrico apresentam maior esforço computacional que as simulações dadas pelo modelo diferencial.

### 3.3 Modelo algébrico aplicado em escoamentos com superfície livre

Nesta Seção, serão apresentados resultados numéricos das simulações de escoamentos com superfície livre utilizando o modelo algébrico PTT, com o objetivo verificar a aplicabilidade do modelo algébrico em escoamentos com superfície livre. Essa verificação será realizada em dois tipos de problemas:

- Escoamento totalmente desenvolvido em um canal.
- Impacto de uma gota viscoelástica numa superfície rígida.

Tanto no escoamento totalmente desenvolvido em um canal quanto no impacto de uma gota viscoelástica numa superfície rígida considera-se as condições de contorno conforme expostas na SubSeção 1.4.2, isto é, consideram-se nas fronteiras rígidas a condição de não-eskorregamento (*no-slip*) e de impermeabilidade para o vetor velocidade, onde o traço do tensor extra-tensão  $I_T$  é calculado a partir das equações (1.112) e (1.115) de acordo com a posição do contorno rígido. Em fronteiras livres a pressão  $p$  é calculada conforme a estratégia Oishi [6], tal estratégia é exposta na subSeção 2.1.4.

#### 3.3.1 Escoamento entre placas paralelas

Considere um escoamento viscoelástico com superfície livre entre placas paralelas na direção  $x$ . Na entrada do canal, impõe-se a solução analítica formulada na Seção 3.1.1 para o tensor extra-tensão e para a velocidade. No ejetor, considera-se a condição de Neumann homogênea.

No tempo  $t = 0s$ , o canal está totalmente vazio, o fluido vai sendo injetado na entrada do canal gradualmente até que atinja o ejetor e também até que o estado estacionário seja estabelecido. Assim, considere os seguintes dados de entrada:

- Distância entre as placas:  $L = 1m$
- Comprimento das placas:  $10L$
- Constantes adimensionais:  $Re = 0.01$ ,  $W_i = 0.2$ ,  $\beta = 0.6$  e  $\epsilon = 0.5$ .

As Figuras 3.16 (a) - 3.16 (b) ilustram a movimentação do fluido viscoelástico escoando entre as placas paralelas.

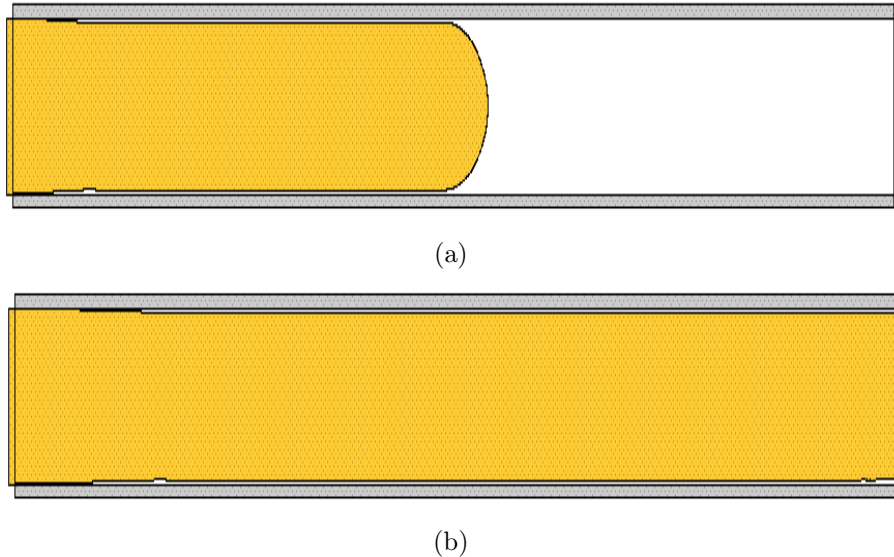


Figura 3.16: Ilustração do escoamento de um fluido viscoelástico entre placas paralelas em  $t = 5s$  e  $t = 10s$ .

As Figuras 3.17 (a) - 3.17 (c) ilustram a comparação das soluções numéricas com a solução analítica das componentes do tensor extra-tensão e da velocidade em  $t = 50s$  considerando três malhas espaciais:

1. M10:  $\delta x = \delta y = 0.1$ .
2. M20:  $\delta x = \delta y = 0.05$ .
3. M40:  $\delta x = \delta y = 0.025$ .

Observa-se que a solução numérica de um escoamento viscoelástico dada pelo modelo algébrico apresenta um boa concordância com a solução analítica do problema.

### 3.3.2 Impacto de uma gota numa superfície rígida

Um problema importante em reologia computacional envolvendo superfície livre e fluido viscoelástico, é o fenômeno do impacto da gota. Esse problema consiste em uma gota esférica que cai sob a ação da gravidade até atingir uma superfície rígida e deforma-se rapidamente, sendo que, as propriedades de cisalhamento do fluido têm bastante influência. Assim, nesta SubSeção, serão apresentados resultados das simulações numéricas do impacto de uma gota numa placa rígida, realizando inicialmente a verificação da metodologia numérica, isto é, serão comparados resultados obtidos neste trabalho com os resultados obtidos num trabalho da literatura. Em seguida, serão efetuadas simulações numéricas variando os parâmetros adimensionais  $\beta$ ,  $W_i$  e  $\epsilon$ , com o objetivo de verificar se o modelo algébrico reproduz os fenômenos previstos pelo modelo diferencial para este caso.

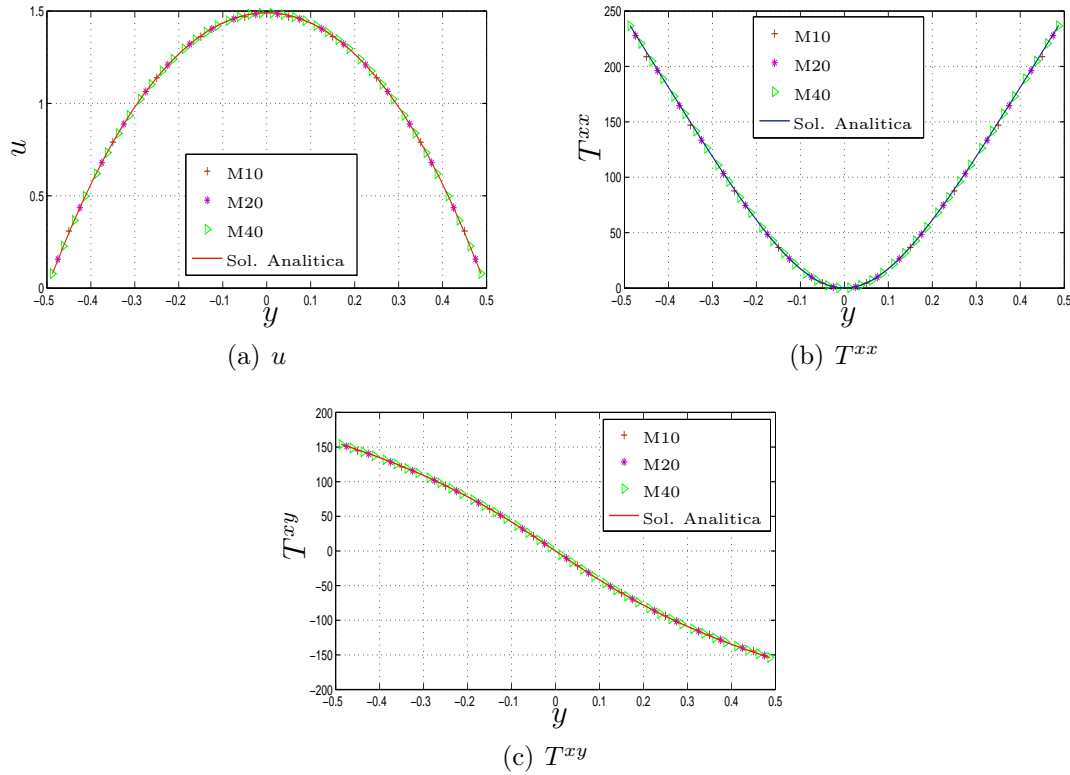


Figura 3.17: Comparação da solução numérica com a solução analítica das componentes  $u$ ,  $T^{xx}$  e  $T^{xy}$  em  $x = 5L$  e  $t = 50s$ .

### 3.3.2.1 Verificação numérica

A verificação numérica é realizada utilizando os resultados do trabalho desenvolvido por Oishi et al. [8]. Assim, considera-se os seguintes dados:

- Domínio Computacional:  $0.078m \times 0.078m$  ( $156 \times 156$  células).
- Diâmetro da gota e velocidade de escala:  $L = 0.02m$  e  $U = 1.0m/s$ , respectivamente.
- Altura inicial (entre o centro da gota e o fundo da caixa):  $h_0 = 0,04m$ .
- Velocidade inicial:  $u_0 = 0.0m/s$  e  $v_0 = -1.0m/s$ .
- viscosidade cinemática:  $4 \times 10^{-3}m^2s^{-1}$ .
- Números de Reynolds, Weissenberg e Froude:  $Re = 5.0$ ,  $Wi = 1.0$  e  $Fr = 2.26$ , respectivamente.
- Constante  $\beta = 0.1$ .

A Figura 3.18 ilustra a variação do comprimento de uma gota modelada pelo fluido Oldroyd-B exposto no trabalho de Oishi et al. [8] e pelo fluido PTT diferencial reduzido a Oldroyd-B, isto é,  $\epsilon = 0.0$ . Nota-se que a gota dada pelo modelo PTT diferencial reduzido a Oldroyd-B (resultado obtido neste trabalho) apresenta uma excelente concordância com o modelo Oldroyd-B (resultado obtido no trabalho [8]).

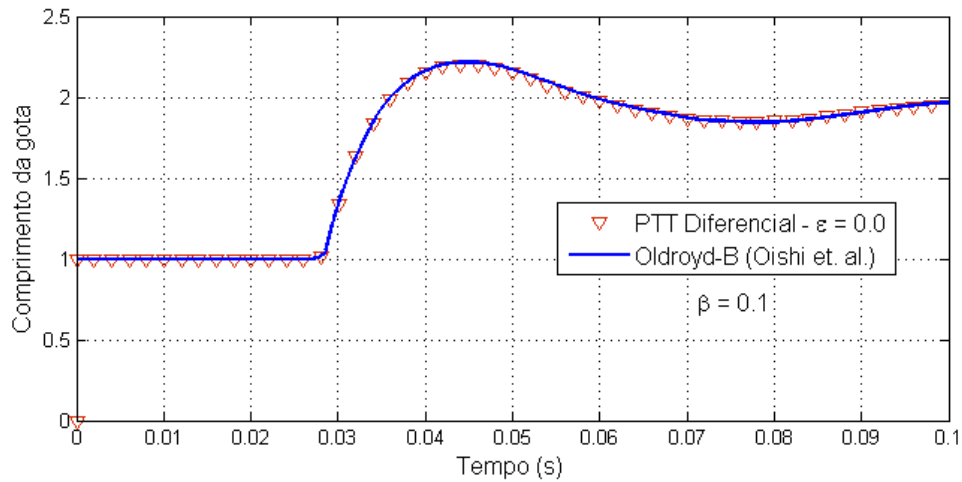


Figura 3.18: Verificação numérica da variação do comprimento de uma gota de um fluido dada pelo modelo diferencial PTT reduzido a Oldroyd-B ( $\epsilon = 0.0$ ).

A Figura 3.19 apresenta a comparação do comprimento da gota dadas pelo modelo algébrico PTT, pelo modelo diferencial PTT e o modelo Oldroyd-B (para os modelos algébrico e diferencial PTT adota-se ( $\epsilon = 0.0$ )). Essa comparação é realizada com os mesmos dados de entrada exposto anteriormente, exceto a constante  $\beta = 0.6$ .

Nota-se, que a variação do comprimento da gota dada pelo modelo algébrico PTT corresponde ao modelo diferencial PTT exceto no intervalo  $(0.05, 0.12)$ , onde a gota modelada pelo diferencial PTT e Oldroyd-B apresentam uma curva indicando que a gota sofre uma contração, o mesmo não ocorre com a gota modelada pelo algébrico PTT.

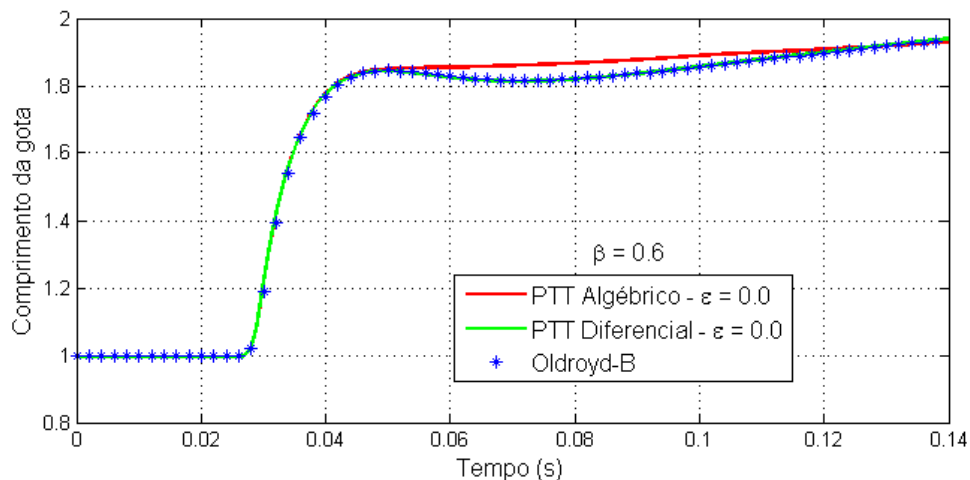


Figura 3.19: Verificação numérica da variação do comprimento de uma gota de um fluido dada pelos modelos diferencial PTT e algébrico PTT, ambos reduzidos a Oldroyd-B, isto é,  $\epsilon = 0.0$ , juntamente com os dados obtidos pelo modelo Oldroyd-B.

A seguir serão apresentados resultados numéricos com o mesmo domínio computacional e velocidade de escala adotados anteriormente, avaliando a influência das constantes adimensionais  $W_i$ ,  $\beta$  e do parâmetro  $\epsilon$ , com o objetivo de verificar se a gota dada pelo modelo algébrico reproduz os fenômenos de uma gota viscoelástica prevista pelo modelo

diferencial. O resultados serão expostos através de gráficos e Tabelas comparando e calculando a diferença dos comprimentos das gotas previstas por ambos os modelos. Essa diferença é calculada utilizando a seguinte expressão

$$D = \sum_j (C_1(t_j) - C_2(t_j))^2, \quad (3.64)$$

onde  $C_1$  representa o comprimento da gota da pelo modelo algébrico PTT e  $C_2$  representa o comprimento da gota modelada pelo modelo diferencial PTT. A equação (3.64) será calculada no tempo  $t \in [0.0, 0.1]$  segundos, pois é nesse intervalo de tempo que ocorre o fenômeno da contração da gota viscoelástica [8], ou seja, nesse intervalo é possível verificar se a gota dada pelo modelo algébrico é capaz de simular esse fenômeno.

### 3.3.2.2 Influência do $W_i$

As Figuras 3.20 (a) - 3.20 (d) ilustram a comparação do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico e diferencial com a variação de  $W_i$  e a Tabela 3.7 apresenta os resultados numéricos da diferença entre os comprimentos da gota modelado por ambos os modelos. Assim, considere os números adimensionais fixados:

- $Re = 5.0$ ,  $Fr \cong 2.26$ ,  $\beta = 0.6$  e  $\epsilon = 0.5$ .

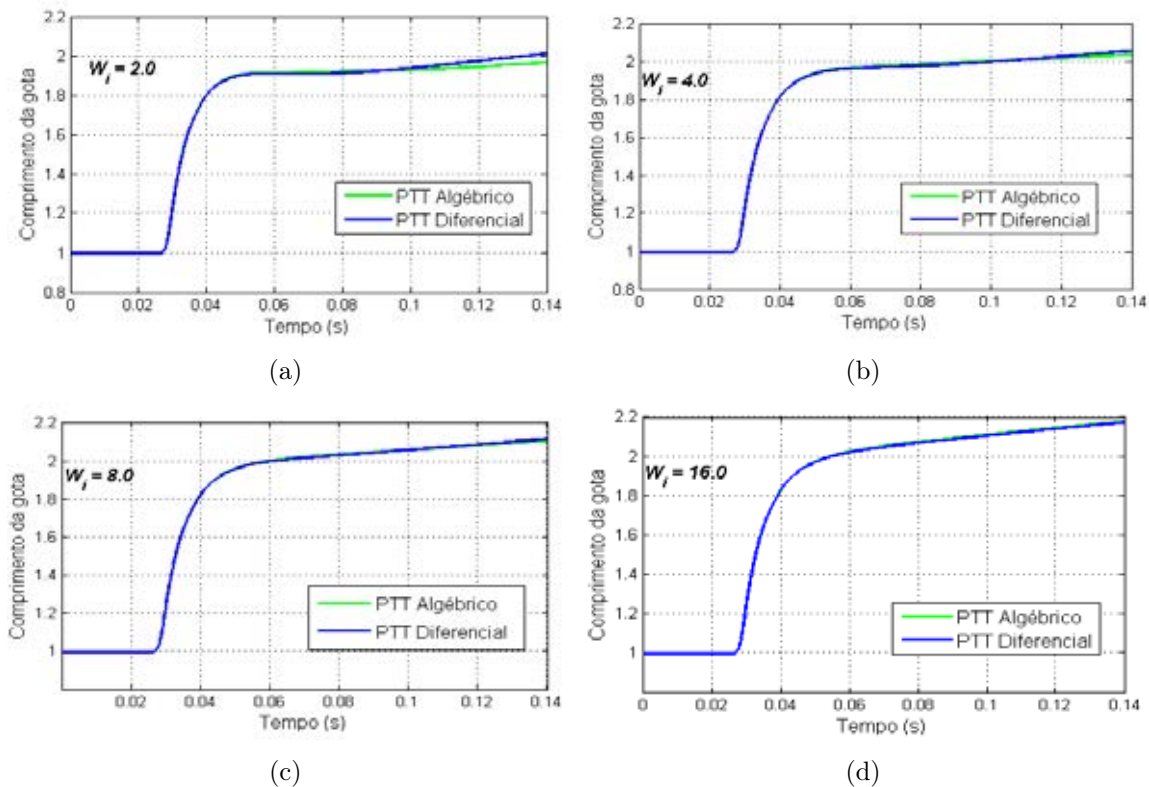


Figura 3.20: Variação do comprimento de uma gota viscoelástica com relação ao tempo: Comparação do modelo diferencial com o modelo algébrico PTT variando  $W_i$ .

Tabela 3.7: Diferença do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico PTT e diferencial PTT.

$W_i$	1.0	2.0	4.0	8.0	16.0
$D$	0.299	0.120	0.092	0.028	0.041

Nota-se pelas Figuras 3.20(a) - 3.20(d) que o modelo algébrico apresenta uma boa concordância com o modelo diferencial considerando o aumento da constante adimensional  $W_i$  e que a gota viscoelástica não contrai com o aumento dessa constante. Certamente, esse fato merece maior investigação para uma contribuição em Reologia Computacional.

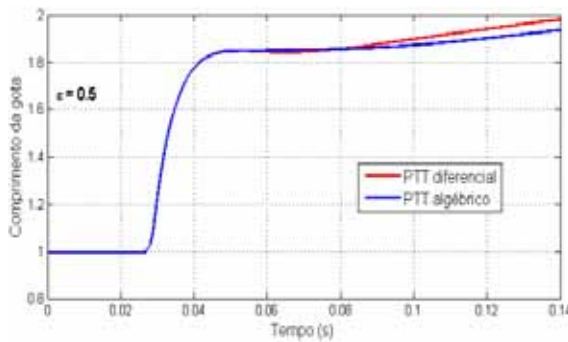
De acordo com a Tabela 3.7, para  $W_i$  até 8.0 a diferença entre os resultados numéricos do modelo algébrico e do modelo diferencial diminui. De  $W_i = 8.0$  para  $W_i = 16.0$  percebe-se que há um pequeno aumento nessa diferença. Entretanto, quando considerou-se  $t \in [0.0, 0.14]s$  esse aumento não ocorreu, o que foi verificado em cálculos que não foram apresentados aqui. Portanto, essa análise merece uma maior investigação para valores maiores de  $W_i$ .

### 3.3.3 Influência de $\epsilon$

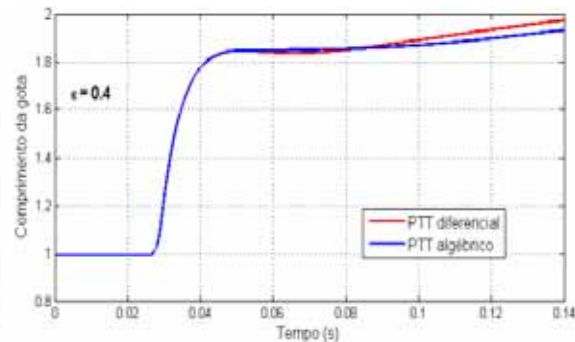
Analisando a influência do parâmetro  $\epsilon$  na simulação de uma gota dada pelo modelo algébrico PTT, tem-se as Figuras 3.21(a) - 3.21(f) que compara o comprimento dessa gota com o comprimento de uma gota dada pelo modelo diferencial PTT e a Tabela 3.8 apresenta essa diferença numericamente. As comparações são efetuadas com os números adimensionais fixados:

- Números adimensionais fixados:  $Re = 5.0$ ,  $Fr \cong 2.26$ ,  $\beta = 0.6$  e  $W_i = 1.0$ .

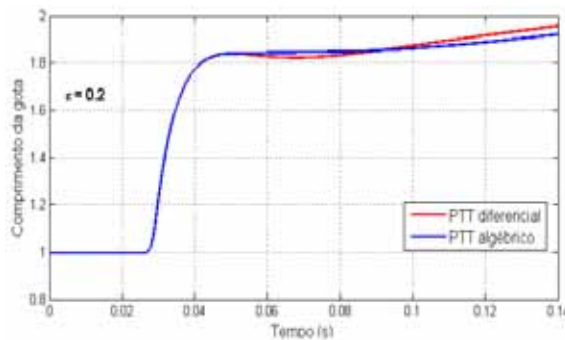
A constante adimensional  $W_i = 1.0$  é escolhida de modo que o efeito da contração de uma gota viscoelástica possa ser evidenciado.



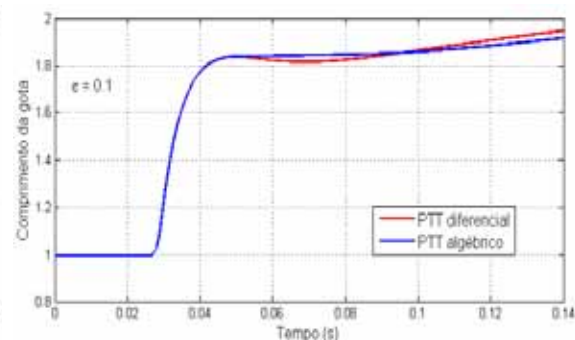
(a)



(b)



(c)



(d)

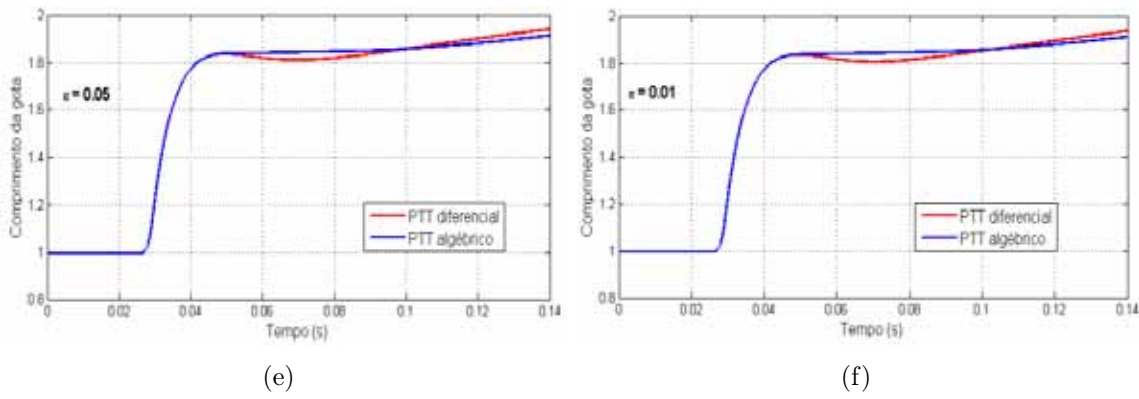


Figura 3.21: Variação do comprimento de uma gota viscoelástica com relação ao tempo: Comparação do modelo diferencial com o modelo algébrico PTT variando  $\epsilon$ .

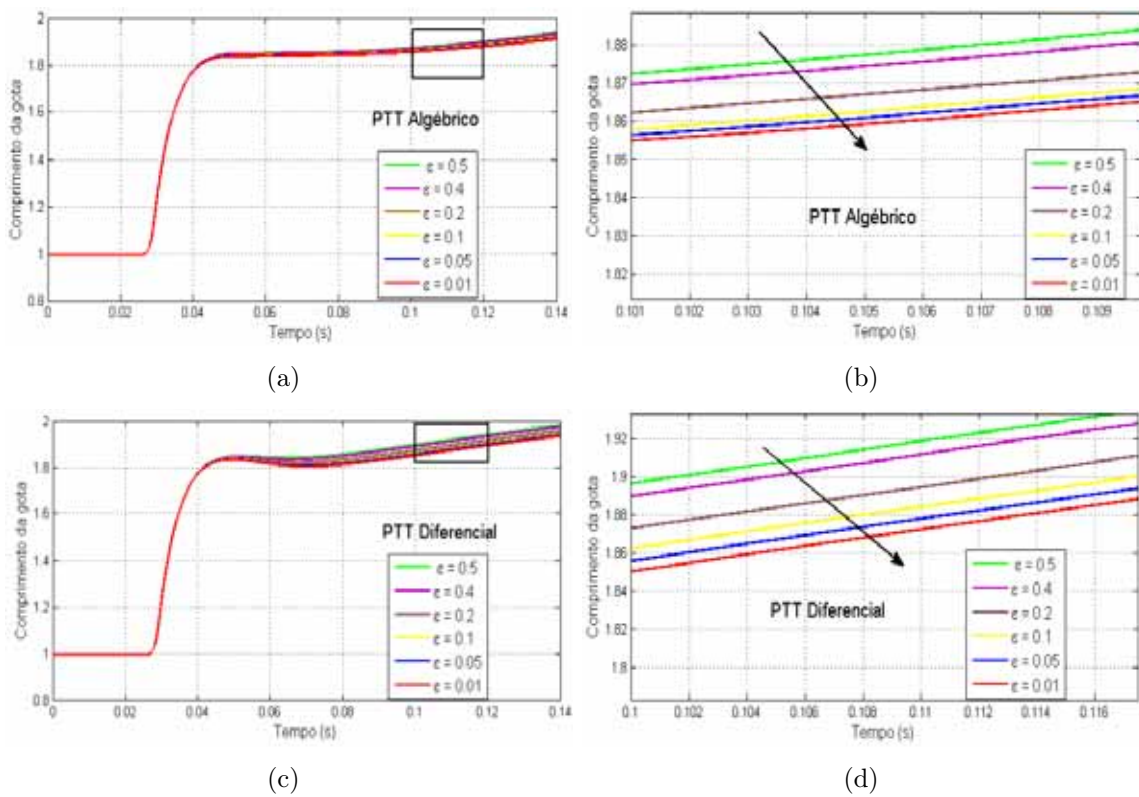


Figura 3.22: (a) Comparação do comprimento de uma gota viscoelástica dada pelo modelo algébrico PTT variando o parâmetro  $\epsilon$ ; (b) zoom da Figura (a); (c) Comparação do comprimento de uma gota viscoelástica dada pelo modelo diferencial PTT variando o parâmetro  $\epsilon$ ; (d) zoom da Figura (c).

Tabela 3.8: Diferença do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico PTT e diferencial PTT.

$\epsilon$	0.5	0.4	0.2	0.1	0.05	0.01
$D$	0.299	0.299	0.498	0.869	1.261	1.678

Conforme as Figuras 3.21(a) - 3.21(f), observa-se que o comprimento da gota dada pelos modelos algébrico e diferencial apresentam maior diferença quando o parâmetro

$\epsilon$  diminui, isto é, nota-se que a gota viscoelástica representada pelo modelo diferencial apresenta o fenômeno de contração mais acentuada com a diminuição de  $\epsilon$  e o mesmo não acontece com a gota viscoelástica representada pelo modelo algébrico.

Analisando os resultados numéricos do modelo algébrico e do modelo diferencial separadamente, pode-se observar melhor a influência do parâmetro  $\epsilon$ , como pode ser visto nas Figuras 3.22(a) - 3.22(d). Essas figuras ilustram que ambos os modelos apresentam um comportamento semelhante com a diminuição do parâmetro  $\epsilon$ . Considerando a Figura 3.22 (c), verifica-se novamente que há uma maior contração da gota dada pelo modelo diferencial quando  $\epsilon$  é menor, já para valores maiores de  $\epsilon$  o comportamento da gota se aproxima do comportamento de uma gota de fluido Newtoniano. Esse fato está coerente com trabalho [33] (por praticidade ver Figura 3.23), o qual mostra que a viscosidade elongacional do modelo diferencial PTT tende a ser constante, como no caso Newtoniano, com o aumento de  $\epsilon$ . Destaca-se que, o efeito da contração da gota apresentado pelo modelo diferencial, não é plenamente capturado pelo modelo algébrico ( ver Figura 3.33(a)).

A Tabela 3.8 expõe quantitativamente a diferença entre os modelos algébrico e diferencial. De acordo com o exposto acima, com relação ao parâmetro  $\epsilon$ , os dados da Tabela 3.8 indicam que quanto menor  $\epsilon$ , ou seja, quanto maior os efeitos viscoelásticos, maior a diferença entre os modelos diferencial e algébrico PTT.

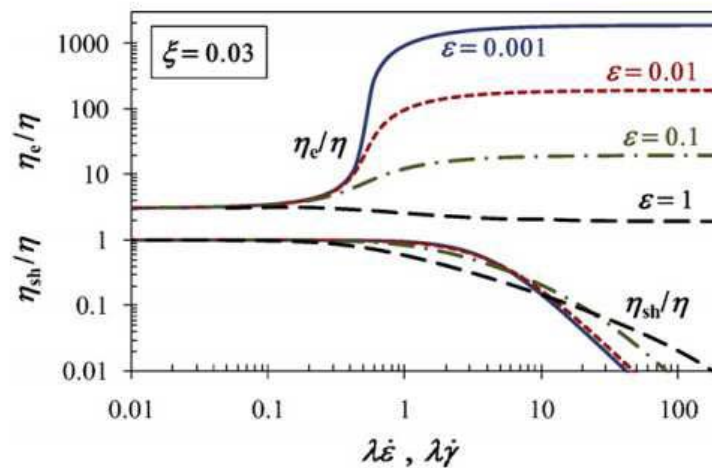


Figura 3.23: Gráfico superior: variação da viscosidade elongacional em função da taxa de elongação. Gráfico inferior: variação da viscosidade cisalhante em função da taxa de cisalhamento. Fonte: Tomé et al. [33].

### 3.3.4 Influência de $\beta$

Por fim, analisa-se a influência da constante adimensional  $\beta$  no escoamento de uma gota. As Figuras 3.24(b) - 3.24 (d) expõe a comparação do comprimento de uma gota dada pelo modelo algébrico PTT com o comprimento de uma gota dada pelo modelo diferencial PTT e a Tabela 3.9 apresenta a diferença do comprimento. As comparações são feitas com as seguintes constantes adimensionais:

- $Re = 5.0$ ,  $Fr \cong 2.26$ ,  $\epsilon = 0.2$  e  $W_i = 1.0$ .

O valor de  $W_i = 1.0$  novamente é escolhido afim de que o efeito da contração da gota seja verificado.

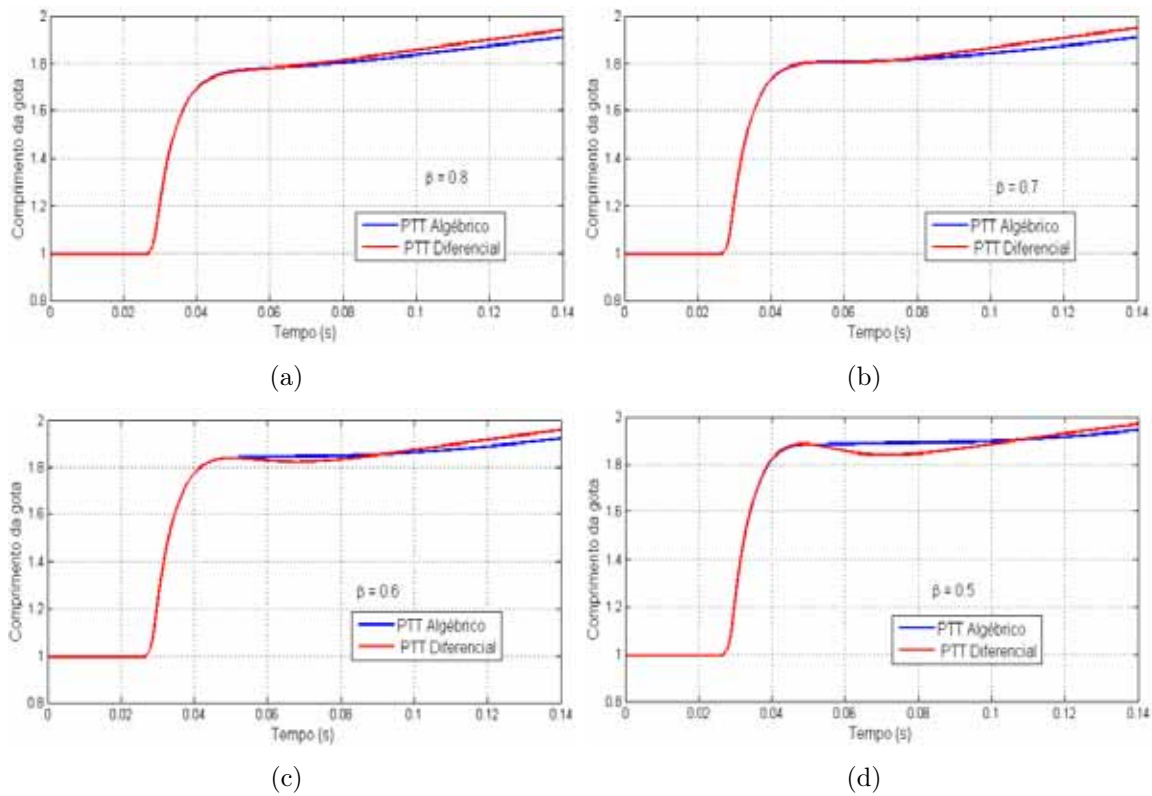


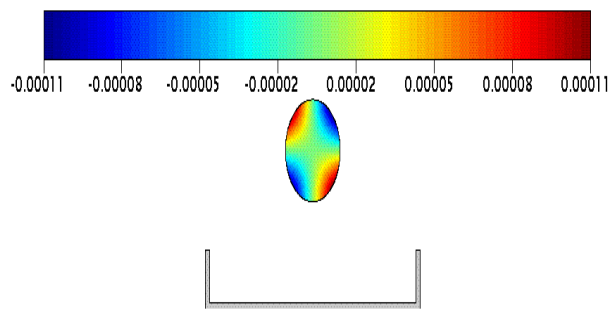
Figura 3.24: Variação do comprimento de uma gota viscoelástica com relação ao tempo: Comparação do modelo diferencial com o modelo algébrico PTT variando  $\beta$ .

Tabela 3.9: Diferença do comprimento de uma gota dada pelos modelos algébrico PTT e diferencial PTT

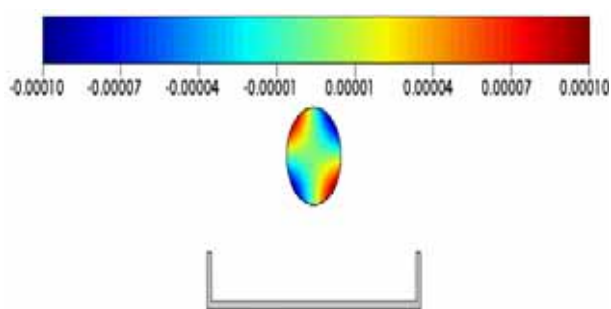
$\beta$	0.7	0.6	0.5
$D$	0.276	0.498	3.347

Nota-se pelas Figuras 3.24(a) - 3.24(d), que a diminuição da constante adimensional  $\beta$  acarreta numa maior diferença nos comportamentos dos modelos algébrico e diferencial PTT. Isso se deve ao fato de que uma gota dada pelo modelo diferencial apresentar de forma mais acentuada o fenômeno da contração com a diminuição de  $\beta$  (resultado também apresentado no trabalho [39]) o mesmo não acontece com a gota dada pelo modelo algébrico. Conseqüentemente, a diferença dos comprimentos aumentam com a diminuição dessa constante como pode ser verificado numericamente na Tabela 3.9.

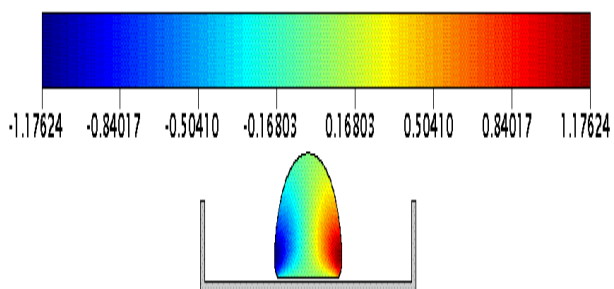
As Figuras 3.25(a) - 3.25(l) apresentam a visualização do perfil da velocidade  $u$  das simulações correspondentes à Figura 3.24(c).



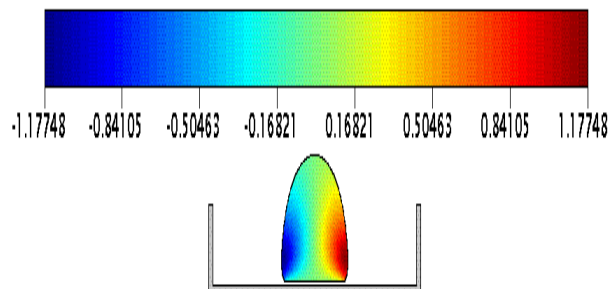
(a) Modelo Algébrico ( $t = 0.01s$ )



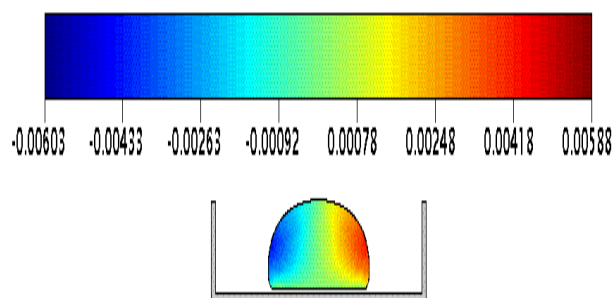
(b) Modelo Diferencial ( $t = 0.01s$ )



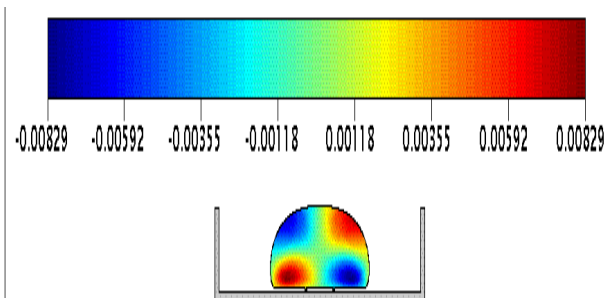
(c) Modelo Algébrico ( $t = 0.03s$ )



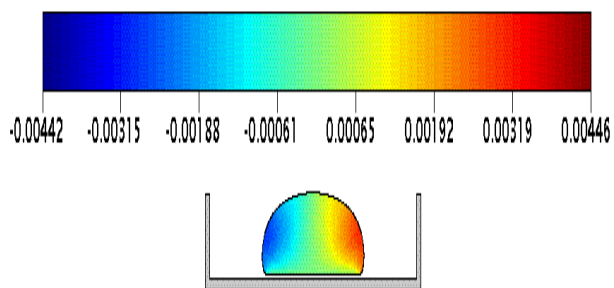
(d) Modelo Diferencial ( $t = 0.03s$ )



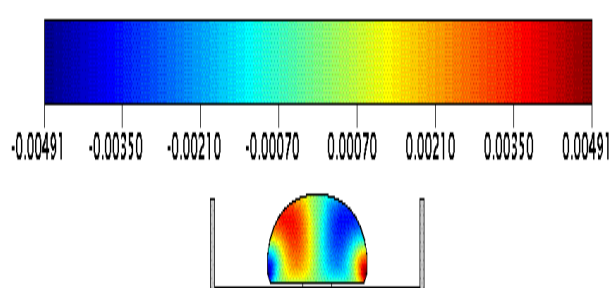
(e) Modelo Algébrico ( $t = 0.05s$ )



(f) Modelo Diferencial ( $t = 0.05s$ )



(g) Modelo Algébrico ( $t = 0.07s$ )



(h) Modelo Diferencial ( $t = 0.07s$ )

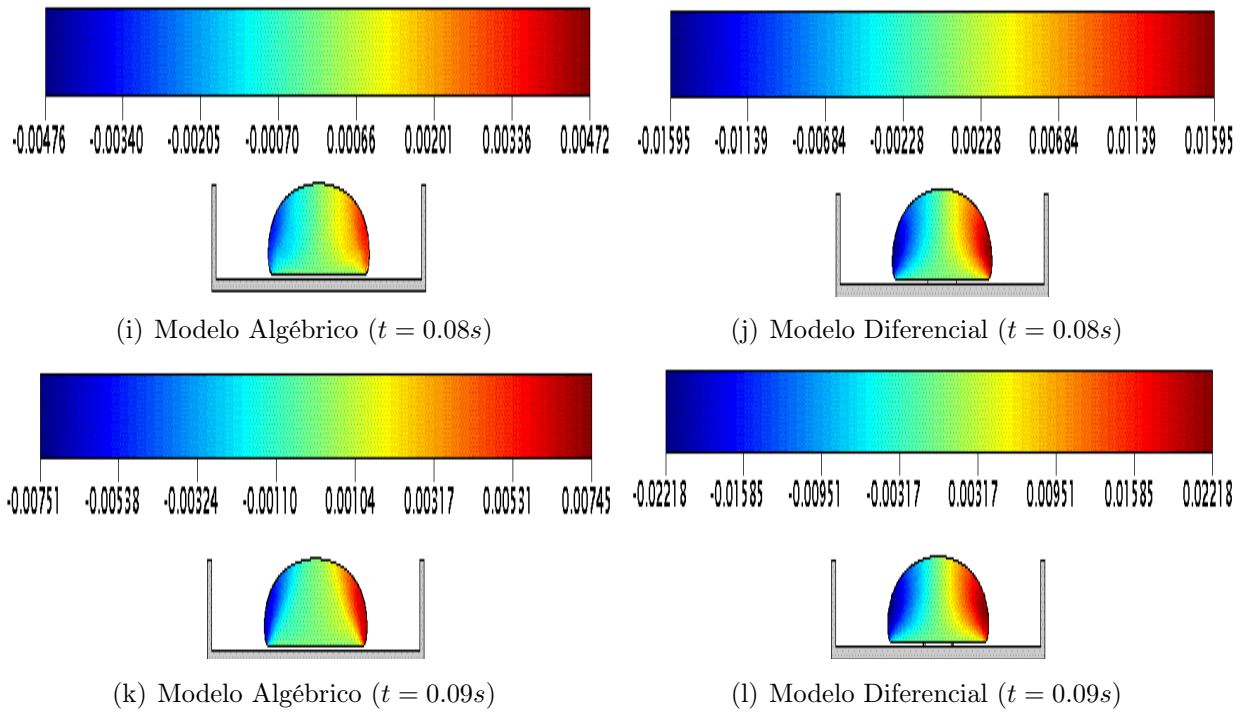


Figura 3.25: Visualização bidimensional do escoamento de uma gota analisando o perfil da componente de velocidade  $u$  dada pelo modelo algébrico PTT e pelo modelo diferencial PTT, com  $\beta = 0.6$ ,  $Re = 5.0$ ,  $W_i = 1.0$ ,  $\epsilon = 0.2$ ,  $Fr \cong 2.26$ .

Observa-se que no tempo  $t = 0.05s$  o modelo diferencial começa a mostrar o efeito de contração, a Figura 3.25(f) já apresenta uma inversão no sinal da velocidade  $u$ , enquanto o modelo algébrico não apresenta essa inversão. Entretanto, destaca-se aqui que a velocidade  $u$  no modelo algébrico diminui consideravelmente, fazendo com que a gota quase pare de escoar (ver da Figura 3.25(c) para Figura 3.25(e)), o que mostra que o modelo algébrico "tenta" contrair, mas não realiza essa contração de fato.

---

## Considerações finais

No presente trabalho foi exposto o estudo do desenvolvimento de um modelo algébrico para escoamentos viscoelásticos a partir da equação constitutiva diferencial PTT, esse modelo foi implementado na plataforma FREFLOW-2D adaptando o cálculo dos tensores em fronteiras fixas e livres. Em seguida, foram realizadas simulações numéricas visando a obtenção e discussão dos resultados obtidos pelo modelo algébrico PTT, a verificação do método numérico foi feita através de comparações quantitativas com a solução analítica, que neste trabalho foi derivada a partir do modelo algébrico PTT. Além disso, comparações dos resultados numéricos entre os modelos algébrico e diferencial foram realizados com objetivo de verificar a viabilidade do modelo algébrico e o tempo de simulação.

A verificação da metodologia numérica foi realizada na simulação de um escoamento confinado entre duas placas paralelas comparando os resultados numéricos do modelo algébrico PTT com a solução analítica do problema. Essa comparação foi satisfatória, pois com o refinamento de malha observa-se que a solução numérica apresenta uma boa concordância com a solução analítica. Além disso, o modelo algébrico e o modelo diferencial apresentam erros relativos e ordem de convergência consideravelmente próximos.

Ainda num escoamento totalmente desenvolvido entre placas paralelas, foram realizadas simulações numéricas com o objetivo de comparar o esforço computacional dessas simulações que foram dadas pelos modelos algébrico e diferencial. Verificou-se que o modelo algébrico apresenta uma restrição de estabilidade maior se comparado com o modelo diferencial quando considera-se escoamentos com mais de 40% de polímero, com valores de  $\epsilon \geq 0.2$  e com o aumento  $W_i$ . Entretanto, em malhas mais finas o modelo algébrico começa a mostrar vantagens com relação ao tempo de processamento e com relação a estabilidade. Na comparação entre os modelos algébrico e diferencial, nota-se que em malhas mais finas o modelo algébrico apresenta convergência numérica e menor esforço computacional, enquanto o modelo diferencial começa apresentar instabilidade e em certo momento não é capaz de simular nenhum dos casos propostos.

No problema da contração planar 4:1, inicialmente foi realizada a verificação numérica reduzindo o modelo diferencial e o modelo algébrico ao modelo Oldroyd-B (tomando  $\epsilon = 0.0$ ), comparando os resultados obtidos neste trabalho com os resultados apresentados no trabalho [20]. A comparação foi satisfatória, pois o comportamento dos valores numéricos das componentes do tensor extra-tensão estão coerentes com o comportamento apresentado no trabalho [20]. Além disso, comparou-se resultados dados pelos modelos algébrico e diferencial PTT e verificou-se que o comportamento das tensões e das velocidades apresentam uma boa concordância, a principal diferença é dada nas linhas de contorno da primeira diferença das tensões normais na região onde ocorre a contração, esse fato também é relatado em [20]. Em seguida verificou-se o esforço computacional e como esperado as simulações dadas pelo modelo algébrico apresentou menor custo computacional em malhas mais finas se comparadas com o modelo diferencial.

Como aplicação em escoamentos com superfície livre, o modelo algébrico foi testado na simulação do escoamento de um fluido viscoelástico entre placas paralelas e de uma

gota viscoelástica em uma placa rígida. Os resultados numéricos foram comparados com os previstos pelo modelo diferencial PTT.

No escoamento entre placas paralelas foram realizadas simulações em três malhas espaciais comparando a solução numérica com a solução analítica, verificando que a solução numérica apresenta uma boa concordância com a solução analítica.

No escoamento do impacto de uma gota viscoelástica numa placa rígida comparações foram feitas com o objetivo de analisar a influência das constantes adimensionais nesse tipo de problema, estudando a aplicabilidade do modelo algébrico. Assim, verifica-se com o aumento dos parâmetros adimensionais  $W_i$ ,  $\epsilon$  e  $\beta$  que o escoamento de uma gota viscoelástica dada pelo modelo algébrico se aproxima do escoamento da gota dada pelo modelo diferencial. Observa-se também com diminuição desses parâmetros que ocorre o fenômeno de contração da gota (efeito elástico) e que o modelo algébrico apresenta dificuldade em representar esse fenômeno.

## Referências

---

- [1] A. Amsden, F. Harlow; *The SMAC methods: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows*. Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA- 4370 (1970).
- [2] A. C. Alves; *Verificação de Soluções Numéricas da Equação de Laplace 2D com Malhas Triangulares e Múltiplas Extrapolações De Richardson*. Tese de Doutorado, UFPR - Curitiba, 2010.
- [3] A. Chorin; *Numerical solution of the navier-stokes*. Mathematics of Computation **2** (1968), 745-762.
- [4] A. Afonso, P.J. Oliveira, F.T. Pinho, P.J. Oliveira, M.A. Alves; *The log-conformation tensor approach in the finite-volume method framework*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **157** (2009), 55-65.
- [5] C. M. Oishi; *Análise e implementação de métodos implícitos no sistema FreeFlow2d*. Dissertação de Mestrado, ICMC/USP - São Carlos, 2004.
- [6] C. M. Oishi; *Análise e implementação de métodos implícitos e de projeção para escoamentos com superfície livre*, Tese de Doutorado, ICMC/USP - São Carlos, 2008.
- [7] C. M. Oishi, J. A. Cuminato, V. G. Ferreira, M. F. Tomé, N. Maanchiavacchi, S. McKee; *A stable semi-implicit method for free surface flows*. Journal of Applied Mechanics **73** (2006), 940-947.
- [8] C. M. Oishi, F.P. Martins, M.F. Tomé, M.A. Alves; *Numerical simulation of drop impact and jet buckling problems using the eXtended Pom-Pom model*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **169-170** (2012), 91-103.
- [9] C. M. Oishi, F. P. Martins, M. F. Tomé, M. A. Alves; *Numerical simulation of the eXtended Pom-Pom model for viscoelastic free surface flows*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **166** (2011), 165-179.
- [10] D. M. Carvalho; *Desenvolvimento de um método numérico para resolver escoamentos viscoelásticos: Modelo de Maxwell*. Dissertação de Mestrado, ICMC/USP - São Carlos, 2004.
- [11] D. O. A. Cruz, F. T. Pinho; *Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a newtonian solvent contribution*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **132** (2005), 28-35.
- [12] D. O. A. Cruz, F. T. Pinho; *Corrigendum "Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a newtonian solvent contribution"*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **132** (2005), 28-35.

- [13] F. Harlow, J. Welch; *Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface*. Physics of Fluids **8** (1965), 2182-2189.
- [14] F. P. Martins; *Desenvolvimento de um método numérico implícito para a simulação de escoamentos viscoelásticos com superfícies livres*. Dissertação de Mestrado, ICMC/USP - São Carlos, 2009.
- [15] G. F. Silva; *Análise e implementação de modelos viscoelásticos no sistema Free-flow2D*. Dissertação de Mestrado, ICMC/USP - São Carlos, 2003.
- [16] G. F. Silva; *Simulação numérica de escoamentos viscoelástico com superfícies livres usando o ambiente FREEFLOW2D*. Dissertação de Mestrado, ICMC/USP - São Carlos, 2003.
- [17] G. K Batchelor; *An introduction of fluid dynamics*. Cambridge University Press, 1967.
- [18] G. Mompean, L. Thais, M. F. Tomé, A. Castelo; *Numerical prediction of threedimensional time-dependent viscoelastic extrudate swell using differential and algebraic models*. Computers and Fluids **44** (2011), 68-78.
- [19] G. Mompean, T. Jongen, T.B. Gatski, and M. Deville; *On algebraic extra-stress models for the simulation of viscoelastic flows*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **79** (1998), 261-281.
- [20] G. Mompean; *On predicting abrupt contraction flows with differential and algebraic viscoelastic models*, Computers and Fluids **31** (2002), 935-956.
- [21] G. S. de Paulo; *Solução numérica do modelo PTT para escoamentos viscoelásticos com superfícies livres*. Tese de Doutorado, ICMC/USP - São Carlos, 2006.
- [22] J. E. Welch, F. H. Harlow, J. P. Shannon, B. J. Daly; *The mac method*. Tech. report, Los Alamos Scientific Laboratory Report LA **3425** (1966).
- [23] J. W. Thomas; *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Springer, New York (1995), 344-347.
- [24] L. Thais, L. Helin, G. Mompean; *Numerical simulation of viscoelastic flows with Oldroyd-B constitutive equations and novel algebraic stress models*. J. Non-Newtonian Fluid Mech. **140** (2006), 145-158.
- [25] L. Thais, L. Helin, G. Mompean. *On the consequences of material frame-indifference in algebraic stress models*. Theoretical and Computational Fluid Dynamics **19** (2005), 1-22.
- [26] M. A. Alves, P. J. Oliveira, F. T. Pinho; *A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection*. International journal for numerical methods in fluids **41** (2003), 47-75.
- [27] M. A. Hulsen; *Some properties and analytical expressions for plane flow of Leonov and Giesekus models*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **30** (1988), 85-92.
- [28] M. A. Hulsen; *A sufficient condition for a positive definitive configuration tensor in differential models*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **38** (1990), 93-100.

- [29] M. A. Silva; *Desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres*. Dissertação de Mestrado, ICMC/USP - São Carlos, 2005.
- [30] M. F. Tomé; *GENSMAC: a multiple free surface fluid flow solver*. Tese de Doutorado, Department of Mathematics / University of Atrathclyde, 1993.
- [31] M. F. Tomé, N. Mangiavacchi, J. Cuminato, A. Castelo, S. McKee; *A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows* **106** (2002), 61-106.
- [32] M. F. Tomé; *GENSMACVISCO: um método numérico para resolver escoamentos viscoelásticos não-estacionários com fronteiras livres*. Tese de Livre Docência, ICMC/USP - São Carlos, 2001.
- [33] M. F. Tomé, G. S. Paulo, F. T. Pinho, M. A. Alves; *Numerical solution of the PTT constitutive equation for unsteady three-dimensional free surface flows*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **165** (2010), 247-262.
- [34] M. F. Tomé, S. McKee; *GENSMAC: a computational Marker-and-Cell method for free surface flows in general domains*. Journal of Computational Physics **110** (1994), 171-186.
- [35] M. F. Tomé, N. Mangiavacchi, J. Cuminato, A. Castelo, S. McKee; *A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **106** (2002), 61-106.
- [36] M. S. Oliveira, F. T. Pinho, M. A. Alves *Purely elastic flow asymmetries in flow-focusing devices*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics **160** (2009), 31-39.
- [37] N. P. Thien, R. I. Tanner; *A new constitutive equation derived from network theory*. J. Non-Newt. Fluid Mech **2** (1977), 353-365.
- [38] R. B. Bird, R.C. Armstrong; O. Hassager; *"Dynamics of polymeric liquids". Vol I*, John Willey Sons, 1987.
- [39] R. Merejolli; *Desenvolvimento de um método numérico para simular escoamentos viscoelásticos axissimétricos com superfícies livres: Modelo PTT*. Dissertação de Mestrado, PosMAC - Presidente Prudente, 2013.
- [40] R. Temam; *Sur l'approximation de la solution des equations de navier-stokes par la methode de pas fractionnaires (ii)*. Archives of Rational Mechanics and Analysis **79** (1969), 377-385.
- [41] S. B. Pope; *A more general effective-viscosity hypothesis*. Journal Fluid Mech **72** (1975), 331-340.
- [42] S. McKee, M. F. Tome, V. G. Ferreira, J. A. Cuminato, A. Castelo, F. S. Sousa, N. Mangiavacchi; *The mac method*. Computers and Fluids **37** (2008), 907-930.
- [43] T. B. Gatski, C. G. Speziale; *General explicit algebraic stress relations and best approximation for three-dimensional flows*. International Journal of Engineering Science **36** (1998), 739-763.
- [44] T. B. Gatski, C. G. Speziale; *On explicit algebraic stress models for complex turbulent flows*. J. Non-Newt. Fluid Mech **254** (1993), 59-78.

- 
- [45] T. Jongen, T. B. Gatski; *A new approach to characterizing the equilibrium states of Reynolds stress anisotropy in homogeneous turbulence*. Theor. Comput. Fluid Dyn. **11** (1998), 31-47.
- [46] Y. Saad; *Iterative methods for sparse linear systems*, 2000.

## Equações governantes em coordenadas cartesianas bidimensionais

### A.1 Equações que descrevem escoamentos newtonianos

As equações de Navier-Stokes para escoamentos newtonianos, incompressíveis e isotérmicos na forma conservativa são dadas por

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^\top) \right) = \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{S} - p\mathbf{I}) + \rho \mathbf{g}, \quad (\text{A-1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (\text{A-2})$$

Considerando escoamentos bidimensionais,  $\mathbf{u} = [u \ v]^\top$  e o operador  $\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x} \ \frac{\partial}{\partial y} \right]$ .

Assim, escreve-se

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial t} \\ \frac{\partial v}{\partial t} \end{bmatrix}, \quad (\text{A-3})$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^\top) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u & v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} uu & uv \\ uv & vv \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} & \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A-4})$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{S} - p\mathbf{I}) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \left( 2\eta_s \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} \right) \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\eta_s \frac{\partial u}{\partial x} - p & \eta_s \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \eta_s \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & 2\eta_s \frac{\partial v}{\partial y} - p \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2\eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) & \eta_s \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) + 2\eta_s \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2\eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) & \eta_s \left( -\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) + 2\eta_s \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) & -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A-5})$$

$$\rho \mathbf{g} = \rho [\mathbf{g}_x \ \mathbf{g}_y], \quad (\text{A-6})$$

e a equação continuidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (\text{A-7})$$

## A.2 Equação que descrevem o escoamento de um fluido PTT

As equações governantes para escoamentos não-newtonianos, isotérmicos e incompressíveis modelados pela equação constitutiva PTT, são dadas na forma conservativa por

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^\top) \right) = \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{S} + \mathbf{T} - p\mathbf{I}) + \rho \mathbf{g}, \quad (\text{A-8})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{A-9})$$

$$f(I_{\mathbf{T}})\mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} = 2n_p \mathbf{S}. \quad (\text{A-10})$$

Considerando escoamentos bidimensionais, os termos  $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ ,  $\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}^\top)$ ,  $\rho \mathbf{g}$  e  $\nabla \cdot \mathbf{u}$  são dados respectivamente pelas equações (A-3), (A-4), (A-6) e (A-7). Além disso,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{S} + \mathbf{T} - p\mathbf{I}) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &\left( 2\eta_s \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} \right) \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \left( 2\eta_s \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \right) \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \left( \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} \right) \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\eta_s \frac{\partial u}{\partial x} & \eta_s \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \eta_s \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & 2\eta_s \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T^{xx} - p & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} - p \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2\eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) & \eta_s \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) + 2\eta_s \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \frac{\partial T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} & \frac{\partial T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) & \eta_s \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} & \frac{\partial T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &- \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A-11})$$

e

$$\begin{aligned}
\overset{\nabla}{\mathbf{T}} &= \frac{D\mathbf{T}}{Dt} - \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{u}^\top - (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{T} \\
&= \frac{D}{Dt} \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & -\frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & -\frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} \\
&= \frac{D}{Dt} \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} T^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + T^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} & T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} - T^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} \\ T^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} + T^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} & T^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - T^{yy} \frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} \\
&\quad - \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} T^{xx} + \frac{\partial u}{\partial y} T^{xy} & \frac{\partial u}{\partial x} T^{xy} + \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} \\ \frac{\partial v}{\partial x} T^{xx} - T^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} T^{xy} - T^{yy} \frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} \\
&= \frac{D}{Dt} \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2T^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + 2T^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} & T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} \\ \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} + T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} & 2T^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - 2T^{yy} \frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial T^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{xx}}{\partial y} & \frac{\partial T^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial T^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{xy}}{\partial y} & \frac{\partial T^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{yy}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{yy}}{\partial y} \end{bmatrix} \\
&\quad - \begin{bmatrix} 2T^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + 2T^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} & T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} \\ \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} + T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} & 2T^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - 2T^{yy} \frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} \tag{A-12}
\end{aligned}$$

Assim, a equação da quantidade de movimento e a equação constitutiva PTT na forma adimensional são escritas matricialmente da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\rho \left( \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial t} & \frac{\partial v}{\partial t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} & \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \end{bmatrix} \right) &= - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} \\
+ \begin{bmatrix} \eta_s \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) & \eta_s \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T^{xy}}{\partial y} & \frac{\partial T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T^{yy}}{\partial y} \end{bmatrix} + \rho [g_x \quad g_y], \tag{A-13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(I_{\mathbf{T}}) \begin{bmatrix} T^{xx} & T^{xy} \\ T^{xy} & T^{yy} \end{bmatrix} + \lambda \left( \begin{bmatrix} \frac{\partial T^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{xx}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{xx}}{\partial y} & \frac{\partial T^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial T^{xy}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{xy}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{xy}}{\partial y} & \frac{\partial T^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial u T^{yy}}{\partial x} + \frac{\partial v T^{yy}}{\partial y} \end{bmatrix} \right. \\
\left. - \begin{bmatrix} 2T^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + 2T^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} & T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} \\ \frac{\partial u}{\partial y} T^{yy} + T^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} & 2T^{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - 2T^{yy} \frac{\partial u}{\partial x} \end{bmatrix} \right) = 2n_p \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \tag{A-14}
\end{aligned}$$



## Operações matemáticas para obtenção do modelo algébrico explícito

### B.1 Equação diferencial PTT em termos dos tensores **S** e **W**

A equação diferencial PTT na forma adimensional é dada pela equação (1.27) que pode ser reescrita como a equação (1.42), isto é,

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\mathbf{T} + 2\frac{(1-\beta)}{W_i\text{Re}}\mathbf{S} + \nabla\mathbf{u}\mathbf{T} + \mathbf{T}\nabla\mathbf{u}^{\top}, \quad (\text{B-1})$$

onde

$$\begin{aligned} \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top} &= \left(\frac{1}{2} \cdot \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{2} \cdot \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{T}\right) + \left(\frac{1}{2} \cdot \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top}\right) \\ &= \left(\frac{1}{2} \cdot \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{T} - \frac{1}{2} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top} \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{2} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top} \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{2} \cdot \nabla\mathbf{u} \cdot \mathbf{T}\right) \\ &\quad + \left(\frac{1}{2} \cdot \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u} - \frac{1}{2} \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u} + \frac{1}{2} \cdot \mathbf{T} \cdot \nabla\mathbf{u}^{\top}\right) \\ &= \left(\frac{1}{2} \cdot (\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^{\top}) \cdot \mathbf{T} + \frac{1}{2} \cdot (\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^{\top}) \cdot \mathbf{T}\right) \\ &\quad - \left(\mathbf{T} \cdot \frac{1}{2} \cdot (\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^{\top}) + \mathbf{T} \cdot \frac{1}{2} \cdot (\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^{\top})\right) \\ &= \mathbf{W} \cdot \mathbf{T} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{T} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{W} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{S} \\ &= (\mathbf{T} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{T}) - (\mathbf{T} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{T}). \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

Substituindo (B-2) na equação (B-1), tem-se (os sinais de produto é omitido por simplicidade)

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = -\frac{f(I_{\mathbf{T}})}{W_i}\mathbf{T} + 2\frac{(1-\beta)}{W_i\text{Re}} + (\mathbf{S}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{S}) - (\mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{T}). \quad (\text{B-3})$$

## B.2 Matrizes resultantes de $(\mathbf{SW} - \mathbf{WS})$ e de $\mathbf{S}^2$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{SW} - \mathbf{WS} &= \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & S^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & S^{yy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -W^{xy}S^{xy} & W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{yy} & W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & W^{xy}S^{yy} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -2W^{xy}S^{xy} & W^{xy}(S^{xx} - S^{yy}) \\ W^{xy}(S^{xx} - S^{yy}) & 2W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 & \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \end{bmatrix} \tag{B-4}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}^2 &= \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & S^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & S^{yy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} (S^{xx})^2 + (S^{xy})^2 & 0 \\ 0 & (S^{yy})^2 + (S^{xy})^2 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \left[ \frac{\partial u}{\partial x} \right]^2 + \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]^2 & 0 \\ 0 & \left[ \frac{\partial v}{\partial y} \right]^2 + \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]^2 \end{bmatrix} \tag{B-5}
 \end{aligned}$$

## B.3 Cálculo dos valores $\{\mathbf{S}^2\}$ e $\{\mathbf{W}^2\}$

O valor  $\{\mathbf{S}^2\}$  pode ser obtido tirando o traço da matriz (B-5), isto é,

$$\{\mathbf{S}^2\} = \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left[ \frac{\partial v}{\partial y} \right]^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 = (S^{xx})^2 + (S^{yy})^2 + 2(S^{xy})^2 \tag{B-6}$$

e o valor  $\{\mathbf{W}^2\}$  é obtido multiplicando

$$\begin{aligned}
 \mathbf{W}^2 &= \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -(W^{xy})^2 & 0 \\ 0 & -(W^{xy})^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)^2 & 0 \\ 0 & -\left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)^2 \end{bmatrix} \tag{B-7}
 \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 \{\mathbf{W}^2\} &= -\left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)^2 - \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)^2 \\
 &= -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \\
 &= \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 = -2(W^{xy})^2 \tag{B-8}
 \end{aligned}$$

## B.4 Cálculo dos valores $\{\Gamma\mathbf{WS}^2\}$ , $\{\mathbf{W}\Gamma\mathbf{S}^2\}$ , $\{\mathbf{S}^3\}$ , $\{\mathbf{S}\Gamma\mathbf{S}^2\}$ e $\{\Gamma\mathbf{S}^3\}$

É necessário obter os valores de  $\{\Gamma\mathbf{WS}^2\}$ ,  $\{\mathbf{W}\Gamma\mathbf{S}^2\}$ ,  $\{\mathbf{S}^3\}$ ,  $\{\mathbf{S}\Gamma\mathbf{S}^2\}$  e  $\{\Gamma\mathbf{S}^3\}$  para que o valor  $\{\Gamma\mathbf{S}^2\}$  seja determinado na subseção 1.3.2. A seguir será exposto o procedimento para obter esses valores,

$$\begin{aligned}
\Gamma\mathbf{WS}^2 &= \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} & \Gamma_{xy} \\ \Gamma_{xy} & \Gamma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W_{xy} \\ -W_{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} -\Gamma_{xy}W_{xy} & \Gamma_{xx}W_{xy} \\ -\Gamma_{yy}W_{xy} & \Gamma_{xy}W_{xy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (S_{xx})^2 + (S_{xy})^2 & 0 \\ 0 & (S_{yy})^2 + (S_{xy})^2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} -\Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & \Gamma_{xx}W_{xy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) \\ -\Gamma_{yy}W_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & +\Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) \end{bmatrix} \quad (\text{B-9})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{W}\Gamma\mathbf{S}^2 &= \begin{bmatrix} 0 & W_{xy} \\ -W_{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} & \Gamma_{xy} \\ \Gamma_{xy} & \Gamma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \Gamma_{xy}W_{xy} & \Gamma_{yy}W_{xy} \\ -\Gamma_{xx}W_{xy} & -\Gamma_{xy}W_{xy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (S_{xx})^2 + (S_{xy})^2 & 0 \\ 0 & (S_{yy})^2 + (S_{xy})^2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & \Gamma_{yy}W_{xy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) \\ -\Gamma_{xx}W_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & -\Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) \end{bmatrix} \quad (\text{B-10})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^3 &= \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & -S_{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} (S_{xx})^2 + (S_{xy})^2 & 0 \\ 0 & (S_{yy})^2 + (S_{xy})^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) \\ S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & S_{yy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) \end{bmatrix} \quad (\text{B-11})
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\{\Gamma\mathbf{WS}^2\} = -\Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) + \Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) = 0 \quad (\text{B-12})$$

$$\{\mathbf{W}\Gamma\mathbf{S}^2\} = \Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) - \Gamma_{xy}W_{xy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) = 0 \quad (\text{B-13})$$

$$\{\mathbf{S}^3\} = S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) + S_{yy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) = 0 \quad (\text{B-14})$$

Note que  $S_{xx} + S_{yy} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$  (hipótese de incompressibilidade). Esse resultado foi utilizado nas equações (B-12)-(B-14) e será utilizado nos próximos resultados.

A seguir, será mostrado que  $\{\mathbf{S}\Gamma\mathbf{S}^2\} = \{\Gamma\mathbf{S}^3\} = \frac{1}{2} \{\Gamma\mathbf{S}\} \{\mathbf{S}^2\}$ .

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}\Gamma\mathbf{S}^2 &= \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} & \Gamma_{xy} \\ \Gamma_{xy} & \Gamma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} S_{xx}\Gamma_{xx} + S_{xy}\Gamma_{xy} & S_{xx}\Gamma_{xy} + S_{xy}\Gamma_{yy} \\ S_{xy}\Gamma_{xx} + S_{yy}\Gamma_{xy} & S_{xy}\Gamma_{xy} + S_{yy}\Gamma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (S_{xx})^2 + (S_{xy})^2 & 0 \\ 0 & (S_{yy})^2 + (S_{xy})^2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) (S_{xx}\Gamma_{xx} + S_{xy}\Gamma_{xy}) & ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) (S_{xx}\Gamma_{xy} + S_{xy}\Gamma_{yy}) \\ ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) (S_{xy}\Gamma_{xx} + S_{yy}\Gamma_{xy}) & ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) (S_{xy}\Gamma_{xy} + S_{yy}\Gamma_{yy}) \end{bmatrix} \quad (\text{B-15})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma \mathbf{S}^3 &= \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} & \Gamma_{xy} \\ \Gamma_{xy} & \Gamma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} & S_{xy} \\ S_{xy} & S_{yy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} & \Gamma_{xy} \\ \Gamma_{xy} & \Gamma_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) \\ S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & S_{yy} ((S_{yy})^2 + (S_{xy})^2) \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \Gamma_{xx} S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & \Gamma_{xx} S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) \\ +\Gamma_{xy} S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & -\Gamma_{xy} S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) \\ \Gamma_{xy} S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & \Gamma_{xy} S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) \\ +\Gamma_{yy} S_{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) & -\Gamma_{yy} S_{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) \end{bmatrix} \quad (\text{B-16})
 \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
 \{\mathbf{S}\Gamma\mathbf{S}^2\} &= [(S_{xx})^2 + (S_{xy})^2] [S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy}] \\
 &\quad + [(S_{xx})^2 + (S_{xy})^2] [S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy}] \\
 &= [S^{xx}\Gamma^{xx} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) + S^{xy}\Gamma^{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2)] \\
 &\quad + [S^{xy}\Gamma^{xy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2) - S^{xx}\Gamma^{yy} ((S_{xx})^2 + (S_{xy})^2)] \\
 &= \{\Gamma\mathbf{S}^3\}. \quad (\text{B-17})
 \end{aligned}$$

#### B.4.1 Cálculo do valor $\{\Gamma\mathbf{S}^3\}$ pelo Teorema de Caley-Hamilton

O polinômio característico do tensor taxa de rotação  $\mathbf{S}_{3 \times 3}$  é dado por

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{S} - \lambda \mathbf{I}). \quad (\text{B-18})$$

Se  $\lambda$  é o autovalor de  $\mathbf{S}$  então  $p(\lambda) = 0$ . Assim, da equação (B-18), vem

$$p(\lambda) = \lambda^3 - \{\mathbf{S}\} \lambda^2 + \frac{1}{2} [\{\mathbf{S}\}^2 - \{\mathbf{S}^2\}] \lambda + \det \mathbf{S} = 0. \quad (\text{B-19})$$

Pelo Teorema de Cayley-Hamilton, tem-se que  $\mathbf{S}$  também anula o polinômio característico, ou seja,

$$\mathbf{S}^3 - \{\mathbf{S}\} \mathbf{S}^2 + \frac{1}{2} [\{\mathbf{S}\}^2 - \{\mathbf{S}^2\}] \mathbf{S} + \text{Idet} \mathbf{S} = \mathbf{0}. \quad (\text{B-20})$$

Aplicando a hipótese de escoamento bidimensional incompressível, tem-se  $\{\mathbf{S}\} = \{\mathbf{S}\}^2 = \det \mathbf{S} = 0$ . Assim,

$$\mathbf{S}^3 - \frac{1}{2} \{\mathbf{S}^2\} \mathbf{S} = \mathbf{0}. \quad (\text{B-21})$$

Multiplicando a equação (B-21) pelo tensor  $\Gamma$ , vem

$$\Gamma \mathbf{S}^3 - \frac{1}{2} \{\mathbf{S}^2\} \Gamma \mathbf{S} = \mathbf{0}. \quad (\text{B-22})$$

Tirando o traço da equação (B-22), obtém-se

$$\{\Gamma \mathbf{S}^3\} - \frac{1}{2} \{\mathbf{S}^2\} \{\Gamma \mathbf{S}\} = 0, \quad (\text{B-23})$$

implicando em

$$\frac{1}{2} \{\Gamma \mathbf{S}\} \{\mathbf{S}^2\} = \{\Gamma \mathbf{S}^3\}. \quad (\text{B-24})$$

## B.5 Cálculo dos valores $\{\mathbf{S}\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\Gamma\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , $\{\Gamma\mathbf{W}^2\mathbf{S}\}$ , $\{\mathbf{W}\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ e $\{\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S}\mathbf{W}\}$

Para obter o valor de  $\{\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S}\}$  na subseção 1.3.2 é necessário o cálculo de  $\{\mathbf{S}\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\Gamma\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ ,  $\{\Gamma\mathbf{W}^2\mathbf{S}\}$  e  $\{\mathbf{W}\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S}\}$ , procedendo como segue.

Primeiramente, multiplica-se as matrizes:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}\Gamma\mathbf{W}\mathbf{S} &= \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma^{xx} & \Gamma^{xy} \\ \Gamma^{xy} & \Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy} & S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy} \\ S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy} & S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & -W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} (S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xy} & -(S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx} \\ -(S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xx} & -(S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xy} \\ (S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xy} & -(S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx} \\ -(S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xx} & -(S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{B-25})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \Gamma^{xx} & \Gamma^{xy} \\ \Gamma^{xy} & \Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy} & S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy} \\ S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy} & S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & -W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} (S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xy} & -(S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx} \\ -(S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx} & -(S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xy} \\ (S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xy} & -(S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xx} \\ -(S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx} & -(S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{B-26})
\end{aligned}$$

$$\mathbf{W}\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & -W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{B-27})$$

e

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S} &= \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & -W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & -W^{xy}(S^{xx})^2 - W^{xy}(S^{xy})^2 \\ W^{xy}(S^{xx})^2 + W^{xy}(S^{xy})^2 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{B-28})
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
 \{\mathbf{S}\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\} &= [(S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xy} - (S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xx}] \\
 &\quad + [-(S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx} - (S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xy}] \\
 &= [S^{xx}S^{xy}\Gamma^{xx}W^{xy} + (S^{xy})^2\Gamma^{xy}W^{xy} - (S^{xx})^2\Gamma^{xy}W^{xy} - S^{xx}S^{xy}\Gamma^{yy}W^{xy}] \\
 &\quad + [-S^{xx}S^{xy}\Gamma^{xx}W^{xy} + (S^{xx})^2\Gamma^{xy}W^{xy} - (S^{xy})^2\Gamma^{xy}W^{xy} + S^{xx}S^{xy}\Gamma^{yy}W^{xy}] \\
 &= 0, \tag{B-29}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \{\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\} &= [(S^{xx}\Gamma^{xx} + S^{xy}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xy} - (S^{xy}\Gamma^{xx} - S^{xx}\Gamma^{xy})W^{xy}S^{xx}] \\
 &\quad + [-(S^{xx}\Gamma^{xy} + S^{xy}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xx} - (S^{xy}\Gamma^{xy} - S^{xx}\Gamma^{yy})W^{xy}S^{xy}] \\
 &= [S^{xx}S^{xy}\Gamma^{xx}W^{xy} + (S^{xy})^2\Gamma^{xy}W^{xy} - S^{xx}S^{xy}\Gamma^{xx}W^{xy} + (S^{xx})^2\Gamma^{xy}W^{xy}] \\
 &\quad + [-(S^{xx})^2\Gamma^{xy}W^{xy} - S^{xx}S^{xy}\Gamma^{yy}W^{xy} - (S^{xy})^2\Gamma^{xy}W^{xy} + S^{xx}S^{xy}\Gamma^{yy}W^{xy}] \\
 &= 0, \tag{B-30}
 \end{aligned}$$

$$\{\mathbf{W}\mathbf{S}\} = W^{xy}S^{xy} - W^{xy}S^{xy} = 0, \tag{B-31}$$

$$\{\mathbf{S}\mathbf{W}\mathbf{S}\} = 0. \tag{B-32}$$

Agora, multiplicando as matrizes:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{\Gamma}\mathbf{W}^2\mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \Gamma^{xx} & \Gamma^{xy} \\ \Gamma^{xy} & \Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -\Gamma^{xy}W^{xy} & \Gamma^{xx}W^{xy} \\ -\Gamma^{yy}W^{xy} & \Gamma^{xy}W^{xy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & -W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -\Gamma^{xy}(W^{xy})^2S^{xy} - \Gamma^{xx}(W^{xy})^2S^{xx} & \Gamma^{xy}(W^{xy})^2S^{xx} - \Gamma^{xx}(W^{xy})^2S^{xy} \\ -\Gamma^{yy}(W^{xy})^2S^{xy} - \Gamma^{xy}(W^{xy})^2S^{xx} & \Gamma^{yy}(W^{xy})^2S^{xx} - \Gamma^{xy}(W^{xy})^2S^{xy} \end{bmatrix}, \tag{B-33}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{W}\mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S} &= \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma^{xx} & \Gamma^{xy} \\ \Gamma^{xy} & \Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} W^{xy}\Gamma^{xy} & W^{xy}\Gamma^{yy} \\ -W^{xy}\Gamma^{xx} & -W^{xy}\Gamma^{xy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^{xy}S^{xy} & -W^{xy}S^{xx} \\ -W^{xy}S^{xx} & -W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} (W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xy} - (W^{xy})^2\Gamma^{yy}S^{xx} & -(W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xx} - (W^{xy})^2\Gamma^{yy}S^{xy} \\ -(W^{xy})^2\Gamma^{xx}S^{xy} + (W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xx} & (W^{xy})^2\Gamma^{xx}S^{xx} + (W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \tag{B-34}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 \mathbf{\Gamma}\mathbf{W}\mathbf{S}\mathbf{W} &= \begin{bmatrix} \Gamma^{xx} & \Gamma^{xy} \\ \Gamma^{xy} & \Gamma^{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{xx} & S^{xy} \\ S^{xy} & -S^{xx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & W^{xy} \\ -W^{xy} & 0 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} -W^{xy}\Gamma^{xy} & W^{xy}\Gamma^{xx} \\ -W^{xy}\Gamma^{yy} & W^{xy}\Gamma^{xy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -W^{xy}S^{xy} & W^{xy}S^{xx} \\ W^{xy}S^{xx} & W^{xy}S^{xy} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} (W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xy} + (W^{xy})^2\Gamma^{xx}S^{xx} & -(W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xx} + (W^{xy})^2\Gamma^{xx}S^{xy} \\ (W^{xy})^2\Gamma^{yy}S^{xy} + (W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xx} & -(W^{xy})^2\Gamma^{yy}S^{xx} + (W^{xy})^2\Gamma^{xy}S^{xy} \end{bmatrix}. \tag{B-35}
 \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\} &= -(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} - (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} + (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx} - (W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} \\
&= -[(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} + (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} - (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx} + (W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy}] \\
&= -\{\mathbf{W \Gamma W S}\}
\end{aligned} \tag{B-36}$$

e

$$\begin{aligned}
2\{\mathbf{\Gamma W}^2 \mathbf{S}\} + \{\mathbf{\Gamma W S W}\} &= 2[-(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} - (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} + (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx} \\
&\quad - (W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy}] + [(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} + (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} \\
&\quad - (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx} + (W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy}] \\
&= 2[-2(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} - (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} + (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx}] \\
&\quad + [2(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} + (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} - (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx}] \\
&= -2(W^{xy})^2 \Gamma^{xy} S^{xy} - (W^{xy})^2 \Gamma^{xx} S^{xx} + (W^{xy})^2 \Gamma^{yy} S^{xx} \\
&= \frac{1}{2} [\Gamma^{xx} S^{xx} + 2\Gamma^{xy} S^{xy} - \Gamma^{yy} S^{xx}] [-2(W^{xy})^2] \\
&= \frac{1}{2} \{\mathbf{\Gamma S}\} \{\mathbf{W}^2\}.
\end{aligned} \tag{B-37}$$