# Cálculo de escoamentos com superfície livre de soluções poliméricas

## 3.1 Introdução

3

Este capítulo resume as equações, as condições de contorno e o método computacional usado para analisar os escoamentos de soluções poliméricas com superfície livre usando a equação de transporte geral do tensor conformação.

O modelo matemático do escoamento com superfície livre requer resolver um problema de condição de contorno livre, isto é problemas onde o domínio de definição das equações diferenciais que descrevem o escoamento é desconhecido e sua localização faz parte da solução do problema.

O método usado para resolver os escoamentos com superfície livre de fluidos Newtonianos é também aplicável para resolver os mesmos problemas com líquidos viscoelásticos. Diferentes formas de lidar com o problema de superfície livre são discutidos em detalhe por Kistler (1983-1984)[17], Christodoulou (1990) [30], e deAlmeida (1995) [37].

A discussão do método usado na solução do problema de superfície livre é um sínteses do trabalho apresentado por Carvalho (1996) [40].

Os métodos computacionais para resolver escoamentos viscoelásticos são ainda uma área de pesquisa ativa, e alguns métodos de resolver as equações diferenciais parciais de tais escoamentos foram propostas em anos recentes, una revisão destes métodos foi apresentada por Baaijens (1998) [46].

O método usado aqui é uma pequena modificação do DAVSS-G/SUPG (Discrete Adaptive Viscous Split Stress, independent velocity Gradient interpolation, Streamline Upwind Petrov-Galerkin) de Sun et al. (1999) [50], o mais novo membro de uma familia de Métodos de Resíduos Ponderados com funções base de elementos finitos que foi originado a partir do método EVSS (Elastic-Viscous Split Stress) proposto por Rajagopalan (1990) [31].

O método EVSS foi aplicado em escoamentos de revestimento por Cai (1993) [35]. O método DAVSS-G/SUPG e suas variantes converge de forma

rápida e exata para números de Weissenberg moderados como mencionado por Szady et al. (1995) [38], Guenette et al. (1995) [39], Azaiez et al. (1996), [42], Fan (1997) [43] e Sun et al. (1999) [50].

A aplicação do método de resíduos ponderados e o DAVSS-G/SUPG neste caso às equações de transporte de massa, quantidade de movimento e tensor conformação polimérica junto com as equações de geração de malha elíptica e as condições de contorno adequadas dão origem a um sistema de equações algébricas não lineares que é resolvido pelo método de Newton com um método de continuação de pseudo comprimento de arco de primeira ordem (Bolstad et al., 1986 [22]).

Devido ao elevado número de equações diferenciais (12 ou 13 por elemento para escoamentos bidimensionais, 22 por elemento para escoamentos tridimensionais), um grande número de derivadas devem ser calculadas para obter o Jaconiano analítico.

Para reduzir o número de derivadas analíticas a serem implementadas num programa computacional, os campos que descrevem o mapeamento, velocidade, gradiente de velocidade e as equações dos resíduos da equação de geração de malha elíptica, equação de quantidade de movimento linear, a definição do gradiente de velocidade interpolado e a equação de transporte para o tensor conformação, são mantidos em sua forma vetorial ou tensorial respectivamente.

O número de incógnitas é reduzido dessa forma a 5 e como conseqüência acontece o mesmo com o número de derivadas analíticas como é apresentado por Pasquali (2000) [52].

As equações dos resíduos ponderados e os elementos da matriz Jacobiana do método de Newton dependem da forma particular da energia livre e dos termos de geração na equação de transporte do tensor conformação.

Um método geral de escrever o código computacional que independe da escolha do modelo constitutivo foi apresentado por Pasquali (2000) [52]; dessa forma é necessário modificar somente algumas subrotinas específicas de um programa computacional para resolver escoamentos de soluções poliméricas com superfície livre com diferentes equações constitutivas.

### 3.2 Método de geração de malha elíptica.

Para calcular um escoamento com superfície livre, o domínio físico desconhecido é mapeado num domínio de referência fixo, conhecido como domínio computacional.



Figura 3.1: Mapeamento do domínio físico desconhecido apriori num domínio computacional de referência.

Formas comuns de construir o mapeamento são o método de "splines"(Kistler, 1983 [18]); método de geração de malha elíptica (Christodoulou, 1990 [30]), onde a função de mapeamento é determinado a partir da solução de uma equação diferencial elíptica; e o método de deformação do domínio (deAlmeida, 1995 [37]), onde a função de mapeamento é obtida resolvendo a equação de equilíbrio de um sólido elástico hipotético cujo estado deformado é o domínio físico.

A versão do método de geração elíptica de malha é apresentado de forma resumida aqui e é descrita em detalhe por de Santos (1991) [32] e Benjamin (1994) [36].

Quando o domínio físico é complexo, uma prática usual é subdividí-lo em vários subdomínios mais simples, estes devem ser quadrangulares e então cada um desses é mapeado em subdomínios separados no domínio computacional.

Como é mostrado na Fig. 3.1 a posição no domínio físico  $\Omega$  é denotado por **x**, e a posição no domínio computacional  $\Omega_0$  por  $\xi$ .

A função de mapeamento que relaciona o domínio computacional com o domínio físico é chamado de mapeamento direto e é dado pela função  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi)$ .

O mapeamento do domínio físico para o domínio computacional é chamado de mapeamento inverso e é representado pela função  $\xi = \xi(\mathbf{x})$ . O mapeamento deve ser inversível e deve mapear os contornos dos subdomínios computacionais para os contornos do domínio físico. Ambos o mapeamento direto e o inverso são necessários para calcular as integrais que aparecem nas equações dos resíduos ponderados e os elementos da matriz Jacobiana do método de Newton; porém, só um deles deve ser calculado explicitamente, a partir do qual o outro pode ser achado.

O mapeamento inverso deve satisfazer a equação diferencial elíptica:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \xi = 0 \tag{3-1}$$

onde  $\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$  denota a diferenciação no espaço físico, e o tensor  $\tilde{\mathbf{D}}$  controla o espaçamento entre as linhas de  $\xi_1$  – *constante* e  $\xi_2$  – *constante* (Benjamin, 1994 [36]).

Embora a equação. 3-1 descreva o mapeamento inverso, o mapeamento direto  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi)$  é construído usando a funções base de elementos finitos  $\phi_{\mathbf{x}}^{\alpha}(\xi)$ ,

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\alpha} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{x}}^{\alpha}(\boldsymbol{\xi}) ; \qquad x_i = x_i^{\alpha} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{x}}^{\alpha}(\boldsymbol{\xi})$$
(3-2)

onde  $\mathbf{x}^{\alpha}$  são um conjunto de incógnitas chamadas de coeficientes das funções base, e o índice *i* indica a direção no espaço físico, e recebe os valores 1, 2 no escoamento bidimensional e 1, 2, e 3 no escoamento tridimensional.

É usada a convenção do somatório de Einstein no caso de índices repetidos serem itálicos ou gregos. O índice subscrito das funções base indica a variável que é aproximada por esta função base e é necessária porque diferentes funções base são usadas para aproximar diferentes variáveis.

A letra grega identifica cada função base do tipo de elemento escolhido para representar a variável de interesse e pode tomar o valor entre 1 e o número de funções base do tipo de elemento escolhido. As funções base não precisam de índices itálicos porque as mesmas funções base são usadas para aproximar as componentes de mesma variável física.

O índice subscrito itálico nos coeficientes das funções base representam as componentes vetoriais ou tensoriais no espaço e o sobrescrito, em letras gregas, identifica cada coeficiente . Os componentes físicos do valor aproximado de uma variável são identificados com índices itálicos subscritos (Pasquali, 2000 [52]).

As possíveis condições de contorno usadas para resolver a equação 3-1 são mostradas na figura 3.2 e são:

- ângulo prescrito: o ângulo θ entre as linhas ξ<sub>i</sub> e o contorno é determinado, n · ∇ξ<sub>i</sub> = |∇ξ<sub>i</sub>| cos θ, i = 1 ou 2, esta condição é usada tanto para contornos conhecidos quanto para contornos cuja localização forma parte do problema;
- 2. **deslizar sobre o contorno**: os pontos nodais são livres para deslizar numa linha cuja equação é  $f(\mathbf{x}) = 0$ ;

- 3. **pontos nodais fixos**: a localização dos pontos nodais no contorno é fixa,  $\mathbf{x}^{\alpha} = \bar{\mathbf{x}}^{\alpha}$ , onde  $\bar{\mathbf{x}}^{\alpha}$  é a predeterminada posição do ponto nodal  $\alpha$ , esta condição é usada para contornos fixos ou conhecidos;
- 4. **distribuição dos pontos nodais prescrita**: os pontos nodais são distribuídos ao longo do contorno do domínio físico de acordo a uma função de esticamento *g* que controla o seu espaçamento,  $\xi_i = g(s)$ , i = 1 ou 2;
- 5. condição cinemática: o líquido não pode cruzar a superfície livre, esta relação localiza implícitamente a posição da superfície livre,  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 0$ , esta condição é usada para contornos cuja localização forme parte do problema.



Figura 3.2: Condições de contorno das equações de geração de malha elíptica.

#### 3.3 Equações de Transporte.

As equações de transporte de massa, quantidade de movimento linear e conformação em regime permanente, isotérmico, incompressível e escoamento não difusivo de uma solução polimérica diluída ou semi-diluída, são apresentadas a seguir:

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v} \tag{3-3}$$

$$0 = -\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g}$$
(3-4)

$$0 = \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - 2\xi \frac{\mathbf{D} \cdot \mathbf{M}}{\mathbf{I} \cdot \mathbf{M}} \mathbf{M}$$
  
-  $\zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2 \frac{\mathbf{D} \cdot \mathbf{M}}{\mathbf{I} \cdot \mathbf{M}} \mathbf{M})$   
-  $\mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M}$   
+  $\frac{1}{\lambda} (g_0 \mathbf{I} + g_1 \mathbf{M} + g_2 \mathbf{M}^2)$  (3-5)

onde **v** é a velocidade do líquido,  $\rho$  é a densidade, **T** é o tensor das tensões (Tensor de Cauchy), **g** é a gravidade e representa as forças de corpo por unidade de volume, **M** é o tensor conformação adimensional, **D** é a taxa de deformação, **W** é a vorticidade, onde  $\nabla$ **v** = **D** + **W** e  $\lambda$  é o tempo de relaxação característica do polímero. A função constitutiva  $\xi$ (**M**) representa a resistência dos segmentos poliméricos ao estiramento ao longo do seu eixo,  $\zeta$ (**M**) representa a resistência dos segmentos à rotação relativa com respeitos à vizinhança e  $g_0$ (**M**),  $g_1$ (**M**),  $g_2$ (**M**) definem a taxa de relaxação dos segmentos poliméricos. A taxa de rotação média dos segmentos poliméricos coincide com o tensor vorticidade **W**.

O tensor das tensões **T** é dividido em 3 componentes: isotrópica, viscosa, e elástica; respectivamente:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\sigma} \tag{3-6}$$

onde a pressão p é constitutivamente indeterminada porque o líquido é incompressível, a tensão viscosa  $\tau$  obedece a lei de Newton da viscosidade,

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathbf{D} \tag{3-7}$$

e a tensão elástica  $\sigma$  tem a seguinte relação constitutiva:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{\rho}(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\zeta}) \frac{\mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} : \frac{\partial a}{\partial \mathbf{M}} + 2\boldsymbol{\rho} \boldsymbol{\zeta} \mathbf{M} \cdot \frac{\partial a}{\partial \mathbf{M}}$$
(3-8)



Figura 3.3: Condições de contorno para a equação de quantidade de movimento linear.

onde  $a(T, \mathbf{M})$  é a energia livre específica.

Uma forma particular das funções constitutivas  $\xi(\mathbf{M})$ ,  $\zeta(\mathbf{M})$ ,  $g_0(\mathbf{M})$ ,  $g_1(\mathbf{M})$ ,  $g_2(\mathbf{M})$ ,  $e_a(T, \mathbf{M})$  deve ser escolhida para descrever o escoamento de um líquido polimérico particular (ver tabela ??). Porém, tanto o método como o programa computacional necessários para efetuar os cálculos independem da escolha específica das funções constitutivas, e elas são explicadas em detalhe por Pasquali (2000) [52] visando preservar a flexibilidade e a forma modular do programa.

As condições de contorno para a equação de transporte da quantidade de movimento linear, que inclui derivadas de segunda ordem na velocidade, devem ser impostas em todo o contorno do domínio. Esta é uma equação vetorial, por essa razão deve ser imposta uma condição de contorno vetorial na velocidade ou na tração. Elas são ilustradas na figura 3.3 e são:

- Não penetração e não escorregamento: no caso de uma parede sólida, condição de contorno impermeável a velocidade do líquido igual à da parede sólida, v = v<sub>w</sub>—uma condição de contorno vetorial;
- 2. Balanço de forças na superfície livre: a componente tangencial da tração desaparece na superfície livre porque a tensão cisalhante exercida pelo gás sobre o líquido é desprezível,  $\mathbf{tn} : \mathbf{T} = 0$ ; a componente normal da tração dentro do líquido deve ser equilibrado pela pressão do gás  $p_a$  e a pressão

capilar induzida pela curvatura,  $\mathbf{nn} : \mathbf{T} = -p_a + \varsigma \nabla_{\mathbf{II}} \cdot \mathbf{n}$ , onde  $\varsigma$  è a tensão superficial do líquido, e  $\nabla_{\mathbf{II}} \equiv (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot \nabla$  é o gradiente de superfície. Num escoamento bidimensional, o balaço da tensão normal pode ser escrito como:  $\mathbf{nn} : \mathbf{T} = -p_a + \varsigma \mathbf{n} \cdot d\mathbf{t}/ds$ , onde  $\mathbf{t}$  é a tangente à superfície livre, e *s* é arco de comprimento ao longo da superfície livre. A forma vetorial das duas condições anteriores é dada por:  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = -p_a \mathbf{n} + \varsigma d\mathbf{t}/ds$ ;

- 3. Condições de entrada e saída: Três condições de contorno podem ser impostas na entrada ou saída: prescrever a velocidade  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0(\mathbf{x})$ , prescrever a pressão e por último, a condição de escoamento totalmente desenvolvido  $\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} = 0$ . Como estas condições de contorno não são impostas pela física do problema mas pela necessidade de limitar o domínio de escoamento, a solução do problema deve ser independente da localização dos contornos abertos (entradas e saída).
- 4. Condição de simetria: Se a geometria é simétrica com respeito a uma linha ou superfície e as condições de contorno são simétricas também, então é conveniente analisar somente a metade do domínio e impor uma condição de contorno simétrica na linha ou superfície de simetria: As condições de simetria são: (*i*) a linha de simetria é uma linha de corrente  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 0$ ; (*ii*) a tensão cisalhante desaparece ao longo da linha ou superfície de simetria,  $\mathbf{tn} : \mathbf{T} = 0$ .

A equação de transporte do tensor conformação equação 3-5 é hiperbólica e suas características num escoamento permanente são as linhas de corrente; por essa razão as condições de contorno somente são necessárias na entrada onde  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} < 0$ . Como a equação 3-5 é uma equação tensorial, uma condição de contorno tensorial é necessária (Pasquali, 2000 [52]).

As componentes do tensor conformação na entrada são desconhecidas em geral. Um procedimento comum em simulação numérica de escoamentos viscoelásticos é colocar as condições de entrada em regiões totalmente desenvolvidas, escoamento paralelo e retilíneo, onde o perfil de conformação é algumas vezes conhecido analiticamente ou este possa ser calculado previamente resolvendo a equação de transporte de conformação mais simples em regime permanente num escoamento paralelo e retilíneo (Pasquali, 2000 [54]).

Se o escoamento na entrada é totalmente desenvolvido, a conformação do polímero não muda ao longo das linhas de corrente,  $\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} = 0$ , e a equação algébrica mostrada a seguir:

$$0 = -2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} - \zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2\frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M})$$

$$-\mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda} (g_0 \mathbf{I} + g_1 \mathbf{M} + g_2 \mathbf{M}^2)$$
(3-9)

é válida na entrada. A equação 3-9 é independente de hipóteses constitutivas e é usada como condição de contorno tensorial na entrada.

# 3.4 Equações de transporte modificadas.

As equações diferenciais parciais de continuidade, transporte de quantidade de movimento, conformação e geração de malha elíptica junto com as condições de contorno são resolvidas com o método de Resíduos Ponderados e funções base de elementos finitos. Algumas modificações forma feitas nas equações antes de colocá-las na forma fraca.

# 3.4.1 Gradiente de velocidade interpolado.

Uma variável adicional L é introduzida para representar o gradiente de velocidade com uma interpolação continua,

$$0 = \mathbf{L} - \nabla \mathbf{v} \tag{3-10}$$

A variável **L** é chamada *gradiente de velocidade interpolado* para distinguir esta do gradiente de velocidade original  $\nabla \mathbf{v}$ .

A equação do tensor conformação é reduzida para uma relação algébrica entre o tensor conformação e o gradiente de velocidade nas regiões de estagnação do escoamento, tais como contornos sólidos estacionários e em regiões de escoamento retilíneo totalmente desenvolvido. Por essa razão Szady (1995) [38] sugere que o tensor conformação e o gradiente de velocidade na equação 3-5 devem ser representados pela mesma função base, e o gradiente interpolado deve ser usado em lugar do gradiente de velocidade original na equação de transporte de conformação. Isso foi feito para melhorar a estabilidade e convergência do método computacional.

Szady (1995) [38] usou a tensão polimérica em lugar do tensor conformação como variável independente, e seus argumentos envolvem o tensor das tensões poliméricas e os modelos constitutivos Oldroyd-B e Giesekus.

O tensor taxa de deformação  $\mathbf{D}$  e o tensor vorticidade  $\mathbf{W}$  na equação de transporte do tensor conformação são definidos em termos do gradiente de velocidade interpolado  $\mathbf{L}$ ,

$$\mathbf{D} \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T); \qquad \mathbf{W} \equiv \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \quad . \tag{3-11}$$

# 3.4.2 Gradiente de velocidade interpolado com traço zero.

Em escoamentos isocóricos o traço do gradiente de velocidade interpolado é igual a zero,  $\nabla \cdot \mathbf{v} = \text{tr} \mathbf{L} = 0$ . Como foi explicado por Pasquali (2000) [52] o campo de velocidade calculado pelos método de Elementos Finitos não satisfaz esta condição ponto a ponto e sim de forma integral e o valor aproximado do gradiente de velocidade interpolado não tem exatamente traço igual a zero, principalmente em regiões onde existem altos gradientes de velocidade.

A taxa de variação ao longo das linhas de corrente do determinante do tensor conformação é relacionado diretamente com o traço de **L**.

Por isso se o traço de L não é calculado de forma precisa, o determinante de M pode mudar de sinal, originando resultados computacionais sem significado físico.

O traço de L pode ser calculado de forma exata com a equação

$$0 = \mathbf{L} - \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\mathrm{tr}\,\mathbf{I}} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I}$$
(3-12)

em lugar da equação 5-8. A equação 3-12 garante que tr $\mathbf{L} = 0$ , independente do valor de  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  esta equação é usada para definir o gradiente interpolado neste trabalho.

### 3.4.3 DAVSS-G Discrete adaptive viscous stress split.

Guenette (1995) [39] escreveu a equação de quantidade de movimento, desprezando a inércia, as forças de corpo e considerando que a tensão viscosa é igual a zero (modelo UCM), da seguinte forma:

$$\nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}) + \nabla \cdot \eta_a (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T - \mathbf{L} - \mathbf{L}^T) = 0$$
(3-13)

onde  $\eta_a$  é um parâmetro numérico e mostrou que o último termo na equação 3-13 estabiliza o método computacional.

Guenette (1995) [39] afirma que a introdução deste termo estabilizante  $\nabla \cdot \eta_a (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T - \mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$  na equação de quantidade de movimento linear é legitima porque este termo é zero na formulação forte das equações e, na formulação fraca, é aproximadamente zero quando a solução numérica se aproxima da solução exata.

A hipótese feita por Guenette (1995) [39] habilita o uso de uma combinação do gradiente de velocidade original e o gradiente de velocidade interpolado para calcular a tensão viscosa, definida como:

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) + \boldsymbol{\eta}_a(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T - \mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$$
(3-14)

junto com a equação de transporte de quantidade de movimento linear (Pasquali, 2000 [52]).

Um resumo do conjunto de equações a ser resolvida é apresentado a seguir:

$$0 = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \xi \tag{3-15}$$

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v} \tag{3-16}$$

$$0 = \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{T} - \rho \mathbf{g}$$
(3-17)

$$0 = \mathbf{L} - \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\mathrm{tr}\,\mathbf{I}} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I}$$
(3-18)

$$0 = \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - 2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} - \zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2\frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M}) - \mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda} (g_0 \mathbf{I} + g_1 \mathbf{M} + g_2 \mathbf{M}^2)$$
(3-19)

junto com a definição de tensão Eq. 3-6, a equação constitutiva do tensor elástico equação 3-8, e equação 3-14 da tensão viscosa .

O conjunto completo das condições de contorno para a equação de geração de malha são:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \xi_i = |\nabla \xi_i| \cos \theta, \, i = 1 \, ou \, 2 \tag{3-20}$$

$$f(\mathbf{x}) = 0 \tag{3-21}$$

$$\mathbf{x}^{\alpha} = \bar{\mathbf{x}}^{\alpha} \tag{3-22}$$

$$\xi_i = g(s), i = 1 ou 2$$
 (3-23)

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{3-24}$$

e as condições de contorno para a equação de quantidade de movimento:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_w \tag{3-25}$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = -p_a \mathbf{n} + \zeta d\mathbf{t}/ds \qquad (3-26)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}) \tag{3-27}$$

$$p = p_o \tag{3-28}$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} = 0 \tag{3-29}$$

a condição de contorno proposta por Pasquali (2000) [52] para a equação de transporte do tensor conformação,

$$0 = -2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} - \zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2\frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M}) -\mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^{T} \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda} (g_{0}\mathbf{I} + g_{1}\mathbf{M} + g_{2}\mathbf{M}^{2}) .$$
(3-30)

### 3.5

# Forma fraca das equações de transporte no domínio de referência pelo Método de Galerkin dos elementos finitos.

A forma fraca das equações de transporte apresentadas anteriormente é descrita a seguir:

$$\mathbf{r}^{\mathbf{x},\alpha} = \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{x}}^{\alpha} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \xi d\Omega$$
(3-31)

$$r^{c,\alpha} = \int_{\Omega} \psi_c^{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega$$
(3-32)

$$\mathbf{r}^{\mathbf{m},\alpha} = \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{m}}^{\alpha} \left( \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{T} - \nabla \Theta \right) d\Omega$$
(3-33)

$$\mathbf{R}^{\mathbf{L},\alpha} = \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{L}}^{\alpha} \left( \mathbf{L} - \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\mathrm{tr}\,\mathbf{I}} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right) d\Omega$$
(3-34)

$$\mathbf{R}^{\mathbf{M},\alpha} = \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{M}}^{\alpha} \left( \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - 2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} - \zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2\frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} \right) -\mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^{T} \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda} (g_{0}\mathbf{I} + g_{1}\mathbf{M} + g_{2}\mathbf{M}^{2}) d\Omega$$
(3-35)

onde  $\Omega$  é o domínio de escoamento desconhecido,  $\psi_x^{\alpha}, \ldots, \psi_M^{\alpha}$  são os conjuntos de funções peso definidos no domínio físico  $\Omega$ , e  $\mathbf{r}^{\mathbf{x},\alpha}, \ldots, \mathbf{R}^{\mathbf{M},\alpha}$  são as equações dos resíduos ponderados chamadas também forma fraca das equações de transporte.

O primeiro sobrescrito na equação residual identifica o tipo de equação de resíduo, o segundo (grego) sobrescrito identifica a função base que foi usada para modelar a variável.

A equação residual de continuidade é escalar, as equações de geração de malha e de quantidade de movimento linear são vetoriais, e as do gradiente de velocidade interpolada e do tensor conformação são tensoriais. As componentes físicas das equações dos resíduos ponderados são identificadas com subscritos itálicos.

Cada variável independente é aproximada como uma combinação linear de um número finito de funções base:

$$\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}^{\beta} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{x}}^{\beta}, \quad p \equiv p^{\beta} \boldsymbol{\varphi}_{p}^{\beta}, \quad \mathbf{v} \equiv \mathbf{v}^{\beta} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{v}}^{\beta}, \quad \mathbf{L} \equiv \mathbf{L}^{\beta} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{L}}^{\beta}, \quad \mathbf{M} \equiv \mathbf{M}^{\beta} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{M}}^{\beta}$$
(3-36)

Para fazer a notação mais clara os mesmos símbolos  $\mathbf{x}, p, \mathbf{v}, \mathbf{L}$ , e M são usados para representar os coeficientes das funções base, como nas equações 3-31 – 5-23, e seus valores exatos, como nas equações 3-15 – 3-19. O contexto deixará claro quando o valor exato ou os coeficientes das funções base são referenciados.

Aplicando o teorema da divergência nas equações 3-31 e 5-21 diminuimos a ordem das derivadas de ordem maior das variáveis independentes,

$$\mathbf{r}^{\mathbf{x},\alpha} = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}_{\mathbf{x}}^{\alpha} \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla \boldsymbol{\psi}_{\mathbf{x}}^{\alpha} \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} d\Omega \qquad (3-37)$$

$$\mathbf{r}^{\mathbf{m},\alpha} = \int_{\Omega} \psi_{\mathbf{m}}^{\alpha} \left( \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla \Theta \right) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \psi_{\mathbf{m}}^{\alpha} \cdot \mathbf{T} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \psi_{\mathbf{m}}^{\alpha} \mathbf{T} d\Gamma (3-38)$$

onde  $\Gamma$  é o contorno do domínio físico  $\Omega$  e **n** é o vetor normal apontando para fora do domínio.

As funções base usadas para representar as variáveis independentes (Szady et al., 1995 [38], Guenette et al., 1995 [39], Baaijens, 1998 [46] e Sun et al., 1999 [50]) são:

- posição  $\varphi_{\mathbf{x}}$ : polinômio Lagrangeano biquadrático;
- pressão  $\varphi_p$ : linear descontínuo;
- velocidade φ<sub>v</sub>: polinômio Lagrangeano biquadrático;
- gradiente de velocidade interpolado  $\phi_L$ : polinômio Lagrangeano bilinear;
- tensor conformação  $\phi_M$ : polinômio Lagrangeano biquadrático.

As funções peso usadas nas equações dos resíduos ponderados [38, 39, 46, 50] são:

- $-\psi_{\mathbf{x}} \equiv \phi_{\mathbf{x}}$  na equação de geração de malha(Galerkin);
- $\psi_c \equiv \varphi_p$  na equação de continuidade(Galerkin);

- $-\psi_m \equiv \phi_v$  na equação de quantidade de movimento linear(Galerkin) ;
- $-\psi_L \equiv \phi_L$  nas equação de gradiente interpolado (Galerkin, onde coincide com os mínimos quadrados);
- $Ψ_{\mathbf{M}} ≡ φ_{\mathbf{M}} + h^{u} \mathbf{v} \cdot \nabla φ_{\mathbf{M}}$ , onde  $h^{u}$  é o parâmetro "upwind", que foi escolhido convenientemente para coincidir com o tamanho característico de um elemento na equação de transporte do tensor conformação. Este método é chamado SUPG (Streamline-Upwind Petrov-Galerkin).

As integrais da formulação fraca são calculadas pelo mapeamento das equações para o domínio computacional  $\Omega_0$ ,

$$\mathbf{r}^{\mathbf{x},\alpha} = \int_{\Gamma_0} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}^{\alpha}_{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} \ell d\Gamma_0 - \int_{\Omega_0} \nabla \boldsymbol{\psi}^{\alpha}_{\mathbf{x}} \cdot \tilde{\mathbf{D}} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} f d\Omega_0$$
(3-39)

$$r^{c,\alpha} = \int_{\Omega_0} \psi_c^{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{v} f d\Omega_0 \tag{3-40}$$

$$\mathbf{r}^{\mathbf{m},\alpha} = \int_{\Omega_0} \psi^{\alpha}_{\mathbf{m}} \left( \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla \Theta \right) f d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \nabla \psi^{\alpha}_{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{T} f d\Omega_0$$
  
$$- \int_{\Gamma_0} \mathbf{n} \cdot \psi^{\alpha}_{\mathbf{m}} \mathbf{T} \ell d\Gamma_0$$
(3-41)

$$\mathbf{R}^{\mathbf{L},\alpha} = \int_{\Omega_0} \psi^{\alpha}_{\mathbf{L}} \left( \mathbf{L} - \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{\mathrm{tr}\,\mathbf{I}} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \right) f d\Omega_0$$
(3-42)

$$\mathbf{R}^{\mathbf{M},\alpha} = \int_{\Omega_0} \psi_{\mathbf{M}}^{\alpha} \left( \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{M} - 2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} - \zeta (\mathbf{M} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{M} - 2\frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \mathbf{M} \right)$$
$$-\mathbf{M} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{M} + \frac{1}{\lambda} (g_0 \mathbf{I} + g_1 \mathbf{M} + g_2 \mathbf{M}^2) \int f d\Omega_0 \qquad (3-43)$$

onde

$$f \equiv \frac{d\Omega}{d\Omega_0} = \det \mathbf{F}$$
(3-44)

é o Jacobiano da função de mapeamento e representa a razão entre um elemento de área infinitesimal do domínio físico e um elemento de área do domínio computacional no caso de escoamentos bidimensionais e de volumes no caso tridimensional, a mesma coisa para

$$\ell \equiv \frac{d\Gamma}{d\Gamma_0} \tag{3-45}$$

que é a razão entre um elemento do contorno físico e um elemento do contorno computacional é uma razão de comprimentos para um escoamento bidimensional e uma de áreas para o caso tridimensional.

**F** é o gradiente da função de mapeamento,  $\triangleleft$  simboliza o gradiente no domínio computacional e os índices *i*, *j* representam as direções no espaço físico e podem tomar os valores de 1,2 no caso bidimensional e 1,2 e 3 no caso tridimensional.

$$\mathbf{F} \equiv \triangleleft \mathbf{x} \equiv \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} \equiv \mathbf{x}^{\beta} \triangleleft \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{x}}^{\beta}; \qquad F_{ij} \equiv \frac{\partial x_j}{\partial \xi_i} \equiv \triangleleft_i x_j \equiv x_j^{\beta} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{x}}^{\beta}}{\partial \xi_i} \qquad (3-46)$$

As funções peso nas equações 3-39–3-43 são definidas no domínio computacional  $\Omega_0$ . Para simplificar a notação o mesmo símbolo será usado para representar a funções peso e as funções base definido no domínio físico e computacional porque  $\phi^{\beta}(\mathbf{x}(\xi)) \equiv \phi^{\beta}(\xi)$ ; o contexto deixará claro qual função será referenciada.

### 3.6 Solução do sistema não linear pelo Método de Newton.

A integração numérica das equações de resíduos ponderados, foi feita usando o método da quadratura de Gauss com três pontos de integração em cada direção.

Quando as equações diferenciais parciais são discretizadas pelo método dos Elementos Finitos/Galerkin obtém-se um sistema de equações não lineares algébricas Eqs. 3-39–3-43.

Este sistema de equações pode ser representada de forma compacta por:

$$\mathbf{R}(\mathbf{u}) = 0 \tag{3-47}$$

onde u é o vetor solução, isto é, os coeficientes das funções base que são incógnitas do problema, **R** é o vetor dos resíduos ponderados associados com os graus de liberdade do problema.

A Equação 3-47 é resolvida pelo método de Newton

$$J\,\delta u = -R(u) \tag{3-48}$$

$$\mathsf{u}^{k+1} = \mathsf{u}^k + \delta \mathsf{u} \tag{3-49}$$

onde *J* é a matriz Jacobiana que é construída elemento por elemento. O método de Newton resolve um sistema linear  $J\delta u = -R$  a cada iteração. E este sistema por ser esparso é resolvido pelo algoritmo de solução frontal desenvolvido por

deAlmeida (1995) [37] de acordo com o algoritmo frontal descrito por Duff (1989) [28], este algoritmo usa a decomposição LU completa.

Para calcular as entradas da matriz Jacobiana devem ser avaliadas as derivadas analíticas das equações 3-39–3-43 e suas condições de contorno com respeito aos coeficientes das funções base  $\mathbf{x}^{\beta}, p^{\beta}, \mathbf{v}^{\beta}, \mathbf{L}^{\beta}, \mathbf{e} \mathbf{M}^{\beta}$ .

Se cada componente das variáveis físicas das equações dos resíduos ponderados é considerada como um escalar, o conjunto de equações tem 13 equações e 13 incógnitas em um escoamento bidimensional e 22 equações e incógnitas em um escoamento tridimensional.

A iteração do método de Newton começa com um valor inicial estimado  $u^0$  e continua até que a norma-2 dos vetores do resíduo  $|\delta u|$  e da solução |R| seja menor que a tolerância  $\varepsilon$  estipulada como critério de parada.

$$|\mathbf{u}'| + |\mathbf{r}| < \varepsilon \tag{3-50}$$

O método de Newton converge quadráticamente quando o valor inicial estimado está dentro do raio de convergência do método, isto é , quando o chute inicial está perto da solução.

Algumas fórmulas necessárias para o cálculo das componente cartesianas das derivadas das equações dos resíduos ponderados, essas derivadas são com respeito aos coeficientes das funções base que são as nossas incógnitas como foi apresentado por Pasquali (2000) [52], são mostradas a seguir:

 Derivada do Jacobiano da função mapeamento *f* com respeito aos coeficientes funções base da posição x<sup>α</sup><sub>i</sub>:

$$\frac{\partial f}{\partial x_j^{\alpha}} = f \nabla_j \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha} \; ; \qquad (3-51)$$

Derivada do gradiente da função de mapeamento direta F com respeito aos coeficientes das funções base da posição x<sup>α</sup><sub>k</sub>:

$$\frac{\partial F_{ij}}{\partial x_k^{\alpha}} = \delta_{kj} \frac{\partial \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha}}{\partial \xi_i} \quad ; \tag{3-52}$$

 Derivada do gradiente da função de mapeamento inversa K com respeito aos coeficientes das funções base da posição x<sub>i</sub><sup>α</sup>:

$$\frac{\partial K_{ki}}{\partial x_j^{\alpha}} = -K_{ji} \nabla_k \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha} ; \qquad (3-53)$$

Derivadas do gradiente de um escalar, componente vetorial, ou componente tensorial *G* com respeito aos coeficientes das funções base da posição x<sub>i</sub><sup>α</sup>:

$$\frac{\partial \nabla_k \mathcal{G}}{\partial x_i^{\alpha}} = -(\nabla_j \mathcal{G}) \nabla_k \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha} ; \qquad (3-54)$$

- Derivadas da componente  $a_i$  de um vetor **a** com respeito a componente  $a_j$  do mesmo vetor:

$$\frac{\partial a_i}{\partial a_j} = \delta_{ij} \tag{3-55}$$

onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker, ou a ij da identidade I, e tem como propriedade

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ if } i = j \\ 0 \text{ if } i \neq j \end{cases} ; \qquad (3-56)$$

- Derivada da componente  $A_{ij}$  de um tensor com respeito à componente  $A_{kl}$  do mesmo tensor:

$$\frac{\partial A_{ij}}{\partial A_{kl}} = \delta_{ik} \delta_{jl} \quad ; \tag{3-57}$$

 Derivadas dos invariantes de um tensor com respeito as componentes do mesmo tensor (não necessariamente simétrico):

~ -

$$\frac{\partial I_{\mathbf{A}}}{\partial A_{ij}} = \delta_{ij} \tag{3-58}$$

$$\frac{\partial I\!\!I_{\mathbf{A}}}{\partial A_{ij}} \equiv \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial A_{ij}} \left[ (\operatorname{tr} \mathbf{A})^2 - \operatorname{tr} (\mathbf{A}^2) \right] = I_{\mathbf{A}} \delta_{ij} - A_{ji} \qquad (3-59)$$

$$\frac{\partial I\!I\!I_{\mathbf{A}}}{\partial A_{ij}} = A_{jk}A_{ki} - I_{\mathbf{A}}A_{ji} + I\!I_{\mathbf{A}}\delta_{ij} = I\!I_{\mathbf{A}}A_{ji}^{-1}$$
(3-60)

onde  $I_{\mathbf{A}} \equiv \operatorname{tr} \mathbf{A} \equiv \mathbf{I} : \mathbf{A}, \mathbb{I}_{\mathbf{A}} \equiv \det \mathbf{A}, \operatorname{e} A_{ji}^{-1} \acute{e} \operatorname{a} ji$  componente da inversa do tensor **A**;

 Derivada do tensor das tensões T com respeito aos coeficientes das funções base da posição x<sup>α</sup><sub>i</sub>:

$$\frac{\partial T_{ki}}{\partial x_j^{\alpha}} = -\eta_a \left[ (\nabla_j v_i) \nabla_k \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha} + (\nabla_j v_k) \nabla_i \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha} \right] ; \qquad (3-61)$$

Derivadas da tensão T com respeito aos coeficientes das funções base da velocidade ν<sub>i</sub><sup>α</sup>:

$$\frac{\partial T_{ki}}{\partial v_j^{\alpha}} = \eta_a \left( \delta_{ij} \nabla_k \varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha} + \delta_{jk} \nabla_i \varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha} \right) \quad ; \tag{3-62}$$

 Derivadas da tensão elástica σ com respeito aos coeficientes das funções base do tensor conformação M:

$$\frac{\partial \sigma_{li}}{\partial M_{jk}} = 2\left(\frac{\partial \xi}{\partial M_{jk}} - \frac{\partial \zeta}{\partial M_{jk}}\right) \frac{\mathbf{M} : \mathbf{A}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} M_{li} - 2\frac{\xi - \zeta}{(\mathbf{I} : \mathbf{M})^2} \mathbf{A} : \mathbf{M} M_{li} \delta_{jk} 
+ 2\frac{\xi - \zeta}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \left(A_{kj} M_{li} + M_{pq} \frac{\partial A_{qp}}{\partial M_{jk}} M_{li} + \mathbf{M} : \mathbf{A} \delta_{jl} \delta_{ki}\right) 
+ 2\frac{\partial \zeta}{\partial M_{jk}} M_{lp} A_{pi} + 2\zeta \left(\delta_{jl} A_{ki} + M_{lp} \frac{\partial A_{pi}}{\partial M_{jk}}\right)$$
(3-63)

onde A é a derivada da energia livre com respeito ao tensor conformação,

$$\mathbf{A} \equiv \frac{\partial a}{\partial \mathbf{M}}; \qquad A_{ij} \equiv \frac{\partial a}{\partial M_{ij}} \tag{3-64}$$

As Equações 3-51–3-64 são válidas tanto para escoamentos bidimensionais como tridimensionais.

### 3.6.1 Derivadas da equação de geração de malha elíptica.

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da posição

$$\frac{\partial r_{i}^{\mathbf{x},\gamma}}{\partial x_{j}^{\alpha}} = \int_{\Omega_{0}} \left( \nabla_{k} \varphi_{\mathbf{x}}^{\alpha} \nabla_{j} \psi_{\mathbf{x}}^{\gamma} \tilde{D}_{kl} K_{li} f + \nabla_{k} \psi_{\mathbf{x}}^{\gamma} \tilde{D}_{kl} \frac{\partial K_{li}}{\partial x_{j}^{\alpha}} f - \nabla_{k} \psi_{\mathbf{x}}^{\gamma} \tilde{D}_{kl} K_{li} \frac{\partial f}{\partial x_{j}^{\alpha}} \right) d\Omega_{0}$$
  
+ termos do contorno . (3-65)

3.6.2 Derivadas da equação de continuidade.

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da posição

$$\frac{\partial r^{c,\gamma}}{\partial x_j^{\alpha}} = \int_{\Omega_0} \psi_c^{\gamma} \left( \frac{\partial f}{\partial x_j^{\alpha}} \nabla \cdot \mathbf{v} - f \nabla_j v_i \nabla_i \phi_{\mathbf{x}}^{\alpha} \right) d\Omega_0$$
(3-66)

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da velocidade

$$\frac{\partial r^{c,\gamma}}{\partial v_j^{\alpha}} = \int_{\Omega_0} \psi_c^{\gamma} \nabla_j \varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha} f d\Omega_0$$
(3-67)

3.6.3 Derivadas da equação de transporte de quantidade de movimento linear.

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da posição

$$\frac{\partial r_{i}^{\mathbf{m},\gamma}}{\partial x_{j}^{\alpha}} = \int_{\Omega_{0}} \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_{j}^{\alpha}} \left[ \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla v_{i} - \nabla_{i} \Theta) + \nabla_{k} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} T_{ki} \right] + f \left[ -\psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \phi_{\mathbf{x}}^{\alpha} \nabla_{j} v_{i} - \nabla_{j} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \nabla_{k} \phi_{\mathbf{x}}^{\alpha} T_{ki} + \nabla_{k} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \frac{\partial T_{ki}}{\partial x_{j}^{\alpha}} \right] \right\} d\Omega_{0} + \text{termos do contorno} .$$
(3-68)

### Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da velocidade

$$\frac{\partial r_{i}^{\mathbf{m},\gamma}}{\partial v_{j}^{\alpha}} = \int_{\Omega_{0}} \left[ \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \rho(\varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha} \nabla_{j} v_{i} + \delta_{ij} \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha}) + \nabla_{k} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \frac{\partial T_{ki}}{\partial v_{j}^{\alpha}} \right] f d\Omega_{0}$$
  
+ termos do contorno . (3-69)

#### Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da pressão

$$\frac{\partial r_i^{\mathbf{m},\gamma}}{\partial p^{\alpha}} = -\int_{\Omega_0} \nabla_i \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \varphi_p^{\alpha} f d\Omega_0 + \text{termos do contorno} . \qquad (3-70)$$

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base do gradiente de velocidade interpolado

$$\frac{\partial r_{i}^{\mathbf{m},\gamma}}{\partial L_{jk}^{\alpha}} = \int_{\Omega_{0}} \phi_{\mathbf{L}}^{\alpha} \left[ (\mu - \eta_{a}) (\nabla_{j} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \delta_{ki} + \nabla_{k} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \delta_{ij}) - \nabla_{l} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \frac{\partial \eta_{a}}{\partial L_{jk}} (L_{li} + L_{il}) \right] f d\Omega_{0} + \text{termos do contorno} .$$
(3-71)

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base do conformação

$$\frac{\partial r_{i}^{\mathbf{m},\gamma}}{\partial M_{jk}^{\alpha}} = -\int_{\Omega_{0}} \phi_{\mathbf{M}}^{\alpha} \nabla_{l} \psi_{\mathbf{m}}^{\gamma} \left[ \frac{\partial \eta_{a}}{\partial M_{jk}} (\nabla_{l} v_{i} - L_{li} + \nabla_{i} v_{l} - L_{il}) + \frac{\partial \sigma_{li}}{\partial M_{jk}} \right] f d\Omega_{0}$$
  
+ termos do contorno . (3-72)

# 3.6.4 Derivadas da equação do gradiente de velocidade interpolado.

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da posição

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{L},\alpha}}{\partial x_{k}^{\gamma}} = \int_{\Omega_{0}} \Psi_{\mathbf{L}}^{\alpha} \left[ \frac{\partial f}{\partial x_{k}^{\alpha}} (L_{ij} - \nabla_{i} \mathbf{v}_{j} + \frac{1}{\mathrm{tr}\,\mathbf{I}} \nabla \cdot \mathbf{v} \delta_{ij}) + f (\nabla_{i} \varphi_{\mathbf{x}}^{\gamma} \nabla_{k} v_{j} - \frac{1}{\mathrm{tr}\,\mathbf{I}} \nabla_{p} \varphi_{\mathbf{x}}^{\gamma} \nabla_{k} v_{p} \delta_{ij}) \right] d\Omega_{0}$$
(3-73)

### Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da velocidade

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{L},\alpha}}{\partial v_k^{\gamma}} = \int_{\Omega_0} \Psi_{\mathbf{L}}^{\alpha} (-\delta_{jk} \nabla_i \varphi_{\mathbf{v}}^{\gamma} + \frac{1}{\mathrm{tr} \mathbf{I}} \nabla_k \varphi_{\mathbf{v}}^{\gamma} \delta_{ij}) f d\Omega_0$$
(3-74)

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base do gradiente de velocidade interpolado

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{L},\alpha}}{\partial L_{kl}^{\gamma}} = \int_{\Omega_0} \Psi_{\mathbf{L}}^{\alpha} \delta_{ik} \delta_{jl} \varphi_{\mathbf{L}}^{\gamma} f d\Omega_0$$
(3-75)

3.6.5 Derivadas da equação de transporte do tensor conformação

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da posição

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{M},\gamma}}{\partial x_{k}^{\alpha}} = \int_{\Omega_{0}} \left\{ \left[ \frac{\partial f}{\partial x_{k}^{\alpha}} \boldsymbol{\psi}_{\mathbf{M}}^{\gamma} + f(\frac{\partial h}{\partial x_{k}^{\alpha}} \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{M}}^{\gamma} - h \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{x}}^{\alpha} \nabla_{k} \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{M}}^{\gamma}) \right] \times \left( \mathbf{v} \cdot \nabla M_{ij} + P_{ij} + \frac{1}{\lambda} S_{ij} \right) - f \boldsymbol{\psi}_{\mathbf{M}}^{\gamma} \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{x}}^{\alpha} \nabla_{k} M_{ij} \right\} d\Omega_{0} \quad (3-76)$$

onde

$$P_{ij} \equiv -2\xi \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} M_{ij} - \zeta (M_{il}D_{lj} + D_{il}M_{lj} - 2\frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} M_{ij}) - M_{il}W_{lj} - W_{li}M_{lj}$$
(3-77)

$$S_{ij} \equiv g_0 \delta_{ij} + g_1 M_{ij} + g_2 M_{il} M_{lj}$$

$$(3-78)$$

### Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base da velocidade

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{M},\gamma}}{\partial v_k^{\alpha}} = \int\limits_{\Omega_o} \left[ \psi_{\mathbf{M}}^{\gamma} \varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha} \nabla_k M_{ij} + h \varphi_{\mathbf{v}}^{\alpha} \nabla_k \varphi_{\mathbf{M}}^{\gamma} (\mathbf{v} \cdot \nabla M_{ij} + P_{ij} + \frac{1}{\lambda} S_{ij}) \right] f d\Omega_o \quad (3-79)$$

Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base do gradiente de velocidade interpolado

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{M},\gamma}}{\partial L_{kl}^{\alpha}} = \int_{\Omega_o} \Psi_{\mathbf{M}}^{\gamma} \varphi_{\mathbf{L}}^{\alpha} \left[ -(\xi - \zeta) \frac{M_{kl} + M_{lk}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} M_{ij} - \frac{1}{2} \zeta (M_{ik} \delta_{jl} + M_{il} \delta_{kj} + \delta_{ik} M_{lj} + \delta_{il} M_{kj}) \right]$$

Capítulo 3. Cálculo de Escoamentos com Superfícies Livres.

$$-\frac{1}{2}(M_{ik}\delta_{jl}-M_{il}\delta_{jk}+\delta_{il}M_{kj}-\delta_{ik}M_{lj})\bigg]fd\Omega_0\qquad(3-80)$$

# Derivadas com respeito aos coeficientes das funções base do conformação

$$\frac{\partial R_{ij}^{\mathbf{M},\gamma}}{\partial M_{kl}^{\alpha}} = \int_{\Omega_{0}} \Psi_{\mathbf{M}}^{\gamma} \left\{ \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi_{\mathbf{M}}^{\alpha} \delta_{ik} \delta_{jl} + \varphi_{\mathbf{M}}^{\alpha} \left[ -2\left(\frac{\partial \xi}{\partial M_{kl}} - \frac{\partial \zeta}{\partial M_{kl}}\right) \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} M_{ij} \right. \\
\left. -2\left(\xi - \zeta\right)\left(\frac{D_{kl}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} M_{ij} - \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{(\mathbf{I} : \mathbf{M})^{2}} \delta_{kl} M_{ij} + \frac{\mathbf{D} : \mathbf{M}}{\mathbf{I} : \mathbf{M}} \delta_{ik} \delta_{jl}\right) \\
\left. -\frac{\partial \zeta}{\partial M_{kl}} \left(M_{ip} D_{pj} + D_{ip} M_{pj}\right) - \zeta\left(\delta_{ik} D_{lj} + D_{ik} \delta_{jl}\right) \\
\left. +\frac{1}{\lambda} \left(\frac{\partial g_{0}}{\partial M_{kl}} \delta_{ij} + \frac{\partial g_{1}}{\partial M_{kl}} M_{ij} + g_{1} \delta_{ik} \delta_{jl} \\
\left. +\frac{\partial g_{2}}{\partial M_{kl}} M_{ip} M_{pj} + g_{2}\left(\delta_{ik} M_{lj} + M_{ik} \delta_{jl}\right)\right) \right] \right\} f d\Omega_{0} \qquad (3-81)$$

As integrais de área e de linha nos resíduos ponderados e nos elementos da matriz Jacobiana analítica foram avaliadas em 9-pontos e 3-pontos na integração Gausseana.