



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”

Faculdade de Ciências e Tecnologia
Câmpus de Presidente Prudente

Aplicação da Transformação Núcleo-Conformação na Estabilidade de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos

Beatriz Liara Carreira

Orientadora: Profa. Dra. Analice Costacurta Brandi

Programa: Matemática Aplicada e Computacional

Presidente Prudente, Setembro de 2020

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

**Aplicação da Transformação
Núcleo-Conformação na Estabilidade de
Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos**

Beatriz Liara Carreira

Orientadora: Profa. Dra. Analice Costacurta Brandi

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, Setembro de 2020

C314a	Carreira, Beatriz Liara Aplicação da transformação núcleo-conformação na estabilidade de escoamentos de fluidos viscoelásticos / Beatriz Liara Carreira. -- Presidente Prudente, 2020 116 f. : il., tabs. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (Unesp), Faculdade de Ciências e Tecnologia, Presidente Prudente Orientadora: Analice Costacurta Brandi 1. Problema do alto número de Weissenberg. 2. Tensor conformação. 3. Simulação numérica direta. 4. Fluido viscoelástico. I. Título.
-------	---

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca da Faculdade de Ciências e Tecnologia, Presidente Prudente. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Aplicação da Transformação Núcleo-Conformação na Estabilidade de Escoamentos de Fluidos Viscoelásticos

AUTORA: BEATRIZ LIARA CARREIRA

ORIENTADORA: ANALICE COSTACURTA BRANDI

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestra em MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, pela Comissão Examinadora:

Profa. Dra. ANALICE COSTACURTA BRANDI

Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

A handwritten signature in blue ink, reading "Analice Costacurta Brandi", is placed over the printed name of the supervisor.

Prof. Dr. MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR

Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

VIDEOCONFERÊNCIA

Prof. Dr. ANTONIO CASTELO FILHO

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação / Universidade de São Paulo

VIDEOCONFERÊNCIA

Presidente Prudente, 28 de setembro de 2020

*Aos meus pais e minha irmã,
dedico.*

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus pela vida, por cada oportunidade e por ter permitido que eu chegasse até aqui.

Em especial aos meus pais, Arlindo e Silvana, por todo amor, dedicação e carinho, por sempre acreditarem em mim. Todas as minhas conquistas dedico a vocês.

Agradeço à minha irmã, Bianca, pela confiança, amor e compreensão.

À Profa. Dra. Analice Costacurta Brandi pela orientação e incentivo. Sou grata por todo conhecimento compartilhado comigo, além de todo apoio, paciência e carinho.

Ao Prof. Dr. Leandro Franco de Souza do ICMC-USP pela colaboração no desenvolvimento desta dissertação e também aos seus alunos, Laison e Matheus.

Aos professores Cassio Oishi e Marilaine Colnago, por terem aceitado o convite para participar da banca de qualificação, e principalmente por todas as contribuições que foram dadas.

Aos professores do Departamento de Matemática e Computação da Unesp de Presidente Prudente pelos ensinamentos durante a Graduação e o Mestrado, e pela convivência.

Aos meus amigos, Rafael e Leticia, por todo apoio, companheirismo e pela amizade. Também agradeço aos amigos do mestrado, pelas conversas e por terem tornado esse período mais leve. Desejo sucesso na caminhada de vocês.

Finalmente, agradeço a todos que colaboraram direta ou indiretamente para o desenvolvimento deste trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

*O sucesso nasce do querer,
da determinação e persistência
em se chegar a um objetivo.
Mesmo não atingindo o alvo,
quem busca e vence obstáculos
no mínimo fará coisas admiráveis.*
José de Alencar

Resumo

O Problema do Alto Número de Weissenberg (HWNP) consiste na ocorrência de um colapso dos esquemas numéricos aplicados na solução da equação constitutiva para fluidos não-Newtonianos, que pode acarretar no surgimento de instabilidades ou na não-convergência da solução. No decorrer de décadas, vários estudos dedicaram-se a identificar as causas e desenvolver métodos estabilizadores deste problema. Uma formulação, chamada núcleo-conformação, ganhou destaque na literatura e admite o uso de transformações aplicadas ao tensor conformação, preservando suas propriedades necessárias para garantia da convergência dos métodos. Desse modo, o objetivo do presente trabalho é aplicar a formulação núcleo-conformação como técnica estabilizadora do Problema do Alto Número de Weissenberg no escoamento de Poiseuille bidimensional para fluido incompressível e viscoelástico do tipo Giesekus, a fim de investigar a estabilidade hidrodinâmica desses escoamentos, observando a amplificação e/ou amortecimento das ondas de Tollmien-Schlichting na transição laminar-turbulenta. Simulações numéricas foram realizadas utilizando a Simulação Numérica Direta com diferentes técnicas de estabilização, variando os parâmetros adimensionais para o escoamento de fluido viscoelástico e comparando com simulações de fluidos Newtonianos.

Palavras-Chave: *Problema do Alto Número de Weissenberg, Tensor Conformação, Simulação Numérica Direta, Fluido Viscoelástico.*

Abstract

The Weissenberg High Number Problem (HWNP) consists in the collapse of the numerical schemes applied in the constitutive equation solution for non-Newtonian fluids, which can cause instability or non-convergence of the solution. Over time, several studies have focused on identifying the causes and developing stabilizing methods for this problem. A formulation, called kernel-conformation, has highlight in the literature and admits the use of transformations applied to the conformation tensor, preserving its properties necessary to guarantee the convergence of the methods. Furthermore, the aim of the present work is to apply the kernel-conformation formulation as a stabilizing technique of the High Weissenberg Number Problem in two-dimensional Poiseuille flow of incompressible and Giesekus viscoelastic fluid, in order to investigate the hydrodynamic stability of these flows, observing the amplification and/or damping of Tollmien-Schlichting waves in the laminar-turbulent transition. Numerical simulations were performed using different stabilization techniques, varying the dimensionless parameters for the viscoelastic fluid flow and comparing with simulations of Newtonian fluids.

Keywords: *High Weissenberg Number Problem, Conformation Tensor, Direct Numerical Simulation, Viscoelastic Fluid.*

Lista de Figuras

2.1	Escoamento totalmente desenvolvido.	34
4.1	Domínio computacional do escoamento de Poiseuille 2D.	50
4.2	Amplitude de distribuição da componente normal de velocidade.	51
4.3	Efeito de aplicar a função f_2 de relaminarização n vezes, segundo Meitz [36].	55
4.4	Efeito de aplicar a função f_3 de relaminarização n vezes, segundo Meitz [36].	55
5.1	Solução numérica (Giesekus com $\alpha_G = 0$) e analítica (Oldroyd-B) para o escoamento base: (a) Tensor T_{11} e (b) Tensor T_{12}	60
5.2	Caso 1 – erro entre a solução analítica (Oldroyd-B) e numérica utilizando DNS (Giesekus com $\alpha_G = 0$).	61
5.3	Caso 2 – erro entre a solução analítica (Oldroyd-B) e numérica utilizando DNS (Giesekus com $\alpha_G = 0$).	62
5.4	Componente da velocidade na direção do escoamento utilizando a formulação log-conformação: (a) perfil de velocidade $U(y)$ e (b) ampliação do perfil de velocidade $U(y)$	63
5.5	Componentes do tensor não-Newtoniano do escoamento utilizando a formulação log-conformação: tensores (a) T_{11} ; (b) T_{12} e (c) T_{22}	64
5.6	Componente da velocidade na direção do escoamento utilizando a formulação raiz quadrada-conformação: (a) perfil de velocidade $U(y)$ e (b) ampliação do perfil de velocidade $U(y)$	65
5.7	Componentes do tensor não-Newtoniano do escoamento utilizando a formulação raiz quadrada-conformação: tensores (a) T_{11} ; (b) T_{12} e (c) T_{22}	66
5.8	Desvio entre as soluções numéricas utilizando log-conformação e raiz quadrada-conformação: (a) velocidade $U(y)$; (b) tensor T_{11} ; (c) tensor T_{12} e (d) tensor T_{22}	67
5.9	Componente da velocidade na direção do escoamento utilizando a formulação log-conformação: (a) perfil de velocidade $U(y)$ e (b) ampliação do perfil de velocidade $U(y)$	68
5.10	Componentes do tensor não-Newtoniano do escoamento utilizando a formulação log-conformação: tensores (a) T_{11} ; (b) T_{12} e (c) T_{22}	69
5.11	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	72
5.12	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	73
5.13	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	74

5.14	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	75
5.15	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	76
5.16	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	77
5.17	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	78
5.18	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.	79
5.19	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 3000$, $\alpha_G = 0.20$, $\beta = 0.70$ e diferentes valores de Wi	80
5.20	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 6000$, $\alpha_G = 0.20$, $\beta = 0.90$ e diferentes valores de Wi	80
5.21	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 9000$, $\alpha_G = 0.20$, $\beta = 0.90$ e diferentes valores de Wi	81
5.22	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para $Re = 2000$ e diferentes valores de α_G	82
5.23	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para $Re = 5000$ e diferentes valores de α_G	82
5.24	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para $Re = 8000$ e diferentes valores de α_G	83
5.25	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de β	84
5.26	Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de β	85
5.27	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 2000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.25$ e variações de Wi	86
5.28	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 2000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.75$ e variações de Wi	87
5.29	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 5000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.50$ e variações de Wi	88
5.30	Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 5000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.90$ e variações de Wi	89

Lista de Tabelas

5.1	Tempo de execução dos programas.	71
-----	--	----

Lista de Siglas

DNS: Simulação Numérica Direta.

FAS: Esquema de Aproximação Total.

HWNP: Problema do Alto Número de Weissenberg.

Sumário

Resumo	7
Abstract	9
Lista de Figuras	10
Lista de Tabelas	12
Lista de Siglas	15
1 Introdução	19
2 Formulação Matemática	23
2.1 Equações Governantes	23
2.1.1 Modelos Newtoniano e não-Newtoniano	23
2.2 Modelo Giesekus	26
2.3 Adimensionalização	28
2.4 Simulação Numérica Direta	31
2.4.1 Condições Auxiliares	34
2.5 Escoamento Base	34
3 Formulação do Tensor Conformação	39
3.1 Formulação Núcleo-Conformação	41
3.1.1 Função $\log_d$ Núcleo-Conformação	47
3.1.2 Função Raiz k -ésima Núcleo-Conformação	48
4 Método Numérico	49
4.1 Simulação Numérica Direta	49
4.2 Introdução de Perturbações	50
4.3 Aproximação Numérica de Derivadas Temporais	51
4.4 Aproximação Numérica de Derivadas Espaciais	52
4.5 Amortecimento de Reflexões na Entrada do Escoamento	53
4.6 Relaminarização do Escoamento	53
4.7 Cálculo da Vorticidade na Parede	55
4.8 Algoritmo Numérico	56
5 Resultados	59
5.1 Verificação do Código	59
5.2 Escoamento Base	62
5.3 Análise de Estabilidade	70
5.3.1 Variação do Número de Weissenberg	70

5.3.2	Variação do parâmetro α_G	81
5.3.3	Variação da Constante β	83
6	Conclusões	91
	Referências	92
A	Outras Formulações Baseadas na Decomposição do Tensor Conformação	97
A.1	Decomposição Logaritmo-Conformação	97
A.2	Decomposição Raiz Quadrada-Conformação	101
A.2.1	Determinação da Matriz $\mathbf{G}$	103
B	Decomposições Matriciais	107
B.1	Decomposição Logaritmo	107
B.2	Decomposição Raiz Quadrada	112
B.3	Formulação Núcleo-Conformação	113

Introdução

A Dinâmica dos Fluidos Computacional é a área da computação científica que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos envolvendo o movimento de fluidos [19], sendo cada vez mais empregada como ferramenta para modelagem e simulação de escoamentos que tem interesse dentro da indústria. Tal relevância está presente nos setores químicos, alimentícios, petrolíferos, aeronáuticos e inclusive na medicina. Dentre as aplicações industriais o comportamento das propriedades reológicas são de grande importância no processamento e fabricação de produtos poliméricos, por exemplo [47].

Uma dessas propriedades é a viscoelasticidade – característica de materiais que reúnem propriedades viscosas e elásticas ao mesmo tempo. Os materiais viscoelásticos representam uma parte dos fluidos conhecidos como não-Newtonianos e apresentam alguma resistência à deformação ou ao escoamento uma vez submetidos a certa tensão.

A literatura registra o desenvolvimento de vários modelos constitutivos de fluidos viscoelásticos, tais como os diferenciais de Maxwell [5, 37], Oldroyd-B [8, 37, 40, 41], White-Metzner [53], Giesekus [22], Leonov [33], FENE-P [6], FENE-CR [11], PTT [39, 41] e derivados, Pom Pom [31] e derivados; e os modelos integrais: Maxwell [29] e K-BKZ [34, 35]. O modelo de Maxwell foi uma das primeiras tentativas de descrever o efeito da viscoelasticidade de um determinado fluido. Esse modelo incorpora a ideia de um fluido que apresenta características tanto de um sólido elástico Hookeano, como de um fluido viscoso Newtoniano.

Este trabalho em particular dedica-se à investigação da estabilidade hidrodinâmica do escoamento [7], com o objetivo de prever mudanças que ocorram no regime de escoamento laminar de um fluido levando-o potencialmente ao regime turbulento. Este processo, conhecido como transição laminar-turbulenta, é extremamente complexo e na atualidade ainda não é completamente compreendido, principalmente para escoamentos de fluidos não-Newtonianos.

Há muitos trabalhos de escoamentos em canais de fluidos viscoelásticos na literatura. Os escoamentos de Poiseuille e de Couette são geralmente utilizados como testes de *benchmark* para as novas equações constitutivas [24, 22, 52], havendo muito interesse em instabilidades nesse tipo de escoamentos viscoelásticos [26, 25, 43, 44, 23, 9, 2, 56]. No entanto, ainda hoje, o escoamento de Poiseuille não foi amplamente estudado, tendo algumas questões sem respostas, principalmente na área de estabilidade de fluidos viscoelásticos.

Existem diversas grandezas adimensionais em Mecânica dos Fluidos que podem ser empregadas para caracterizar um escoamento. Um dos parâmetros adimensionais que está relacionado ao escoamento de fluidos viscoelásticos é o número de Weissenberg, que quantifica a relação entre o tempo de relaxação do fluido e um tempo de relaxação caracte-

rístico do escoamento. Em outras palavras, este parâmetro mensura o nível de elasticidade em uma determinada condição de escoamento.

Apesar do impetuoso esforço e notável progresso na simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos, problemas de instabilidade numérica vem surgindo juntamente com estes avanços [38]. Em especial, uma dificuldade está diretamente relacionada com o parâmetro anteriormente mencionado, conhecida como Problema do Alto Número de Weissenberg ou em inglês “High Weissenberg Number Problem” (HWNP).

O HWNP consiste no fato de que os esquemas numéricos utilizados para simulações de escoamentos viscoelásticos entram em colapso a partir de certo valor crítico do número de Weissenberg, que depende em geral de fatores como o tipo de escoamento, a geometria do problema, o esquema de discretização espacial e o algoritmo numérico [12]. A questão é que este valor crítico é bastante baixo se comparado aos valores de interesse prático, como por exemplo, aqueles que podem ser atingidos em escoamentos tipicamente encontrados no processamento de materiais poliméricos [3].

Apesar de pouco compreendido, uma das causas do HWNP do ponto de vista numérico está relacionada à perda da positividade dos tensores. Segundo Dupret e Marchal [13], o caráter evolutivo de um sistema é um requisito que deve ser mantido, independente do modelo considerado. E mostraram ainda que um dos critérios que devem ser satisfeitos para que isto ocorra está relacionado à positividade do tensor extra-tensão.

Uma abordagem que emergiu na tentativa de solucionar o problema relacionado ao alto número de Weissenberg formula o modelo a partir do tensor conformação, devido às suas propriedades de ser simétrico e definido positivo [27, 28]. Hulsen [28] também evidenciou a importância de que as boas propriedades deste tensor não fossem violadas, caso contrário instabilidades numéricas poderiam surgir. Neste mesmo trabalho, provou que o tensor conformação permanece simétrico e definido positivo se assim for inicializado.

Neste sentido, Vaithianathan e Collins [51] apresentaram dois métodos a partir da construção de equações evolutivas para o tensor conformação. O primeiro, chamado de decomposição espectral, concentrou-se em escrever uma equação de evolução para os autovalores e autovetores do tensor, enquanto que o segundo método consiste na construção de uma equação evolutiva para a matriz triangular inferior derivada da decomposição de Cholesky aplicada ao tensor conformação.

Segundo Vaithianathan e Collins [51], com esses métodos evitou-se muitos problemas observados em simulações anteriores, e ainda, garantiu-se a expansão da gama de parâmetros que poderiam ser simulados. Mais tarde, os métodos que haviam sido aplicados ao modelo FENE-P também foram testados para os modelos Oldroyd-B e Giesekus [50].

Os trabalhos de Fattal e Kupferman [15, 16] também ganharam destaque devido à construção de uma equação constitutiva em termos do logaritmo do tensor conformação. De acordo com os autores, a transformação logarítmica remove instabilidades que levaram os cálculos numéricos a explodir ou os solucionadores lineares a não convergirem [15].

Uma outra formulação baseada na decomposição do tensor conformação foi apresentada por Balci et al. [4]. Desta vez, a ideia foi aplicar uma decomposição do tipo raiz quadrada ao tensor conformação. Segundo os autores esta técnica é facilmente implementada em simulações numéricas diretas, resultando em vantagens práticas significativas em termos de precisão e estabilidade.

Recentemente, Afonso et al. [1] apresentaram uma transformação núcleo genérica do tensor conformação para uma grande classe de modelos constitutivos diferenciais. Essa técnica, que ficou conhecida como “kernel-conformation” engloba as formulações log-conformação proposta por Fattal e Kupferman [15, 16] e raiz quadrada-conformação sugerida por Balci et al. [4]. Os autores concluíram que a eficiência numérica desta formulação em problemas com número de Weissenberg elevado está relacionada ao comportamento

característico da função núcleo (“kernel”) selecionada e, em particular, à sua capacidade de equilibrar numericamente o crescimento exponencial e a convecção do campo do tensor conformação. Naturalmente, também é relevante preservar a propriedade definida positiva do tensor conformação.

Apesar disso, nenhum destes trabalhos estuda o fenômeno de transição laminar-turbulenta, e nem dedica-se a realizar análise de estabilidade para problemas com alto número de Weissenberg. Neste contexto, este trabalho tem como principal objetivo aplicar a transformação núcleo-conformação no escoamento de Poiseuille incompressível, bidimensional, de um fluido viscoelástico, em especial, do modelo Giesekus. Com isso, permite-se investigar o fenômeno de transição para a turbulência por meio da técnica de Simulação Numérica Direta, a fim de analisar a estabilidade do escoamento do fluido Giesekus simulado com altos números de Weissenberg.

O texto está organizado da seguinte maneira: no Capítulo 2 são apresentadas as equações governantes para um escoamento bidimensional, incompressível e isotérmico, para fluidos Newtoniano e não-Newtoniano, com ênfase no modelo viscoelástico Giesekus. As equações a princípio são apresentadas na sua forma dimensional, e o processo de adimensionalização também é mostrado. Ainda neste capítulo, apresenta-se o desenvolvimento da formulação vorticidade-velocidade utilizada na Simulação Numérica Direta.

No Capítulo 3 apresenta-se a técnica núcleo-conformação para estabilização do HWNP, que foi desenvolvida por Afonso et al. [1] e que é explorada neste trabalho por ser mais abrangente e por considerar outras decomposições como casos particulares. Mais detalhes sobre as formulações baseadas na decomposição logaritmo-conformação apresentada por Fattal e Kupferman [15, 16] e decomposição raiz quadrada-conformação desenvolvida por Balci et al. [4], apesar de não serem objeto de estudo neste trabalho, podem ser encontrados nos Apêndices A.1 e A.2, respectivamente.

Posteriormente, no Capítulo 4 constam os métodos numéricos utilizados para a solução das equações governantes aplicando a técnica de Simulação Numérica Direta. No Capítulo 5 são apresentados os resultados numéricos obtidos utilizando a Simulação Numérica Direta: a verificação do código implementado, através da comparação com resultados do modelo Oldroyd-B, e a análise da estabilidade, com variação dos parâmetros adimensionais. E finalmente, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões do trabalho, e também algumas perspectivas de continuidade deste estudo.

Formulação Matemática

Neste capítulo são apresentadas as equações governantes para escoamentos incompressíveis e isotérmicos. A princípio, descreve-se o modelo Newtoniano, antes de tratar do modelo não-Newtoniano de interesse. Em particular, a equação constitutiva do modelo viscoelástico Giesekus, considerado neste trabalho é apresentada. Tendo em vista ainda o tratamento numérico das equações e o processo de caracterização do escoamento, todas as equações são adimensionalizadas. Finalmente, uma abordagem sobre a formulação vorticidade-velocidade utilizada posteriormente na Simulação Numérica Direta é realizada.

2.1 Equações Governantes

Considerando um escoamento incompressível e isotérmico, as equações governantes são dadas pelas equações da continuidade e de Navier-Stokes (conservação do momento), respectivamente,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.2)$$

Em um sistema de coordenadas cartesianas bidimensionais xOy , observa-se que t é o tempo ($t \geq 0$), $\mathbf{u} = [u, v]$ representa o campo de velocidade com $u = u(x, y, t)$ e $v = v(x, y, t)$ sendo suas componentes ao longo das coordenadas x e y , respectivamente, ρ é a densidade do fluido que é constante devido ao escoamento ser incompressível e $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(x, y, t)$ é o tensor tensão total, definido por

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}, \quad (2.3)$$

onde $p = p(x, y, t)$ é a pressão, $\mathbf{I}$ é o tensor identidade e $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}(x, y, t)$ é o tensor simétrico das tensões $\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{12} & \tau_{22} \end{bmatrix}$.

2.1.1 Modelos Newtoniano e não-Newtoniano

Algumas características dos fluidos que estão relacionadas com suas propriedades físicas são capazes de influenciar certos fatores que são relevantes em um escoamento, como

por exemplo o fluxo do material, a taxa de deformação, etc. Essas características são importantes do ponto de vista que classificam os fluidos em Newtoniano e não-Newtoniano.

No modelo do fluido Newtoniano, o tensor simétrico das tensões é linearmente proporcional ao tensor taxa de deformação, isto é,

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{D}, \quad (2.4)$$

sendo η_s a viscosidade do solvente Newtoniano, enquanto $\mathbf{D}$ é o tensor taxa de deformação

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top). \quad (2.5)$$

Em coordenadas cartesianas bidimensionais, este tensor pode ser escrito como

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

Agora, substituindo (2.4) em (2.3) é possível calcular o divergente presente na equação do momento (2.2) dado por

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) = \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{D} - p\mathbf{I}) = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} 2\eta_s \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} = \\ &= \eta_s \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{bmatrix} = \\ &= \eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} = \\ &= \eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} & 2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} = \\ &= \eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} & 2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Segue diretamente da equação da continuidade (2.1) que $\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial v}{\partial y}$. Dessa forma, algumas substituições permitem escrever

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} & 2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} = \\ &= \eta_s \begin{bmatrix} 2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} & 2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} = \\ &= \eta_s \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} & \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Desenvolvendo o lado esquerdo da equação do momento (2.2), segue que

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = \rho \left(\left[\frac{\partial u}{\partial t} \quad \frac{\partial v}{\partial t} \right] + \left[\frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} \quad \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right] \right).$$

Portanto, em coordenadas cartesianas bidimensionais, a equação do momento nas direções x e y pode ser escrita, respectivamente, como

$$\rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right], \quad (2.7)$$

$$\rho \left[\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right], \quad (2.8)$$

além da equação da continuidade, que é dada por

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.9)$$

Para os fluidos que não apresentam uma linearidade entre a taxa de deformação e a tensão de cisalhamento são propostos modelos que variam de acordo com seu comportamento reológico. Fluidos desse tipo são chamados não-Newtonianos e possuem viscosidade dinâmica variante de acordo com a taxa de deformação aplicada.

Em muitos modelos propostos para fluidos não-Newtonianos, o tensor das tensões é definido como a soma da contribuição Newtoniana e da contribuição não-Newtoniana. Para fluidos viscoelásticos, define-se o tensor como sendo [47]

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_s \mathbf{D} + \mathbf{T}, \quad (2.10)$$

onde η_s é a viscosidade do solvente Newtoniano, enquanto $\mathbf{D}$ é o tensor taxa de deformação definido em (2.5) e $\mathbf{T}$ representa a contribuição não-Newtoniana através do tensor simétrico extra-tensão

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Dessa forma, o divergente do lado direito da equação do momento (2.2) torna-se

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) = \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{D} + \mathbf{T} - p\mathbf{I}) = \nabla \cdot (2\eta_s \mathbf{D} - p\mathbf{I}) + \nabla \cdot \mathbf{T} \\ &= \eta_s \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right] - \left[\frac{\partial p}{\partial x} \quad \frac{\partial p}{\partial y} \right] + \nabla \cdot \mathbf{T}. \end{aligned}$$

Calculando $\nabla \cdot \mathbf{T}$, segue

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}}{\partial y} & \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

Consequentemente, em coordenadas cartesianas bidimensionais, a equação da continuidade e a equação do momento nas direções x e y para fluidos não-Newtonianos podem ser escritas, respectivamente, como

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.12)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}}{\partial y}, \quad (2.13)$$

$$\rho \left[\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta_s \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y}. \quad (2.14)$$

2.2 Modelo Giesekus

Neste trabalho trata-se do estudo do escoamento do fluido viscoelástico modelado pela equação constitutiva não linear do modelo Giesekus [22]. Os fluidos deste modelo têm comportamento físico caracterizado por

$$\mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (2.15)$$

onde η_p é o coeficiente de viscosidade polimérica, λ o tempo de relaxação do fluido e α_G o parâmetro de mobilidade que regula o comportamento “shear thinning” (cisalhamento fino ou pseudoplasticidade) do fluido ($0 \leq \alpha_G \leq 1$). Este comportamento está relacionado à capacidade do fluido de recuperar viscosidade desde que o cisalhamento seja removido, e é percebido quando esta recuperação ocorre muito rapidamente. Enquanto isso, $\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}$ é um produto tensorial e $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}$ é a derivada convectada, dada por

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \frac{D\mathbf{T}}{Dt} - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T}, \quad (2.16)$$

sendo que $\frac{D\mathbf{T}}{Dt}$ representa a derivada material de $\mathbf{T}$, que corresponde a

$$\frac{D\mathbf{T}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{T}. \quad (2.17)$$

Para reescrever o modelo constitutivo Giesekus, em coordenadas cartesianas bidimensionais, primeiramente substitui as equações (2.17) e (2.16) em (2.15)

$$\begin{aligned} \mathbf{T} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}} + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) &= 2\eta_p \mathbf{D} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{T} + \lambda \left[\frac{D\mathbf{T}}{Dt} - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} \right] + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) &= 2\eta_p \mathbf{D} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{T} + \lambda \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{T} - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} \right] + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) &= 2\eta_p \mathbf{D}. \end{aligned}$$

Desenvolvendo a equação da derivada material (2.17), segue que

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{T}}{Dt} &= \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{T} = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} + \left[u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right] \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial t} & \frac{\partial T_{12}}{\partial t} \\ \frac{\partial T_{12}}{\partial t} & \frac{\partial T_{22}}{\partial t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} & u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} \\ u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} & u \frac{\partial T_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{22}}{\partial y} \end{bmatrix} = \end{aligned}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} & \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} \\ \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} & \frac{\partial T_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{22}}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

Consequentemente, a derivada convectada (2.16) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{\mathbf{T}} &= \frac{D\mathbf{T}}{Dt} - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} & \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} \\ \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} & \frac{\partial T_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{22}}{\partial y} \end{bmatrix} + \\ &- \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \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} - \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} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} & \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} \\ \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} & \frac{\partial T_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{22}}{\partial y} \end{bmatrix} + \\ &- \begin{bmatrix} T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} & T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial v}{\partial y} \\ T_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} & T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} & T_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \\ T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial v}{\partial y} & T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Além disso, se o produto tensorial for definido como um produto entre duas matrizes, então

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11}^2 + T_{12}^2 & T_{11}T_{12} + T_{12}T_{22} \\ T_{11}T_{12} + T_{12}T_{22} & T_{12}^2 + T_{22}^2 \end{bmatrix}.$$

Portanto, a equação do modelo Giesekus (2.15) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12} & T_{22} \end{bmatrix} + \lambda \left(\begin{bmatrix} \frac{\partial T_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} & \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} \\ \frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} & \frac{\partial T_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{22}}{\partial y} \end{bmatrix} + \right. \\ &- \begin{bmatrix} T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} & T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial v}{\partial y} \\ T_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} & T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} & T_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \\ T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{12} \frac{\partial v}{\partial y} & T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \Bigg) + \\ &+ \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} \begin{bmatrix} T_{11}^2 + T_{12}^2 & T_{11}T_{12} + T_{12}T_{22} \\ T_{11}T_{12} + T_{12}T_{22} & T_{12}^2 + T_{22}^2 \end{bmatrix} = \eta_p \begin{bmatrix} 2 \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & 2 \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Agora, levando em consideração que $\mathbf{T}$ é um tensor simétrico e utilizando a equação da continuidade (2.9), obtém-se as seguintes equações para os tensores não-Newtonianos do modelo Giesekus

$$T_{11} + \lambda \left(\frac{\partial T_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} - 2T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} - 2T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (T_{11}^2 + T_{12}^2) = 2\eta_p \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (2.18)$$

$$T_{12} + \lambda \left(\frac{\partial T_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{12}}{\partial y} - T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} - T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} [T_{12} (T_{11} + T_{22})] = \eta_p \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad (2.19)$$

$$T_{22} + \lambda \left(\frac{\partial T_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{22}}{\partial y} - 2T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} - 2T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (T_{12}^2 + T_{22}^2) = 2\eta_p \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (2.20)$$

2.3 Adimensionalização

No tratamento de problemas em Dinâmica dos Fluidos Computacional é comum que grandezas dimensionais específicas, tais como velocidade, diâmetro do tubo ou comprimento do canal sejam agrupadas em parâmetros adimensionais, que passam a caracterizar o escoamento. Esse processo possibilita não só mostrar os efeitos físicos, bem como formular o modelo para o problema independente do sistema de unidades de medidas e se dá através da adimensionalização das equações, considerando as seguintes mudanças de variáveis

$$\mathbf{x} = L\mathbf{x}^*, \quad t = \frac{Lt^*}{U}, \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}^* \rho U^2, \quad p = p^* \rho U^2, \quad \mathbf{u} = U\mathbf{u}^*, \quad (2.21)$$

onde L representa o comprimento do canal, U a velocidade e ρ a densidade, sendo as variáveis adimensionais escalares acrescidas do sobrescrito (*).

Como é conhecido, durante as manipulações algébricas do processo de adimensionalização surgem alguns parâmetros adimensionais:

Número de Reynolds (Re): Representa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas do escoamento e é definido por

$$Re = \frac{\rho U L}{\eta_0}, \quad (2.22)$$

onde η_0 é a viscosidade total do fluido, dada por $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$, sendo que η_s é a viscosidade do solvente e η_p a viscosidade do polímero.

Número de Weissenberg (Wi): Para um fluido viscoelástico, trata-se da razão entre uma escala de tempo característica do fluido e uma escala de tempo do escoamento, e pode ser dado por

$$Wi = \frac{\lambda U}{L}. \quad (2.23)$$

Constante β : A constante $\beta \in (0, 1)$ é uma quantidade que controla a contribuição do solvente Newtoniano, definida como

$$\beta = \frac{\eta_s}{\eta_0}. \quad (2.24)$$

A dedução das equações de conservação e dos tensores não-Newtonianos na sua forma adimensional é realizada fazendo a substituição das variáveis adimensionais (2.21) e manipulando os termos algebricamente.

A equação da continuidade (2.9) em sua forma adimensional, torna-se

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial(Uu^*)}{\partial(Lx^*)} + \frac{\partial(Uv^*)}{\partial(Ly^*)} = 0 \Rightarrow \frac{U}{L} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} \right) = 0. \quad (2.25)$$

Como L é o comprimento do canal, então $L \neq 0$, e U é a velocidade no interior do canal, então segue que $U \neq 0$, e portanto $\frac{U}{L} \neq 0$. Assim, a equação da continuidade na forma adimensional pode ser escrita como

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0. \quad (2.26)$$

A dedução da equação do momento na sua forma adimensional segue o mesmo princípio

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} \right] &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta_s \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}}{\partial y} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \rho \left[\frac{\partial(Uu^*)}{\partial(\frac{Lt^*}{U})} + \frac{\partial(Uu^*Uu^*)}{\partial(Lx^*)} + \frac{\partial(Uv^*Uu^*)}{\partial(Ly^*)} \right] = -\frac{\partial(p^*\rho U^2)}{\partial(Lx^*)} + \\ &+ \eta_s \left[\frac{\partial^2(Uu^*)}{\partial(Lx^*)^2} + \frac{\partial^2(Uu^*)}{\partial(Ly^*)^2} \right] + \frac{\partial(T_{11}^*\rho U^2)}{\partial(Lx^*)} + \frac{\partial(T_{12}^*\rho U^2)}{\partial(Ly^*)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \rho \left[\frac{U^2}{L} \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \frac{U^2}{L} \frac{\partial(u^*u^*)}{\partial x^*} + \frac{U^2}{L} \frac{\partial(v^*u^*)}{\partial y^*} \right] = -\rho \frac{U^2}{L} \frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \\ &+ \eta_s \left[\frac{U}{L^2} \frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{U}{L^2} \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} \right] + \rho \frac{U^2}{L} \left[\frac{\partial T_{11}^*}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}^*}{\partial y} \right]. \end{aligned}$$

Agora, dividindo todos os termos por $\rho \frac{U^2}{L}$, segue que

$$\rho \left[\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u^*u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^*u^*)}{\partial y^*} \right] = -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \frac{\eta_s}{\rho UL} \left[\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} \right] + \frac{\partial T_{11}^*}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}^*}{\partial y}.$$

A equação está praticamente adimensionalizada. O único termo restante é $\frac{\eta_s}{\rho UL}$ e neste caso, manipulações são realizadas a fim de reescrevê-lo em função dos parâmetros adimensionais Re , Wi ou β

$$\begin{aligned} \frac{\eta_s}{\rho UL} &= \frac{\eta_0 - \eta_p}{\rho UL} = \frac{\eta_0}{\rho UL} - \frac{\eta_p}{\rho UL} = \frac{1}{Re} - \frac{\eta_p}{\rho UL} = \frac{1}{Re} - \frac{\eta_p \eta_0}{\eta_0 \rho UL} = \\ &= \frac{1}{Re} - \frac{(\eta_0 - \eta_s)\eta_0}{\eta_0 \rho UL} = \frac{1}{Re} - \left(\frac{\eta_0^2}{\eta_0 \rho UL} - \frac{\eta_s \eta_0}{\eta_0 \rho UL} \right) = \frac{1}{Re} - \left(\frac{1}{Re} - \beta \frac{1}{Re} \right) = \frac{\beta}{Re}. \end{aligned}$$

Portanto, a equação do momento em x na forma adimensional é dada por

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u^*u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^*u^*)}{\partial y^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} \right] + \frac{\partial T_{11}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial T_{12}^*}{\partial y^*}. \quad (2.27)$$

Enquanto isso, a equação do momento na direção y é obtida analogamente

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(u^*v^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(v^*v^*)}{\partial y^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial y^*} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 v^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 v^*}{\partial y^{*2}} \right] + \frac{\partial T_{12}^*}{\partial x^*} + \frac{\partial T_{22}^*}{\partial y^*}. \quad (2.28)$$

Agora, resta adimensionalizar as equações dos tensores, com as seguintes manipulações

$$\begin{aligned} T_{11} + \lambda \left(\frac{\partial T_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial T_{11}}{\partial y} - 2T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} - 2T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (T_{11}^2 + T_{12}^2) &= 2\eta_p \frac{\partial u}{\partial x} \Rightarrow \\ \Rightarrow (T_{11}^* \rho U^2) + \lambda \left(\frac{\partial(T_{11}^* \rho U^2)}{\partial(\frac{Lt^*}{U})} + (Uu^*) \frac{\partial(T_{11}^* \rho U^2)}{\partial(Lx^*)} + (Uv^*) \frac{\partial(T_{11}^* \rho U^2)}{\partial(Ly^*)} + \right. \\ \left. - 2(T_{11}^* \rho U^2) \frac{\partial(Uu^*)}{\partial(Lx^*)} - 2(T_{12}^* \rho U^2) \frac{\partial(Uu^*)}{\partial(Ly^*)} \right) + \\ + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} ((T_{11}^* \rho U^2)^2 + (T_{12}^* \rho U^2)^2) &= 2\eta_p \frac{\partial(Uu^*)}{\partial(Lx^*)} \Rightarrow \\ \Rightarrow \rho U^2 T_{11}^* + \lambda \left[\frac{\rho U^3}{L} \left(\frac{\partial T_{11}^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial T_{11}^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial T_{11}^*}{\partial y^*} - 2T_{11}^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - 2T_{12}^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) \right] + \\ + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} \rho^2 U^4 (T_{11}^{*2} + T_{12}^{*2}) &= 2\eta_p \frac{U}{L} \frac{\partial u^*}{\partial x^*}. \end{aligned}$$

Dividindo a expressão acima por ρU^2 , segue que

$$\begin{aligned} T_{11}^* + \lambda \frac{U}{L} \left(\frac{\partial T_{11}^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial T_{11}^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial T_{11}^*}{\partial y^*} - 2T_{11}^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - 2T_{12}^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) + \\ + \alpha_G \frac{\lambda \rho U^2}{\eta_p} (T_{11}^{*2} + T_{12}^{*2}) &= 2 \frac{\eta_p}{\rho U L} \frac{\partial u^*}{\partial x^*}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Agora, através de algumas manipulações, os termos $\frac{\eta_p}{\rho U L}$ e $\alpha_G \frac{\lambda \rho U^2}{\eta_p}$ são escritos em função de parâmetros adimensionais

$$\frac{\eta_p}{\rho U L} = \frac{\eta_0 - \eta_s}{\rho U L} = \frac{\frac{1}{\eta_0}(\eta_0 - \eta_s)}{\frac{1}{\eta_0} \rho U L} = \frac{1 - \frac{\eta_s}{\eta_0}}{\frac{\rho U L}{\eta_0}} = \frac{1 - \beta}{Re},$$

enquanto que

$$\alpha_G \frac{\lambda \rho U^2}{\eta_p} = \alpha_G \frac{L W i U \rho}{\eta_p} = \alpha_G \frac{W i L U \rho}{\eta_p} = \alpha_G W i \frac{\rho U L}{\eta_p} = \alpha_G \frac{W i Re}{1 - \beta}.$$

Substituindo em (2.29), obtém-se a equação do tensor T_{11} adimensionalizada

$$\begin{aligned} T_{11}^* + W i \left(\frac{\partial T_{11}^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial T_{11}^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial T_{11}^*}{\partial y^*} - 2T_{11}^* \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - 2T_{12}^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) + \\ + \alpha_G \frac{W i Re}{1 - \beta} (T_{11}^{*2} + T_{12}^{*2}) &= 2 \frac{1 - \beta}{Re} \frac{\partial u^*}{\partial x^*}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Da mesma forma, obtém-se as equações adimensionalizadas dos tensores T_{12} e T_{22} , respectivamente, dadas por

$$T_{12}^* + Wi \left(\frac{\partial T_{12}^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial T_{12}^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial T_{12}^*}{\partial y^*} - T_{11}^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*} - T_{22}^* \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) + \alpha_G \frac{WiRe}{1-\beta} (T_{12}^* (T_{11}^* + T_{22}^*)) = \frac{1-\beta}{Re} \left(\frac{\partial v^*}{\partial x^*} + \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right), \quad (2.31)$$

$$T_{22}^* + Wi \left(\frac{\partial T_{22}^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial T_{22}^*}{\partial x^*} + v^* \frac{\partial T_{22}^*}{\partial y^*} - 2T_{12}^* \frac{\partial v^*}{\partial x^*} - 2T_{22}^* \frac{\partial v^*}{\partial y^*} \right) + \alpha_G \frac{WiRe}{1-\beta} (T_{12}^{*2} + T_{22}^{*2}) = 2 \frac{1-\beta}{Re} \frac{\partial v^*}{\partial y^*}. \quad (2.32)$$

As equações (2.26) – (2.28) e (2.30) – (2.32) modelam um escoamento bidimensional, incompressível e isotérmico, para um fluido viscoelástico do modelo Giesekus [22].

Daqui em diante, todas as equações serão consideradas na sua forma adimensional, porém o sobrescrito (*) será omitido por simplicidade de notação.

2.4 Simulação Numérica Direta

A Simulação Numérica Direta ou em inglês “Direct Numerical Simulation” (DNS) resolve as equações de Navier-Stokes empregando esquemas de diferenças finitas de alta ordem, em que todas as escalas do escoamento são simuladas. A principal restrição desta técnica está relacionada ao seu custo computacional.

A fim de simplificar o problema e eliminar o tratamento da pressão na equação do momento, utiliza-se a formulação vorticidade-velocidade. A vorticidade é uma medida da rotação de um elemento de fluido em torno de um ponto e em coordenadas bidimensionais, ω_z é matematicamente definida como

$$\omega_z = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (2.33)$$

Derivando a equação (2.33) com respeito a x obtém-se

$$\frac{\partial \omega_z}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \quad (2.34)$$

e utilizando a equação da continuidade (2.26), que garante $\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial v}{\partial y}$, pode-se ainda escrever

$$\frac{\partial \omega_z}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(-\frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \quad (2.35)$$

Consequentemente, tem-se uma equação de Poisson em termos da componente v da velocidade

$$\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = -\frac{\partial \omega_z}{\partial x}. \quad (2.36)$$

Agora, tratando-se da equação de transporte de vorticidade, sua obtenção ocorre através de algumas manipulações. Primeiramente, deriva-se a equação do momento em x em

relação a y e depois, a equação do momento em y é derivada com respeito a x , o que resulta, respectivamente, em

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial t} + \frac{\partial^2(uu)}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2(vu)}{\partial y^2} = -\frac{\partial^2 p}{\partial y \partial x} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^3 u}{\partial y \partial x^2} + \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} \right] + \frac{\partial^2 T_{11}}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial y^2}, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial t} + \frac{\partial^2(uv)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(vv)}{\partial x \partial y} = -\frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^3 v}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial y^2} \right] + \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_{22}}{\partial x \partial y}. \quad (2.38)$$

Agora, a equação (2.37) é subtraída de (2.38), resultando em

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2(uv)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2(vu)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(vv)}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2(uu)}{\partial y \partial x} = \\ & = \frac{\beta}{Re} \left(\frac{\partial^3 v}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial y^2} - \frac{\partial^3 u}{\partial y \partial x^2} - \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} \right) + \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_{22}}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 T_{11}}{\partial y \partial x}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Simplificações são realizadas nas derivadas presentes na equação (2.39) e note que, pela regra da cadeia

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2(uv)}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(uv)}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \\ &= u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} = u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

e de maneira análoga

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2(vu)}{\partial y^2} &= u \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} + v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \\ \frac{\partial^2(uu)}{\partial y \partial x} &= 2u \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y}, \\ \frac{\partial^2(vv)}{\partial x \partial y} &= 2v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y}. \end{aligned}$$

Dessa forma, o lado esquerdo da equação (2.39) pode ser simplificado

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2(uv)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2(vu)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(vv)}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2(uu)}{\partial y \partial x} = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (-\omega_z) + u \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} - v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \\ & \quad + 2v \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - 2u \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} = \\ &= -\frac{\partial \omega_z}{\partial t} + u \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} \right) + v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + v \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} \right) + \\ & \quad - u \left(\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right) + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \\ &= -\frac{\partial \omega_z}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + v \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + v \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \end{aligned}$$

$$-u \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right).$$

Substituindo as equações da continuidade e a equação (2.33), obtém-se a expressão

$$-\frac{\partial \omega_z}{\partial t} - u \frac{\partial \omega_z}{\partial x} - v \frac{\partial \omega_z}{\partial y}. \quad (2.40)$$

Pode-se ainda simplificar o termo que aparece acompanhando a constante $\frac{\beta}{Re}$ em (2.39), da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 v}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 v}{\partial x \partial y^2} - \frac{\partial^3 u}{\partial y \partial x^2} - \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \frac{\partial u}{\partial y} = \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial^2 \omega_z}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \omega_z}{\partial y^2}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Finalmente, a equação de transporte de vorticidade pode ser escrita como

$$\frac{\partial \omega_z}{\partial t} + \frac{\partial \omega_z}{\partial x} u + \frac{\partial \omega_z}{\partial y} v = \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 \omega_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega_z}{\partial y^2} \right] - \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 T_{22}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 T_{11}}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial y^2}. \quad (2.42)$$

Portanto, o problema agora consiste em resolver o sistema composto pela equação da continuidade (2.43), equação da vorticidade (2.44) e transporte de vorticidade (2.45), além das equações dos tensores não-Newtonianos (2.46) – (2.48)

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = -\frac{\partial \omega_z}{\partial x}, \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial \omega_z}{\partial t} + \frac{\partial(u\omega_z)}{\partial x} + \frac{\partial(v\omega_z)}{\partial y} = \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 \omega_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega_z}{\partial y^2} \right] - \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 T_{22}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 T_{11}}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial y^2}, \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} T_{11} + Wi \left(\frac{\partial T_{11}}{\partial t} + \frac{\partial(uT_{11})}{\partial x} + \frac{\partial(vT_{11})}{\partial y} - 2T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} - 2T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\alpha_G Wi Re}{1 - \beta} (T_{11}^2 + T_{12}^2) = 2 \frac{1 - \beta}{Re} \frac{\partial u}{\partial x}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} T_{12} + Wi \left(\frac{\partial T_{12}}{\partial t} + \frac{\partial(uT_{12})}{\partial x} + \frac{\partial(vT_{12})}{\partial y} - T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} - T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\alpha_G Wi Re}{1 - \beta} (T_{12} (T_{11} + T_{22})) = \frac{1 - \beta}{Re} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} T_{22} + Wi \left(\frac{\partial T_{22}}{\partial t} + \frac{\partial(uT_{22})}{\partial x} + \frac{\partial(vT_{22})}{\partial y} - 2T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} - 2T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\alpha_G Wi Re}{1 - \beta} (T_{12}^2 + T_{22}^2) = 2 \frac{1 - \beta}{Re} \frac{\partial v}{\partial y}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

2.4.1 Condições Auxiliares

No problema bidimensional do escoamento de Poiseuille de um fluido viscoelástico, três tipos de condição de contorno são consideradas: as condições de entrada e saída de fluido no domínio (inflow e outflow, respectivamente) e condição sobre uma superfície rígida.

- Entrada de fluido (inflow): A posição do contorno de entrada é estabelecida, a velocidade tangencial (v) no contorno é considerada nula e a velocidade normal (u) é prescrita

$$u = U(y) \quad \text{e} \quad v = 0. \quad (2.49)$$

A contribuição não-Newtoniana $\mathbf{T}$ é determinada considerando que o fluido não recebe interferência desta propriedade, portanto

$$\mathbf{T} = \mathbf{0}. \quad (2.50)$$

- Parede (fronteira sólida): Neste tipo de contorno é comum considerar a condição de não-eskorregamento e impermeabilidade. Assim, garante-se que a componente tangencial da velocidade do fluido junto a parede é igual a velocidade da parede, e que a componente normal da velocidade é nula. Como as placas não estão em movimento, então esta condição é fisicamente traduzida para

$$u = 0 \quad \text{e} \quad v = 0. \quad (2.51)$$

- Saída de fluido (outflow): Considera-se a condição de Neumann homogênea na direção normal à fronteira (direção x), para a velocidade e também para a contribuição não-Newtoniana, ou seja,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial x^2} = \mathbf{0}. \quad (2.52)$$

2.5 Escoamento Base

O escoamento base também pode ser conhecido como laminar ou totalmente desenvolvido. A partir da Figura 2.1, que mostra um escoamento laminar, pode-se entender o motivo para isso. Uma camada limite (linha tracejada mais clara) desenvolve-se ao longo das paredes. Isso ocorre devido a uma força de cisalhamento retardante que a parede

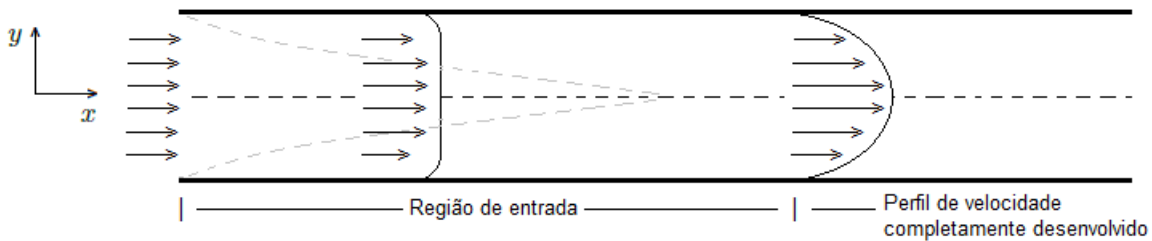


Figura 2.1: Escoamento totalmente desenvolvido.

exerce sobre o escoamento e que é numericamente traduzida para a condição de não escorregamento e impermeabilidade. Dessa forma, a velocidade do fluido nas proximidades da parede é reduzida e este efeito é levado cada vez mais para dentro do canal. Suficientemente longe da entrada do escoamento a camada limite em desenvolvimento atinge a linha de centro do canal. Quando isto acontece e a forma do perfil de velocidade não se altera com o avanço do escoamento diz-se que o mesmo encontra-se completamente desenvolvido.

Para calcular o escoamento nestas condições, ou seja, o escoamento base, algumas hipóteses devem ser consideradas:

1. Todas as variáveis são dependentes apenas do eixo y , exceto para a pressão, cujo gradiente é constante na direção x ;
2. Considera-se o escoamento no canal no estado estacionário, totalmente desenvolvido;
3. O domínio em y é dado pelo intervalo $[-1, 1]$.

Uma das consequências da primeira hipótese decorre diretamente da equação da continuidade. Perceba que

$$\overbrace{\frac{\partial u}{\partial x}}^{=0} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \Rightarrow v(y) \equiv \text{constante.} \quad (2.53)$$

Segue das condições de contorno que $v_{\text{parede}} = 0$, logo se $v \equiv \text{constante}$, então $v(y) = 0$. Resumidamente, as hipóteses impostas ao escoamento base, consistem em

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= 0 : \text{decorre do fato do escoamento estar no estado estacionário;} \\ \frac{\partial}{\partial x} &= 0 : \text{decorre do fato do escoamento ser invariante em } x; \\ \nabla p &= \text{constante} : \text{devido à variação linear da pressão no escoamento;} \\ v &= 0 : \text{segue de (2.53);} \\ u &= U(y) : \text{decorre do fato do escoamento estar no estado estacionário e} \\ &\quad \text{ser invariante em } x; \\ \mathbf{T} &= \mathbf{T}(y) : \text{decorre do fato do escoamento estar no estado estacionário e} \\ &\quad \text{ser invariante em } x. \end{aligned}$$

Dadas as equações adimensionalizadas para o modelo de fluido viscoelástico do tipo Giesekus, tem-se o seguinte sistema

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}}{\partial y}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] + \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y}, \end{aligned}$$

$$T_{11} + Wi \left(\frac{\partial T_{11}}{\partial t} + \frac{\partial(uT_{11})}{\partial x} + \frac{\partial(vT_{11})}{\partial y} - 2T_{11} \frac{\partial u}{\partial x} - 2T_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\alpha_G Wi Re}{1 - \beta} (T_{11}^2 + T_{12}^2) = 2 \frac{1 - \beta}{Re} \frac{\partial u}{\partial x},$$

$$T_{12} + Wi \left(\frac{\partial T_{12}}{\partial t} + \frac{\partial(uT_{12})}{\partial x} + \frac{\partial(vT_{12})}{\partial y} - T_{11} \frac{\partial v}{\partial x} - T_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\alpha_G Wi Re}{1 - \beta} (T_{12} (T_{11} + T_{22})) = \frac{1 - \beta}{Re} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right),$$

$$T_{22} + Wi \left(\frac{\partial T_{22}}{\partial t} + \frac{\partial(uT_{22})}{\partial x} + \frac{\partial(vT_{22})}{\partial y} - 2T_{12} \frac{\partial v}{\partial x} - 2T_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \\ + \frac{\alpha_G Wi Re}{1 - \beta} (T_{12}^2 + T_{22}^2) = 2 \frac{1 - \beta}{Re} \frac{\partial v}{\partial y}.$$

Aplicando as hipóteses do escoamento base neste sistema muitos termos são anulados e um novo sistema é obtido

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\beta}{Re} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial T_{12}}{\partial y} = 0,$$

$$-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y} = 0,$$

$$T_{11} = 2WiT_{12} \frac{\partial u}{\partial y} - \alpha_G \frac{Wi Re}{1 - \beta} (T_{11}^2 + T_{12}^2),$$

$$T_{12} = WiT_{22} \frac{\partial u}{\partial y} - \alpha_G \frac{Wi Re}{1 - \beta} [T_{12}(T_{11} + T_{12})] + \frac{1 - \beta}{Re} \frac{\partial u}{\partial y},$$

$$T_{22} = -\alpha_G \frac{Wi Re}{1 - \beta} (T_{12}^2 + T_{22}^2).$$

Agora, as seguintes adaptações são implementadas para a notação

$$u = U(y), \quad p = P(x, y), \quad T = \hat{T}(y), \quad \frac{\partial p}{\partial x} = P_x,$$

e o sistema pode ser reescrito como

$$-P_x + \frac{\beta}{Re} \frac{d^2 U}{dy^2} + \frac{d\hat{T}_{12}}{dy} = 0, \tag{2.54}$$

$$-\frac{dp}{dy} + \frac{d\hat{T}_{22}}{dy} = 0, \tag{2.55}$$

$$\hat{T}_{11} = 2Wi\hat{T}_{12} \frac{dU}{dy} - \alpha_G \frac{Wi Re}{1 - \beta} (\hat{T}_{11}^2 + \hat{T}_{12}^2), \tag{2.56}$$

$$\hat{T}_{12} = Wi\hat{T}_{22} \frac{dU}{dy} - \alpha_G \frac{Wi Re}{1 - \beta} [\hat{T}_{12}(\hat{T}_{11} + \hat{T}_{12})] + \frac{1 - \beta}{Re} \frac{dU}{dy}, \tag{2.57}$$

$$\hat{T}_{22} = -\alpha_G \frac{WiRe}{1 - \beta} (\hat{T}_{12}^2 + \hat{T}_{22}^2). \quad (2.58)$$

O sistema de equações (2.54) – (2.58) possui soluções semi-analíticas [17, 42, 49, 55] disponíveis na literatura, mas não dispõe de uma solução analítica completa. Sendo assim, neste trabalho optou-se por gerar o escoamento base numericamente, resolvendo o sistema (2.43) – (2.48) com o código de Simulação Numérica Direta sem perturbação, cujas simulações são executadas até que o escoamento atinja o estado estacionário [20].

Formulação do Tensor Conformação

No trabalho de Hulsen [27], evidencia-se que a imposição de restrições ao tensor extra-tensão é importante para manter o sistema de equações bem condicionado do ponto de vista numérico, evitando o surgimento de instabilidades não lineares devido a erros de aproximação.

Uma maneira alternativa para descrever os modelos viscoelásticos usa o tensor conformação $\mathbf{A} = \mathbf{A}(x, y, t) = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12} & A_{22} \end{bmatrix}$, que pode ser definido como uma aproximação do estado microestrutural do líquido [15]. Este tensor é simétrico e definido positivo e Hulsen [27] provou que essas propriedades são mantidas durante toda a evolução temporal da equação constitutiva se este for inicializado desta forma. Nesse sentido, define-se [27]

$$\mathbf{A} - \mathbf{I} = \frac{\lambda}{\eta_p} \mathbf{T}, \quad (3.1)$$

que pode ser adimensionalizado

$$\frac{\lambda}{\eta_p} \mathbf{T} = \frac{\lambda}{\eta_p} \rho U^2 \mathbf{T}^*.$$

Sabendo que $\frac{\lambda}{\eta_p} \rho U^2 = \frac{ReWi}{1 - \beta}$ então, ao final do processo $\mathbf{A} = \mathbf{I} + \frac{ReWi}{1 - \beta} \mathbf{T}$.

Considerando $\xi = \frac{1 - \beta}{ReWi}$, é possível escrever o tensor conformação $\mathbf{A}$ em função da contribuição polimérica $\mathbf{T}$, da seguinte forma

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I}, \quad (3.2)$$

bem como a contribuição polimérica $\mathbf{T}$ em função do tensor conformação $\mathbf{A}$

$$\mathbf{T} = \xi(\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (3.3)$$

Como neste trabalho é considerado o fluido do tipo Giesekus, a equação constitutiva do tensor conformação $\mathbf{A}$ é obtida, em particular, a partir da equação constitutiva (2.15) deste modelo

$$\mathbf{T} + \lambda \left(\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{T}) - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{T} \right) + \alpha_G \frac{\lambda}{\eta_p} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = 2\eta_p \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top).$$

Adimensionalizando esta equação de forma análoga a que foi procedida na seção 2.3 durante a adimensionalização das componentes deste mesmo tensor, segue que

$$\mathbf{T} + Wi \left(\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uT}) - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} \right) + \alpha_G \frac{WiRe}{1-\beta} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = 2 \frac{1-\beta}{Re} \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{Wi} \mathbf{T} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uT}) - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} + \alpha_G \frac{Re}{1-\beta} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = \frac{1-\beta}{WiRe} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top).$$

Sabendo que $\xi = \frac{1-\beta}{WiRe}$, então $\frac{Re}{1-\beta} = \frac{1}{Wi\xi}$. Logo,

$$\frac{1}{Wi} \mathbf{T} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uT}) - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} + \alpha_G \frac{1}{Wi\xi} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = \xi (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{Wi} \mathbf{T} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uT}) + \alpha_G \frac{1}{Wi\xi} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} + \xi (\nabla \mathbf{u}) + \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top + \xi (\nabla \mathbf{u})^\top \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{Wi} \mathbf{T} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uT}) + \alpha_G \frac{1}{Wi\xi} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) = (\nabla \mathbf{u})[\mathbf{T} + \xi \mathbf{I}] + [\mathbf{T} + \xi \mathbf{I}](\nabla \mathbf{u})^\top.$$

Agora, substituindo $\mathbf{T} = \xi(\mathbf{A} - \mathbf{I})$ (equação (3.3)), pode-se escrever

$$\frac{1}{Wi} \xi(\mathbf{A} - \mathbf{I}) + \frac{\partial(\xi(\mathbf{A} - \mathbf{I}))}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\xi(\mathbf{A} - \mathbf{I})) + \alpha_G \frac{1}{Wi\xi} (\xi(\mathbf{A} - \mathbf{I}))(\xi(\mathbf{A} - \mathbf{I})) =$$

$$= (\nabla \mathbf{u})[\xi(\mathbf{A} - \mathbf{I}) + \xi \mathbf{I}] + [\xi(\mathbf{A} - \mathbf{I}) + \xi \mathbf{I}](\nabla \mathbf{u})^\top \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\xi}{Wi} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) + \xi \frac{\partial(\mathbf{A} - \mathbf{I})}{\partial t} + \xi \nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{A} - \mathbf{I})) + \alpha_G \frac{1}{Wi\xi} \xi^2 (\mathbf{A} - \mathbf{I})(\mathbf{A} - \mathbf{I}) = (\nabla \mathbf{u})\xi \mathbf{A} + \xi \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top.$$

A expressão acima, dividida por ξ resulta em

$$\frac{1}{Wi} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uA}) + \alpha_G \frac{1}{Wi} (\mathbf{A} - \mathbf{I})(\mathbf{A} - \mathbf{I}) = (\nabla \mathbf{u})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top,$$

e como alguns termos são nulos, segue que a equação constitutiva do tensor conformação é dada por

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uA}) - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{A} - \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top = \frac{1}{Wi} (\mathbf{I} - \mathbf{A})[\mathbf{I} + \alpha_G (\mathbf{A} - \mathbf{I})]. \quad (3.4)$$

Substituindo a equação (3.2) na equação constitutiva do tensor conformação (3.4) obtém-se a equação constitutiva do modelo Giesekus

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I})}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\mathbf{u} \left(\frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I} \right) \right) - (\nabla \mathbf{u}) \left(\frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I} \right) - \left(\frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I} \right) (\nabla \mathbf{u})^\top = \\ & = \frac{1}{Wi} \left(\mathbf{I} - \left(\frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I} \right) \right) \left[\mathbf{I} + \alpha_G \left(\left(\frac{1}{\xi} \mathbf{T} + \mathbf{I} \right) - \mathbf{I} \right) \right] \Rightarrow \\ & \Rightarrow \frac{1}{\xi} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \frac{1}{\xi} \nabla \cdot (\mathbf{uT}) - \frac{1}{\xi} (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} - \nabla \mathbf{u} - \frac{1}{\xi} \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top - \nabla \mathbf{u}^\top = \frac{1}{Wi} \left[-\frac{1}{\xi} \mathbf{T} - \alpha_G \frac{1}{\xi^2} \mathbf{T}\mathbf{T} \right]. \end{aligned}$$

Agora, multiplicando a expressão acima por ξ , segue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uT}) - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{T} - \mathbf{T}(\nabla \mathbf{u})^\top &= \xi(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top) - \frac{1}{Wi} \left[\mathbf{T} + \frac{\alpha_G}{\xi} \mathbf{T}\mathbf{T} \right] \Rightarrow \\ \Rightarrow \overset{\nabla}{\mathbf{T}} &= 2\xi \mathbf{D} - \frac{1}{Wi} \left[\mathbf{T} + \frac{\alpha_G}{\xi} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{T}) \right], \end{aligned}$$

que é justamente a equação do modelo constitutivo Giesekus.

Assim, a equação constitutiva do tensor conformação pode ser escrita como

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uA}) = (\nabla \mathbf{u})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{Wi} P(\mathbf{A}), \quad (3.5)$$

sendo $P(\mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{A} - \mathbf{I})]$, em particular, para o modelo Giesekus.

3.1 Formulação Núcleo-Conformação

Esta técnica foi apresentada por Afonso et al. [1] e trata da construção de um tensor núcleo-conformação genérico, no qual diversas transformações núcleo podem ser aplicadas à equação de evolução do tensor conformação. Nesse sentido, a formulação núcleo-conformação reúne formulações tais como a decomposição logaritmo-conformação proposta por Fattal e Kupferman [15, 16] (Apêndice A.1) e a decomposição raiz quadrada conformação desenvolvida por Balci et al. [4] (Apêndice A.2).

A elaboração do método se dá, basicamente, por meio de três etapas principais:

1. Elaboração de uma equação de evolução para os autovalores da matriz $\mathbf{A}$;
2. Construção de uma equação de evolução para a função núcleo avaliada na matriz dos autovalores de $\mathbf{A}$;
3. Composição de uma equação evolutiva para a função núcleo avaliada em $\mathbf{A}$.

A partir do princípio utilizado por Vaithianathan e Collins [51], que aplica decomposição espectral para o tensor conformação $\mathbf{A} = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top$, então

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{O}^\top \mathbf{A} \mathbf{O}, \quad (3.6)$$

e, conseqüentemente, a derivada material de $\mathbf{\Lambda}$ é expressa por

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = \frac{D(\mathbf{O}^\top \mathbf{A} \mathbf{O})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{A} \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{A}}{Dt} \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \mathbf{A} \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.7)$$

Tendo em vista a decomposição do gradiente da velocidade, que Fattal e Kupferman [15, 16] usaram na formulação log-conformação (Apêndice A.1), onde $\nabla \mathbf{u} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}$ foi descrito em termos de um componente extensional, tensor $\mathbf{B}$ simétrico que comuta com $\mathbf{A}$ e um componente rotacional puro antissimétrico, tensor $\mathbf{\Omega}$, então considera-se a seguinte equação constitutiva para o tensor conformação

$$\frac{D\mathbf{A}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uA}) = (\mathbf{\Omega}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{\Omega}) + 2\mathbf{B}\mathbf{A} + \frac{1}{Wi} P(\mathbf{A}). \quad (3.8)$$

Com o objetivo de obter uma equação evolutiva para a matriz dos autovalores $\mathbf{\Lambda}$, substitui-se (3.8) na equação (3.7), que resulta em

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} &= \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{A} \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \left[(\mathbf{\Lambda} \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{\Lambda}) + 2\mathbf{B} \mathbf{A} + \frac{1}{W_i} P(\mathbf{A}) \right] \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \mathbf{A} \frac{D\mathbf{O}}{Dt} = \\ &= \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{A} \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \mathbf{\Lambda} \mathbf{A} \mathbf{O} - \mathbf{O}^\top \mathbf{A} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O} + 2\mathbf{O}^\top \mathbf{B} \mathbf{A} \mathbf{O} + \frac{1}{W_i} \mathbf{O}^\top P(\mathbf{A}) \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \mathbf{A} \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Apenas lembrando que $P(\mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{A} - \mathbf{I})]$ para o modelo constitutivo Giesekus, então através da decomposição espectral aplicada em $\mathbf{A}$ é possível escrever

$$\begin{aligned} P(\mathbf{A}) &= (\mathbf{I} - \mathbf{A})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{A} - \mathbf{I})] \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathbf{O}^\top P(\mathbf{A}) \mathbf{O} = \mathbf{O}^\top [(\mathbf{I} - \mathbf{A})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{A} - \mathbf{I})]] \mathbf{O} = \\ &= \mathbf{O}^\top [(1 - \alpha_G)\mathbf{I} + (2\alpha_G - 1)\mathbf{A} - \alpha_G \mathbf{A}^2] \mathbf{O} = \\ &= (1 - \alpha_G) \mathbf{O}^\top \mathbf{I} \mathbf{O} + (2\alpha_G - 1) \mathbf{O}^\top \mathbf{A} \mathbf{O} - \alpha_G (\mathbf{O}^\top \mathbf{A}) (\mathbf{A} \mathbf{O}) = \\ &= (1 - \alpha_G) \mathbf{I} + (2\alpha_G - 1) \mathbf{\Lambda} - \alpha_G (\mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top) (\mathbf{O} \mathbf{\Lambda}) = \\ &= (1 - \alpha_G) \mathbf{I} + (2\alpha_G - 1) \mathbf{\Lambda} - \alpha_G \mathbf{\Lambda}^2 = \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})] = P(\mathbf{\Lambda}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

A fim de escrever (3.9) em termos de $\mathbf{\Lambda}$, então a decomposição espectral do tensor conformação é substituída nessa equação

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} &= \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} (\mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top) \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \mathbf{\Omega} (\mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top) \mathbf{O} - \mathbf{O}^\top (\mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top) \mathbf{\Omega} \mathbf{O} + \\ &+ 2\mathbf{O}^\top \mathbf{B} (\mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top) \mathbf{O} + \frac{1}{W_i} \mathbf{O}^\top P(\mathbf{A}) \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top (\mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top) \frac{D\mathbf{O}}{Dt} = \\ &= \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} + (\mathbf{O}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{O}) \mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda} (\mathbf{O}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{O}) + 2(\mathbf{O}^\top \mathbf{B} \mathbf{O}) \mathbf{\Lambda} + \frac{1}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}) + \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Com base nas decomposições matriciais vistas no Apêndice B obtém-se

$$\mathbf{B} = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{O}^\top \quad (\text{simétrica}) \quad \Rightarrow \tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{O}^\top \mathbf{B} \mathbf{O}, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{\Omega}} \mathbf{O}^\top \quad (\text{antissimétrica}) \quad \Rightarrow \tilde{\mathbf{\Omega}} = \mathbf{O}^\top \mathbf{\Omega} \mathbf{O}, \quad (3.13)$$

que podem ser substituídas em (3.11) de maneira que

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} + \tilde{\mathbf{\Omega}} \mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda} \tilde{\mathbf{\Omega}} + 2\tilde{\mathbf{B}} \mathbf{\Lambda} + \frac{1}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}) + \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.14)$$

Agora, para prosseguir com a construção do método, define-se o tensor $\mathbf{H}$ como sendo

$$\mathbf{H} = \mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{O}}{Dt}, \quad (3.15)$$

e note que,

$$\mathbf{0} = \frac{D\mathbf{I}}{Dt} = \frac{D(\mathbf{O}^\top \mathbf{O})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{O} + \mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{O}}{Dt}, \quad (3.16)$$

tem como consequência direta o fato de que

$$\mathbf{H} = \mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{O}}{Dt} = -\frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{O} = -\mathbf{H}^\top. \quad (3.17)$$

Por outro lado, $\mathbf{H}^\top = (\mathbf{O}^\top \frac{D\mathbf{O}}{Dt})^\top = (\frac{D\mathbf{O}}{Dt})^\top (\mathbf{O}^\top)^\top = \frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \mathbf{O}$ e, portanto, $\mathbf{H}$ é antissimétrica.

Então, o próximo passo consiste em substituir (3.15) na equação (3.14), de tal maneira que

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = (\mathbf{\Lambda}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{\Lambda}) + (\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}\tilde{\mathbf{\Omega}}) + 2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda} + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda}), \quad (3.18)$$

que é a equação evolutiva do tensor conformação escrita em função da matriz de autovalores de $\mathbf{A}$.

Escrevendo brevemente as matrizes de componentes envolvidas na expressão logo acima

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda} &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{diagonal}) \\ \mathbf{H} &= \begin{bmatrix} 0 & H_{12} \\ -H_{12} & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{antissimétrica}) \\ \tilde{\mathbf{\Omega}} &= \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \\ -\tilde{\Omega}_{12} & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{antissimétrica}) \\ \tilde{\mathbf{B}} &= \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{diagonal}) \\ P(\mathbf{\Lambda}) &= \begin{bmatrix} P(\mathbf{\Lambda})_{11} & 0 \\ 0 & P(\mathbf{\Lambda})_{22} \end{bmatrix}. \quad (\text{simétrica}) \end{aligned}$$

Logo,

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = \frac{D}{Dt} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{D\lambda_1}{Dt} & 0 \\ 0 & \frac{D\lambda_2}{Dt} \end{bmatrix},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}\mathbf{H} &= \begin{bmatrix} 0 & \lambda_1 H_{12} \\ -\lambda_2 H_{12} & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{H}\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 0 & H_{12} \lambda_2 \\ -H_{12} \lambda_1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{\Lambda}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{\Lambda} &= \begin{bmatrix} 0 & H_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) \\ H_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{\Lambda} &= \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \lambda_2 \\ -\tilde{\Omega}_{12} \lambda_1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{\Lambda}\tilde{\mathbf{\Omega}} = \begin{bmatrix} 0 & \lambda_1 \tilde{\Omega}_{12} \\ -\lambda_2 \tilde{\Omega}_{12} & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}\tilde{\mathbf{\Omega}} &= \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

$$2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 2\tilde{B}_{11}\lambda_1 & 0 \\ 0 & 2\tilde{B}_{22}\lambda_2 \end{bmatrix},$$

$$\frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda})_{11} & 0 \\ 0 & \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda})_{22} \end{bmatrix}.$$

Então, é possível que se escreva a equação (3.18) matricialmente

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \frac{D\lambda_1}{Dt} & 0 \\ 0 & \frac{D\lambda_2}{Dt} \end{bmatrix}}_{\frac{D\Lambda}{Dt}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & H_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) \\ H_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) & 0 \end{bmatrix}}_{\Lambda H - H \Lambda} +$$

$$+ \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix}}_{\tilde{\Omega} \Lambda - \Lambda \tilde{\Omega}} + \underbrace{\begin{bmatrix} 2\tilde{B}_{11}\lambda_1 & 0 \\ 0 & 2\tilde{B}_{22}\lambda_2 \end{bmatrix}}_{2\tilde{B}\Lambda} + \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{1}{W_i}P(\Lambda)_{11} & 0 \\ 0 & \frac{1}{W_i}P(\Lambda)_{22} \end{bmatrix}}_{\frac{1}{W_i}P(\Lambda)}.$$
(3.19)

Observe que as parcelas $(\mathbf{H}\Lambda - \Lambda\mathbf{H})$ e $(\tilde{\Omega}\Lambda - \Lambda\tilde{\Omega})$ não contribuem para a evolução de Λ , em razão de que as matrizes $\mathbf{H}$ e $\tilde{\Omega}$ são antissimétricas, logo, possuem entradas nulas na diagonal principal. Assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned} (\Lambda\mathbf{H} - \mathbf{H}\Lambda) - (\tilde{\Omega}\Lambda - \Lambda\tilde{\Omega}) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\Omega}\Lambda - \Lambda\tilde{\Omega} &= -\Lambda\mathbf{H} + \mathbf{H}\Lambda \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\Omega}\Lambda - \Lambda\tilde{\Omega} &= \mathbf{H}\Lambda - \Lambda\mathbf{H}. \end{aligned}$$

A partir disso, conclui-se que $\tilde{\Omega} = \mathbf{H}$. De fato,

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}\Lambda - \Lambda\tilde{\Omega} &= \mathbf{H}\Lambda - \Lambda\mathbf{H} \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) &= H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \Rightarrow \\ \Rightarrow \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) - H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (H_{12} - \tilde{\Omega}_{12})(\lambda_2 - \lambda_1) &= 0. \end{aligned}$$

Como $\lambda_1 \neq \lambda_2$, então $H_{12} = \tilde{\Omega}_{12}$, e portanto a igualdade das matrizes está garantida.

Ainda, observando a expressão matricial vista acima, percebe-se que é possível escrever para os termos da diagonal principal,

$$\frac{D\Lambda}{Dt} = 2\tilde{B}\Lambda + \frac{1}{W_i}P(\Lambda), \quad (3.20)$$

ou melhor,

$$\frac{D\lambda_i}{Dt} = 2\tilde{B}_{ii}\lambda_i + \frac{1}{W_i}P(\Lambda)_{ii}, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots \quad (3.21)$$

A próxima etapa é a construção de uma equação de evolução para a função núcleo avaliada em Λ . Tendo isso em vista, apresenta-se a função núcleo $\mathbb{K}$, definida no conjunto das matrizes simétricas definidas positivas

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \mathbf{O}\mathbb{K}(\Lambda)\mathbf{O}^\top, \quad (3.22)$$

cujas decomposição acima é possível desde que $\mathbb{K}$ seja contínua, inversível e diferenciável.

Uma vantagem de aplicar a função núcleo na matriz diagonal é a construção de uma outra matriz diagonal cujas entradas são as imagens dos termos da diagonal principal pela função $\mathbb{K}$, definida no conjunto dos reais $\mathbb{R}$ [38].

Considerando, por exemplo, uma matriz diagonal qualquer $d = d_{ij}$, pode-se escrever

$$\mathbb{K}(\text{diag}(d_{11}, d_{12}, \dots, d_{nn})) = \text{diag}(\mathbb{K}(d_{11}), \mathbb{K}(d_{22}), \dots, \mathbb{K}(d_{nn})). \quad (3.23)$$

Assim, define-se $\mathbb{K}$ em $\mathbf{\Lambda}$, que possui em sua diagonal principal os autovalores de $\mathbf{A}$, que são reais e positivos, devido as propriedades do tensor conformação.

Retornando, então, à busca da equação evolutiva para $\mathbb{K}(\mathbf{A})$, deriva-se a função $\mathbb{K}(\lambda_i)$ em relação ao tempo t de tal forma que

$$\frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_i)}{\partial t} = \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_i)}{\partial \lambda_i} \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} = \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} J_{ii}, \quad (3.24)$$

ou matricialmente,

$$\frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{\Lambda}}{\partial t} \mathbf{J}, \quad (3.25)$$

em que $\mathbf{J}$ trata-se da Jacobiana de $\mathbb{K}(\mathbf{A})$, e no caso bidimensional, é uma matriz diagonal dada por

$$\mathbf{J} = \text{diag} \left(\frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1}, \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2} \right). \quad (3.26)$$

Esse é mais um motivo pelo qual exige-se a diferenciabilidade de $\mathbb{K}$, e consequentemente, a continuidade desta função. Aplicando a derivada material na matriz $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$ e utilizando a regra da cadeia, obtém-se

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = \frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})) = \frac{\partial \mathbf{\Lambda}}{\partial t} \mathbf{J} + \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})). \quad (3.27)$$

Agora, escrevendo a equação (3.27) em termos das matrizes de componentes, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial \lambda_1}{\partial t} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \lambda_2}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial y} & 0 \\ 0 & u \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial y} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial \lambda_1}{\partial t} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \lambda_2}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (u \frac{\partial \lambda_1}{\partial x} + v \frac{\partial \lambda_1}{\partial y}) \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} & 0 \\ 0 & (u \frac{\partial \lambda_2}{\partial x} + v \frac{\partial \lambda_2}{\partial y}) \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial \lambda_1}{\partial t} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \lambda_2}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u \frac{\partial \lambda_1}{\partial x} + v \frac{\partial \lambda_1}{\partial y} & 0 \\ 0 & u \frac{\partial \lambda_2}{\partial x} + v \frac{\partial \lambda_2}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{\Lambda}}{\partial t} \mathbf{J} + \nabla(\mathbf{u}\mathbf{\Lambda}) \mathbf{J} = \left(\frac{\partial \mathbf{\Lambda}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbf{\Lambda}) \right) \mathbf{J} = \frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} \mathbf{J}. \quad (3.28)$$

Porém, conhecendo (3.20), obtém-se a equação de evolução para $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = 2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}. \quad (3.29)$$

Finalmente, as próximas etapas contribuirão para a determinação de uma equação de evolução para $\mathbb{K}(\mathbf{A})$. Para tanto, através da diagonalização da matriz $\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top$ e pela regra do produto para derivadas, pode-se escrever

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top + \mathbf{O}\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt}\mathbf{O}^\top + \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt}. \quad (3.30)$$

Agora, substituindo a equação evolutiva para $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$ (3.29) na equação (3.30), segue que

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top + \mathbf{O} \left[2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J} \right] \mathbf{O}^\top + \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt},$$

e como $\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top$, então substituindo $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda}) = \mathbf{O}^\top\mathbb{K}(\mathbf{A})\mathbf{O}$ tem-se

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} &= \frac{D\mathbf{O}}{Dt}(\mathbf{O}^\top\mathbb{K}(\mathbf{A})\mathbf{O})\mathbf{O}^\top + \mathbf{O} \left[2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J} \right] \mathbf{O}^\top + \mathbf{O}(\mathbf{O}^\top\mathbb{K}(\mathbf{A})\mathbf{O})\frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt}\mathbf{O}^\top\mathbb{K}(\mathbf{A}) + \mathbf{O} \left[2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J} \right] \mathbf{O}^\top + \mathbb{K}(\mathbf{A})\mathbf{O}\frac{D\mathbf{O}^\top}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Atentando para o fato de que $\mathbf{H} = \tilde{\mathbf{\Omega}}$, então

$$\tilde{\mathbf{\Omega}} = \mathbf{H} \Rightarrow \mathbf{O}\tilde{\mathbf{\Omega}} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt} \Rightarrow \mathbf{O}\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{O}^\top = \frac{D\mathbf{O}}{Dt}\mathbf{O}^\top, \quad (3.32)$$

e pelas decomposições matriciais tem-se que $\mathbf{\Omega} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{O}^\top$, ou seja,

$$\mathbf{\Omega} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt}\mathbf{O}^\top, \quad (3.33)$$

que é antissimétrica pela sua construção anterior. Portanto,

$$-\mathbf{\Omega} = -\frac{D\mathbf{O}}{Dt}\mathbf{O}^\top = \mathbf{\Omega}^\top = \mathbf{O}\frac{D\mathbf{O}}{Dt}, \quad (3.34)$$

e substituindo em (3.31), a equação evolutiva para $\mathbb{K}(\mathbf{A})$ pode ser escrita como

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} = \frac{\partial\mathbb{K}(\mathbf{A})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}(\mathbf{A})) = (\mathbf{\Omega}\mathbb{K}(\mathbf{A}) - \mathbb{K}(\mathbf{A})\mathbf{\Omega}) + 2(\mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J}\mathbf{O}^\top) + \quad (3.35)$$

$$+ \frac{1}{W_i}\mathbf{O}P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}\mathbf{O}^\top, \quad (3.36)$$

então é preciso definir

$$\mathbb{B} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{B}}\mathbf{O}^\top, \quad (3.37)$$

$$\mathbb{H} = \mathbf{O}P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{H}}\mathbf{O}^\top, \quad (3.38)$$

onde $\mathbf{D}_{\mathbb{B}} = \tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J}$ e $\mathbf{D}_{\mathbb{H}} = P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}$ são matrizes diagonais. Repare que somente $\mathbb{H}$ depende de P , que é determinada pelo modelo constitutivo. Assim,

$$\mathbf{D}_{\mathbb{B}} = \tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{11} & 0 \\ 0 & J_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11}\lambda_1 J_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22}\lambda_2 J_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.39)$$

$$\mathbf{D}_{\mathbb{H}} = P(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J} = \begin{bmatrix} P(\mathbf{\Lambda})_{11} & 0 \\ 0 & P(\mathbf{\Lambda})_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{11} & 0 \\ 0 & J_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P(\mathbf{\Lambda})_{11}J_{11} & 0 \\ 0 & P(\mathbf{\Lambda})_{22}J_{22} \end{bmatrix}. \quad (3.40)$$

Finalmente, a equação de evolução da transformação núcleo aplicada ao tensor conformação é expressa por

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} = \frac{\partial\mathbb{K}(\mathbf{A})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}(\mathbf{A})) = (\mathbf{\Omega}\mathbb{K}(\mathbf{A}) - \mathbb{K}(\mathbf{A})\mathbf{\Omega}) + 2\mathbb{B} + \frac{1}{W_i}\mathbb{H}. \quad (3.41)$$

3.1.1 Função $\log_d$ Núcleo-Conformação

Esta versão permite o uso de uma transformação logarítmica em qualquer base $d > 0$, sendo portanto, uma ampliação da formulação logaritmo-conformação proposta por Fattal e Kupferman [15, 16] (Apêndice A.1), que permite apenas a aplicação do logaritmo natural ($\ln$). A função núcleo $\log_d$ é definida por

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \log_d(\mathbf{A}) = \log_d(\mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top) = \mathbf{O}\log_d(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top, \quad (3.42)$$

e inversamente,

$$\mathbf{A} = d^{\mathbb{K}(\mathbf{A})}. \quad (3.43)$$

Dessa forma, a matriz $\mathbf{J}$ pode ser determinada por

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \frac{\partial(\log_d(\mathbf{\Lambda}))}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \frac{1}{\ln(d)} \frac{1}{\mathbf{\Lambda}} = \frac{\mathbf{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)}. \quad (3.44)$$

Em particular, para $d = e$ então $\mathbf{J} = \mathbf{\Lambda}^{-1}$.

Continuando, é possível calcular

$$\mathbb{B} = \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{B}}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}(\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J})\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\left(\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\frac{\mathbf{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)}\right)\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{O}^\top \frac{1}{\ln(d)} = \frac{\mathbf{B}}{\ln(d)}. \quad (3.45)$$

Em particular, para $d = e$ então $\mathbb{B} = \mathbf{B}$.

Também é possível determinar o termo $\mathbb{H} = \mathbf{O}\mathbf{P}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}\mathbf{O}^\top$, da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \mathbf{O}(\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})]\frac{\mathbf{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)}\mathbf{O}^\top = \frac{1}{\ln(d)}\mathbf{O}(\mathbf{\Lambda}^{-1} - \mathbf{I})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})]\mathbf{O}^\top = \\ &= \frac{1}{\ln(d)}(\mathbf{O}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{O}^\top - \mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{I} - \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{O}^\top - \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top + \mathbf{I})) = \\ &= \frac{1}{\ln(d)}(d^{-\mathbb{K}} - \mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{I} - d^{-\mathbb{K}} - d^{\mathbb{K}} + \mathbf{I})) = \frac{d^{-\mathbb{K}}}{\ln(d)}(\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}})[\mathbf{I} + \alpha_G(d^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Portanto, a equação constitutiva para a transformação núcleo $\log_d$ aplicada ao tensor conformação pode ser escrita como

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}) = (\mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega}) + \frac{2}{\ln(d)}\mathbf{B} + \frac{d^{-\mathbb{K}}}{Wi \ln(d)}(\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}})[\mathbf{I} + \alpha_G(d^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})]. \quad (3.47)$$

Em particular, para $d = e$, a equação (3.47) é equivalente à equação constitutiva (A.16)

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}) = \mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} + \frac{e^{-\mathbb{K}}}{Wi}(\mathbf{I} - e^{\mathbb{K}})[\mathbf{I} + \alpha_G(e^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})]. \quad (3.48)$$

3.1.2 Função Raiz k -ésima Núcleo-Conformação

Trata-se de uma versão que considera a decomposição raiz quadrada ($k = 2$) como um caso particular, à medida que permite a aplicação de qualquer potência ($k \in \mathbb{Z}$). A função núcleo raiz k -ésima é definida por

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \mathbf{A}^{\frac{1}{k}} = (\mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top)^{\frac{1}{k}} = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top, \quad (3.49)$$

e inversamente,

$$\mathbf{A} = \mathbb{K}^k. \quad (3.50)$$

Dessa forma, a matriz $\mathbf{J}$ pode ser determinada por

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \frac{\partial \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}}}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \frac{\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}-1}}{k} = \frac{\mathbf{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k}. \quad (3.51)$$

Continuando, é possível calcular

$$\mathbb{B} = \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{B}}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}(\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J})\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\left(\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\frac{\mathbf{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k}\right)\mathbf{O}^\top = \frac{1}{k}\mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}}\mathbf{O}^\top = \frac{\mathbf{B}\mathbb{K}}{k}. \quad (3.52)$$

Também é possível determinar o termo $\mathbb{H} = \mathbf{O}\mathbf{P}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}\mathbf{O}^\top$, da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \mathbf{O}(\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})]\frac{\mathbf{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k}\mathbf{O}^\top = \frac{1}{k}\mathbf{O}((\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}})^{1-k} - \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})]\mathbf{O}^\top = \\ &= \frac{1}{k}\mathbf{O}((\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}})^{1-k} - \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}})\mathbf{O}^\top\mathbf{O}[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})]\mathbf{O}^\top = \frac{1}{k}(\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbb{K}^k - \mathbf{I})]. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Portanto, a equação constitutiva para a transformação núcleo raiz k -ésima aplicada ao tensor conformação pode ser escrita como

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}) = (\mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega}) + \frac{2}{k}\mathbf{B}\mathbb{K} + \frac{1}{kWi}(\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbb{K}^k - \mathbf{I})]. \quad (3.54)$$

Método Numérico

Neste capítulo são apresentados os métodos numéricos considerados mais adequados e utilizados na obtenção das soluções das equações na formulação da técnica de Simulação Numérica Direta.

4.1 Simulação Numérica Direta

O sistema de equações (2.43) – (2.48) é resolvido numericamente através da Simulação Numérica Direta, o que demanda a utilização de métodos aplicados em discretizações espacial e temporal, além de métodos dedicados à solução de equações diferenciais parciais, em particular, uma equação de Poisson. Além disso, são implementadas técnicas de introdução de perturbação e de amortecimento de perturbações próximo ao contorno de entrada e de saída do escoamento.

Os métodos utilizados são escolhidos com base em referências da literatura, com o intuito de garantir a obtenção de resultados satisfatórios para o problema de forma eficiente. A escolha bem sucedida dos métodos adequados para cada etapa da solução, bem como o uso de computadores com alto poder de processamento, permitem calcular todas as escalas de turbulência de um escoamento pela completa resolução das equações governantes.

A fim de simular adequadamente os efeitos transientes, necessita-se empregar incrementos de tempo relativamente pequenos na simulação numérica. Para tanto, a discretização temporal das equações modelo do escoamento, bem como dos tensores não-Newtonianos é realizada através de um esquema de Runge-Kutta clássico de quarta ordem [18].

Discretizações espaciais para o cálculo das derivadas são realizadas usando métodos de diferenças finitas compactas de alta ordem [48, 46, 32, 30], mais especificamente, quinta e sexta ordem de precisão [48]. A utilização desses métodos demanda a solução de sistemas lineares tridiagonais. Pelo fato de adotar discretizações centradas de alta ordem de precisão, também é necessário a utilização de filtro espacial a fim de eliminar perturbações espúrias da solução numérica.

O sistema linear resultante da solução numérica da equação de Poisson é resolvido utilizando um esquema completo de Aproximação Multigrid (FAS) num ciclo V composto por 4 níveis [46].

4.2 Introdução de Perturbações

Perturbações temporais em um escoamento se propagam como ondas. As ondas de Tollmien-Schlichting são as primeiras instabilidades que surgem, junto à parede, e caracterizam-se por apresentar pequenas amplitudes e comportamento laminar. Se estas ondas se propagam na direção do escoamento principal, são conhecidas como ondas de Tollmien-Schlichting planares.

A transição laminar-turbulenta pode ser desencadeada pelo crescimento de perturbações de pequena amplitude, tais como as ondas de Tollmien-Schlichting [54]. Estas ondas são amplificadas lentamente até que possam eventualmente crescer o suficiente para que as não-linearidades assumam o controle e o escoamento sofra transição para turbulência. Desde que a existência de ondas de instabilidade de Tollmien-Schlichting foi confirmada por Schubauer e Skramstad [45], muitos estudos foram realizados para explorar e explicar melhor a transição.

As perturbações temporais são introduzidas através da técnica de injeção e sucção de massa na parede, que consiste na imposição do componente de velocidade normal à parede sendo maior ou menor que zero, respectivamente. De acordo com Fasel et al. [14], a introdução de perturbação através da técnica de injeção e sucção de massa na parede é muito eficiente para gerar ondas de Tollmien-Schlichting.

De acordo com o modo de implementação, o método assume que no tempo inicial $t = 0$ o escoamento não possui perturbações. Após um intervalo δt , mais especificamente no tempo $t + \delta t$, as perturbações são inseridas por injeção e sucção de massa na parede em uma determinada região, compreendida entre x_1 e x_2 , conforme ilustrado na Figura 4.1.

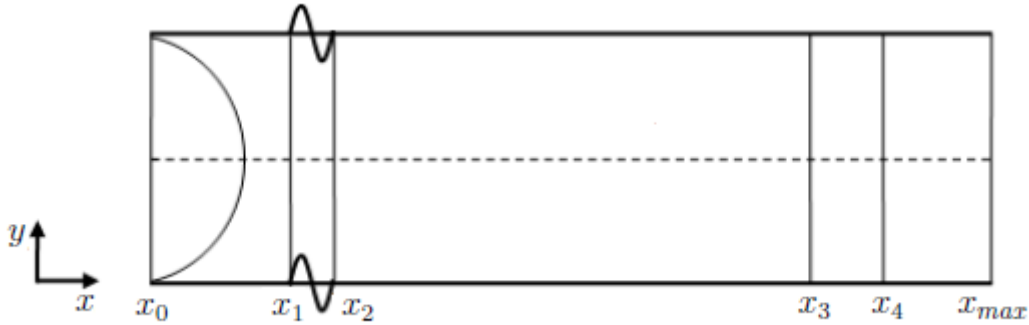


Figura 4.1: Domínio computacional do escoamento de Poiseuille 2D.

Esta perturbação é introduzida assumindo a velocidade v representada por meio de uma função polinomial $f(x)$ de grau 9 (Figura 4.2) para

$$v = A_p f(x) \sin(\omega_t t), \quad x_1 < x < x_2, \quad (4.1)$$

e

$$v = 0, \quad x \leq x_1 \quad \text{ou} \quad x \geq x_2, \quad (4.2)$$

onde A_p representa uma constante utilizada para ajustar a amplitude das perturbações, ω_t é a frequência temporal da perturbação e t é o tempo.

Com o objetivo de suavizar a introdução das perturbações no escoamento, os coeficientes do polinômio são escolhidos convenientemente de tal maneira que o valor da função e das suas primeira e segunda derivadas nos pontos x_1 e x_2 sejam nulos.

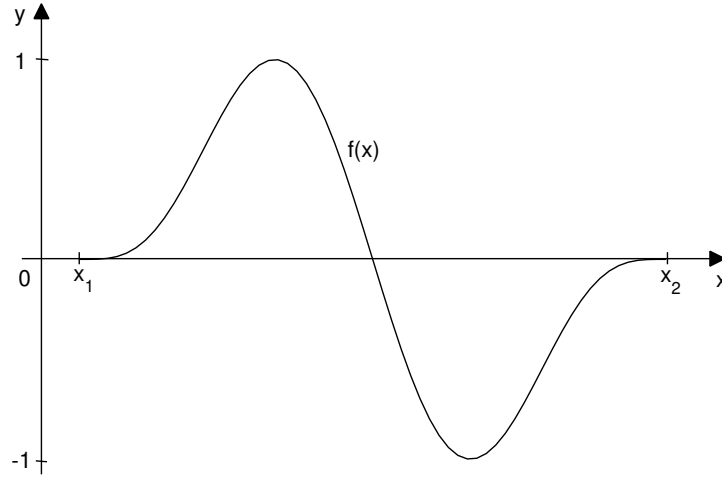


Figura 4.2: Amplitude de distribuição da componente normal de velocidade.

4.3 Aproximação Numérica de Derivadas Temporais

Para simular adequadamente os efeitos transientes, necessita-se empregar incrementos de tempo (Δt) na simulação numérica relativamente pequenos, da mesma ordem de grandeza necessária para que se satisfaçam os critérios de estabilidade numérica [46]. Sendo assim, o método numérico utilizado para discretização temporal das equações que modelam o escoamento e dos componentes do tensor extra-tensão das equações do fluido viscoelástico, é um esquema clássico de quatro etapas de integração de Runge-Kutta de quarta ordem.

O método Runge-Kutta empregado é do tipo Previsor-Corretor onde, os métodos de Euler explícito e implícito são utilizados como previsor e corretor, respectivamente, para um avanço temporal de t a $t + \frac{\Delta t}{2}$. O avanço para $t + \Delta t$ é realizado pela aplicação de um previsor baseado na regra do ponto médio e um corretor baseado na regra de Simpson. Os quatro passos do método são descritos como segue

$$\omega_z^{(n+\frac{1}{2})^*} = \omega_z^n + \frac{\Delta t}{2} g(t^n, \omega_z^n), \quad (4.3)$$

$$\omega_z^{(n+\frac{1}{2})^{**}} = \omega_z^n + \frac{\Delta t}{2} g(t^{n+\frac{1}{2}}, \omega_z^{(n+\frac{1}{2})^*}), \quad (4.4)$$

$$\omega_z^{(n+1)^*} = \omega_z^n + (\Delta t) g(t^{n+\frac{1}{2}}, \omega_z^{(n+\frac{1}{2})^{**}}), \quad (4.5)$$

$$\omega_z^{(n+1)} = \omega_z^n + \frac{\Delta t}{6} \left[g(t^n, \omega_z^n) + 2g(t^{n+\frac{1}{2}}, \omega_z^{(n+\frac{1}{2})^*}) + 2g(t^{n+\frac{1}{2}}, \omega_z^{(n+\frac{1}{2})^{**}}) + g(t^{n+1}, \omega_z^{(n+1)^*}) \right], \quad (4.6)$$

sendo

$$g(t, \omega_z) \equiv \frac{\partial \omega_z}{\partial t} = -\frac{\partial(u\omega_z)}{\partial x} - \frac{\partial(v\omega_z)}{\partial y} + \frac{\beta}{Re} \left[\frac{\partial^2 \omega_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega_z}{\partial y^2} \right] - \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 T_{22}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 T_{11}}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 T_{12}}{\partial y^2}, \quad (4.7)$$

que corresponde à equação (2.45) de transporte de vorticidade.

Analogamente, a evolução temporal das componentes do tensor extra-tensão também é realizada através desse método, em quatro passos

$$\begin{aligned}
g(t, T_{11}) \equiv \frac{\partial T_{11}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uT_{11})}{\partial x} - \frac{\partial(vT_{11})}{\partial y} + 2T_{11}\frac{\partial u}{\partial x} + 2T_{12}\frac{\partial u}{\partial y} + \\
& -\frac{\alpha_G Re}{1-\beta} (T_{11}^2 + T_{12}^2) + 2\frac{1-\beta}{ReWi}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{Wi}T_{11}, \quad (4.8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g(t, T_{12}) \equiv \frac{\partial T_{12}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uT_{12})}{\partial x} - \frac{\partial(vT_{12})}{\partial y} + T_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + T_{22}\frac{\partial u}{\partial y} + \\
& -\alpha_G \frac{Re}{1-\beta} (T_{12}(T_{11} + T_{22})) + \frac{1-\beta}{ReWi} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{1}{Wi}T_{12}, \quad (4.9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g(t, T_{22}) \equiv \frac{\partial T_{22}}{\partial t} = & -\frac{\partial(uT_{22})}{\partial x} - \frac{\partial(vT_{22})}{\partial y} + 2T_{12}\frac{\partial v}{\partial x} + 2T_{22}\frac{\partial v}{\partial y} + \\
& -\alpha_G \frac{Re}{1-\beta} (T_{12}^2 + T_{22}^2) + 2\frac{1-\beta}{ReWi}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{Wi}T_{22}. \quad (4.10)
\end{aligned}$$

4.4 Aproximação Numérica de Derivadas Espaciais

Para calcular as derivadas espaciais utiliza-se diferenças finitas compactas de alta ordem [30, 32, 46, 48] e neste estudo optou-se por um esquema de sexta ordem. Aproximações de sexta ordem foram aplicadas aos pontos próximos ao contorno, enquanto que nos pontos do contorno utilizou-se aproximações de quinta ordem. Aproximações de sexta ordem foram testadas, mas resultaram em instabilidades numéricas [46]. Os sistemas lineares tridiagonais resultantes da aplicação deste esquema foram resolvidos pelo algoritmo de Thomas.

Para o cálculo da aproximação referente à primeira derivada de uma função em f , tem-se

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} 1 & 4 & & & & \\ 1 & 6 & 2 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & 3 & 1 \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 2 & 6 & 1 \\ & & & & & & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1' \\ f_2' \\ \vdots \\ f_i' \\ \vdots \\ f_{n-1}' \\ f_n' \end{bmatrix} = \\
& = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \frac{1}{24}(-74f_1 + 16f_2 + 72f_3 - 16f_4 + 2f_5) \\ \frac{1}{120}(-406f_1 - 300f_2 + 760f_3 - 80f_4 + 30f_5 - 4f_6) \\ \vdots \\ \frac{1}{12}(-f_{i-2} - 28f_{i-1} + 28f_{i+1} + f_{i+2}) \\ \vdots \\ \frac{1}{120}(406f_n + 300f_{n-1} - 760f_{n-2} + 80f_{n-3} - 30f_{n-4} + 4f_{n-5}) \\ \frac{1}{24}(74f_n - 16f_{n-1} - 72f_{n-2} + 16f_{n-3} - 2f_{n-4}) \end{bmatrix}, \quad (4.11)
\end{aligned}$$

em que h representa o espaçamento e n representa o número de pontos discretizados. De forma similar, o cálculo da segunda derivada resulta no sistema

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} 13 & 137 & & & & \\ & 1 & 12 & 3 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & 2 & 11 & 2 \\ & & & & \ddots & \\ & & & & 2 & 12 & 1 \\ & & & & & 137 & 13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1'' \\ f_2'' \\ \vdots \\ f_i'' \\ \vdots \\ f_{n-1}'' \\ f_n'' \end{bmatrix} = \\
& = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} \frac{1}{60}(9775f_1 - 20285f_2 + 11170f_3 - 550f_4 - 145f_5 + 36f_6) \\ \frac{1}{360}(4834f_1 - 8424f_2 + 1890f_3 + 2320f_4 - 810f_5 + 216f_6 - 26f_7) \\ \vdots \\ \frac{1}{4}(3f_{i-2} + 48f_{i-1} - 102f_i + 48f_{i+1} + 3f_{i+2}) \\ \vdots \\ \frac{1}{360}(4834f_n - 8424f_{n-1} + 1890f_{n-2} + 2320f_{n-3} - 810f_{n-4} + 216f_{n-5} - 26f_{n-6}) \\ \frac{1}{60}(9775f_n - 20285f_{n-1} + 11170f_{n-2} - 550f_{n-3} - 145f_{n-4} + 36f_{n-5}) \end{bmatrix}. \quad (4.12)
\end{aligned}$$

4.5 Amortecimento de Reflexões na Entrada do Escoamento

Segundo Meitz [36], simulações numéricas nas quais vórtices longitudinais estão presentes, podem sofrer interferência indesejada de reflexões destes vórtices na entrada do domínio. A fim de evitar essas possíveis reflexões, introduz-se uma zona de amortecimento próxima à entrada, através do ponderamento da componente de vorticidade por meio da seguinte função

$$f_1(x) = f_1(\epsilon) = 6\epsilon^5 - 15\epsilon^4 + 10\epsilon^3, \quad (4.13)$$

onde ϵ depende dos pontos (i) da discretização na direção x do escoamento, sendo definido como

$$\epsilon = \frac{i - 1}{i_1 - 1}, \quad (4.14)$$

para $1 \leq i \leq i_1$. Assim, a função $f_1(x)$ é aplicada no intervalo da seguinte forma

$$\omega_z(x, y, t) = f_1(x)\hat{\omega}_z(x, y, t). \quad (4.15)$$

O termo $\hat{\omega}_z(x, y, t)$ representa o componente de vorticidade calculado pelo integrador temporal e $\omega_z(x, y, t)$ é o valor do componente obtido após a aplicação do amortecimento [20].

4.6 Relaminarização do Escoamento

Da mesma forma como ocorre na região de entrada, a reflexão numérica de perturbações convectivas presentes na região de saída do escoamento, podem não corresponder aos efeitos físicos, e acabam por comprometer a qualidade dos resultados numéricos.

Nesse sentido, Kloker [30], Meitz [36] e Souza [46] estudaram técnicas de relaminarização para eliminar tais efeitos de reflexão de onda.

Em seu trabalho, Kloker [30] testou e comparou diferentes técnicas na região de saída do escoamento, tais como a linearização das equações ou o aumento da viscosidade. Porém os resultados mostraram que o método mais eficaz foi suprimir espacialmente a vorticidade de perturbação dentro de uma zona de relaminarização.

Em resumo, a essência desta técnica está em considerar um intervalo próximo à saída do escoamento, e neste intervalo impor condições capazes de provocar um decaimento das perturbações dos componentes de vorticidade, chegando a zero.

Conforme adotado neste trabalho, considerando o intervalo $x_3 < x < x_4$ em correspondência com os pontos i_3 e i_4 da malha, utiliza-se uma função f_2 que satisfaz: $f_2(x_3) = 1$ até $f_2(x_4) = 0$. Assim,

$$\omega_z(x, y, t) = f_2(x)\hat{\omega}_z(x, y, t), \quad (4.16)$$

é aplicada em todo o intervalo definido. Ressalta-se que $\hat{\omega}_z(x, y, t)$ representa o componente da vorticidade calculado pelo integrador temporal e $\omega_z(x, y, t)$ é o valor alcançado após a relaminarização.

Em seus estudos, Kloker [30] considera $f_2(x)$ como sendo um polinômio de quinta ordem

$$f_2(x) = f_2(\epsilon) = 1 - 6\epsilon^5 + 15\epsilon^4 - 10\epsilon^3, \quad (4.17)$$

onde

$$\epsilon = \frac{i - i_3}{i_4 - i_3}, \quad i_3 \leq i \leq i_4. \quad (4.18)$$

Esse polinômio respeita a variação da função, que deve ser de 1 até 0 e suas derivadas são suaves de tal maneira que reflexões são evitadas.

Porém, Meitz [36] num estudo mais detalhado, conseguiu descrever os efeitos da aplicação desta técnica de relaminarização a cada passo do integrador temporal, n vezes, como

$$\omega_z(x, y, t) = f_2^n(x)\hat{\omega}_z(x, y, t), \quad (4.19)$$

e verificou que esta repetição leva a um decaimento brusco da vorticidade dentro do intervalo de relaminarização (Figura 4.3), podendo causar reflexões de ondas, que é justamente o que se deseja evitar. Então, Meitz [36] propôs a utilização da seguinte função

$$f_3(x) = f_3(\epsilon) = e^{-\frac{\epsilon^4}{10}}(1 - \epsilon^{50})^4. \quad (4.20)$$

Pode-se perceber através da Figura 4.4 que as curvas para valores mais altos de n são muito mais suaves do que na Figura 4.3 que se refere a função f_2 . Em seu trabalho, Meitz [36] deixa claro que a função de amortecimento f_3 teve um bom desempenho. Portanto esta foi a função implementada neste trabalho.

Segundo Souza [46] ainda deve-se respeitar as seguintes restrições para garantir um bom funcionamento da técnica

$$\begin{aligned} i_4 - i_3 &\geq 2\lambda, \\ i_{max} - i_4 &\geq \lambda, \end{aligned}$$

onde λ é um comprimento de onda de Tollmien-Schlichting.

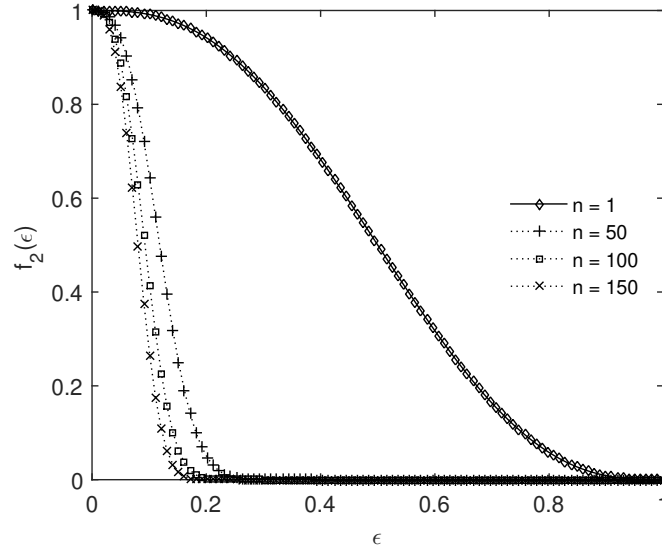


Figura 4.3: Efeito de aplicar a função f_2 de relaminarização n vezes, segundo Meitz [36].

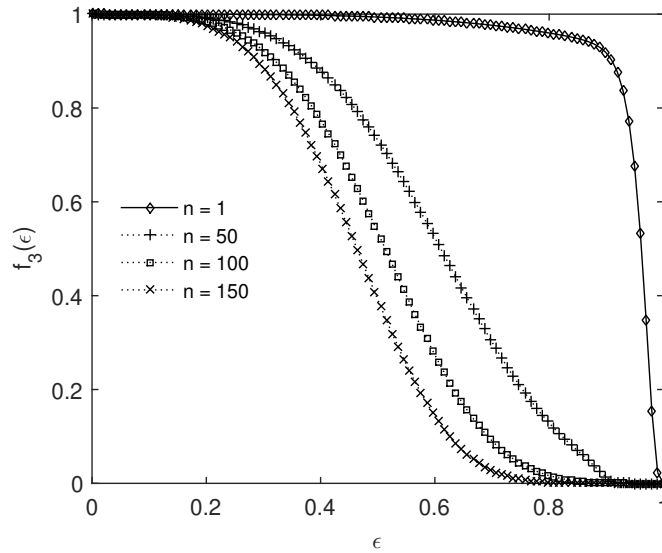


Figura 4.4: Efeito de aplicar a função f_3 de relaminarização n vezes, segundo Meitz [36].

4.7 Cálculo da Vorticidade na Parede

Para calcular os componentes de vorticidade na parede, isto é, em $y = -1$ e $y = 1$, primeiramente é preciso resolver as equações de Poisson e da continuidade para as componentes da velocidade. Só então, segundo Souza [46], realiza-se os seguintes procedimentos:

a) Calcula-se

$$J = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}. \quad (4.21)$$

No intervalo entre os pontos x_1 e x_2 , a segunda derivada na direção x é calculada analiticamente, considerando a mesma função utilizada para introduzir as ondas de Tollmien-Schlichting. Nos demais pontos, essa derivada é considerada nula.

Na direção y , calcula-se a segunda derivada por meio de uma aproximação explícita e descentrada, como a que está apresentada abaixo

$$\left. \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right|_{y=-1} = \frac{1}{18\delta y^2} [-134.89v_1 + 216v_2 - 135v_3 + 80v_4 - 33.75v_5 + 8.64v_6 - v_7] + O(\delta y^6). \quad (4.22)$$

Em $y = 1$, uma aproximação similar é empregada. Essas aproximações reforçam o fato de que $\left. \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right|_{y=\text{parede}} = 0$.

- b) Desde que calculados os valores do laplaciano da velocidade, então o componente de vorticidade pode ser obtido por meio da equação a seguir, que tem relação com a equação (2.36)

$$\frac{\partial \omega_z}{\partial x} = -J. \quad (4.23)$$

Souza [46] propõe as seguintes aproximações numéricas:

- Para $i = 2$ ($i = 1$ é condição de entrada):

$$\omega_{z_2} = \frac{1}{720} [\delta x (251\omega'_{z_1} + 646\omega'_{z_2} - 264\omega'_{z_3} + 106\omega'_{z_4} - 19\omega'_{z_5}) + 720\omega_{z_1}] + O\left(\frac{3}{160}\delta x^6\right); \quad (4.24)$$

- Para $3 \leq i \leq i_{max} - 2$:

$$\omega_{z_2} = \frac{1}{57} [\delta x (10\omega'_{z_{i-2}} + 57\omega'_{z_{i-1}} + 24\omega'_{z_i} - \omega'_{z_{i+1}}) + 33\omega_{z_{i-2}} + 24\omega_{z_{i-1}}] + O\left(\frac{11}{3420}\delta x^6\right); \quad (4.25)$$

- Para $i_{max} - 1$: uma aproximação similar àquela aplicada para $i = 2$ é utilizada.

4.8 Algoritmo Numérico

Em seus estudos, Lele [32] apresenta diversas estratégias para filtragem, dentre as quais encontra-se um método compacto de quarta ordem, que foi adotado neste trabalho. A técnica de filtragem é aplicada após cada iteração temporal, e consiste em recalculer a componente de vorticidade através de um sistema pentadiagonal [46]. Ainda, um filtro que também requer a solução de outro sistema pentadiagonal é aplicado à componente de vorticidade e as componentes dos tensores após o último passo de Runge-Kutta.

Os resultados deste estudo foram obtidos de uma adaptação no código computacional desenvolvido por Souza [46]. O seguinte algoritmo é então aplicado para resolver numericamente o sistema de equações (2.43) – (2.48)

1. Aplica-se um passo do integrador de tempo para a vorticidade e para os tensores não-Newtonianos;
2. Aplica-se as funções responsáveis pelas zonas de amortecimento e relaminarização do escoamento;
3. Introduz-se as perturbações por injeção e sucção de massa nas paredes;
4. Calcula-se o lado direito da equação de Poisson, dada pela equação (2.44);
5. Determina-se a velocidade v , resolvendo a equação de Poisson (2.44);
6. Calcula-se o valor da velocidade u através da equação (2.43);
7. Calcula-se a vorticidade ω_z através da equação (2.45);
8. Determina-se os componentes do tensor extra-tensão não-Newtoniano através das equações (2.46) - (2.48);
9. Atualiza-se o valor da vorticidade $\hat{\omega}_z$ nas paredes;
10. Aplica-se o filtro após o último passo do integrador de tempo.

Após o último subpasso do integrador temporal, aplica-se o filtro computacional. Finaliza-se o método numérico quando se atinge o tempo limite imposto para a simulação.

A formulação núcleo-conformação é implementada junto ao código gerador do escoamento base. Este código tem uma estrutura parecida com a do algoritmo acima, embora sem introdução de perturbações.

1. Inicia o tensor conformação $\mathbf{A}$ a partir do tensor extra-tensão $\mathbf{T}$ utilizando a equação (3.2);
2. Decompõe $\mathbf{A}$ em autovalores (Λ) e autovetores ($\mathbf{O}$), analiticamente;
3. Aplica-se função núcleo e constrói $\mathbb{K}(\mathbf{A})$;
4. Aplica-se um passo do integrador de tempo para a vorticidade e para $\mathbb{K}(\mathbf{A})$;
5. Aplica-se as funções responsáveis pelas zonas de amortecimento e relaminarização do escoamento;
6. Calcula-se o lado direito da equação de Poisson, dada pela equação (2.44);
7. Determina-se a velocidade v , resolvendo a equação de Poisson (2.44);
8. Calcula-se o valor da velocidade u através da equação (2.43);
9. Calcula-se a vorticidade ω_z através da equação (2.45);
10. Determina-se os componentes de $\mathbb{K}(\mathbf{A})$ através da equação de evolução (3.41) (ver Apêndice B : equações (B.47) – (B.49));
11. Atualiza-se o valor da vorticidade $\hat{\omega}_z$ nas paredes;
12. Aplica-se o filtro após o último passo do integrador de tempo;
13. Calcula-se $\mathbf{T}$ a partir do tensor conformação através da equação (3.3).

Resultados

Neste capítulo apresenta-se os resultados numéricos do presente estudo para a análise da estabilidade espacial de um escoamento de Poiseuille bidimensional de um fluido viscoelástico do modelo constitutivo Giesekus, simulado para altos valores do número de Weissenberg através da técnica estabilizadora do HWNP. Nesse sentido, os resultados estão organizados em três subseções: na primeira subseção realiza-se a verificação do código com a formulação núcleo-conformação. Na segunda, analisa-se a influência do número de Weissenberg nas componentes do escoamento base. E por último, realiza-se uma análise da estabilidade do escoamento com variação do parâmetro Wi , inclusive para valores altos, que foram possíveis de simular devido à utilização das técnicas de estabilização do HWNP.

5.1 Verificação do Código

Os resultados apresentados nesta seção referem-se a verificação do código desenvolvido neste trabalho. Esta verificação é realizada para um código DNS que simula o escoamento de Poiseuille plano, bidimensional, incompressível e isotérmico, utilizando o fluido viscoelástico do modelo Giesekus e a formulação núcleo-conformação como técnica estabilizadora das simulações numéricas com o parâmetro adimensional Weissenberg alto. O domínio computacional do problema pode ser visto na Figura 4.1.

Para tanto, foi necessária a comparação do código do presente estudo considerando $\alpha_G = 0$ na equação (2.15) do modelo Giesekus, com a solução analítica do escoamento nas mesmas condições, considerando o modelo Oldroyd-B [21]. Isto é válido, pois ao atribuir o valor de $\alpha_G = 0$ em (2.15), a equação constitutiva resultante é equivalente à equação do modelo Oldroyd-B, cuja solução analítica é conhecida e está disponível na literatura.

Os métodos numéricos utilizados nas simulações numéricas estão descritos no Capítulo 4, e os detalhes das decomposições matriciais necessárias para a construção dos tensores e matrizes utilizadas na implementação da técnica núcleo-conformação podem ser encontrados no Apêndice B.

Os seguintes parâmetros foram adotados para a simulação numérica do teste de verificação:

- Número de pontos no sentido do escoamento: $imax = 9049$;
- Número de pontos no sentido normal ao escoamento: $jmax = 249$;
- Distância entre dois pontos consecutivos na direção x : $dx = \frac{2\pi}{16}$;

- Distância entre dois pontos consecutivos na direção y : $dy = \frac{2}{j_{max}-1}$;
- Passo de tempo: $dt = 0.0785$.

Na Figura 5.1 é apresentado o perfil das componentes T_{11} (Figura 5.1(a)) e T_{12} (Figura 5.1(b)) do tensor extra-tensão para diferentes casos, com variações dos parâmetros adimensionais: $Re = 2000, 4000$ e 7000 , $\beta = 0.25, 0.50$ e 0.75 , e $Wi = 10, 15$ e 20 . Pode-se observar na Figura 5.1 concordância entre as soluções numéricas e analítica para todos os casos testados, sendo portanto, um indicativo de que os códigos implementados com as

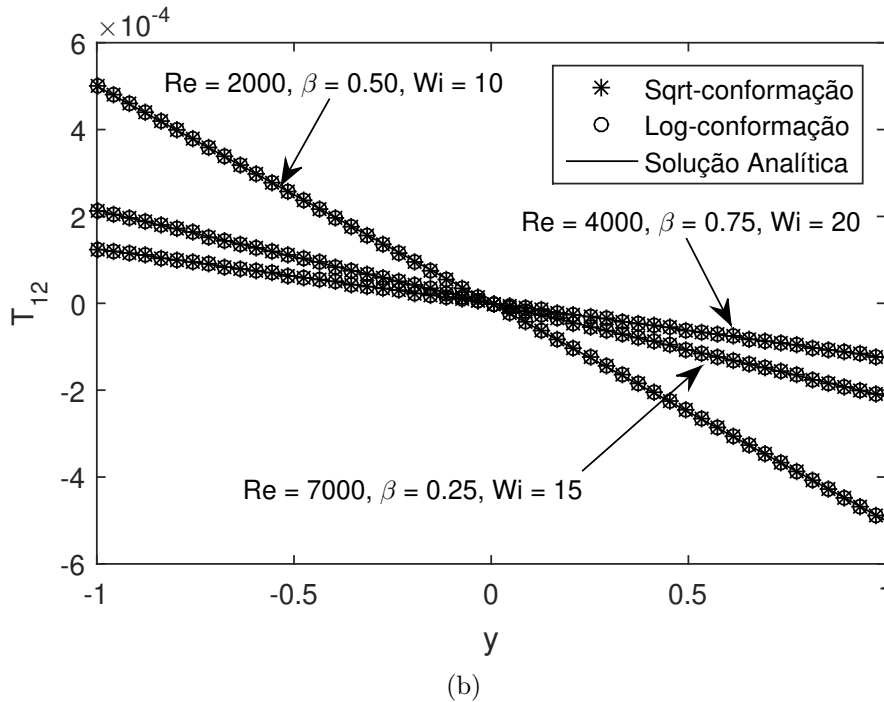
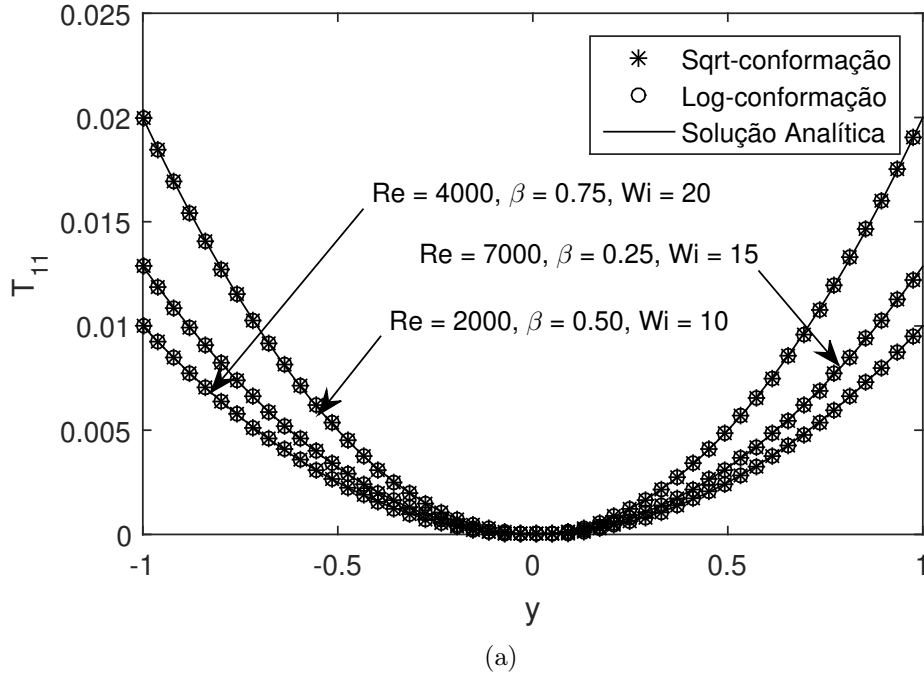


Figura 5.1: Solução numérica (Giesekus com $\alpha_G = 0$) e analítica (Oldroyd-B) para o escoamento base: (a) Tensor T_{11} e (b) Tensor T_{12} .

técnicas de estabilização log-conformação e raiz quadrada-conformação (sqrt-conformação) são adequados para simular e analisar a estabilidade dos escoamentos bidimensionais de fluidos viscoelásticos, em particular, para o modelo Giesekus.

Tendo em vista que os resultados obtidos com as técnicas de estabilização núcleo-conformação concordam entre si, e principalmente com a solução analítica, as Figuras 5.2 e 5.3 são apresentadas com objetivo de mostrar o erro relativo entre estas soluções, em particular, para a componente T_{12} do tensor não-Newtoniano, para os seguintes casos:

- Caso 1: $Re = 2000$, $\beta = 0.50$ e $Wi = 10$;
- Caso 2: $Re = 4000$, $\beta = 0.75$ e $Wi = 20$.

Considerando quatro diferentes malhas, representadas por M1 ($jmax = 193$), M2 ($jmax = 217$), M3 ($jmax = 249$) e M4 ($jmax = 289$) para a análise do erro relativo, dado por

$$\text{Erro} = \frac{\|\text{Solução numérica} - \text{Solução analítica}\|_2}{\|\text{Solução analítica}\|_2}, \quad (5.1)$$

e, ainda, a taxa de convergência dada por

$$p = \frac{\log\left(\frac{E^{M_a}}{E^{M_b}}\right)}{\log\left(\frac{M_a}{M_b}\right)}, \quad (5.2)$$

sendo E^{M_a} e E^{M_b} os erros relativos referentes as malhas M_a e M_b , respectivamente.

Pode-se notar nas Figuras 5.2 e 5.3 que para o Caso 1 a taxa de convergência aproxima-se de $p = 5$, enquanto que, para o Caso 2 torna-se próxima de $p = 4$, independente da técnica de estabilização do HWNP implementada. Isso está de acordo, exceto para a

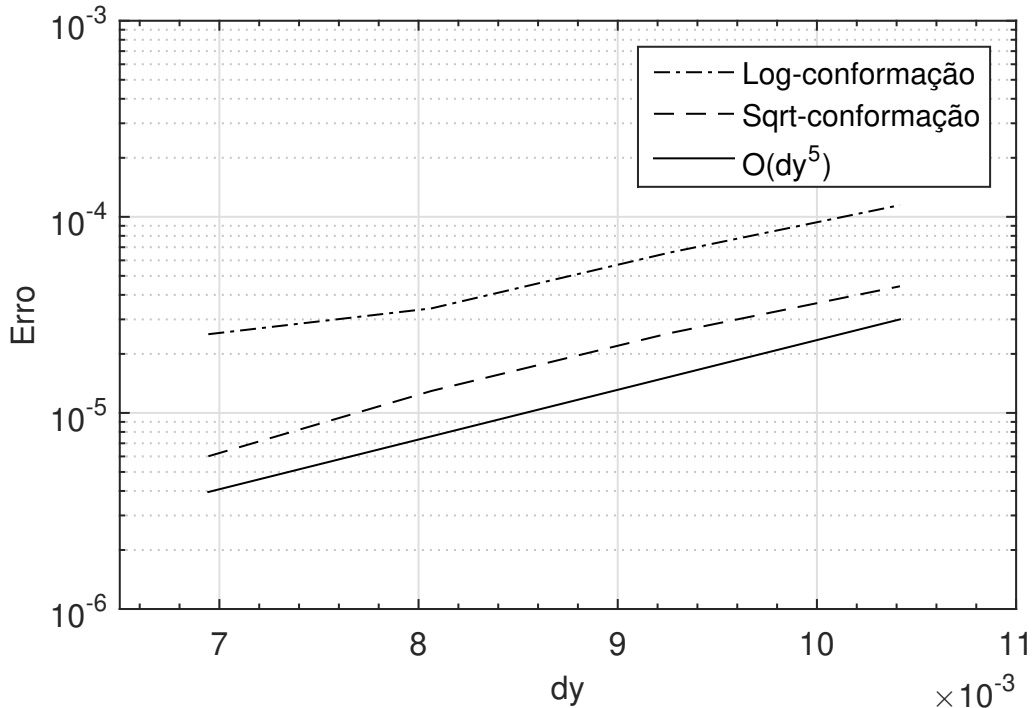


Figura 5.2: Caso 1 – erro entre a solução analítica (Oldroyd-B) e numérica utilizando DNS (Giesekus com $\alpha_G = 0$).

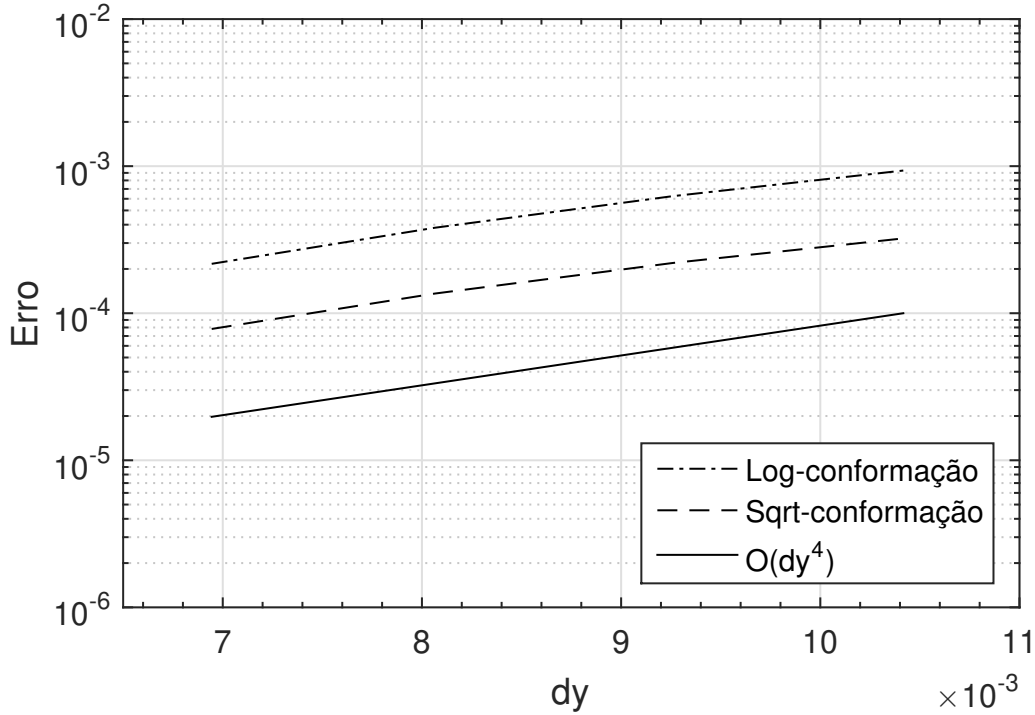


Figura 5.3: Caso 2 – erro entre a solução analítica (Oldroyd-B) e numérica utilizando DNS (Giesekus com $\alpha_G = 0$).

solução obtida com a técnica log-conformação, que em certa região apresentou uma taxa de convergência menor.

Apesar disso, os erros encontram-se na ordem de 10^{-6} e 10^{-5} para o Caso 1, e 10^{-5} e 10^{-4} para o Caso 2. Uma outra observação refere-se ao valor do erro calculado para as soluções obtidas com a formulação raiz quadrada-conformação (sqrt-conformação) que foi sempre inferior em comparação com a formulação log-conformação, independente da malha escolhida.

5.2 Escoamento Base

Nesta seção são apresentados os resultados das simulações numéricas realizadas com variações do número de Weissenberg (Wi), com o intuito de demonstrar a influência deste parâmetro no comportamento das componentes do escoamento do fluido Giesekus. A princípio, o número de Reynolds, e os parâmetros β e α_G foram fixados em $Re = 2000$, $\beta = 0.25$ e $\alpha_G = 0.15$, respectivamente, enquanto que foram considerados três diferentes valores para o número de Weissenberg, $Wi = 5, 20$ e 80 .

Nas Figuras 5.4 e 5.5 são apresentados os perfis das componentes $U(y)$ (velocidade), T_{11} , T_{12} e T_{22} (tensores não-Newtonianos) do escoamento de fluido viscoelástico, cujo código DNS foi simulado com a transformação log núcleo-conformação para estabilização do HWNP.

Pode-se notar na Figura 5.4 que o perfil de velocidade $U(y)$ aumenta quando o número de Wi também aumenta. Comparando com o perfil de velocidade Newtoniano observa-se que o comportamento do fluido viscoelástico tende a se aproximar mais do Newtoniano à medida que Wi aumenta. Já para os tensores não-Newtonianos T_{11} , T_{12} e T_{22} , observa-se na Figura 5.5 que o valor absoluto das componentes do tensor diminui à medida que o número de Weissenberg aumenta.

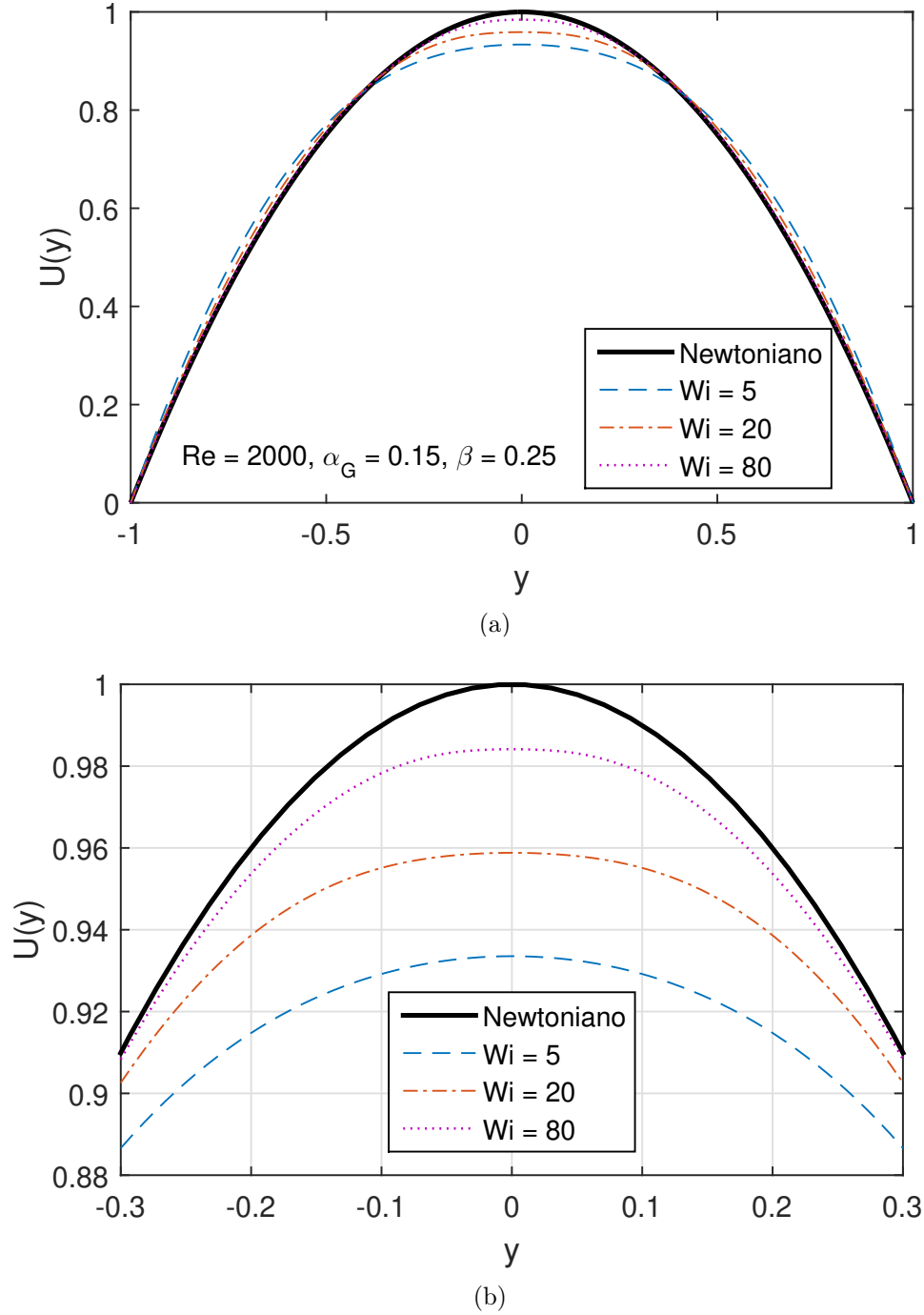
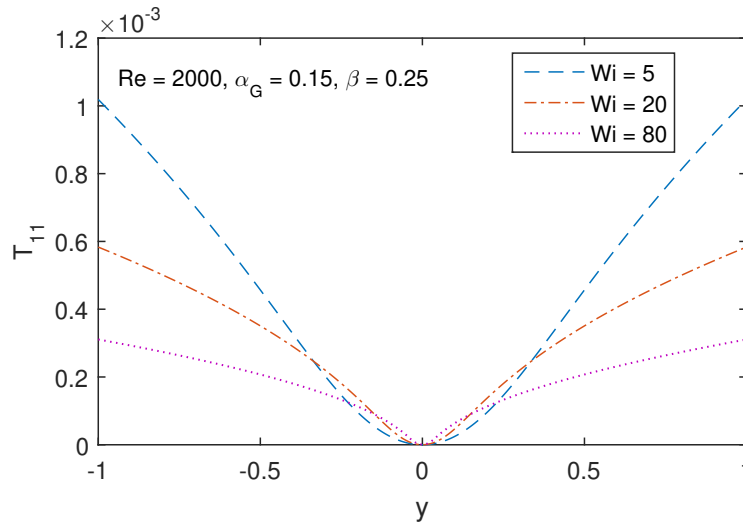


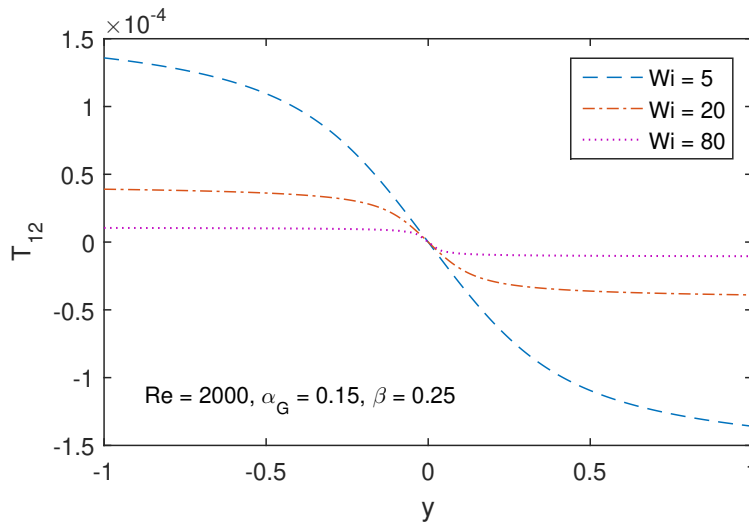
Figura 5.4: Componente da velocidade na direção do escoamento utilizando a formulação log-conformação: (a) perfil de velocidade $U(y)$ e (b) ampliação do perfil de velocidade $U(y)$.

Enquanto isso, nas Figuras 5.6 e 5.7 são apresentados os perfis das componentes $U(y)$ (velocidade), T_{11} , T_{12} e T_{22} (tensores não-Newtonianos) do escoamento de fluido viscoelástico simulado com os mesmos parâmetros, utilizando a transformação raiz quadrada núcleo-conformação. As mesmas observações consideradas nas Figuras 5.4 e 5.5, para o caso log-conformação, podem ser aplicadas para este caso.

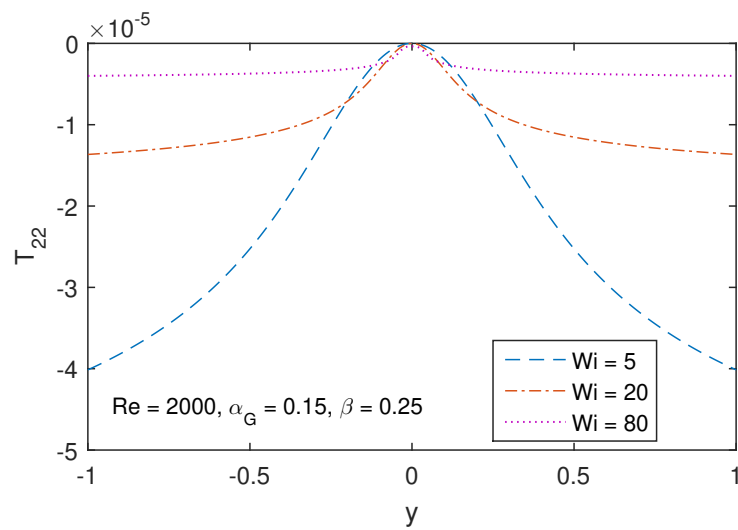
Para uma melhor visualização das Figuras 5.4(a) e 5.6(a) que representam o perfil de velocidade $U(y)$ nos escoamentos foram realizadas ampliações dessas figuras vistas nas Figuras 5.4(b) e 5.6(b), que demonstram claramente a influência das forças elásticas não-



(a)



(b)



(c)

Figura 5.5: Componentes do tensor não-Newtoniano do escoamento utilizando a formulação log-conformação: tensores (a) T_{11} ; (b) T_{12} e (c) T_{22} .

Newtonianas no perfil de velocidade, quando comparado com o perfil de velocidade do fluido Newtoniano. Além disso, é possível notar que o parâmetro Wi é capaz de influenciar esse perfil de velocidade, observando uma diferença entre as curvas do modelo Giesekus.

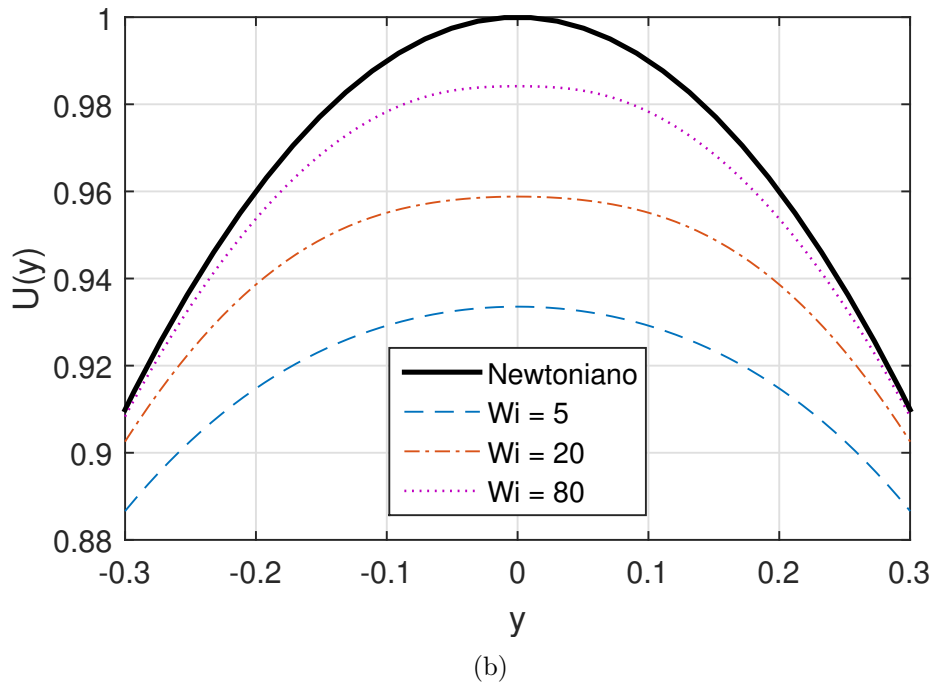
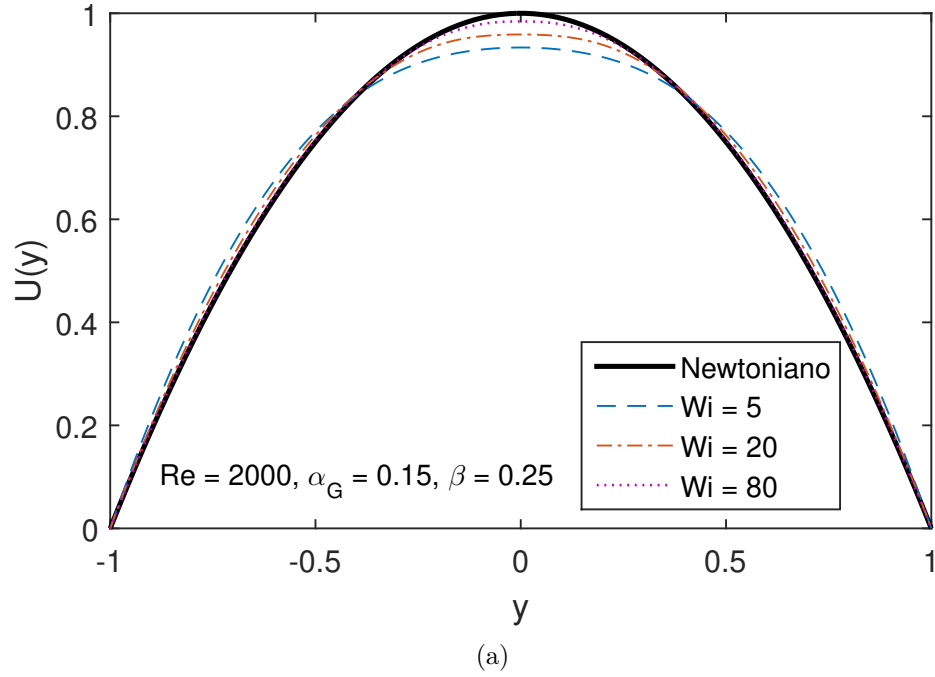


Figura 5.6: Componente da velocidade na direção do escoamento utilizando a formulação raiz quadrada-conformação: (a) perfil de velocidade $U(y)$ e (b) ampliação do perfil de velocidade $U(y)$.

Quanto ao comportamento das componentes T_{11} , T_{12} e T_{22} , vistas nas Figuras 5.5 e 5.7, nota-se que o tensor não-Newtoniano apresenta maior influência próximo às paredes, principalmente quando os valores de Wi são maiores. No meio do canal, o valor dos tensores tende a zero.

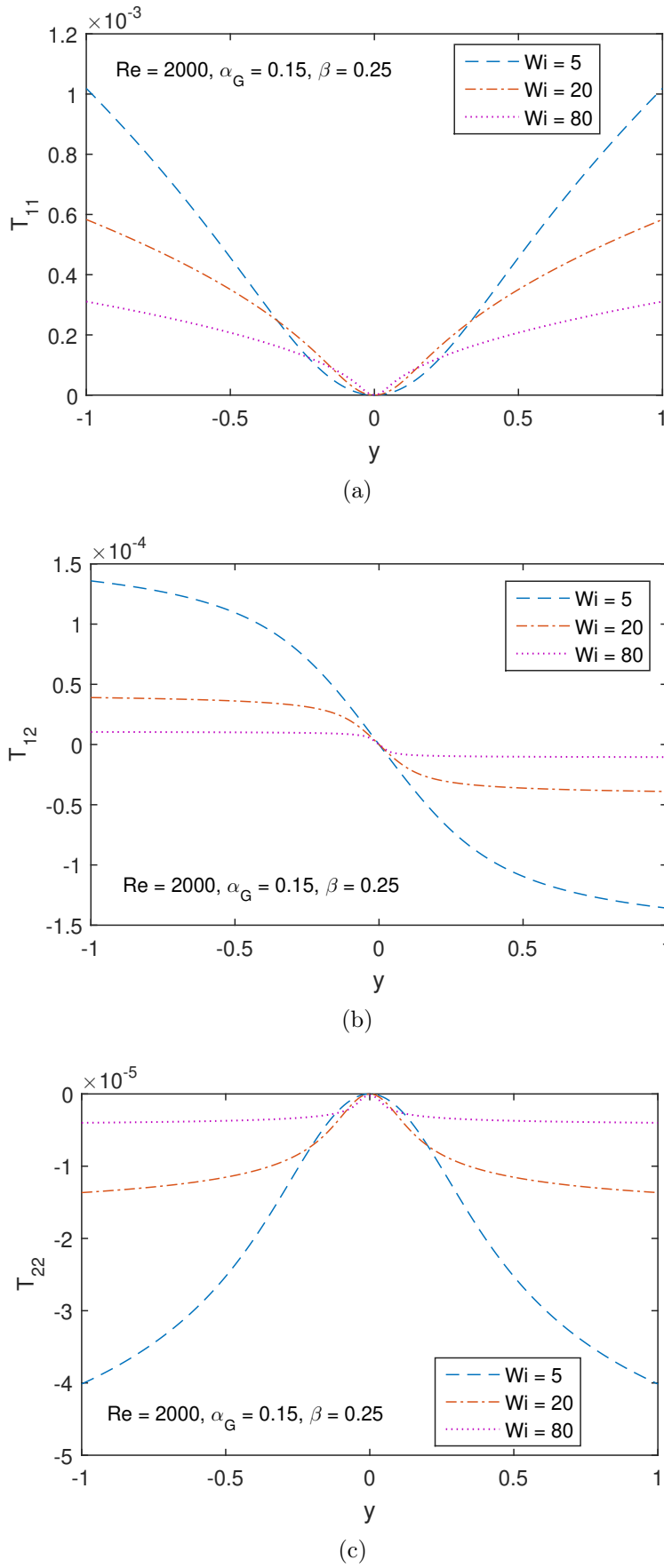


Figura 5.7: Componentes do tensor não-Newtoniano do escoamento utilizando a formulação raiz quadrada-conformação: tensores (a) T_{11} ; (b) T_{12} e (c) T_{22} .

Além disso, os resultados numéricos apresentados nas Figuras 5.4, 5.5, 5.6 e 5.7 mostram concordância em ambas as transformações núcleo-conformação. A fim de verificar essa proximidade entre as soluções obtidas através da aplicação das transformações log e raiz quadrada núcleo-conformação, a Figura 5.8 apresenta a diferença entre estas soluções numéricas. Percebe-se que embora sejam bem próximas, há algumas regiões que apresentam oscilações. Geralmente essa região está no centro do canal e as principais oscilações ocorrem para os maiores valores de Wi .

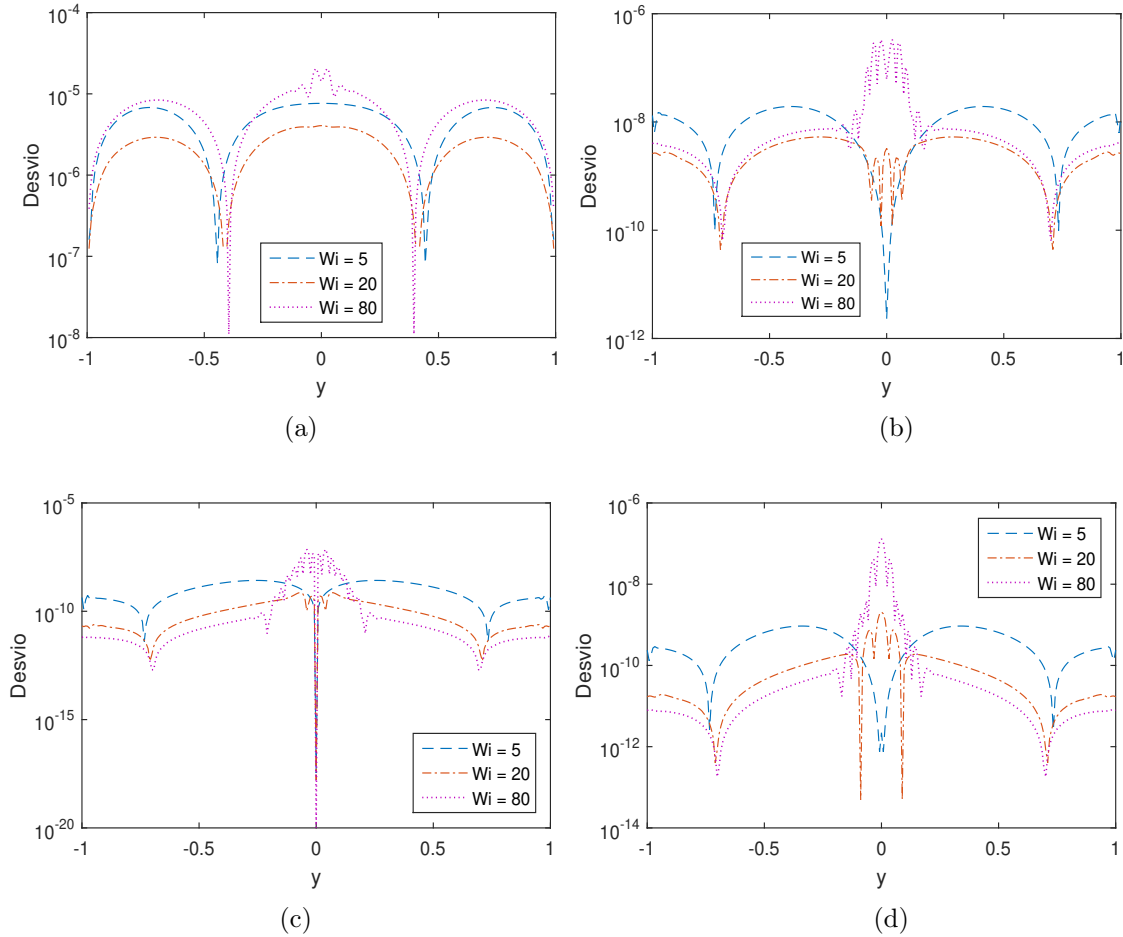


Figura 5.8: Desvio entre as soluções numéricas utilizando log-conformação e raiz quadrada-conformação: (a) velocidade $U(y)$; (b) tensor T_{11} ; (c) tensor T_{12} e (d) tensor T_{22} .

Seguindo a mesma ideia, considerando agora valores menores para os parâmetros adimensionais Re e Wi na simulação numérica do escoamento, a influência do parâmetro Weissenberg é analisada com relação ao comportamento das componentes do escoamento base do fluido Giesekus. Considerando o número de Reynolds e os parâmetros adimensionais β e α_G fixos iguais a $Re = 1000$, $\beta = 0.25$ e $\alpha_G = 0.15$, respectivamente, e três diferentes valores para o número de Weissenberg, $Wi = 0.5, 1$ e 2 .

Levando em consideração que os resultados obtidos com o código DNS utilizando as técnicas núcleo-conformação concordam entre si, a seguir são apresentados apenas os resultados obtidos com a formulação log-conformação.

As Figuras 5.9 e 5.10 apresentam os perfis das componentes $U(y)$ (velocidade), T_{11} , T_{12} e T_{22} (tensores não-Newtonianos) do escoamento de fluido viscoelástico Giesekus. E, novamente, percebe-se que há influência do parâmetro Wi no comportamento do escoamento simulado, mesmo que o número de Reynolds seja menor, como neste caso.

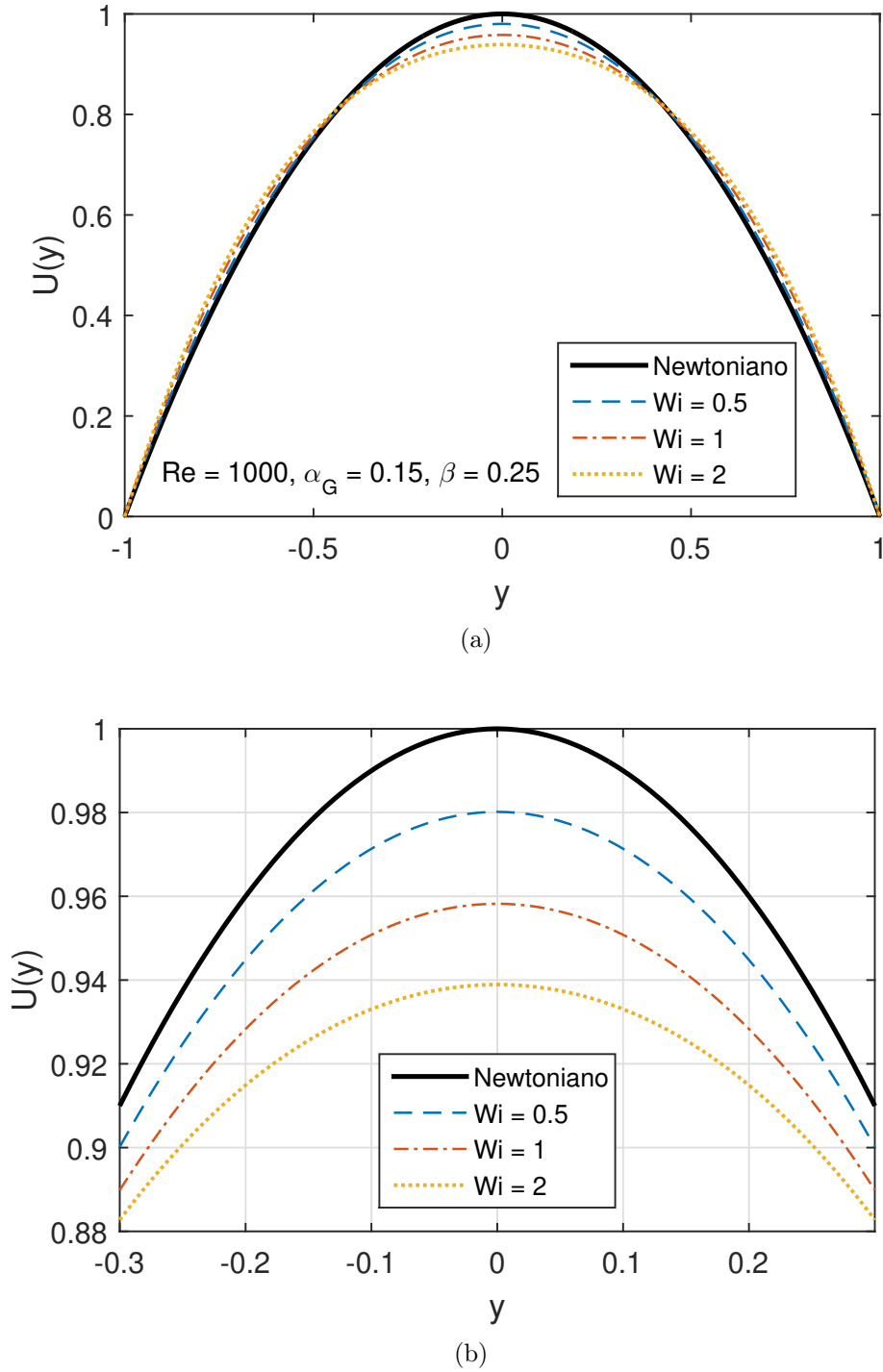


Figura 5.9: Componente da velocidade na direção do escoamento utilizando a formulação log-conformação: (a) perfil de velocidade $U(y)$ e (b) ampliação do perfil de velocidade $U(y)$.

Observa-se na Figura 5.9(b) que apresenta a ampliação do perfil de velocidade que, à medida que o número de Weissenberg diminui, o perfil de velocidade viscoelástico se aproxima do perfil de velocidade do escoamento de fluido Newtoniano.

Quanto ao tensor extra-tensão não-Newtoniano apresentado na Figura 5.10, percebe-se uma mudança no comportamento e pode-se notar principalmente que neste caso, onde o escoamento foi simulado com os parâmetros Re e Wi relativamente menores, a ordem dos tensores é maior, quando comparado com os casos testados anteriormente.

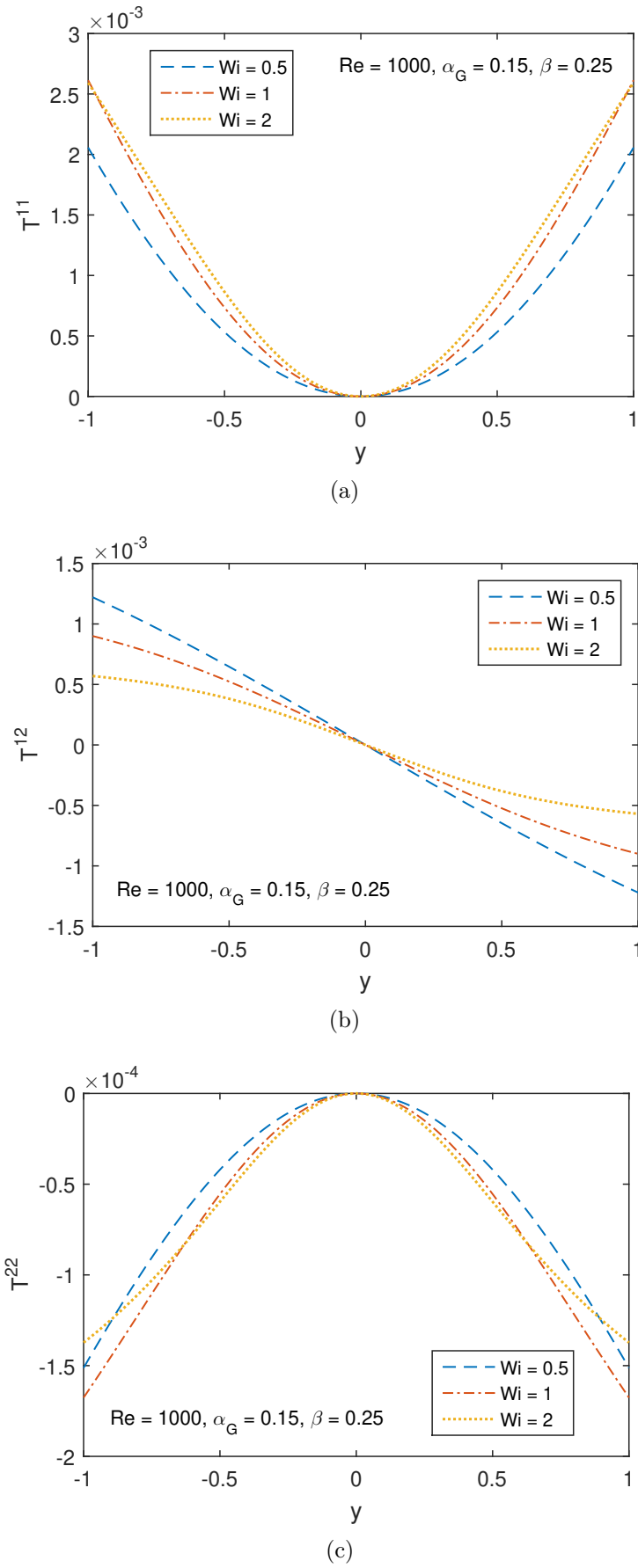


Figura 5.10: Componentes do tensor não-Newtoniano do escoamento utilizando a formulação log-conformação: tensores (a) T_{11} ; (b) T_{12} e (c) T_{22} .

5.3 Análise de Estabilidade

Nesta seção, investiga-se a estabilidade do escoamento de fluido viscoelástico Giesekus, analisando o comportamento das perturbações infinitesimais do escoamento, através da técnica DNS. Nas simulações numéricas foram considerados diferentes valores do número de Reynolds $Re = 2000, 3000, 5000, 6000, 7000$ e 9000 , $\alpha_G = 0.15, 0.20, 0.30, 0.35$ e 0.45 , $\beta = 0.25, 0.50, 0.70, 0.75$ e 0.90 , e algumas variações do número de Weissenberg $Wi = 2, 5, 10, 15, 20, 40, 45, 50, 80, 100$ e 120 .

Os parâmetros adotados nas simulações numéricas aqui realizadas foram:

- Número de pontos no sentido do escoamento: $imax = 505$;
- Número de pontos no sentido normal ao escoamento: $jmax = 249$;
- Distância entre dois pontos consecutivos na direção x : $dx = \frac{2\pi}{16\alpha_r}$;
- Distância entre dois pontos consecutivos na direção y : $dy = \frac{2}{jmax-1}$;
- Passos no tempo por período de onda: $stpp = 400$;
- Frequência de onda: $\omega_t = 0.2$;
- Passo de tempo: $dt = \frac{2\pi}{stpp\omega_t}$;
- Amplitude da perturbação: $A_p = 1 \times 10^{-4}$.

O tempo total de simulação é igual a 30 vezes o período de onda considerado. O domínio inicia em $x_0 = 1$, as perturbações são introduzidas entre os pontos $x_1 = x_0 + 39$ e $x_2 = x_0 + 71$ e a faixa de relaminarização do escoamento está situada entre os pontos $x_3 = 425$ e $x_4 = 465$, como mostra a Figura 4.1.

Com o objetivo de avaliar as taxas máximas de amplificação, diferentes simulações numéricas foram realizadas variando-se os parâmetros adimensionais para o escoamento do fluido Giesekus, comparando com o escoamento de fluido Newtoniano, e ainda, sendo testadas as técnicas de estabilização núcleo-conformação. Neste trabalho, os parâmetros estudados são o número de Weissenberg (Wi), o parâmetro α_G e a constante β . A seguir, são apresentados os resultados numéricos obtidos para cada parâmetro.

5.3.1 Variação do Número de Weissenberg

As figuras a seguir exibem resultados de simulações numéricas realizadas a partir de variações do número de Weissenberg. Diferentes casos foram selecionados variando também os demais parâmetros adimensionais para que a análise da estabilidade hidrodinâmica desses escoamentos seja realizada.

O efeito do número de Weissenberg (Wi) na estabilidade do escoamento é mostrado nas Figuras 5.11 a 5.18 para diferentes valores de Re , α_G e β . Nessas figuras são apresentadas o máximo valor da perturbação da velocidade na direção do escoamento (x) e as curvas mostram o comportamento das ondas de Tollmien-Schlichting do fluido Newtoniano e do fluido viscoelástico com seus parâmetros fixados.

Em todos os casos apresentados foram aplicadas as técnicas de estabilização núcleo-conformação. Por exemplo, as Figuras 5.11(a) e 5.12(a) apresentam os resultados obtidos através da estabilização do código por meio da transformação log-conformação. Enquanto isso, as Figuras 5.11(b) e 5.12(b) apresentam os resultados da transformação raiz quadrada-conformação. Estudos anteriores revelam que, sem a implementação das

técnicas estabilizadoras do HWNP o código não obtém resultados para maiores valores de Wi , aproximadamente $Wi > 15$ [20].

A Tabela 5.1 apresenta o tempo de execução do código com as técnicas de estabilização, em paralelo, utilizando 8 processadores, especificamente para o caso contemplado na Figura 5.12: $Re = 3000$, $\beta = 0.70$, $\alpha_G = 0.20$ e variações do número de Weissenberg.

Tabela 5.1: Tempo de execução dos programas.

Wi	Log-conformação	Sqrt-conformação
5	25:31:42	26:23:52
15	23:50:44	22:20:58
45	19:10:01	17:13:42
100	14:56:11	15:01:28

Comparando as transformações log-conformação e raiz quadrada-conformação, verifica-se que pra este caso, os tempos de execução do código são semelhantes. Ainda, é possível notar que os códigos são executados mais rapidamente conforme o número de Weissenberg aumenta. Além disso, nota-se que ambos os métodos comportaram-se como estabilizadores numéricos, em particular, para todos os Wi testados.

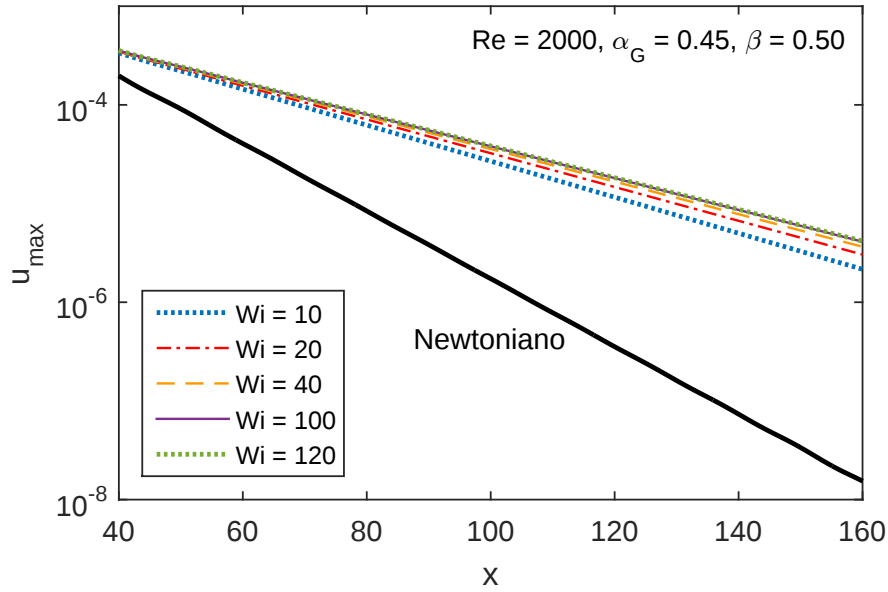
Nas Figuras 5.11 e 5.12 foram considerados números de Reynolds relativamente menores ($Re = 2000$ e 3000), as curvas representam a amplitude máxima da velocidade na direção do escoamento e apresentam comportamento decrescente, apesar dos acréscimos realizados no parâmetro Wi .

Isto demonstra um comportamento estável do escoamento, uma vez que as curvas decrescentes revelam um decrescimento das perturbações introduzidas. Pode-se notar também que conforme Wi aumenta o escoamento torna-se menos estável, ou seja, as curvas perdem inclinação e tornam-se menos decrescentes. Entretanto, nenhuma destas variações pode ser considerada como um caso instável.

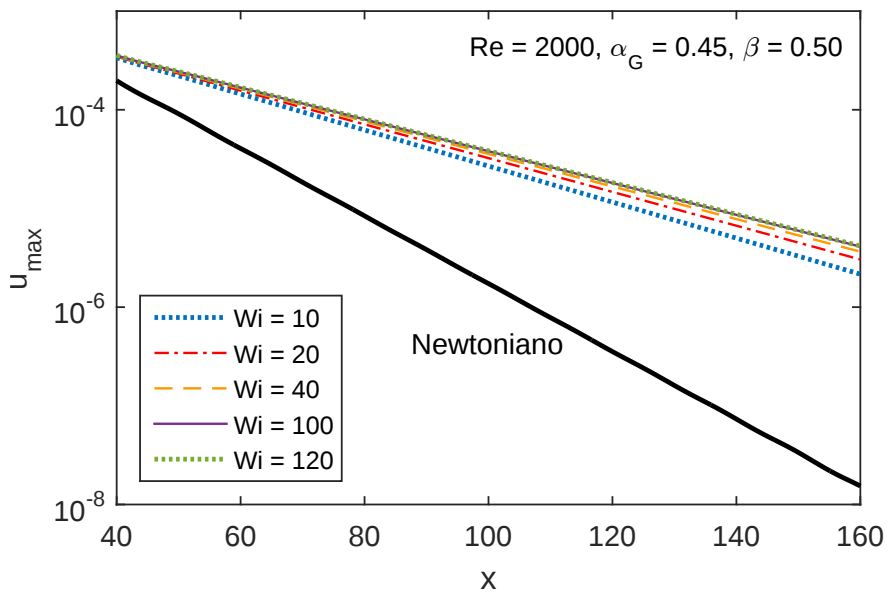
Aumentando o número de Reynolds para $Re = 5000$ e o valor da constante β para $\beta = 0.75$, deixando o fluido mais próximo do fluido Newtoniano, esses resultados são mostrados na Figura 5.13. Nota-se nessa figura um decrescimento das curvas, evidenciando que as perturbações introduzidas no início do escoamento não foram amplificadas, mas amortecidas. Além disso, observando as Figuras 5.13(a) e 5.13(b) não há evidências de discrepância significativa entre os resultados das simulações numéricas utilizando diferentes transformações núcleo-conformação.

Pode-se ainda ressaltar que em ambos os casos, as curvas referentes aos escoamentos simulados com maiores valores do número de Weissenberg estão mais próximas entre si. Portanto, entende-se que a partir de determinado valor, o número de Weissenberg pouco influencia no comportamento relacionado à amplificação e/ou amortecimento das ondas de Tollmien-Schlichting.

A Figura 5.14 também apresenta resultados numéricos do escoamento variando o número de Wi , em particular, para $Re = 6000$. Pode-se notar que diferente dos casos anteriores, as curvas que representam a amplitude máxima da velocidade U na direção do escoamento têm comportamento crescente, que pode ser interpretado como a amplificação das ondas de Tollmien-Schlichting, tornando os escoamentos instáveis. À medida que o parâmetro Wi aumenta, a inclinação das respectivas curvas torna-se mais acentuada e então ocorre uma maior amplificação da perturbação introduzida no início do escoamento.



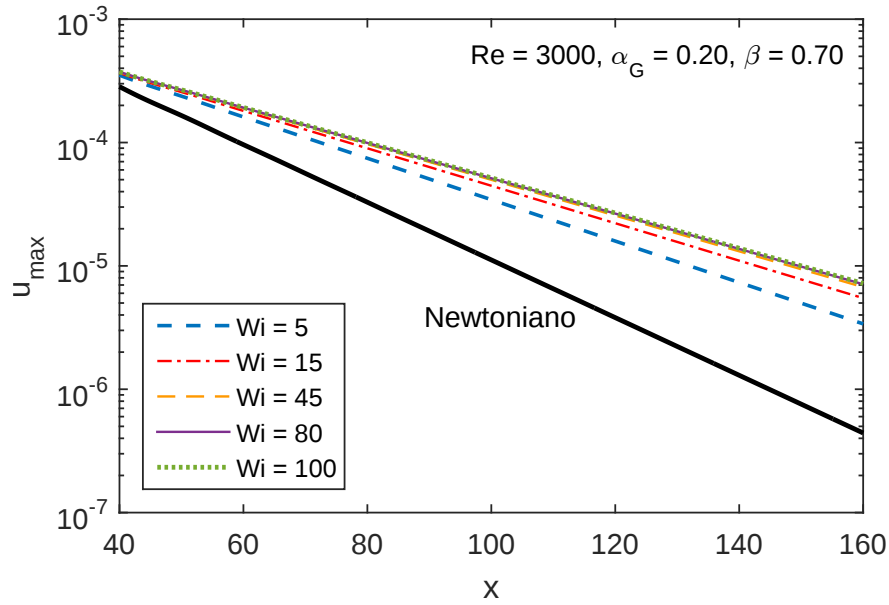
(a)



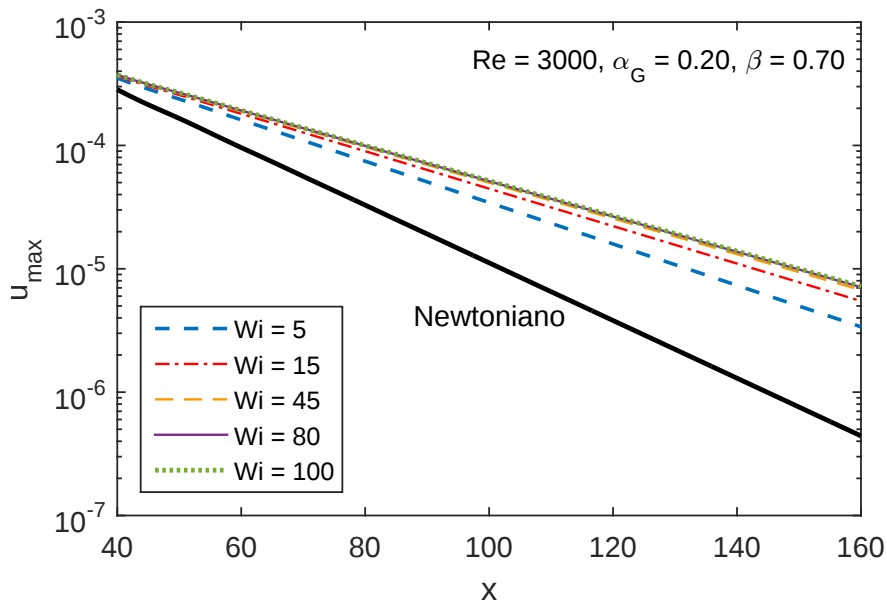
(b)

Figura 5.11: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Em contrapartida, para o mesmo caso, o escoamento Newtoniano é estável. Como já é conhecido, isso apenas evidencia que a estabilidade hidrodinâmica está relacionada com o número de Reynolds, mas também que os demais parâmetros adimensionais interferem no comportamento do escoamento. Considerando $\beta = 0.50$ obteve esse resultado do escoamento viscoelástico, espera-se que aumentando o valor deste parâmetro obtenha-se um comportamento mais próximo do fluido Newtoniano, ou seja, um comportamento mais estável.



(a)

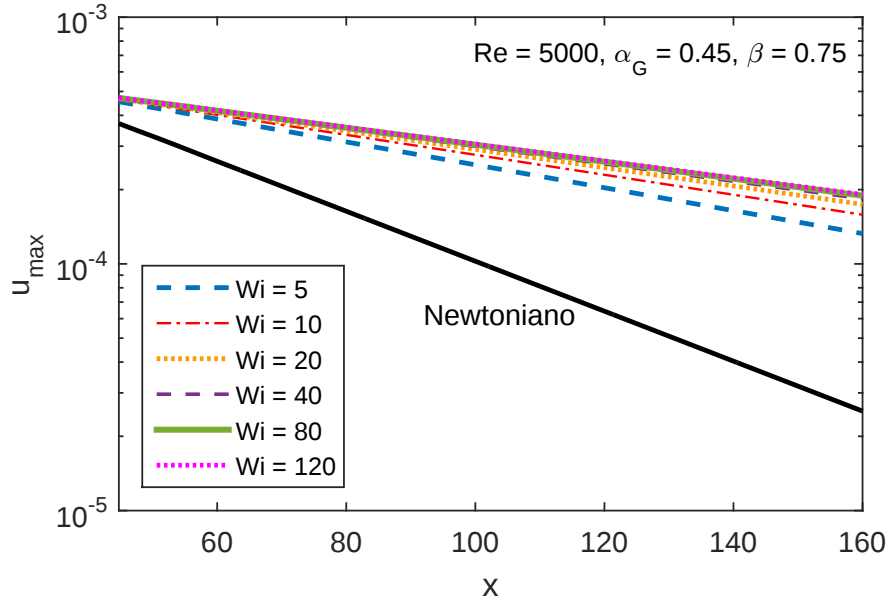


(b)

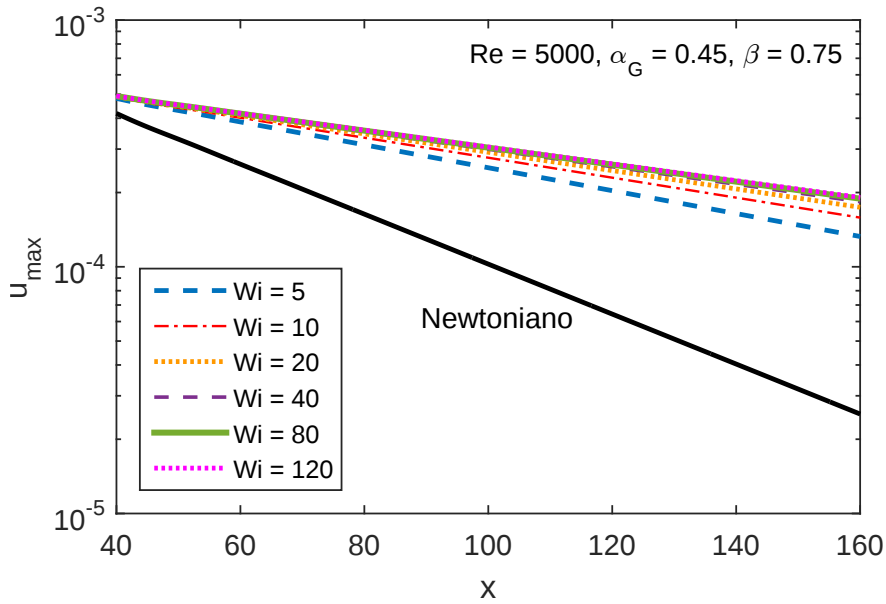
Figura 5.12: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Dessa forma, as próximas simulações são realizadas considerando $Re = 6000$, como no caso anterior, mas com valores maiores de β , como $\beta = 0.75$ e 0.90 , respectivamente. De fato, percebe-se na Figura 5.15 que para maiores valores de Wi alguns escoamentos permanecem instáveis. Porém, quando o número de Weissenberg diminui as curvas tornam-se decrescentes, ou seja, os escoamentos são estáveis.

Considerando a constante β ainda maior, $\beta = 0.9$, deixando o fluido mais próximo do fluido Newtoniano, como na Figura 5.16, os escoamentos são estáveis independente do parâmetro Wi testado. Portanto, nota-se um comportamento muito mais próximo do fluido Newtoniano, principalmente para os menores números de Weissenberg.



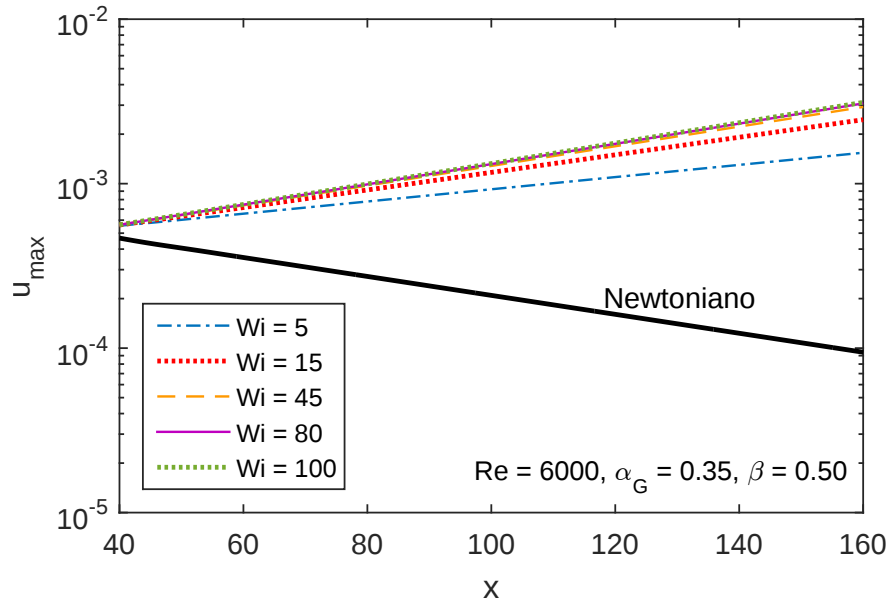
(a)



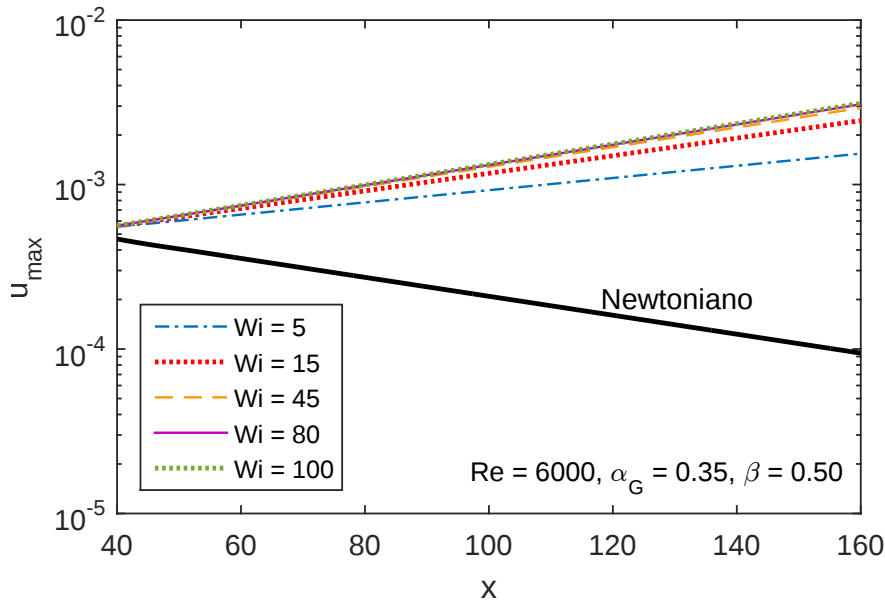
(b)

Figura 5.13: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Aumentando o número de Reynolds para 7000 e mantendo-se o valor da constante β como $\beta = 0.9$, os resultados dessa simulação numérica podem ser vistos na Figura 5.17. Observa-se nessa figura que as curvas são decrescentes, ou seja, os escoamentos são estáveis, inclusive para o caso do fluido Newtoniano. Quanto menor o número de Wi mais estável o escoamento, ou seja, para número de Wi maior, as amplificações tendem a ser menos amortecidas. Para $Wi = 100$ nota-se que o escoamento é estável, mas aproxima-se muito de um caso neutro, ou seja, as perturbações são carregadas pelo escoamento.



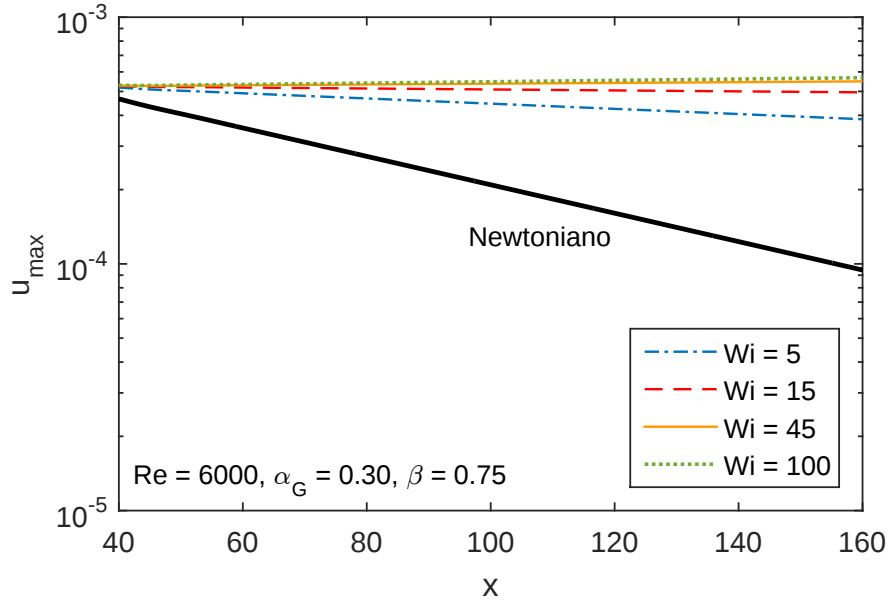
(a)



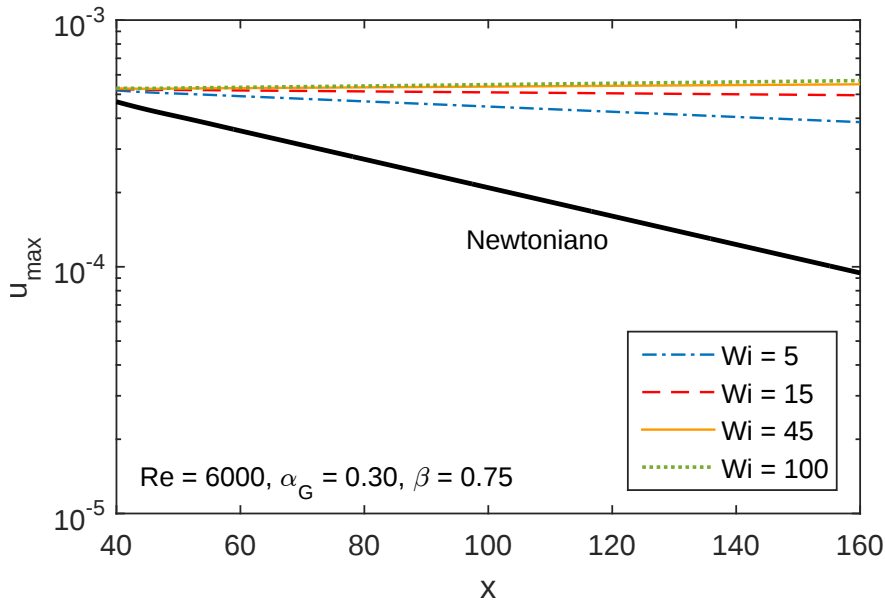
(b)

Figura 5.14: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Na Figura 5.18 considera-se $Re = 9000$, mantém-se ainda a constante $\beta = 0.9$ e diferentes valores para o número de Weissenberg. Nota-se que os escoamentos são instáveis, tanto para o fluido Newtoniano, quanto para o fluido Giesekus, independente do valor de Wi testado. As curvas para os maiores valores de Wi crescem mais rapidamente, favorecendo a amplificação das perturbações. Em outras palavras, enquanto na maioria dos casos simulados anteriormente os acréscimos no número de Weissenberg favoreciam casos menos estáveis, agora conforme Wi aumenta obtém-se escoamentos cada vez mais instáveis.



(a)

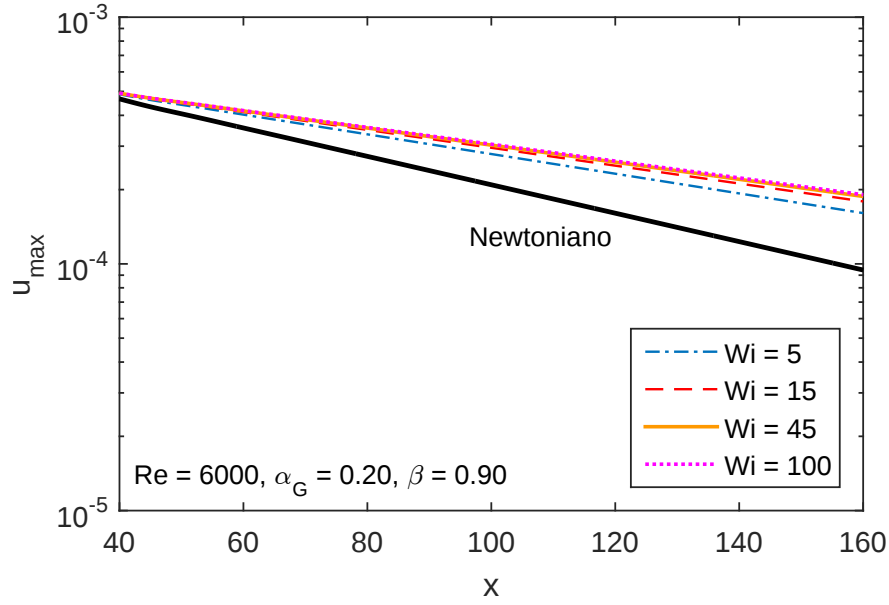


(b)

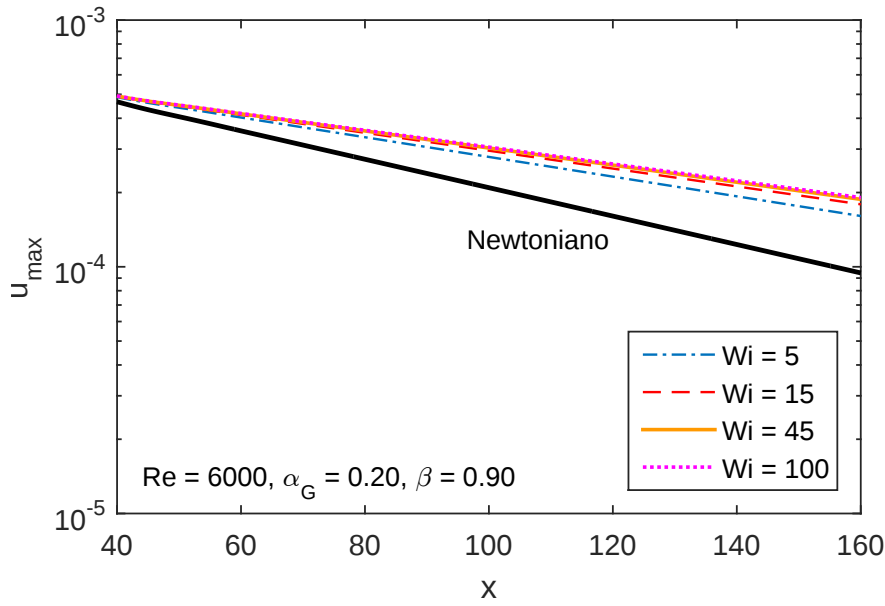
Figura 5.15: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

A positividade do tensor conformação é uma característica que deve ser preservada durante toda evolução temporal da equação constitutiva e é necessária para se evitar que instabilidades referentes ao HWNP ocorram.

Chen et al. [10] examina a positividade do tensor conformação através do monitoramento do sinal de seu determinante. A matriz é iniciada positiva definida, então caso haja troca no sinal de algum dos autovalores isso resultaria em um determinante negativo. Segundo Hulsen [27], a positividade do tensor conformação é assegurada se o determinante deste tensor, iniciado positivo, satisfizer $|\mathbf{A}| \geq 1$.



(a)

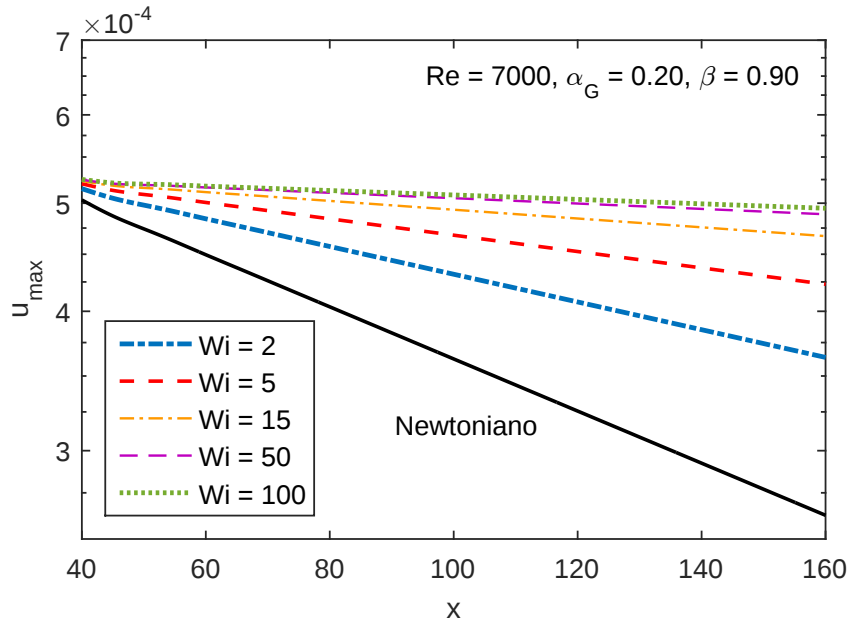


(b)

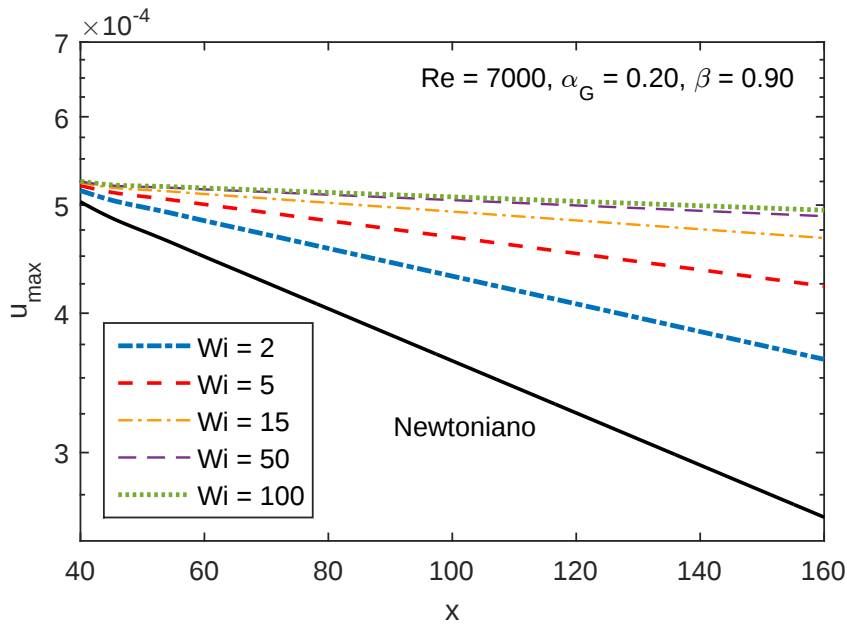
Figura 5.16: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Considerando as técnicas baseadas nas transformações núcleo log- e raiz quadrada-conformação (sqrt-conformação), alguns dos casos já apresentados foram selecionados, fixando os parâmetros $Re = 3000, 6000$ e 9000 , $\alpha_G = 0.20$ e $\beta = 0.70$ e 0.90 , variando os valores do número de Wi . Sendo assim, as Figuras 5.19, 5.20 e 5.21 apresentam a evolução temporal do valor de $|\mathbf{A}|_{\min}$ para os casos mencionados. A evolução temporal de $1 - |\mathbf{A}|_{\min}$ também é apresentada.

Em ambos os casos, percebe-se que a evolução temporal inicia com uma pequena oscilação no valor do determinante. Isso ocorre para todas simulações numéricas, independente da técnica de estabilização aplicada e do valor de Weissenberg testado.



(a)

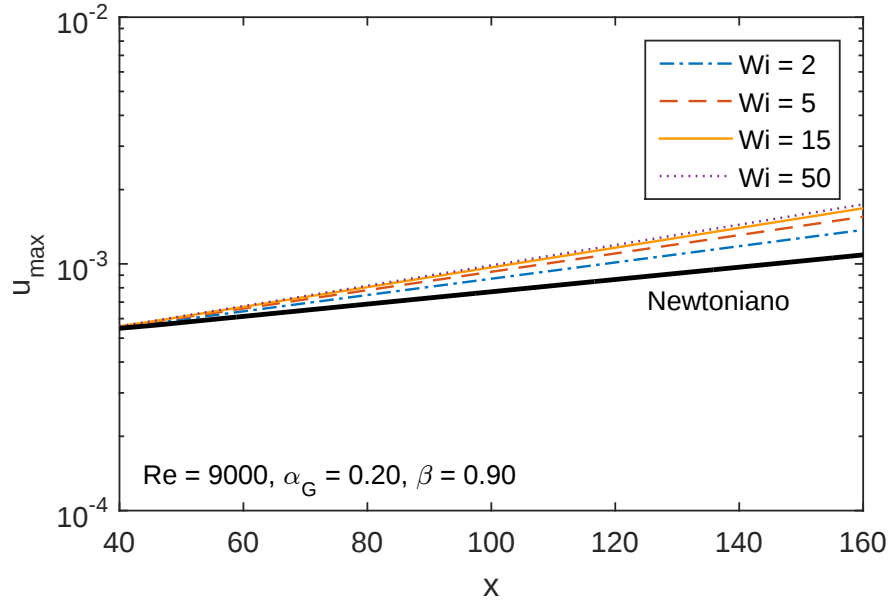


(b)

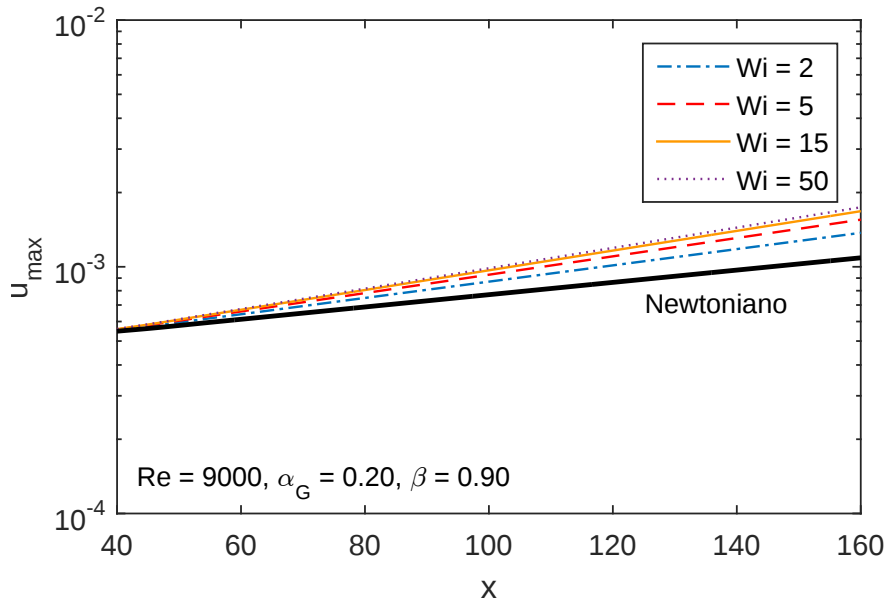
Figura 5.17: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Observando as Figuras 5.19, 5.20 e 5.21 nota-se que a amplitude das oscilações é muito pequena e, apesar disso, todos os valores mantêm-se positivos, que pode ser confirmado através do valor de $1 - |\mathbf{A}|_{min}$. Dessa forma, é possível notar que ambas as formulações preservaram $|\mathbf{A}|$ maior que zero durante a evolução temporal, isto é, não houve perda da positividade do tensor conformação.

Outra observação importante refere-se ao fato de que o determinante mínimo do tensor conformação para a técnica raiz quadrada sempre é maior quando comparado à técnica log-conformação, quando considerado o mesmo número de Weissenberg.



(a)



(b)

Figura 5.18: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de Wi : (a) Log-conformação e (b) Raiz quadrada-conformação.

Além disso, essas figuras também demonstram que para a técnica raiz quadrada-conformação o valor de $|\mathbf{A}|_{\min} > 1$, e para a técnica log-conformação o valor de $|\mathbf{A}|_{\min} \approx 1$, confirmando os resultados numéricos anteriormente apresentados para análise de estabilidade do escoamento utilizando ambas as técnicas como estratégia para estabilização do HWNP.

Ainda, é possível observar que os acréscimos no número de Reynolds favoreceram os resultados da técnica log-conformação, aumentando o valor do determinante mínimo do tensor conformação.

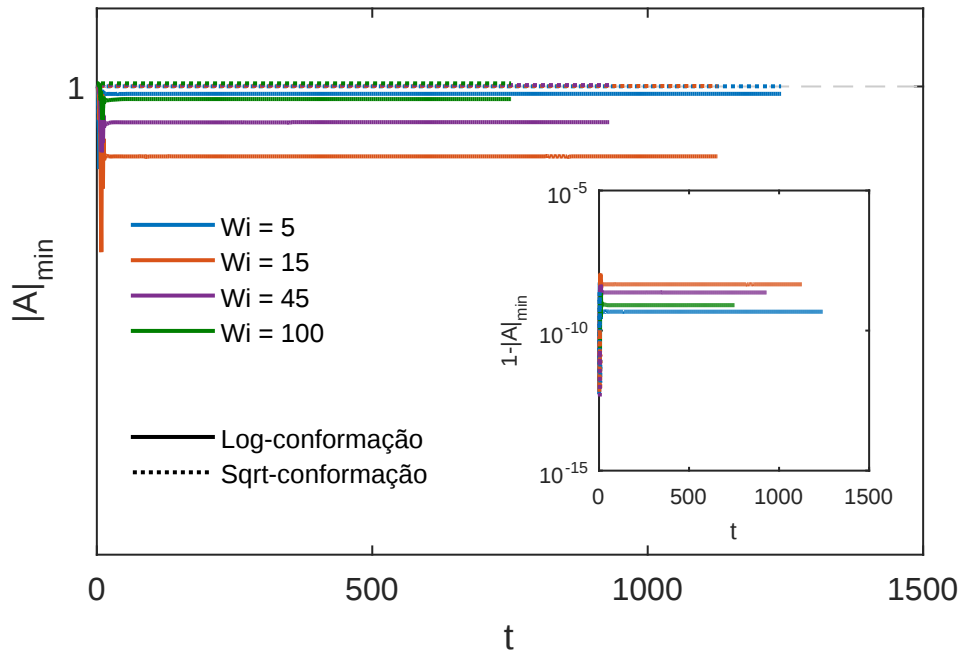


Figura 5.19: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 3000$, $\alpha_G = 0.20$, $\beta = 0.70$ e diferentes valores de Wi .

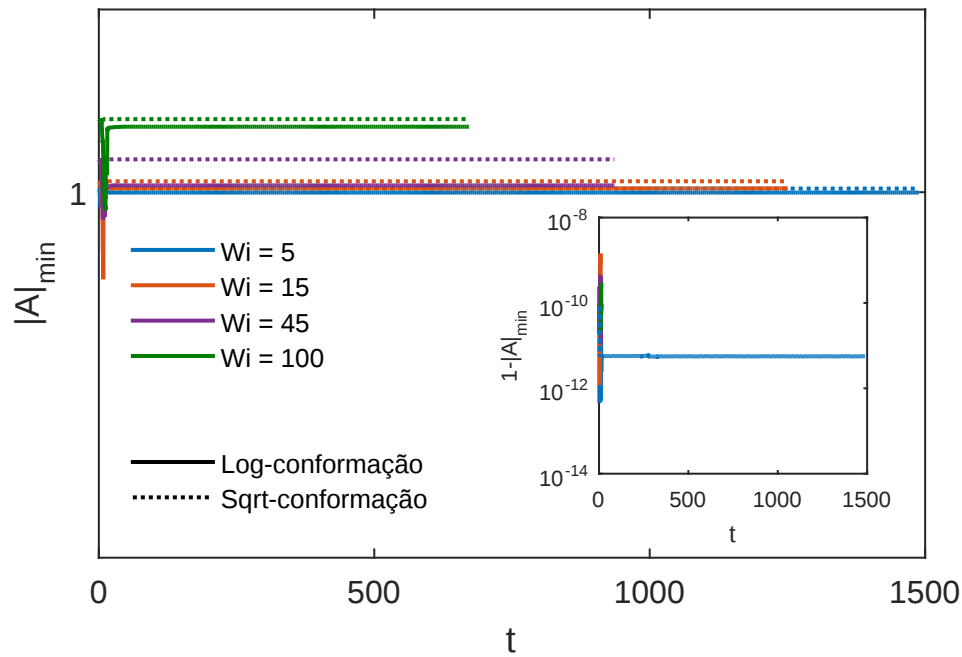


Figura 5.20: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 6000$, $\alpha_G = 0.20$, $\beta = 0.90$ e diferentes valores de Wi .

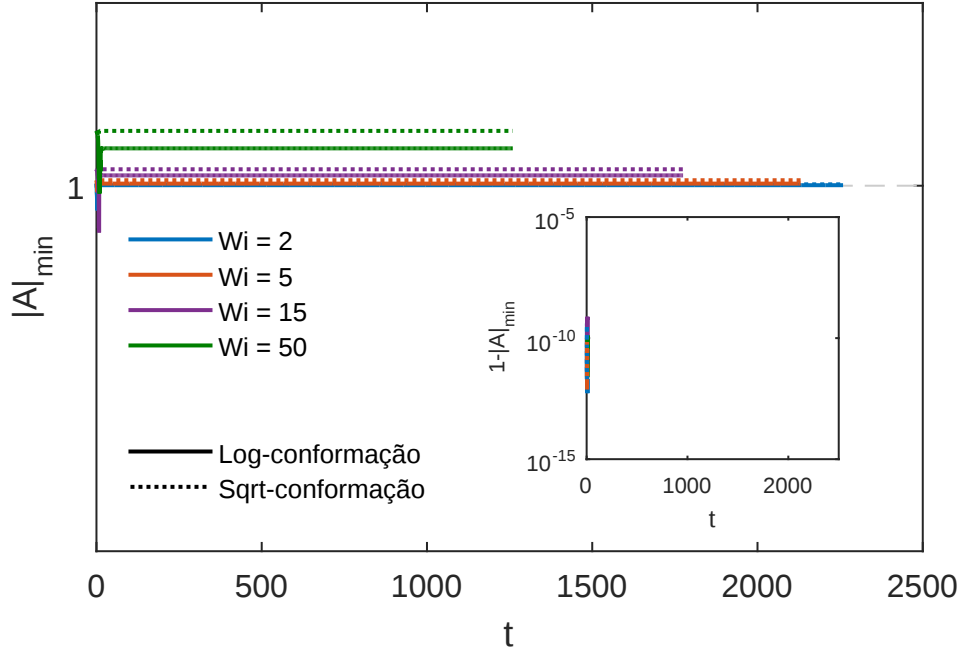


Figura 5.21: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 9000$, $\alpha_G = 0.20$, $\beta = 0.90$ e diferentes valores de Wi .

5.3.2 Variação do parâmetro α_G

Nesta subseção são apresentados os resultados da estabilidade do escoamento de Poiseuille do fluido viscoelástico, onde é investigada a influência do parâmetro α_G , responsável por regular o comportamento “shear thinning” do fluido, e que pode ser visto na equação constitutiva (2.15) do modelo Giesekus.

As simulações numéricas foram realizadas para os valores fixos de $\beta = 0.75$ e $Wi = 10$, considerando três diferentes números de Reynolds, $Re = 2000$ (Figura 5.22), $Re = 5000$ (Figura 5.23) e $Re = 8000$ (Figura 5.24) e variando os valores de α_G para $\alpha_G = 0.15, 0.30$ e 0.45 . Essa influência do parâmetro α_G é apresentada nas Figuras 5.22, 5.23 e 5.24, onde também mostram as curvas que descrevem o comportamento das ondas de Tollmien-Schlichting do fluido Newtoniano e do fluido viscoelástico com seus parâmetros fixados.

Além disso, essas figuras apresentam os resultados obtidos com a técnica estabilizadora do HWNP log núcleo-conformação e raiz quadrada núcleo-conformação (sqrt-conformação), e novamente demonstram que ambos os resultados numéricos estão em concordância.

Observando as Figuras 5.22, 5.23 e 5.24 nota-se que a variação do número de Reynolds influenciou quanto à estabilidade do escoamento. Para $Re = 2000$ e 5000 os escoamentos são estáveis, sendo este último um caso menos estável. Para $Re = 8000$, os escoamentos são instáveis, podendo ser confirmado através das curvas crescentes.

Quanto a variação do parâmetro α_G , que assumiu os valores $\alpha_G = 0.15, 0.30$ e 0.45 , pode-se notar pouca variação das curvas e, portanto, pouca influência quanto à estabilidade. Para os casos estáveis (Figuras 5.22 e 5.23), o acréscimo em α_G apresentou escoamentos menos estáveis. Obviamente, no caso instável (Figura 5.24), o acréscimo em α_G apresentou escoamentos mais instáveis. Apesar disso, para os casos testados não foi observada nenhuma situação em que a variação do parâmetro α_G pudesse tornar um escoamento, que a princípio fosse estável, em instável, ou vice-versa.

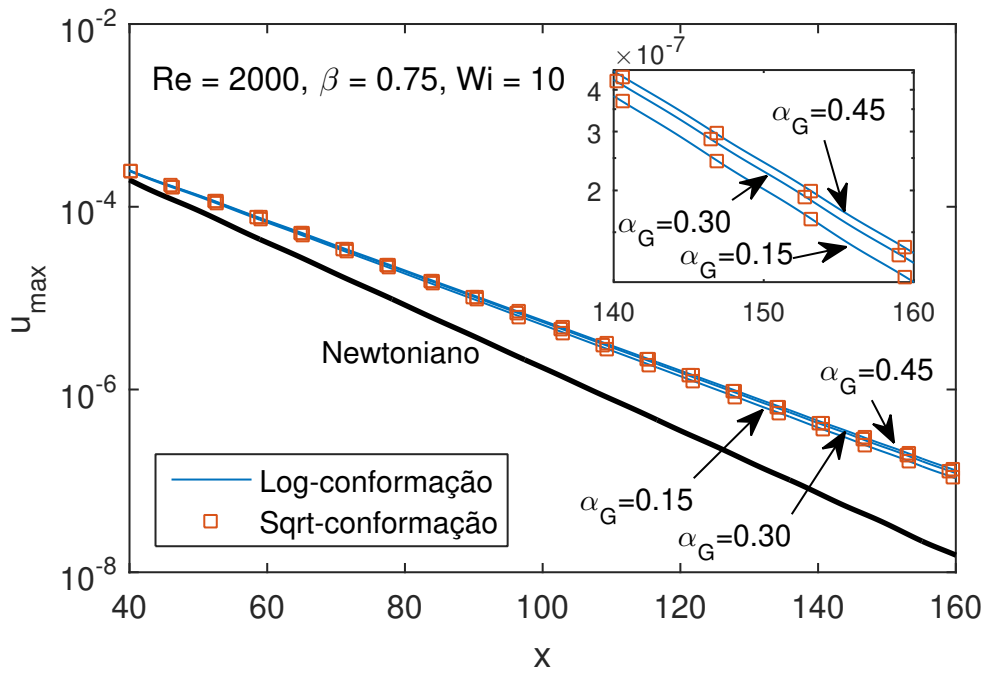


Figura 5.22: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para $Re = 2000$ e diferentes valores de α_G .

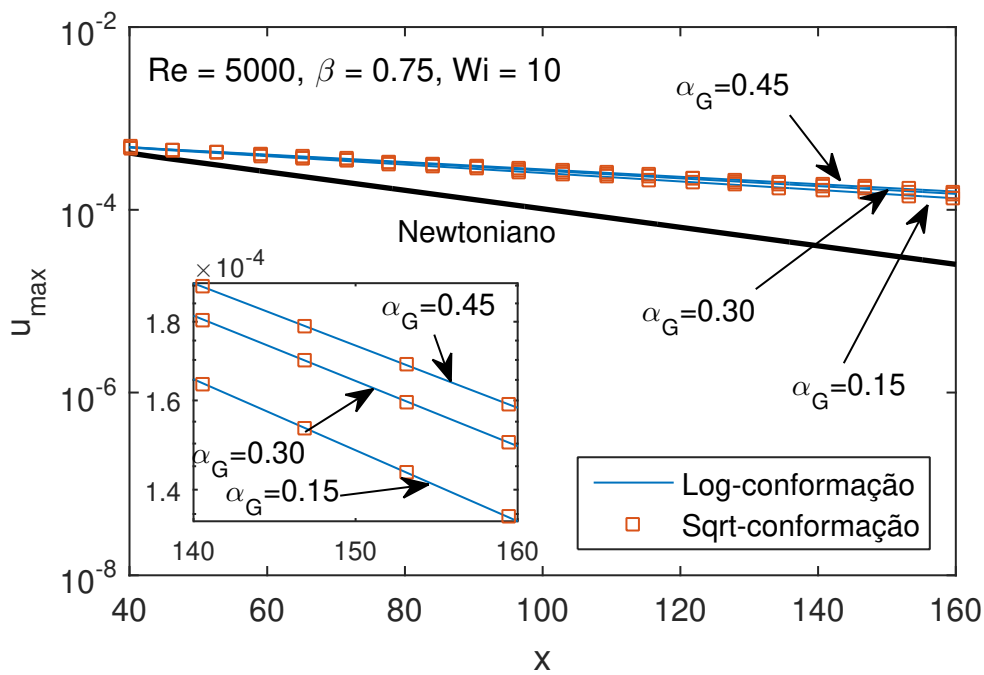


Figura 5.23: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para $Re = 5000$ e diferentes valores de α_G .

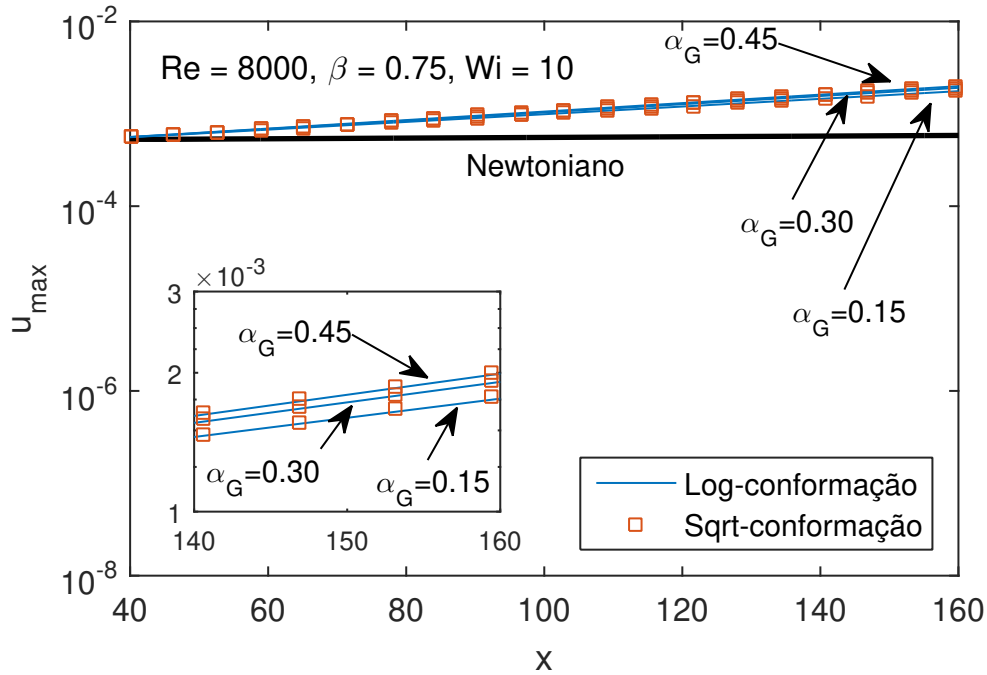


Figura 5.24: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para $Re = 8000$ e diferentes valores de α_G .

5.3.3 Variação da Constante β

O efeito da constante β , que controla a contribuição Newtoniana do fluido, é investigado na estabilidade do escoamento de Poiseuille do fluido viscoelástico. As simulações numéricas foram realizadas fixando os valores de $Re = 2000$ e 5000 , $\alpha_G = 0.15$, considerando quatro diferentes valores do número de Weissenberg, $Wi = 5, 20, 80$ e 120 e quatro diferentes valores da constante β , a saber $\beta = 0.25, 0.50, 0.75$ e 0.90 .

Essa influência da constante β é apresentada nas Figuras 5.25 e 5.26, onde também mostram as curvas que descrevem o comportamento das ondas de Tollmien-Schlichting do fluido Newtoniano e do fluido viscoelástico com seus parâmetros fixados.

Na Figura 5.25 são considerados os seguintes valores para a constante, $\beta = 0.25, 0.50$ e 0.75 , sendo que os acréscimos nessa constante representam uma maior contribuição Newtoniana no fluido. Nota-se que para um valor de β menor – isto significa um fluido mais não-Newtoniano –, as curvas perdem cada vez mais inclinação, ou seja, tornam-se menos decrescentes. Este efeito é percebido principalmente para os casos com maiores valores do número de Weissenberg, quando as forças elásticas estão mais presentes.

Neste caso, em particular, para $\beta = 0.25$, os acréscimos em Wi tornam os escoamentos menos estáveis, revelando casos neutros (Figura 5.25(c) e Figura 5.25(d)). Além disso, nota-se que os casos mais estáveis ocorrem quando $\beta = 0.75$.

Na Figura 5.26 são considerados os valores de $\beta = 0.50, 0.75$ e 0.90 . Neste caso, observa-se principalmente dois efeitos sobre o comportamento dos escoamentos: os acréscimos no número de Weissenberg tornam os escoamentos menos estáveis considerando $\beta = 0.75$ e 0.90 , sendo mais facilmente percebido numa comparação entre as Figuras 5.26(a) e 5.26(b). Já para $\beta = 0.50$ o escoamento que é neutro (Figura 5.26(a)) torna-se instável com o aumento do número de Wi .

Vale mencionar que analisando as Figuras 5.25 e 5.26 nota-se que as curvas dos escoamentos simulados com o modelo Giesekus vão se aproximando da curva do modelo Newtoniano, conforme o valor de β é aumentado.

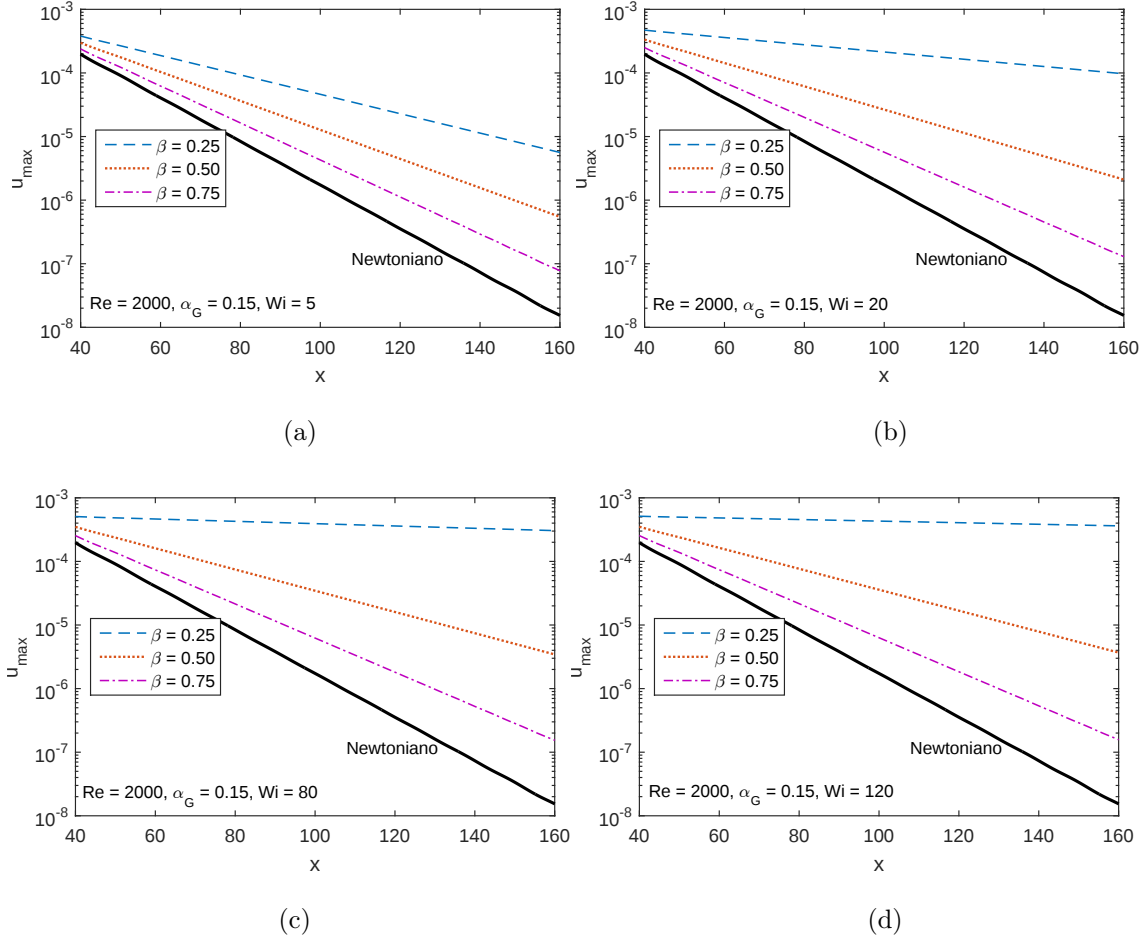


Figura 5.25: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de β .

Em todos os casos considerados é possível observar que os escoamentos Newtonianos comportaram-se sempre de forma mais estável quando comparados com os escoamentos viscoelásticos, mesmo para os menores valores de Wi considerados.

A evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para alguns dos casos simulados nesta subseção é apresentada a seguir. Para tanto, os seguintes parâmetros adimensionais são considerados $Re = 2000$ para $\beta = 0.25$ (Figura 5.27) e 0.75 (Figura 5.28), e $Re = 5000$ para $\beta = 0.50$ (Figura 5.29) e 0.90 (Figura 5.30), ambos os casos com $\alpha_G = 0.15$ fixo e variações de $Wi = 5, 20, 80$ e 120 .

Observando essas figuras é possível verificar que $|\mathbf{A}|_{\min} \approx 1$. A maioria dos casos simulados com a técnica log-conformação costumam manter-se abaixo de um, apesar de estar muito próximo deste valor, o que pode ser confirmado através das Figuras 5.27(b), 5.28(b) 5.29(b) e 5.30(b) devido ao fato de que os valores de $1 - |\mathbf{A}|_{\min}$ apresentam uma ordem muito baixa.

Pode-se notar ainda que os resultados comportam-se de forma bastante semelhante apesar da variação dos parâmetros, exceto quando trata-se dos casos com $Wi = 120$ simulados com a técnica log-conformação, que se destaca pelo fato de, embora manter o valor de $|\mathbf{A}|_{\min}$ próximo de um, ainda é o caso que mantém-se mais distante de $|\mathbf{A}|_{\min} = 1$.

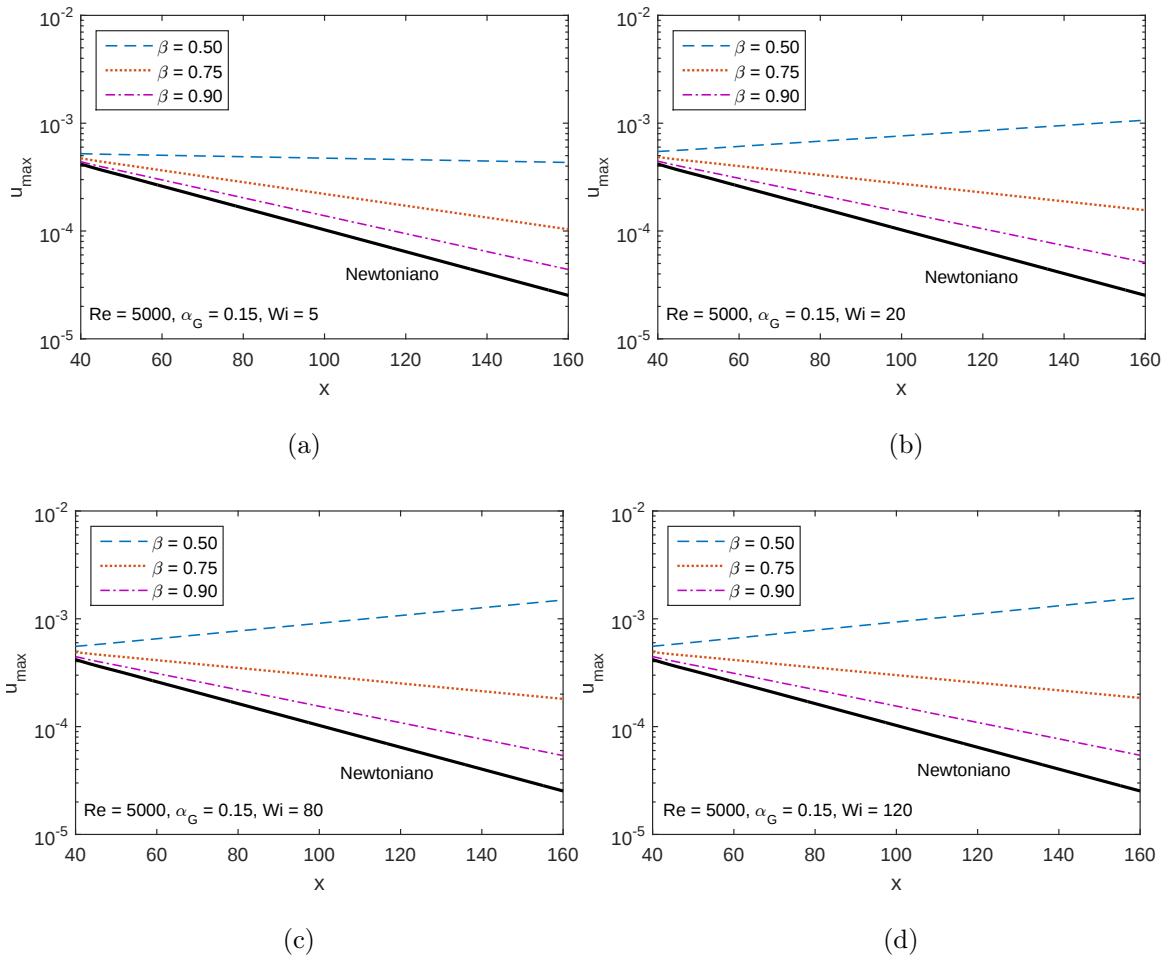


Figura 5.26: Valor máximo da perturbação da velocidade na direção do escoamento para diferentes valores de β .

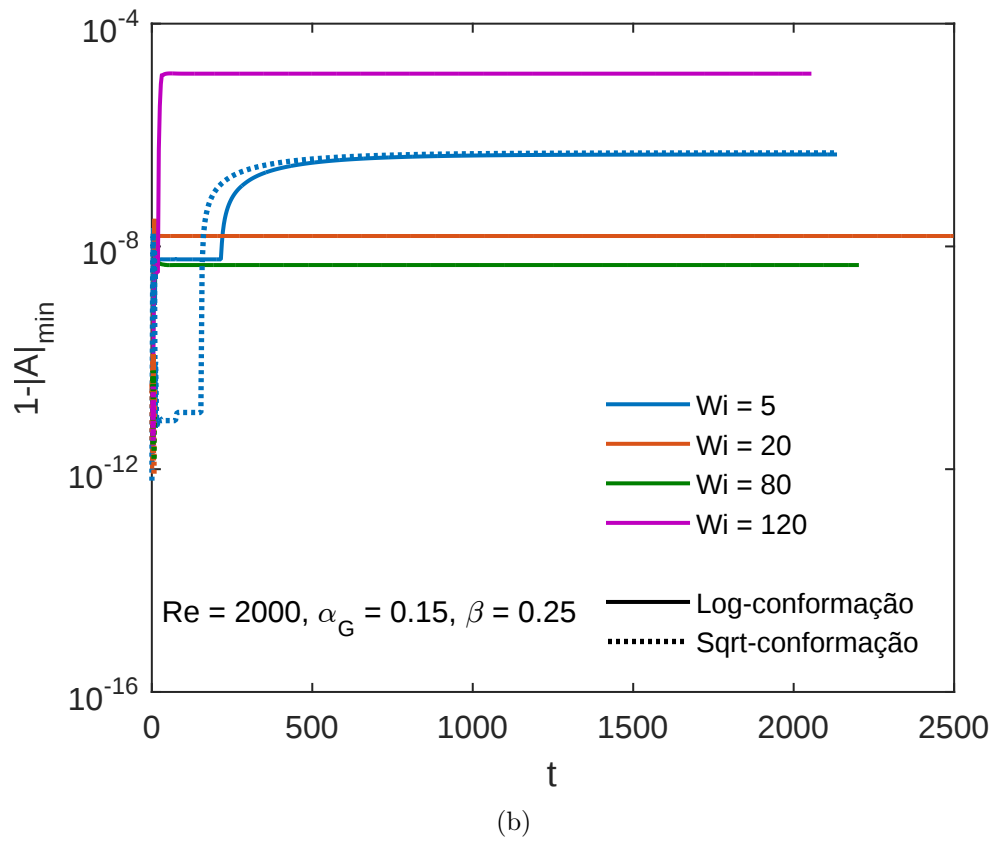
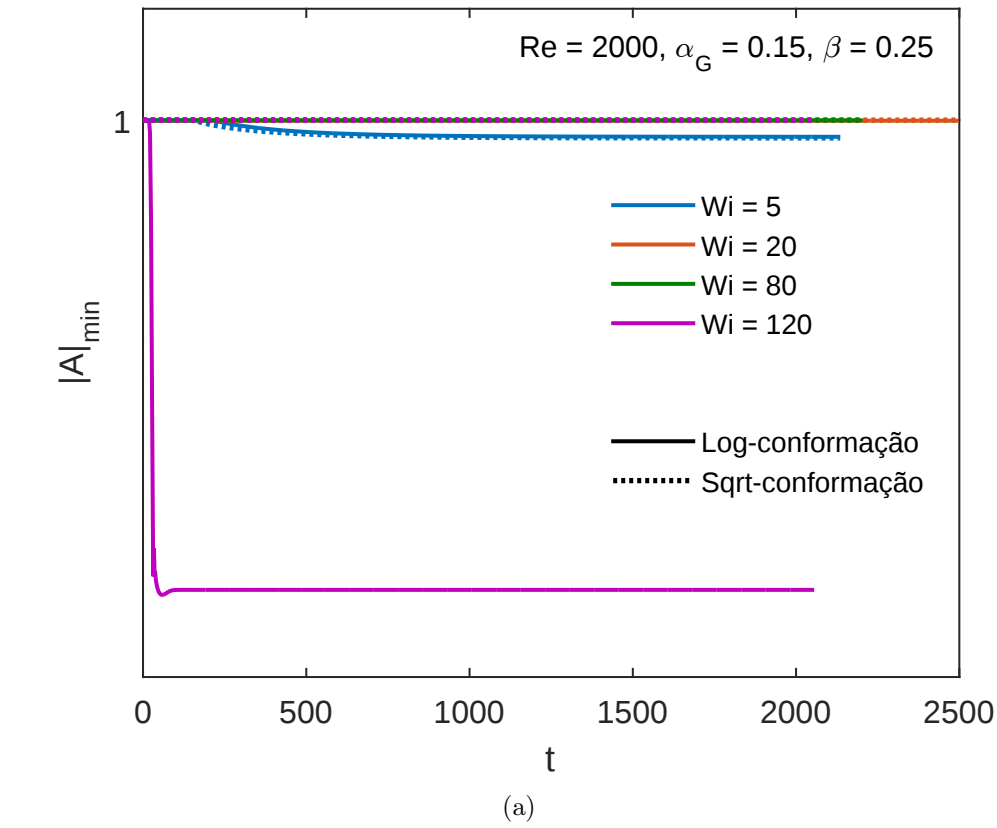


Figura 5.27: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 2000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.25$ e variações de Wi .

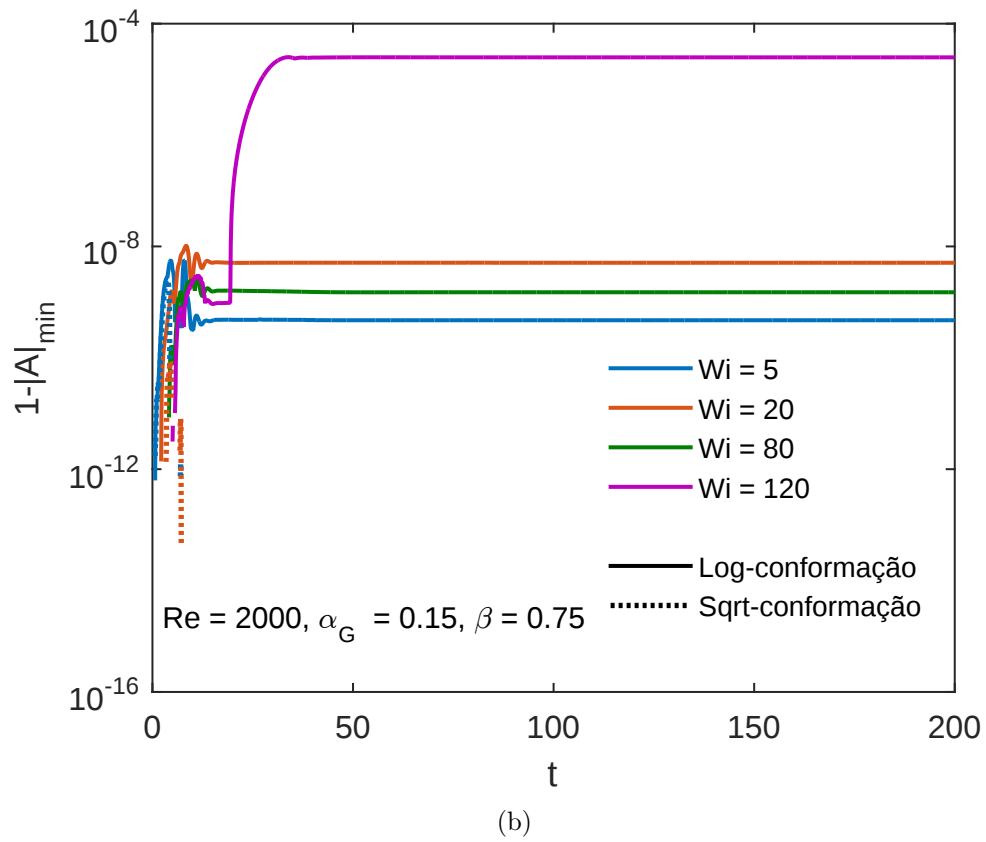
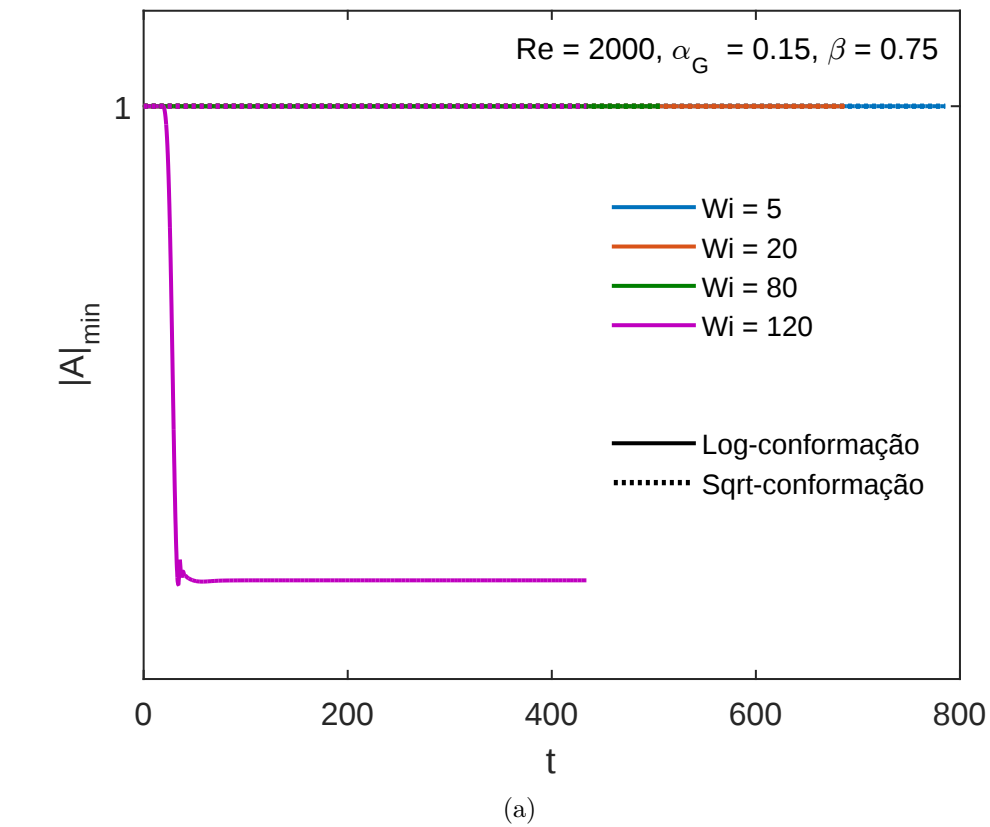
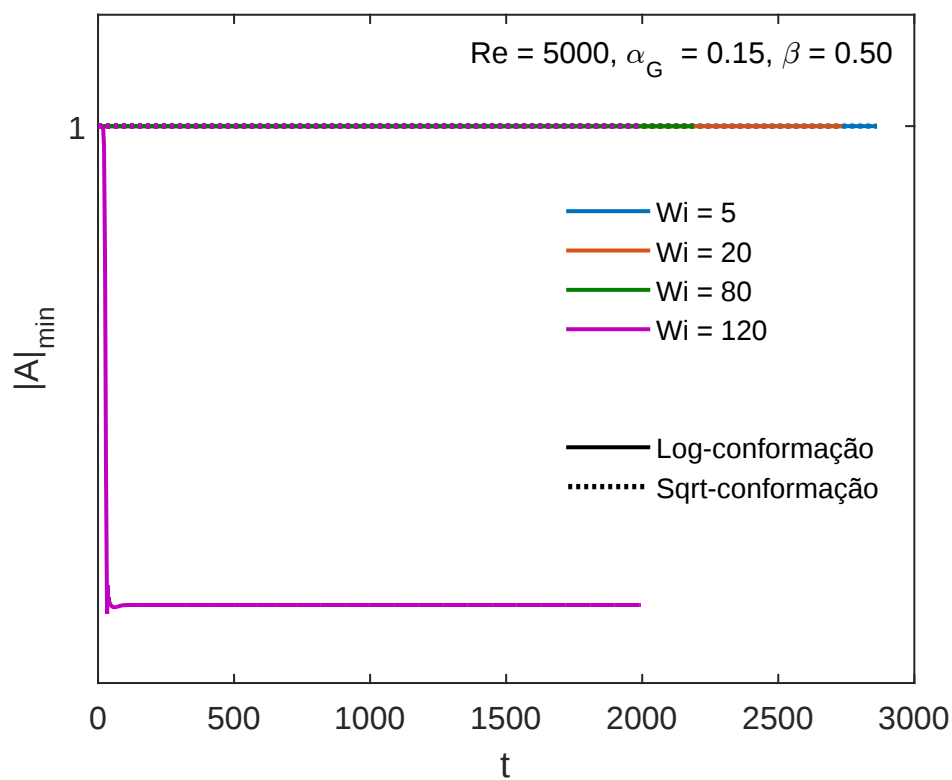
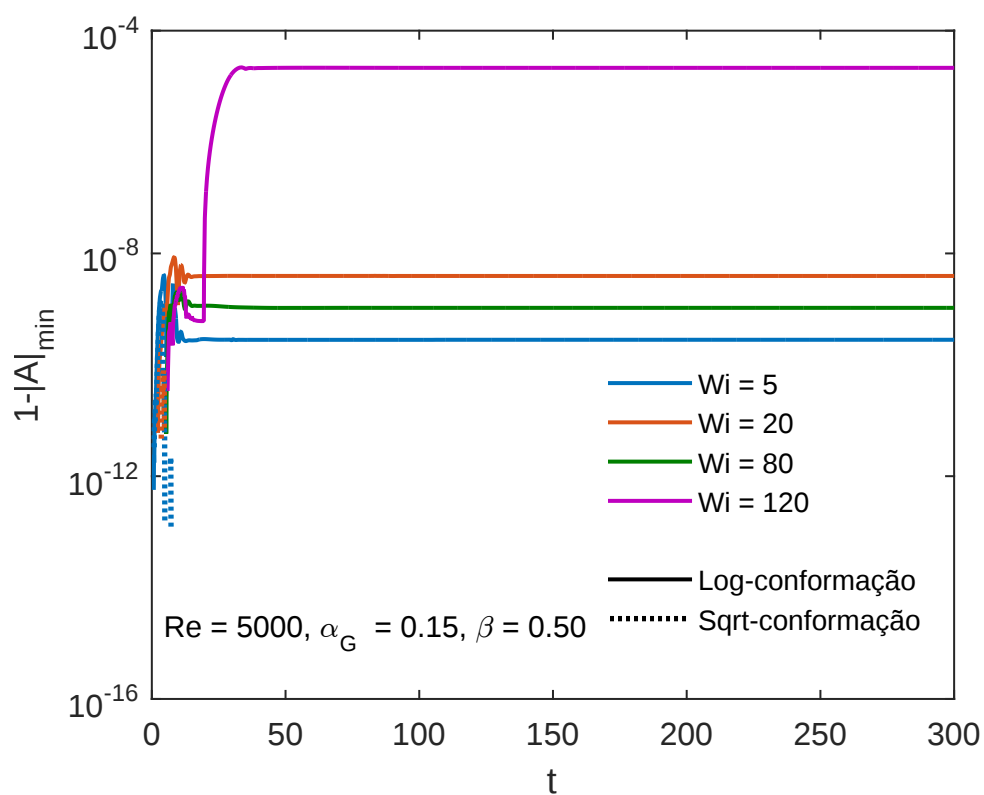


Figura 5.28: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 2000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.75$ e variações de Wi .



(a)



(b)

Figura 5.29: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 5000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.50$ e variações de Wi .

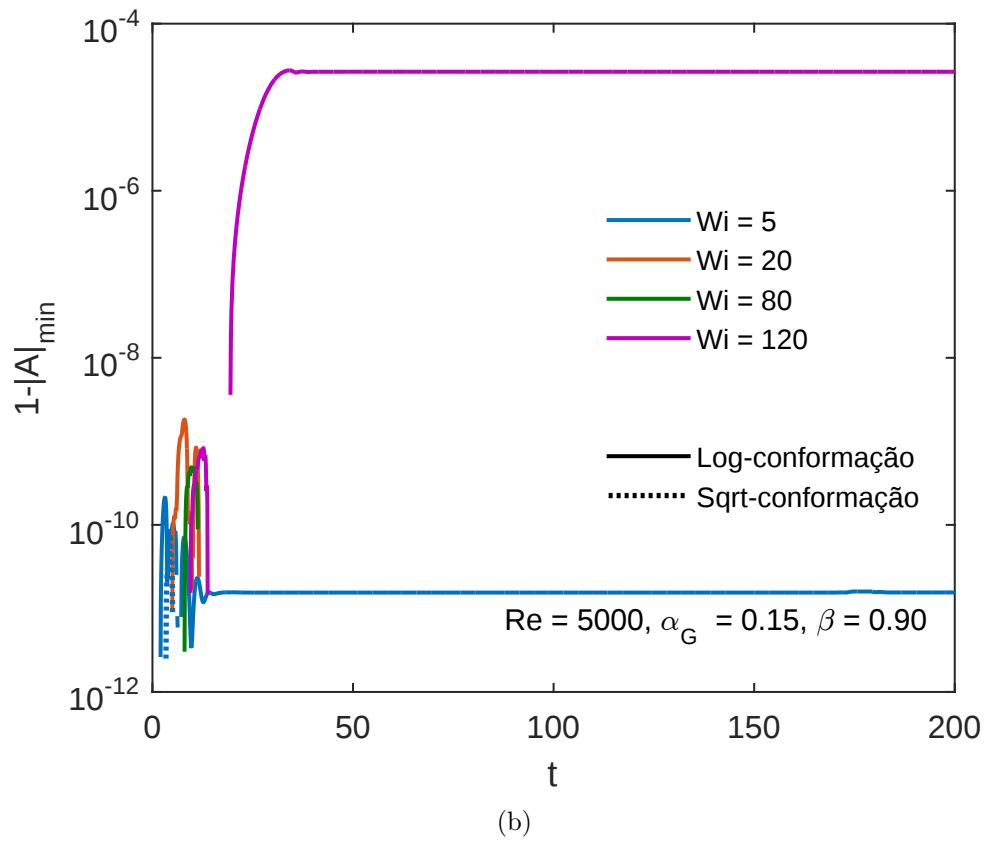
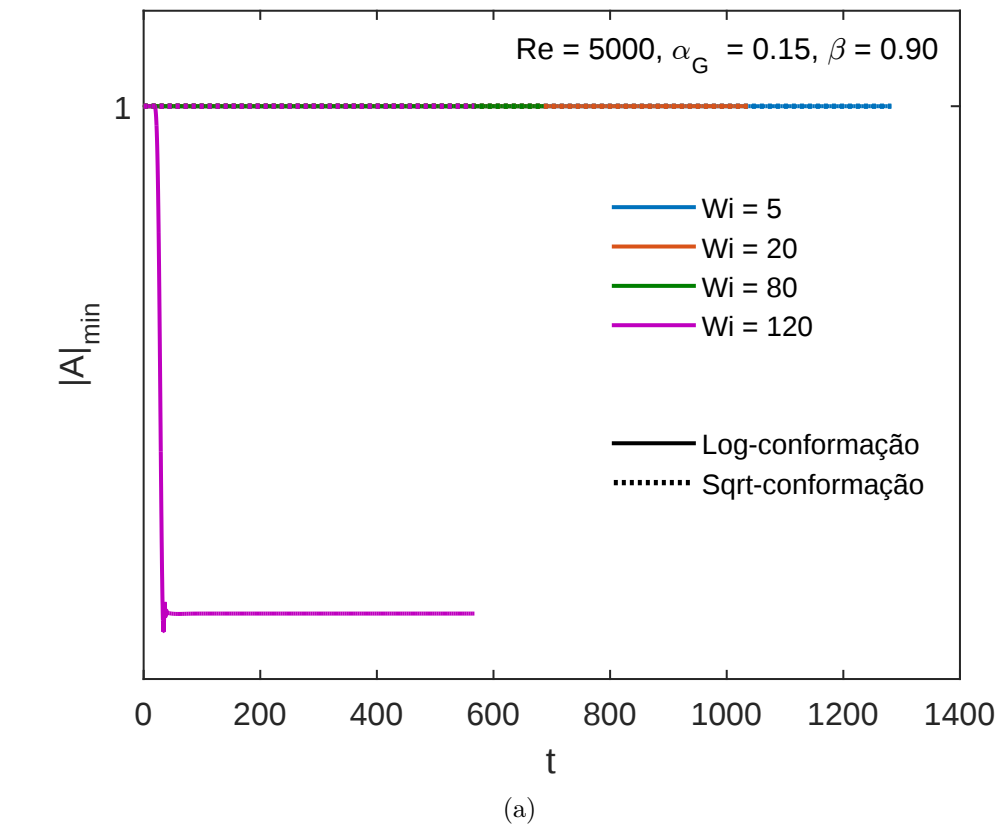


Figura 5.30: Evolução temporal do determinante mínimo do tensor conformação para $Re = 5000$, $\alpha_G = 0.15$, $\beta = 0.90$ e variações de Wi .

Conclusões

Neste trabalho apresentou-se as formulações utilizadas no tratamento de escoamentos bidimensionais, incompressíveis e isotérmicos, em particular, o problema de Poiseuille que considera o escoamento entre duas placas planas paralelas.

O fluido não-Newtoniano considerado apresenta propriedades viscoelásticas e respeita o modelo constitutivo Giesekus. O tratamento numérico adotado para simulação destes escoamentos considera as equações na forma adimensional, e portanto, também dedicou-se uma parte deste estudo à adimensionalização das equações que modelam o problema.

Utilizando a técnica de Simulação Numérica Direta aliada à formulação vorticidade-velocidade, a análise de estabilidade ocorreu após a introdução de pequenas perturbações no início do escoamento e através da observação do comportamento da amplitude máxima da velocidade na direção do escoamento, no sentido de avaliar a amplificação ou amortecimento das perturbações introduzidas. Este processo foi realizado considerando casos particulares com variações dos parâmetros adimensionais Wi , β e α_G .

Os resultados numéricos obtidos foram satisfatórios, do ponto de vista que as transformações núcleo log-conformação e raiz quadrada-conformação garantiram a estabilidade numérica do código utilizado para simular o escoamento, possibilitando atingir resultados até então não alcançados, devido à limitações numéricas que impediam simular escoamentos com elevados números de Weissenberg. Com isso, uma maior variedade de parâmetros pode ser testada, e portanto foi possível realizar a análise de estabilidade em casos que até então não haviam sido analisados.

Os resultados permitem analisar o efeito das forças elásticas, representadas pelo número de Weissenberg (Wi), na estabilidade do escoamento. Considerando variações do número de Wi para diferentes números de Re , observou-se que nos casos com Re menor, os acréscimos em Wi favorecem escoamentos menos estáveis. Para casos com Re maior, quando os menores Wi já são capazes de apresentar escoamentos instáveis, percebeu-se que os acréscimos em Wi apresentam um acréscimo na amplitude das perturbações. Em todos os casos, nota-se que os escoamentos Newtonianos são sempre mais estáveis que os escoamentos viscoelásticos.

Também analisou-se a influência do parâmetro β , que controla a contribuição Newtoniana do fluido, sobre o comportamento do escoamento. Esta análise revelou que, considerando $Re = 2000$ para os menores valores de β o escoamento tem comportamento menos estável, e este efeito pode ser melhor percebido nos casos com Wi maior. Considerando $Re = 5000$, obtém-se casos de instabilidade, principalmente para os menores valores de β e maiores valores de Wi . Além disso, os casos Newtonianos são sempre mais estáveis.

Em alguns casos, observou-se o valor do determinante mínimo do tensor conformação, sendo possível verificar concordância com as condições presentes na literatura. Os resultados numéricos obtidos foram satisfatórios, do ponto de vista que as transformações núcleo log-conformação e raiz quadrada-conformação garantiram a estabilidade numérica do código, permitindo simular escoamentos com alto número de Weissenberg, o que anteriormente não era possível por conta da existência de limitações numéricas.

Desta forma este trabalho aplicou dois casos particulares da formulação núcleo-conformação: log e raiz quadrada, a fim de estabilizar os efeitos do HWNP e, a partir disso, concentrou-se em analisar a estabilidade do escoamento bidimensional do fluido viscoelástico Giesekus entre duas placas paralelas com forte influência das forças elásticas, representado pelos altos valores do número de Weissenberg nas simulações.

Algumas perspectivas para a continuidade deste trabalho são:

- Determinar qual transformação núcleo-conformação é mais eficiente para estabilizar o Problema do Alto Número de Weissenberg;
- Investigar qual transformação núcleo-conformação é mais adequada para a análise de estabilidade hidrodinâmica no escoamento;
- Estudar, com detalhes, a variação dos demais parâmetros adimensionais (Re , β e α_G);
- Estudar o problema de Poiseuille tridimensional, utilizando a transformação núcleo-conformação.

Referências

- [1] A.M. Afonso; F.T. Pinho; M.A. Alves. The kernel-conformation constitutive laws. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 167-168:30–37, 2012.
- [2] M. Avgousti; A. N. Beris. Non-axisymmetric modes in viscoelastic Taylor-Couette flow. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 50(2):225–251, 1993.
- [3] J Azadeh. *Simulation of Time-Dependent Viscoelastic Fluid Flows by Spectral Elements*. PhD thesis, École Polytechnique Fédéral de Lausanne, Lausanne, 2011.
- [4] N. Balci; B. Thomasesa; M. Renardya; C. R. Doering. Symmetric factorization of the conformation tensor in viscoelastic fluid models. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 166:546–553, 2011.
- [5] A. Beris; R. Armostrong; R. Brown. Spectral finite-element calculations of the flow of a Maxwell fluid between excetric rotating cylinders. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 22:129–167, 1987.
- [6] R. B. Bird; P. J. Dotson; N. L. Johnson. Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead-spring chain model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 7:213–235, 1980.
- [7] A.C. Brandi; M.T. Mendonça; L.F. Souza. DNS and LST stability analysis of Oldroyd-B fluid in a flow between two parallel plates. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 267:14–27, 2019.
- [8] E. Brasseur; M. Fyrillas; G. Georgioou; M. Crochet. The time-dependent extrudateswell problem of an Oldroyd-B fluid with slip along the wall. *Journal of Rheology*, 42:549–566, 1994.
- [9] K. P. Chen. Elastic instability of the interface in Couette flow of viscoelastic liquids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 40:261–267, 1991.
- [10] X. Chen; H. Marschall; M. Schafer; D. Bothe. A comparison of stabilisation approaches for finite volume simulation of viscoelastic fluid flow. *Journal of Computational Fluid Dynamics*, 27:229–250, 2013.
- [11] M. D. Chilcott; J. M. Rallison. Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 29:381–432, 1988.
- [12] R. Comminal; J. Spangenberg; J. H. Hattel. Robust simulations of viscoelastic flows at high Weissenberg numbers with the streamfunction/log-conformation formulation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 223:37–61, 2015.
- [13] F. Dupret; J.M. Marchal. Loss of evolution in the flow of viscoelastic fluids. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 20:143–171, 1986.

- [14] H.F. Fasel; U. Rist; U. Konzelmann. Numerical investigation of the threedimensional development in boundary-layer transition. *AIAA Journal*, 28:29–37, 1990.
- [15] R. Fattal; R. Kupferman. Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 123:281–285, 2004.
- [16] R. Fattal; R. Kupferman. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 126:23–37, 2005.
- [17] L.L. Ferrás; J. M. Nóbrega; F. T. Pinho. Analytical solutions for channel flows of Phan-Thien-Tanner and Giesekus fluids under slip. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 171:97–115, 2012.
- [18] J. H. Ferziger; M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997.
- [19] A.O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Edusp, 2012.
- [20] L.J.S. Furlan. Análise de estabilidade de escoamentos do fluido viscoelástico Giesekus. Master’s thesis, FCT-UNESP, Presidente Prudente, 2018.
- [21] E.S. Gervazoni. Análise de estabilidade linear de escoamentos bidimensionais do fluido Oldroyd-B. Master’s thesis, FCT-UNESP, Presidente Prudente, 2016.
- [22] H. Giesekus. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2:69–109, 1982.
- [23] C. Guillopé; J. C. Saut. Global existence and one-dimensional nonlinear stability of shearing motions of viscoelastic fluids of Oldroyd type. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 24:369–401, 1990.
- [24] C. D. Han. *Rheology in Polymer Processing*. Academic Press, New York, 1976.
- [25] A. P. Hooper. Long-wave instability at the interface between two viscous fluids: Thin layer effects. *Physics of Fluids*, 28:1613–1618, 1985.
- [26] A. P. Hooper; W. G. C. Boyd. Shear-flow instability at the interface between two viscous fluids. *Journal of Fluids Mechanics*, 128:507–528, 1983.
- [27] M.A. Hulsen. Some properties and analytical expressions for plane flow of Leonov and Giesekus models. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 30:85–92, 1988.
- [28] M.A. Hulsen. A sufficient condition for a positive definite configuration tensor in differential models. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 38:93–100, 1990.
- [29] A. Kaye. *Non-newtonian flow in incompressible flows*. College of Aeronautics, 1962.
- [30] M. Kloker. A robust high-resolution split-type compact fd scheme for spatial direct numerical simulation of boundary-layer transition. *Applied Scientific Research*, 59:353–377, 1998.
- [31] R. G. Larson. *Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*. Butterworths, 1988.

- [32] S. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103:16–42, 1992.
- [33] A. I. Leonov. Nonequilibrium thermodynamics and rheology of viscoelastic polymer media. *Rheologica Acta*, 15:61–89, 1986.
- [34] X. L. Luo; R. I. Tanner. A streamline element scheme for solving viscoelastic flow problems part ii: Integral constitutive models. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 22:61–89, 1986.
- [35] X. L. Luo; R. I. Tanner. Finite element simulation of long and short circular die extrusion experiments using integral models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 25:9–22, 1988.
- [36] H.L. Meitz. *Numerical Investigation of Suction in a Transitional Flat-Plate Boundary Layer*. PhD thesis, The University of Arizona, 1996.
- [37] G. Mompean; M. Deville. Unsteady finite volume of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 72:253–279, 1997.
- [38] I. L. Palhares Jr. Decomposições matriciais para escoamentos viscoelásticos incompressíveis. Master’s thesis, FCT-UNESP, Presidente Prudente, 2014.
- [39] N. Phan-Thien; R. I. Tanner. A new constitutive equation derived from network theory. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2:353–365, 1977.
- [40] T. N. Phillips; A. Williams. Comparison of creeping and inertial flow of an Oldroyd-B fluid through a planar and axisymmetric contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 108:25–47, 2002.
- [41] F. T. Pinho; M. A. Alves; P. J. Oliveira. Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 10:45–75, 2003.
- [42] A. Raisi; M. Mirzazadh; A. S. Dehnavi; F. Rashidi. An approximate solution for the Couette-Poiseuille flow of the Giesekus model between parallel plates. *Rheologica Acta*, 47:75–80, 2008.
- [43] Y. Renardy. Instability at the interface between two shearing fluids in a channel. *Physics of Fluids*, 28:3441–3443, 1985.
- [44] M. Renardy; Y. Renardy. Linear stability of plane Couette flow of an upper convected maxwell fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 22:23–33, 1986.
- [45] G. B. Schubauer; H. K. Skramstad. Laminar boundary-layer oscillations and transition on a flat plate. *National Advisory Committee for Aeronautics*, TR-909, 1948.
- [46] L. F. Souza. *Instabilidade centrífuga e transição para turbulência em escoamentos laminares sobre superfícies côncavas*. PhD thesis, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2003.
- [47] L.F. Souza; A.C. Brandi; M.T. Mendonça. *Estabilidade de Escoamentos de Fluidos Não Newtonianos*. In: *Mendonça, M.T.; Avelar, A.C. Turbulência*. ABCM, 2012.

- [48] L. F. Souza; M. T. Mendonça; M. A. F. Medeiros. The advantages of using high-order finite differences schemes in laminar-turbulent transition studies. *International Journal for Numerical Methods Fluids*, 48:565–592, 2005.
- [49] S.M. Taghavi; N. Khabazi; K. Sadeghy. Hydromagnetic linear instability analysis of Giesekus fluids in plane Poiseuille flow. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulations*, 14:2046–2055, 2009.
- [50] T. Vaithianathan; A. Robert, J.G. Brasseur; L.R. Collins. An improved algorithm for simulating three-dimensional, viscoelastic turbulence. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 140:3–22, 2006.
- [51] T. Vaithianathan; L.R. Collins. Numerical approach to simulating turbulent flow of a viscoelastic polymer solution. *Journal of Computational Physics*, 187:1–21, 2003.
- [52] W. M. H. Verbeeten; G. W. M. Peters; F. T. P. Baaijens. Differential constitutive equations for polymer melts: the extended Pom-Pom model. *Journal of Rheology*, 45:823–843, 2001.
- [53] J. A. White; A. B. Metzner. Development of constitutive equations for polymeric melts and solutions. *Journal of Applied Polymer Science*, 7:1867–1889, 1963.
- [54] H. Xu; S. J. Sherwin; P. Hall; X. Hu. The behaviour of Tollmien-Schlichting waves undergoing small-scale localised distortions. *Journal of Fluid Mechanics*, 792:499–525, 2016.
- [55] J.Y. Yoo; H. C. Choi. On the steady simple shear flows of the one-mode Giesekus fluid. *Rheologica Acta*, 28:13–24, 1989.
- [56] M. Zhang; I. Lashgari; T. A. Zaki; L. Brandt. Linear stability analysis of channel flow of viscoelastic Oldroyd-B and FENE-P fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 737:249–279, 2013.

Outras Formulações Baseadas na Decomposição do Tensor Conformação

A.1 Decomposição Logaritmo-Conformação

Vaithianathan e Collins [51] propuseram uma formulação baseada primeiramente, na decomposição do tensor gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$ em termos de duas componentes

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{R}, \quad (\text{A.1})$$

sendo $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^\top)$ o tensor taxa de deformação (simétrico) e $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^\top)$ o tensor taxa de rotação (antissimétrico).

Embora esta decomposição não seja a mesma utilizada por Fattal e Kupferman [15], pode-se relacionar as duas decomposições, uma vez que ambas as formulações trata em decompor $\nabla \mathbf{u}$ em componentes extensional e rotacional, ainda que a escolha realizada por Fattal e Kupferman [15] seja menos explícita.

Os resultados a seguir garantem que seja possível aplicar a decomposição do tensor gradiente de velocidade.

Lema A.1 *Seja $\mathbf{\Lambda}$ uma matriz diagonal com entradas não nulas e distintas. Então qualquer matriz $\tilde{\mathbf{M}}_{n \times n}$ possui uma única decomposição*

$$\tilde{\mathbf{M}} = \tilde{\mathbf{\Omega}} + \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{\Lambda}^{-1}, \quad (\text{A.2})$$

onde $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ e $\tilde{\mathbf{N}}$ são antissimétricas, enquanto $\tilde{\mathbf{B}}$ é diagonal.

Lema A.2 *Seja $\mathbf{S}_{n \times n}$ uma matriz simétrica e definida positiva. Então qualquer matriz $\mathbf{M}_{n \times n}$ pode ser decomposta em*

$$\mathbf{M} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{S}^{-1}, \quad (\text{A.3})$$

onde $\mathbf{\Omega}$ e $\mathbf{N}$ são antissimétricas e $\mathbf{B}$ além de ser simétrica, comuta com $\mathbf{S}$.

As demonstrações dos Lemas A.1 e A.2 podem ser encontradas em [15]. Como consequência destes resultados, segue o Corolário A.1.

Corolário A.1 *Sendo $\mathbf{u}$ o campo de velocidade e $\mathbf{A}$ o tensor conformação que é simétrico e definido positivo, então*

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}, \quad (\text{A.4})$$

onde $\mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{A})$ e $\mathbf{N} = \mathbf{N}(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{A})$ são antissimétricas e $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{A})$ além de ser simétrica, comuta com $\mathbf{A}$.

Toda matriz simétrica e definida positiva, tal como o tensor conformação, pode ser decomposta como

$$\mathbf{A} = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top, \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{O} = \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

são, respectivamente, a matriz dos autovalores e a matriz dos autovetores de $\mathbf{A}$ para o caso bidimensional, e então segue que

$$\mathbf{O}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}^\top\mathbf{O} = \mathbf{I}. \quad (\text{A.7})$$

Substituindo a equação (A.4) do Corolário A.1 na equação constitutiva do tensor conformação (3.5), segue

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) &= (\nabla \mathbf{u})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) &= (\mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) &= (\mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\mathbf{\Omega}^\top + \mathbf{B}^\top + \mathbf{A}^{-1\top}\mathbf{N}^\top) + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) &= \mathbf{\Omega}\mathbf{A} + \mathbf{B}\mathbf{A} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} + \mathbf{A}(-\mathbf{\Omega}) + \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}(-\mathbf{N}) + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}), \end{aligned}$$

e finalmente, em termos das matrizes resultantes da decomposição matricial do Corolário A.1, a equação constitutiva do tensor conformação $\mathbf{A}$ é dada por

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) = (\mathbf{\Omega}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{\Omega}) + 2\mathbf{B}\mathbf{A} + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}), \quad (\text{A.8})$$

com $P(\mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{A} - \mathbf{I})]$.

A definição de matriz logaritmica exige a positividade do logaritmando. Tendo em vista que o tensor conformação satisfaz essa condição, então pode-se definir seu logaritmo como sendo

$$\mathbf{\Psi} = \ln(\mathbf{A}), \quad (\text{A.9})$$

ressaltando que $\mathbf{\Psi}$ carrega as propriedades simétrica e definida positiva do tensor conformação. Pela propriedade inversa, é claro que

$$e^{\mathbf{\Psi}} = \mathbf{A}. \quad (\text{A.10})$$

Como consequência da diagonalização do tensor conformação $\mathbf{A}$, os tensores $\mathbf{\Psi}$ e $e^{\mathbf{\Psi}}$ podem ser calculados

$$\mathbf{\Psi} = \ln(\mathbf{A}) = \ln(\mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top) = \mathbf{O}\ln(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^\top = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \ln(\lambda_1) & 0 \\ 0 & \ln(\lambda_2) \end{bmatrix} \mathbf{O}^\top. \quad (\text{A.11})$$

Desta última equação é possível notar que os autovetores de $\mathbf{A}$ são os mesmos que de $\mathbf{\Psi}$, enquanto que os autovalores de $\mathbf{\Psi}$ são as imagens dos autovalores de $\mathbf{A}$ pela função logarítmica.

Para calcular $e^{\mathbf{\Psi}}$, utiliza-se a decomposição (A.11) do tensor $\mathbf{\Psi}$

$$e^{\mathbf{\Psi}} = \mathbf{O} e^{\ln(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{O}^{\top} = \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^{\top} = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \mathbf{O}^{\top} = \mathbf{A}. \quad (\text{A.12})$$

Desde que $\mathbf{\Psi} = \ln(\mathbf{A})$, então agora o objetivo é, a partir disso, determinar uma equação evolutiva para o tensor $\mathbf{\Psi}$. Para tanto, a equação evolutiva (A.8) é decomposta em quatro termos principais [15]:

Advecção: A contribuição convectiva de $\mathbf{\Psi}$ obtém-se a partir de $\mathbf{A} = e^{\mathbf{\Psi}}$.

De fato, note que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{A}) &= 0 \Rightarrow \frac{\partial e^{\mathbf{\Psi}}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) e^{\mathbf{\Psi}} = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{\partial e^{\Psi_{11}}}{\partial t} & \frac{\partial e^{\Psi_{12}}}{\partial t} \\ \frac{\partial e^{\Psi_{12}}}{\partial t} & \frac{\partial e^{\Psi_{22}}}{\partial t} \end{bmatrix} + \left[u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right] \begin{bmatrix} e^{\Psi_{11}} & e^{\Psi_{12}} \\ e^{\Psi_{12}} & e^{\Psi_{22}} \end{bmatrix} &= 0. \end{aligned}$$

Pela regra da cadeia, segue que

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e^{\Psi_{11}} \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial t} + e^{\Psi_{11}} \left(u \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial y} \right) & e^{\Psi_{12}} \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + e^{\Psi_{12}} \left(u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} \right) \\ e^{\Psi_{12}} \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + e^{\Psi_{12}} \left(u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} \right) & e^{\Psi_{22}} \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial t} + e^{\Psi_{22}} \left(u \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial y} \right) \end{bmatrix} &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{bmatrix} e^{\Psi_{11}} \left(\frac{\partial \Psi_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial y} \right) & e^{\Psi_{12}} \left(\frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} \right) \\ e^{\Psi_{12}} \left(\frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} \right) & e^{\Psi_{22}} \left(\frac{\partial \Psi_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial y} \right) \end{bmatrix} &= 0. \end{aligned}$$

Como $e^{\Psi_{ij}} \neq 0, \forall i, j \in \{1, 2\}$, segue que

$$\frac{\partial \Psi_{ij}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{ij}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{ij}}{\partial y} = 0, \quad \forall i, j \in \{1, 2\}.$$

Dessa forma, tem-se que

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial y} & \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} \\ \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} & \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial y} \end{bmatrix} &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12} & \Psi_{22} \end{bmatrix} + \left[u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right] \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12} & \Psi_{22} \end{bmatrix} &= 0. \end{aligned}$$

Portanto, conclui-se que

$$\frac{\partial \mathbf{\Psi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{\Psi}) = 0,$$

é a contribuição convectiva da equação constitutiva do tensor $\mathbf{\Psi}$.

Rotação: Se o gradiente da velocidade é uma rotação pura, então algum tensor que seja função de $\mathbf{A}$, em particular o tensor do logaritmo conformação, também será uma rotação com $\mathbf{A}$. Portanto a seguinte implicação é verdadeira

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = (\boldsymbol{\Omega} \mathbf{A} - \mathbf{A} \boldsymbol{\Omega}) \Rightarrow \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} = (\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\Psi} \boldsymbol{\Omega}). \quad (\text{A.13})$$

De fato, a solução para $\mathbf{A}$ é

$$\mathbf{A}(t) = e^{\boldsymbol{\Omega} t} \mathbf{A}(0) e^{-\boldsymbol{\Omega} t}, \quad (\text{A.14})$$

logo,

$$\boldsymbol{\Psi}(t) = e^{\boldsymbol{\Omega} t} \boldsymbol{\Psi}(0) e^{-\boldsymbol{\Omega} t}. \quad (\text{A.15})$$

Extensão: A contribuição extensional para a matriz $\boldsymbol{\Psi}$ é obtida a partir de

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 2\mathbf{B}\mathbf{A}.$$

De fato, considerando a informação do Corolário A.1 de que $\mathbf{B}$ comuta com $\mathbf{A}$, então

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 2\mathbf{B}\mathbf{A} \Rightarrow \frac{\partial e^{\boldsymbol{\Psi}}}{\partial t} = 2\mathbf{B}e^{\boldsymbol{\Psi}} \Rightarrow e^{\boldsymbol{\Psi}} \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} = 2e^{\boldsymbol{\Psi}} \mathbf{B},$$

e simplificando

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} = 2\mathbf{B},$$

é obtida como a contribuição extensional de $\boldsymbol{\Psi}$.

Termo-fonte: O termo-fonte é obtido a partir de

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{1}{W_i} P(\mathbf{A}).$$

Substituindo $\mathbf{A} = e^{\boldsymbol{\Psi}}$, resulta em

$$\frac{\partial e^{\boldsymbol{\Psi}}}{\partial t} = \frac{1}{W_i} P(e^{\boldsymbol{\Psi}}) \Rightarrow e^{\boldsymbol{\Psi}} \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} = \frac{1}{W_i} P(e^{\boldsymbol{\Psi}}).$$

Finalmente,

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} = \frac{1}{W_i} e^{-\boldsymbol{\Psi}} P(e^{\boldsymbol{\Psi}}),$$

é o termo-fonte da equação constitutiva do tensor $\boldsymbol{\Psi}$.

Dessa forma, seja $\mathbf{A}$ tensor conformação, governado pela equação constitutiva (A.8), então $\boldsymbol{\Psi} = \ln(\mathbf{A})$ satisfaz

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \boldsymbol{\Psi}) = (\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\Psi} \boldsymbol{\Omega}) + 2\mathbf{B} + \frac{1}{W_i} e^{-\boldsymbol{\Psi}} P(e^{\boldsymbol{\Psi}}), \quad (\text{A.16})$$

onde a função $P(e^\Psi)$ é definida de acordo com o modelo constitutivo. Assim, para o modelo Giesekus segue que

$$P(e^\Psi) = (\mathbf{I} - e^\Psi)[\mathbf{I} + \alpha_G(e^\Psi - \mathbf{I})].$$

A.2 Decomposição Raiz Quadrada-Conformação

Sendo $\mathbf{A}$ diagonalizável, logo pode ser decomposto como em (A.5), e então a raiz quadrada de $\mathbf{A}$ é dada por

$$\mathbf{A}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{O}(\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}})\mathbf{O}^\top. \quad (\text{A.17})$$

De fato, $\mathbf{A}^{\frac{1}{2}}\mathbf{A}^{\frac{1}{2}} = (\mathbf{O}(\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}})\mathbf{O}^\top)(\mathbf{O}(\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}})\mathbf{O}^\top) = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{O}^\top = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^\top = \mathbf{A}$.

Daí segue que o tensor conformação pode ser decomposto de maneira única como

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}^2, \quad (\text{A.18})$$

onde $\mathbf{Q}$ é a matriz raiz quadrada do tensor conformação que também é simétrica e definida positiva.

Vaithianathan e Collins [51] empregaram a decomposição de Cholesky

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^\top,$$

onde $\mathbf{L}$ é uma matriz triangular inferior e $\mathbf{L}^\top$ é sua transposta.

Enquanto isso, Balci et al. [4] aplicaram a decomposição do tipo raiz quadrada, que pode ser associada à decomposição de Cholesky utilizada anteriormente, pois, uma vez que $\mathbf{Q}$ é simétrica, é permitido escrever $\mathbf{A} = \mathbf{Q}^\top\mathbf{Q}$.

Assim como na formulação log-conformação, o método baseado na decomposição do tipo raiz quadrada caracteriza-se por estimular a preservação da positividade de $\mathbf{A}$, que deve satisfazer, em particular para o caso bidimensional

$$\begin{aligned} \det(A_1) &> 0, \\ \det(A_2) &= \det(A) > 0, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\det(A_1) = A_{11} > 0, \quad (\text{A.19})$$

$$\det(A_2) = A_{11}A_{22} - A_{12}^2 > 0. \quad (\text{A.20})$$

Considerando a decomposição de Balci et al. [4], segue que

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} Q_{11}^2 + Q_{12}^2 & Q_{11}Q_{12} + Q_{12}Q_{22} \\ Q_{12}Q_{11} + Q_{22}Q_{12} & Q_{12}^2 + Q_{22}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11}^2 + Q_{12}^2 & Q_{12}(Q_{11} + Q_{22}) \\ Q_{12}(Q_{11} + Q_{22}) & Q_{12}^2 + Q_{22}^2 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Verifica-se que $\text{tr}(\mathbf{A})$ é positivo e que a condição (A.19) está naturalmente satisfeita, pois

$$A_{11} = Q_{11}^2 + Q_{21}^2 > 0.$$

Porém, garantir a positividade pela condição (A.20), além de não ser simples, impõe algumas limitações ao método

$$\begin{aligned} A_{11}A_{22} - A_{12}^2 &= (Q_{11}^2 + Q_{12}^2)(Q_{12}^2 + Q_{22}^2) - [Q_{12}(Q_{11} + Q_{22})]^2 = \\ &= Q_{11}^2Q_{12}^2 + Q_{11}^2Q_{22}^2 + Q_{12}^2Q_{12}^2 + Q_{12}^2Q_{22}^2 - Q_{12}^2(Q_{11}^2 + 2Q_{11}Q_{22} + Q_{22}^2) = \\ &= Q_{11}^2Q_{22}^2 + Q_{12}^2(Q_{12}^2 - 2Q_{11}Q_{22}). \end{aligned}$$

Logo, deve-se garantir que $Q_{11}^2Q_{22}^2 + Q_{12}^2(Q_{12}^2 - 2Q_{11}Q_{22}) > 0$. Recordando a equação constitutiva do tensor conformação

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) = (\nabla \mathbf{u})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}),$$

com $P(\mathbf{A})$ tensor que depende de $\mathbf{A}$, é possível associar o lado esquerdo dessa equação à derivada material do tensor conformação, dada por

$$\frac{D\mathbf{A}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}),$$

e, portanto,

$$\frac{D\mathbf{A}}{Dt} = (\nabla \mathbf{u})\mathbf{A} + \mathbf{A}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{A}).$$

Agora, $\mathbf{A}$ é substituído pela decomposição $\mathbf{Q}^2$, e então

$$\frac{D\mathbf{Q}^2}{Dt} = (\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^2(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{Q}^2).$$

Aplicando a regra do produto para a derivada material segue que

$$\frac{D\mathbf{Q}^2}{Dt} = \frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt},$$

e, consequentemente,

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} &= (\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^2(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{Q}^2) \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{Q}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} &= -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + (\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^2(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}P(\mathbf{Q}^2) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} &= -\mathbf{Q}^{-1}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1}(\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Q}^2(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} &= -\mathbf{Q}^{-1}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1}(\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2). \end{aligned}$$

Considerando a seguinte manipulação

$$\frac{1}{W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) = \frac{1}{2}\frac{1}{W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) + \frac{1}{2}\frac{1}{W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2),$$

então segue que

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} &= -\mathbf{Q}^{-1}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1}(\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) + \frac{1}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2), \\ \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top - \frac{1}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) &= -\mathbf{Q}^{-1}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1}(\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^2 + \frac{1}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2), \end{aligned}$$

$$\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top - \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) = \mathbf{Q}^{-1} \left[-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + (\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q} + \frac{1}{2W_i} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right] \mathbf{Q}, \quad (\text{A.21})$$

e definindo o primeiro membro como

$$\mathbf{V} = \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top - \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2), \quad (\text{A.22})$$

então sua transposta é facilmente definida

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^\top &= \left[\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top - \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) \right]^\top = \\ &= \left(\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} \right)^\top - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q}^\top - \frac{1}{2W_i} P(\mathbf{Q}^2)^\top (\mathbf{Q}^{-1})^\top = \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - (\nabla \mathbf{u})\mathbf{Q} - \frac{1}{2W_i} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

tendo em vista que $\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}$, $\mathbf{Q}$, $P(\mathbf{Q}^2)$ e $\mathbf{Q}^{-1}$ são simétricos.

A partir disso, é possível notar que $(-\mathbf{V})^\top$ é justamente o termo que aparece entre colchetes na igualdade (A.21). Logo, pode-se escrever

$$\mathbf{V} = \mathbf{Q}^{-1}(-\mathbf{V})^\top \mathbf{Q} \Rightarrow \mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1} = -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{V}^\top \Rightarrow \mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1} = -(\mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1})^\top,$$

e o tensor $\mathbf{G} = \mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1}$ é antissimétrico. Substituindo de forma conveniente em (A.21), segue que

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top - \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) &= \mathbf{Q}^{-1}(-\mathbf{V}^\top)\mathbf{Q} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Q}) &= \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top + \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2), \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

que é a equação constitutiva do tensor conformação em termos de $\mathbf{Q}$, sendo $\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 & G_{12} \\ -G_{12} & 0 \end{bmatrix}$ antissimétrica e $P(\mathbf{Q}^2)$ dependente do modelo constitutivo, no caso, do tipo Giesekus

$$P(\mathbf{Q}^2) = (\mathbf{I} - \mathbf{Q}^2)[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbf{Q}^2 - \mathbf{I})].$$

A.2.1 Determinação da Matriz $\mathbf{G}$

Apesar da definição de $\mathbf{G}$ ser

$$\mathbf{G} = \mathbf{Q}^{-1} \left(-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla \mathbf{u}\mathbf{Q} + \frac{1}{2W_i} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right), \quad (\text{A.25})$$

sua indicação não é realizada dessa forma. Ocorre que $\mathbf{Q}^{-1}$ é simétrica, assim como todas as outras parcelas, com exceção de $\nabla \mathbf{u}\mathbf{Q}$, logo

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^\top &= \left[\mathbf{Q}^{-1} \left(-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla \mathbf{u}\mathbf{Q} + \frac{1}{2W_i} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right) \right]^\top = \\ &= \left(-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \mathbf{Q}\nabla \mathbf{u}^\top + \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) \right) \mathbf{Q}^{-1}. \end{aligned}$$

Nesse sentido, segue que

$$\left(-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^\top + \frac{1}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2)\right)\mathbf{Q}^{-1} \neq \mathbf{Q}^{-1}\left(\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} - \frac{1}{2W_i}P(\mathbf{Q}^2)\mathbf{Q}^{-1}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mathbf{G}^\top \neq -\mathbf{G},$$

ou seja, $\mathbf{G}$ não é antissimétrica.

Conclui-se, portanto, que a propriedade antissimétrica de $\mathbf{G}$ não se deve à maneira como é definida em (A.25), mas sim as circunstâncias envolvidas na construção da equação evolutiva de $\mathbf{Q}$

$$\underbrace{\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Q})}_{\text{simétrico}} = \underbrace{\mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u})^\top}_{?} + \underbrace{\frac{1}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2)}_{\text{simétrico}},$$

em que os termos indicados são simétricos pois $\mathbf{Q}$ é simétrico e portanto $\mathbf{Q}^{-1}$ também o é. Além disso, $P(\mathbf{Q}^2)$ é simétrico pois envolve os tensores $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{I}$ que são simétricos.

A partir disso, há necessidade de garantir que $\mathbf{K} = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u})^\top$ também seja simétrico

$$\mathbf{K}^\top = \mathbf{K} \Rightarrow (\mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u})^\top)^\top = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u})^\top \Rightarrow \mathbf{Q}(-\mathbf{G}) + \nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u})^\top \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} - \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u} = \mathbf{G}\mathbf{Q} - \mathbf{Q}\mathbf{G}. \quad (\text{A.26})$$

Escrevendo em termos da matriz de componentes

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^\top = \mathbf{K} &\Rightarrow \nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} - \mathbf{Q}(\nabla\mathbf{u})^\top = \mathbf{G}\mathbf{Q} - \mathbf{Q}\mathbf{G} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \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} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \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} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 & G_{12} \\ -G_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & G_{12} \\ -G_{12} & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \begin{bmatrix} Q_{11}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial u}{\partial y} & Q_{12}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \\ Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} & Q_{12}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Q_{11}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial u}{\partial y} & Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} \\ Q_{12}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} & Q_{12}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} G_{12}Q_{12} & G_{12}Q_{22} \\ -G_{12}Q_{11} & -G_{12}Q_{12} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -G_{12}Q_{12} & G_{12}Q_{11} \\ -G_{12}Q_{22} & G_{12}Q_{12} \end{bmatrix} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & Q_{12}\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}\right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \\ -\left[Q_{12}\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}\right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y}\right] & 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 & G_{12}(Q_{11} + Q_{22}) \\ -G_{12}(Q_{11} + Q_{22}) & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} G_{12}(Q_{11} + Q_{22}) &= Q_{12}\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}\right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \Rightarrow \\ &\Rightarrow G_{12} = \frac{Q_{12}\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}\right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y}}{Q_{11} + Q_{22}}, \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

e, de fato, $\mathbf{G}$ é confirmada antissimétrica. Mais ainda, desta forma, $\mathbf{G}$ garante a simetria do termo $\mathbf{K}$, pois

$$\mathbf{K} = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^\top = \begin{bmatrix} G_{12}Q_{12} & G_{12}Q_{22} \\ -G_{12}Q_{11} & -G_{12}Q_{12} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Q_{11}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial u}{\partial y} & Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} \\ Q_{12}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} & Q_{12}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix},$$

e lembrando que $\mathbf{K}$ é simétrico desde que $K_{12} = K_{21}$, então basta verificar que

$$G_{12}Q_{22} + Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} = -G_{12}Q_{11} + Q_{12}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y}.$$

Aplicando a definição de $\mathbf{G}$ (A.27) tem-se

$$\begin{aligned} & \left[Q_{12} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \right] \frac{Q_{22}}{Q_{11} + Q_{22}} + Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} = \\ & = - \left[Q_{12} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \right] \frac{Q_{11}}{Q_{11} + Q_{22}} + Q_{12}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned}$$

Analisando o lado esquerdo da igualdade

$$\begin{aligned} & \left[Q_{12} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \right] \frac{Q_{22}}{Q_{11} + Q_{22}} + Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} = \\ & = Q_{12}Q_{22}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}^2\frac{\partial u}{\partial y} + Q_{11}^2\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}Q_{11}\frac{\partial v}{\partial y}. \end{aligned}$$

Enquanto que, no lado direito da igualdade

$$\begin{aligned} & - \left[Q_{12} \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) - Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} \right] \frac{Q_{11}}{Q_{11} + Q_{22}} + Q_{12}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}\frac{\partial u}{\partial y} = \\ & = Q_{12}Q_{11}\frac{\partial v}{\partial y} + Q_{11}^2\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}Q_{22}\frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22}^2\frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned}$$

Note que, de fato as parcelas satisfazem a igualdade que é condição para $\mathbf{K}$ ser simétrico.

Decomposições Matriciais

B.1 Decomposição Logaritmo

Cálculo das matrizes de decomposição de $\nabla \mathbf{u}$

Cálculo das matrizes $\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{B}$ e $\mathbf{N}$, com $\mathbf{\Omega}$ e $\mathbf{N}$ antissimétricas e $\mathbf{B}$ simétrica, definidas por

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{O}^T, \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{O}^T, \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{N} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{O}^T. \quad (\text{B.3})$$

Também define-se,

$$\tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{O}^T(\nabla \mathbf{u})\mathbf{O} = \begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.4})$$

então

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega} &= \mathbf{O} \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \\ -\tilde{\Omega}_{21} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{O}^T = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{O}^T, \\ \mathbf{B} &= \mathbf{O} \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22} \end{bmatrix} \mathbf{O}^T = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{O}^T, \\ \mathbf{N} &= \mathbf{O} \begin{bmatrix} 0 & \tilde{N}_{12} \\ -\tilde{N}_{21} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{O}^T = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{O}^T. \end{aligned}$$

Pelo Lema A.1 tem-se $\tilde{\mathbf{M}} = \tilde{\mathbf{\Omega}} + \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{\Lambda}^{-1}$, e além disso, sabendo que

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{\Lambda}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_2} \end{bmatrix},$$

então,

$$\begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \\ -\tilde{\Omega}_{21} & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \tilde{N}_{12} \\ -\tilde{N}_{21} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_2} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11} & \tilde{\Omega}_{12} + \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_1} \\ -\tilde{\Omega}_{21} - \frac{\tilde{N}_{21}}{\lambda_2} & \tilde{B}_{22} \end{bmatrix}.$$

Logo, segue que

$$\tilde{M}_{11} = \tilde{B}_{11} \quad \text{e} \quad \tilde{M}_{22} = \tilde{B}_{22}, \quad (\text{B.5})$$

onde é possível construir a matriz **B**.

Além disso,

$$\tilde{M}_{12} = \tilde{\Omega}_{12} + \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_2} \Rightarrow \tilde{\Omega}_{12} = \tilde{M}_{12} - \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_2}, \quad (\text{B.6})$$

e

$$\tilde{M}_{21} = -\tilde{\Omega}_{12} - \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_2}. \quad (\text{B.7})$$

Substituindo a equação (B.6) na equação (B.7), obtém-se

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{21} &= -\left(\tilde{M}_{12} - \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_2}\right) - \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_1} = -\tilde{M}_{12} + \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_2} - \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_1} = -\tilde{M}_{12} + \tilde{N}_{12}(\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1}) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \tilde{M}_{21} + \tilde{M}_{12} = \tilde{N}_{12}(\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1}) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \tilde{N}_{12} = \frac{\tilde{M}_{21} + \tilde{M}_{12}}{\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1}}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Desta forma, a matriz **N** está determinada.

Agora, substituindo a equação (B.8) em (B.6), segue que

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_{12} &= \tilde{M}_{12} - \left[\frac{\tilde{M}_{21} + \tilde{M}_{12}}{(\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1})\lambda_2} \right] = \frac{\tilde{M}_{12}[(\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1})\lambda_2] - \tilde{M}_{21} - \tilde{M}_{12}}{(\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1})\lambda_2} = \\ &= \frac{\tilde{M}_{12} - \tilde{M}_{12}\lambda_2\lambda_1^{-1} - \tilde{M}_{21} - \tilde{M}_{12}}{1 - \lambda_2\lambda_1^{-1}} = \frac{-\tilde{M}_{12}\lambda_2\lambda_1^{-1} - \tilde{M}_{21}}{\lambda_1\lambda_1^{-1} - \lambda_2\lambda_1^{-1}} = \\ &= \frac{\tilde{M}_{12}\lambda_2 + \tilde{M}_{21}\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

e, portanto, determina-se a matriz **Ω**.

Cálculo de Ψ , e^Ψ e $e^{-\Psi}$

Tem-se que

$$\begin{aligned}
\Psi &= \ln(\mathbf{A}) = \mathbf{O} \ln(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \ln(\lambda_1) & 0 \\ 0 & \ln(\lambda_2) \end{bmatrix} \mathbf{O}^T = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ln(\lambda_1) & 0 \\ 0 & \ln(\lambda_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11} \ln(\lambda_1) & O_{12} \ln(\lambda_2) \\ O_{21} \ln(\lambda_1) & O_{22} \ln(\lambda_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11}^2 \ln(\lambda_1) + O_{12}^2 \ln(\lambda_2) & O_{11} O_{21} \ln(\lambda_1) + O_{12} O_{22} \ln(\lambda_2) \\ O_{21} O_{11} \ln(\lambda_1) + O_{22} O_{12} \ln(\lambda_2) & O_{21}^2 \ln(\lambda_1) + O_{22}^2 \ln(\lambda_2) \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

De fato, verifica-se que Ψ é simétrico. Portanto,

$$\Psi_{11} = O_{11}^2 \ln(\lambda_1) + O_{12}^2 \ln(\lambda_2), \quad (\text{B.10})$$

$$\Psi_{12} = O_{21} O_{11} \ln(\lambda_1) + O_{22} O_{12} \ln(\lambda_2), \quad (\text{B.11})$$

$$\Psi_{22} = O_{21}^2 \ln(\lambda_1) + O_{22}^2 \ln(\lambda_2). \quad (\text{B.12})$$

Além disso, note que $e^\Psi = \mathbf{A} = \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^T$, e portanto,

$$\begin{aligned}
e^\Psi &= \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11} \lambda_1 & O_{12} \lambda_2 \\ O_{21} \lambda_1 & O_{22} \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2 & O_{11} O_{21} \lambda_1 + O_{12} O_{22} \lambda_2 \\ O_{21} O_{11} \lambda_1 + O_{22} O_{12} \lambda_2 & O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2 \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

ou seja, e^Ψ é simétrico e

$$e^{\Psi_{11}} = O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2, \quad (\text{B.13})$$

$$e^{\Psi_{12}} = O_{21} O_{11} \lambda_2 + O_{22} O_{12} \lambda_2, \quad (\text{B.14})$$

$$e^{\Psi_{22}} = O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2. \quad (\text{B.15})$$

Agora, $e^{-\Psi} = (e^\Psi)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{O} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{O}^T$, e, consequentemente,

$$\begin{aligned}
e^{-\Psi} &= \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11} \frac{1}{\lambda_1} & O_{12} \frac{1}{\lambda_2} \\ O_{21} \frac{1}{\lambda_1} & O_{22} \frac{1}{\lambda_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\
&= \begin{bmatrix} O_{11}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{12}^2 \frac{1}{\lambda_2} & O_{11} O_{21} \frac{1}{\lambda_1} + O_{12} O_{22} \frac{1}{\lambda_2} \\ O_{21} O_{11} \frac{1}{\lambda_1} + O_{22} O_{12} \frac{1}{\lambda_2} & O_{21}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{22}^2 \frac{1}{\lambda_2} \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

donde segue que $e^{-\Psi}$ também é simétrico e

$$e^{-\Psi_{11}} = O_{11}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{12}^2 \frac{1}{\lambda_2}, \quad (\text{B.16})$$

$$e^{-\Psi_{12}} = O_{11} O_{21} \frac{1}{\lambda_1} + O_{12} O_{22} \frac{1}{\lambda_2}, \quad (\text{B.17})$$

$$e^{-\Psi_{22}} = O_{21}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{22}^2 \frac{1}{\lambda_2}. \quad (\text{B.18})$$

Equação Constitutiva para Ψ

Dada a equação constitutiva do tensor conformação (A.16) em função do tensor Ψ , tem-se

$$\underbrace{\frac{\partial \Psi}{\partial t}}^{(*)} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{u} \Psi)}^{(**)} = \underbrace{(\Omega \Psi - \Psi \Omega)}^{***} + \underbrace{2\mathbf{B}}^{****} + \frac{1}{Wi} e^{-\Psi} P(e^{\Psi}).$$

Segue o desenvolvimento termo a termo:

(*):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12} & \Psi_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial t} & \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} \\ \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} & \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial t} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.19})$$

(**):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{u} \Psi) &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Psi = \left[u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right] \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12} & \Psi_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} u \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{11}}{\partial y} & u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} \\ u \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{12}}{\partial y} & u \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \Psi_{22}}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

(***): Tem-se que

$$\begin{aligned} \Omega &= \mathbf{O} \tilde{\Omega} \mathbf{O} = \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \\ -\tilde{\Omega}_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} -O_{12} \tilde{\Omega}_{12} & O_{11} \tilde{\Omega}_{12} \\ -O_{22} \tilde{\Omega}_{12} & O_{21} \tilde{\Omega}_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} -O_{12} \tilde{\Omega}_{12} O_{11} + O_{11} \tilde{\Omega}_{12} O_{12} & -O_{12} \tilde{\Omega}_{12} O_{21} + O_{11} \tilde{\Omega}_{12} O_{22} \\ -O_{22} \tilde{\Omega}_{12} O_{11} + O_{21} \tilde{\Omega}_{12} O_{12} & -O_{22} \tilde{\Omega}_{12} O_{21} + O_{21} \tilde{\Omega}_{12} O_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12}(O_{11}O_{22} - O_{12}O_{21}) \\ -\tilde{\Omega}_{12}(O_{11}O_{22} - O_{12}O_{21}) & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{12} \\ -\Omega_{12} & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

e portanto, segue que Ω é antissimétrica.

Prosseguindo,

$$\Omega \Psi = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{12} \\ -\Omega_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12} & \Psi_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_{12} \Psi_{12} & \Omega_{12} \Psi_{22} \\ -\Omega_{12} \Psi_{11} & -\Omega_{12} \Psi_{12} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.22})$$

$$\Psi \Omega = \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \Psi_{12} & \Psi_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{12} \\ -\Omega_{12} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Omega_{12} \Psi_{12} & \Omega_{12} \Psi_{11} \\ -\Omega_{12} \Psi_{22} & \Omega_{12} \Psi_{12} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.23})$$

Finalmente,

$$(\Omega \Psi - \Psi \Omega) = \begin{bmatrix} 2\Omega_{12} \Psi_{12} & \Omega_{12}(\Psi_{22} - \Psi_{11}) \\ \Omega_{12}(\Psi_{22} - \Psi_{11}) & -2\Omega_{12} \Psi_{12} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.24})$$

(****):

$$2\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{11} & 0 \\ 0 & B_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2B_{11} & 0 \\ 0 & 2B_{22} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.25})$$

- Termo $\mathbf{H} = e^{-\Psi}P(e^{\Psi})$.

Em particular, para o modelo Giesekus tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= e^{-\Psi}P(e^{\Psi}) = e^{-\Psi}(\mathbf{I} - e^{\Psi})[\mathbf{I} + \alpha_G(e^{\Psi} - \mathbf{I})] = (e^{-\Psi} - \mathbf{I})[\mathbf{I} + \alpha_G(e^{\Psi} - \mathbf{I})] \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathbf{H} = (2\alpha_G - 1)\mathbf{I} + (1 - \alpha_G)e^{-\Psi} - \alpha_G e^{\Psi}. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Continuando o desenvolvimento,

$$\mathbf{H} = (2\alpha_G - 1) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + (1 - \alpha_G) \begin{bmatrix} e^{-\Psi_{11}} & e^{-\Psi_{12}} \\ e^{-\Psi_{12}} & e^{-\Psi_{22}} \end{bmatrix} - \alpha_G \begin{bmatrix} e^{\Psi_{11}} & e^{\Psi_{12}} \\ e^{\Psi_{12}} & e^{\Psi_{22}} \end{bmatrix} \Rightarrow \quad (\text{B.27})$$

$$\Rightarrow \mathbf{H} = \begin{bmatrix} 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{11}} - \alpha_G e^{\Psi_{11}} & (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{12}} - \alpha_G e^{\Psi_{12}} \\ (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{12}} - \alpha_G e^{\Psi_{12}} & 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{22}} - \alpha_G e^{\Psi_{22}} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.28})$$

donde pode-se perceber que $\mathbf{H}$ é simétrico, e portanto,

$$H_{11} = 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{11}} - \alpha_G e^{\Psi_{11}}, \quad (\text{B.29})$$

$$H_{12} = (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{12}} - \alpha_G e^{\Psi_{12}}, \quad (\text{B.30})$$

$$H_{22} = 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G)e^{-\Psi_{22}} - \alpha_G e^{\Psi_{22}}. \quad (\text{B.31})$$

Realizando as devidas substituições, escreve-se ainda

$$H_{11} = 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G) \left(O_{11}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{12}^2 \frac{1}{\lambda_2} \right) - \alpha_G (O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2), \quad (\text{B.32})$$

$$H_{12} = (1 - \alpha_G) \left(O_{11} \frac{1}{\lambda_1} O_{21} + O_{12} \frac{1}{\lambda_2} O_{22} \right) - \alpha_G (O_{11} \lambda_1 O_{21} + O_{12} \lambda_2 O_{22}), \quad (\text{B.33})$$

$$H_{22} = 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G) \left(O_{21}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{22}^2 \frac{1}{\lambda_2} \right) - \alpha_G (O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2). \quad (\text{B.34})$$

Componentes da equação de evolução

Diante do exposto, obtém-se

$$\frac{\partial \Psi_{11}}{\partial t} + \frac{\partial(u\Psi_{11})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Psi_{11})}{\partial y} = 2(\Psi_{12}\Omega_{12} + B_{11}) + \frac{1}{W_i}H_{11}, \quad (\text{B.35})$$

$$\frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + \frac{\partial(u\Psi_{12})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Psi_{12})}{\partial y} = \Omega_{12}(\Psi_{22} - \Psi_{11}) + 2B_{12} + \frac{1}{W_i}H_{12}, \quad (\text{B.36})$$

$$\frac{\partial \Psi_{22}}{\partial t} + \frac{\partial(u\Psi_{22})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Psi_{22})}{\partial y} = -2(\Psi_{12}\Omega_{12} - B_{22}) + \frac{1}{W_i}H_{22}. \quad (\text{B.37})$$

B.2 Decomposição Raiz Quadrada

Equação Constitutiva em termos de $\mathbf{Q}$

Dada a equação constitutiva do tensor conformação em termos de $\mathbf{Q}$ (A.24) tem-se

$$\overbrace{\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t}}^{(\diamond)} + \overbrace{\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Q})}^{(\diamond\diamond)} = \overbrace{\mathbf{G}\mathbf{Q}}^{(\diamond\diamond\diamond)} + \overbrace{\mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top}^{(\diamond\diamond\diamond\diamond)} + \frac{1}{2W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2).$$

Segue o desenvolvimento termo a termo:

$(\diamond)$:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial Q_{11}}{\partial t} & \frac{\partial Q_{12}}{\partial t} \\ \frac{\partial Q_{12}}{\partial t} & \frac{\partial Q_{22}}{\partial t} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.38})$$

$(\diamond\diamond)$:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Q}) &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{Q} = \left[u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right] \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} u \frac{\partial Q_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial Q_{11}}{\partial y} & u \frac{\partial Q_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial Q_{12}}{\partial y} \\ u \frac{\partial Q_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial Q_{12}}{\partial y} & u \frac{\partial Q_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial Q_{22}}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

$(\diamond\diamond\diamond)$: Sendo $\mathbf{G}$ antissimétrica (A.27), então

$$\mathbf{G}\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0 & G_{12} \\ -G_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{12}Q_{12} & G_{12}Q_{22} \\ -G_{12}Q_{11} & -G_{12}Q_{12} \end{bmatrix}.$$

$(\diamond\diamond\diamond\diamond)$:

$$\mathbf{Q}(\nabla \mathbf{u})^\top = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + Q_{12} \frac{\partial u}{\partial y} & Q_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12} \frac{\partial v}{\partial y} \\ Q_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22} \frac{\partial u}{\partial y} & Q_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + Q_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

- Termo $\mathbf{H} = \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2)$.

Em particular, para o modelo Giesekus tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) = \mathbf{Q}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{Q}^2) [\mathbf{I} + \alpha_G (\mathbf{Q}^2 - \mathbf{I})] \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathbf{H} = (1 - \alpha_G) \mathbf{Q}^{-1} + (2\alpha_G - 1) \mathbf{Q} + \alpha_G \mathbf{Q}^3. \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

Continuando o desenvolvimento,

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= (1 - \alpha_G) \frac{1}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} \begin{bmatrix} Q_{22} & -Q_{12} \\ -Q_{12} & Q_{11} \end{bmatrix} + (2\alpha_G - 1) \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} + \\ &+ \alpha_G \begin{bmatrix} Q_{11}(Q_{11}^2 + Q_{12}^2) + Q_{12}^2 \text{tr}(\mathbf{Q}) & Q_{12}(Q_{11}^2 + Q_{12}^2) + Q_{12}Q_{22} \text{tr}(\mathbf{Q}) \\ Q_{11}Q_{12} \text{tr}(\mathbf{Q}) + Q_{12}(Q_{12}^2 + Q_{22}^2) & Q_{12}^2 \text{tr}(\mathbf{Q}) + Q_{22}(Q_{12}^2 + Q_{22}^2) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

Note que $\mathbf{Q}^3$ é simétrico, pois

$$\begin{aligned} Q_{12}(Q_{11}^2 + Q_{12}^2) + Q_{12}Q_{22}(Q_{11} + Q_{22}) &= Q_{11}Q_{12}Q_{11} + Q_{11}Q_{12}Q_{22} + Q_{12}Q_{12}^2 + Q_{12}Q_{22}^2 = \\ &= Q_{11}Q_{12}(Q_{11} + Q_{22}) + Q_{12}(Q_{12}^2 + Q_{22}^2), \end{aligned}$$

sendo que $tr(\mathbf{Q}) = Q_{11} + Q_{22}$.

E, portanto, tem-se

$$\begin{aligned} H_{11} &= \frac{1 - \alpha_G}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} Q_{22} + (2\alpha_G - 1)Q_{11} - \alpha_G[Q_{11}(Q_{11}^2 + Q_{12}^2) + Q_{12}^2(Q_{11} + Q_{22})], \\ H_{12} &= \frac{1 - \alpha_G}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} Q_{12} + (2\alpha_G - 1)Q_{12} - \alpha_G[Q_{12}(Q_{11}^2 + Q_{12}^2) + Q_{12}Q_{22}(Q_{11} + Q_{22})], \\ H_{22} &= \frac{1 - \alpha_G}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} Q_{11} + (2\alpha_G - 1)Q_{22} - \alpha_G[Q_{22}(Q_{12}^2 + Q_{22}^2) + Q_{12}^2(Q_{11} + Q_{22})]. \end{aligned}$$

Componentes da equação de evolução

Diante do exposto, obtém-se

$$\frac{\partial Q_{11}}{\partial t} + \frac{\partial(uQ_{11})}{\partial x} + \frac{\partial(vQ_{11})}{\partial y} = Q_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + Q_{12} \left(G_{12} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{2Wi} H_{11}, \quad (\text{B.42})$$

$$\frac{\partial Q_{12}}{\partial t} + \frac{\partial(uQ_{12})}{\partial x} + \frac{\partial(vQ_{12})}{\partial y} = G_{12}Q_{22} + Q_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{Wi} H_{12}, \quad (\text{B.43})$$

$$\frac{\partial Q_{22}}{\partial t} + \frac{\partial(uQ_{22})}{\partial x} + \frac{\partial(vQ_{22})}{\partial y} = Q_{22} \frac{\partial v}{\partial y} + Q_{12} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - G_{12} \right) + \frac{1}{2Wi} H_{22}. \quad (\text{B.44})$$

B.3 Formulação Núcleo-Conformação

Equação constitutiva da função núcleo aplicada ao tensor conformação

Dada a equação constitutiva do tensor conformação em termos de $\mathbb{K}(\mathbf{A})$, tem-se

$$\overbrace{\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t}}^{(\triangleright)} + \overbrace{\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K})}^{(\triangleright \triangleright)} = \overbrace{(\Omega \mathbb{K} - \mathbb{K} \Omega)}^{(\triangleright \triangleright \triangleright)} + 2 \overbrace{\mathbb{B}}^{(\triangleright \triangleright \triangleright \triangleright)} + \frac{1}{Wi} \overbrace{\mathbb{H}}^{(\triangleright \triangleright \triangleright \triangleright \triangleright)}.$$

Segue o desenvolvimento termo a termo:

$(\triangleright)$:

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \mathbb{K}_{11} & \mathbb{K}_{12} \\ \mathbb{K}_{12} & \mathbb{K}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial t} & \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial t} & \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial t} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.45})$$

$(\triangleright \triangleright)$:

$$\begin{aligned} \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}) &= (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbb{K} = \left[u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right] \begin{bmatrix} \mathbb{K}_{11} & \mathbb{K}_{12} \\ \mathbb{K}_{12} & \mathbb{K}_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} u \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial y} & u \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial y} \\ u \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial y} & u \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial y} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

$(\triangleright \triangleright \triangleright)$:

$$\Omega \mathbb{K} = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{12} \\ -\Omega_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbb{K}_{11} & \mathbb{K}_{12} \\ \mathbb{K}_{12} & \mathbb{K}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_{12} \mathbb{K}_{12} & \Omega_{12} \mathbb{K}_{22} \\ -\Omega_{12} \mathbb{K}_{11} & -\Omega_{12} \mathbb{K}_{12} \end{bmatrix},$$

e

$$\mathbb{K}\Omega = \begin{bmatrix} \mathbb{K}_{11} & \mathbb{K}_{12} \\ \mathbb{K}_{12} & \mathbb{K}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{12} \\ -\Omega_{12} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} & \Omega_{12}\mathbb{K}_{11} \\ -\Omega_{12}\mathbb{K}_{22} & \Omega_{12}\mathbb{K}_{12} \end{bmatrix},$$

então,

$$\Omega\mathbb{K} - \mathbb{K}\Omega = \begin{bmatrix} 2\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} & \Omega_{12}(\mathbb{K}_{22} - \mathbb{K}_{11}) \\ \Omega_{12}(\mathbb{K}_{22} - \mathbb{K}_{11}) & -2\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} \end{bmatrix}.$$

(▷▷▷▷):

$$\begin{aligned} \mathbb{B} &= \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{B}}\mathbf{O}^{\top} = \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11}\lambda_1 J_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22}\lambda_2 J_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} O_{11}^2 \tilde{B}_{11} \lambda_1 J_{11} + O_{12}^2 \tilde{B}_{22} \lambda_2 J_{22} & O_{11} \tilde{B}_{11} \lambda_1 J_{11} O_{21} + O_{12} \tilde{B}_{22} \lambda_2 J_{22} O_{22} \\ O_{21} \tilde{B}_{11} \lambda_1 J_{11} O_{11} + O_{22} \tilde{B}_{22} \lambda_2 J_{22} O_{12} & O_{21}^2 \tilde{B}_{11} \lambda_1 J_{11} + O_{22}^2 \tilde{B}_{22} \lambda_2 J_{22} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

(▷▷▷▷▷):

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{H}}\mathbf{O}^{\top} = \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(\Lambda)_{11} J_{11} & 0 \\ 0 & P(\Lambda)_{22} J_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{21} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} O_{11}^2 P(\Lambda)_{11} J_{11} + O_{12}^2 P(\Lambda)_{22} J_{22} & O_{11} P(\Lambda)_{11} J_{11} O_{21} + O_{12} P(\Lambda)_{22} J_{22} O_{22} \\ O_{21} P(\Lambda)_{11} J_{11} O_{11} + O_{22} P(\Lambda)_{22} J_{22} O_{12} & O_{21}^2 P(\Lambda)_{11} J_{11} + O_{22}^2 P(\Lambda)_{22} J_{22} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Componentes da equação de evolução

Diante do exposto, obtém-se

$$\frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial y} = 2(\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} + \mathbb{B}_{11}) + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{11}, \quad (\text{B.47})$$

$$\frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial y} = \Omega_{12}(\mathbb{K}_{22} - \mathbb{K}_{11}) + 2\mathbb{B}_{12} + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{12}, \quad (\text{B.48})$$

$$\frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial y} = -2(\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} - \mathbb{B}_{22}) + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{22}. \quad (\text{B.49})$$

Função $\log_d$ Núcleo-Conformação

Equação constitutiva da função $\log_d$ núcleo-conformação dada por

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}) = (\Omega\mathbb{K} - \mathbb{K}\Omega) + 2\mathbb{B} + \frac{1}{W_i} \mathbb{H},$$

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}) = \Omega\mathbb{K} - \mathbb{K}\Omega + \frac{2}{\ln(d)} \mathbf{B} + \frac{d^{-\mathbb{K}}}{W_i \ln(d)} (\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}}) [\mathbf{I} + \alpha_G (d^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})]. \quad (\text{B.50})$$

Tem-se

$$\mathbb{B} = \frac{1}{\ln(d)} \mathbf{B} = \frac{1}{\ln(d)} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{12} & B_{22} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.51})$$

Portanto,

$$\mathbb{B}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} B_{11}, \quad (\text{B.52})$$

$$\mathbb{B}_{12} = \frac{1}{\ln(d)} B_{12}, \quad (\text{B.53})$$

$$\mathbb{B}_{22} = \frac{1}{\ln(d)} B_{22}. \quad (\text{B.54})$$

Enquanto isso,

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \frac{1}{\ln(d)} d^{-\mathbb{K}} (\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}}) [\mathbf{I} + \alpha_G (d^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})] = \frac{1}{\ln(d)} [(2\alpha_G - 1)\mathbf{I} + (1 - \alpha_G)d^{-\mathbb{K}} - \alpha_G d^{\mathbb{K}}] = \\ &= \frac{1}{\ln(d)} \left[(2\alpha_G - 1) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + (1 - \alpha_G) \begin{bmatrix} d_{11}^{-\mathbb{K}} & d_{12}^{-\mathbb{K}} \\ d_{12}^{-\mathbb{K}} & d_{22}^{-\mathbb{K}} \end{bmatrix} - \alpha_G \begin{bmatrix} d_{11}^{\mathbb{K}} & d_{12}^{\mathbb{K}} \\ d_{12}^{\mathbb{K}} & d_{22}^{\mathbb{K}} \end{bmatrix} \right] = \\ &= \frac{1}{\ln(d)} \begin{bmatrix} 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G)d_{11}^{-\mathbb{K}} - \alpha_G d_{11}^{\mathbb{K}} & (1 - \alpha_G)d_{12}^{-\mathbb{K}} - \alpha_G d_{12}^{\mathbb{K}} \\ (1 - \alpha_G)d_{12}^{-\mathbb{K}} - \alpha_G d_{12}^{\mathbb{K}} & 2\alpha_G - 1 + (1 - \alpha_G)d_{22}^{-\mathbb{K}} - \alpha_G d_{22}^{\mathbb{K}} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

Dessa forma,

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} [d_{11}^{-\mathbb{K}} - 1 + \alpha_G(2 - d_{11}^{-\mathbb{K}} - d_{11}^{\mathbb{K}})], \quad (\text{B.56})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{\ln(d)} [d_{12}^{-\mathbb{K}} + \alpha_G(-d_{11}^{-\mathbb{K}} - d_{11}^{\mathbb{K}})], \quad (\text{B.57})$$

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{1}{\ln(d)} [d_{22}^{-\mathbb{K}} - 1 + \alpha_G(2 - d_{22}^{-\mathbb{K}} - d_{22}^{\mathbb{K}})]. \quad (\text{B.58})$$

Diante do exposto, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial y} &= 2 \left(\Omega_{12} \mathbb{K}_{12} + \frac{1}{\ln(d)} B_{11} \right) + \\ &+ \frac{1}{\ln(d) W_i} [d_{11}^{-\mathbb{K}} - 1 + \alpha_G(2 - d_{11}^{-\mathbb{K}} - d_{11}^{\mathbb{K}})], \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial y} &= \Omega_{12} (\mathbb{K}_{22} - \mathbb{K}_{11}) + \frac{2}{\ln(d)} B_{12} + \\ &+ \frac{1}{\ln(d) W_i} [d_{12}^{-\mathbb{K}} + \alpha_G(-d_{11}^{-\mathbb{K}} - d_{11}^{\mathbb{K}})], \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial y} &= -2 \left(\Omega_{12} \mathbb{K}_{12} - \frac{1}{\ln(d)} B_{22} \right) + \\ &+ \frac{1}{\ln(d) W_i} [d_{22}^{-\mathbb{K}} - 1 + \alpha_G(2 - d_{22}^{-\mathbb{K}} - d_{22}^{\mathbb{K}})]. \end{aligned} \quad (\text{B.61})$$

Função Raiz k -ésima Núcleo-Conformação

Equação constitutiva da função raiz k -ésima núcleo-conformação dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}) &= (\boldsymbol{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\boldsymbol{\Omega}) + 2\mathbb{B} + \frac{1}{Wi}\mathbb{H}, \\ \frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}\mathbb{K}) &= \boldsymbol{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{k}\mathbf{B}\mathbb{K} + \frac{1}{kW_i}(\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K})[\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbb{K}^k - \mathbf{I})]. \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

Tem-se

$$\mathbb{B} = \frac{1}{k}\mathbf{B}\mathbb{K} = \frac{1}{k} \begin{bmatrix} B_{11}\mathbb{K}_{11} + B_{12}\mathbb{K}_{12} & B_{11}\mathbb{K}_{12} + B_{12}\mathbb{K}_{22} \\ B_{12}\mathbb{K}_{11} + B_{22}\mathbb{K}_{12} & B_{12}\mathbb{K}_{12} + B_{22}\mathbb{K}_{22} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.63})$$

Portanto,

$$\mathbb{B}_{11} = \frac{1}{k}(B_{11}\mathbb{K}_{11} + B_{12}\mathbb{K}_{12}), \quad (\text{B.64})$$

$$\mathbb{B}_{12} = \frac{1}{k}(B_{11}\mathbb{K}_{12} + B_{12}\mathbb{K}_{22}), \quad (\text{B.65})$$

$$\mathbb{B}_{22} = \frac{1}{k}(B_{12}\mathbb{K}_{12} + B_{22}\mathbb{K}_{22}). \quad (\text{B.66})$$

Enquanto isso,

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \left(\frac{1}{k}\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K} \right) [\mathbf{I} + \alpha_G(\mathbb{K}^k - \mathbf{I})] = \frac{1}{k} [\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K} + \alpha_G(\mathbb{K} - \mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K}^{k+1} + \mathbb{K})] = \\ &= \frac{1}{k} \left[(2\alpha_G - 1) \begin{bmatrix} \mathbb{K}_{11} & \mathbb{K}_{12} \\ \mathbb{K}_{12} & \mathbb{K}_{22} \end{bmatrix} + (1 - \alpha_G) \begin{bmatrix} (\mathbb{K}^{1-k})_{11} & (\mathbb{K}^{1-k})_{12} \\ (\mathbb{K}^{1-k})_{12} & (\mathbb{K}^{1-k})_{22} \end{bmatrix} - \alpha_G \begin{bmatrix} (\mathbb{K}^{1+k})_{11} & (\mathbb{K}^{1+k})_{12} \\ (\mathbb{K}^{1+k})_{12} & (\mathbb{K}^{1+k})_{22} \end{bmatrix} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

Dessa forma,

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{k} [(2\alpha_G - 1)\mathbb{K}_{11} + (1 - \alpha_G)(\mathbb{K}^{1-k})_{11} - \alpha_G(\mathbb{K}^{1+k})_{11}], \quad (\text{B.68})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{k} [(2\alpha_G - 1)\mathbb{K}_{12} + (1 - \alpha_G)(\mathbb{K}^{1-k})_{12} - \alpha_G(\mathbb{K}^{1+k})_{12}], \quad (\text{B.69})$$

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{1}{k} [(2\alpha_G - 1)\mathbb{K}_{22} + (1 - \alpha_G)(\mathbb{K}^{1-k})_{22} - \alpha_G(\mathbb{K}^{1+k})_{22}]. \quad (\text{B.70})$$

Diante do exposto, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial y} &= 2 \left[\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} + \frac{1}{k}(B_{11}\mathbb{K}_{11} + B_{12}\mathbb{K}_{12}) \right] + \\ &+ \frac{1}{kW_i} [(2\alpha_G - 1)\mathbb{K}_{11} + (1 - \alpha_G)(\mathbb{K}^{1-k})_{11} - \alpha_G(\mathbb{K}^{1+k})_{11}], \end{aligned} \quad (\text{B.71})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial y} &= \Omega_{12}(\mathbb{K}_{22} - \mathbb{K}_{11}) + \frac{2}{k}(B_{11}\mathbb{K}_{12} + B_{12}\mathbb{K}_{22}) + \\ &+ \frac{1}{kW_i} [(2\alpha_G - 1)\mathbb{K}_{12} + (1 - \alpha_G)(\mathbb{K}^{1-k})_{12} - \alpha_G(\mathbb{K}^{1+k})_{12}], \end{aligned} \quad (\text{B.72})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial y} &= -2 \left[\Omega_{12}\mathbb{K}_{12} - \frac{1}{k}(B_{12}\mathbb{K}_{12} + B_{22}\mathbb{K}_{22}) \right] + \\ &+ \frac{1}{kW_i} [(2\alpha_G - 1)\mathbb{K}_{22} + (1 - \alpha_G)(\mathbb{K}^{1-k})_{22} - \alpha_G(\mathbb{K}^{1+k})_{22}]. \end{aligned} \quad (\text{B.73})$$