

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

# **Decomposições matriciais para escoamentos viscoelásticos incompressíveis**

Irineu Lopes Palhares Junior

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

Presidente Prudente, Fevereiro de 2014

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA**

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

# **Decomposições matriciais para escoamentos viscoelásticos incompressíveis**


Irineu Lopes Palhares Junior

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

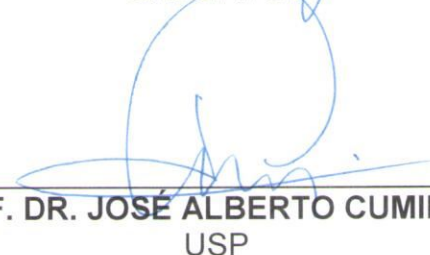
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, Fevereiro de 2014

**BANCA EXAMINADORA**

  
\_\_\_\_\_  
**PROF. DR. CÁSSIO MACHIAVELI OISHI**  
ORIENTADOR

  
\_\_\_\_\_  
**PROF. DR. MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR**  
UNESP/FCT

  
\_\_\_\_\_  
**PROF. DR. JOSÉ ALBERTO CUMINATO**  
USP

  
\_\_\_\_\_  
**IRINEU LOPES PALHARES JUNIOR**

Presidente Prudente (SP), 26 de fevereiro de 2014.

Resultado: Aprovado

## FICHA CATALOGRÁFICA

P188d Palhares Junior, Irineu Lopes.  
Decomposições matriciais para escoamentos viscoelásticos  
incompressíveis / Irineu Lopes Palhares Junior. - Presidente Prudente : [s.n],  
2014  
123 f.

Orientador: Cassio Machiaveli Oishi  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de  
Ciências e Tecnologia  
Inclui bibliografia

1. Instabilidades Numéricas. 2. Problema de Alto Número de  
Weissenberg. 3. Escoamentos Viscoelásticos. I. Oishi, Cassio Machiaveli. II.  
Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências e Tecnologia. III.  
Título.

*Aos meus pais, Cleusa e Irineu,  
dedico!*

---

# Agradecimentos

Primeiramente, agradeço ao meu Deus Jeová pela vida e alegria durante todo este tempo.

À minha família, aos meus pais Irineu Lopes Palhares e Cleusa Fernandes Basílio Palhares (Mamis), a minha irmã Renata Fernandes Palhares (Mano), por todo apoio, incentivo, paciência e pelo amor incondicional, sem o qual eu não teria chegado até aqui.

Ao Prof.Dr. Cassio Machiaveli Oishi pela orientação, paciência, incentivo e contribuição para meu crescimento científico e pessoal.

Aos professores do DMC-FCT/UNESP e funcionários pelos ensinamentos dentro e fora de sala de aula. Em especial à professora Gilcilene Sanchez e o Fernando Pacanelli pela paciência e orientação, que foram fundamentais para a conclusão deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Alexandre Afonso, responsável por um dos artigos mais interessantes deste projeto, pelas sugestões e contribuições durante o desenvolvimento do projeto.

Aos meus queridos amigos Selma (Mamis), Helosinha e Juliano Meireles (Papão) pelo companheirismo e amizade.

Aos amigos da república Curtiço: Lusca, Elisângela, Max, Delta, Fera, Alan, Henrico, Alisson, Eliel, Apollo e Luiz Caires, que me acompanharam desde o início.

Os amigos do curso de mestrado do PosMAC: Clóvis (Choquinho), Juliano (Brow), Pedro (Carneiro), Reginaldo (Merejolli), Alisson, Daiane (Dai), Gabriela, Hemily (Gentile), José (Animale), Luciene, Mariane (Crânio), Marília (Maria), Patrícia (Penny), Rafael (Pãonetone), Renata, Wesley (Varzea), Adriano (pãoneis), Bruno, Caroline (Carol), Crislaine, Gustavo (Pancada), Heloísa, Jonas (Jym), Junior, Rafael (Casta). Agradeço a todos pelas brincadeiras, conhecimentos que compartilharam todos esses dias.

Aos funcionários da Seção de Pós-Graduação, em especial à Erynát, Ivonete e Cintia pela atenção e apoio oferecido no decorrer do curso de mestrado.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

A todos que direta ou indiretamente me ajudaram na elaboração deste trabalho.

*"Assim disse Jeová, teu Resgatador,  
o Santo de Israel: 'Eu, Jeová, sou  
teu Deus, Aquele que te ensina a tirar  
proveito, Aquele que te faz pisar no  
caminho em que deves andar'".*

***Isaías 48:17.***

---

# Resumo

Uma dificuldade na solução de escoamentos viscoelásticos complexos ocorre quando instabilidades numéricas surgem na simulação, resultantes de um colapso ("breakdown") dos esquemas numéricos aplicados na solução da equação constitutiva para fluidos não-newtonianos. Essa dificuldade é conhecida na literatura como o *Problema de Alto Número de Weissenberg* ou "High Weissenberg Number Problem" (HWNP). Nesta dissertação, investigamos decomposições matriciais aplicadas ao tensor conformação  $\mathbf{A}$  empregues como métodos de estabilização na simulação do HWNP.

Na primeira parte deste trabalho, com o propósito de compreender a teoria usada para construir as abordagens de estabilização, efetuamos um amplo estudo sobre decomposições matriciais, objetivando investigar três métodos diferentes: log-conformação, decomposição do tipo raiz quadrada e núcleo-conformação. Após isso, no contexto do método "Marker-and-Cell", empregamos discretizações por diferenças finitas juntamente com o método de projeção na implementação das decomposições matriciais, visando solucionar o HWNP. O código é verificado utilizando o problema de um escoamento bidimensional entre placas paralelas ("Poiseuille flow") para um fluido Oldroyd-B. Finalmente, os esquemas numéricos são testados, mediante a simulação de um escoamento viscoelástico em uma cavidade com tampa móvel, examinando as técnicas de estabilização em termos de estabilidade e precisão.

**Palavras-Chave:** Instabilidades numéricas, Problema de Alto Número de Weissenberg, Escoamentos viscoelásticos, Tensor conformação, Equações de Navier-Stokes, Diferenças finitas.



# Abstract

---

One difficulty in the solution of complex viscoelastic flows occurs when numerical instabilities arise in the simulation. The instabilities result in a breakdown of numerical schemes used for solving the constitutive equation for non-Newtonian fluids. This difficulty is known as the High Weissenberg Number Problem (HWNP). In this dissertation, we analyze matrix decompositions applied to the conformation tensor  $\mathbf{A}$  that are used as stabilization techniques in the simulation of HWNP.

In the first part of this work, in order to understand the theory used to construct the stabilization approaches, comprehensive studies have based on matrix decompositions been carried out. The goal is to investigate three different methods: the logarithm transformation, the symmetry factorization, and the generic kernel-conformation tensor transformation.

After this, in the context of the "Marker-and-Cell (MAC)" methodology, we employ a finite difference discretization together with the projection method to implement the matrix decompositions for solving the HWNP. The code is verified using the two-dimensional Poiseuille flow of an Oldroyd-B fluid. Finally, the numerical techniques are tested examining the stability and accuracy of the stabilization techniques in the simulation of the viscoelastic lid-driven cavity flow.

**Keywords:** Numerical instability, High Weissenberg Number Problem, Viscoelastic flow, conformation tensor, Navier-Stokes equations, Finite-differences.

# Lista de Figuras

1	Escoamento em uma cavidade. Fonte: Piller e Nobile [54] . . . . .	2
2	Escoamento em uma contração de razão 4:1. Fonte: Wachs et al. [68] . . . .	2
3	Escoamento em torno de um cilindro confinado. Fonte: Dyke [23] . . . . .	2
4	Escoamento entre placas paralelas. Fonte: [45] . . . . .	58
5	Perfil da velocidade $u$ para $Wi = 3$ , malha $M_2$ e tempo $t = 40$ com os métodos Standard e Kernel-linear. . . . .	62
6	Perfil da velocidade $u$ para $Wi = 3$ , malha $M_2$ e tempo $t = 50$ com os métodos Ln, Square-root e Kernel-root, juntamente com a solução analítica. . . . .	62
7	Valor do $det_{min}(\mathbf{A})$ com relação ao tempo $t$ para os métodos Standard e Kernel-linear com $Wi = 3.0$ e malha $M_2$ . . . . .	64
8	Valor do $det_{min}(\mathbf{A})$ com relação ao tempo $t$ para o método Square-root com $Wi = 2.0$ e malha $M_2$ . . . . .	65
9	Valor do $det_{min}(\mathbf{A})$ com relação ao tempo $t$ para os métodos Ln e Kernel-root com $Wi = 3$ e malha $M_2$ . . . . .	66
10	Escoamento em uma cavidade, no tempo $t = 20$ , usando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$ , $Wi = 0.1$ e $\beta = 0.5$ : a) velocidade $u$ sobre $(0.5, y)$ e b) velocidade $v$ sobre $(x, 0.75)$ . A malha usada foi $M_3$ . . . . .	71
11	Escoamento em uma cavidade, no tempo $t = 20$ , usando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$ , $Wi = 0.5$ e $\beta = 0.5$ : a) velocidade $u$ sobre $(0.5, y)$ e b) velocidade $v$ sobre $(x, 0.75)$ . A malha usada foi $M_3$ . . . . .	71
12	Escoamento em uma cavidade, no tempo $t = 40$ , usando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$ , $Wi = 0.5$ e $\beta = 0.5$ : a) componente $\tau_{11}$ sobre $(x, 1)$ e b) componente $\tau_{11}$ sobre $(0.5, y)$ . A malha usada foi $M_3$ . . . . .	72
13	Energia cinética com relação ao tempo para $Wi = 2$ . . . . .	76
14	Energia cinética com relação ao tempo para $Wi = 5$ . . . . .	80
15	Escoamento em uma cavidade, no tempo $t = 40$ , usando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$ , $Wi = 1.0$ e $\beta = 0.5$ : a) velocidade $u$ sobre $(0.5, y)$ e b) velocidade $v$ sobre $(x, 0.75)$ . A malha usada foi $M_3$ . . . . .	81

16	Escoamento em uma cavidade, no tempo $t = 40$ , usando o modelo Oldroyd-B com $Re = 0.01$ , $Wi = 2$ e $\beta = 0.5$ : a) velocidade $u$ sobre $(0.5, y)$ e b) velocidade $v$ sobre $(x, 0.75)$ . A malha usada foi $M_3$ . . . . .	82
17	Representação da célula computacional deslocada em um ponto genérico $(i, j)$ , em $t = t_n$ : as componentes da velocidade são definidas nas faces da célula e as outras propriedades no centro da célula. . . . .	101

# Lista de Tabelas

5.1	Erros e taxa de convergência espacial para a componente $u$ da velocidade e a componente $\tau_{11}$ do tensor polimerico no tempo $t = 50$ e $Wi = 0.1$ . . . .	59
5.2	Erros e taxa de convergência espacial para a componente $u$ da velocidade e a componente $\tau_{11}$ do tensor polimerico no tempo $t = 50$ e $Wi = 1$ . . . .	60
5.3	Erros e taxa de convergência espacial para a componente $u$ da velocidade e a componente $\tau_{11}$ do tensor polimerico no tempo $t = 50$ e $Wi = 2$ . . . .	61
5.4	Erros e taxa de convergência espacial para a componente $u$ da velocidade e a componente $\tau_{11}$ do tensor polimerico no tempo $t = 50$ e $Wi = 3$ . . . .	61
5.5	Valor do $det_{min}(\mathbf{A})$ para $Wi = 0.1, 1, 2$ e $3$ com os métodos Standard, Ln, Square-root, Kernel-linear e Kernel-root. A malha usada foi $M_1$ . . . . .	63
5.6	Valor do $det_{min}(\mathbf{A})$ para $Wi = 0.1, 1, 2$ e $3$ com os métodos Standard, Ln, Square-root, Kernel-linear e Kernel-root. A malha usada foi $M_2$ . . . . .	63
5.7	Tempo de CPU (min: seg) para $Wi = 1$ e $t = 50$ . . . . .	67
5.8	Tempo de CPU (hor: min: seg) para $Wi = 3$ e $t = 50$ . . . . .	67
5.9	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 80$ e $Wi = 0.1$ . . . . .	70
5.10	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 80$ e $Wi = 0.5$ . . . . .	70
5.11	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 1$ com a malha $M_1$ . .	73
5.12	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 1$ com a malha $M_2$ . .	74
5.13	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 1$ com a malha $M_3$ . .	74
5.14	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 2$ com a malha $M_1$ . .	74
5.15	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 2$ com a malha $M_2$ . .	75
5.16	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 2$ com a malha $M_3$ . .	75
5.17	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 3$ com a malha $M_1$ . .	77
5.18	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 3$ com a malha $M_2$ . .	77
5.19	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 3$ com a malha $M_3$ . .	77
5.20	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 4$ com a malha $M_1$ . .	78
5.21	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 4$ com a malha $M_2$ . .	78
5.22	Valor de $det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 4$ com a malha $M_3$ . .	78

5.23	Valor de $\det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 5$ com a malha $M_1$ .	79
5.24	Valor de $\det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 5$ para $Wi = 5$ com a malha $M_2$ .	79
5.25	Valor de $\det_{min}(\mathbf{A})$ em diferentes tempos para $Wi = 5$ para $Wi = 5$ com a malha $M_3$ .	79
5.26	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 80$ e $Wi = 1$ .	81
5.27	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 80$ e $Wi = 2$ .	82
5.28	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 14$ e $Wi = 3$ .	83
5.29	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 12$ e $Wi = 4$ .	83
5.30	Erro e taxa de convergência para a componente $u$ da velocidade e componente $\tau_{11}$ da contribuição não-newtoniana para $t = 11$ e $Wi = 5$ .	83
5.31	Tempo de CPU (hor: min: seg) para $Wi = 1$ e $t = 40$ .	84
5.32	Tempo de CPU (hor: min: seg) para $Wi = 2$ e $t = 40$ .	84
5.33	Desempenho dos métodos para o problema da cavidade com o modelo Oldroyd-B.	85

---

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modelagem Matemática</b>	<b>11</b>
2.1	Equações Governantes . . . . .	11
2.2	Condições auxiliares . . . . .	15
2.2.1	Condições iniciais . . . . .	15
2.2.2	Condições de contorno . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Decomposições Matriciais</b>	<b>19</b>
3.1	Formulação Log-Conformação . . . . .	19
3.1.1	Construção do método . . . . .	20
3.2	Decomposição do tipo raiz quadrada . . . . .	26
3.2.1	Construção do método . . . . .	27
3.3	Formulação núcleo-conformação . . . . .	33
3.3.1	Construção do método . . . . .	33
3.3.2	Aplicações sobre a formulação núcleo-conformação . . . . .	39
3.4	Equivalência e diferenças entre decomposições . . . . .	46
3.4.1	O método padrão e a transformação linear deslocada núcleo-conformação . . . . .	46
3.4.2	Os métodos log-conformação e $\log_d$ núcleo-conformação . . . . .	48
3.4.3	Os métodos decomposição do tipo raiz quadrada e raiz $k$ -ésima núcleo-conformação . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Método Numérico</b>	<b>51</b>
4.1	Método de Projeção: versão incremental . . . . .	51
4.2	Ciclo computacional . . . . .	54
<b>5</b>	<b>Resultados numéricos</b>	<b>57</b>
5.1	Verificação do código: simulação em um canal totalmente desenvolvido . . . . .	57
5.2	O problema da cavidade . . . . .	68
5.2.1	Baixos valores de Weissenberg: precisão dos métodos . . . . .	69
5.2.2	Altos valores de Weissenberg . . . . .	72

<i>SUMÁRIO</i>	1
5.2.3 Discussão dos resultados . . . . .	84
<b>6 Considerações finais</b>	<b>86</b>
<b>A Equações em coordenadas cartesianas bidimensionais</b>	<b>87</b>
A.1 Equações governantes . . . . .	87
A.2 Decomposições Matriciais . . . . .	89
A.2.1 Log-conformação . . . . .	89
A.2.2 Decomposição do tipo raiz quadrada . . . . .	92
A.2.3 Núcleo-conformação . . . . .	94
<b>B Discretização espacial</b>	<b>100</b>
B.0.4 Tratamento da contribuição não-newtoniana em células <b>[F]</b> . . . . .	102
B.0.5 Tratamento da contribuição não-newtoniana em células <b>[B]</b> . . . . .	107
B.0.6 Tratamento da contribuição não-newtoniana em células <b>[I]</b> e <b>[O]</b> . . . . .	114
<b>C Cálculo dos tensores na tampa da cavidade</b>	<b>116</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>118</b>

# Introdução

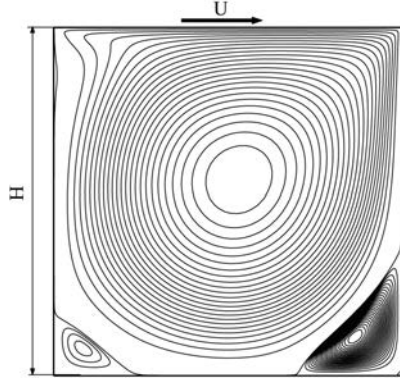
O estudo de escoamentos de fluidos viscoelásticos tem grande destaque em reologia computacional, uma vez que em aplicações industriais muitos materiais, no processo de fabricação, se comportam como fluidos viscoelásticos. Por exemplo, podemos citar produtos para a indústria automobilística, a maioria das embalagens para produtos alimentícios, indústria aeroespacial, produtos de beleza, tintas, entre muitos outros. Assim, o estudo destes escoamentos tem despertado o interesse de muitos pesquisadores.

Os fluidos viscoelásticos, grosso modo, são fluidos complexos que possuem memória, apresentando propriedades viscosas e elásticas ao mesmo tempo. Desta forma, as equações de Navier-Stokes são insuficientes para descrever o escoamento por completo, sendo necessário o acréscimo de uma equação constitutiva para o tensor não-newtoniano  $\boldsymbol{\tau}$ , que representa o comportamento reológico do material. Há na literatura uma vasta quantidade de modelos constitutivos, dentre eles citamos: Phan-Thien Tanner (PTT), Oldroyd-B, FENE-model, POM-POM, Upper Convected Maxwell (UCM) e Giesekus [8, 43].

Apesar do impetuoso esforço e notável progresso na simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos, problemas de instabilidade numérica vem surgindo juntamente com estes avanços. Em especial, uma dificuldade conhecida como *Problema de Alto Número de Weissenberg* ou "High Weissenberg Number Problem" (HWNP), se apresenta como um grande obstáculo na reologia computacional desde o início dos anos 1970 [50]. Este é um fenômeno numérico que acarreta em instabilidades e/ou na não convergência da solução, mesmo com diferentes formulações ou formas de discretização (diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos, entre outros). O termo HWNP, refere-se à observação experimental de que todos os métodos numéricos entram em colapso ("breakdown") quando o número de Weissenberg ( $Wi$ ) - um parâmetro adimensional usado no estudo de escoamentos viscoelásticos, definido como o produto entre o tempo de relaxação do fluido ( $\lambda$ ) e a escala de tempo do escoamento ( $\frac{U}{H}$ ) - excede um determinado valor crítico ( $Wi_{crit}$ ), que depende de vários fatores, por exemplo, a geometria do problema, equação constitutiva,

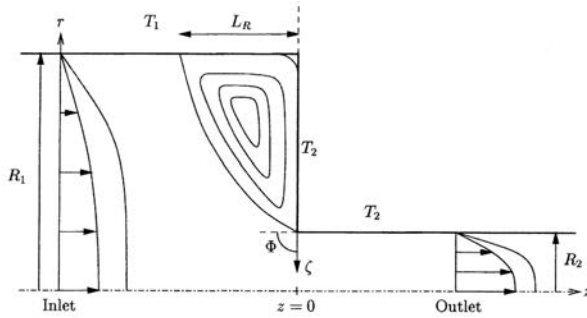


dados iniciais, método numérico e a malha computacional [39]. A observação de que há uma variação no valor de  $Wi_{crit}$  com a mudança da geometria empregue, pode ser constatada por meio das Figuras 1, 2 e 3, na qual temos diferentes valores de  $Wi_{crit}$  para um mesmo tipo de fluido, Oldroyd-B, mas com diferentes geometrias (cavidade, contração 4:1 e cilindro, respectivamente).



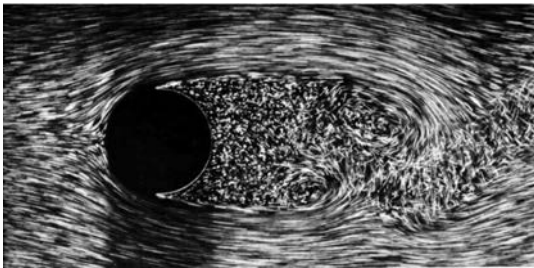
Literatura	$Wi_{crit}$
Fattal e Kupferman [27]	$< 0.5$
Chen et al. [14]	$= 0.75$

Figura 1: Escoamento em uma cavidade. Fonte: Piller e Nobile [54]



Literatura	$Wi_{crit}$
Walters e Webster [69]	$\simeq 2.8$
Chen et al. [14]	$1.5$

Figura 2: Escoamento em uma contração de razão 4:1. Fonte: Wachs et al. [68]



Literatura	$Wi_{crit}$
Fan et al. [25]	$\simeq 0.9$
Oliveira e Miranda [49]	$= 1.0$

Figura 3: Escoamento em torno de um cilindro confinado. Fonte: Dyke [23]

Já por muito tempo pesquisadores vem sofrendo fracassos em fornecer resultados numéricos para além do valor crítico do número de Weissenberg, chamado por Keunings [38] de *problema notável* ("outstanding problem"). Desta forma, abordagens alternativas foram sendo desenvolvidas com o decorrer do tempo [62]. Uma primeira ideia relevante, foi o uso de um sistema de equações acopladas, onde a pressão, velocidade e tensor não-newtoniano são resolvidos simultaneamente usando-se a eliminação gaussiana, na qual o

sistema linear original é transformado num sistema triangular equivalente. Esta, embora não tenha resolvido o HWNP, desempenhou um papel importante, uma vez que conseguiu estender o valor crítico do número de Weissenberg para além do que se havia alcançado até então. Outra ideia nesse sentido, proposta por Sureshkumar e Beris [60], que há muito tempo vem sendo usada, é a adição de uma tensão difusiva artificial à equação constitutiva visando amortecer as instabilidades. Apesar do sucesso desta abordagem (ver em [7, 24, 12, 13, 35, 61, 44, 21]), foi questionado se este termo não estaria mascarando ou modificando a física do problema, ou seja, fornecendo uma solução sem sentido físico [65]. Outro método que faz uso de um termo difusivo é o método conhecido como "both sides diffusion" (BSD), entretanto, o termo difusivo não é aplicado à equação constitutiva, que permanece inalterada, mas à equação de quantidade de movimento. Nesta técnica o termo difusivo é adicionado aos dois membros da equação de quantidade de movimento, enquanto um deles é usado de maneira explícita o outro é empregue implicitamente [55, 70].

Um tratamento que vem ganhando destaque no meio acadêmico, é a aplicação de decomposições matriciais no tensor conformação  $\mathbf{A}$ , reformulando sua equação constitutiva. A propriedade fundamental deste tensor é de ser simétrico e definido positivo (SPD) [31, 32]. A perda desta propriedade, resultante do acúmulo de erros numéricos, é tomada como a principal responsável pelo surgimento de instabilidades na simulação [4, 22, 26, 27, 65, 66]. Contudo, do ponto-de-vista dos pesquisadores Afonso et al. [1], a perda desta propriedade é imputada como uma consequência do HWNP. Seja como for, este atributo especial, a positividade de  $\mathbf{A}$ , é o que possibilita as diversas decomposições sobre este.

Dois métodos que investiram no uso de decomposições matriciais aplicadas ao tensor conformação  $\mathbf{A}$ , decomposição em autovalores e autovetores, chamada de decomposição espectral ("continuous eigendecomposition"), e decomposição de Cholesky, foram apresentadas por Vaithianathan e Collins [65]. Neste trabalho, os autores demonstram como construir equações de evolução para os autovalores e autovetores de  $\mathbf{A}$ , além de construírem uma equação evolutiva para a matriz triangular inferior, gerada mediante a decomposição de Cholesky. Segundo os autores, estas duas decomposições garantiram a positividade do tensor conformação, e consequentemente a estabilização da solução. Uma aplicação recente da técnica com a decomposição espectral pode ser vista em [66]. Originalmente desenvolvido para o modelo FENE-P [65], foi ampliado em [66] para os modelos Giesekus e Oldroyd-B.

Uma ideia que se destacou com o uso das decomposições matriciais, deve-se aos trabalhos de Fattal e Kupferman [26, 27], que propuseram uma nova formulação para a equação constitutiva do tensor conformação com o uso da matriz logarítmica deste tensor. Em suma, este método reformula a equação constitutiva do tensor conformação  $\mathbf{A}$ , mediante uma decomposição matricial aplicada ao gradiente da velocidade, e faz uma mudança de variável, substituindo o tensor conformação pela sua matriz logarítmica. Esta formulação

ficou conhecida como matriz logarítmica ou log-conformação ("log-conformation"). Este método, embora não tenha solucionado completamente os problemas do HWNP, foi significativo, uma vez que contribuiu para a estabilidade dos esquemas numéricos para altos valores de  $Wi$  sem a adição empírica de termos difusivos, ou seja, sem alterar a física por trás do problema original. Após a publicação da formulação log-conformação de Fattal e Kupferman, diversos pesquisadores empregaram esta técnica para escoamentos de fluidos viscoelásticos em diferentes formas de discretização, por exemplo, Fattal e Kupferman [26, 27] e Tomé et al. [64] aplicaram ao método de diferenças finitas, Hulsen et al. [33], Kwon [40], Coronado et al. [18], Kane et al. [37], Ilincă et al. [36] e Damanik et al. [19] usaram o método de elementos finitos, e Afonso et al. [1, 2] aplicaram ao método de volumes finitos. Em todas estas situações houve um aumento na estabilidade dos métodos. Uma formulação mais simples da técnica log-conformação foi proposta por Coronado et al. [18], no contexto de elementos finitos, que pode ser aplicada a todas as equações governantes (continuidade, quantidade de movimento e equação constitutiva) de maneira acoplada usando o método de Newton. Posteriormente, Kane et al. [37] realizaram um estudo comparativo entre a proposta original do log-conformação de Fattal e Kupferman [26, 27], a formulação empreendida por Coronado et al. [18] e outras duas variações desta última. Mais recentemente, Damanik et al. [19] usaram a formulação log-conformação aplicada ao método de elementos finitos monolítico, este calcula as variáveis velocidade, pressão e o logaritmo do tensor conformação de maneira totalmente acoplada. O sistema não-linear gerado por este acoplamento também é resolvido pelo método de Newton.

Outra técnica, proposta por Balci et al. [4], sugere uma nova formulação baseada na decomposição matricial do tipo raiz quadrada do tensor conformação, que ficou conhecida como representação por raiz quadrada-conformação "square-root-conformation representation" (SRCR). Esta formulação, segundo os autores, resultou em vantagens em termos de estabilidade, bem como, em precisão. Ainda, outra técnica com o uso do tensor deformação foi proposta por Lozinski e Owens [41]. Mais recentemente, Afonso et al. [2], apresentaram uma formulação, também vantajosa em termos de precisão e estabilidade, denominada núcleo-conformação ("Kernel-conformation"), a qual generaliza as formulações de Fattal e Kupferman [27, 26] e de Balci et al. [4], isto é, as formulações log-conformação e decomposição do tipo raiz quadrada são casos particulares desta. Ademais, este método admite o uso de qualquer transformação ao tensor conformação  $\mathbf{A}$  que seja contínua, inversível e diferenciável.

O preciso mecanismo responsável pelo HWNP ainda é algo desconhecido ou, como mencionado por alguns autores ([26, 27, 33]), dispõe de alguns mistérios. Entretanto, muita compreensão sobre parte da origem das instabilidades do HWNP foi esclarecida pelos trabalhos de Fattal e Kupferman [26, 27]. Muitos modelos constitutivos para a contribuição não-newtoniana apresentam em sua composição a derivada convectiva superior

de Maxwell "Upper-Convected Maxwell" (UCM), dada por

$$\frac{\nabla}{\tau} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \tau) - (\nabla \mathbf{u} \tau + \tau \nabla \mathbf{u}^T), \quad (1.1)$$

onde  $\mathbf{u}$  é o campo de velocidade e  $\tau$  é a contribuição não-newtoniana. Os modelos com esta característica sofrem em razão de uma compensação inadequada entre os termos  $\nabla \cdot (\mathbf{u} \tau)$  (convecção) e  $\nabla \mathbf{u} \tau + \tau \nabla \mathbf{u}^T$  (deformação) quando tomamos um valor elevado para  $Wi$ . Isto ocorre porque a contribuição do termo fonte, que envolve o número de Weissenberg, é reduzida com o aumento de  $Wi$ , transferindo todo o encargo em equilibrar o valor gerado pela deformação para o termo convectivo, acarretando em instabilidades e no crescimento ilimitado ("blowup") da contribuição não-newtoniana. Outra maneira de expor esta situação é através do polinômio interpolador. Este polinômio, usado na aproximação da equação diferencial, como, o método de diferenças finitas que faz uso do polinômio de Taylor, não consegue representar corretamente o perfil exponencial da solução, gerado pela deformação, estimulando o surgimento do HWNP. Estes problemas são ainda mais acentuados em simulações que envolvem geometrias complexas, onde há a presença de pontos de estagnação (ou pontos singulares), onde o crescimento exponencial das tensões normais são mais intensos [59].

Fattal e Kupferman elucidam estas observações feitas acima por meio de uma equação escalar de advecção, que chamaremos de equação teste ("toy model"). O uso desta equação teste, que representa a equação constitutiva do tensor conformação, justifica-se pois as instabilidades presentes na solução de um sistema de equações para escoamentos viscoelásticos, equações de Navier-Stokes juntamente com a equação constitutiva, persistem mesmo quando desacoplamos as equações de conservação do momento e a equação constitutiva, o que nos permite usar a equação teste de maneira isolada. Assim, o surgimento das instabilidades pode ser estudado considerando-se uma configuração mais simples do modelo constitutivo, onde a velocidade é mantida fixa. Estas simplificações nos conduzem à seguinte equação de advecção linear em uma dimensão com termo fonte para a variável  $\phi = \phi(x, t)$ , com  $x \in [0, 1]$ ,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a(x) \frac{\partial \phi}{\partial x} - b(x) \phi = -\frac{1}{Wi} \phi, \quad (1.2)$$

com  $a(x), b(x) > 0$ , condição de contorno  $\phi(0, t) = 1$  e condição inicial  $\phi(x, 0) = 1$ . Relacionando esta equação teste com a equação constitutiva, as funções  $a(x)$  e  $b(x)$  representam a velocidade  $\mathbf{u}(x, t)$  e a taxa de deformação  $\nabla \mathbf{u}$ , respectivamente.

A solução exata da equação teste (1.2) para o caso estacionário é dada por

$$\phi = \exp \left( \int_0^x \left( \frac{b(x') - Wi^{-1}}{a(x')} \right) dx' \right). \quad (1.3)$$

Seguindo a mesma estratégia apresentada em [26], discretizamos a equação (1.2) pelos métodos de Euler explícito (derivada temporal) e "Upwind" de primeira ordem (termo convectivo). Como o termo  $a(x)$  convecta  $\phi$  para direita, isto é,  $a(x) > 0, \forall x \in [0, 1]$ , discretizamos a derivada espacial de  $\phi$  por uma diferença regressiva. Assim, a equação de diferenças fica

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + a_i \left( \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} \right) - b_i \phi_i^n = -\frac{1}{Wi} \phi_i^n, \quad (1.4)$$

ou ainda

$$\phi_i^{n+1} = \left( 1 - \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} + \Delta t \left( b_i - \frac{1}{Wi} \right) \right) \phi_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} a_i \phi_{i-1}^n, \quad (1.5)$$

onde  $a_i = a(x_i)$  e  $b_i = b(x_i)$ , com  $i \in \mathbb{Z}$  (conjunto dos números inteiros).

Afim de garantirmos a estabilidade da equação (1.5), precisamos impor que os coeficientes de  $\phi_i^n$  e  $\phi_{i-1}^n$  sejam menores ou iguais à 1, ou seja,

$$\frac{a_i \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (1.6)$$

e

$$1 - \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} + \Delta t \left( b_i - \frac{1}{Wi} \right) \leq 1. \quad (1.7)$$

Observamos que a primeira condição (1.6) é automaticamente satisfeita com a hipótese de  $a(x) > 0$ , juntamente com a condição CFL. A segunda condição é satisfeita pela imposição

$$\left( b_i - \frac{1}{Wi} \right) \leq 0, \quad (1.8)$$

que implica

$$Wi \leq \frac{1}{b_i}. \quad (1.9)$$

Ainda de (1.7), derivamos uma restrição sobre o passo espacial  $\Delta x$

$$\Delta x \leq \frac{a_i}{b_i - Wi^{-1}}. \quad (1.10)$$

Note que esta é uma restrição sobre o passo na malha espacial (que também é uma restrição ao número de Weissenberg), não é a condição CFL que é uma restrição sobre o passo no tempo. Quanto maior o valor de  $Wi$  em (1.10) menor deverá ser o passo espacial. Esta condição se torna muito restritiva. Este fato nos conduz ao princípio do HWNP, que é limitar o tamanho de  $Wi$ .

A fim de ilustrar, teoricamente, a eficiência das decomposições matriciais seguiremos as ideias de Fattal e Kupferman [26, 27], Hulsen et al. [33] e Afonso et al. [1]. Definimos a função  $\theta(x)$  como representante das decomposições matriciais, e esta deverá satisfazer três requisitos: contínua, diferenciável e inversível. A seguir, apresentamos os efeitos que

as decomposições baseadas na transformação logarítmica em qualquer base e raiz  $k$ -ésima, com  $k \in \mathbb{Z}$ , ocasionam na equação constitutiva.

- Função  $\log_d()$ , ou seja:

$$\theta = \log_d(\phi), \quad (1.11)$$

onde  $d > 0$  e  $d \neq 1$ . Assim, pela aplicação inversa, segue que

$$\phi = d^\theta. \quad (1.12)$$

Substituindo a relação (1.12) em (1.2), segue que

$$\frac{\partial d^\theta}{\partial t} + a(x) \frac{\partial d^\theta}{\partial x} - b(x) d^\theta = -\frac{1}{W_i} d^\theta. \quad (1.13)$$

Aplicando em (1.13) a regra da cadeia e multiplicando por  $(d^\theta \ln(d))^{-1}$ , resulta na seguinte equação de advecção para  $\theta$ :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + a(x) \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{b(x) - W_i^{-1}}{\ln(d)}, \quad (1.14)$$

com condição de contorno  $\theta(0, t) = 0$  e condição inicial  $\theta(x, 0) = 0$  (pois  $\log_d(\phi(0, t) = 1) = 0$  e  $\log_d(\phi(x, 0) = 1) = 0$ ). Novamente, discretizando pelo método de Euler explícito e Upwind, resulta em

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} + a_i \left( \frac{\theta_i^n - \theta_{i-1}^n}{\Delta x} \right) = \frac{b_i - W_i^{-1}}{\ln(d)}, \quad (1.15)$$

ou ainda,

$$\theta_i^{n+1} = \left( 1 - \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} \right) \theta_i^n + \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} \theta_{i-1}^n + \Delta t \left( \frac{b_i - W_i^{-1}}{\ln(d)} \right). \quad (1.16)$$

Impondo a restrição de estabilidade sobre esta nova equação (1.16), temos

$$1 - \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (1.17)$$

que implica

$$\frac{a_i \Delta t}{\Delta x} \geq 0. \quad (1.18)$$

O que é sempre verdade, pois  $a_i > 0$ ,  $\forall i \in \mathbb{Z}$ . Desta forma, eliminamos a restrição sobre o passo espacial  $\Delta x$ , e consequentemente sobre o número de Weissenberg.

Consideremos os coeficientes da equação (1.2) como sendo constantes, isto é,  $a(x) = a$  e  $b(x) = b$ . De modo que, a solução exata para a variável  $\theta$  é adquirida pela

aplicação da função  $\log_d()$  na solução de  $\phi$ , equação (1.3), isto é,

$$\theta = \left( \frac{b - Wi^{-1}}{a \ln(d)} \right) x, \forall x \in [0, 1]. \quad (1.19)$$

O que nos revela que o crescimento exponencial de  $\phi$  é linearizado pela função logarítmica conforme discutido em [2, 26].

- Função  $\sqrt[k]{\phantom{x}}$ , isto é:

$$\theta = \sqrt[k]{\phi}, \quad (1.20)$$

que implica

$$\phi = \theta^k \quad (1.21)$$

com  $k \in \mathbb{Z}$ . Substituindo a relação (1.21) em (1.2), temos que

$$\frac{\partial \theta^k}{\partial t} + a(x) \frac{\partial \theta^k}{\partial x} - b(x) \theta^k = -\frac{1}{Wi} \theta^k. \quad (1.22)$$

Aplicando a regra da cadeia nas derivadas e algumas manipulações algébricas em (1.22), obtemos

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + a(x) \frac{\partial \theta}{\partial x} = \left( \frac{b(x) - Wi^{-1}}{k} \right) \theta. \quad (1.23)$$

Semelhante ao que fizemos para a função logarítmica, discretizamos a equação (1.23) por Euler explícito e Upwind de primeira ordem, que resulta em

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} + a_i \left( \frac{\theta_i^n - \theta_{i-1}^n}{\Delta x} \right) = \left( \frac{b_i - Wi^{-1}}{k} \right) \theta_i^n, \quad (1.24)$$

ou ainda

$$\theta_i^{n+1} = \left( 1 - \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} + \Delta t \left( \frac{b_i - Wi^{-1}}{k} \right) \right) \theta_i^n + \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} \theta_{i-1}^n. \quad (1.25)$$

Aplicando a condição de estabilidade ao método, segue que

$$1 - \frac{a_i \Delta t}{\Delta x} + \Delta t \left( \frac{b_i - Wi^{-1}}{k} \right) \leq 1, \quad (1.26)$$

que implica

$$\Delta x \leq \frac{a_i k}{b_i - Wi^{-1}} \quad (1.27)$$

Observe que, embora não tenhamos conseguido eliminar a restrição sobre o passo temporal, que também restringe o valor de  $Wi$ , à medida que aumentamos o valor de  $k$  diminuimos a restrição sobre  $Wi$ .

Novamente, consideramos os coeficientes de (1.2) como sendo constantes, isto é,  $a(x) = a$  e  $b(x) = b$ . Assim, a solução, no estado estacionário, para  $\theta$  é

$$\theta = \sqrt[k]{\exp\left(\left(\frac{b - Wi^{-1}}{a}\right)x\right)}. \quad (1.28)$$

Como pode ser observado, a transformação raiz  $k$ -ésima não linearizou o crescimento exponencial, como aconteceu com a função logarítmica, mas somente o normalizou por um fator  $k$ .

Embora possa parecer que a formulação logarítmica tenha solucionado os problemas por eliminar a restrição sobre  $Wi$ , numericamente isto não é verdade, da mesma forma que para altos valores de  $k$  o método da raiz  $k$ -ésima não é a solução para os problemas. Muito pelo contrário, segundo estudos em [1], o método raiz  $k$ -ésima produz bons resultados para  $-16 \leq k \leq -2$ . O que teoricamente não faz sentido, pois desta forma o passo espacial estaria possivelmente restrito a um valor negativo. Uma mesma dificuldade ocorre com o valor da base da função logarítmica, no qual soluções estáveis só são obtidas para  $d < 10$  [1].

Desta forma, propomo-nos investigar, de maneira minuciosa, algumas das decomposições mencionadas no decorrer do texto, a saber os métodos log-conformação desenvolvido por Fattal e Kupferman [26, 27], decomposição do tipo raiz quadrada apresentado por Balci et al. [4] e núcleo-conformação proposto por Afonso et al. [2]. Recentemente Chen et al. [14] executaram algo semelhante ao que sugerimos fazer, um estudo comparativo entre métodos de estabilização. Entretanto, este fato não desconsidera as informações que aqui serão apresentadas, visto que diferentemente do exposto em [14], estamos interessados exclusivamente nos métodos que empregam decomposições matriciais ao tensor conformação. Ademais, além das técnicas log-conformação e decomposição do tipo raiz quadrada, apresentadas em [14], em adição, incluímos o método núcleo-conformação. Que é uma das técnicas mais atrativas, uma vez que esta tenta reproduzir outras técnicas desenvolvidas. Além disso, outra novidade, é o emprego do método de diferenças finitas para a solução das equações, enquanto em [14] as simulações são realizadas pelo método de volumes finitos.

O estudo aqui adotado envolve uma análise teórica das decomposições mencionadas, apresentando detalhes da construção dos métodos, como, explicação pormenorizada dos conceitos empregues, em quais situações essas técnicas são equivalentes e quais os trabalhos que inspiraram sua construção. Faremos um exame da propriedade SPD do tensor conformação  $\mathbf{A}$  em diferentes simulações. Finalmente, as técnicas serão comparadas, analisando as vantagens e desvantagens, estudando a ordem de precisão, e verificando as restrições de estabilidade de cada decomposição, que resume-se em determinar o valor crítico de  $Wi$  para cada uma delas em alguns problemas clássicos da literatura.



O trabalho está organizado da seguinte maneira: no Capítulo 2 apresentamos os principais conceitos no que diz respeito a escoamentos de fluidos viscoelásticos, seguido das condições auxiliares empregues nas simulações numéricas. No Capítulo 3 apresentamos as decomposições matriciais seleccionadas e um estudo de equivalência entre métodos. Posteriormente, apresentamos no Capítulo 4 a ideia central do método de projecção adotado. Na segunda parte deste trabalho, no Capítulo 5, apresentamos os resultados numéricos dos métodos de estabilização, em dois problemas diferentes. Por fim, no capítulo 6 fazemos alguns comentários sobre a relevância deste estudo e os novos rumos da pesquisa.

# Modelagem Matemática

## 2.1 Equações Governantes

Todo escoamento de fluidos pode ser descrito matematicamente pelas equações de Navier-Stokes que representam três leis fundamentais da física. A primeira é a conservação de massa, que afirma que a massa em um sistema fechado é invariável. A segunda lei é a conservação de movimento, que declara que a quantidade de movimento de um sistema permanece constante se nenhuma força externa agir e a terceira é a conservação de energia, também conhecida como a primeira lei da termodinâmica, que afirma que a energia total de um sistema isolado permanece constante.

Neste trabalho, consideramos apenas escoamentos incompressíveis e isotérmicos de fluidos viscoelásticos (fluidos com características viscosas e elásticas). As hipóteses sobre o escoamento, incompressibilidade isotérmica, equivalem a considerarmos a densidade e a temperatura como sendo constantes, e assim, por esta última, ignoramos o princípio de conservação de energia. Portanto, neste trabalho, assumimos como equações de Navier-Stokes apenas os princípios de conservação de massa e conservação de quantidade de movimento.

Consideremos um sistema de coordenadas cartesianas bidimensionais  $xOy$ , seja  $\mathbf{x} = (x, y)$  o vetor posição e  $\mathbf{u} = (u, v)$  o vetor velocidade, com  $u = u(\mathbf{x}, t)$  e  $v = v(\mathbf{x}, t)$  as componentes da velocidade  $\mathbf{u}$  ao longo das coordenadas  $x$  e  $y$ , respectivamente, no instante de tempo  $t \geq 0$ . Definimos o tensor tensão total  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$  por

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{T} - p\mathbf{I} \quad (2.1)$$

onde,  $\mathbf{T} = \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}$  é o tensor das tensões, que é simétrico,  $p = p(\mathbf{x}, t)$  é a pressão e  $\mathbf{I}$  é o tensor identidade.

As equações do momento e da continuidade na forma adimensional conservativa, são dadas, respectivamente, por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.3)$$

Definimos a taxa de deformação  $\mathbf{D}$ , como

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (2.4)$$

onde,  $\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}$  é o tensor gradiente da velocidade e  $\nabla \mathbf{u}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}$  o seu transposto.

Podemos definir o tensor das tensões como sendo a soma das contribuições newtoniana (viscosa) e a contribuição não-newtoniana (elástica) [8], isto é,

$$\mathbf{T} = 2\frac{\beta}{Re}\mathbf{D} + \boldsymbol{\tau}, \quad (2.5)$$

onde  $2\frac{\beta}{Re}\mathbf{D}$  é a contribuição newtoniana e  $\boldsymbol{\tau}$  é a contribuição não-newtoniana ou contribuição polimérica. Neste trabalho, adotamos  $\beta = \frac{\mu_s}{\mu}$ , ou seja, a razão entre a viscosidade do solvente e a viscosidade total ( $\mu = \mu_s + \mu_p$ , onde  $\mu_p$  é a viscosidade polimérica). Além disso,  $Re$  é o número de Reynolds, dado por:  $Re = \frac{UH}{\nu}$ , onde  $U$  e  $H$  representam escolhas apropriadas de escalas de velocidade e comprimento, respectivamente, e  $\nu$  é a viscosidade cinemática.

A seguir, apresentaremos a equação constitutiva da contribuição polimérica em termos do tensor conformação, mas antes, definimos a derivada material (ou derivada total) e a derivada convectiva superior de Maxwell "Upper-Convected Maxwell" (UCM).

Dado um tensor  $\boldsymbol{\Omega}$  qualquer definimos sua derivada material e sua derivada convectiva superior de Maxwell, respectivamente, como

$$\frac{D\boldsymbol{\Omega}}{Dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\boldsymbol{\Omega}), \quad (2.6)$$

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\Omega}} = \frac{D\boldsymbol{\Omega}}{Dt} - (\nabla \mathbf{u}\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{\Omega}\nabla \mathbf{u}^T). \quad (2.7)$$

Substituindo (2.5) em (2.1), e depois nas equações de Navier-Stokes (2.2) e (2.3), segue que

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.9)$$

A equação constitutiva da contribuição polimérica é frequentemente formulada em termos do tensor conformação  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12} & A_{22} \end{bmatrix}$ , que é uma aproximação do estado microestrutural do líquido [26]. Isso se deve à propriedade central deste tensor que é de ser simétrico e definido positivo [31, 32]. Hulsen [32] provou que o tensor conformação deve permanecer SPD durante toda a evolução temporal da equação constitutiva se este foi inicializado desta forma, isto é, se foi inicializado SDP.

A equação constitutiva do tensor conformação  $\mathbf{A}$  é dada por

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) = \nabla \mathbf{u} \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla \mathbf{u}^T + \frac{1}{Wi} f(\mathbf{A}) P(\mathbf{A}), \quad (2.10)$$

onde  $f(\mathbf{A})$ , uma função escalar, e  $P(\mathbf{A})$ , um tensor que depende de  $\mathbf{A}$ , são determinados de acordo com o modelo constitutivo:

- Oldroyd-B:

$$f(\mathbf{A}) = 1 \quad (2.11)$$

e

$$P(\mathbf{A}) = \mathbf{I} - \mathbf{A}. \quad (2.12)$$

- Giesekus:

$$f(\mathbf{A}) = 1 \quad (2.13)$$

e

$$P(\mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbf{A} - \mathbf{I})], \quad (2.14)$$

onde  $\alpha$  é o fator de mobilidade.

- FENE-CR:

$$f(\mathbf{A}) = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{A})} \quad (2.15)$$

e

$$P(\mathbf{A}) = \mathbf{I} - \mathbf{A}, \quad (2.16)$$

onde  $L$  é a extensão máxima do polímero e  $\text{tr}(\mathbf{A})$  é o traço do tensor conformação  $\mathbf{A}$ .

- FENE-P:

$$f(\mathbf{A}) = \frac{L^2}{L^2 - 3} \quad (2.17)$$

e

$$P(\mathbf{A}) = \left( \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{A})} \mathbf{A} \right). \quad (2.18)$$

**Observação 2.1.** *O modelo FENE-P adotado neste trabalho está baseado no trabalho de Oliveira [48].*

Agora, apresentamos a equação que relaciona o tensor conformação  $\mathbf{A}$  com a contribuição polimérica  $\boldsymbol{\tau}$ . Esta relação entre os tensores varia de acordo com o modelo constitutivo escolhido:

- Modelos Oldroyd-B e Giesekus

$$\boldsymbol{\tau} = \xi (\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (2.19)$$

- Modelo FENE-CR

$$\boldsymbol{\tau} = \xi f(\mathbf{A}) (\mathbf{A} - \mathbf{I}), \quad (2.20)$$

onde  $f(\mathbf{A})$  é definido como na equação (2.15).

- Modelo FENE-P

$$\boldsymbol{\tau} = \xi (f(\mathbf{A}) \mathbf{A} - f(L) \mathbf{I}), \quad (2.21)$$

onde  $f(\mathbf{A})$  é igual a (2.15) e

$$f(L) = \frac{L^2}{L^2 - 3}. \quad (2.22)$$

Note que em todos os modelos o valor de  $\xi$  é:  $\frac{1 - \beta}{ReWi}$ . Este valor pode sofrer alterações dependendo de como adimensionalizamos os tensores. Neste trabalho, a adimensionalização usada no tensor polimérico é  $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^* / \rho U^2$  [52]. Além disso, os modelos FENE-CR e FENE-P diferem apenas da função  $f(L)$ . Se tomarmos  $f(L)$  como sendo igual a  $f(\mathbf{A})$ , definido na equação (2.15), o modelo FENE-P torna-se FENE-CR.

A equação constitutiva do tensor conformação  $\mathbf{A}$  pode ser escrita inteiramente em função do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ . Para ilustrar, construímos a equação deste para o modelo constitutivo Oldroyd-B. Inicialmente, escrevemos o modelo Oldroyd-B para o tensor  $\mathbf{A}$  adotando em (2.10) as equações (2.11) e (2.12), ou seja,

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{A}) = \nabla \mathbf{u} \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla \mathbf{u}^T + \frac{1}{Wi} (\mathbf{I} - \mathbf{A}). \quad (2.23)$$

Como consequência de (2.19), escrevemos o tensor conformação como

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\xi} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{I}, \quad (2.24)$$

e substituindo (2.24) na equação (2.23), resulta na equação do modelo constitutivo Oldroyd-B para o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ , dada por

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\xi \mathbf{D} - \frac{1}{W_i} \boldsymbol{\tau}. \quad (2.25)$$

## 2.2 Condições auxiliares

Para resolvermos o sistema de equações composto por (2.8), (2.9) e (2.10) é necessário a prescrição de condições auxiliares para as variáveis pressão  $p$ , velocidade  $\mathbf{u}$  e para o tensor conformação  $\mathbf{A}$  (ou tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ ), uma vez que, um sistema de Equações Diferenciais Parciais (EDP's), ou mesmo uma EDP, em geral, apresenta um conjunto infinito de soluções. Portanto, a imposição de condições auxiliares é indispensável para que o sistema tenha solução única e que a solução numérica simule o comportamento físico do fenômeno estudado.

As condições auxiliares nos tensores das decomposições matriciais, que serão apresentados no Capítulo 3, são determinadas através das condições auxiliares impostas ao tensor conformação  $\mathbf{A}$ , que por sua vez, estabelece as condições auxiliares mediante a relação com o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ .

Quando falamos em condições auxiliares estamos nos referindo às condições iniciais e de contorno, ou seja, a imposição de um valor inicial para a solução e valores desta no contorno do domínio considerado, respectivamente.

A correta imposição de condições auxiliares é essencial para a resolução de problemas envolvendo escoamento de fluidos [20], em especial os fluidos não-newtonianos em regime não estacionário, como são os escoamentos que estamos estudando.

A seguir apresentamos uma breve descrição das condições iniciais e de contorno, usadas nas simulações.

### 2.2.1 Condições iniciais

As condições iniciais são informações sobre o estado inicial do problema, informando-nos a partir de qual valor a solução irá se propagar. Assim, a correta imposição das condições iniciais são importantes não só para a convergência do método, mas, também, para descrever o correto comportamento do fenômeno estudado. Uma exigência para a imposição de uma condição inicial para o campo de velocidade é que esta deve satisfazer a equação da continuidade (2.9) [28]. As variáveis  $p$  e  $\boldsymbol{\tau}$  devem estar em conformidade com o campo de velocidade, sendo, em geral, consideradas nulas no instante inicial [5, 8, 28].

Vale ressaltar que as condições iniciais do tensor conformação são obtidas das condições iniciais do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ . Desta forma, as condições iniciais de  $\mathbf{u}$ ,  $p$  e  $\mathbf{A}$  são dadas respectivamente por:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

$$p = 0, \quad (2.27)$$

e, como consequência da relação com  $\boldsymbol{\tau}$ , considerando os quatro modelos constitutivos estudados:

- Oldroyd-B e Gisekus: obtida da equação (2.19), ou seja,

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\tau} = \xi (\mathbf{A} - \mathbf{I}), \quad (2.28)$$

que implica

$$\mathbf{A} = \mathbf{I}. \quad (2.29)$$

- FENE-CR: obtida da relação (2.20), ou seja,

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\tau} = \xi f(\mathbf{A}) (\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (2.30)$$

onde  $f(\mathbf{A})$  é definida como em (2.15). Assim, a função  $f(\mathbf{A})$  é sempre não-nula. Portanto, segue (2.29).

- FENE-P: obtida da equação (2.21), isto é,

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{\tau} = \xi (f(\mathbf{A}) \mathbf{A} - f(L) \mathbf{I}). \quad (2.31)$$

onde  $f(\mathbf{A})$  é definida como em (2.15) e  $f(L)$  como (2.22). Assim, temos que

$$\mathbf{A} = \frac{f(L)}{f(\mathbf{A})} \mathbf{I}, \quad (2.32)$$

no qual, tomamos  $f(\mathbf{A})$  de modo a garantir que  $\mathbf{A}$  seja SPD.

## 2.2.2 Condições de contorno

Estas condições nos fornecem informações sobre o comportamento do fenômeno modelado no limiar da região estudada e dividem-se, pelo menos neste trabalho, condizentes com as situações físicas aqui estudadas, em três tipos diferentes:

- *Região de entrada de fluido ("inflow")*: Nesta região estabelecemos o valor das variáveis dependentes na entrada de fluido do domínio considerado. O valor da velocidade normal ( $u_{\vec{n}}$ ) à entrada de fluido é prescrito de acordo com a vazão desejada, enquanto que a velocidade tangencial ( $u_{\vec{t}}$ ) é nula, isto é

$$u_{\vec{n}} = u_{inflow} \quad (2.33)$$

$$u_{\vec{t}} = 0 \quad (2.34)$$

Também impomos um valor para o tensor conformação  $\mathbf{A}$  nesta região, que vai depender do valor estabelecido para a velocidade. Se considerarmos  $\mathbf{u}_{inflow}$  constante, a contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}$  será nula e, então, o tensor conformação será a identidade, equação (2.29), para os modelos Oldroyd-B, Giesekus e FENE-CR, e (2.32) para o modelo FENE-P. Este posicionamento, o anulamento de  $\boldsymbol{\tau}$  na região de entrada de fluido, parte do pressuposto de que o fluido prestes a entrar no domínio está livre de perturbações [47]. Caso consideremos a velocidade com perfil parabólico, a contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}$  é definida como em [42]. Novamente, obtemos o valor de  $\mathbf{A}$  nesta região pela relação com  $\boldsymbol{\tau}$ .

- *Paredes Sólidas*: Neste tipo de contorno, é comum considerarmos a condição de não escorregamento "no-slip", também chamada de condição de aderência completa, e a condição de fronteira impermeável. A condição de não escorregamento supõe que o fluido irá aderir à fronteira, implicando que a componente tangencial da velocidade  $u_{\vec{t}}$ , em relação à parede, seja zero, como resultado de considerarmos esta velocidade em repouso em relação à parede. A velocidade normal  $u_{\vec{n}}$  também é prescrita como sendo zero, como consequência da condição de impermeabilidade da parede que impede o fluxo de massa em sua direção normal, isto é, o fluido não pode penetrar na parede. Assim, resumindo o que fora apontado acima, temos que

$$u_{\vec{t}} = 0, \quad (2.35)$$

$$u_{\vec{n}} = 0. \quad (2.36)$$

Aproveitando-se dos valores da velocidade no contorno, equação (2.35), obtemos valores nas paredes sólidas para a contribuição não-newtoniana a partir da equação



constitutiva de  $\boldsymbol{\tau}$ , que será simplificada em consequência dos valores das componentes da velocidade e suas derivadas. O mesmo se aplica à equação do tensor conformação  $\mathbf{A}$ , bem como das equações dos tensores das decomposições apresentados no Capítulo 3. Mais detalhes sobre a abordagem do cálculo nas paredes sólidas podem ser consultados em [42].

- *Região de saída de fluido ("outflow")*: Esta região é responsável pela saída de fluido do domínio e representa um ponto crítico na simulação do escoamento, uma vez que esta região só existe porque precisamos "cortar" o domínio físico em algum ponto, para que possamos representá-lo no computador. Num esforço de reproduzir a saída de fluido do domínio, impomos a condição de Neumann homogênea para a velocidade e para a contribuição não-newtoniana, consideramos:

$$\frac{\partial u_{\vec{n}}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial u_{\vec{t}}}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (2.38)$$

e

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (2.39)$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor normal à região de saída de fluido. Uma vez evoluído o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  nesta região, transferimos o valor obtido para o tensor conformação  $\mathbf{A}$  mediante a relação entre os dois tensores.

**Observação 2.2.** *As condições de contorno para as equações (2.8), (2.9) e (2.25) abrangem somente as variáveis  $\mathbf{u}$  e  $\boldsymbol{\tau}$ , uma vez que estas não incluem uma equação evolutiva para a pressão  $p$ .*

# Decomposições Matriciais

## 3.1 Formulação Log-Conformação

Nesta seção, apresentamos a formulação log-conformação, proposta por Fattal e Kupferman [26, 27], para a equação constitutiva (2.10). Este método tornou-se uma das principais técnicas de controle das instabilidades numéricas causadas pelo HWNP [1, 18, 19, 33, 40, 64], não só pela formulação teórica bem elaborada, em que os autores apresentam uma das causas do problema e sua solução [26, 27], como também, pelos resultados estáveis para altos valores de  $Wi$ .

Este método propõe a reformulação da equação constitutiva do tensor conformação em duas etapas principais: uma decomposição aplicada ao tensor  $\nabla \mathbf{u}$  e, posteriormente, uma transformação logarítmica em  $\mathbf{A}$ , construindo uma nova equação constitutiva para a variável logarítmica utilizada. Esta formulação, conforme declarado pelos autores e assegurado pelos testes numéricos, realmente diminuiu as instabilidades causadas pelo HWNP. Entretanto, assim como todas as outras propostas de estabilização, não está isenta de limitações. Uma dificuldade apontada por Fattal e Kupferman está associada com a perda de precisão do método.

A escolha deste método, para investigação, justifica-se pelo importante papel que este exerceu, e ainda exerce, na simulação de escoamentos viscoelásticos. Além disso, o método baseado na transformação logarítmica é uma das principais inspirações para as demais técnicas, elaboradas a partir de decomposições do tensor conformação, que foram sendo desenvolvidas desde então. Portanto, não poderíamos deixar de explorar esta técnica, que nos auxiliará nos estudos teóricos e numéricos das decomposições matriciais investigadas neste projeto.

### 3.1.1 Construção do método

Esta proposta foi motivada pela evidência numérica de que um dos mecanismos responsáveis pelo HWNP é uma falha no polinômio interpolador usado para aproximar a equação diferencial constitutiva do modelo reológico, sendo este incapaz de representar corretamente o perfil exponencial gerado pelo tensor conformação. Em especial, esses problemas ocorrem nas regiões de altos gradientes ("sharp gradients") próximos à camadas limites e pontos de estagnação. Esta observação, do crescimento exponencial, aguçou a ideia do uso de uma transformação logarítmica como uma forma de suavizar este crescimento e consequentemente amenizar os problemas do HWNP. Além disso, as manifestações do HWNP em muitos casos coincide com a perda da positividade do tensor conformação [34, 53], de modo que esta transformação visa garantir a preservação desta propriedade.

O uso de uma transformação logarítmica como uma estratégia de manter a positividade do tensor conformação leva-nos a fazer alusão ao trabalho de Vaithianathan e Collins [65]. Neste, os autores após uma decomposição do tipo Cholesky aplicada ao tensor conformação, emprega uma transformação logarítmica aos termos da diagonal principal da matriz decomposta visando garantir a positividade de  $\mathbf{A}$ .

A essência desta técnica não está somente na mudança para uma variável logarítmica, mas também na decomposição do tensor  $\nabla \mathbf{u}$  em duas componentes: rotacional e extensional. Mais uma vez, citamos o trabalho de Vaithianathan e Collins [65], que apresenta uma estratégia de estabilização, decomposição espectral, na qual, antes de empregarem a técnica principal, fazem uso de uma decomposição no tensor  $\nabla \mathbf{u}$ . Embora as decomposições de  $\nabla \mathbf{u}$  utilizadas em [26, 27] e [65] sejam diferentes, podemos estabelecer uma relação entre as componentes geradas por tais decomposições. Para esclarecer melhor esta relação, apresentamos a decomposição usada por Vaithiantha e Collins [65]. Primeiramente, consideramos:

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{D} + \mathbf{R}, \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{D}$  é a taxa de deformação, equação (2.4), e  $\mathbf{R} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T)$ , a taxa de rotação que é um tensor antissimétrico. Além de um termo rotacional presente em ambas as decomposições, o termo extensional, assim como a taxa de deformação são simétricos. Ou seja, em ambas as decomposições, decomposição de Cholesky e log-conformação, temos um termo rotacional e um tensor simétrico.

A seguir, apresentamos os resultados que possibilitam-nos decompor  $\nabla \mathbf{u}$  de acordo com a proposta estabelecida em [26, 27] e a construção de uma equação evolutiva para a matriz logarítmica do tensor conformação  $\mathbf{A}$ .

**Lema 3.1.** *Seja  $\Lambda$  uma matriz diagonal  $n \times n$  com entradas não nulas e distintas entre si. Então, qualquer que seja a matriz  $\tilde{\mathbf{M}}_{n \times n}$  possui uma única decomposição da forma:*

$$\tilde{\mathbf{M}} = \tilde{\mathbf{\Omega}} + \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1}, \quad (3.2)$$

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

**Demonstração:** Denotamos por  $\mathcal{S}$  o subespaço das matrizes simétricas,  $\mathcal{A}$  o subespaço das matrizes antissimétricas e  $\mathcal{D}$  o subespaço das matrizes diagonais. Devemos mostrar a existência e unicidade das matrizes  $\tilde{\mathbf{\Omega}}, \tilde{\mathbf{N}} \in \mathcal{A}$  e  $\tilde{\mathbf{B}} \in \mathcal{D}$ . Inicialmente, observamos que a matriz  $\tilde{\mathbf{M}}$  pode ser escrita como

$$\tilde{\mathbf{M}} = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{M}} + \tilde{\mathbf{M}}^T) + \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{M}} - \tilde{\mathbf{M}}^T), \quad (3.3)$$

onde,  $\frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{M}} + \tilde{\mathbf{M}}^T) \in \mathcal{S}$  e  $\frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{M}} - \tilde{\mathbf{M}}^T) \in \mathcal{A}$ . Podemos escrever as parcelas de (3.3), como consequência de (3.2), da seguinte forma

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{B}} + \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1}\tilde{\mathbf{N}}) &= \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{M}} + \tilde{\mathbf{M}}^T), \\ \tilde{\mathbf{\Omega}} + \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1} + \Lambda^{-1}\tilde{\mathbf{N}}) &= \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{M}} - \tilde{\mathbf{M}}^T). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Precisamos apresentar apenas a existência e unicidade das matrizes  $\tilde{\mathbf{N}}$  e  $\tilde{\mathbf{B}}$ , uma vez que a existência e unicidade de  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$  ficará garantida pela segunda equação de (3.4). Isto será assegurado se provarmos que o subespaço  $\mathcal{S}$ , das matrizes simétricas, for igual à soma direta dos subespaços  $\mathcal{D}$ , das matrizes diagonais, e  $\left\{ \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1}\tilde{\mathbf{N}}) : \tilde{\mathbf{N}} \in \mathcal{A} \right\}$ , das matrizes simétricas com entradas nulas na diagonal principal, isto é,

$$\mathcal{S} = \mathcal{D} \oplus \left\{ \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1}\tilde{\mathbf{N}}) : \tilde{\mathbf{N}} \in \mathcal{A} \right\}. \quad (3.5)$$

Provamos esta igualdade por meio das dimensões dos subespaços.

Consideremos a transformação linear

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{S} \\ \tilde{\mathbf{N}} &\mapsto \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1}\tilde{\mathbf{N}}) \end{aligned}$$

com

$$\frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{N}}\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1}\tilde{\mathbf{N}})_{ij} = \frac{1}{2} (\Lambda_{jj}^{-1} - \Lambda_{ii}^{-1}) \tilde{N}_{ij}.$$

Observamos, supondo  $i \neq j$ , que a igualdade  $\frac{1}{2} (\Lambda_{jj}^{-1} - \Lambda_{ii}^{-1}) \tilde{N}_{ij} = 0$  ocorre se, e somente se,  $\tilde{N}_{ij} = 0$ , visto que estamos supondo  $\Lambda$  com entradas não nulas e distintas entre si. Portanto, o núcleo de  $\mathbf{F}$  se resume apenas à matriz nula, isto é,  $\text{Ker}(\mathbf{F}) = \{O\}$ ,

que implica  $\dim(\text{Ker}(\mathbf{F})) = 0$ . Como  $\dim(\mathcal{A}) = \frac{1}{2}n(n-1)$ , segue do Teorema do Núcleo e da Imagem que a dimensão da imagem é igual à dimensão do domínio, ou seja,  $\dim(\text{Im}(\mathbf{F})) = \frac{1}{2}n(n-1)$ . Assim, concluímos que

$$\dim(\mathcal{D}) \oplus \dim\left(\left\{\frac{1}{2}\left(\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{\Lambda}^{-1} - \mathbf{\Lambda}^{-1}\tilde{\mathbf{N}}\right) : \tilde{\mathbf{N}} \in \mathcal{A}\right\}\right) = \frac{1}{2}n(n-1) + n = \frac{n^2 + n}{2} = \dim(\mathcal{S}). \quad (3.6)$$

Como  $\mathcal{D} \oplus \left\{\frac{1}{2}\left(\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{\Lambda}^{-1} - \mathbf{\Lambda}^{-1}\tilde{\mathbf{N}}\right) : \tilde{\mathbf{N}} \in \mathcal{A}\right\}$  é um subespaço de  $\mathcal{S}$ , segue de (3.6) a igualdade em (3.5). ■

**Lema 3.2.** *Seja  $\mathbf{S}$  uma matriz  $n \times n$  simétrica e definida positiva. Então, qualquer que seja a matriz  $\mathbf{M}_{n \times n}$  pode ser decomposta como:*

$$\mathbf{M} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{S}^{-1}, \quad (3.7)$$

onde  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{N}$  são antissimétricas e  $\mathbf{B}$  é simétrica e comuta com  $\mathbf{S}$ .

**Demonstração:** Por hipótese, a matriz  $\mathbf{S}$  é simétrica e definida positiva, então vale a decomposição  $\mathbf{S} = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^T$ , onde  $\mathbf{O}$  é ortogonal. Reescrevendo a decomposição como  $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{O}^T\mathbf{S}\mathbf{O}$  e fazendo  $\tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{O}^T\mathbf{M}\mathbf{O}$  temos pelo Lema 3.1 que

$$\mathbf{O}^T\mathbf{M}\mathbf{O} = \tilde{\mathbf{\Omega}} + \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{N}}\mathbf{\Lambda}^{-1}. \quad (3.8)$$

Multiplicando à direita por  $\mathbf{O}$  e a esquerda por  $\mathbf{O}^T$ , resulta em

$$\mathbf{M} = \mathbf{O}^T\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{O} + \mathbf{O}^T\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{O} + \left(\mathbf{O}^T\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{O}\right)\left(\mathbf{O}^T\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{O}\right). \quad (3.9)$$

Definindo

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{O}^T, \quad (3.10)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{O}^T \quad (3.11)$$

e

$$\mathbf{N} = \mathbf{O}\tilde{\mathbf{N}}\mathbf{O}^T \quad (3.12)$$

resulta na igualdade (3.7). A propriedade antissimétrica das matrizes  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{N}$  segue como consequência direta de  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$  e  $\tilde{\mathbf{N}}$  serem antissimétricas e a comutatividade entre as matrizes  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{S}$  resulta da comutatividade de  $\mathbf{\Lambda}$  e  $\tilde{\mathbf{B}}$ . ■

**Corolário 3.1.** *Seja  $\mathbf{u}$  um campo de velocidade e  $\mathbf{A}$  o tensor conformação que é simétrico definido positivo. Então, o gradiente da velocidade  $\nabla\mathbf{u}$  pode ser decomposto como:*

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}, \quad (3.13)$$

onde  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{A})$  e  $\mathbf{N} = \mathbf{N}(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{A})$  são antissimétricas, e  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\nabla \mathbf{u}, \mathbf{A})$  é simétrica e comuta com o tensor conformação  $\mathbf{A}$ .

O cálculo das matrizes  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{B}$  para o caso de duas dimensões é apresentado no Apêndice A.

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{O}\mathbf{\Lambda}\mathbf{O}^T \quad (3.14)$$

onde  $\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$  é a matriz dos autovalores e  $\mathbf{O} = \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix}$  é a matriz dos autovetores, tal que  $\mathbf{O}\mathbf{O}^T = \mathbf{I}$ . Além disso, definimos

$$\tilde{\mathbf{M}} = \mathbf{O}^T (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{O}. \quad (3.15)$$

Mediante a substituição de (3.13) na equação constitutiva para o tensor conformação (2.10), isto é,

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) = (\mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}) \mathbf{A} + \mathbf{A} (-\mathbf{\Omega} + \mathbf{B} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}) + \frac{f(\mathbf{A})}{Wi} P(\mathbf{A}), \quad (3.16)$$

o termo  $\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}$  é eliminado e a equação constitutiva resume-se a

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{A}) = (\mathbf{\Omega}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{\Omega}) + 2\mathbf{B}\mathbf{A} + \frac{f(\mathbf{A})}{Wi} P(\mathbf{A}). \quad (3.17)$$

A definição de uma matriz logarítmica exige a positividade do logaritmando, que no nosso caso será o tensor conformação, que satisfaz essa condição. Esta é uma das razões por estarmos trabalhando com  $\mathbf{A}$  ao invés de  $\boldsymbol{\tau}$ , que é o mais comum. Assim, definimos o logaritmo do tensor conformação como

$$\boldsymbol{\Psi} = \ln(\mathbf{A}), \quad (3.18)$$

que implica, pela propriedade inversa, em

$$e^{\boldsymbol{\Psi}} = \mathbf{A}. \quad (3.19)$$

Observe que pela definição da matriz  $\boldsymbol{\Psi}$ , esta também tem a propriedade de ser simétrica e definida positiva.

Logicamente, para iniciarmos os cálculos com uma equação evolutiva para  $\Psi$ , bem como, para retornarmos à variável  $\mathbf{A}$  necessitamos calcular os tensores  $\Psi$  e  $e^\Psi$ . O cálculo destes tensores é feito por intermédio da diagonalização de  $\mathbf{A}$  e  $\Psi$ , respectivamente. Para o cálculo de  $\Psi$ , aplicamos a transformação logarítmica em (3.14), ou seja,

$$\Psi = \ln(\mathbf{A}) = \mathbf{O} \ln(\Lambda) \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \ln(\lambda_1) & 0 \\ 0 & \ln(\lambda_2) \end{bmatrix} \mathbf{O}^T. \quad (3.20)$$

Note que, os autovetores usados na decomposição de  $\Psi$  e  $\mathbf{A}$  são os mesmo. Além disso, os autovalores de  $\Psi$  são as imagens dos autovalores de  $\mathbf{A}$  pela função logarítmica. Algo semelhante ocorre com os autovalores de  $\mathbf{A}$ , que são as imagens dos autovalores de  $\Psi$  pela função exponencial, como pode ser observado mais a frente no cálculo de  $e^\Psi$ . Isso nos indica que o cálculo dos tensores  $\mathbf{B}$  e  $\Omega$ , pode ser feito tanto pela decomposição da matriz  $\mathbf{A}$ , como também, pela decomposição de  $\Psi$ , com as mudanças necessárias. Assim, não precisamos fazer a decomposição das duas matrizes,  $\mathbf{A}$  e  $\Psi$ , a cada passo no tempo e espaço, mas apenas de uma delas. Para isto, sugerimos a decomposição da matriz  $\Psi$ , uma vez que, obrigatoriamente essa matriz precisa ser decomposta a cada passo no tempo para retornarmos ao tensor  $\mathbf{A}$ , uma vez que não podemos usar os autovalores e autovetores defasados.

Para o cálculo de  $e^\Psi$  decompomos o tensor  $\Psi$  em autovalores e autovetores, como

$$\Psi = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \ln(\lambda_1) & 0 \\ 0 & \ln(\lambda_2) \end{bmatrix} \mathbf{O}^T, \quad (3.21)$$

de modo que

$$e^\Psi = \mathbf{O} e^{\ln(\Lambda)} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \mathbf{O}^T = \mathbf{A}. \quad (3.22)$$

A partir de agora, vamos trabalhar na busca de uma equação constitutiva para  $\Psi$ , que será feito, por simplicidade, de forma separada, isto é, com os quatro termos principais decompostos separadamente: advecção, rotação, extensão e termo fonte.

(1) *Advecção*: A contribuição convectiva de  $\Psi$  obtem-se substituindo (3.19) em

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

ou seja,

$$\frac{\partial e^\Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} e^\Psi) = 0, \quad (3.23)$$

que, pela regra da cadeia e manipulações algébricas adequadas, resulta em

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \Psi) = 0. \quad (3.24)$$

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

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = (\boldsymbol{\Omega} \mathbf{A} - \mathbf{A} \boldsymbol{\Omega}) \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\boldsymbol{\Omega} \Psi - \Psi \boldsymbol{\Omega}). \quad (3.25)$$

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

$$\mathbf{A}(t) = e^{\boldsymbol{\Omega} t} \mathbf{A}(0) e^{-\boldsymbol{\Omega} t}, \quad (3.26)$$

logo

$$\Psi(t) = e^{\boldsymbol{\Omega} t} \Psi(0) e^{-\boldsymbol{\Omega} t}, \quad (3.27)$$

e segue (3.25).

- (3) *Extensão*: A contribuição extensional para a matriz  $\Psi$  é obtida por meio da substituição de (3.19) em

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

que implica

$$\frac{\partial e^{\Psi}}{\partial t} = 2e^{\Psi} \mathbf{B}.$$

Por meio da regra da cadeia e de manipulações algébricas adequadas, a contribuição extensional para  $\Psi$  pode ser escrita como

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = 2\mathbf{B}. \quad (3.28)$$

- (4) *Termo fonte*: O termo fonte para a equação evolutiva de  $\Psi$  é obtido pela substituição direta de (3.19) em

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{1}{W_i} f(\mathbf{A}) P(\mathbf{A}), \quad (3.29)$$

ou seja,

$$\frac{\partial e^{\Psi}}{\partial t} = \frac{1}{W_i} f(e^{\Psi}) P(e^{\Psi}). \quad (3.30)$$

Portanto, aplicando a regra da cadeia e multiplicando por  $e^{-\Psi}$ , resulta em



$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{f(e^\Psi)}{Wi} e^{-\Psi} P(e^\Psi), \quad (3.31)$$

onde  $e^{-\Psi} = \mathbf{A}^{-1}$

Resumindo os resultados acima, podemos escrever a seguinte conclusão:

**Teorema 3.1.** *Seja  $\mathbf{A}$ , o tensor conformação, governado pela equação constitutiva (3.17) com  $\boldsymbol{\Omega} \in \mathcal{A}$ ,  $\mathbf{B} \in \mathcal{S}$ , e  $\mathbf{BA} = \mathbf{AB}$ , então  $\Psi = \ln(\mathbf{A})$  satisfaz a seguinte equação:*

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\Psi) = (\boldsymbol{\Omega}\Psi - \Psi\boldsymbol{\Omega}) + 2\mathbf{B} + \frac{f(e^\Psi)}{Wi} e^{-\Psi} P(e^\Psi). \quad (3.32)$$

Onde as funções  $f(e^\Psi)$  e  $P(e^\Psi)$  são definidas de acordo com o modelo constitutivo. Assim, temos

- Oldroyd-B:

$$f(e^\Psi) = 1 \quad (3.33)$$

e

$$P(e^\Psi) = \mathbf{I} - e^\Psi. \quad (3.34)$$

- Giesekus:

$$f(e^\Psi) = 1 \quad (3.35)$$

e

$$P(e^\Psi) = (\mathbf{I} - e^\Psi) [\mathbf{I} + \alpha(e^\Psi - \mathbf{I})]. \quad (3.36)$$

- FENE-CR:

$$f(e^\Psi) = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(e^\Psi)} \quad (3.37)$$

e

$$P(e^\Psi) = \mathbf{I} - e^\Psi. \quad (3.38)$$

- FENE-P:

$$f(e^\Psi) = \frac{L^2}{L^2 - 3} \quad (3.39)$$

e

$$P(e^\Psi) = \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} e^\Psi. \quad (3.40)$$

## 3.2 Decomposição do tipo raiz quadrada

Há uma grande dificuldade em se construir esquemas numéricos que sejam vantajosos em termos de precisão e estabilidade simultaneamente. Os estudiosos Fattal e Kupferman

[26, 27] depararam-se com esta situação na execução do método log-conformação. Esbarrraram num ponto muito importante associado ao HWNP, a perda de precisão ou acurácia da solução. Embora tenham desenvolvido uma notável ferramenta de estabilização, não foram capazes de integrar precisão e estabilidade ao mesmo tempo. Em vista disso, Balci et al. [4] propuseram uma nova formulação para a equação constitutiva (2.10), baseada na matriz raiz quadrada do tensor conformação, que, segundo os autores, resultou em benefícios tanto em termos de precisão como, também, estabilidade. Este método ficou conhecido como método raiz quadrada, em resultado da decomposição empregada. Além disso, é de fácil implementação e não há aumento significativo no custo computacional, que é equiparável à evolução direta do tensor conformação  $\mathbf{A}$  (ou do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ ), uma vez que este método não requer o cálculo dos autovalores e autovetores do tensor conformação.

Apesar dos atrativos suscitados, a influência desta metodologia foi insignificante, quando comparado com o método log-conformação que teve forte repercussão na área. Assim, é natural que surjam algumas questões relacionadas a eficiência desta técnica. Além do mais, Afonso et al. [1], em seus resultados, apresentam a técnica baseada na decomposição do tipo raiz quadrada como ineficiente. Portanto, o estudo deste método de estabilização justifica-se, para além da comparação entre métodos, pela presumível incompreensão que ainda permeia esta técnica. Ademais, estendemos a formulação teórica desta técnica para modelos constitutivos ainda não estudados, como Giesekus e FENE-CR.

A seguir, apresentamos a decomposição do tipo raiz quadrada e a construção de uma equação de evolução para esta nova variável.

### 3.2.1 Construção do método

Nesta subseção, apresentamos a construção do método de estabilização, desenvolvido por Balci et al. [4], fundamentado na decomposição do tipo raiz quadrada do tensor conformação. Antes, porém, enunciamos um teorema e sua demonstração que ensejam a decomposição sugerida.

**Teorema 3.2.** *Se uma matriz  $\mathbf{A}$  de ordem  $n \times n$  for diagonalizável e todos os seus autovalores forem positivos, então  $\mathbf{A}$  admite uma raiz quadrada.*

**Demonstração:** Sendo a matriz  $\mathbf{A}$  diagonalizável, podemos escrevê-la como em (3.14).

Afirmamos que a matriz raiz quadrada de  $\mathbf{A}$  é dada por:

$$\mathbf{A}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{O}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{O}^T. \quad (3.41)$$

De fato:

$$\mathbf{A}^{\frac{1}{2}}\mathbf{A}^{\frac{1}{2}} = \left(\mathbf{O}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{O}^T\right)\left(\mathbf{O}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{O}^T\right) = \mathbf{O}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{O}^T = \mathbf{O}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{O}^T = \mathbf{A}. \quad (3.42)$$

■

Portanto, amparado pelo teorema acima, podemos decompor o tensor conformação  $\mathbf{A}$  de maneira única como

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}^2, \quad (3.43)$$

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

A decomposição do tipo raiz quadrada, induz-nos a mencionar o trabalho de Vaithianathan e Collins [65], que exploraram o emprego de uma decomposição semelhante à do tipo raiz quadrada, a decomposição de Cholesky. Nesta técnica, decomparamos a matriz  $\mathbf{A}$  como

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T, \quad (3.44)$$

onde  $\mathbf{L}$  é uma matriz triangular inferior e  $\mathbf{L}^T$  sua transposta. Além disso, a notação originalmente empregue na decomposição do tipo raiz quadrada em [4], sugere, ainda mais, esta conformidade. Balci et al. [4] apresenta a equação (3.43) como

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}^T \mathbf{Q}. \quad (3.45)$$

A estrutura e disposição das decomposições (3.44) e (3.45), sem dúvidas, apresentam similaridades. Este fato, possivelmente influenciou ou inspirou o desenvolvimento desta nova técnica.

Da mesma forma como nos demais métodos de estabilização, o método baseado na decomposição do tipo raiz quadrada caracteriza-se por estimular a preservação da positividade de  $\mathbf{A}$ . Intuitivamente, observamos a contribuição desta decomposição neste sentido. A positividade de uma matriz quadrada pode ser definida em termos da positividade dos determinantes de seus menores principais, isto é, no caso que estamos considerando,  $n = 2$ , precisamos garantir que

$$\det(A_{11}) = A_{11} > 0 \quad (3.46)$$

$$\det(\mathbf{A}) = A_{11}A_{22} - A_{12}^2 > 0. \quad (3.47)$$

A primeira exigência (3.46) é automaticamente satisfeita com o emprego da decomposição do tipo raiz quadrada. De fato, (3.46) torna-se

$$\det(Q_{11}^2 + Q_{12}^2) = Q_{11}^2 + Q_{12}^2 > 0, \quad (3.48)$$

que é sempre positivo. A segunda condição (3.47), não é satisfeita automaticamente. Na verdade, sobre esta não temos controle algum. Neste ponto, estão as limitações do método

em conservar a positividade de  $\mathbf{A}$ . O que é natural presumir, uma vez que os próprios autores Balci et al. [4] admitiram haver deficiências integradas ao método, até mesmo, sugerindo o acréscimo de uma tensão difusiva artificial à equação constitutiva de  $\mathbf{Q}$ , que atuaria como um reforço ao método numérico.

Escrevendo a segunda restrição (3.47) em função de  $\mathbf{Q}$ , temos

$$\det(\mathbf{Q}^2) = Q_{11}^2 Q_{22}^2 + Q_{12}^2 (Q_{12}^2 - 2Q_{11}Q_{22}), \quad (3.49)$$

que pode, ocasionalmente, não ser positivo, devido ao acúmulo de erros numéricos.

Apesar da dificuldade acima apontada, temos outro elemento a favor desta decomposição. Este fator diz respeito ao traço da matriz  $\mathbf{A}$ , que é garantido positivo pela decomposição do tipo raiz quadrada. Isto é o que se espera de uma matriz definida positiva, pois seus autovalores devem ser reais positivos.

Isto posto, empenhemo-nos em conceber uma equação evolutiva para o tensor  $\mathbf{Q}$  a partir da equação constitutiva (2.10).

A primeira ação que empreendemos na elaboração de uma equação constitutiva para  $\mathbf{Q}$  é a substituição da decomposição (3.43) em (2.10), ou seja,

$$\frac{D\mathbf{Q}^2}{Dt} = \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^2 \nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} P(\mathbf{Q}^2) \quad (3.50)$$

Em seguida, aplicando a regra do produto para a derivada total  $\frac{D\mathbf{Q}^2}{Dt}$  na equação (3.50), obtemos

$$\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} = \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^2 \nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} P(\mathbf{Q}^2), \quad (3.51)$$

que implica em

$$\mathbf{Q} \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} = -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} \mathbf{Q} + \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}^2 \nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} P(\mathbf{Q}^2) \quad (3.52)$$

Multiplicando a equação (3.52) à esquerda por  $\mathbf{Q}^{-1}$ , resulta em

$$\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} = -\mathbf{Q}^{-1} \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1} \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q} \nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2). \quad (3.53)$$

Para a próxima etapa, usaremos o seguinte artifício

$$\frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) = \frac{1}{2} \left( \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{W_i} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) \right). \quad (3.54)$$

Assim, substituindo (3.54) em (3.53), obtemos

$$\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} = -\mathbf{Q}^{-1}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1}\nabla\mathbf{u}\mathbf{Q}^2 + \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) \quad (3.55)$$

que implica em

$$\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T - \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) = -\mathbf{Q}^{-1}\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}^{-1}\nabla\mathbf{u}\mathbf{Q}^2 + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2). \quad (3.56)$$

Atentando para o segundo membro da equação (3.56), colocamos as matrizes  $\mathbf{Q}^{-1}$  e  $\mathbf{Q}$  em evidencia, isto é,

$$\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T - \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2) = \mathbf{Q}^{-1}\left(-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}P(\mathbf{Q}^2)\mathbf{Q}^{-1}\right)\mathbf{Q}. \quad (3.57)$$

O próximo passo é definirmos o tensor  $\mathbf{V}$  como sendo o primeiro membro da equação (3.57), ou seja,

$$\mathbf{V} = \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T - \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2). \quad (3.58)$$

Em seguida, observamos que o fator  $\left(-\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}P(\mathbf{Q}^2)\mathbf{Q}^{-1}\right)$  presente no segundo membro da equação (3.57), nada mais é que  $-\mathbf{V}^T$ . Assim, podemos escrever (3.57) em função somente dos tensores  $\mathbf{V}$  e  $\mathbf{Q}$  da seguinte forma

$$\mathbf{V} = \mathbf{Q}^{-1}(-\mathbf{V}^T)\mathbf{Q}, \quad (3.59)$$

ou ainda

$$\mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1} = -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{V}^T, \quad (3.60)$$

que equivale a

$$\mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1} = -(\mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1})^T, \quad (3.61)$$

ou seja, o tensor  $\mathbf{V}\mathbf{Q}^{-1}$  é antissimétrico.

Definimos o tensor

$$\mathbf{G} = -\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{V}^T, \quad (3.62)$$

que garantimos ser antissimétrico por (3.61).

Por fim, substituindo (3.62) em (3.57), obtemos a seguinte equação evolutiva para a matriz raiz quadrada  $\mathbf{Q}$ :

$$\frac{\partial\mathbf{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Q}) = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2W_i}\mathbf{Q}^{-1}P(\mathbf{Q}^2), \quad (3.63)$$

onde  $\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 & G_{12} \\ -G_{12} & 0 \end{bmatrix}$  é uma matriz antissimétrica, as funções  $f(\mathbf{Q}^2)$  e  $P(\mathbf{Q}^2)$ , apresentadas adiante, são definidas segundo o modelo constitutivo selecionado, e a matriz  $\mathbf{Q}^{-1}$  é calculada analiticamente pela relação:

$$\mathbf{Q}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{Q})} \text{adj}(\mathbf{Q}), \quad (3.64)$$

onde  $\det(\mathbf{Q})$  é o determinante de  $\mathbf{Q}$  e  $\text{adj}(\mathbf{Q})$  sua matriz adjunta. Logo, a matriz  $\mathbf{Q}^{-1}$ , em termos das componentes de  $\mathbf{Q}$ , é escrita como:

$$\mathbf{Q}^{-1} = \frac{1}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} \begin{pmatrix} Q_{22} & -Q_{12} \\ -Q_{12} & Q_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

As funções  $f(\mathbf{Q}^2)$  e  $P(\mathbf{Q}^2)$  são definidas, de acordo com o modelo constitutivo adotado, como:

- Oldroyd-B:

$$f(\mathbf{Q}^2) = 1 \quad (3.66)$$

e

$$P(\mathbf{Q}^2) = \mathbf{I} - \mathbf{Q}^2. \quad (3.67)$$

- Giesekus:

$$f(\mathbf{Q}^2) = 1 \quad (3.68)$$

e

$$P(\mathbf{Q}^2) = (\mathbf{I} - \mathbf{Q}^2) [\mathbf{I} + \alpha(\mathbf{Q}^2 - \mathbf{I})]. \quad (3.69)$$

- FENE-CR:

$$f(\mathbf{Q}^2) = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{Q}^2)} \quad (3.70)$$

e

$$P(\mathbf{Q}^2) = \mathbf{I} - \mathbf{Q}^2. \quad (3.71)$$

- FENE-P:

$$f(\mathbf{Q}^2) = \frac{L^2}{L^2 - 3} \quad (3.72)$$

e

$$P(\mathbf{Q}^2) = \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{Q}^2)} \mathbf{Q}^2. \quad (3.73)$$

Até o momento, não mencionamos como proceder na determinação da matriz antissimétrica  $\mathbf{G}$  definida anteriormente, equação (3.62). O mais natural seria explorarmos sua

definição, ou seja, determinar  $\mathbf{G}$  a partir da relação (3.62), que equivale a

$$\mathbf{G} = \mathbf{Q}^{-1} \left( -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q} + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right). \quad (3.74)$$

Contudo, não adotamos este recurso. O motivo é muito simples: a configuração de  $\mathbf{G}$  na equação (3.74) não é antissimétrica. Isto é facilmente constatado, por observarmos que  $\mathbf{Q}^{-1}$  é simétrica, assim como, todas as parcelas de  $\left( -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q} + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right)$  com exceção de  $\nabla \mathbf{u} \mathbf{Q}$ . Logo, segue que

$$\left[ \mathbf{Q}^{-1} \left( -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q} + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right) \right]^T = \left( -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \mathbf{Q} \nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) \right) \mathbf{Q}^{-1} \quad (3.75)$$

e

$$\left( -\frac{D\mathbf{Q}}{Dt} + \mathbf{Q} \nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2) \right) \mathbf{Q}^{-1} \neq \mathbf{Q}^{-1} \left( \frac{D\mathbf{Q}}{Dt} - \nabla \mathbf{u} \mathbf{Q} - \frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} P(\mathbf{Q}^2) \mathbf{Q}^{-1} \right), \quad (3.76)$$

que garante não haver a antissimetria em (3.74).

A propriedade antissimétrica atribuída à matriz  $\mathbf{G}$ , deve-se às circunstâncias envolvidas na construção da equação evolutiva de  $\mathbf{Q}$ , e não à sua definição em termos de  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{u}$ . Assim, omitindo-se a composição de  $\mathbf{V}$  em (3.62), alcançamos a propriedade antissimétrica para  $\mathbf{G}$ .

A indicação de uma matriz  $\mathbf{G}$  é feita através, não da sua definição (3.62), mas, de um exame da propriedade simétrica presente em alguns termos da equação evolutiva de  $\mathbf{Q}$ . Balci et al. [4] declaram que a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  depende da correta escolha da matriz antissimétrica  $\mathbf{G}$ , que é obtida por meio da imposição de simetria sobre o tensor  $\mathbf{K}$ , definido como:

$$\mathbf{K} = \mathbf{G} \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \nabla \mathbf{u}^T. \quad (3.77)$$

Esta imposição segue da circunstância que a derivada material  $\frac{D\mathbf{Q}}{Dt}$  é simétrica, logo todo o segundo membro de (3.63) também deve satisfazer esta condição. A parcela  $\frac{f(\mathbf{Q}^2)}{2Wi} \mathbf{Q}^{-1} P(\mathbf{Q}^2)$  já satisfaz esta condição, em consequência da simetria de  $\mathbf{Q}$  e do fato de o polinômio  $P(\mathbf{Q}^2)$  envolver somente os tensores  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{I}$ , que são simétricos. De modo que, a única parcela que ainda falta atender esta exigência é  $\mathbf{G} \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \nabla \mathbf{u}^T$ .

Assim, construímos o tensor  $\mathbf{G}$  como consequência de

$$\mathbf{K}^T = \mathbf{K}, \quad (3.78)$$

ou seja, estabelecemos

$$(\mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T)^T = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T, \quad (3.79)$$

que implica em

$$\nabla\mathbf{u}\mathbf{Q} - \mathbf{Q}\nabla\mathbf{u}^T = \mathbf{G}\mathbf{Q} + \mathbf{Q}\mathbf{G}. \quad (3.80)$$

Após algumas manipulações algébricas em (3.80) determinamos a matriz  $\mathbf{G}$  (ver Apêndice A).

### 3.3 Formulação núcleo-conformação

Em vista do demasiado entusiasmo e bons resultados alcançados com o emprego de modificações na equação constitutiva do tensor conformação, como decomposição espectral [65], decomposição de Cholesky [65], log-conformação [26, 27] e decomposição do tipo raiz quadrada [4], uma questão que despertou o interesse dos estudiosos Afonso et al. [2] foi a possibilidade de reunir as principais sugestões de cada uma das decomposições mencionadas em uma única técnica, na qual por meio de uma simples modificação na função principal, escolhemos qual das estratégias adotar. Assim, na busca por tal método, Afonso et al. [2] desenvolveram o método núcleo-conformação, que, em particular, reúne os métodos log-conformação [26, 27] e decomposição do tipo raiz quadrada [4]. Esta formulação vai além do que simplesmente englobar algumas das técnicas já desenvolvidas, uma vez que cria a possibilidade do uso de outras transformações não investigadas até então, como a função inversa de seno hiperbólico, função logarítmica em qualquer base positiva, função raiz k-ésima, entre outras.

Afonso et al. [2] forneceram, não apenas, mais uma ferramenta de estabilização para a simulação numérica de escoamentos viscoelásticos a altos Weissenberg, como também, um estudo numérico entre as diferentes transformações empregues, analisando as melhores propostas de transformações. Algo semelhante ao que nos propomos fazer neste projeto, porém de modo mais abrangente e metódico, considerando também as técnicas originais.

No que segue, apresentamos a construção do método núcleo-conformação [2]. Quando apropriado, apontamos as ideias de outros trabalhos que serviram de base para esta formulação. Ademais, também citamos as diferenças e semelhanças entre as decomposições originais e suas versões similares originadas da técnica núcleo-conformação.

#### 3.3.1 Construção do método

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

- Elaboração de uma equação de evolução para os autovalores da matriz  $\mathbf{A}$



- Construção de uma equação de evolução para a função núcleo, que será definida mais adiante, avaliada na matriz dos autovalores de  $\mathbf{A}$
- Composição de uma equação evolutiva para a função núcleo avaliada em  $\mathbf{A}$

A construção deste método está fundamentada, principalmente, nas ideias de Vaithianathan e Collins [65] e Fattal e Kupferman [26, 27]. Inicialmente, podemos citar o uso da peculiar decomposição do gradiente da velocidade (3.13) usada na formulação log-conformação, a fim de modificar a estrutura da equação do tensor conformação antes do uso da transformação principal. Assim, a equação constitutiva que consideraremos será a equação (3.17).

Com o intento de alcançarmos uma equação evolutiva para a matriz dos autovalores  $\mathbf{\Lambda}$ , empregamos a mesma ideia empreendida por Vaithianathan e Collins [65], ou seja, usando a decomposição espectral (3.14), reescrevemos a matriz dos autovalores como

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{O}^T \mathbf{A} \mathbf{O}, \quad (3.81)$$

e aplicamos a derivada material em  $\mathbf{\Lambda}$ , juntamente com o uso da regra do produto para derivadas, que resulta em

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{A} \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{A}}{Dt} \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \mathbf{A} \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.82)$$

Agora, também usando uma ideia semelhante ao que fora feito em [65], substituímos  $\frac{D\mathbf{A}}{Dt}$  usando a equação constitutiva de  $\mathbf{A}$  (3.17), reformulada pela decomposição do tensor  $\nabla \mathbf{u}$ . No entanto, não usamos a decomposição feita em [65], equação (3.1), mas a decomposição empregada por Fattal e Kupferman [26, 27], equação (3.13), que resulta em:

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{A} \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \left( \mathbf{\Omega} \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} \mathbf{A} + \frac{f(\mathbf{A})}{W_i} P(\mathbf{A}) \right) \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \mathbf{A} \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.83)$$

$$= \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{A} \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{A} \mathbf{O} - \mathbf{O}^T \mathbf{A} \mathbf{\Omega} \mathbf{O} + 2\mathbf{O}^T \mathbf{B} \mathbf{A} \mathbf{O} + \frac{f(\mathbf{A})}{W_i} \mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \mathbf{A} \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.84)$$

Substituindo (3.14) em (3.84), com exceção dos argumentos de  $f$  e  $P$ , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} &= \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} + (\mathbf{O}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{O}) \mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda} (\mathbf{O}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{O}) + 2(\mathbf{O}^T \mathbf{B} \mathbf{O}) \mathbf{\Lambda} + \frac{f(\mathbf{A})}{W_i} \mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O} \\ &+ \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

A próxima alteração que faremos na equação (3.85) é substituir os termos  $f(\mathbf{A})$  e  $\mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O}$  por  $f(\mathbf{\Lambda})$  e  $P(\mathbf{\Lambda})$ . Antes, porém, apresentamos os cálculos que nos asseveram esta mudança para todos os modelos constitutivos aqui considerados.

- Oldroyd-B

$$f(\mathbf{A}) = 1 = f(\mathbf{\Lambda}) \quad (3.86)$$

e

$$\mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O} = \mathbf{O}^T (\mathbf{I} - \mathbf{A}) \mathbf{O} = (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) = P(\mathbf{\Lambda}). \quad (3.87)$$

- Giesekus

$$f(\mathbf{A}) = 1 = f(\mathbf{\Lambda}) \quad (3.88)$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O}^T &= \mathbf{O}^T (\mathbf{I} - \mathbf{A}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbf{A} - \mathbf{I})] \mathbf{O} = \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})] = P(\mathbf{\Lambda}) \end{aligned} \quad (3.89)$$

- FENE-CR

$$f(\mathbf{A}) = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{A})} = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} = f(\mathbf{\Lambda}) \quad (3.90)$$

e

$$\mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O} = \mathbf{O}^T (\mathbf{I} - \mathbf{A}) \mathbf{O} = (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) = P(\mathbf{\Lambda}). \quad (3.91)$$

- FENE-P

$$f(\mathbf{A}) = \frac{L^2}{L^2 - 3} = f(\mathbf{\Lambda}) \quad (3.92)$$

$$\mathbf{O}^T P(\mathbf{A}) \mathbf{O} = \mathbf{O}^T \left( \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{A})} \mathbf{A} \right) \mathbf{O} = \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} = P(\mathbf{\Lambda}) \quad (3.93)$$

Desta forma, podemos reescrever a equação (3.85) como

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} &= \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} + (\mathbf{O}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{O}) \mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda} (\mathbf{O}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{O}) + 2 (\mathbf{O}^T \mathbf{B} \mathbf{O}) \mathbf{\Lambda} + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}) \\ &+ \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt}, \end{aligned} \quad (3.94)$$

e após utilizarmos as equações (3.10) e (3.11), obtemos:

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} + \tilde{\mathbf{\Omega}} \mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda} \tilde{\mathbf{\Omega}} + 2\tilde{\mathbf{B}} \mathbf{\Lambda} + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}) + \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.95)$$

Agora, definimos o tensor  $\mathbf{H}$  como

$$\mathbf{H} = \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt}. \quad (3.96)$$

Note que,

$$\mathbf{0} = \frac{D\mathbf{O}^T \mathbf{O}}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{O} + \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt}, \quad (3.97)$$

que implica em

$$\mathbf{H} = \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt} = -\frac{D\mathbf{O}^T}{Dt} \mathbf{O} = -\mathbf{H}^T. \quad (3.98)$$

Desta maneira, mostramos que a matriz  $\mathbf{H}$  é antissimétrica.

Prosseguindo com a construção da equação evolutiva para a matriz  $\mathbf{\Lambda}$ , substituímos a equação (3.96) em (3.95), que resulta em

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = (\mathbf{\Lambda}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{\Lambda}) + (\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}\tilde{\mathbf{\Omega}}) + 2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda} + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{Wi}P(\mathbf{\Lambda}). \quad (3.99)$$

Observamos que as parcelas  $(\mathbf{\Lambda}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{\Lambda})$  e  $(\tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}\tilde{\mathbf{\Omega}})$  em nada contribuem para a evolução de  $\mathbf{\Lambda}$ , em razão de as matrizes  $\mathbf{H}$  e  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$  serem antissimétricas, logo possuem entradas nulas para a diagonal principal. Assim, podemos extrair duas expressões diferentes de (3.99), uma para os termos da diagonal principal e outra para os demais termos:

$$\frac{D\lambda_i}{Dt} = 2\tilde{B}_{ii}\lambda_i + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{Wi}P(\mathbf{\Lambda})_{ii}, \text{ onde } i = 1, 2, \quad (3.100)$$

e

$$\mathbf{H}\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}\mathbf{H} = \tilde{\mathbf{\Omega}}\mathbf{\Lambda} - \mathbf{\Lambda}\tilde{\mathbf{\Omega}}, \quad (3.101)$$

onde (3.100) aplica-se a equação de evolução para os autovalores de  $\mathbf{\Lambda}$  e a equação (3.101) aplica-se para os termos fora da diagonal principal.

Novamente, somos compelidos a mencionar a semelhança entre as construções dos métodos núcleo-conformação e decomposição espectral apresentada em [65]. As equações (3.100) e (3.101) são similares às equações compostas para a decomposição espectral, diferindo em apenas algumas componentes, que foram geradas pela distinta decomposição de  $\nabla \mathbf{u}$ . Uma diferença fundamental que indicamos entre os métodos núcleo-conformação e decomposição espectral, está no uso dessas equações. No trabalho proposto em [65], a composição das equações (3.100) e (3.101) tem por objetivo evoluir os autovalores e autovetores do tensor conformação, seguido da construção de  $\mathbf{A}$ . Observe que a equação (3.100) permite-nos evoluir os autovalores, enquanto que a equação (3.101) possibilita a determinação da matriz  $\mathbf{H}$  para posterior uso na equação evolutiva de  $\mathbf{O}$ , dada por

$$\frac{D\mathbf{O}}{Dt} = \mathbf{O}\mathbf{H}. \quad (3.102)$$

Em contrapartida, as equações (3.100) e (3.101) para a formulação núcleo-conformação, tem o papel de auxiliar os demais passos na construção do método. A equação (3.101), por exemplo, garante-nos a igualdade entre as matrizes  $\mathbf{H}$  e  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ , isto é,

$$\mathbf{H} = \tilde{\mathbf{\Omega}}. \quad (3.103)$$

De fato, consideremos a equação (3.101), reescrita abaixo como

$$\begin{bmatrix} 0 & H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.104)$$

que equivale a

$$H_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) = \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \quad (3.105)$$

que implica em

$$(\lambda_2 - \lambda_1) (H_{12} - \tilde{\Omega}_{12}) = 0. \quad (3.106)$$

Por hipótese,  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  (mesmo argumento usado na demonstração do Lema 3.1 do método log-conformação), que resulta em

$$H_{12} = \tilde{\Omega}_{12}, \quad (3.107)$$

que equivale a (3.103)

A próxima etapa é a construção de uma equação de evolução para a função núcleo avaliada em  $\mathbf{A}$ . Antes, porém, apresentamos a função núcleo  $\mathbb{K}$ , definida no conjunto das matrizes simétricas definidas positivas:

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \mathbf{O}\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{O}^T, \quad (3.108)$$

onde  $\mathbb{K}$  é uma função que deve satisfazer três condições: ser contínua, inversível e diferenciável. A exigência da continuidade e diferenciabilidade, que está associada à suavidade da função  $\mathbb{K}$ , é imposta para que possamos escrever  $\mathbb{K}(\mathbf{A})$  como em (3.108). O quesito inversível é explicado pela necessidade de retornarmos à  $\mathbf{A}$  após a evolução da matriz  $\mathbb{K}$ . Mais detalhes sobre estas condições para  $\mathbb{K}$  serão esclarecidas no decorrer do estudo.

Essa aplicação tem a vantagem de, após a diagonalização (3.14), ser aplicada somente na matriz diagonal (por isso do nome função núcleo), deixando de lado as matrizes ortogonais formadas pelos autovetores, conforme (3.108). Outra vantagem, é que aplicar a função núcleo na matriz diagonal equivale a construir uma matriz diagonal cujas entradas são as imagens dos termos da diagonal principal pela função  $\mathbb{K}$  definida em  $\mathbb{R}$ , ou seja, considerando uma matriz diagonal qualquer  $\mathbf{d} = d_{ij}$ , podemos escrever:

$$\mathbb{K}(\text{diag}(d_{11}; d_{22}; \dots; d_{nn})) = \text{diag}(\mathbb{K}(d_{11}); \mathbb{K}(d_{22}); \dots; \mathbb{K}(d_{nn})). \quad (3.109)$$

Assim, definimos a função  $\mathbb{K}$  em  $\mathbf{\Lambda}$ , que na prática é aplicada ao conjunto  $\mathbb{R}$  (lembrando que os autovalores de  $\mathbf{A}$  são reais positivos devido à positividade do tensor). Tendo isso em mente, vamos em busca de uma equação evolutiva para  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$ .

Derivando a função  $\mathbb{K}(\lambda_i)$  em relação ao tempo  $t$ , e usando a regra da cadeia em  $\mathbb{R}$ , obtemos:

$$\frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_i)}{\partial t} = \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_i)}{\partial \lambda_i} = \frac{\partial \lambda_i}{\partial t} J_{ii}, \quad (3.110)$$

ou na forma matricial

$$\frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{\Lambda}}{\partial t} \mathbf{J}, \quad (3.111)$$

onde, no caso bidimensional,  $\mathbf{J}$  é uma matriz diagonal dada por:

$$\mathbf{J} = \text{diag}\left(\frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_1)}{\partial \lambda_1}; \frac{\partial \mathbb{K}(\lambda_2)}{\partial \lambda_2}\right). \quad (3.112)$$

Este é mais um motivo para a exigência de diferenciabilidade de  $\mathbb{K}$ , e consequentemente da continuidade.

Aplicando a derivada material à matriz  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$ , e usando a regra da cadeia, obtemos:

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = \frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} \mathbf{J}. \quad (3.113)$$

Escrevendo a equação (3.100) na forma matricial, tem-se

$$\frac{D\mathbf{\Lambda}}{Dt} = 2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda} + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}), \quad (3.114)$$

e substituindo em (3.113), resulta na seguinte equação de evolução para  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$ :

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = 2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{J}. \quad (3.115)$$

Através da definição da matriz  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$  (3.108) e pela regra do produto para derivadas, podemos escrever a derivada material de  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$  como:

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt} \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{O}^T + \mathbf{O} \frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} \mathbf{O}^T + \mathbf{O} \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda}) \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt}. \quad (3.116)$$

Com isso, esclarecemos o motivo de termos produzido, antes, uma equação evolutiva para  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})$ , ou seja, para substituímos em (3.116). Fazendo esta substituição, obtemos:

$$\frac{D\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{Dt} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt} \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{O}^T + \mathbf{O} \left[ 2\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J} + \frac{f(\mathbf{\Lambda})}{W_i} P(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{J} \right] \mathbf{O}^T + \mathbf{O} \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda}) \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt}. \quad (3.117)$$

Mediante outra substituição,  $\mathbb{K}(\mathbf{\Lambda}) = \mathbf{O}^T \mathbb{K}(\mathbf{A}) \mathbf{O}$  aplicada à equação (3.117), além de distribuímos as multiplicações presentes na equação, resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbb{K}(\mathbf{A})}{Dt} &= \frac{D\mathbf{O}}{Dt} \mathbf{O}^T \mathbb{K}(\mathbf{A}) + 2 \left( \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{J} \mathbf{O}^T \right) + \frac{1}{Wi} \left( \mathbf{O} f(\mathbf{\Lambda}) P(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{J} \mathbf{O}^T \right) \\ &+ \mathbb{K}(\mathbf{A}) \mathbf{O} \frac{D\mathbf{O}^T}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.118)$$

Atentando para a equação (3.103), temos que

$$\tilde{\mathbf{\Omega}} = \mathbf{H} = \mathbf{O}^T \frac{D\mathbf{O}}{Dt}, \quad (3.119)$$

que implica

$$\mathbf{O} \tilde{\mathbf{\Omega}} \mathbf{O}^T = \frac{D\mathbf{O}}{Dt} \mathbf{O}^T, \quad (3.120)$$

ou seja,

$$\mathbf{\Omega} = \frac{D\mathbf{O}}{Dt} \mathbf{O}^T. \quad (3.121)$$

Portanto, a equação evolutiva para  $\mathbb{K}(\mathbf{A})$  pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{A})}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}(\mathbf{A})) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K}(\mathbf{A}) - \mathbb{K}(\mathbf{A}) \mathbf{\Omega} + 2\mathbb{B} + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}, \quad (3.122)$$

onde as matrizes  $\mathbb{B}$  e  $\mathbb{H}$  são dadas, respectivamente, por:

$$\mathbb{B} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{B}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{J} \mathbf{O}^T \quad (3.123)$$

e

$$\mathbb{H} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} f(\mathbf{\Lambda}) P(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{J} \mathbf{O}^T, \quad (3.124)$$

onde  $\mathbf{D}_{\mathbb{B}}$  e  $\mathbf{D}_{\mathbb{H}}$  são matrizes diagonais. Repare que somente a matriz  $\mathbb{H}$  depende das funções  $f$  e  $P$ , que determinam o modelo constitutivo. Logo, somente esta matriz sofrerá mudanças com a variação de modelos.

### 3.3.2 Aplicações sobre a formulação núcleo-conformação

Agora, apresentamos a construção de equações de evolução para três funções diferentes de  $\mathbb{K}$ , função linear deslocada ("linear shifted") e as versões  $\log_d$  e raiz  $k$ -ésima para a formulação núcleo-conformação. Estas três funções citadas anteriormente são as mesmas apresentadas em [2]. Porém, em [2] elas foram desenvolvidas somente para o modelo constitutivo Oldroyd-B. Aqui, além de considerarmos este modelo, estenderemos para outros modelos, Giesekus, FENE-CR e FENE-P.

### 3.3.2.1 Função linear deslocada núcleo-conformação

O primeiro exemplo de transformação, através da técnica núcleo-conformação, que apresentamos é a função linear deslocada. Afonso et al. [2] exibem esta transformação com o propósito de expor a suposta equivalência entre o uso desta função e a evolução direta com o tensor polimérico, mostrando a capacidade desta transformação de, até mesmo, representar o método padrão. Entretanto, em [2] esta análise é feita apenas para o modelo Oldroyd-B, individualizando a função linear deslocada, ou seja, a característica da função deslocada, como é posta em [2], só faz sentido para o modelo Oldroyd-B.

Afonso et al. [2] definem a função linear deslocada como

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \frac{1}{W_i} (\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (3.125)$$

Esta função representa a relação existente entre o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  e o tensor conformação  $\mathbf{A}$  para o modelo Oldroyd-B (ver [27]), que por acaso é a mesma para o modelo Giesekus. Entretanto, em consequência da adimensionalização usada neste trabalho, a relação entre os tensores  $\boldsymbol{\tau}$  e  $\mathbf{A}$  por nós adotada difere da relação empregue em [2]. Assim, com o propósito de manter a consistência entre associação entre os tensores, definimos a função linear deslocada como

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \xi (\mathbf{A} - \mathbf{I}). \quad (3.126)$$

Para a construção da equação evolutiva, com a função linear deslocada, precisamos calcular os tensores  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbb{B}$  e  $\mathbb{H}$ , isto é, os escrevemos em função de  $\mathbb{K}$ . Assim, usando as equações (3.112), (3.123) e (3.124), e observando que a aplicação inversa de  $\mathbb{K}$  é

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\xi} \mathbb{K}(\mathbf{A}) + \mathbf{I}, \quad (3.127)$$

temos

a) Cálculo de  $\mathbf{J}$  através da equação (3.112):

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{A})}{\partial \mathbf{A}} = \frac{\partial \xi (\mathbf{A} - \mathbf{I})}{\partial \mathbf{A}} = \xi \mathbf{I}. \quad (3.128)$$

b) Cálculo de  $\mathbb{B}$  através da equação (3.123):

$$\mathbb{B} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{B}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} (\tilde{\mathbf{B}} \mathbf{A} \mathbf{J}) \mathbf{O}^T = \xi \mathbf{O} (\tilde{\mathbf{B}} \mathbf{A}) \mathbf{O}^T = \xi (\mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{O}^T) (\mathbf{O} \mathbf{A} \mathbf{O}^T), \quad (3.129)$$

que, por intermédio das equações (3.10) e (3.14), pode ser escrita como

$$\mathbb{B} = \xi \mathbf{B} \mathbf{A} = \xi \mathbf{B} \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K} + \mathbf{I} \right) = \mathbf{B} (\mathbb{K} + \xi \mathbf{I}). \quad (3.130)$$

c) Cálculo de  $\mathbb{H}$  através da equação (3.124):

– Oldroyd-B:

$$\mathbb{H} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{O}^T = \xi (\mathbf{I} - \mathbf{A}) = -\xi (\mathbf{A} - \mathbf{I}) = -\mathbb{K}. \quad (3.131)$$

– Giesekus:

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})] \xi \mathbf{O}^T = \xi (\mathbf{I} - \mathbf{A}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbf{A} - \mathbf{I})] \\ &= -\mathbb{K} \left( \mathbf{I} + \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K} \right). \end{aligned} \quad (3.132)$$

– FENE-CR:

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{O} (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) \xi \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \xi (\mathbf{I} - \mathbf{A}) \\ &= -\frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbb{K}. \end{aligned} \quad (3.133)$$

– FENE-P:

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{O} \left( \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{\Lambda} \right) \xi \mathbf{O}^T \\ &= \xi \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{I} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{A} \right) = \xi \left[ \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{I} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K} + \mathbf{I} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.134)$$

Abaixo, apresentamos as equações com a transformação linear deslocada para os quatro modelos constitutivos:

• Oldroyd-B

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} (\mathbb{K} + \xi \mathbf{I}) - \frac{1}{W_i} \mathbb{K} \quad (3.135)$$

• Giesekus

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} (\mathbb{K} + \xi \mathbf{I}) - \frac{1}{W_i} \mathbb{K} \left( \mathbf{I} + \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K} \right) \quad (3.136)$$

• FENE-CR

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} (\mathbb{K} + \xi \mathbf{I}) - \frac{1}{W_i} \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbb{K}. \quad (3.137)$$



- FENE-P

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + 2\mathbf{B} (\mathbb{K} + \xi \mathbf{I}) + \frac{\xi}{Wi} \left[ \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{I} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K} + \mathbf{I} \right) \right] \quad (3.138)$$

Podemos ainda reduzir todas estas equações a uma única equação, que depende apenas das funções  $f$  e  $P$ , como

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + 2\mathbf{B} (\mathbb{K} + \xi \mathbf{I}) + \frac{\xi}{Wi} f \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K} + \mathbf{I} \right) P \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K} + \mathbf{I} \right). \quad (3.139)$$

### 3.3.2.2 Função $\log_d$ núcleo-conformação

Estimulado pelo método log-conformação, concebido por Fattal e Kupferman [26, 27], Afonso et al. [2] cria uma versão generalizada deste método, permitindo o uso de uma transformação logarítmica em qualquer base  $d > 0$ . Uma ampliação da formulação log-conformação original, que permitia-nos apenas o emprego do logaritmo natural  $\ln(\boldsymbol{\Lambda})$ .

Definimos a função  $\log_d$  núcleo-conformação como:

$$\mathbb{K}(\boldsymbol{\Lambda}) = \log_d(\boldsymbol{\Lambda}) = \mathbf{O} \log_d(\boldsymbol{\Lambda}) \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \mathbb{K}(\boldsymbol{\Lambda}) \mathbf{O}^T. \quad (3.140)$$

A aplicação inversa pode ser escrita como

$$\mathbf{A} = d^{\mathbb{K}}. \quad (3.141)$$

a) Cálculo de  $\mathbf{J}$  através da equação (3.112):

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbb{K}(\boldsymbol{\Lambda})}{\partial \boldsymbol{\Lambda}} = \frac{\partial \log_d(\boldsymbol{\Lambda})}{\partial \boldsymbol{\Lambda}} = \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)} \quad (3.142)$$

b) Cálculo de  $\mathbb{B}$  através da equação (3.123):

$$\mathbb{B} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{B}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{J} \mathbf{O}^T = \frac{1}{\ln(d)} \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{O}^T = \frac{1}{\ln(d)} \mathbf{B}. \quad (3.143)$$

c) Cálculo de  $\mathbb{H}$  através da equação 3.124:

– Oldroyd-B:

$$\mathbb{H} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O} = \mathbf{O} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\Lambda}) \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)} \mathbf{O}^T = \frac{1}{\ln(d)} \mathbf{O} (\boldsymbol{\Lambda}^{-1} - \mathbf{I}) \mathbf{O}^T. \quad (3.144)$$

Por (3.141), temos que  $d^{-\mathbb{K}} = \mathbf{O} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \mathbf{O}^T$ . Portanto,

$$\mathbb{H} = \frac{1}{\ln(d)} (d^{-\mathbb{K}} - \mathbf{I}) \quad (3.145)$$

– Giesekus:

$$\begin{aligned}
\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I})] \frac{\mathbf{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)} \mathbf{O}^T = \\
&= \frac{1}{\ln(d)} (\mathbf{I} - \mathbf{A}) [\mathbf{A}^{-1} + \alpha (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{-1})] = \frac{1}{\ln(d)} (\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}}) [d^{-\mathbb{K}} + \alpha (\mathbf{I} - d^{-\mathbb{K}})] = \\
&= \frac{1}{\ln(d)} d^{-\mathbb{K}} (\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}}) [\mathbf{I} + \alpha (d^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})]
\end{aligned} \tag{3.146}$$

– FENE-CR:

$$\begin{aligned}
\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{O} (\mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}) \frac{\mathbf{\Lambda}^{-1}}{\ln a} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{\ln(a)} (\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{I}) = \\
&= \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{\ln(a)} (a^{-\mathbb{K}} - \mathbf{I})
\end{aligned} \tag{3.147}$$

– FENE-P:

$$\begin{aligned}
\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{O} \left( \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{\Lambda} \right) \frac{\mathbf{\Lambda}^{-1}}{\ln(d)} \mathbf{O}^T = \\
&= \frac{1}{\ln(d)} \mathbf{O} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{\Lambda}^{-1} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{I} \right) \mathbf{O}^T = \frac{1}{\ln(d)} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{A}^{-1} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{I} \right) = \\
&= \frac{1}{\ln(d)} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} d^{-\mathbb{K}} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{I} \right)
\end{aligned} \tag{3.148}$$

Abaixo, apresentamos as equações com a transformação  $\log_d$  núcleo-conformação para os quatro modelos constitutivos:

- Oldroyd-B

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \frac{2}{\ln(d)} \mathbf{B} + \frac{1}{\ln(d) Wi} (d^{-\mathbb{K}} - \mathbf{I}) \tag{3.149}$$

- Giesekus

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \frac{2}{\ln(d)} \mathbf{B} + \frac{1}{\ln(d) Wi} d^{-\mathbb{K}} (\mathbf{I} - d^{\mathbb{K}}) [\mathbf{I} + \alpha (d^{\mathbb{K}} - \mathbf{I})] \tag{3.150}$$

- FENE-CR

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \frac{2}{\ln(d)} \mathbf{B} + \frac{1}{\ln(d) Wi} \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} (d^{-\mathbb{K}} - \mathbf{I}) \quad (3.151)$$

- FENE-P

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \frac{2}{\ln(d)} \mathbf{B} + \frac{1}{\ln(d) Wi} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} d^{-\mathbb{K}} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \mathbf{I} \right) \quad (3.152)$$

Podemos ainda reduzir todas estas equações a uma única equação, que depende apenas das funções  $f$  e  $P$ , como

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \frac{2}{\ln(d)} \mathbf{B} + \frac{f(d^{\mathbb{K}})}{\ln(a) Wi} d^{-\mathbb{K}} P(d^{\mathbb{K}}). \quad (3.153)$$

### 3.3.2.3 Função raiz $k$ -ésima núcleo-conformação

Assim como a transformação  $\log_d$  núcleo-conformação, o método núcleo-conformação também dispõe de uma versão para a decomposição do tipo raiz quadrada. Além deste caso, em particular, os autores Afonso et al. [2] propuseram algo mais geral, o uso da raiz  $k$ -ésima do tensor conformação, isto é, a raiz para qualquer potência desejada.

Definimos a função raiz  $k$ -ésima núcleo-conformação como:

$$\mathbb{K}(\mathbf{A}) = \mathbf{A}^{\frac{1}{k}} = \mathbf{O} \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \mathbf{\Lambda} \mathbf{O}^T, \quad (3.154)$$

onde  $k$  é um número inteiro qualquer.

A inversa desta transformação é representada por

$$\mathbf{A} = \mathbb{K}^k. \quad (3.155)$$

a) Cálculo de  $\mathbf{J}$  através da equação (3.112):

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbb{K}(\mathbf{\Lambda})}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \frac{\partial \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}}}{\partial \mathbf{\Lambda}} = \frac{\mathbf{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k} \quad (3.156)$$

b) Cálculo de  $\mathbb{B}$  através da equação (3.123):

$$\mathbb{B} = \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{B}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{\Lambda} \mathbf{J} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} \tilde{\mathbf{B}} \frac{\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{k}}}{k} \mathbf{O}^T = \frac{\mathbf{B} \mathbb{K}}{k} \quad (3.157)$$

c) Cálculo de  $\mathbb{H}$  através da equação (3.124):

– Oldroyd-B:

$$\begin{aligned}\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\Lambda}) \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k} \mathbf{O}^T = \frac{1}{k} \mathbf{O} \left( \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}} - \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{k}} \right) \mathbf{O}^T = \\ &= \frac{1}{k} (\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K})\end{aligned}\tag{3.158}$$

– Giesekus:

$$\begin{aligned}\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \mathbf{O} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\Lambda}) [\mathbf{I} + \alpha (\boldsymbol{\Lambda} - \mathbf{I})] \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{K} \mathbf{O}^T = \\ &= \frac{1}{K} \mathbf{O} \left( \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}} - \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{k}} \right) [\mathbf{I} + \alpha (\boldsymbol{\Lambda} - \mathbf{I})] \mathbf{O}^T = \\ &= \frac{1}{k} (\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbb{K}^k - \mathbf{I})]\end{aligned}\tag{3.159}$$

– FENE-CR:

$$\begin{aligned}\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \mathbf{O} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\Lambda}) \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k} \mathbf{O}^T = \\ &= \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \frac{1}{k} (\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K})\end{aligned}\tag{3.160}$$

– FENE-P:

$$\begin{aligned}\mathbb{H} &= \mathbf{O} \mathbf{D}_{\mathbb{H}} \mathbf{O}^T = \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbf{O} \left( \mathbf{I} - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \boldsymbol{\Lambda} \right) \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}}}{k} \mathbf{O}^T = \\ &= \frac{1}{k} \mathbf{O} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1-k}{k}} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \right) \mathbf{O}^T = \\ &= \frac{1}{k} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbb{K}^{1-k} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \mathbb{K} \right)\end{aligned}\tag{3.161}$$

Abaixo, apresentamos as equações com a transformação raiz  $k$ -ésima núcleo-conformação para os quatro modelos constitutivos:

• Oldroyd-B

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{k} \mathbf{B} \mathbb{K} + \frac{1}{kW_i} (\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K})\tag{3.162}$$

- Giesekus

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{k} \mathbf{B} \mathbb{K} + \frac{1}{kWi} \mathbb{K} (\mathbb{K}^{-k} - \mathbf{I}) [\mathbf{I} + \alpha (\mathbb{K}^k - \mathbf{I})] \quad (3.163)$$

- FENE-CR

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{k} \mathbf{B} \mathbb{K} + \frac{1}{kWi} \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} (\mathbb{K}^{1-k} - \mathbb{K}) \quad (3.164)$$

- FENE-P

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{k} \mathbf{B} \mathbb{K} + \frac{1}{kWi} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbb{K}^{1-k} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\boldsymbol{\Lambda})} \mathbb{K} \right) \quad (3.165)$$

Podemos ainda reduzir todas estas equações a uma única equação, que depende apenas das funções  $f$  e  $P$ , como

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \boldsymbol{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{k} \mathbf{B} \mathbb{K} + \frac{f(\mathbb{K}^k)}{kWi} \mathbb{K}^{1-k} P(\mathbb{K}^k). \quad (3.166)$$

### 3.4 Equivalência e diferenças entre decomposições

Nesta seção, faremos uma análise sobre possíveis equivalências, no nível teórico, existentes entre as decomposições investigadas. Mais especificamente, analisaremos as afirmações de equivalência, feitas em [2], entre as decomposições log-conformação e decomposição do tipo raiz quadrada com suas versões providas da transformação núcleo-conformação e o método padrão, que faz uso da evolução direta de  $\boldsymbol{\tau}$ , com a transformação linear deslocada núcleo-conformação. Além disso, averiguaremos se estas equivalências, ou a ausência delas, se aplicam a todos os modelos constitutivos por nós examinados.

Este estudo comparativo justifica-se pelas afirmações de similaridades teóricas entre decomposições, como exposto em [2], ainda não muito bem compreendidas. Lembremos, por exemplo, que, enquanto a decomposição do tipo raiz quadrada em [4] é tida como uma boa alternativa de estabilização, esta mesma técnica em [2] é vista de maneira desfavorável. Assim, este estudo pretende esclarecer alguns equívocos que circundam estas decomposições.

#### 3.4.1 O método padrão e a transformação linear deslocada núcleo-conformação

Nesta subseção, mostraremos a equivalência entre as equações (3.135) e (2.25).

Considerando que para a construção da equação (3.135) foi empregue a decomposição (3.13), na qual deixamos de trabalhar diretamente com  $\nabla \mathbf{u}$ , temos que, de alguma ma-

neira, retornar à situação original. Assim, numa tentativa de conquistar esta condição, construímos o seguinte sistema, com base em (3.13)

$$\begin{cases} \nabla \mathbf{u} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} \\ \nabla \mathbf{u}^T = -\mathbf{\Omega} + \mathbf{B} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N} \end{cases} \quad (3.167)$$

que fornece-nos expressões para  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{B}$ , envolvendo  $\nabla \mathbf{u}$ , dadas, respectivamente, por

$$\mathbf{\Omega} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{1}{2} (\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}) \quad (3.168)$$

e

$$\mathbf{B} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{1}{2} (\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}). \quad (3.169)$$

Por simplicidade, resolveremos as duas parcelas principais,  $\mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega}$  e  $2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})$  de (3.135), separadamente. Note que, estes termos são os únicos que necessitam ser alterados a fim de alcançarmos a equivalência. Outro ponto importante a ser destacado nos cálculos apresentados a seguir, é o seguinte artifício usado no cálculo de  $2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})$ , isto é, escrevemos este termo como

$$2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) = \mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) + (\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})\mathbf{B}, \quad (3.170)$$

que segue do fato de  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{A}$  comutarem. De fato, a relação (3.126) pode ser escrita como

$$\xi\mathbf{A} = \mathbb{K} + \xi\mathbf{I}. \quad (3.171)$$

Logo,

$$\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) = \mathbf{B}\xi\mathbf{A} = \xi\mathbf{A}\mathbf{B} = (\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})\mathbf{B}. \quad (3.172)$$

Substituindo as equações (3.168) e (3.169) nas parcelas  $\mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega}$  e  $2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})$ , respectivamente, obtemos

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega} &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}\mathbb{K} - \nabla \mathbf{u}^T\mathbb{K} - \mathbb{K}\nabla \mathbf{u} + \mathbb{K}\nabla \mathbf{u}^T) - \frac{1}{2} (\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})\mathbb{K} \\ &\quad + \frac{1}{2}\mathbb{K}(\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}) \end{aligned} \quad (3.173)$$

e

$$\begin{aligned} 2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) &= \mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) + (\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})\mathbf{B} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}\mathbb{K} + \nabla \mathbf{u}^T\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla \mathbf{u} + \mathbb{K}\nabla \mathbf{u}^T) \\ &\quad - \frac{1}{2} (\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N})\mathbb{K} - \frac{1}{2}\mathbb{K}(\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}) + 2\xi\mathbf{D} - \xi(\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}) \end{aligned} \quad (3.174)$$

Somando as equações (3.173) e (3.174), resulta em

$$\boldsymbol{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\boldsymbol{\Omega} + 2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) = \nabla\mathbf{u}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + 2\xi\mathbf{D} + (\mathbb{K}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N} - \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}\mathbb{K}) - \xi(\mathbf{N}\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}), \quad (3.175)$$

que também pode ser escrita como

$$\boldsymbol{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\boldsymbol{\Omega} + 2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) = \nabla\mathbf{u}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + 2\xi\mathbf{D} - \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) + (\mathbb{K} + \xi\mathbf{I})\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}. \quad (3.176)$$

Recordando a relação (3.171), podemos escrever (3.176) como

$$\boldsymbol{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\boldsymbol{\Omega} + 2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) = \nabla\mathbf{u}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + 2\xi\mathbf{D} - \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1}\xi\mathbf{A} + \xi\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{N}, \quad (3.177)$$

que implica em

$$\boldsymbol{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\boldsymbol{\Omega} + 2\mathbf{B}(\mathbb{K} + \xi\mathbf{I}) = \nabla\mathbf{u}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + 2\xi\mathbf{D}. \quad (3.178)$$

Assim, de (3.139), a equação resultante será

$$\frac{\partial\mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}) = \nabla\mathbf{u}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + 2\xi\mathbf{D} + \frac{\xi}{Wi}f\left(\frac{1}{\xi}\mathbb{K} + \mathbf{I}\right)P\left(\frac{1}{\xi}\mathbb{K} + \mathbf{I}\right). \quad (3.179)$$

Em particular para o modelo Oldroyd-B, temos

$$\frac{\partial\mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}) = \nabla\mathbf{u}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + 2\xi\mathbf{D} - \frac{1}{Wi}\mathbb{K}, \quad (3.180)$$

que é exatamente igual à equação (2.25) para quando tomamos  $\mathbb{K} = \boldsymbol{\tau}$ . Portanto, tendo em vista nosso critério de avaliação, consideramos a equação (3.135) equivalente à equação original padrão (2.25). Embora, logicamente, possa haver diferenças numéricas, uma vez que estas são calculadas por procedimentos diferentes. Não faremos esta análise para os outros modelos constitutivos, uma vez que, como já mencionado, a relação (3.126) só faz sentido para os modelos Oldroyd-B e Giesekus.

### 3.4.2 Os métodos log-conformação e $\log_d$ núcleo-conformação

Nesta subseção, analisaremos a equivalência entre os métodos log-conformação original [26, 27] e  $\log_d$  núcleo-conformação para  $d = e$ . Afonso et al. [2] citam esta equivalência entre os métodos para o modelo Oldroyd-B, e apresenta a equação constitutiva para a versão log-conformação (3.32), que segundo eles foi deduzida através da substituição de  $d = e$  na equação da transformação logarítmica para uma base qualquer. Assim, o objetivo desta análise será verificar a equivalência mencionada para o modelo Oldroyd-B, e, por extensão, para os outros modelos constitutivos.

Substituindo  $d = e$  na equação (3.153), obtemos

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} + \frac{f(e^{\mathbb{K}})}{Wi} e^{-\mathbb{K}} P(e^{\mathbb{K}}). \quad (3.181)$$

A equação (3.181) é exatamente igual à equação (3.32), da formulação original log-conformação. Se trocamos em (3.181),  $\mathbb{K}$  por  $\Psi$ , obtemos a equação (3.32). Essa equivalência entre as equações já era esperada, uma vez que boa parte do desenvolvimento do método núcleo-conformação segue o que fora feito em [26, 27].

### 3.4.3 Os métodos decomposição do tipo raiz quadrada e raiz $k$ -ésima núcleo-conformação

Por fim, a última equivalência que vamos investigar, é entre os métodos decomposição do tipo raiz quadrada e a versão raiz quadrada da formulação núcleo-conformação, ou seja, buscaremos uma correspondência entre as equações (3.63) e (3.166) para o caso em que  $k = 2$ . Para tanto, escrevemos, primeiramente, a equação (3.166) com  $k = 2$ , que fornece-nos

$$\frac{\partial \mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbb{K}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} \mathbb{K} + \frac{f(\mathbb{K}^2)}{2Wi} \mathbb{K}^{-1} P(\mathbb{K}^2). \quad (3.182)$$

Uma breve análise desta equação, fornece-nos informações sobre quais os passos necessários para se atingir a estrutura da equação (3.63). Os únicos termos que necessitam ser modificados são  $\mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{B} \mathbb{K}$ , semelhante ao que foi efetuado no estudo de equivalência entre as equações padrão e transformação linear deslocada núcleo-conformação. Outra ideia análoga, é o uso da comutatividade entre a matriz  $\mathbb{K}$  e  $\mathbf{B}$ , isto é,

$$\mathbf{B} \mathbb{K} = \mathbb{K} \mathbf{B}, \quad (3.183)$$

que se justifica pela comutatividade entre  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$ . Como já fizemos o cálculo da parcela  $\mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega}$ , precisamos somente calcular  $\mathbb{K} \mathbf{B}$ . Assim, aproveitando-se de (3.169), temos

$$\mathbb{K} \mathbf{B} = \frac{1}{2} (\mathbb{K} \nabla \mathbf{u} + \mathbb{K} \nabla \mathbf{u}^T) - \frac{1}{2} \mathbb{K} (\mathbf{N} \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{N}). \quad (3.184)$$

Somando as equações (3.173) e (3.184), resulta em

$$\mathbf{\Omega} \mathbb{K} - \mathbb{K} \mathbf{\Omega} + \mathbb{K} \mathbf{B} = \mathbb{K} \nabla \mathbf{u}^T + \mathbb{K} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{N} + \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u}^T) \mathbb{K} - \frac{1}{2} (\mathbf{N} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1} \mathbf{N}) \mathbb{K}. \quad (3.185)$$

A partir da relação inversa (3.155) e sabendo-se que  $k = 2$ , temos que

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbb{K}^{-2}. \quad (3.186)$$



Então, substituindo (3.186) em (3.185), obtemos

$$\mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega} + \mathbb{K}\mathbf{B} = \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + \mathbb{K}^{-1}\mathbf{N} + \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^T)\mathbb{K} - \frac{1}{2}(\mathbf{N}\mathbb{K}^{-2} + \mathbb{K}^{-2}\mathbf{N})\mathbb{K}, \quad (3.187)$$

que pode ser escrita como

$$\mathbf{\Omega}\mathbb{K} - \mathbb{K}\mathbf{\Omega} + \mathbb{K}\mathbf{B} = \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + \left[ \mathbb{K}^{-1}\mathbf{N}\mathbb{K}^{-1} + \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^T) - \frac{1}{2}(\mathbf{N}\mathbb{K}^{-2} + \mathbb{K}^{-2}\mathbf{N}) \right] \mathbb{K}. \quad (3.188)$$

Agora, observemos que as três parcelas  $\mathbb{K}^{-1}\mathbf{N}\mathbb{K}^{-1}$ ,  $\frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^T)$  e  $\frac{1}{2}(\mathbf{N}\mathbb{K}^{-2} + \mathbb{K}^{-2}\mathbf{N})$ , que figuram no segundo membro da equação (3.188), são antissimétricas, então sua soma também resultará em uma matriz antissimétrica, que denotaremos por  $\mathbf{P}$ , isto é,

$$\mathbf{P} = \mathbb{K}^{-1}\mathbf{N}\mathbb{K}^{-1} + \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^T) - \frac{1}{2}(\mathbf{N}\mathbb{K}^{-2} + \mathbb{K}^{-2}\mathbf{N}). \quad (3.189)$$

Assim, a equação resultante será

$$\frac{\partial\mathbb{K}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbb{K}) = \mathbf{P}\mathbb{K} + \mathbb{K}\nabla\mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbb{K}^2)}{2W_i}\mathbb{K}^{-1}P(\mathbb{K}^2), \quad (3.190)$$

que representa a equação (3.63) de maneira parcial, uma vez que a matriz antissimétrica  $\mathbf{P}$ , presente na equação (3.190), é diferente da matriz antissimétrica  $\mathbf{G}$ , obtida da equação (3.80) (ver Apêndice A). Portanto, seguindo nosso critério de equivalência, as equações (3.166) e (3.63) não são equivalentes. Embora, possam apresentar semelhanças numéricas.

# Método Numérico

## 4.1 Método de Projeção: versão incremental

A resolução do conjunto de equações (2.8), (2.9) e (2.25)<sup>1</sup> pode ser feita de duas maneiras. Resolvemos estas equações de maneira simultânea, calculando  $\mathbf{u}$ ,  $p$  e  $\boldsymbol{\tau}$  em um mesmo processo, ou calculamos estas variáveis de maneira separada e sucessiva. Estas duas maneiras dão origem à duas classes de métodos: acoplados e segregados, respectivamente. O método usado neste trabalho é o método de projeção, proposto por Chorin [15, 16] e Temam [63], que pertence à classe dos métodos segregados. O leitor interessado em mais detalhes sobre o método de projeção pode seguir os trabalhos de Quarteroni et al. [58] e Broun et al. [10].

Primeiramente, apresentamos a discretização temporal das equações (2.8) e (2.9) por um método  $\theta$ , da seguinte forma:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) = -\nabla p^{n+1} + \frac{\beta}{Re} [(1 - \theta) \nabla^2 \mathbf{u}^n + \theta \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}] + \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}^{n+1} \quad (4.1)$$

e

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (4.2)$$

onde  $\delta t$  é o passo temporal e  $\theta \in [0, 1]$ , determina o método a ser empregue (ver [42]). Os termos  $\nabla \cdot (\mathbf{u}^n \mathbf{u}^n)$  e  $\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}$  na equação (4.1) são discretizados em instantes de tempos anteriores a  $t_{n+1}$ . Vale ressaltar que o termo convectivo é discretizado explicitamente pois estamos interessados em escoamentos a baixos Reynolds. Além disso, para evitar o acoplamento das variáveis  $\mathbf{u}^{n+1}$ ,  $p^{n+1}$  e  $\boldsymbol{\tau}^{n+1}$ , o termo do tensor não-newtoniano também é discretizado de forma explícita. A seguir apresentamos o Teorema da Decomposição de Helmholtz-Hodge [17].

<sup>1</sup>Embora tenhamos particularizado o modelo Oldroyd-B, isto vale para os demais modelos constitutivos

**Teorema 4.1.** (*Decomposição de Helmholtz-Hodge*) Seja  $\Omega$  uma região do espaço com fronteira suave  $\partial\Omega$  e  $\tilde{\mathbf{u}}$  um campo vetorial definido em  $\Omega$ . Então, a decomposição de  $\tilde{\mathbf{u}}$  na forma

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \nabla\psi \quad (4.3)$$

existe e é única, sendo  $\psi$  um campo escalar também definido em  $\Omega$ , e um campo vetorial solenoidal e paralelo a  $\partial\Omega$ , isto é,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.4)$$

e, ao longo de  $\partial\Omega$ ,

$$\mathbf{u} \cdot \vec{n} = 0, \quad (4.5)$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor normal exterior a  $\partial\Omega$ .

O método de projeção considerado neste trabalho é conhecido como método de projeção incremental, que foi bem discutido em [57]. Este método foi adaptado para a solução de problemas envolvendo uma equação constitutiva para fluidos viscoelásticos. Em resumo, primeiramente procedemos como no caso de fluidos newtonianos, isto é, desacoplamos os campos  $\mathbf{u}$  e  $p$  das equações (4.1) e (4.2). A seguir, conhecido os valores intermediários do método de projeção, obtemos o campo de velocidade e pressão no nível  $t_{n+1}$ . Finalmente, obtemos o tensor não-newtoniano  $\boldsymbol{\tau}^{n+1}$ .

Com o objetivo de descrever o procedimento acima vamos considerar os seguintes passos:

1. Determinar um campo intermediário  $\tilde{\mathbf{u}}$ : considerando que  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}$  tenha sido obtido, e adotando  $\theta = 1$  (método de Euler explícito) em (4.1), obtemos uma equação para  $\tilde{\mathbf{u}}$ :

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^n}{\delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) = -\nabla \tilde{p}^{n+1} + \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}. \quad (4.6)$$

A explicação para o cálculo de  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}$  será apresentada a seguir.

2. Projeção: neste passo, utilizando o Teorema 4.1, temos:

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{u}^{n+1} + \nabla\psi^{n+1} \quad (4.7)$$

e

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (4.8)$$

com

$$\mathbf{u}^{n+1} \cdot \vec{n} = 0 \quad (4.9)$$

nas superfícies de contorno. O sistema acima pode ser resolvido equivalentemente em dois passos. Primeiramente, resolver

$$\nabla^2 \psi^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} \quad (4.10)$$

com condições de contorno do tipo Dirichlet e/ou Neumann, conforme o tipo de contorno, isto é,

- Fronteiras rígidas e injetores

$$\frac{\partial \psi^{n+1}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (4.11)$$

- Ejetores

$$\psi^{n+1} = 0. \quad (4.12)$$

A seguir, obter  $\mathbf{u}^{n+1}$  como:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \nabla \psi^{n+1}. \quad (4.13)$$

3. Atualizar a pressão: Substituir a equação (4.7) em (4.6) eliminando  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  e comparando com (4.1) com  $\theta = 1$ , obtemos a fórmula de atualização da pressão

$$p^{n+1} = \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{\beta}{Re} \nabla^2 \psi^{n+1}. \quad (4.14)$$

Como já comentado anteriormente, no cálculo do campo intermediário  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ , já teremos um valor para o tensor  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^{n+1}$ . Esse termo, ou será obtido diretamente da equação constitutiva que define  $\boldsymbol{\tau}$ , ou pela relação com os tensores obtidos pelas decomposições matriciais discutidas no Capítulo 3. A discretização temporal empregada nesse processo será o método de Runge-Kutta de segunda ordem (RK21) [11]. Vamos ilustrar esse processo da seguinte forma. Consideremos a equação

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} = F(\mathbf{u}, \mathbf{Z}), \quad (4.15)$$

onde  $\mathbf{Z}$ , um tensor genérico, representa os tensores referentes à contribuição não-newtoniana, incluindo os tensores das decomposições matriciais, e  $F$  é uma função definida de acordo com a decomposição e o modelo constitutivo utilizado, ou seja,

- Tensor polimérico: fazendo  $\mathbf{Z} = \boldsymbol{\tau}$ , temos da equação (2.25) que

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{Z}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Z}) + \nabla \mathbf{u}\mathbf{Z} + \mathbf{Z}\nabla \mathbf{u}^T + 2\xi \mathbf{D} - \frac{1}{W_i} \mathbf{Z} \quad (4.16)$$

- Tensor conformação: tomando  $\mathbf{Z} = \mathbf{A}$ , temos da equação (2.10) que

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{Z}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Z}) + \nabla \mathbf{u}\mathbf{Z} + \mathbf{Z}\nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Z})}{W_i} P(\mathbf{Z}). \quad (4.17)$$

- Log-conformação: fazendo  $\mathbf{Z} = \mathbf{\Psi}$ , obtemos  $F$  pela equação (3.32)

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{Z}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Z}) + (\mathbf{\Omega}\mathbf{Z} - \mathbf{Z}\mathbf{\Omega}) + 2\mathbf{B} + \frac{f(e^{\mathbf{Z}})}{W_i} e^{-\mathbf{Z}} P(e^{\mathbf{Z}}). \quad (4.18)$$

- Decomposição do tipo raiz quadrada: tomando  $\mathbf{Z} = \mathbf{Q}$ , obtemos a expressão de  $F$  através da equação (3.63)

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{Z}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Z}) + \mathbf{G}\mathbf{Z} + \mathbf{Z}\nabla \mathbf{u}^T + \frac{f(\mathbf{Z}^2)}{2W_i} \mathbf{Z}^{-1} P(\mathbf{Z}^2), \quad (4.19)$$

- Núcleo-conformação: fazendo  $\mathbf{Z} = \mathbb{K}$ , obtemos  $F$  pela equação (3.122)

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{Z}) = -\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{Z}) + \mathbf{\Omega}\mathbf{Z} - \mathbf{Z}\mathbf{\Omega} + 2\mathbf{B} + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}. \quad (4.20)$$

Portanto, na primeira etapa do método RK21, a aplicação do método de Euler explícito, calculamos o tensor previsor  $\tilde{\mathbf{Z}}^{n+1}$ , da forma

$$\frac{\tilde{\mathbf{Z}}^{n+1} - \mathbf{Z}^n}{\delta t} = F(\mathbf{u}^n, \mathbf{Z}^n). \quad (4.21)$$

Na segunda etapa, semelhante ao que é feito na regra do trapézio para equações diferenciais ordinárias, determinamos o tensor corretor  $\mathbf{Z}^{n+1}$  por

$$\frac{\mathbf{Z}^{n+1} - \mathbf{Z}^n}{\delta t} = \frac{1}{2} \left[ F(\mathbf{u}^n, \mathbf{Z}^n) + F(\mathbf{u}^{n+1}, \tilde{\mathbf{Z}}^{n+1}) \right]. \quad (4.22)$$

O uso desta segunda etapa, corretora, evita que valores defasados no tempo sejam usados novamente em partes do algoritmo.

## 4.2 Ciclo computacional

Supondo que  $\mathbf{u}^n$ ,  $p^n$  e  $\boldsymbol{\tau}^n$  sejam conhecidos no tempo  $t = t_n$ , apresentamos, no que segue, o ciclo computacional do método de projeção, descrito anteriormente, acrescido das decomposições matriciais aplicadas ao tensor conformação, permitindo o cálculo de  $\mathbf{u}^{n+1}$ ,  $p^{n+1}$  e  $\boldsymbol{\tau}^{n+1}$  no tempo  $t_{n+1} = t_n + \delta t$ .

**Passo 1:** Cálculo do tensor conformação  $\mathbf{A}^n$  a partir de  $\boldsymbol{\tau}^n$  pela relação

- Oldroyd-B e Giesekus: equação (2.19)
- FENE-CR: equação (2.20)
- FENE-P: equação (2.21)

**Passo 2:** Cálculo de  $\mathbf{Z}^n$  a partir de uma decomposição matricial aplicada ao tensor conformação  $\mathbf{A}^n$ , dada por

- Tensor conformação: equação (2.10)
- Log-conformação: equação (3.20)
- Decomposição do tipo raiz quadrada: equação (3.41)
- Núcleo-conformação: equação (3.108)

**Passo 3:** Cálculo do tensor  $\tilde{\mathbf{Z}}^{n+1}$  pela equação (4.21)

**Passo 4:** Cálculo da velocidade intermediária  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  pela equação (4.6) com condição de contorno (4.9).

**Passo 5:** Cálculo do potencial auxiliar  $\psi^{n+1}$  pela equação (4.10) com condições de contorno (4.11) e (4.12).

**Passo 6:** Cálculo da velocidade  $\mathbf{u}^{n+1}$  pela equação (4.13)

**Passo 7:** Cálculo da pressão  $p^{n+1}$  pela equação (4.14)

**Passo 8:** Cálculo do tensor genérico  $\mathbf{Z}^{n+1}$  pela equação (4.22)

**Passo 9:** Construção do tensor conformação  $\mathbf{A}^{n+1}$  pela relação

- Log-conformação: equação (3.19)
- Decomposição do tipo raiz quadrada: equação (3.43)
- Núcleo-conformação:
  - \* Linear deslocada: equação (3.127)
  - \*  $Log_d$ : equação (3.141)
  - \* Raiz  $k$ -ésima: equação (3.155)

**Passo 10:** Construção do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}^{n+1}$  pela relação inversa com  $\mathbf{A}$

- Oldroyd-B e Giesekus: equação (2.19)
- FENE-CR: equação (2.20)
- FENE-P: equação (2.21)

---

**Observação 4.1.** *Para o método de decomposição do tipo raiz quadrada o segundo passo do ciclo computacional é aplicado uma única vez, somente no ciclo zero, visto que para o passo seguinte podemos usar o tensor  $\mathbf{Q}^n$  resultante do cálculo de (4.22) do segundo passo do método RK21 do ciclo anterior. Para as demais decomposições, se faz necessário este passo para todo  $t = t_n$ , uma vez que, mesmo dispondo de  $\mathbf{Z}^n$ , obtido por (4.22), necessitamos calcular os tensores  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{\Omega}$ , do método log-conformação, e  $\mathbb{B}$  e  $\mathbb{H}$ , do método núcleo-conformação, que fazem uso dos autovalores e autovetores de  $\mathbf{A}$  que, por sua vez, usam decomposições matriciais.*

**Observação 4.2.** *O método usado para o cálculo numérico dos autovalores e autovetores nas decomposições matriciais é o método de Jacobi [56].*

## Resultados numéricos

### 5.1 Verificação do código: simulação em um canal totalmente desenvolvido

Nesta seção, faremos a verificação das implementações dos métodos log-conformação, decomposição do tipo raiz quadrada e núcleo-conformação para as transformações linear deslocada e raiz quadrada. Note que, das transformações apresentadas para o método núcleo-conformação, dispensamos a verificação da transformação do logaritmo natural, visto que, como certificado no Capítulo 3, ver equação (3.181), esta transformação é equivalente ao método log-conformação original, equação (3.32). Já a transformação linear deslocada núcleo-conformação, embora tenhamos constatado a equivalência com o método padrão, faremos a verificação desta, uma vez que estes métodos são calculados de maneiras diferentes. Para as simulações o caso teste de um escoamento entre placas paralelas será utilizado (ver Figura 4). A verificação será feita através da comparação entre a solução calculada com o emprego das decomposições matriciais e a solução analítica do problema. Mais precisamente, apresentaremos os erros relativos e o cálculo da taxa de convergência espacial de cada uma das técnicas. O modelo constitutivo adotado em todas as simulações será o modelo Oldroyd-B. Ademais, realizaremos um estudo preliminar da eficiência computacional, precisão e estabilidade dos métodos, que contribuirá para o posterior estudo destes quesitos no problema da cavidade. Além dos métodos de estabilização, também apresentamos os resultados com o método padrão, desprovido de decomposições.

A partir de agora, denotaremos os métodos padrão, log-conformação, decomposição do tipo raiz quadrada, transformação linear deslocada núcleo-conformação e a versão raiz quadrada da transformação raiz  $k$ -ésima núcleo-conformação, por Standard, Ln, Square-root, Kernel-linear e Kernel-root, respectivamente.



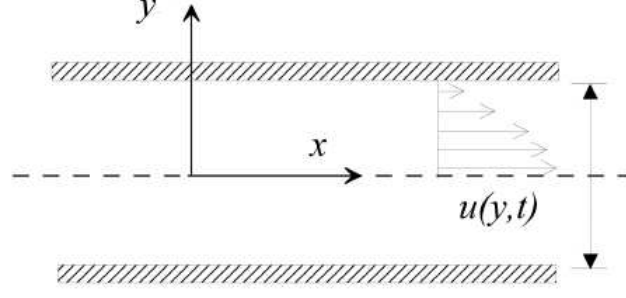


Figura 4: Escoamento entre placas paralelas. Fonte: [45]

Consideremos um escoamento em um canal de dimensões  $5H \times H$ , onde  $H$  é a largura do canal e  $5H$  o seu comprimento. Em todas as simulações tomamos  $H = 1$ . Além disso, empregamos na entrada de fluido as soluções analíticas das componentes  $u$  e  $v$  da velocidade  $\mathbf{u}$  e dos termos  $\tau_{11}$ ,  $\tau_{12}$  e  $\tau_{22}$  do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ , dadas respectivamente por

$$u(y) = 4U \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right) \text{ e } v = 0, \quad (5.1)$$

$$\tau_{11}(y) = \frac{2Wi}{Re} (1 - \beta) \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2, \quad \tau_{12}(y) = \frac{1}{Re} (1 - \beta) \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) \text{ e } \tau_{22} = 0. \quad (5.2)$$

Após o cálculo de  $\boldsymbol{\tau}$  nesta região, os valores do tensor conformação  $\mathbf{A}$  na região de entrada de fluido são obtidos mediante a relação (2.24) entre os tensores  $\mathbf{A}$  e  $\boldsymbol{\tau}$ . Finalmente, os valores de  $\mathbf{A}$  são transferidos para os tensores das decomposições, mediante a relação existente entre  $\mathbf{A}$  e cada um destes tensores. O mesmo raciocínio se aplica ao cálculo na saída de fluido do domínio, com a equação (2.39), isto é, calculamos  $\boldsymbol{\tau}$  nesta região com o método Standard, e depois, sucessivamente, transferimos este valor para o tensor conformação  $\mathbf{A}$ , que, por sua vez, proporciona o cálculo dos tensores das decomposições matriciais. No contorno rígido, empregamos o cálculo dos tensores com as equações constitutivas simplificadas pelo anulamento das velocidades tangencial  $u_{\vec{t}}$  e normal  $u_{\vec{n}}$  à fronteira, equação (2.35) e (2.36), respectivamente. Estas simplificações são aplicadas tanto à equação do tensor polimérico (2.25), como para as equações dos métodos com as decomposições matriciais. Para mais detalhes sobre estas equações ver Apêndice B.

Os testes foram executados em duas malhas diferentes  $M_1$  ( $\delta h = 0.05$ ,  $20 \times 100$ ) e  $M_2$  ( $\delta h = 0.025$ ,  $40 \times 200$ ), onde  $\delta h$  é o passo espacial. O passo temporal utilizado é  $\delta t = 0.001$  em todas as simulações realizadas.

Para o cálculo da taxa de convergência espacial usamos a equação

$$O(.) = \frac{\ln \left( \frac{E(.)^{M_1}}{E(.)^{M_2}} \right)}{\ln(2)}, \quad (5.3)$$

onde  $(.)^{M_i}$  representa a solução aproximada das variáveis analisadas, referente à malha  $M_i$ , com  $i = 1, 2$ , e  $E(.)^{M_i}$  é o erro relativo concernente a esta solução. Este erro é calculado usando a norma  $L_2$ , ou norma euclidiana, da seguinte maneira

$$E(.) = \frac{\| (.)^{M_i} - (.)^{exata} \|_2}{\| (.)^{exata} \|_2}, \quad (5.4)$$

onde  $(.)^{exata}$  representa a solução analítica da variável selecionada. Os parâmetros básicos usados nas simulações são  $Re = 0.01$  e  $\beta = 0.5$ . Os valores do número de Weissenberg utilizados nos testes são  $Wi = 0.1, 1, 2$  e  $3$ , obtidos mediante a variação do tempo de relaxação  $\lambda$ . Os resultados apresentados foram selecionados fazendo-se um corte vertical no centro do canal, ou seja, fixamos  $x = 2.5H$ , e variamos o valor de  $y$ .

As Tabelas 5.1 e 5.2, apresentam os erros relativos e a taxa de convergência da componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  do tensor polimérico, com  $Wi = 0.1$  e  $Wi = 1$ , respectivamente. As malhas empregues no cálculo dos erros e taxas de convergência foram  $M_1$  e  $M_2$ . Os valores apresentados foram coletados no tempo adimensional  $t = 50$ , para todos os métodos de estabilização, e as decomposições matriciais, especificados anteriormente, inclusive o método Standard. Para os valores  $Wi = 0.1$  e  $1$ , todos os métodos apresentaram exatamente os mesmos resultados. Além disso, o refinamento de malha, de  $M_1$  para  $M_2$ , ocasionou em uma diminuição dos erros para todas as variáveis analisadas. Isto pode ser verificado pela taxa de convergência espacial para todos os métodos, na qual temos apenas valores positivos. Enquanto a taxa de convergência espacial para a velocidade é próxima de 2, para a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimérico este valor é reduzido, sendo um pouco maior do que 1.

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$1.51 \times 10^{-3}$	$3.81 \times 10^{-4}$	1.98	$1.34 \times 10^{-2}$	$5.46 \times 10^{-3}$	1.29
Ln	$1.51 \times 10^{-3}$	$3.81 \times 10^{-4}$	1.98	$1.34 \times 10^{-2}$	$5.46 \times 10^{-3}$	1.29
Square-root	$1.51 \times 10^{-3}$	$3.81 \times 10^{-4}$	1.98	$1.34 \times 10^{-2}$	$5.46 \times 10^{-3}$	1.29
Kernel-linear	$1.51 \times 10^{-3}$	$3.81 \times 10^{-4}$	1.98	$1.34 \times 10^{-2}$	$5.46 \times 10^{-3}$	1.29
Kernel-root	$1.51 \times 10^{-3}$	$3.81 \times 10^{-4}$	1.98	$1.34 \times 10^{-2}$	$5.46 \times 10^{-3}$	1.29

Tabela 5.1: Erros e taxa de convergência espacial para a componente  $u$  da velocidade e a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimerico no tempo  $t = 50$  e  $Wi = 0.1$ .

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$1.52 \times 10^{-3}$	$3.86 \times 10^{-4}$	1.97	$1.33 \times 10^{-2}$	$5.45 \times 10^{-3}$	1.28
Ln	$1.52 \times 10^{-3}$	$3.87 \times 10^{-4}$	1.97	$1.33 \times 10^{-2}$	$5.45 \times 10^{-3}$	1.28
Square-root	$1.52 \times 10^{-3}$	$3.86 \times 10^{-4}$	1.97	$1.33 \times 10^{-2}$	$5.45 \times 10^{-3}$	1.28
Kernel-linear	$1.52 \times 10^{-3}$	$3.87 \times 10^{-4}$	1.97	$1.33 \times 10^{-2}$	$5.45 \times 10^{-3}$	1.28
Kernel-root	$1.52 \times 10^{-3}$	$3.86 \times 10^{-4}$	1.97	$1.33 \times 10^{-2}$	$5.45 \times 10^{-3}$	1.28

Tabela 5.2: Erros e taxa de convergência espacial para a componente  $u$  da velocidade e a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimerico no tempo  $t = 50$  e  $Wi = 1$ .

Os resultados com o emprego de altos números de Weissenberg,  $Wi = 2$  e  $Wi = 3$ , são apresentados nas Tabelas 5.3 e 5.4, respectivamente. Estes resultados apresentam comportamentos diferentes entre os métodos e entre as variáveis analisadas, a menos dos métodos Standard e Kernel-linear, que geraram os mesmos erros e, conseqüentemente, as mesmas taxas de convergência. Além disso, ambos deixam de fornecer resultados para  $t > 45$ . A Figura 5 mostra-nos o perfil da velocidade  $u(y)$  dos métodos Standard e Kernel-linear no instante de tempo  $t = 40$  para  $Wi = 3.0$  e malha  $M_2$ . Novamente, constatamos similaridade entre os métodos. Este comportamento observado está em conformidade com a equivalência teórica entre estes métodos, demonstrada no Capítulo 3. Portanto, embora sejam calculados de maneira distinta, os resultados numéricos dos métodos Standard e Kernel-linear mostram-se, também, compatíveis numericamente.

Fazendo-se um estudo pormenorizado dos erros, observamos que os maiores erros, para altos Weissenberg, pertencem ao método Kernel-root, tanto para  $Wi = 2$  como  $Wi = 3$ . Para  $Wi = 2$ , algo que chama-nos a atenção na Tabela 5.3, são os valores negativos da taxa de convergência espacial do método Kernel-root. Isto nos informa que ao passarmos da malha  $M_1$  para  $M_2$ , o método Kernel-root não diminui os erros relativos. Além disso, os métodos com os menores erros para  $Wi = 2$  são os métodos Standard e Kernel-linear, seguido do método Ln.

Finalmente, para  $Wi = 3$ , o método Square-root se sobressai aos demais métodos, considerando os erros da velocidade  $u$ . Por outro lado, o método Ln apresenta os menores erros quando tratamos da componente  $\tau_{11}$  do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ . Novamente, observamos na Tabela 5.4 a presença de valores negativos para a taxa de convergência espacial, agora, além do método Kernel-root, também para o método Ln. Estes, informam-nos que não há uma diminuição nos erros com o emprego de um refinamento de malha. Entretanto, algo notório, em meio a tantos valores negativos para a taxa de convergência espacial, são os valores positivos para o método Square-root. Uma análise no perfil de velocidade gerado pelo método Square-root revelou-nos, de fato, haver um melhor resultado para este método (ver Figura 6).

A omissão de erros para o método Standard e Kernel-linear com  $Wi = 3$  e malha  $M_2$ , na Tabela 5.4, não significa que estes não geraram resultados em momento algum, mas,

apenas, deixaram de produzir valores a partir de um determinado tempo, que conforme já indicado é  $t > 45$ . Uma análise pormenorizada desta dificuldade revelou-nos haver um crescimento ilimitado das principais componentes da equação do tensor polimérico (2.25), deformação, convecção e termo fonte, desencadeado por uma explosão nos valores dos termos convectivos.

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$1.19 \times 10^{-3}$	$2.87 \times 10^{-4}$	2.05	$1.08 \times 10^{-2}$	$4.89 \times 10^{-3}$	1.14
Ln	$1.22 \times 10^{-3}$	$2.87 \times 10^{-4}$	2.08	$1.09 \times 10^{-2}$	$5.01 \times 10^{-3}$	1.12
Square-root	$1.48 \times 10^{-3}$	$3.44 \times 10^{-4}$	2.10	$2.96 \times 10^{-1}$	$7.62 \times 10^{-2}$	1.95
Kernel-linear	$1.19 \times 10^{-3}$	$2.87 \times 10^{-4}$	2.05	$1.08 \times 10^{-2}$	$4.89 \times 10^{-3}$	1.14
Kernel-root	$1.22 \times 10^{-3}$	$1.10 \times 10^{-2}$	-4.11	$1.08 \times 10^{-2}$	$1.18 \times 10^{-1}$	-4.68

Tabela 5.3: Erros e taxa de convergência espacial para a componente  $u$  da velocidade e a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimerico no tempo  $t = 50$  e  $Wi = 2$ .

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$6.99 \times 10^{-3}$	—	—	$9.82 \times 10^{-2}$	—	—
Ln	$6.02 \times 10^{-3}$	$1.94 \times 10^{-2}$	-1.68	$8.35 \times 10^{-2}$	$1.81 \times 10^{-1}$	-1.11
Square-root	$1.48 \times 10^{-3}$	$3.54 \times 10^{-4}$	2.06	$3.52 \times 10^{-1}$	$2.36 \times 10^{-1}$	0.57
Kernel-linear	$6.99 \times 10^{-3}$	—	—	$9.82 \times 10^{-2}$	—	—
Kernel-root	$1.47 \times 10^{-2}$	$2.11 \times 10^{-2}$	-3.80	$3.63 \times 10^{-1}$	$2.78 \times 10^{-1}$	-4.37

Tabela 5.4: Erros e taxa de convergência espacial para a componente  $u$  da velocidade e a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimerico no tempo  $t = 50$  e  $Wi = 3$ .

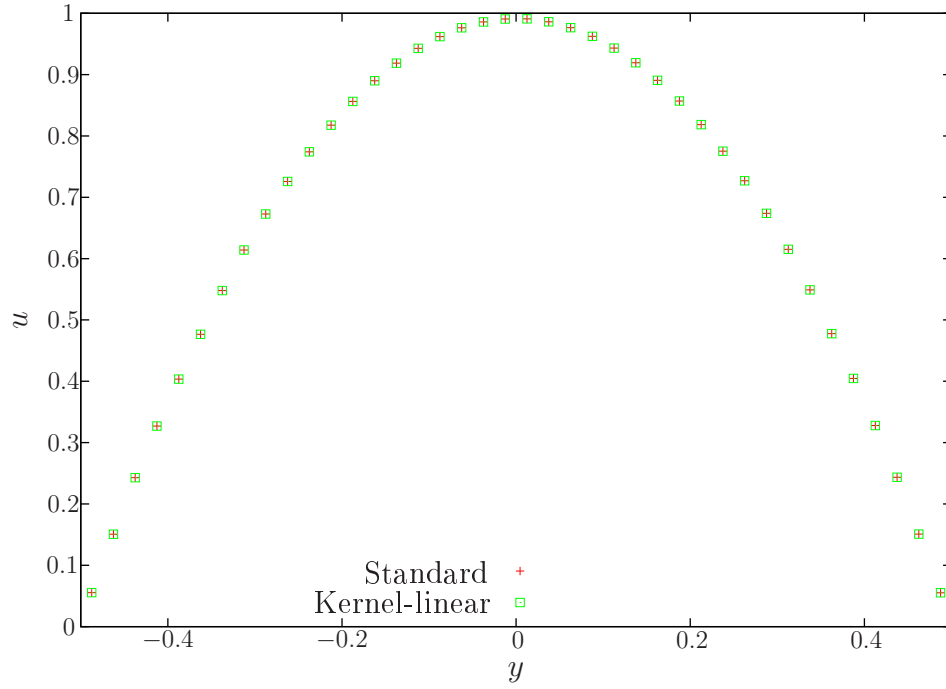


Figura 5: Perfil da velocidade  $u$  para  $Wi = 3$ , malha  $M_2$  e tempo  $t = 40$  com os métodos Standard e Kernel-linear.

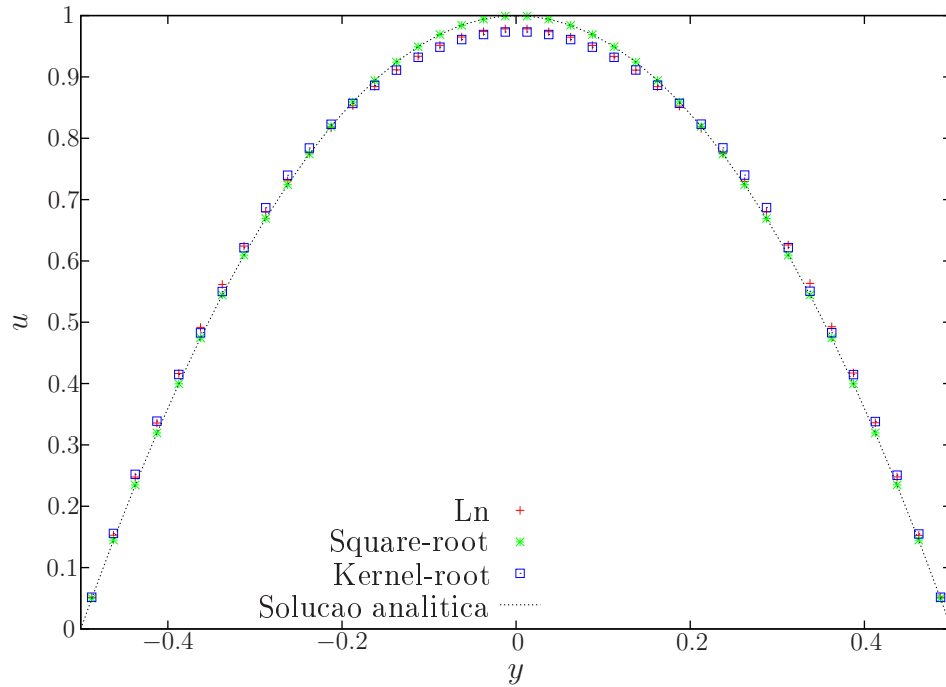


Figura 6: Perfil da velocidade  $u$  para  $Wi = 3$ , malha  $M_2$  e tempo  $t = 50$  com os métodos Ln, Square-root e Kernel-root, juntamente com a solução analítica.

Outro aspecto fundamental deste estudo, diz respeito à estabilidade dos métodos. Faremos esta análise preliminar com base na capacidade do método em preservar a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$ , que será averiguada mediante um monitoramento, em

todo o domínio espacial, do determinante mínimo ( $\det_{\min}(\mathbf{A})$ ) do tensor conformação, a cada passo de tempo. As Tabelas 5.5 e 5.6 apresentam os valores do determinante mínimo do tensor conformação com o emprego dos métodos de estabilização, para  $Wi = 0.1, 1, 2$  e  $3$ , com as malhas  $M_1$  e  $M_2$ , respectivamente. A primeira observação que faremos, é referente ao método Square-root, que destrói a positividade de  $\mathbf{A}$  já para  $Wi = 2$ , considerando as duas malhas  $M_1$  e  $M_2$ . Mais precisamente, o método Square-root perde a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  com  $Wi \geq 1.7$  para a malha  $M_1$  e  $Wi \geq 1.6$  para a malha  $M_2$ . O que consideramos ruim, uma vez que o método Standard só perde esta propriedade para  $Wi \geq 2.4$  com a malha  $M_1$  e  $Wi \geq 2.2$  com a malha  $M_2$ .

Embora o método Square-root para  $Wi = 2$  e malha  $M_1$ , juntamente com  $Wi = 3$  para ambas as malhas,  $M_1$  e  $M_2$ , forneça valores positivo para  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  em  $t = 50$ , bem como para o método Standard com  $Wi = 3$  e malha  $M_2$ , também em  $t = 50$ , estes valores não condizem com os resultados em [31]. Segundo Hulsen [31], a positividade do tensor conformação é assegurada se o determinante deste tensor, iniciado positivo (por exemplo,  $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ ), satisfizer a seguinte desigualdade:

$$\det(\mathbf{A}) \geq 1. \quad (5.5)$$

Mas, este aumento permitido para o  $\det(\mathbf{A})$  é limitado, podendo sofrer variações pequenas. Ademais, os valores obtidos nas Tabelas 5.5 e 5.6 foram apanhados no tempo  $t = 50$ . Portanto, estes valores não revelam o que ocorreu em tempos anteriores, que constatamos haver, de fato, a presença de valores negativos.

$Wi$	Standard	Ln	Square-root	Kernel-linear	Kernel-root
0.1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
1.0	1.03	1.03	1.03	1.03	1.03
2.0	1.16	1.15	$1.23 \times 10^3$	1.16	1.15
3.0	$-1.88 \times 10^2$	1.33	$1.68 \times 10^{-4}$	$-1.88 \times 10^2$	1.31

Tabela 5.5: Valor do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  para  $Wi = 0.1, 1, 2$  e  $3$  com os métodos Standard, Ln, Square-root, Kernel-linear e Kernel-root. A malha usada foi  $M_1$ .

$Wi$	Standard	Ln	Square-root	Kernel-linear	Kernel-root
0.1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
1.0	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
2.0	1.04	1.04	$-3.80 \times 10^{40}$	1.04	1.03
3.0	$1.00 \times 10^3$	1.08	$4.52 \times 10^{-4}$	$1.00 \times 10^3$	1.08

Tabela 5.6: Valor do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  para  $Wi = 0.1, 1, 2$  e  $3$  com os métodos Standard, Ln, Square-root, Kernel-linear e Kernel-root. A malha usada foi  $M_2$ .

Os métodos Standard e Kernel-linear, novamente apresentam os mesmos resultados (ver Tabelas 5.5 e 5.6). Ambos começam a fornecer valores negativos com  $Wi = 3$  e malhas  $M_1$  e  $M_2$  a partir de  $t = 5$ . A Figura 7 ilustra esta situação para a malha  $M_2$ , na qual apresenta o perfil do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  com o passar do tempo  $t$  para  $Wi = 3$ . Nesta, observamos que, embora o valor final do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  tenha sido positivo, isto não assegura sua positividade em tempos anteriores, que como constatamos, em sua maioria, os valores do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  são negativos.

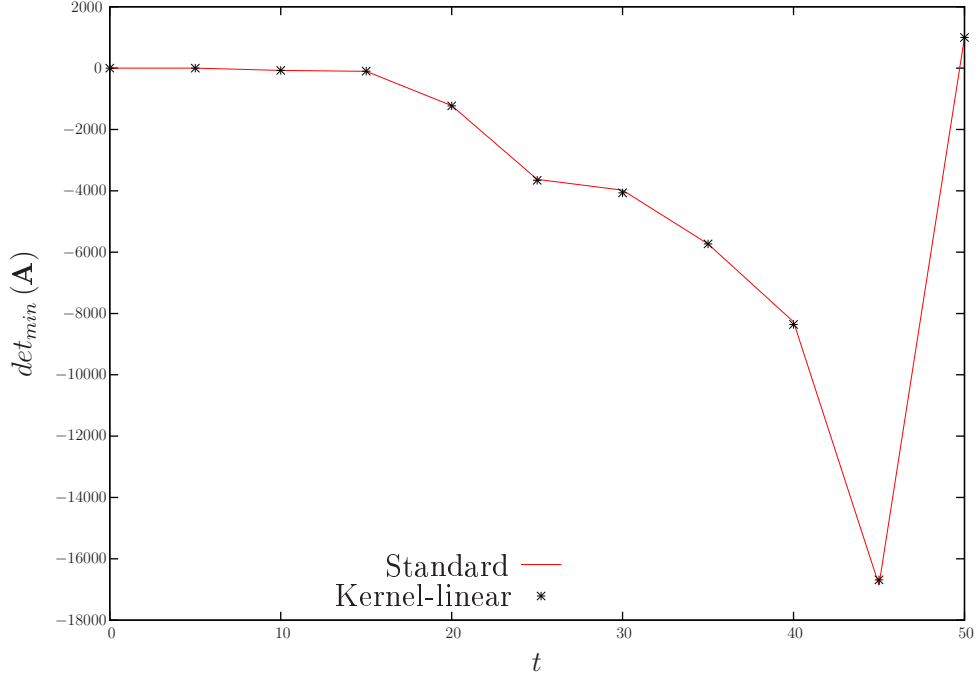


Figura 7: Valor do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  com relação ao tempo  $t$  para os métodos Standard e Kernel-linear com  $Wi = 3.0$  e malha  $M_2$ .

No método Square-root, o surgimento de valores negativos para  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  começam já nos primeiros instantes de tempo,  $t > 0$ , para  $Wi = 2$  e a partir de  $t > 20$  para  $Wi = 3$ , ambos com a malha  $M_1$ . Para a malha mais fina, a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  é perdida a partir de  $t > 15$  para  $Wi = 2$  e  $t > 10$  para  $Wi = 3$ . A Figura 8 apresenta o desenvolvimento do determinante mínimo do tensor conformação  $\mathbf{A}$  com o passar do tempo para o método Square-root para  $Wi = 2$  e Malha  $M_2$ . Observamos que próximo a  $t = 40$  os valores de  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  são muito altos negativamente. Mas, após o valor mínimo de  $\det_{\min}(\mathbf{A})$ , os valores se aproximam de zero, resultando em um valor positivo em  $t = 50$ , porém, não satisfazendo a restrição (5.5).

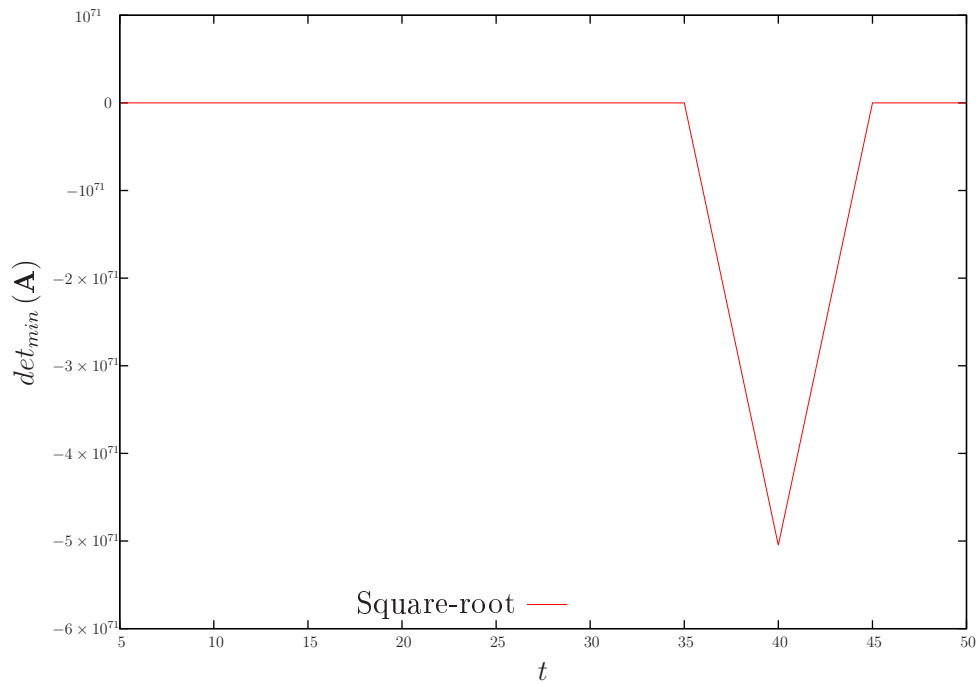


Figura 8: Valor do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  com relação ao tempo  $t$  para o método Square-root com  $Wi = 2.0$  e malha  $M_2$ .

Por fim, os métodos Ln e Kernel-root foram os mais bem sucedidos neste teste, assegurando a positividade de  $\mathbf{A}$  para  $Wi > 3$ . A Figura 9 apresenta o perfil de  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  com o passar do tempo  $t$  para estes métodos com  $Wi = 3$  e malha  $M_2$ . Note que, o valor de  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  é sempre maior que 1.0, satisfazendo a restrição (5.5). Por outro lado, o crescimento de  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  é limitado, conforme deve atender para garantir a positividade de  $\mathbf{A}$ .



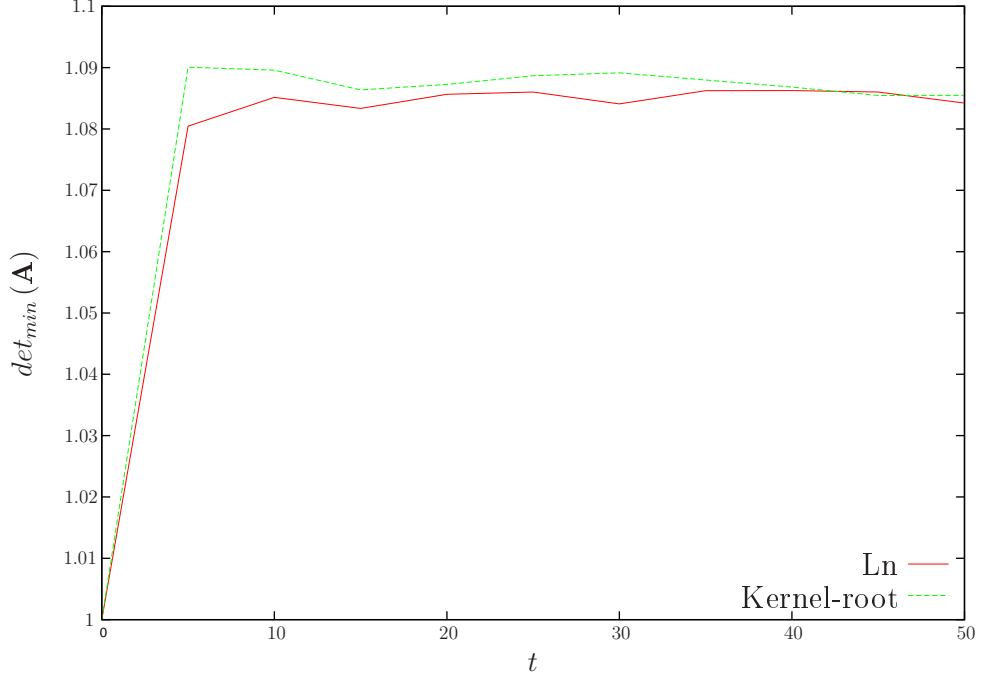


Figura 9: Valor do  $\det_{\min}(\mathbf{A})$  com relação ao tempo  $t$  para os métodos Ln e Kernel-root com  $Wi = 3$  e malha  $M_2$ .

Finalmente, faremos uma breve análise em termos de eficiência computacional. Este estudo é realizado mediante a comparação da quantidade de tempo despendido para a simulação de cada um dos métodos, até atingir o tempo adimensional  $t = 50$ . Para a execução desta análise, realizamos dois testes para dois valores de Weissenberg diferentes,  $Wi = 1$  e  $3$ .

A Tabela 5.7 exibe o tempo gasto na simulação de cada um dos métodos para  $Wi = 1$  com as malhas  $M_1$  e  $M_2$ . Como sugerido pela construção dos métodos, a técnica mais eficiente, dentre os métodos com o uso de decomposições matriciais, é o método Square-root. Isto pode ser observado na Tabela 5.7, na qual, independentemente das malhas adotadas, o método em questão possui praticamente o mesmo custo computacional que o método Standard. Já os métodos Ln e Kernel-root, com o maior custo computacional, apresentam tempos de CPU semelhantes, uma vez que estes dispõem de uma estrutura muito similar, mudando apenas a transformação núcleo empregue. O método Kernel-linear está numa posição intermediária. Não é tão eficiente quanto os métodos Standard e Square-root, mas também, não apresenta um custo computacional tão alto como os métodos Ln e Kernel-root. Possivelmente, esta redução no custo do método Kernel-linear, deve-se à sua transformação mais simples, quando comparado à transformação logarítmica e raiz quadrada.

Método	$M_1$	$M_2$
Standard	04 : 39	25 : 09
Ln	07 : 57	37 : 40
Square-root	04 : 48	25 : 48
Kernel-linear	06 : 12	31 : 09
Kernel-root	07 : 59	37 : 50

Tabela 5.7: Tempo de CPU (min: seg) para  $Wi = 1$  e  $t = 50$ .

Por outro lado, os testes com  $Wi = 3$  não foram tão bem definidos quanto para  $Wi = 1$ . Isto pode ser observado na Tabela 5.8, no qual o uso do método Standard para a malha  $M_2$ , mostra-se o menos eficiente. Contradizendo o que fora exposto na tabela 5.7. Esta imprecisão, é atribuída à escolha do número de Weissenberg, uma vez que este ultrapassa o valor crítico estabelecido para os métodos Standard, Kernel-linear e Square-root. Assim sendo, os únicos métodos que, de fato, produzem resultados confiáveis, no que diz respeito a tempo de processamento, são os métodos Ln e Kernel-root.

Método	$M_1$	$M_2$
Standard	00 : 07 : 15	01 : 04 : 37
Ln	00 : 09 : 51	00 : 50 : 55
Square-root	00 : 08 : 52	00 : 26 : 22
Kernel-linear	00 : 08 : 52	00 : 55 : 40
Kernel-root	00 : 09 : 34	00 : 51 : 13

Tabela 5.8: Tempo de CPU (hor: min: seg) para  $Wi = 3$  e  $t = 50$ .

De modo geral, considerando baixos valores de Weissenberg, vimos que os métodos se comportam de maneira muito semelhante, até  $Wi = 1$  aproximadamente. Portanto, independentemente do método empregue, conseguimos os mesmos resultados. Por conseguinte, para valores de  $Wi$  maiores que 1, tivemos diferentes resultados para cada  $Wi$  empregue. Assim, em vista dos resultados apresentados, não podemos tirar uma conclusão definitiva sobre qual o método mais indicado neste ponto, que será melhor esclarecido no problema da cavidade, na próxima seção.

Outro ponto a ser comentado diz respeito à estabilidade. Neste, os métodos que demonstraram maior habilidade em preservar a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$ , foram os métodos Ln e Kernel-root. Em contrapartida, o mais instável, tomando a positividade de  $\mathbf{A}$  como critério, foi o método Square-root.

No quesito eficiência, considerando valores de  $Wi$  abaixo do valor crítico, os métodos com o menor custo computacional foram os métodos Standard e Square-root.

Finalmente, vale ressaltar que constatamos uma equivalência em termos numéricos entre os métodos Standard e Kernel-linear. Entretanto, não há indícios de equivalência entre

os métodos Square-root e Kernel-root. Estas duas observações, estão em conformidade com a análise de equivalência empreendida no Capítulo 3.

## 5.2 O problema da cavidade

O problema da cavidade consiste em uma caixa quadrada de comprimento  $H$  contendo fluido, com uma tampa móvel. Este problema é amplamente usado para verificação de métodos numéricos, precisão, condições de contorno, entre outros, para escoamento de fluidos, sobretudo newtonianos. Entretanto, nos últimos anos esse problema tem sido usado na verificação de códigos que utilizam modelos de fluidos não-newtonianos, por exemplo, nos trabalhos [6, 9, 19, 27, 29, 46, 51, 67, 71, 72].

Isto posto, nossas simulações numéricas serão executadas neste problema teste e compreenderão diversos valores de  $Wi$ , com as diferentes formulações estudadas, objetivando investigar e apresentar os seguintes pontos: estabilidade, precisão e eficiência.

Nesta seção, continuaremos a adotar as definições no que diz respeito aos nomes dos métodos de estabilização que foram empregues na seção anterior, isto é, denotamos os métodos padrão, log-conformação, decomposição do tipo raiz quadrada e núcleo-conformção com as transformações linear deslocada e raiz quadrada como Standard, Ln, Square-root, Kernel-linear e Kernel-root, respectivamente. Outra observação importante, é que para este problema não mais usaremos o método Kernel-linear, que, conforme constatamos no problema anterior, também é equivalente numericamente ao método Standard. Portanto, neste trabalho, empregaremos somente os métodos Standard, Ln, Square-root e Kernel-root.

Para as simulações numéricas na cavidade, consideramos as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade na tampa como

$$u(x, t) = 8 \left[ 1 + \tanh 8 \left( t - \frac{1}{2} \right) \right] x^2 (1 - x) \text{ e } v = 0. \quad (5.6)$$

Este perfil de velocidade parabólico é adotado a fim de eliminar as singularidades do gradiente da velocidade próximo às quinas da cavidade. O cálculo dos tensores na tampa são realizados via extrapolação (ver Apêndice C).

Nas demais fronteiras, impomos a condição de não-escorregamento e impermeabilidade, de modo que as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade, nestes pontos, são iguais a zero. Além do mais, salvo outra indicação, tomamos os parâmetros  $\beta = 0.5$ ,  $Re = 0.01$  e  $\delta t = 0.001$ , que assumem estes valores em todas as simulações realizadas. Além disso, todas as simulações são executadas com o modelo de fluido Oldroyd-B, programadas a fornecer resultados até o nível de tempo  $t = 80$ .

Para o estudo da precisão e convergência dos métodos, o problema da cavidade é simulado em três malhas diferentes:  $M_1$  ( $h = 0.03125$ ,  $32 \times 32$  células),  $M_2$  ( $h = 0.015625$ ,

$64 \times 64$  células) e  $M_3$  ( $h = 0.0078125$ ,  $128 \times 128$  células), onde o passo espacial  $\delta h$  é uniforme, isto é, não muda no domínio de definição. Como a solução analítica para este problema não é conhecida, a comparação das soluções numéricas obtidas com as malhas  $M_1$  e  $M_2$  são feitas sobre a solução gerada por intermédio da malha  $M_3$ . O erro relativo é calculado como em (5.4), entretanto no lugar da solução exata, representada por  $(.)^{exata}$ , tomamos a solução obtida com a malha  $M_3$ , isto é,  $(.)^{M_3}$ . O cálculo da taxa de convergência segue o que fora feito no problema do canal, equação (5.3).

### 5.2.1 Baixos valores de Weissenberg: precisão dos métodos

O estudo dos métodos de estabilização para baixos valores de  $Wi$  compreenderá apenas o item precisão, uma vez que os valores de  $Wi$  adotados,  $Wi = 0.1$  e  $0.5$ , estão abaixo do valor crítico do número de Weissenberg, conforme Figura 1, não apresentando problemas de estabilidade. Além disso, também desconsideramos o estudo de eficiência para estes valores, que será empreendido na próxima subseção para  $Wi = 1$  e  $2$ .

A análise de precisão e ordem de convergência serão executadas mediante os erros relativos. As tabelas 5.9 e 5.10 apresentam os erros relativos e a taxa de convergência da componente  $u$  da velocidade e da componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}$  para  $Wi = 0.1$  e  $0.5$ , respectivamente. A partir destas tabelas, notamos que em todos os métodos há uma diminuição no erro quando passamos da malha  $M_1$  para a malha  $M_2$ , isto é, o erro diminui com o refinamento de malha, indicando a convergência dos métodos. Este comportamento é semelhante ao observado nas Tabelas 5.1 e 5.2 para o escoamento no canal com  $Wi = 0.1$  e  $1$ . Entretanto, nesta nova situação há uma leve diferença entre os erros de um método para outro, pois, diferentemente do problema anterior, não dispomos de uma solução analítica, de modo que a solução de referência  $(.)^{M_3}$  para cada método de estabilização pode sofrer variação de um método para outro. Atentando para a Tabela 5.9, observamos que os erros relativos para a velocidade  $u$ , bem como para a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  para o método Standard, estão muito próximos dos erros adquiridos pelos métodos com o uso de decomposições, resultando em taxas de convergência semelhantes.

Com base na Tabela 5.10, para  $Wi = 0.5$ , observamos que os métodos Kernel-root e Square-root se destacam por possuírem os menores erros para a componente  $u$  da velocidade, que a propósito possuem erros bem próximos para ambas as malhas,  $M_1$  e  $M_2$ , bem como para as duas variáveis analisadas  $u$  e  $\tau_{11}$ . Em contrapartida, os erros referentes à componente  $\tau_{11}$  para o método Standard evidenciam uma precisão ligeiramente melhor para este método, quando comparado com as demais formulações e para esta componente.

Método numérico	$E(u^{M1})$	$E(u^{M2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M1})$	$E(\tau_{11}^{M2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$3.95 \times 10^{-3}$	$7.92 \times 10^{-4}$	2.31	$6.25 \times 10^{-2}$	$2.03 \times 10^{-2}$	1.61
Ln	$3.93 \times 10^{-3}$	$7.90 \times 10^{-4}$	2.31	$6.51 \times 10^{-2}$	$2.15 \times 10^{-2}$	1.59
Kernel-root	$3.94 \times 10^{-3}$	$7.91 \times 10^{-4}$	2.31	$6.37 \times 10^{-2}$	$2.09 \times 10^{-2}$	1.60
Square-root	$3.94 \times 10^{-3}$	$7.91 \times 10^{-4}$	2.31	$5.71 \times 10^{-2}$	$1.86 \times 10^{-2}$	1.61

Tabela 5.9: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 80$  e  $Wi = 0.1$ .

Método numérico	$E(u^{M1})$	$E(u^{M2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M1})$	$E(\tau_{11}^{M2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$7.84 \times 10^{-3}$	$2.62 \times 10^{-3}$	1.57	$6.30 \times 10^{-1}$	$3.81 \times 10^{-1}$	0.72
Ln	$7.25 \times 10^{-3}$	$1.59 \times 10^{-3}$	2.18	$6.39 \times 10^{-1}$	$4.09 \times 10^{-1}$	0.64
Kernel-root	$6.46 \times 10^{-3}$	$1.43 \times 10^{-3}$	2.17	$6.35 \times 10^{-1}$	$3.97 \times 10^{-1}$	0.67
Square-root	$6.49 \times 10^{-3}$	$1.45 \times 10^{-3}$	2.16	$6.46 \times 10^{-1}$	$3.97 \times 10^{-1}$	0.70

Tabela 5.10: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 80$  e  $Wi = 0.5$ .

Como forma de verificação dos resultados, bem como das implementações, comparamos algumas de nossas soluções, mais especificamente as soluções das componentes  $u$  e  $v$  da velocidade, com resultados na literatura, apresentados por Pan et al. [51] e Fattal e Kupferman [27]. Em todas as figuras construídas, a velocidade  $u$  é plotada ao longo do eixo  $y$  com  $x = 0.5$ , fixo e a velocidade  $v$  é plotada ao longo da linha horizontal  $y = 0.75$ , com  $x$  variando.

A Figura 10, que apresenta as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade ao longo das retas  $y = 0.75$  e  $x = 0.5$ , respectivamente, embora não comparada com resultados na literatura, revelam-nos o comportamento das soluções para as diferentes formulações estudadas, que demonstram estar em acordo para  $Wi = 0.1$ , em conformidade com a Tabela 5.9. Já para  $Wi = 0.5$ , na Figura 11, nossa solução para as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade são comparadas com os resultados adquiridos em Pan et al. [51]. Nesta figura, observamos uma boa concordância das soluções, que, de fato, agem consonante com os resultados em Pan et al. [51], cuja solução foi adquirida pelo método de elementos finitos com a formulação log-conformação.

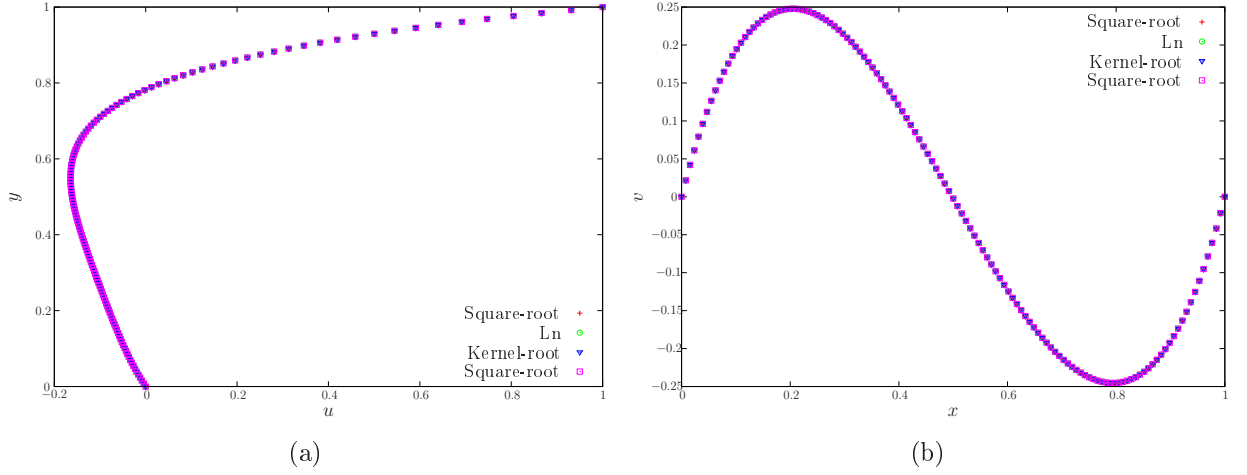


Figura 10: Escoamento em uma cavidade, no tempo  $t = 20$ , usando o modelo Oldroyd-B com  $Re = 0.01$ ,  $Wi = 0.1$  e  $\beta = 0.5$ : a) velocidade  $u$  sobre  $(0.5, y)$  e b) velocidade  $v$  sobre  $(x, 0.75)$ . A malha usada foi  $M_3$ .

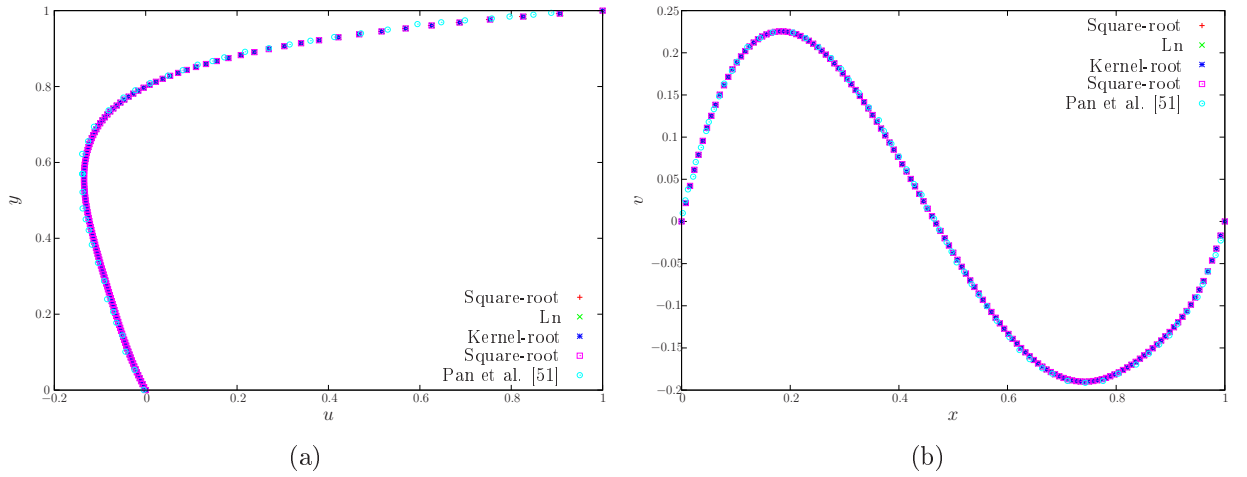


Figura 11: Escoamento em uma cavidade, no tempo  $t = 20$ , usando o modelo Oldroyd-B com  $Re = 0.01$ ,  $Wi = 0.5$  e  $\beta = 0.5$ : a) velocidade  $u$  sobre  $(0.5, y)$  e b) velocidade  $v$  sobre  $(x, 0.75)$ . A malha usada foi  $M_3$ .

Ainda para  $Wi = 0.5$ , apresentamos na Figura 12(a) a componente  $\tau_{11}$  do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  ao longo da tampa da cavidade, no qual fixamos  $y = 1$  e variamos  $x$ . Já na Figura 12(b), apresentamos a componente  $\tau_{11}$  ao longo da linha vertical  $x = 0.5$ . Os valores obtidos na tampa, conforme já citado, foram adquiridos mediante extrapolações. Os resultados expostos na Figura 12(a), além de apresentarem um comportamento similar entre os métodos, também se assemelham aos resultados apresentados em [14]. A diferença dos valores máximos das curvas de  $\tau_{11}(x, 1)$ , para os diferentes métodos, também é observada em [14]. Contudo, a ordem em que os métodos aparecem em [14], ordenando-os de acordo com o valor máximo atingido pela curva, é totalmente diferente da ordem obtida por nossos resultados. Enquanto para nós a curva com o método Standard atinge

o maior valor, comparado aos resultados dos demais métodos, em [14] o método Standard está abaixo dos métodos Ln e Square-root. Em suma, temos a seguinte ordem em nossos resultados: Standard, Square-root, Kernel-root e Ln. Já em [14] a ordem em que se apresentam são: Ln, Square-root e Standard. O método Kernel-root não é testado em [14]. Em contrapartida, o perfil de  $\tau_{11}(0.5, y)$ , apresentado na Figura 12(b) para os diversos métodos testados são muito próximos. Novamente, se assemelha aos resultados observados em [14].

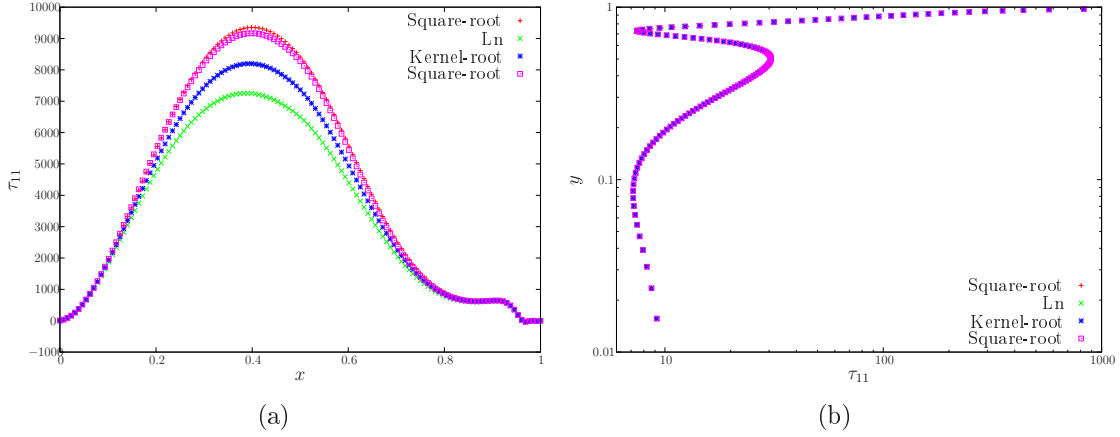


Figura 12: Escoamento em uma cavidade, no tempo  $t = 40$ , usando o modelo Oldroyd-B com  $Re = 0.01$ ,  $Wi = 0.5$  e  $\beta = 0.5$ : a) componente  $\tau_{11}$  sobre  $(x, 1)$  e b) componente  $\tau_{11}$  sobre  $(0.5, y)$ . A malha usada foi  $M_3$ .

De maneira geral, o uso ou não de decomposições para baixos valores de  $Wi$  não modificam, pelo menos não consideravelmente, a solução resultante. Deste modo, no que tange precisão, nada podemos dizer sobre qual a melhor escolha, ou a mais adequada, dentre os métodos aqui apresentados para baixos valores de  $Wi$ . Além do mais, a acurácia está condicionada a outros fatores, como geometria, tipo de fluido, condições de contorno, entre outros. Esta observação pode ser exemplificada através da diferença na ordem de precisão e taxa de convergência entre o problema da cavidade e o escoamento no canal abordado anteriormente. Portanto, para o problema em questão, com a configuração especificada, a diferença entre as formulações é praticamente insignificante, mesmo com as diferenças de precisão aqui apontadas, que como apresentadas nas Tabelas 5.9 e 5.10 e Figuras 10, 11 e 12, são muito pequenas.

## 5.2.2 Altos valores de Weissenberg

### 5.2.2.1 Estabilidade

A estabilidade dos métodos de decomposição matricial, tema fundamental deste estudo, será efetuada mediante a observação da degradação da positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  ou a não convergência do método, consequente do aumento do número de

Weissenberg ou com o avanço no tempo. Vale ressaltar que essa forma de analisar a estabilidade dos métodos foi realizada por Chen et al. [14]. Este estudo será realizado através do aumento gradual do número de Weissenberg, a começar por  $Wi = 1$ , avançando uma unidade por vez, até alcançarmos  $Wi = 5$ . Além do mais, faremos esta análise para as três malhas consideradas  $M_1$ ,  $M_2$  e  $M_3$ , visto que os resultados demonstraram forte dependência da malha. As simulações foram programadas a fornecer resultados até o tempo  $t = 80$ , de modo que não podemos afirmar sobre o comportamento da solução para além deste valor prefixado. Entretanto, veremos que na maioria dos casos este valor não é atingido, já que os métodos apresentam instabilidades para certo  $Wi$ .

a) Simulação para  $Wi = 1$

Para este valor inicial, os três métodos de estabilização considerados permanecem estáveis durante todo o desenvolvimento do escoamento, alcançando o tempo  $t = 80$  sem sofrer as consequências do HWNP. As Tabelas 5.11, 5.12 e 5.13 apresentam o valor do determinante mínimo de  $\mathbf{A}$  para as três malhas,  $M_1$ ,  $M_2$  e  $M_3$ , até o tempo  $t = 30$ , e em todas elas o tensor conformação tem sua positividade preservada. Os resultados do método Standard não foram adicionados, pois para todas as malhas a positividade de  $\mathbf{A}$  é perdida já nos primeiros instantes. Mais precisamente, o valor crítico do número de Weissenberg para o método Standard é  $Wi_{crit} = 0.66$ , isto é, acima deste valor a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  é perdida quando evoluímos o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  com o método Standard. Contudo o método Standard ainda converge para  $Wi = 1$ , e apresenta valores estáveis para as componentes do tensor  $\boldsymbol{\tau}$  e da velocidade  $\mathbf{u}$ .

Novamente, assim como observado nos resultado do canal, os valores de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  satisfazem a restrição (5.5) imposta ao determinante do tensor conformação, assegurando a positividade de  $\mathbf{A}$  para todos os esquemas aqui indicados.

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	0.99	0.99	0.99
15	0.99	1.0	1.0
20	1.0	0.99	0.99
25	1.0	0.99	0.99
30	1.0	1.0	1.0

Tabela 5.11: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 1$  com a malha  $M_1$ .



$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	1.0	1.0
25	1.0	1.0	1.0
30	1.0	1.0	1.0

Tabela 5.12: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 1$  com a malha  $M_2$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	0.99	0.99	0.99
15	0.99	0.99	0.99
20	0.99	0.99	0.99
25	0.99	0.99	0.99
30	1.0	0.99	0.99

Tabela 5.13: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 1$  com a malha  $M_3$ .

b) Simulação para  $Wi = 2$

A partir daqui os métodos de estabilização revelam sua potencialidade, uma vez que não mais conseguimos convergência com o método padrão. Desta forma é possível a obtenção de resultados estáveis somente com o emprego de métodos de estabilização. Esta observação contrasta com os resultados apanhados para  $Wi = 2$  no canal, no qual além da convergência, o método padrão mantinha a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$  até o tempo final de simulação,  $t = 50$ . Por outro lado, para o problema da cavidade, o método Square-root consegue manter a positividade de  $\mathbf{A}$ , o que não acontecia no problema do canal (ver Tabelas 5.5 e 5.6). As Tabelas 5.14, 5.15 e 5.16, respectivamente, apresentam o valor do determinante mínimo do tensor conformação  $\mathbf{A}$  para as malhas  $M_1$ ,  $M_2$  e  $M_3$ , que, novamente, estão próximos de 1, ou são iguais 1. Os testes com  $Wi = 2$  para todos os métodos alcançaram o tempo final de  $t = 80$ , e sempre com  $\mathbf{A}$  simétrico definido positivo.

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	1.0	1.0
25	1.0	1.0	1.0
30	1.0	1.0	1.0

Tabela 5.14: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 2$  com a malha  $M_1$ .

---

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	1.0	1.0
25	1.0	1.0	1.0
30	1.0	1.0	1.0

---

Tabela 5.15: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 2$  com a malha  $M_2$ .

---

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	0.99	0.99	0.99
15	0.99	0.99	0.99
20	0.99	0.99	0.99
25	1.0	0.99	0.99
30	1.0	0.99	0.99

---

Tabela 5.16: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 2$  com a malha  $M_3$ .

Na Figura 13, esboçamos o gráfico da energia cinética, norma  $L_2$  da velocidade  $\mathbf{u}$ , com relação ao tempo, para os métodos Ln, Kernel-root e Square-root com  $Wi = 2$ , juntamente com os resultados apresentados por Fattal e Kupferman [27], simulados com o método Ln. Podemos observar que após a energia cinética atingir seu valor máximo, esta tende ao estado estacionário, a partir de  $t = 8$  aproximadamente. A energia cinética está associada ao movimento executado pelo fluido, que, por sua vez, é acionado pelo deslocamento da tampa da cavidade. Desta forma, o crescimento da energia cinética observado no início da simulação deve-se à aceleração da tampa. Assim, a energia cinética atinge o seu valor máximo ao final desta aceleração e posteriormente decresce até um valor constante, no estado estacionário.

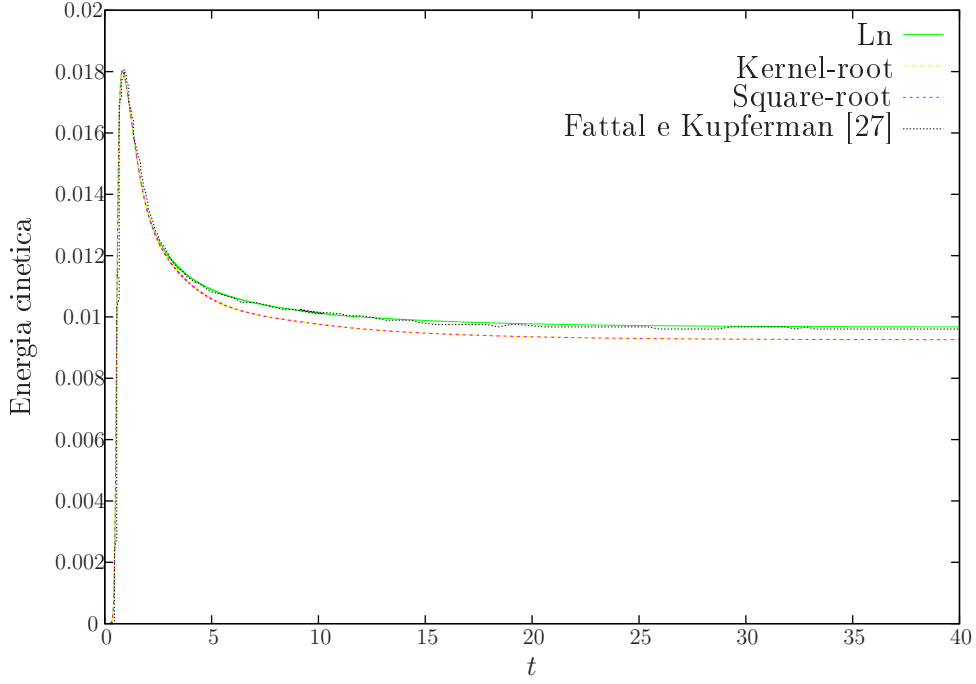


Figura 13: Energia cinética com relação ao tempo para  $Wi = 2$ .

c) Simulação para  $Wi = 3$

Até o momento, não havíamos encontrado diferenças, em termos de estabilidade, entre os métodos tratados. Entretanto, a partir deste valor de Weissenberg,  $Wi = 3$ , observamos diferenças importantes entre os métodos, na capacidade de preservação da positividade de  $\mathbf{A}$  e no alcance da convergência. Primeiramente, atentamos para a Tabela 5.17, na qual temos os valores de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diversos tempos com o emprego da malha  $M_1$ . Nesta tabela, observamos que em  $t = 30$  não temos valores para os métodos Kernel-root e Square-root. Isto acontece porque ambos os métodos deixam de produzir resultados para  $t = 30$ . Mais especificamente, o método Kernel-root deixa de convergir a partir de  $t = 28$ , enquanto que o método Square-root perde a convergência em  $t = 26$ . Já o método Ln, além da positividade que é preservada, consegue simular até o tempo final prefixado,  $t = 80$ . Uma observação semelhante é feita para o emprego da malha intermediária,  $M_2$ , (ver Tabela 5.18), porém, o tempo final, em que os métodos Kernel-root e Square-root produzem resultados, é ainda menor,  $t = 17$  para ambos os métodos. Em contrapartida, o método Ln, mais uma vez, mantém a positividade de  $\mathbf{A}$  e a convergência numérica.

Os resultados para a malha mais fina, apresentados na Tabela 5.19, ainda demonstram a superioridade do método Ln em produzir valores para além do alcance dos outros métodos. Entretanto, o emprego da malha  $M_3$  também reduziu o tempo de simulação deste método, que perdeu a convergência em  $t = 31$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	1.0	1.0
25	1.0	1.0	1.0
30	1.0	—	—

Tabela 5.17: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 3$  com a malha  $M_1$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	—	—
25	1.0	—	—
30	1.0	—	—

Tabela 5.18: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 3$  com a malha  $M_2$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	0.99	—	—
20	0.99	—	—
25	0.99	—	—
30	1.0	—	—

Tabela 5.19: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 3$  com a malha  $M_3$ .

d) Simulação para  $Wi = 4$

As observações feitas para este valor do número de Weissenberg,  $Wi = 4$ , são semelhantes ao que constatamos para  $Wi = 3$ . Conforme refinamos a malha, o tempo de simulação dos métodos é reduzido. Novamente, o método Ln com as malhas mais grossas  $M_1$  e  $M_2$ , alcançou o tempo de simulação  $t = 80$ .

Como podemos observar nas Tabelas 5.20, 5.21 e 5.22, o refinamento de malha prejudica a convergência de todos os métodos, inclusive do Ln que deixa de produzir valores para a malha mais fina,  $M_3$ , a partir de  $t = 23$ . Os métodos kernel-root e square-root perdem a convergência, para valores próximos de  $t = 15$ , em todas as malhas, sendo o menor valor de  $t$ , como esperado, para a malha mais fina,  $M_3$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	1.0
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	—	—
25	1.0	—	—
30	1.0	—	—

Tabela 5.20: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 4$  com a malha  $M_1$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	0.99	0.99
15	1.0	—	—
20	1.0	—	—
25	1.0	—	—
30	1.0	—	—

Tabela 5.21: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 4$  com a malha  $M_2$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	0.99	0.99	0.99
15	0.99	—	—
20	0.99	—	—
25	—	—	—
30	—	—	—

Tabela 5.22: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 4$  com a malha  $M_3$ .

e) Simulação para  $Wi = 5$

O emprego de  $Wi = 5$  nas simulações resultou em valores muito semelhantes aos adquiridos para  $Wi = 4$ , como pode ser observado na estrutura das Tabelas 5.23, 5.24 e 5.25. Porém, algo que nos chamou a atenção, foi a convergência do método Ln, que conseguiu alcançar o tempo  $t = 80$  para a malha  $M_3$ . Algo que não havia acontecido para  $Wi = 4$ . Entretanto, como se pode observar na tabela 5.25, a positividade do tensor conformação  $\mathbf{A}$ , com o método Ln, também é perdida ainda no início da simulação, pouco maior que  $t = 20$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	1.0	0.87
15	1.0	1.0	1.0
20	1.0	—	—
25	1.0	—	—
30	1.0	—	—

Tabela 5.23: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 5$  com a malha  $M_1$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	1.0	0.99	1.0
15	1.0	—	—
20	1.0	—	—
25	1.0	—	—
30	0.99	—	—

Tabela 5.24: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 5$  para  $Wi = 5$  com a malha  $M_2$ .

$t$	Ln	Kernel-root	Square-root
10	0.99	0.99	0.99
15	0.99	—	—
20	0.99	—	—
25	—	—	—
30	—	—	—

Tabela 5.25: Valor de  $\det_{min}(\mathbf{A})$  em diferentes tempos para  $Wi = 5$  para  $Wi = 5$  com a malha  $M_3$ .

Outra observação importante que faremos neste item, é referente ao comportamento da energia cinética, que, como observado em [26], apresenta fortes oscilações para  $Wi = 5$  (ver Figura 14). Estas oscilações são causadas por vórtices que são gerados no canto superior direito da cavidade. Observamos que estas oscilações persistem até o final da execução das simulações, em  $t = 80$ . Este fenômeno observado, deve-se ao aumento no número de Weissenberg, que induz o problema a continuar *transiente*.

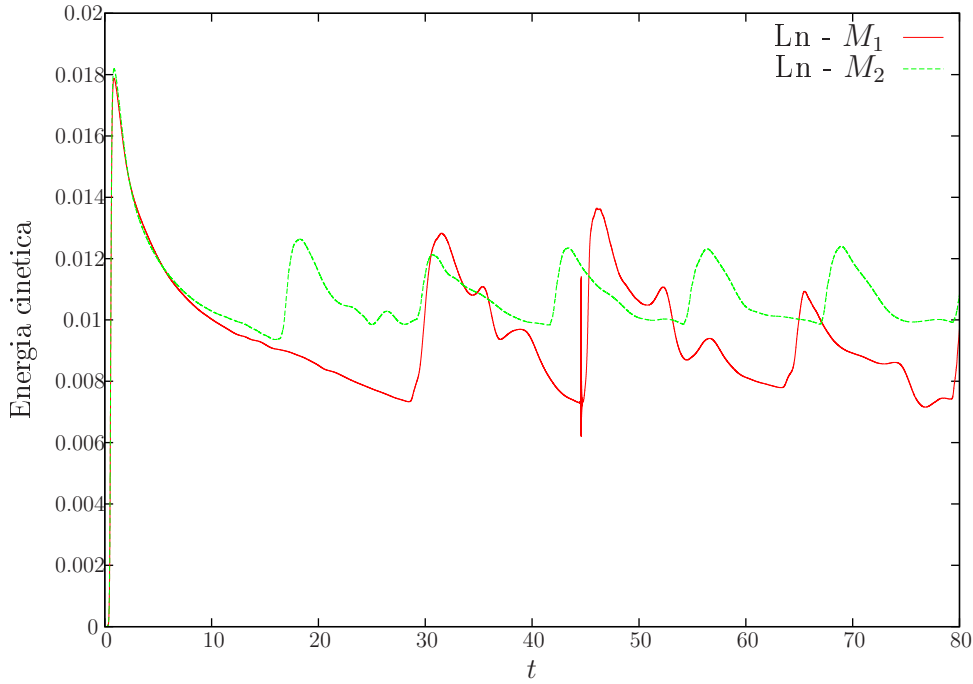


Figura 14: Energia cinética com relação ao tempo para  $Wi = 5$ .

### 5.2.2.2 Precisão

Outra aspecto importante neste estudo diz respeito à precisão ou acurácia dos métodos. Esta análise será realizada mediante o estudo dos erros relativos e ordem de precisão de cada um dos métodos. Consideraremos o método mais preciso ou mais acurado, aquele que apresentar os menores erros. Os baixos erros, indicam que as soluções adquiridas estão relativamente próximas da solução que não varia mais com o refinamento de malha. Além disso, quando possível, compararemos nossos perfis de velocidade, componentes  $u$  e  $v$ , com resultados obtidos na literatura.

A Tabela 5.26 exibe os erros relativos e a taxa de convergência para as componentes  $u$  e  $\tau_{11}$  calculadas para  $Wi = 1$  e tempo  $t = 80$ . Em todos os métodos, quando transpomos da malha  $M_1$  para a malha  $M_2$ , os erros relativos de ambas as componentes decrescem, o que indica a convergência das técnicas. Além disso, a convergência dos métodos, bem como a verificação dos resultados para  $Wi = 1$ , também é assegurada pelos resultados apresentados na Figura 15, no qual comparamos nossos resultados, adquiridos com as técnicas estudadas, para as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade, com os resultados apanhados dos trabalhos de Fattal e Kupferman [27] e Pan et al. [51], ambos calculados com a técnica log-conformação. Podemos observar que nossos resultados estão em concordância com os resultados obtidos por Fattal e Kupferman [27] e Pan et al. [51].

Mediante um cuidadoso estudo dos erros para  $Wi = 1$ , Tabela 5.26, constatamos que o método com os menores erros, tanto para a componente  $u$  como para  $\tau_{11}$ , é o método Ln, seguido do método Kernel-root, que é o método com o segundo menor erro.

Por conseguinte, o método com os maiores erros, exceto para  $E(\tau_{11}^{M_2})$ , que fica atrás do método Square-root, é o método Standard.

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Standard	$1.94 \times 10^{-2}$	$9.67 \times 10^{-3}$	1.00	$7.96 \times 10^{-1}$	$5.59 \times 10^{-1}$	0.50
Ln	$8.52 \times 10^{-3}$	$1.57 \times 10^{-3}$	2.43	$7.58 \times 10^{-1}$	$5.44 \times 10^{-1}$	0.47
Kernel-root	$9.97 \times 10^{-3}$	$3.56 \times 10^{-3}$	1.48	$7.66 \times 10^{-1}$	$5.50 \times 10^{-1}$	0.47
Square-root	$1.00 \times 10^{-2}$	$3.57 \times 10^{-3}$	1.49	$7.86 \times 10^{-1}$	$5.62 \times 10^{-1}$	0.48

Tabela 5.26: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 80$  e  $Wi = 1$ .

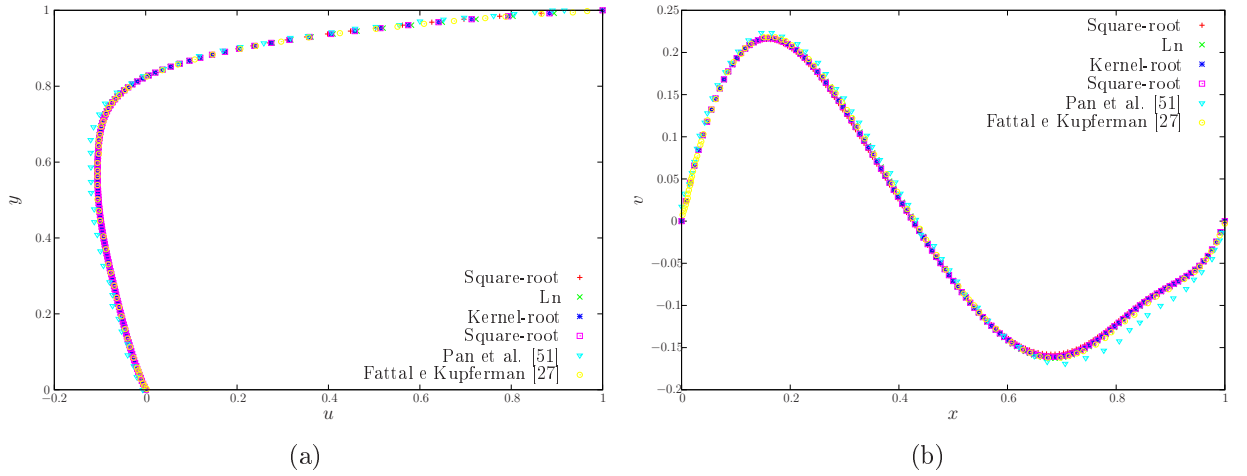


Figura 15: Escoamento em uma cavidade, no tempo  $t = 40$ , usando o modelo Oldroyd-B com  $Re = 0.01$ ,  $Wi = 1.0$  e  $\beta = 0.5$ : a) velocidade  $u$  sobre  $(0.5, y)$  e b) velocidade  $v$  sobre  $(x, 0.75)$ . A malha usada foi  $M_3$ .

Para  $Wi = 2$ , os erros relativos em  $t = 80$ , apresentados na Tabela 5.27, para os diferentes métodos de integração da contribuição não-newtoniana, não se comportam, exatamente, com a mesma configuração encontrada para  $Wi = 1$ . Entretanto, se assumirmos que o método mais preciso será escolhido, tomando como critério de avaliação o método que mais vezes apresentou o menor dos erros, seja qual for a componente observada, teremos, novamente, os mais precisos na ordem que se segue: Ln, Kernel-root e Square-root. Os erros observados na Tabela 5.27, possuem um comportamento semelhante ao observado na Tabela 5.26: a diminuição dos erros relativos à medida que refinamos a malha computacional, exceto para o método Ln na componente  $u$ . Assim, estes valores, juntamente com os gráficos comparativos, apresentados na Figura 16, que efetuam a verificação dos resultados, apontam a convergência dos métodos. No entanto, a taxa de convergência para o método Ln, para a componente  $u$  da velocidade, produz um valor negativo, ou seja, os erros gerados pela malha  $M_1$  são menores que os erros para a malha  $M_2$ .



Método	$E(u^{M1})$	$E(u^{M2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M1})$	$E(\tau_{11}^{M2})$	$O(\tau_{11})$
Ln	$1.65 \times 10^{-2}$	$3.80 \times 10^{-2}$	-1.20	$7.27 \times 10^{-1}$	$3.82 \times 10^{-1}$	0.92
Kernel-root	$6.64 \times 10^{-2}$	$2.69 \times 10^{-2}$	1.30	$7.75 \times 10^{-1}$	$5.65 \times 10^{-1}$	0.45
Square-root	$6.38 \times 10^{-2}$	$2.57 \times 10^{-2}$	1.31	$7.96 \times 10^{-1}$	$5.91 \times 10^{-1}$	0.42

Tabela 5.27: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 80$  e  $Wi = 2$ .

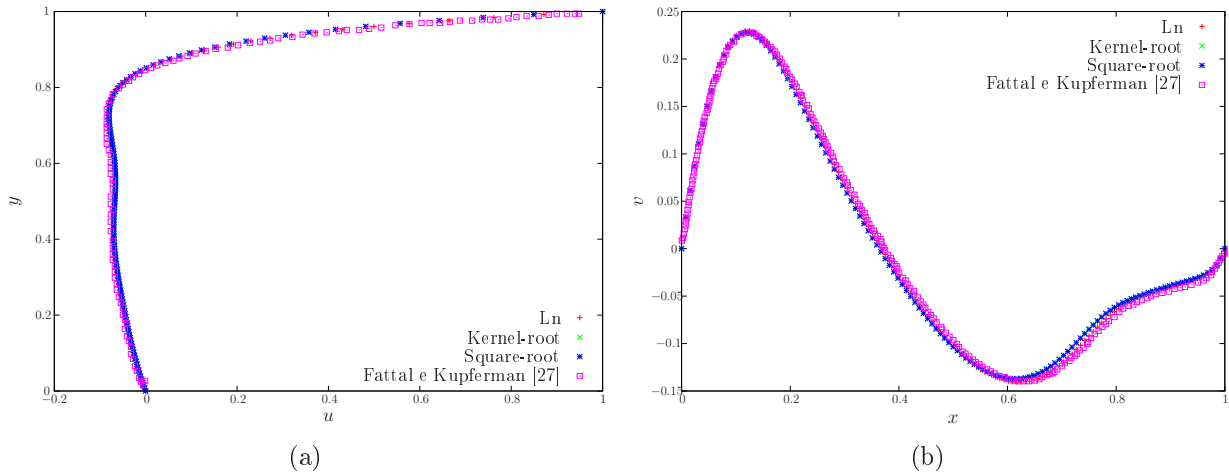


Figura 16: Escoamento em uma cavidade, no tempo  $t = 40$ , usando o modelo Oldroyd-B com  $Re = 0.01$ ,  $Wi = 2$  e  $\beta = 0.5$ : a) velocidade  $u$  sobre  $(0.5, y)$  e b) velocidade  $v$  sobre  $(x, 0.75)$ . A malha usada foi  $M_3$ .

A partir de  $Wi = 3$ , a taxa de convergência e os erros computados, ver Tabelas 5.28, 5.29 e 5.30 para  $Wi = 3, 4$  e  $5$ , respectivamente, são calculados em tempos menores que os apresentados anteriormente (Tabelas 5.26 e 5.27) no qual tínhamos os erros calculados em  $t = 80$ . Isto acontece pois, como observado anteriormente, nem todos os métodos alcançaram o tempo de simulação  $t = 80$ . Naturalmente, não podemos calcular o erro de todos os métodos se tomarmos  $t$  muito alto. Desta forma, para cada  $Wi$  específico tomaremos um  $t$  diferente, que corresponde ao maior tempo atingido pelo método que primeiro perde a convergência. Para  $Wi = 3$ , tomaremos os resultados em  $t = 14$ , enquanto que para  $Wi = 4$ , tomamos  $t = 12$ . Finalmente, para  $Wi = 5$ , apanhamos os resultados em  $t = 11$ .

Nas Tabelas 5.28, 5.29 e 5.30, com os erros dos métodos para  $Wi = 3, 4$  e  $5$ , respectivamente, notamos que em todas elas, segue-se a seguinte sequência dos métodos com menores erros e maiores taxas de convergência: Ln, Square-root e Kernel-root. Essa diferença entre os métodos é mais evidente com estes valores de  $Wi$ . Notemos que esta é uma constatação semelhante ao que foi descrito no estudo de estabilidade, no qual o método Ln dá indícios de um melhor desempenho, comparado aos outros métodos, para quando tomamos altos valores de  $Wi$ . Naturalmente isto deveria acontecer, uma vez que

estabilidade e precisão estão relacionadas. Assim, qualquer que seja o método numérico utilizado, a perda da positividade ou a divergência do método deve-se a um acúmulo de erros numéricos com o avanço no tempo.

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Ln	$2.75 \times 10^{-2}$	$1.24 \times 10^{-2}$	1.15	$9.72 \times 10^{-1}$	$1.37 \times 10^{-1}$	2.83
Kernel-root	$5.03 \times 10^{-2}$	$2.36 \times 10^{-2}$	1.09	1.68	$3.36 \times 10^{-1}$	2.32
Square-root	$4.79 \times 10^{-2}$	$2.14 \times 10^{-2}$	1.16	1.64	$3.12 \times 10^{-1}$	2.39

Tabela 5.28: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 14$  e  $Wi = 3$ .

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Ln	$3.64 \times 10^{-2}$	$1.07 \times 10^{-2}$	1.76	1.01	$1.02 \times 10^{-1}$	3.32
Kernel-root	$4.80 \times 10^{-2}$	$2.18 \times 10^{-2}$	1.14	2.07	$4.03 \times 10^{-1}$	2.36
Square-root	$4.80 \times 10^{-2}$	$1.20 \times 10^{-2}$	1.27	2.02	$3.74 \times 10^{-1}$	2.43

Tabela 5.29: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 12$  e  $Wi = 4$ .

Método	$E(u^{M_1})$	$E(u^{M_2})$	$O(u)$	$E(\tau_{11}^{M_1})$	$E(\tau_{11}^{M_2})$	$O(\tau_{11})$
Ln	$3.40 \times 10^{-2}$	$9.35 \times 10^{-3}$	2.06	$8.97 \times 10^{-1}$	$5.67 \times 10^{-2}$	3.97
Kernel-root	$4.95 \times 10^{-2}$	$2.07 \times 10^{-2}$	1.26	2.29	$4.42 \times 10^{-1}$	2.37
Square-root	$4.85 \times 10^{-2}$	$1.93 \times 10^{-2}$	1.33	2.02	$4.18 \times 10^{-1}$	2.42

Tabela 5.30: Erro e taxa de convergência para a componente  $u$  da velocidade e componente  $\tau_{11}$  da contribuição não-newtoniana para  $t = 11$  e  $Wi = 5$ .

### 5.2.2.3 Eficiência

Como último quesito no estudo dos métodos de estabilização, apresentamos a análise da eficiência computacional, que resume-se em comparar o tempo de simulação gasto para cada método, até atingirem o tempo adimensional  $t = 40$ . Assim como observado nas Tabelas 5.7 e 5.8, no problema do canal, o método de estabilização com o menor tempo gasto para o problema da cavidade é o método Square-root, (ver Tabelas 5.31 e 5.32). Esta diferença é facilmente explicada pelas diversas operações que se exige nos métodos Ln e Kernel-root, em especial o esforço despendido no cálculo dos autovalores e autovetores a cada passo no tempo e espaço. Outra observação importante diz respeito ao aumento no tempo de simulação quando passamos de  $Wi = 1$  para  $Wi = 2$ , isto é, o aumento do número de Weissenberg acarreta em um aumento no tempo de simulação, conforme também observado em [14]. Note que, na Tabela 5.31 temos os valores do

tempo de simulação para o método Standard, ao passo que na Tabela 5.32, estes valores não foram colocados. Conforme já comentado, o método Standard perde a convergência para este valor de  $Wi$ . De modo que não temos como avaliar a eficiência deste método para  $Wi = 2$ . Além do mais, os resultados exibidos na Tabela 5.32 para  $Wi = 2$  com o método Square-root, não apresentam uma diferença tão grande, como aconteceu na Tabela 5.31, para  $Wi = 1$ . Isto possivelmente, deve-se ao fato de que o número de Weissenberg está mais próximo do seu valor crítico. O que representa um problema, uma vez que, como analisado no problema do canal na Tabela 5.8, esta situação compromete o correto estudo da eficiência do método.

	$M_1$	$M_2$	$M_3$
Standard	00 : 01 : 36	00 : 07 : 03	00 : 34 : 45
Ln	00 : 04 : 07	00 : 15 : 01	01 : 00 : 38
Kernel-root	00 : 03 : 01	00 : 12 : 18	00 : 55 : 55
Square-root	00 : 01 : 37	00 : 07 : 18	00 : 35 : 46

Tabela 5.31: Tempo de CPU (hor: min: seg) para  $Wi = 1$  e  $t = 40$ .

	$M_1$	$M_2$	$M_3$
Ln	00 : 05 : 07	00 : 19 : 57	01 : 52 : 48
Kernel-root	00 : 03 : 51	00 : 19 : 24	01 : 46 : 48
Square-root	00 : 02 : 30	00 : 14 : 28	01 : 32 : 00

Tabela 5.32: Tempo de CPU (hor: min: seg) para  $Wi = 2$  e  $t = 40$ .

### 5.2.3 Discussão dos resultados

De maneira geral, considerando baixos valores de  $Wi$  os métodos de estabilização demonstraram poucas diferenças em termos de estabilidade e precisão. Ficando o item eficiência como o grande diferencial para estes valores. Mas, se considerarmos que podemos realizar a simulação com o próprio Standard, para estes valores de  $Wi$ , isto não é algo tão vantajoso assim, uma vez que o método Standard ainda é o mais eficiente. Por outro lado, se tivermos interessado em um aumento pequeno no valor de  $Wi$ ,  $1 \leq Wi \leq 2$ , aproximadamente, já não podemos adotar o método Standard, de modo que os métodos Ln, Kernel-root e Square-root, são boas sugestões para estes casos. Em especial, o método Square-root, que, como já vimos, é o mais eficiente dos métodos de estabilização, isto é, o mais rápido computacionalmente.

Entretanto, quando consideramos altos valores de  $Wi$ , maiores que 2, o método com o melhor desempenho nos quesitos estabilidade e precisão, foi o método Ln que, embora não tenha solucionado todos os problemas referentes ao HWNP, foi o método que mais contribui para a estabilidade e convergência da simulação na cavidade.

Vale ressaltar, que não há indícios de equivalência numérica entre os métodos Square-root e Kernel-root, embora ambos se assemelhem no quesito estabilidade. A análise de precisão está em conformidade com a afirmação de que estes métodos não são equivalentes.

Queremos salientar, que estas observações, postas anteriormente, é exclusivamente para o problema da cavidade com as configurações adotadas neste trabalho. Portanto, não podemos assegurar estas mesmas características para outros problemas, parâmetros e modelos constitutivos.

Finalmente, na Tabela 5.33, resumimos o que fora constatado no desenvolver deste estudo.

	Ln	Kernel-root	Square-root
Precisão	✓		
Estabilidade	✓		
Eficiência			✓

Tabela 5.33: Desempenho dos métodos para o problema da cavidade com o modelo Oldroyd-B.

## Considerações finais

As informações apresentadas neste trabalho servem como um auxílio no estudo dos assuntos pertinentes às instabilidades do HWNP e de algumas das principais propostas de estabilização desenvolvidas envolvendo decomposições matriciais do tensor conformação. Além disso, esta análise serve como um indicativo para uma escolha mais acertada de um método estabilizador, compatível com a situação, modelo constitutivo ou geometria a ser utilizada. Outra contribuição, foi a tentativa de esclarecer equivalências entre decomposições, em especial as equivalências entre as técnicas padrão e a transformação linear deslocada núcleo-conformação, para o modelo constitutivo Oldroyd-B. Além disso, certificamo-nos da perfeita similaridade entre as equações para a técnica log-conformação original e transformação logarítmica via núcleo-conformação, para todos os modelos constitutivos considerados. Não obstante, também constatamos a não equivalência, no mínimo parcial, entre os métodos Decomposição do tipo raiz quadrada e sua versão via transformação núcleo-conformação.

Os próximos passos a serem investidos neste projeto dizem respeito ao emprego de outras geometrias para teste, como o escoamento em torno de um cilindro ou o escoamento em uma contração de razão 4:1, bem como o uso de outros modelos constitutivos. Além disso, o estudo das decomposições em escoamento com superfície livre também é de interesse e uma boa sugestão para os novos rumos deste projeto.

# Equações em coordenadas cartesianas bidimensionais

A seguir, apresentamos as principais equações, desenvolvidas no decorrer do trabalho, em coordenadas cartesianas bidimensionais.

## A.1 Equações governantes

Equações de Navier Stokes em função do tensor das tensões  $\mathbf{T}$  (2.2) e (2.3):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}}{\partial y}, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y}, \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (\text{A.3})$$

Termos presentes nas equações (2.6) e (2.7):

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{\Omega}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial(u\Omega_{11})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega_{11})}{\partial y} & \frac{\partial(u\Omega_{12})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega_{12})}{\partial y} \\ \frac{\partial(u\Omega_{21})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega_{21})}{\partial y} & \frac{\partial(u\Omega_{22})}{\partial x} + \frac{\partial(v\Omega_{22})}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

$$\nabla \mathbf{u}\mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} \Omega_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega_{21} \frac{\partial u}{\partial y} & \Omega_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \\ \Omega_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega_{21} \frac{\partial v}{\partial y} & \Omega_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{\Omega} \nabla \mathbf{u}^T = \begin{bmatrix} \Omega_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega_{12} \frac{\partial u}{\partial y} & \Omega_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega_{12} \frac{\partial v}{\partial y} \\ \Omega_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + \Omega_{22} \frac{\partial u}{\partial y} & \Omega_{21} \frac{\partial v}{\partial x} + \Omega_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

Equações de Navier-Stokes em função da contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}$  (2.8) e (2.9):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (uu)}{\partial x} + \frac{\partial (vu)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \tau_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{12}}{\partial y}, \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial (uv)}{\partial x} + \frac{\partial (vv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\beta}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \tau_{21}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{22}}{\partial y}, \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (\text{A.9})$$

Equação do tensor conformação  $\mathbf{A}$  (2.10):

$$\frac{\partial A_{11}}{\partial t} + \frac{\partial (uA_{11})}{\partial x} + \frac{\partial (vA_{11})}{\partial y} = 2 \left( A_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + A_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{Wi} f(A) P(A)_{11}, \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial A_{12}}{\partial t} + \frac{\partial (uA_{12})}{\partial x} + \frac{\partial (vA_{12})}{\partial y} = A_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + A_{22} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{Wi} f(A) P(A)_{12}, \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial A_{22}}{\partial t} + \frac{\partial (uA_{22})}{\partial x} + \frac{\partial (vA_{22})}{\partial y} = 2 \left( A_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + A_{22} \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{1}{Wi} f(A) P(A)_{22}. \quad (\text{A.12})$$

- Oldroyd-B, equações (2.11) e (2.12):

$$f(A) = 1, \quad (\text{A.13})$$

$$P(A)_{11} = 1 - A_{11}, \quad (\text{A.14})$$

$$P(A)_{12} = -A_{12} \quad (\text{A.15})$$

e

$$P(A)_{22} = 1 - A_{22}. \quad (\text{A.16})$$

- Giesekus, equações (2.13) e (2.14):

$$f(A) = 1, \quad (\text{A.17})$$

$$P(A)_{11} = \alpha[A_{11}(2 - A_{11}) - A_{12}^2 - 1] + 1 - A_{11}, \quad (\text{A.18})$$

$$P(A)_{12} = A_{12}[\alpha(2 - \text{tr}(A)) - 1] \quad (\text{A.19})$$

e

$$P(A)_{22} = \alpha[A_{22}(2 - A_{22}) - A_{12}^2 - 1] + 1 - A_{22}. \quad (\text{A.20})$$

- FENE-CR, equações (2.15) e (2.16):

$$f(A) = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(A)}, \quad (\text{A.21})$$

$$P(A)_{11} = 1 - A_{11}, \quad (\text{A.22})$$

$$P(A)_{12} = -A_{12} \quad (\text{A.23})$$

e

$$P(A)_{22} = 1 - A_{22}. \quad (\text{A.24})$$

- FENE-P, equações (2.17) e (2.18):

$$f(A) = \frac{L^2}{L^2 - 3}, \quad (\text{A.25})$$

$$P(A)_{11} = 1 - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(A)} A_{11}, \quad (\text{A.26})$$

$$P(A)_{12} = -\frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(A)} A_{12} \quad (\text{A.27})$$

e

$$P(A)_{22} = 1 - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(A)} A_{22}. \quad (\text{A.28})$$

## A.2 Decomposições Matriciais

### A.2.1 Log-conformação

Cálculo das matrizes  $\mathbf{\Omega}$ ,  $\mathbf{B}$ , e  $\mathbf{N}$ , equações (3.10), (3.11) e (3.12), respectivamente:

$$\begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{bmatrix} = \mathbf{O}^T (\nabla \mathbf{u}) \mathbf{O}. \quad (\text{A.29})$$

Então,



$$\mathbf{N} = \mathbf{O} \begin{bmatrix} 0 & \tilde{N}_{12} \\ -\tilde{N}_{12} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{O}^T, \quad (\text{A.30})$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{O} \begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{M}_{22} \end{bmatrix} \mathbf{O}^T, \quad (\text{A.31})$$

e

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{O} \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \\ -\tilde{\Omega}_{12} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{O}^T. \quad (\text{A.32})$$

A partir da equação (3.2), podemos escrever

$$\begin{bmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{21} & \tilde{M}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12} \\ -\tilde{\Omega}_{12} & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{B}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \tilde{N}_{12}/\lambda_2 \\ -\tilde{N}_{12}/\lambda_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.33})$$

implicando no seguinte sistema:  $\begin{cases} \tilde{M}_{12} = \tilde{\Omega}_{12} + \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_2} \\ \tilde{M}_{21} = -\tilde{\Omega}_{12} - \frac{\tilde{N}_{12}}{\lambda_1} \end{cases}$ , que resulta nas equações

$$N_{12} = \frac{\tilde{M}_{12} + \tilde{M}_{21}}{(\lambda_2)^{-1} - (\lambda_1)^{-1}} \quad (\text{A.34})$$

e

$$\tilde{\Omega}_{12} = \frac{\tilde{M}_{12}\lambda_2 + \tilde{M}_{21}\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}, \quad (\text{A.35})$$

para  $\tilde{N}_{12}$  e  $\tilde{\Omega}_{12}$ , respectivamente. A matriz  $\tilde{\mathbf{B}}$  é obtida fazendo-se

$$\tilde{B}_{11} = \tilde{M}_{11} \quad (\text{A.36})$$

e

$$\tilde{B}_{22} = \tilde{M}_{22}. \quad (\text{A.37})$$

Assim, as matrizes  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{\Omega}$  são obtidas diretamente de (A.30), (A.31) e (A.32), respectivamente.

Cálculo de  $\Psi$  (3.20):

$$\Psi_{11} = O_{11}^2 \ln(\lambda_1) + O_{12}^2 \ln(\lambda_2), \quad (\text{A.38})$$

$$\Psi_{12} = O_{11}O_{21} \ln(\lambda_1) + O_{12}O_{22} \ln(\lambda_2) \quad (\text{A.39})$$

e

$$\Psi_{22} = O_{21}^2 \ln(\lambda_1) + O_{22}^2 \ln(\lambda_2). \quad (\text{A.40})$$

Equação constitutiva para  $\Psi$  (3.32):

$$\frac{\partial \Psi_{11}}{\partial t} + \frac{\partial (u \Psi_{11})}{\partial x} + \frac{\partial (v \Psi_{11})}{\partial y} = 2(\Psi_{12} \Omega_{12} + B_{11}) + \quad (\text{A.41})$$

$$+ \frac{f(e^\Psi)}{Wi} \left( O_{11}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{12}^2 \frac{1}{\lambda_2} \right) P(e^\Psi)_{11}$$

$$\frac{\partial \Psi_{12}}{\partial t} + \frac{\partial (u \Psi_{12})}{\partial x} + \frac{\partial (v \Psi_{12})}{\partial y} = \Omega_{12}(\Psi_{22} - \Psi_{11}) + 2B_{12} + \quad (\text{A.42})$$

$$+ \frac{f(e^\Psi)}{Wi} \left( O_{11} O_{21} \frac{1}{\lambda_1} + O_{12} O_{22} \frac{1}{\lambda_2} \right) P(e^\Psi)_{12}$$

$$\frac{\partial \Psi_{22}}{\partial t} + \frac{\partial (u \Psi_{22})}{\partial x} + \frac{\partial (v \Psi_{22})}{\partial y} = -2(\Psi_{12} \Omega_{12} + B_{22}) + \quad (\text{A.43})$$

$$+ \frac{f(e^\Psi)}{Wi} \left( O_{21}^2 \frac{1}{\lambda_1} + O_{22}^2 \frac{1}{\lambda_2} \right) P(e^\Psi)_{22}.$$

- Oldroyd-B, equações (3.33) e (3.34):

$$f(e^\Psi) = 1, \quad (\text{A.44})$$

$$P(e^\Psi)_{11} = 1 - (O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2), \quad (\text{A.45})$$

$$P(e^\Psi)_{12} = -(O_{11} \lambda_1 O_{21} + O_{12} \lambda_2 O_{22}) \quad (\text{A.46})$$

e

$$P(e^\Psi)_{22} = 1 - (O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2) \quad (\text{A.47})$$

- Giesekus, equações (3.35) e (3.36):

$$f(e^\Psi) = 1, \quad (\text{A.48})$$

$$P(e^\Psi)_{11} = [1 - (O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2)] [1 + \alpha (O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2 - 1)], \quad (\text{A.49})$$

$$P(e^\Psi)_{12} = -(O_{11} \lambda_1 O_{21} + O_{12} \lambda_2 O_{22}) (\alpha - 1) \quad (\text{A.50})$$

e

$$P(e^\Psi)_{22} = [1 - (O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2)] [1 + \alpha (O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2 - 1)] \quad (\text{A.51})$$

- FENE-CR, e quações (3.37) e (3.38):

$$f(e^\Psi) = \frac{L^2}{L^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)}, \quad (\text{A.52})$$

$$P(e^\Psi)_{11} = 1 - (O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2), \quad (\text{A.53})$$

$$P(e^\Psi)_{12} = -(O_{11} \lambda_1 O_{21} + O_{12} \lambda_2 O_{22}) \quad (\text{A.54})$$

e

$$P(e^\Psi)_{22} = 1 - (O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2) \quad (\text{A.55})$$

- FENE-P, equações (3.39) e (3.40):

$$f(e^\Psi) = \frac{L^2}{L^2 - 3}, \quad (\text{A.56})$$

$$P(e^\Psi)_{11} = 1 - \frac{L^2 - 3}{L^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)} (O_{11}^2 \lambda_1 + O_{12}^2 \lambda_2), \quad (\text{A.57})$$

$$P(e^\Psi)_{12} = -\frac{L^2 - 3}{L^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)} (O_{11} \lambda_1 O_{21} + O_{12} \lambda_2 O_{22}) \quad (\text{A.58})$$

e

$$P(e^\Psi)_{22} = 1 - \frac{L^2 - 3}{L^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)} (O_{21}^2 \lambda_1 + O_{22}^2 \lambda_2). \quad (\text{A.59})$$

### A.2.2 Decomposição do tipo raiz quadrada

Decomposição do tipo raiz quadrada da matriz  $\mathbf{A}$  (3.43):

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11}^2 + Q_{12}^2 & Q_{12} (Q_{11} + Q_{22}) \\ Q_{12} (Q_{11} + Q_{22}) & Q_{12}^2 + Q_{22}^2 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.60})$$

Equação constitutiva para  $\mathbf{Q}$  (3.63):

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_{11}}{\partial t} + \frac{\partial (u Q_{11})}{\partial x} + \frac{\partial (v Q_{11})}{\partial y} &= Q_{12} \left( G_{12} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + Q_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + \\ &+ \frac{f(Q^2)}{2Wi} \left( \frac{Q_{22}}{Q_{11} Q_{22} - Q_{12}^2} \right) P(Q^2)_{11}, \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

$$\frac{\partial Q_{12}}{\partial t} + \frac{\partial (uQ_{12})}{\partial x} + \frac{\partial (vQ_{12})}{\partial y} = G_{12}Q_{22} + Q_{11}\frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12}\frac{\partial v}{\partial y} +$$
(A.62)

$$+ \frac{f(Q^2)}{2Wi} \left( \frac{-Q_{12}}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} \right) P(Q^2)_{12},$$

$$\frac{\partial Q_{22}}{\partial t} + \frac{\partial (uQ_{22})}{\partial x} + \frac{\partial (vQ_{22})}{\partial y} = Q_{12} \left( -G_{12} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + Q_{22}\frac{\partial v}{\partial y} +$$
(A.63)

$$+ \frac{f(Q^2)}{2Wi} \left( \frac{Q_{11}}{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}^2} \right) P(Q^2)_{22}.$$

- Oldroyd-B, equações (3.66) e (3.67):

$$f(Q^2) = 1, \quad (A.64)$$

$$P(Q^2)_{11} = 1 - (Q_{11}^2 + Q_{12}^2), \quad (A.65)$$

$$P(Q^2)_{12} = -Q_{12}(Q_{11} + Q_{22}) \quad (A.66)$$

e

$$P(Q^2)_{22} = 1 - (Q_{12}^2 + Q_{22}^2). \quad (A.67)$$

- Giesekus, equações (3.68) e (3.68):

$$f(Q^2) = 1, \quad (A.68)$$

$$P(Q^2)_{11} = [1 - (Q_{11}^2 + Q_{12}^2)] [1 + \alpha(Q_{11}^2 + Q_{12}^2 - 1)] - \alpha(Q_{12}tr(Q))^2, \quad (A.69)$$

$$P(Q^2)_{12} = Q_{12}tr(Q) [\alpha(2 - Q_{11}^2 - 2Q_{12}^2 - Q_{22}^2) - 1] \quad (A.70)$$

e

$$P(Q^2)_{22} = [1 - (Q_{12}^2 + Q_{22}^2)] [1 + \alpha(Q_{12}^2 + Q_{22}^2 - 1)] - \alpha(Q_{12}tr(Q))^2. \quad (A.71)$$

- FENE-CR, equações (3.70) e (3.71):

$$f(Q^2) = \frac{L^2}{L^2 - tr(Q^2)}, \quad (A.72)$$

$$P(Q^2)_{11} = 1 - (Q_{11}^2 + Q_{12}^2), \quad (A.73)$$

$$P(Q^2)_{12} = -Q_{12}(Q_{11} + Q_{22}) \quad (A.74)$$

e

$$P(Q^2)_{22} = 1 - (Q_{12}^2 + Q_{22}^2). \quad (A.75)$$

- FENE-P, equações (3.72) e (3.73):

$$f(Q^2) = \frac{L^2}{L^2 - 3}, \quad (\text{A.76})$$

$$P(Q^2)_{11} = 1 - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(Q^2)} (Q_{11}^2 + Q_{12}^2), \quad (\text{A.77})$$

$$P(Q^2)_{12} = -\frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(Q^2)} Q_{12} \text{tr}(Q) \quad (\text{A.78})$$

e

$$P(Q^2)_{22} = 1 - \frac{L^2 - 3}{L^2 - \text{tr}(Q^2)} (Q_{12}^2 + Q_{22}^2) \quad (\text{A.79})$$

Cálculo da matriz antissimétrica  $\mathbf{G}$  (3.80):

$$Q_{12} \left( \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) + Q_{22} \frac{\partial u}{\partial y} - Q_{11} \frac{\partial v}{\partial x} = G_{12} (Q_{11} + Q_{22}), \quad (\text{A.80})$$

que resulta em

$$G_{12} = \frac{\left( Q_{12} \frac{\partial u}{\partial x} + Q_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \left( Q_{11} \frac{\partial v}{\partial x} + Q_{12} \frac{\partial v}{\partial y} \right)}{Q_{11} + Q_{22}}. \quad (\text{A.81})$$

### A.2.3 Núcleo-conformação

Equação de evolução para os autovalores  $\Lambda$  (3.99):

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \frac{D\lambda_1}{Dt} & 0 \\ 0 & \frac{D\lambda_2}{Dt} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & H_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) \\ H_{12}(\lambda_1 - \lambda_2) & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) \\ \tilde{\Omega}_{12}(\lambda_2 - \lambda_1) & 0 \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} 2\tilde{B}_{11}\lambda_1 & 0 \\ 0 & 2\tilde{B}_{22}\lambda_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{f(\Lambda)}{W_i} P(\Lambda)_{11} & 0 \\ 0 & \frac{f(\Lambda)}{W_i} P(\Lambda)_{22} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Equação de evolução para  $\mathbb{K}(\Lambda)$  (3.115):

$$\frac{D\mathbb{K}(\lambda_i)}{Dt} = 2\tilde{B}_{ii}\lambda_i J_{ii} + \frac{f(\Lambda)}{W_i} P(\Lambda)_{ii} J_{ii}, \text{ onde } i = 1, 2. \quad (\text{A.83})$$

Equação de evolução para  $\mathbb{K}(\mathbf{A})$  (3.122):

$$\frac{\partial \mathbb{K}_{11}}{\partial t} + \frac{\partial (u\mathbb{K}_{11})}{\partial x} + \frac{\partial (v\mathbb{K}_{11})}{\partial y} = 2(\mathbb{K}_{12}\Omega_{12} + \mathbb{B}_{11}) + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{11}, \quad (\text{A.84})$$

$$\frac{\partial \mathbb{K}_{12}}{\partial t} + \frac{\partial (u\mathbb{K}_{12})}{\partial x} + \frac{\partial (v\mathbb{K}_{12})}{\partial y} = \Omega_{12}(\mathbb{K}_{22} - \mathbb{K}_{11}) + 2\mathbb{B}_{12} + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{12}, \quad (\text{A.85})$$

$$\frac{\partial \mathbb{K}_{22}}{\partial t} + \frac{\partial (u \mathbb{K}_{22})}{\partial x} + \frac{\partial (v \mathbb{K}_{22})}{\partial y} = 2(-\mathbb{K}_{12} \Omega_{12} + \mathbb{B}_{22}) + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{22}, \quad (\text{A.86})$$

Cálculo de  $\mathbf{J}$  para a transformação linear deslocada núcleo-conformação (3.128):

$$J_{11} = \xi \quad (\text{A.87})$$

e

$$J_{22} = \xi. \quad (\text{A.88})$$

Cálculo de  $\mathbb{B}$  para a transformação linear deslocada núcleo-conformação (3.130):

$$\mathbb{B}_{11} = B_{11} (\mathbb{K}_{11} + \xi) + B_{12} \mathbb{K}_{12}, \quad (\text{A.89})$$

$$\mathbb{B}_{12} = B_{11} \mathbb{K}_{12} + B_{12} (\mathbb{K}_{22} + \xi) \quad (\text{A.90})$$

e

$$\mathbb{B}_{22} = B_{12} \mathbb{K}_{12} + B_{22} (\mathbb{K}_{22} + \xi). \quad (\text{A.91})$$

Cálculo de  $\mathbb{H}$  para a transformação linear deslocada núcleo-conformação:

- Oldryd-B, equação (3.131):

$$\mathbb{H}_{11} = -\mathbb{K}_{11}, \quad (\text{A.92})$$

$$\mathbb{H}_{12} = -\mathbb{K}_{12} \quad (\text{A.93})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = -\mathbb{K}_{22}. \quad (\text{A.94})$$

- Giesekus, equação (3.132):

$$\mathbb{H}_{11} = \mathbb{K}_{11} \left( 1 + \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K}_{11} \right) + \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K}_{12}^2, \quad (\text{A.95})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K}_{11} \mathbb{K}_{12} + \mathbb{K}_{12} \left( 1 + \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K}_{22} \right) \quad (\text{A.96})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K}_{12}^2 + \mathbb{K}_{22} \left( 1 + \frac{\alpha}{\xi} \mathbb{K}_{22} \right). \quad (\text{A.97})$$

- FENE-CR, equação (3.133):

$$\mathbb{H}_{11} = -\frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\Lambda)} \mathbb{K}_{11}, \quad (\text{A.98})$$

$$\mathbb{H}_{12} = -\frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\Lambda)} \mathbb{K}_{12} \quad (\text{A.99})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = -\frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\Lambda)} \mathbb{K}_{22} \quad (\text{A.100})$$

- FENE-P, equação (3.134):

$$\mathbb{H}_{11} = \xi \left[ \frac{L^2}{L^2 - 3} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\Lambda)} \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K}_{11} + 1 \right) \right], \quad (\text{A.101})$$

$$\mathbb{H}_{12} = -\frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\Lambda)} \mathbb{K}_{12} \quad (\text{A.102})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \xi \left[ \frac{L^2}{L^2 - 3} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\Lambda)} \left( \frac{1}{\xi} \mathbb{K}_{22} - 1 \right) \right] \quad (\text{A.103})$$

Cálculo de  $\mathbf{J}$  para a transformação  $\log_d$  núcleo-conformação (3.142):

$$J_{11} = \frac{\lambda_1^{-1}}{\ln(d)} \quad (\text{A.104})$$

e

$$J_{22} = \frac{\lambda_2^{-1}}{\ln(d)}. \quad (\text{A.105})$$

Cálculo de  $\mathbb{B}$  para a transformação  $\log_d$  núcleo-conformação (3.143):

$$\mathbb{B}_{11} = \frac{B_{11}}{\ln(d)}, \quad (\text{A.106})$$

$$\mathbb{B}_{12} = \frac{B_{12}}{\ln(d)} \quad (\text{A.107})$$

e

$$\mathbb{B}_{22} = \frac{B_{22}}{\ln(d)} \quad (\text{A.108})$$

Cálculo de  $\mathbb{H}$  para a transformação  $\log_d$  núcleo-conformação:

- Oldroyd-B, equação (3.145):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} \left( (d^{-\mathbb{K}})_{11} - 1 \right), \quad (\text{A.109})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{\ln(d)} (d^{-\mathbb{K}})_{12} \quad (\text{A.110})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{1}{\ln(d)} ((d^{-\mathbb{K}})_{22} - 1). \quad (\text{A.111})$$

- Giesekus, equação (3.146):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} [(d^{-\mathbb{K}})_{11} - 1 + \alpha (2 - (d^{-\mathbb{K}})_{11} - (d^{\mathbb{K}})_{11})], \quad (\text{A.112})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{\ln(d)} [(d^{-\mathbb{K}})_{12} + \alpha (- (d^{-\mathbb{K}})_{12} - (d^{\mathbb{K}})_{12})] \quad (\text{A.113})$$

e

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} [(d^{-\mathbb{K}})_{22} - 1 + \alpha (2 - (d^{-\mathbb{K}})_{22} - (d^{\mathbb{K}})_{22})]. \quad (\text{A.114})$$

- FENE-CR, equação (3.147):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{\ln(d)} ((d^{-\mathbb{K}})_{11} - 1), \quad (\text{A.115})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{\ln(d)} (d^{-\mathbb{K}})_{12} \quad (\text{A.116})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{\ln(d)} ((d^{-\mathbb{K}})_{22} - 1). \quad (\text{A.117})$$

- FENE-P, equação (3.148):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} (d^{-\mathbb{K}})_{11} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \right), \quad (\text{A.118})$$

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} \frac{L^2}{L^2 - 3} (d^{-\mathbb{K}})_{12} \quad (\text{A.119})$$

e

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{\ln(d)} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} (d^{-\mathbb{K}})_{22} - \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \right). \quad (\text{A.120})$$

Cálculo de  $\mathbf{J}$  para a transformação raiz  $k$ -ésima núcleo-conformação (3.156):

$$J_{11} = \frac{\lambda_1^{\frac{1-k}{k}}}{k} \quad (\text{A.121})$$



e

$$J_{22} = \frac{\lambda_2^{\frac{1-k}{k}}}{k} \quad (\text{A.122})$$

Cálculo de  $\mathbb{B}$  para a transformação raiz  $k$ -ésima núcleo-conformação (3.157):

$$\mathbb{B}_{11} = \frac{1}{k} (B_{11}\mathbb{K}_{11} + B_{12}\mathbb{K}_{12}), \quad (\text{A.123})$$

$$\mathbb{B}_{12} = \frac{1}{k} (B_{11}\mathbb{K}_{12} + B_{12}\mathbb{K}_{22}) \quad (\text{A.124})$$

e

$$\mathbb{B}_{22} = \frac{1}{k} (B_{12}\mathbb{K}_{12} + B_{22}\mathbb{K}_{22}). \quad (\text{A.125})$$

Cálculo de  $\mathbb{H}$  para a transformação raiz  $k$ -ésima núcleo-conformação:

- Oldroyd-B, equação (3.158):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{k} (\mathbb{K}_{11}^{1-k} - \mathbb{K}_{11}), \quad (\text{A.126})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{k} (\mathbb{K}_{12}^{1-k} - \mathbb{K}_{12}) \quad (\text{A.127})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{1}{k} (\mathbb{K}_{22}^{1-k} - \mathbb{K}_{22}). \quad (\text{A.128})$$

- Giesekus, equação (3.159):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{k} \left\{ (\mathbb{K}_{11}^{1-k} - \mathbb{K}_{11}) [1 + \alpha (\mathbb{K}_{11}^k - 1)] + \alpha (\mathbb{K}_{12}^{1-k} - \mathbb{K}_{12}) \mathbb{K}_{12}^k \right\}, \quad (\text{A.129})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{k} \left\{ \alpha (\mathbb{K}_{11}^{1-k} - \mathbb{K}_{11}) \mathbb{K}_{12}^k + (\mathbb{K}_{12}^{1-k} - \mathbb{K}_{12}) (1 + \alpha (\mathbb{K}_{22}^k - 1)) \right\} \quad (\text{A.130})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{1}{k} \left\{ \alpha (\mathbb{K}_{12}^{1-k} - \mathbb{K}_{12}) \mathbb{K}_{12}^k + (\mathbb{K}_{22}^{1-k} - \mathbb{K}_{22}) [1 + \alpha (\mathbb{K}_{22}^k - 1)] \right\}. \quad (\text{A.131})$$

- FENE-CR, equação (3.160):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{k} (\mathbb{K}_{11}^{1-k} - \mathbb{K}_{11}), \quad (\text{A.132})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{L^2}{L^2 - \text{tr}(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{k} (\mathbb{K}_{12}^{1-k} - \mathbb{K}_{12}) \quad (\text{A.133})$$

e

$$\mathbb{H}_{22} = \frac{L^2}{L^2 - tr(\mathbf{\Lambda})} \frac{1}{k} (\mathbb{K}_{22}^{1-k} - \mathbb{K}_{22}). \quad (\text{A.134})$$

- FENE-P, equação (3.161):

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{k} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbb{K}_{11}^{1-k} - \frac{L^2}{L^2 - tr(\mathbf{\Lambda})} \mathbb{K}_{11} \right), \quad (\text{A.135})$$

$$\mathbb{H}_{12} = \frac{1}{k} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbb{K}_{12}^{1-k} - \frac{L^2}{L^2 - tr(\mathbf{\Lambda})} \mathbb{K}_{12} \right) \quad (\text{A.136})$$

e

$$\mathbb{H}_{11} = \frac{1}{k} \left( \frac{L^2}{L^2 - 3} \mathbb{K}_{22}^{1-k} - \frac{L^2}{L^2 - tr(\mathbf{\Lambda})} \mathbb{K}_{22} \right). \quad (\text{A.137})$$

## Discretização espacial

A metodologia utilizada para a discretização do conjunto de equações apresentadas no decorrer deste trabalho, Navier-Stokes (2.8) e equação constitutiva (2.10) (ou equação (2.25)), bem como as equações deduzidas pelos métodos de decomposições matriciais, (3.32), (3.63) e (3.122), é a metodologia *Marker-And-Cell* (MAC) [30] combinada com o método de projeção. O método MAC caracteriza-se pelo uso de uma malha composta por células deslocadas ("staggered grid"), nas quais as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade são definidas nas faces das células e as outras grandezas (representadas por  $\phi$ ) no centro das células (ver Figura 17). Além disso, o método MAC adota um procedimento de classificação das células, que, para os objetivos deste trabalho, variam apenas com o seu posicionamento no domínio. Portanto, temos

- Células cheias [**F**] ("Full"): representam as células cheias de fluido.
- Células de fronteira [**B**] ("Boundary"): determinam a configuração do contorno rígido.
- Células do injeto [**I**] ("inflow"): definem a entrada de fluido no domínio.
- Células do ejetor [**O**] ("outflow"): definem a saída de fluido no domínio.

A seguir, apresentamos a discretização espacial das equações para os tensores das decomposições matriciais, bem como para o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  e tensor conformação **A**. Porém, agora, iremos particularizar alguns aspectos dos métodos, simplificando as equações de diferenças. A partir de agora, trataremos somente do modelo constitutivo Oldroyd-B. Além disso, não apresentamos a discretização espacial das demais equações, equações (4.6), (4.10), (4.13) e (4.14), uma vez que o acréscimo do tensor polimérico em nada altera a estratégia de solução das equações de quantidade de movimento e da continuidade. Assim, a discretização das demais propriedades podem ser consultadas em [42].

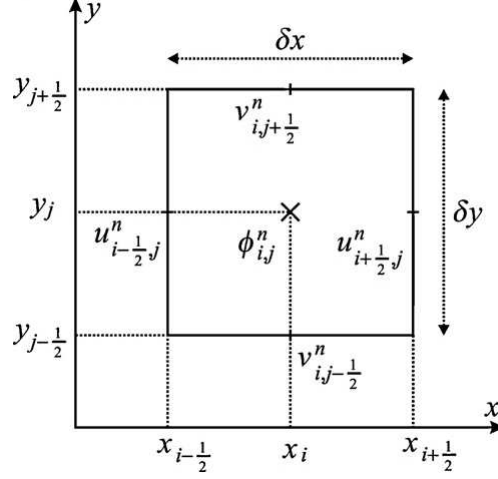


Figura 17: Representação da célula computacional deslocada em um ponto genérico  $(i, j)$ , em  $t = t_n$ : as componentes da velocidade são definidas nas faces da célula e as outras propriedades no centro da célula.

A fim de garantirmos uma melhor representação para as equações discretas, faremos uma alteração na notação das componentes dos tensores. Seja  $\mathbf{Z}$  um tensor qualquer, cuja representação em coordenadas cartesianas bidimensionais é

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} \\ Z_{21} & Z_{22} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

A partir de agora, denotaremos a matriz  $\mathbf{Z}$  como

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} Z^{xx} & Z^{xy} \\ Z^{yx} & Z^{yy} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Além disso, consideremos uma função genérica  $w = w(x, y, t)$  como sendo a solução exata de uma Equação Diferencial Parcial qualquer, denotaremos uma solução aproximada dessa função no ponto  $(x_i, y_j, t_n)$  como  $w_{i,j}^n$ , representando o valor numérico da função neste ponto.

Outro aspecto importante a ser destacado diz respeito ao tratamento especial utilizado na discretização dos termos convectivos da equação de quantidade de movimento, bem como da contribuição não-newtoniana, e por extensão das decomposições matriciais, que são discretizados pelo esquema CUBISTA [3]. Desse modo, não apresentaremos as discretizações, ou o método empregue aos termos convectivos, mas simplesmente usaremos a notação  $convx()$  e  $convy()$  para os termos envolvendo as derivadas parciais ao longo das direções  $x$  e  $y$ , respectivamente.

Portanto, a seguir, apresentamos as discretizações por diferenças finitas das equações dos tensores  $\boldsymbol{\tau}$ ,  $\mathbf{A}$ ,  $\boldsymbol{\Psi}$ ,  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbb{K}$  para o modelo constitutivo Oldroyd-B, que compreenderão as células  $[\mathbf{F}]$ ,  $[\mathbf{B}]$ ,  $[\mathbf{I}]$  e  $[\mathbf{O}]$ . Ademais, também apresentamos as discretizações de algumas

decomposições empregue. Por conveniência, omitiremos o índice temporal das variáveis, devendo ficar subentendido, a menos de outra indicação, que as variáveis estão em um mesmo instante de tempo.

#### B.0.4 Tratamento da contribuição não-newtoniana em células [F]

Com base nas equações (4.21) e (4.22), necessitamos discretizar a função  $F$ , que como já comentado, depende da estratégia ou decomposição adotada. Desse modo, apresentamos as equações discretas no espaço para todos os tensores das decomposições, bem como para o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  e tensor conformação  $\mathbf{A}$ , em células [F].

- Método Padrão: discretização da equação (4.16), com  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{Z}$ .

$$F_{i,j}^{xx} = - \left[ convx (u\tau^{xx})_{i,j} + convy (v\tau^{xx})_{i,j} \right] + 2 \left[ \frac{\partial u}{\partial x} |_{i,j} (\tau_{i,j}^{xx} + \xi) + \frac{\partial u}{\partial y} |_{i,j} \tau_{i,j}^{xy} \right] - \frac{1}{W_i} \tau_{i,j}^{xx} \quad (\text{B.3})$$

$$F_{i,j}^{xy} = - \left[ convx (u\tau^{xy})_{i,j} + convy (v\tau^{xy})_{i,j} \right] + \left[ \frac{\partial v}{\partial x} |_{i,j} (\tau_{i,j}^{xx} + \xi) + \frac{\partial u}{\partial y} |_{i,j} (\tau_{i,j}^{yy} + \xi) \right] - \frac{1}{W_i} \tau_{i,j}^{xy} \quad (\text{B.4})$$

$$F_{i,j}^{yy} = - \left[ convx (u\tau^{yy})_{i,j} + convy (v\tau^{yy})_{i,j} \right] + 2 \left[ \frac{\partial v}{\partial x} |_{i,j} \tau_{i,j}^{xy} + \frac{\partial v}{\partial y} |_{i,j} (\tau_{i,j}^{yy} + \xi) \right] - \frac{1}{W_i} \tau_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.5})$$

- Tensor conformação: discretização da equação (4.17), para  $\mathbf{A} = \mathbf{Z}$  com  $f$  e  $P$  tomados como em (2.11) e (2.12), respectivamente.

$$F_{i,j}^{xx} = - \left[ convx (uA^{xx})_{i,j} + convy (vA^{xx})_{i,j} \right] + 2 \left( \frac{\partial u}{\partial x} |_{i,j} A_{i,j}^{xx} + \frac{\partial u}{\partial y} |_{i,j} A_{i,j}^{xy} \right) + \frac{1}{W_i} (1 - A_{i,j}^{xx}) \quad (\text{B.6})$$

$$F_{i,j}^{xy} = - \left[ convx (uA^{xy})_{i,j} + convy (vA^{xy})_{i,j} \right] + \frac{\partial v}{\partial x} |_{i,j} A_{i,j}^{xx} + \frac{\partial u}{\partial y} |_{i,j} A_{i,j}^{yy} - \frac{1}{W_i} A_{i,j}^{xy} \quad (\text{B.7})$$

$$F_{i,j}^{yy} = - \left[ convx (uA^{yy})_{i,j} + convy (vA^{yy})_{i,j} \right] + 2 \left( \frac{\partial v}{\partial x} |_{i,j} A_{i,j}^{xy} + \frac{\partial v}{\partial y} |_{i,j} A_{i,j}^{yy} \right) + \frac{1}{W_i} (1 - A_{i,j}^{yy}) \quad (\text{B.8})$$

- Log-conformação: discretização da equação (4.18), tomando  $\Psi = \mathbf{Z}$  com as funções  $f$  e  $P$  definidas como em (3.33) e (3.34), respectivamente.

$$F_{i,j}^{xx} = - \left[ convx (u\Psi^{xx})_{i,j} + convy (v\Psi^{xx})_{i,j} \right] + 2 (\Psi_{i,j}^{xy} \Omega_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{xx}) + \frac{1}{W_i} \left[ (e^{-\Psi})_{i,j}^{xx} - 1 \right] \quad (\text{B.9})$$

$$F_{i,j}^{xy} = - \left[ convx (u\Psi^{xy})_{i,j} + convy (v\Psi^{xy})_{i,j} \right] + \Omega_{i,j}^{x,y} (\Psi_{i,j}^{yy} - \Psi_{i,j}^{xx}) + 2B_{i,j}^{xy} + \frac{1}{W_i} (e^{-\Psi})_{i,j}^{xy} \quad (\text{B.10})$$

$$F_{i,j}^{yy} = - \left[ convx (u\Psi^{yy})_{i,j} + convy (v\Psi^{yy})_{i,j} \right] - 2 (\Psi_{i,j}^{xy} \Omega_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{yy}) + \frac{1}{W_i} \left[ (e^{-\Psi})_{i,j}^{yy} - 1 \right] \quad (\text{B.11})$$

A seguir, apresentamos a discretização das equações das componentes dos tensores  $\Omega$ ,  $\mathbf{B}$  e  $e^{-\Psi}$ . Antes, porém, mostramos o cálculo das matrizes  $\tilde{\mathbf{M}}$ ,  $\tilde{\mathbf{B}}$  e  $\tilde{\Omega}$  que auxiliam na obtenção dos tensores  $\Omega$ ,  $\mathbf{B}$  e  $e^{-\Psi}$ .

– Matriz  $\tilde{\mathbf{M}}$ : discretização da equação (3.15).

$$\tilde{M}_{i,j}^{xx} = (O_{i,j}^{xx})^2 \frac{\partial u}{\partial x} |_{i,j} + O_{i,j}^{yx} O_{i,j}^{xx} \left( \frac{\partial v}{\partial x} |_{i,j} + \frac{\partial u}{\partial y} |_{i,j} \right) + (O_{i,j}^{yx})^2 \frac{\partial v}{\partial y} |_{i,j} \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{i,j}^{xy} = & O_{i,j}^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \big|_{i,j} O_{i,j}^{xy} + O_{i,j}^{yx} \frac{\partial v}{\partial x} \big|_{i,j} O_{i,j}^{xy} + O_{i,j}^{xx} \frac{\partial u}{\partial y} \big|_{i,j} O_{i,j}^{yy} + \\ & + O_{i,j}^{yx} \frac{\partial v}{\partial y} \big|_{i,j} O_{i,j}^{yy} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{i,j}^{yx} = & O_{i,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} \big|_{i,j} O_{i,j}^{xx} + O_{i,j}^{yy} \frac{\partial v}{\partial x} \big|_{i,j} O_{i,j}^{xx} + O_{i,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \big|_{i,j} O_{i,j}^{yx} + \\ & + O_{i,j}^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \big|_{i,j} O_{i,j}^{yx} \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\tilde{M}_{i,j}^{yy} = (O_{i,j}^{xy})^2 \frac{\partial u}{\partial x} \big|_{i,j} + O_{i,j}^{yy} \frac{\partial v}{\partial x} \big|_{i,j} O_{i,j}^{xy} + O_{i,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \big|_{i,j} O_{i,j}^{yy} + (O_{i,j}^{yy})^2 \frac{\partial v}{\partial y} \big|_{i,j} \quad (\text{B.15})$$

- Matrizes  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$  e  $\tilde{\mathbf{B}}$ : discretização das equações (A.35), (A.36) e (A.37), respectivamente.

$$\tilde{\Omega}_{i,j}^{xy} = \frac{\tilde{M}_{i,j}^{xy} \Lambda_{i,j}^{yy} + \tilde{M}_{i,j}^{yx} \Lambda_{i,j}^{xx}}{\Lambda_{i,j}^{yy} - \Lambda_{i,j}^{xx}}, \quad (\text{B.16})$$

onde  $\Lambda^{xx}$  e  $\Lambda^{yy}$  são os autovalores do tensor conformação  $\mathbf{A}$ .

$$\tilde{B}_{i,j}^{xx} = \tilde{M}_{i,j}^{xx} \quad (\text{B.17})$$

$$\tilde{B}_{i,j}^{yy} = \tilde{M}_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.18})$$

- Matrizes  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{B}$ : discretização das equações (A.32) e (A.31), respectivamente.

$$\Omega_{i,j}^{xy} = \tilde{\Omega}_{i,j}^{xy} (O_{i,j}^{xx} O_{i,j}^{yy} - O_{i,j}^{xy} O_{i,j}^{yx}) \quad (\text{B.19})$$

$$B_{i,j}^{xx} = (O_{i,j}^{xx})^2 \tilde{M}_{i,j}^{xx} + (O_{i,j}^{xy})^2 \tilde{M}_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.20})$$

$$B_{i,j}^{xy} = O_{i,j}^{xx} \tilde{M}_{i,j}^{xx} O_{i,j}^{yx} + O_{i,j}^{xy} \tilde{M}_{i,j}^{yy} O_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.21})$$

$$B_{i,j}^{yy} = (O_{i,j}^{yx})^2 \tilde{M}_{i,j}^{xx} + (O_{i,j}^{yy})^2 \tilde{M}_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.22})$$

- Matriz  $e^{-\Psi}$ : neste caso, obtemos a discretização deste tensor pela relação inversa de (3.22).

$$(e^{-\Psi})_{i,j}^{xx} = (O_{i,j}^{xx})^2 \frac{1}{\Lambda_{i,j}^{xx}} + (O_{i,j}^{xy})^2 \frac{1}{\Lambda_{i,j}^{yy}} \quad (\text{B.23})$$

$$(e^{-\Psi})_{i,j}^{xy} = O_{i,j}^{xx} O_{i,j}^{yx} \frac{1}{\Lambda_{i,j}^{xx}} + O_{i,j}^{xy} O_{i,j}^{yy} \frac{1}{\Lambda_{i,j}^{yy}} \quad (\text{B.24})$$

$$(e^{-\Psi})_{i,j}^{yy} = (O_{i,j}^{yx})^2 \frac{1}{\Lambda_{i,j}^{xx}} + (O_{i,j}^{yy})^2 \frac{1}{\Lambda_{i,j}^{yy}} \quad (\text{B.25})$$

- Decomposição do tipo raiz quadrada: discretização da equação (3.63), com  $\mathbf{Q} = \mathbf{Z}$ .

$$\begin{aligned} F_{i,j}^{xx} = & - [\text{conv}x (uQ_{i,j}^{xx}) + \text{conv}y (vQ_{i,j}^{xx})] + Q_{i,j}^{xy} \left( G_{i,j}^{xy} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \right) + Q_{i,j}^{xx} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} \\ & + \frac{1}{2Wi} \left( \frac{Q_{i,j}^{yy}}{Q_{i,j}^{xx} Q_{i,j}^{yy} - (Q_{i,j}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - ((Q_{i,j}^{xx})^2 + (Q_{i,j}^{xy})^2) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

$$\begin{aligned} F_{i,j}^{xy} = & - [\text{conv}x (uQ_{i,j}^{xy}) + \text{conv}y (vQ_{i,j}^{xy})] + G_{i,j}^{xy} Q_{i,j}^{yy} + Q_{i,j}^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} + Q_{i,j}^{xy} \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \\ & + \frac{1}{2Wi} \left( -\frac{Q_{i,j}^{xy}}{Q_{i,j}^{xx} Q_{i,j}^{yy} - (Q_{i,j}^{xy})^2} \right) [-Q_{i,j}^{xy} (Q_{i,j}^{xx} + Q_{i,j}^{yy})] \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

$$\begin{aligned} F_{i,j}^{yy} = & - [\text{conv}x (uQ_{i,j}^{yy}) + \text{conv}y (vQ_{i,j}^{yy})] + Q_{i,j}^{xy} \left( -G_{i,j}^{xy} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} \right) + Q_{i,j}^{yy} \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \\ & + \frac{1}{2Wi} \left( \frac{Q_{i,j}^{xx}}{Q_{i,j}^{xx} Q_{i,j}^{yy} - (Q_{i,j}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - ((Q_{i,j}^{xy})^2 + (Q_{i,j}^{yy})^2) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

- Matriz antissimétrica  $\mathbf{G}$ : discretização da equação (A.81).

$$G_{i,j}^{xy} = \frac{\left( Q_{i,j}^{xy} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,j} + Q_{i,j}^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} \right) - \left( Q_{i,j}^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} + Q_{i,j}^{xy} \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,j} \right)}{Q_{i,j}^{xx} + Q_{i,j}^{yy}} \quad (\text{B.29})$$

- Núcleo-conformação: discretização da equação (3.122).

$$F_{i,j}^{xx} = - [\text{conv}x (u\mathbb{K}_{i,j}^{xx}) + \text{conv}y (v\mathbb{K}_{i,j}^{xx})] + 2 (\mathbb{K}_{i,j}^{xy} \Omega_{i,j}^{xy} + \mathbb{B}_{i,j}^{xx}) + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i,j}^{xx} \quad (\text{B.30})$$



$$F_{i,j}^{xy} = - [\text{convx} (u\mathbb{K}_{i,j}^{xy}) + \text{convy} (v\mathbb{K}_{i,j}^{xy})] + \Omega_{i,j}^{xy} (\mathbb{K}_{i,j}^{yy} - \mathbb{K}_{i,j}^{xx}) + 2\mathbb{B}_{i,j}^{xy} + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{i,j}^{xy} \quad (\text{B.31})$$

$$F_{i,j}^{yy} = - [\text{convx} (u\mathbb{K}_{i,j}^{yy}) + \text{convy} (v\mathbb{K}_{i,j}^{yy})] + 2 (-\mathbb{K}_{i,j}^{xy} \Omega_{i,j}^{xy} + \mathbb{B}_{i,j}^{yy}) + \frac{1}{W_i} \mathbb{H}_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.32})$$

onde  $\Omega^{xy}$  é calculada por (B.19).

A seguir apresentamos o cálculo dos termos dos tensores  $\mathbb{B}$  e  $\mathbb{H}$  que figuram nas equações acima.

- Matriz  $\mathbb{B}$ : neste caso, a determinação deste tensor varia de acordo com a função empregue, isto é,
  - \* Linear deslocada: discretização da equação (3.130).

$$\mathbb{B}_{i,j}^{xx} = B_{i,j}^{xy} \mathbb{K}_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{xx} (\mathbb{K}_{i,j}^{xx} + \xi) \quad (\text{B.33})$$

$$\mathbb{B}_{i,j}^{xy} = B_{i,j}^{xx} \mathbb{K}_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{xy} (\mathbb{K}_{i,j}^{yy} + \xi) \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbb{B}_{i,j}^{yy} = B_{i,j}^{xy} \mathbb{K}_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{yy} (\mathbb{K}_{i,j}^{yy} + \xi) \quad (\text{B.35})$$

- \*  $\text{Log}_d$ : discretização da equação (3.143).

$$\mathbb{B}_{i,j}^{xx} = \frac{B_{i,j}^{xy}}{\ln(d)} \quad (\text{B.36})$$

$$\mathbb{B}_{i,j}^{xy} = \frac{B_{i,j}^{xy}}{\ln(d)} \quad (\text{B.37})$$

$$\mathbb{B}_{i,j}^{yy} = \frac{B_{i,j}^{yy}}{\ln(d)} \quad (\text{B.38})$$

- \* Raiz  $k$ -ésima: discretização da equação (3.157).

$$\mathbb{B}_{i,j}^{xx} = \frac{1}{k} (B_{i,j}^{xx} \mathbb{K}_{i,j}^{xx} + B_{i,j}^{xy} \mathbb{K}_{i,j}^{xy}) \quad (\text{B.39})$$

$$\mathbb{B}_{i,j}^{xy} = \frac{1}{k} (B_{i,j}^{xx} \mathbb{K}_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{xy} \mathbb{K}_{i,j}^{yy}) \quad (\text{B.40})$$

$$\mathbb{B}_{i,j}^{yy} = \frac{1}{k} (B_{i,j}^{xy} \mathbb{K}_{i,j}^{xy} + B_{i,j}^{yy} \mathbb{K}_{i,j}^{yy}) \quad (\text{B.41})$$

Para o cálculo das componentes de  $\mathbf{B}$ , usamos as equações (B.20), (B.21) e (B.22).

- Matriz  $\mathbb{H}$ : novamente, a determinação da expressão para  $\mathbb{H}$  depende da transformação adotada.

- \* Linear deslocada: discretização da equação (3.131).

$$\mathbb{H}_{i,j}^{xx} = -\mathbb{K}_{i,j}^{xx} \quad (\text{B.42})$$

$$\mathbb{H}_{i,j}^{xy} = -\mathbb{K}_{i,j}^{xy} \quad (\text{B.43})$$

$$\mathbb{H}_{i,j}^{yy} = -\mathbb{K}_{i,j}^{yy} \quad (\text{B.44})$$

- \*  $\text{Log}_d$ : discretização da equação (3.145).

$$\mathbb{H}_{i,j}^{xx} = \frac{1}{\ln(d)} \left[ (d^{-\mathbb{K}})_{i,j}^{xx} - 1 \right] \quad (\text{B.45})$$

$$\mathbb{H}_{i,j}^{xy} = \frac{1}{\ln(d)} (d^{-\mathbb{K}})_{i,j}^{xy} \quad (\text{B.46})$$

$$\mathbb{H}_{i,j}^{yy} = \frac{1}{\ln(d)} \left[ (d^{-\mathbb{K}})_{i,j}^{yy} - 1 \right] \quad (\text{B.47})$$

- \* Raiz  $k$ -ésima: discretização da equação (3.158).

$$\mathbb{H}_{i,j}^{xx} = \frac{1}{2} \left( \frac{\mathbb{K}_{i,j}^{yy}}{\mathbb{K}_{i,j}^{xx} \mathbb{K}_{i,j}^{yy} - (\mathbb{K}_{i,j}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - \left( (\mathbb{K}_{i,j}^{xx})^2 + (\mathbb{K}_{i,j}^{xy})^2 \right) \right] \quad (\text{B.48})$$

$$\mathbb{H}_{i,j}^{xy} = \frac{1}{2} \left( -\frac{\mathbb{K}_{i,j}^{xy}}{\mathbb{K}_{i,j}^{xx} \mathbb{K}_{i,j}^{yy} - (\mathbb{K}_{i,j}^{xy})^2} \right) \left[ -\mathbb{K}_{i,j}^{xy} (\mathbb{K}_{i,j}^{xx} + \mathbb{K}_{i,j}^{yy}) \right] \quad (\text{B.49})$$

$$\mathbb{H}_{i,j}^{yy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\mathbb{K}_{i,j}^{xx}}{\mathbb{K}_{i,j}^{xx} \mathbb{K}_{i,j}^{yy} - (\mathbb{K}_{i,j}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - \left( (\mathbb{K}_{i,j}^{xy})^2 + (\mathbb{K}_{i,j}^{yy})^2 \right) \right] \quad (\text{B.50})$$

### B.0.5 Tratamento da contribuição não-newtoniana em células [B]

O tratamento em células [B] consiste em aproximar os tensores no centro da célula por meio de extrapolação quadrática envolvendo o valor calculado na face e duas células

vizinhas no interior do domínio, isto é, dado um tensor genérico  $\mathbf{Z}$

$$\mathbf{Z}_B = \frac{8}{3}\mathbf{Z}_{face} + 2\mathbf{Z}_{full1} + \frac{1}{3}\mathbf{Z}_{full2}, \quad (\text{B.51})$$

onde  $\mathbf{Z}_B$  é o valor extrapolado no centro da célula  $[\mathbf{B}]$ ,  $\mathbf{Z}_{face}$  é o valor calculado na face e  $\mathbf{Z}_{full1}$  e  $\mathbf{Z}_{full2}$  são valores de  $\mathbf{Z}$  em células  $[\mathbf{F}]$  vizinhas à  $[\mathbf{B}]$ .

Este valor calculado na face obtem-se por meio do emprego de simplificações na equação constitutiva do tensor  $\boldsymbol{\tau}$  ou tensor conformação  $\mathbf{A}$ , que também fazemos para os tensores das decomposições matriciais. Estas simplificações ocorrem mediante às condições de não-escorregamento e impermeabilidade, resultando em (2.35) e (2.36). Além disso, algumas derivadas espaciais das componentes  $u$  e  $v$  também são anuladas, de acordo com o posicionamento das paredes sólidas, em consequência destas condições. Desta forma, aplicamos a estratégia de integração temporal com o método RK21 às equações dos tensores na face, mesmo procedimento empregue em células  $[\mathbf{F}]$ . Vale ressaltar que, para as discretizações apresentadas a seguir, foram empregues as mesmas simplificações nas equações constitutivas adotadas em [42] para o cálculo na face de células  $[\mathbf{B}]$ .

- Fronteira rígida paralelo ao eixo  $y$

- Padrão: discretização da equação (4.16), com  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{Z}$ .

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} = -\frac{1}{W_i}\tau_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \quad (\text{B.52})$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \left( \tau_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} + \xi \right) - \frac{1}{W_i}\tau_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \quad (\text{B.53})$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = 2\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \tau_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} - \frac{1}{W_i}\tau_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \quad (\text{B.54})$$

- Tensor conformação: discretização da equação (4.17), para  $\mathbf{A} = \mathbf{Z}$  com  $f$  e  $P$  tomados como em (2.11) e (2.12), respectivamente.

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} = \frac{1}{W_i} \left( 1 - A_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \right) \quad (\text{B.55})$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} A_{i,j}^{xx} - \frac{1}{W_i} A_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \quad (\text{B.56})$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = 2 \left( \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} A_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + A_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \right) + \frac{1}{W_i} \left( 1 - A_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \right) \quad (\text{B.57})$$

- Log-conformação: discretização da equação (4.18), tomando  $\Psi = \mathbf{Z}$  com as funções  $f$  e  $P$  definidas como em (3.33) e (3.34), respectivamente.

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} = 2 \left( \Psi_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \Omega_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + B_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \right) + \frac{1}{W_i} \left[ (e^{-\Psi})_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} - 1 \right] \quad (\text{B.58})$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \Omega^{x,y} \left( \Psi_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} - \Psi_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \right) + 2B_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + \frac{1}{W_i} (e^{-\Psi})_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \quad (\text{B.59})$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = -2 \left( \Psi_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \Omega_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + B_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \right) + \frac{1}{W_i} \left[ (e^{-\Psi})_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} - 1 \right] \quad (\text{B.60})$$

- \* Matriz  $\tilde{\mathbf{M}}$ : discretização da equação (3.15).

$$\tilde{M}_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} = O_{i+\frac{1}{2},j}^{yx} O_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \quad (\text{B.61})$$

$$\tilde{M}_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = O_{i+\frac{1}{2},j}^{yx} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i,j} O_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \quad (\text{B.62})$$

$$\tilde{M}_{i+\frac{1}{2},j}^{yx} = O_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} O_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \quad (\text{B.63})$$

$$\tilde{M}_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = O_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} O_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \quad (\text{B.64})$$

- \* Matrizes  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$  e  $\tilde{\mathbf{B}}$ : equações (B.16), (B.17) e (B.18) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .
- \* Matrizes  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{B}$ : equações (B.19), (B.20), (B.21) e (B.22) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .
- \* Matriz  $e^{-\Psi}$ : equações (B.23), (B.24) e (B.25) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .
- Decomposição do tipo raiz quadrada: discretização da equação (3.63), com  $\mathbf{Q} = \mathbf{Z}$ .

$$\begin{aligned} F_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} &= Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} G_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + \\ &+ \frac{1}{2W_i} \left( \frac{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy}}{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} - (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - \left( (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx})^2 + (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy})^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

$$\begin{aligned}
F_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} &= G_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} + Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} + \\
&+ \frac{1}{2Wi} \left( -\frac{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy}}{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} - (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy})^2} \right) \left[ -Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} + Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy}) \right]
\end{aligned} \tag{B.66}$$

$$\begin{aligned}
F_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} &= Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \left( -G_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \right) + \\
&+ \frac{1}{2Wi} \left( \frac{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx}}{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} - (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - \left( (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xy})^2 + (Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy})^2 \right) \right]
\end{aligned} \tag{B.67}$$

\* Matriz antissimétrica **G**: discretização da equação (A.81).

$$G_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \frac{-Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j}}{Q_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} + Q_{i+\frac{1}{2},j}^{yy}} \tag{B.68}$$

– Núcleo-conformação: discretização da equação (3.122).

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} = 2 \left( \mathbb{K}_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \Omega_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + \mathbb{B}_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \right) + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \tag{B.69}$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \Omega_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \left( \mathbb{K}_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} - \mathbb{K}_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} \right) + 2\mathbb{B}_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \tag{B.70}$$

$$F_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = 2 \left( -\mathbb{K}_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} \Omega_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} + \mathbb{B}_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \right) + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} \tag{B.71}$$

\* Matriz **B**: neste caso, a determinação deste tensor varia de acordo com a função empregue, isto é,

- Linear deslocada: equações (B.33), (B.34) e (B.35) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .
- Loga: equações (B.36), (B.37) e (B.38) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .
- Raiz  $k$ -ésima: equações (B.39), (B.40) e (B.41) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .

Para o cálculo das componentes de **B**, usamos as equações (B.20), (B.21) e (B.22) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ .

\* Matriz  $\mathbb{H}$ : novamente, a determinação da expressão para  $\mathbb{H}$  depende da transformação adotada.

- Linear deslocada: equações (B.42), (B.43) e (B.44) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ ..
- *Loga*: equações (B.45), (B.46) e (B.47) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ ..
- Raiz  $k$ -ésima: equações (B.48), (B.49) e (B.50) calculadas em  $(i + \frac{1}{2}, j)$ ..

Por diferenças centrais de segunda ordem obtemos a única derivada não-nula das componentes da velocidade  $\mathbf{u}$ , para quando tomamos a fronteira rígida paralela ao eixo  $y$ , como

$$\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{\delta x}, \quad (\text{B.72})$$

onde

$$v_{i,j} = \frac{1}{2} \left( v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} \right). \quad (\text{B.73})$$

Tomemos novamente um tensor genérico  $\mathbf{Z}$ , como representante de todos os tensores aqui considerados. Então, após o cálculo de  $\mathbf{Z}_{i+\frac{1}{2},j}$  na face, aplicamos a extrapolação (B.51), ou seja,

$$\mathbf{Z}_{i,j} = \frac{8}{3}\mathbf{Z}_{i+\frac{1}{2},j} - 2\mathbf{Z}_{i+1,j} + \frac{1}{3}\mathbf{Z}_{i+2,j}. \quad (\text{B.74})$$

- Fronteira rígida paralelo ao eixo  $x$ :

– Padrão: discretização da equação (4.16), com  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{Z}$ .

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} = 2 \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \tau_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} - \frac{1}{W_i} \tau_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \quad (\text{B.75})$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} = \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \left( \tau_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} + \xi \right) - \frac{1}{W_i} \tau_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \quad (\text{B.76})$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} = -\frac{1}{W_i} \tau_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \quad (\text{B.77})$$

- Tensor conformação: discretização da equação (4.17), para  $\mathbf{A} = \mathbf{Z}$  com  $f$  e  $P$  tomados como em (2.11) e (2.12), respectivamente.

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} = 2 \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} A_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \frac{1}{W_i} \left( 1 - A_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \right) \quad (\text{B.78})$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j} A_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - \frac{1}{W_i} A_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \quad (\text{B.79})$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} = \frac{1}{Wi} \left( 1 - A_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \right) \quad (\text{B.80})$$

- Log-conformação: discretização da equação (4.18), tomando  $\Psi = \mathbf{Z}$  com as funções  $f$  e  $P$  definidas como em (3.33) e (3.34), respectivamente.

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} = 2 \left( \Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \Omega_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + B_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \right) + \frac{1}{Wi} \left[ (e^{-\Psi})_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} - 1 \right] \quad (\text{B.81})$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} = \Omega_{i,j+\frac{1}{2}}^{x,y} \left( \Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - \Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \right) + 2B_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \frac{1}{Wi} (e^{-\Psi})_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \quad (\text{B.82})$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} = -2 \left( \Psi_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \Omega_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + B_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \right) + \frac{1}{Wi} \left[ (e^{-\Psi})_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - 1 \right] \quad (\text{B.83})$$

- \* Matriz  $\tilde{\mathbf{M}}$ : discretização da equação (3.15).

$$\tilde{M}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} = O_{i,j+\frac{1}{2}}^{yx} O_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \quad (\text{B.84})$$

$$\tilde{M}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} = O_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} O_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \quad (\text{B.85})$$

$$\tilde{M}_{i,j+\frac{1}{2}}^{yx} = O_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} O_{i,j+\frac{1}{2}}^{yx} \quad (\text{B.86})$$

$$\tilde{M}_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} = O_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} O_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \quad (\text{B.87})$$

- \* Matrizes  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$  e  $\tilde{\mathbf{B}}$ : equações (B.16), (B.17) e (B.18) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .

- \* Matrizes  $\mathbf{\Omega}$  e  $\mathbf{B}$ : equações (B.19), (B.20), (B.21) e (B.22) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .

- \* Matriz  $e^{-\Psi}$ : equações (B.23), (B.24) e (B.25) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .

- Decomposição do tipo raiz quadrada: discretização da equação (3.63), com  $\mathbf{Q} = \mathbf{Z}$ .

$$\begin{aligned} F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} &= Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \left( G_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} \right) + \\ &+ \frac{1}{2Wi} \left( \frac{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy}}{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - \left( (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx})^2 + (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy})^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.88})$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} &= G_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} + \\
&+ \frac{1}{2Wi} \left( -\frac{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy}}{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy})^2} \right) \left[ -Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} + Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy}) \right]
\end{aligned} \tag{B.89}$$

$$\begin{aligned}
F_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} &= -Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} G_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \\
&+ \frac{1}{2Wi} \left( \frac{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx}}{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy})^2} \right) \left[ 1 - \left( (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy})^2 + (Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy})^2 \right) \right]
\end{aligned} \tag{B.90}$$

\* Matriz antissimétrica **G**: discretização da equação (A.81).

$$G_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} = \frac{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \frac{\partial u}{\partial y} |_{i,j+\frac{1}{2}}}{Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} + Q_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy}} \tag{B.91}$$

– Núcleo-conformação: discretização da equação (3.122).

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} = 2 \left( \mathbb{K}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \Omega_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \mathbb{B}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \right) + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \tag{B.92}$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} = \Omega_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \left( \mathbb{K}_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} - \mathbb{K}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xx} \right) + 2\mathbb{B}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \tag{B.93}$$

$$F_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} = 2 \left( -\mathbb{K}_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} \Omega_{i,j+\frac{1}{2}}^{xy} + \mathbb{B}_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \right) + \frac{1}{Wi} \mathbb{H}_{i,j+\frac{1}{2}}^{yy} \tag{B.94}$$

\* Matriz **B**: neste caso, a determinação deste tensor varia de acordo com a função empregue, isto é,

- Linear deslocada: equações (B.33), (B.34) e (B.35) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .
- $\text{Log}_d$ : equações (B.36), (B.37) e (B.38) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .
- Raiz  $k$ -ésima: equações (B.39), (B.40) e (B.41) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .

Para o cálculo das componentes de **B**, usamos as equações (B.20), (B.21) e (B.22) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ .



\* Matriz  $\mathbb{H}$ : novamente, a determinação da expressão para  $\mathbb{H}$  depende da transformação adotada.

- Linear deslocada: equações (B.42), (B.43) e (B.44) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ ..
- $Log_d$ : equações (B.45), (B.46) e (B.47) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ ..
- Raiz  $k$ -ésima: equações (B.48), (B.49) e (B.50) calculadas em  $(i, j + \frac{1}{2})$ ..

Por diferenças centrais de segunda ordem obtemos a única derivada não-nula das componentes da velocidade  $\mathbf{u}$ , para quando tomamos a fronteira rígida paralela ao eixo  $x$ , dada por

$$\frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta y}, \quad (\text{B.95})$$

onde

$$u_{i,j+1} = \frac{1}{2} \left( u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i-\frac{1}{2},j+1} \right). \quad (\text{B.96})$$

Após o cálculo de  $\mathbf{Z}_{i,j+\frac{1}{2}}$  na face, aplicamos a extrapolação (B.51), isto é,

$$\mathbf{Z}_{i,j} = \frac{8}{3}\mathbf{Z}_{i,j+\frac{1}{2}} - 2\mathbf{Z}_{i,j+1} + \frac{1}{3}\mathbf{Z}_{i,j+2}. \quad (\text{B.97})$$

## B.0.6 Tratamento da contribuição não-newtoniana em células [I] e [O]

Para as regiões de entrada e saída de fluidos, todos os cálculos são realizados com o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ , equações (5.2) e (2.39), respectivamente, independentemente do métodos adotado. Esta abordagem é empregue, uma vez que não possuímos condições de "inflow" e "outflow" para os tensores das decomposições matriciais. Assim, calculamos o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  nestas regiões, e posteriormente, transferimos os valores para o tensor conformação  $\mathbf{A}$ , que por sua vez, permite-nos obter os tensores das decomposições.

Na região de entrada de fluido impomos a solução analítica (5.2), que é calculada na face das células células [I]. Sem perda de generalidade, consideraremos a região de saída de fluido paralela ao eixo  $y$ . Logo, as discretizações das equações (5.2) são dadas por

$$\tau_{i+\frac{1}{2},j}^{xx} = \frac{2Wi}{Re} (1 - \beta) \left( \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \right)^2 \quad (\text{B.98})$$

$$\tau_{i+\frac{1}{2},j}^{xy} = \frac{1}{Re} (1 - \beta) \left( \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} \right) \quad (\text{B.99})$$

e

$$\tau_{i+\frac{1}{2},j}^{yy} = 0 \quad (\text{B.100})$$

Após calculado na face de  $[\mathbf{I}]$ , usamos uma extrapolação linear para inserir um valor no centro da célula, dada por

$$\tau_{i,j}^{xx} = 2\tau_{i+\frac{1}{2}}^{xx} - \tau_{i+1,j}^{xx}, \quad (\text{B.101})$$

$$\tau_{i,j}^{xy} = 2\tau_{i+\frac{1}{2}}^{xy} - \tau_{i+1,j}^{xy}, \quad (\text{B.102})$$

e

$$\tau_{i,j}^{yy} = -\tau_{i+1,j}^{yy}, \quad (\text{B.103})$$

Para a região de saída de fluido, a condição adotada é Neumann homogêneo (2.39). Novamente, sem perda de generalidade, consideramos esta região paralela ao eixo  $y$ . Assim, as equações para a contribuição não-newtoniana  $\boldsymbol{\tau}$  são dadas por

$$\tau_{i,j}^{xx} = -\tau_{i-1,j}^{xx}, \quad (\text{B.104})$$

$$\tau_{i,j}^{xy} = -\tau_{i-1,j}^{xy} \quad (\text{B.105})$$

e

$$\tau_{i,j}^{yy} = -\tau_{i-1,j}^{yy} \quad (\text{B.106})$$

Finalmente, após o cálculo destes tensores, nas regiões de entrada e saída de fluido, estes são transferidos para o tensor conformação  $\mathbf{A}$ , que por sua vez, proporciona o calculo dos demais tensores das decomposições matriciais.

## Cálculo dos tensores na tampa da cavidade

Nesta etapa do trabalho, iremos discutir o método de extrapolação empregue no cálculo dos tensores na tampa da cavidade, bem como outra possibilidade que pode ser adotada para o cálculo destes tensores, embora não empregue neste trabalho. A notação que usaremos para as componentes dos tensores são as mesmas adotadas no Apêndice B. A extrapolação usada para o cálculo dos tensores na tampa, é uma extrapolação linear, na qual, para o cálculo de um tensor nesta região, usamos apenas dois tensores definidos no centro de células  $[\mathbf{F}]$  próximas à célula a ser calculada, isto é,

$$Z_{i,j} = 2Z_{i,j-1} - Z_{i,j-2}, \quad (\text{C.1})$$

onde  $Z$  é um escalar qualquer, representando as componentes do tensor polimérico e dos tensores das decomposições matriciais. A seguir, apresentamos as equações para o cálculo das extrapolações com o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ . Não apresentamos as equações para os tensores das decomposições, uma vez que o raciocínio empregue para estes tensores é análogo ao que apresentamos para  $\boldsymbol{\tau}$ . Desta forma, as equações para o cálculo das componentes  $\tau^{xx}$ ,  $\tau^{xy}$  e  $\tau^{yy}$  são dadas, respectivamente, por

$$\tau_{i,j}^{xx} = 2\tau_{i,j-1}^{xx} - \tau_{i,j-2}^{xx}, \quad (\text{C.2})$$

$$\tau_{i,j}^{xy} = 2\tau_{i,j-1}^{xy} - \tau_{i,j-2}^{xy} \quad (\text{C.3})$$

e

$$\tau_{i,j}^{yy} = 2\tau_{i,j-1}^{yy} - \tau_{i,j-2}^{yy}. \quad (\text{C.4})$$

Outra alternativa de solução na tampa, é semelhante ao que foi adotado nas paredes sólidas, células **[B]** estáticas. Entretanto, não mais temos a condição de não-escorregamento, equação (2.35). Mas, agora, consideramos as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade como definidas em (5.6).

Com esta configuração, as únicas derivadas espaciais da velocidade que se anularão são  $\frac{\partial u}{\partial y}$  e  $\frac{\partial v}{\partial x}$ . As demais derivadas são obtidas da seguinte forma

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 8 \left( 1 + \tanh \left( 8 \left( t - \frac{1}{2} \right) \right) \right) 2x(1-x)(1-2x) \quad (\text{C.5})$$

e

$$\frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial u}{\partial x}, \quad (\text{C.6})$$

resultantes da derivação, analítica, de  $u$ , equação (5.6), e da equação da continuidade, equação (2.9), respectivamente.

Novamente, apresentamos as equações do tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$  (2.25), apenas o modelo Oldroyd-B, com as simplificações discutidas acima. Não faremos para os tensores das decomposições, uma vez que o raciocínio empregue para estes tensores é semelhante ao que empreenderemos para o tensor polimérico  $\boldsymbol{\tau}$ . Assim, apresentamos as equações do tensor polimérico com as simplificações sugeridas, dadas por

$$\frac{\partial \tau^{xx}}{\partial t} + \frac{\partial (u\tau^{xx})}{\partial x} = 2\frac{\partial u}{\partial x}(\tau^{xx} + \xi) - \frac{\tau^{xx}}{Wi}, \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} + \frac{\partial (u\tau^{xy})}{\partial x} = -\frac{\tau^{xy}}{Wi} \quad (\text{C.8})$$

e

$$\frac{\partial \tau^{yy}}{\partial t} + \frac{\partial (u\tau^{yy})}{\partial x} = 2\frac{\partial v}{\partial y}(\tau^{yy} + \xi) - \frac{\tau^{yy}}{Wi}. \quad (\text{C.9})$$

---

## Referências Bibliográficas

- [1] A. Afonso, P. J. Oliveira, F. T. Pinho, and M. A. Alves. The log-conformation tensor approach in the finite-volume method framework. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 157:55–65, 2009.
- [2] A. M. Afonso, F. T. Pinho, and M. A. Alves. The kernel-conformation constitutive laws. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 167-168:30–37, 2012.
- [3] M. A. Alves, P. J. Oliveira, and F. T. Pinho. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 41:47–75, 2003.
- [4] N. Balci, B. Thomases, M. Renardy, and C. R. Doering. Symmetric factorization of the conformation tensor in viscoelastic fluid models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 166:546–553, 2011.
- [5] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1967.
- [6] F. Belblidia, H. Matallah, B. Puangkird, and M. F. Webster. Alternative subcell discretisations for viscoelastic flow: Stress interpolation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 146:59–78, 2007.
- [7] A. N. Beris and R. Sureshkumar. Simulation of time-dependent viscoelastic channel poiseuille flow at high reynolds numbers. *Chem. Eng. Sci.*, 51:1451–1471, 1996.
- [8] R. B. Bird, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of polymeric liquids*. John Wiley and Sons Inc., New York, 1987.
- [9] G. Bohme and A. Muller. Stress analysis for a cavity flow of a memory fluid. *Arch. Appl. Mech.*, 81:1807–1826, 2011.
- [10] D. L. Brown, R. Cortez, and M. L. Minion. Accurate projection methods for the incompressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 168:464–499, 2001.
- [11] J. Butcher. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley and Sons, 2003.

- 
- [12] A.N. Beris C.D. Dimitropoulos, R. Sureshkumar. Direct numerical simulation of viscoelastic turbulent channel flow exhibiting drag reduction: effect of the variation of rheological parameters. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 79:433–468, 1998.
  - [13] A.N. Beris R.A. Handler C.D. Dimitropoulos, R. Sureshkumar. Budgets of reynolds stress, kinetic energy and streamwise enstrophy in viscoelastic turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 13:1016–1027, 2001.
  - [14] X. Chen, H. Marschall, M. Schäfer, and D. Bothe. A comparison of stabilisation approaches for finite-volume simulation of viscoelastic fluid flow. *Int. J. Comput. Fluid Dynamics*, 27:229–250, 2013.
  - [15] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comp. Phys.*, 2:12–26, 1967.
  - [16] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comput.*, 2:745–762, 1968.
  - [17] A. J. Chorin and J. E. A. Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer, 2000.
  - [18] O. M. Coronado, D. Arora, M. Behr, and M. Pasquali. A simple method for simulating general viscoelastic fluid flows with an alternate log-conformation formulation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 147:189–199, 2007.
  - [19] H. Damanik, J. Hron, A. Ouazzi, and S. Turek. A monolithic fem approach for the log-conformation reformulation (lcr) of viscoelastic flow problems. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 165:1105–1113, 2010.
  - [20] C. R. de Oliveira. *Intermediate Spectral Theory and Quantum Dynamics*. Basel, Birkhauser, 2008.
  - [21] Y. Dubief and S.K. Lele. *Direct numerical simulation of polymer flow*. in: Center for Turbulence Research Annual Research Briefs, NASA Ames/Stanford University, 2001.
  - [22] F. Dupret and J. M. Marchal. Loss of evolution in the flow of viscoelastic fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 20:143–171, 1986.
  - [23] M. V. Dyke. *An Album of Fluid Motion*. Parabolic Press, 12 edition, 1982.
  - [24] B. Eckhardt, J. Kronjager, and J. Schumacher. Stretching of polymers in a turbulent environment. *Comput. Phys. Commun.*, 147:538–543, 2002.

- 
- [25] Y. Fan, R. I. Tanner, and N. Phan-Thien. Galerkin/least-square finite-element methods for steady viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 84:233–256, 1999.
  - [26] R. Fattal and R. Kupferman. Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 123:23–37, 2004.
  - [27] R. Fattal and R. Kupferman. Time-dependent of viscoelastic flows at high weissenberg number using the log-conformation representation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 126:23–37, 2005.
  - [28] A. O. Fortuna. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. Edusp, 2000.
  - [29] A. M. Grillet, B. Yang, B. Khomami, and E. S. G. Shaqfeh. Modeling of viscoelastic lid driven cavity flow using finite element simulations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 88:99–131, 1999.
  - [30] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependet viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
  - [31] M. A. Hulsen. Some properties and analytical expressions for plane flow of leonov and giesekus models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 30:85–92, 1988.
  - [32] M. A. Hulsen. A sufficient condition for a positive definite configuration tensor in differential models. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 38:93–100, 1990.
  - [33] M. A. Hulsen, R. Fattal, and R. Kupferman. Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high weissenberg number: Stabilized simulations using matrix logarithms. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 127:27–39, 2005.
  - [34] M. A. Hulsen, A. P. G. Van Hell, and B. H. A. A. Van den Brule. Simulation of viscoelastic flows using brownian configuration fields. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 70:79–101, 1997.
  - [35] P. Ilg, E. de Angelis, I. V. Karlin, C. M. Casciola, and S. Succi. Polymer dynamics in wall turbulent flow. *Europhys. Lett.*, 58:616–622, 2002.
  - [36] F. Ilinca, J. F. Hétu, and D. Pelletier. A unified finite element algorithm for two-equation models of turbulence. *Comput. Fluids*, 27:291–310, 1998.
  - [37] A. Kane, R. Guenette, and A. Fortin. A comparison of four implementations of the log-conformation formulation for viscoelastic fluid flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 164:45–50, 2009.

- 
- [38] R. Keunings. On the high weissenberg number problem. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 20:209–226, 1986.
- [39] R. Keunings and M. J. Crochet. Numerical simulation of the flow of a viscoelastic fluid through an abrupt contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 14:279–299, 1984.
- [40] Y. Kwon. Finite element analysis of planar 4:1 contraction flow with the tensor-logarithmic formulation of differential constitutive equations. *Korea-Australia Rheol. J.*, 16:183–191, 2004.
- [41] A. Lozinski and R. G. Owens. An energy estimate for the oldroyd-b model theory and applications. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 112:161–176, 2003.
- [42] F. P. Martins. Desenvolvimento de um método numérico implícito para a simulação de escoamentos viscoelásticos com superfícies livres. Mestrado, Instituto de Ciências Matemática e de Computação, Universidade de São Paulo, 2009.
- [43] T. C. B. McLeish and R. G. Larson. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer. *J. Rheol.*, 42:101–110, 1998.
- [44] T. Min, J. Y. Yoo, and H. Choi. Effect of spatial discretization schemes on numerical solutions of viscoelastic fluid flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 100:27–47, 2001.
- [45] A. I. P. Miranda and P. J. Oliveira. Start-up times in viscoelastic channel and pipe flows. *Korea-Australia Rheol. J.*, 22:65–73, 2010.
- [46] E. Mitsoulis and T. Zisis. Flow of bingham plastics in a lid-driven square cavity. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 101:173–180, 2001.
- [47] G. Mompean and M. Deville. Unsteady finite volume simulation of oldroyd-b fluid through a three-dimensional planar contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 72:253–279, 1997.
- [48] P. J. Oliveira. An exact solution for tube and slit flow of a fene-p fluid. *Acta Mech.*, 158:157–167, 2002.
- [49] P. J. Oliveira and A. I. P. Miranda. A numerical study of steady and unsteady viscoelastic flow past bounded cylinders. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 127:51–66, 2005.
- [50] R. G. Owens and T. N. Phillips. *Computational Rheology*. Imperial College Press, London, 2002.



- 
- [51] T. W. Pan, J. Hao, and R. Glowinski. On the simulation of a time-dependent cavity flow of an oldroyd-b fluid. *Int. J. for numer. methods fluids*, 60:791–808, 2009.
  - [52] G. S. Paulo, C. M. Oishi, M. F. Tomé, M. A. Alves, and F. T. Pinho. Numerical solution of the fene-cr model in complex flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 204:50–61, 2014.
  - [53] T. Phillips and A. Williams. Comparison of creeping and inertial flow of an oldroyd-b fluid through planar and axisymmetric contractions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 108:25–47, 2002.
  - [54] M. Piller and E. Nobile. Direct numerical simulation of turbulent heat transfer in a square duct. *Int. J. Numer. Methods for Heat and Fluid Flow*, 12:658–686, 2002.
  - [55] G.A. Pinto P.J. Oliveira, F.T. Pinho. Numerical simulation of non-linear elastic flows with a general collocated finite-volume method. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 79:1–43, 1998.
  - [56] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992.
  - [57] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Numerical mathematics*. Springer, 2000.
  - [58] A. Quarteroni, F. Saleri, and A. Veneziani. Factorization methods for the numerical approximation of navier-stokes equations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 188:505–526, 2000.
  - [59] M. Renardy. Viscoelastic stagnation point flow in a wake. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 138:206–208, 2006.
  - [60] R. Sureshkumar and A. N. Beris. Effect of artificial stress diffusivity on the stability of numerical calculations and the flow dynamics of time-dependent viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 60:53–80, 1995.
  - [61] R. Sureshkumar, A. N. Beris, and R. A. Handler. Direct numerical simulation of turbulent channel flow of a polymer solution. *Phys. Fluids*, 9:743–755, 1997.
  - [62] R. I. Tanner and K. Walters. *Rheology: An Historical Perspective*. Elsevier Science, Amsterdam, 1998.
  - [63] R. Témam. Sur l’approximation de la solution des équations de navier-stokes par la méthode des pas fractionnaires (ii). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 33:377–385, 1969.

- 
- [64] M. F. Tomé, A. Castelo, A. M. Afonso, F. T. Pinho, and M. A. Alves. *Application of the log-conformation technique to 3D free surface flows*. Congresso de Métodos Numéricos en Ingeniería, Barcelona, 2009.
- [65] T. Vaithianathan and L. R. Collins. Numerical approach to simulating turbulent flow of a viscoelastic polymer solution. *J. Comput. Phys.*, 187:1–21, 2003.
- [66] T. Vaithianathan, A. Robert, J. G. Brasseur, and L. R. Collins. An improved algorithm for simulating three-dimensional, viscoelastic turbulence. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 140:3–22, 2006.
- [67] D. Vola, L. Boscardin, and J. C. Latché. Laminar unsteady flows of bingham fluids: a numerical strategy and some benchmark results. *J. Comput. Phys.*, 187:441–456, 2003.
- [68] A. Wachs, J. R. Clermont, and A. Khalifeh. Computations of non-isothermal viscous and viscoelastic flows in abrupt contractions using a finite volume method. *Eng. Comput.*, 8:874–901, 2002.
- [69] K. Walters and M. F. Webster. The distinctive cfd challenges of computational rheology. *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 43:577–596, 2003.
- [70] S. C. Xue, R. Tanner, and N. Phan-Thien. Numerical modelling of transient viscoelastic flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 123:33–58, 2004.
- [71] K. Yapici, B. Karasozen, and Y. Uludag. Finite volume simulation of viscoelastic laminar flow in a lid-driven cavity. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 164:51–65, 2009.
- [72] J. Zhang. An augmented lagrangian approach to bingham fluid flows in a lid-driven square cavity with piecewise linear equal-order finite elements. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 199:3051–3057, 2010.