UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

Aplicação do Método VOF para Simulação dos Escoamentos Bifásicos com Viscoelasticidade

Gustavo Alexandre Sousa Miziara

Dissertação de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Gustavo Alexandre Sousa Miziara

Aplicação do Método VOF para Simulação dos Escoamentos Bifásicos com Viscoelasticidade

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Antônio Castelo Filho

**USP – São Carlos
Novembro de 2020**

Gustavo Alexandre Sousa Miziara

Application of the VOF Method for Simulation of Two-Phase Flows with Viscoelasticity

Dissertation submitted to the Institute of Mathematics
and Computer Sciences – ICMC-USP – in
accordance with the requirements of the Computer
and Mathematical Sciences Graduate Program, for
the degree of Master in Science. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Antônio Castelo Filho

USP – São Carlos
November 2020

RESUMO

MIZIARA, G. A. S. **Aplicação do Método VOF para Simulação dos Escoamentos Bifásicos com Viscoelasticidade**. 2020. 158 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2020.

Neste trabalho, são simulados escoamentos bifásicos viscoelásticos com a técnica VOF, nos sistemas HIG-FLOW/HIG-TREE, ainda em desenvolvimento no ICMC, para simulação de escoamentos em domínios complexos (compostos por blocos cartesianos), em malhas hierárquicas. Considera-se o clássico modelo Oldroyd-B, para modelar a viscoelasticidade, incorporando-se o módulo bifásico ao sistema HIG-FLOW. Uma série de testes numéricos é realizada e, finalmente são apresentados resultados de simulações envolvendo bolhas, comparando-os com os presentes na literatura.

Palavras-chave: Fluido Viscoelástico, Oldroyd-B, VOF, PLIC, HIG-FLOW.

ABSTRACT

MIZIARA, G. A. S. **Application of the VOF Method for Simulation of Two-Phase Flows with Viscoelasticity**. 2020. 158 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2020.

In this work, two-phase viscoelastic flows are simulated with the VOF technique, in the HIG-FLOW/HIG-TREE systems, still under development at the ICMC, for simulating flows in complex domains (composed of Cartesian blocks), in hierarchical meshes. The classic Oldroyd-B model is used to model viscoelasticity, incorporating the two-phase module to the HIG-FLOW system. A series of numerical tests is performed and, finally, results of simulations involving bubbles are presented, comparing them with those present in the literature.

Keywords: Viscoelastic Fluid, Oldroyd-B, VOF, PLIC, HIG-FLOW.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Respostas do sólido hookeano (b) e do fluido newtoniano (a) ao experimento de cisalhamento (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 256).	24
Figura 2 – Série mola-amortecedor. Maxwell propôs este modelo para gases, embora tenha se popularizado em reologia (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 117).	25
Figura 3 – Resposta de diferentes materiais a um experimento de relaxação (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 110).	26
Figura 4 – Resposta a um experimento de fluência (creep) (GUEDES, 2010, p. 5).	27
Figura 5 – Figura ilustrando a fração de volume (Def 3.1) numa interface.	31
Figura 6 – Figura mostrando as parametrizações locais de uma curva, $y = y(x)$ e $x = x(y)$	33
Figura 7 – Parametrizações $x = s$ e $x = -s$, sendo $Y_M \approx y(x_M)$ uma aproximação de $y(x_M)$	34
Figura 8 – Stencils fixo e variável para o cálculo da altura numa célula interfacial. No variável, estabelece-se uma origem $\bullet$ em comum.	35
Figura 9 – Na célula destacada, com a resolução acima, não é possível construir um stencil de diferenças finitas centradas.	37
Figura 10 – Comparação entre a interface original e com aproximação por retas	38
Figura 11 – Mudanças de coordenadas para $n_x \cdot n_y > 0$ e $n_x \cdot n_y < 0$	39
Figura 12 – Caso 1: $a_{SW} < \min\{a_{SE}, a_{NW}\}$	44
Figura 13 – Caso 2: $\min\{a_{SE}, a_{NW}\} < a_{SW} < \max\{a_{SE}, a_{NW}\}$	45
Figura 14 – Caso 3: $a_{SW} > \max\{a_{SE}, a_{NW}\}$	46
Figura 15 – Casos paralelos $n_x = 0$ e $n_y = 0$	49
Figura 16 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $r_{i,j} \cap \{SW', SE, NE, D\} = \emptyset$	55
Figura 17 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $r_{i+1,j} \cap \{SW, SE', D, NW\} = \emptyset$	55
Figura 18 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $n_{xi,j} \cdot n_{yi,j} \neq 0$	56

Figura 19 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $n_{xi+1,j} \cdot n_{yi+1,j} \neq 0$.	56
Figura 20 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $n_{xi,j} \cdot n_{yi,j} = 0$.	57
Figura 21 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $n_{xi+1,j} \cdot n_{yi+1,j} = 0$.	57
Figura 22 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $f_{i,j} = 1$ ou $f_{i,j} = 0$, ou $n_{xi,j} = n_{yi,j} = 0$.	58
Figura 23 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $f_{i+1,j} = 1$ ou $f_{i+1,j} = 0$, ou $n_{xi+1,j} = n_{yi+1,j} = 0$.	58
Figura 24 – Configurações de intersecções consideradas.	60
Figura 25 – Configurações de intersecções (ambíguas) desconsideradas (a malha é refinada, caso ocorra).	61
Figura 26 – Configuração de um tipo de interseção, sendo ϕ^* uma aproximação linear de ϕ .	62
Figura 27 – Nós para uma quadratura de 5 pontos.	63
Figura 28 – Mapeamento de uma região W (descrição lagrangeana).	68
Figura 29 – Exemplo de domínio complexo formado por blocos cartesianos tridimensionais.	75
Figura 30 – Problema do degrau simulado no HIG-FLOW	76
Figura 31 – As figuras acima ilustram a ideia de uma <i>higtree</i> : uma árvore na qual as folhas são as células do domínio (em vários níveis de refinamento) discretizado.	78
Figura 32 – Estêncil de diferenças finitas sobre U_C . Os pontos em U_L e U_R estão na malha enquanto U_B e U_T não estão. Para obter os valores de U_B e U_L uma interpolação (sobre os pontos da malha vizinhos) vizinhança é feita.	79
Figura 33 – Célula computacional (bidimensional) de centro C , e facetas f , sendo os centros das células (virtuais ou físicas) vizinhas expressos em (5.2).	83
Figura 34 – Dispersão das curvaturas (linha contínua é a curvatura exata) para células interfaciais (eixo x , identificadas por números inteiros) e admissíveis (Obs 6.1).	97
Figura 35 – Interface em $t = 1$ e $t = 2$, sendo as linhas de referência (pontilhada e contínua) obtidas pela função <i>lsode</i> do Octave.	98
Figura 36 – Erros ($\ \cdot\ _\infty$) para o tensor e velocidade (Poiseuille) no domínio e no centro do canal.	105
Figura 37 – Erros ($\ \cdot\ _\infty$) para o tensor e velocidade (Couette) no domínio e no centro do canal.	108

Figura 38 – Informações do salto de pressão e velocidades para o problema da bolha estática (valores dimensionais).	110
Figura 39 – Salto da pressão ($t^* = 1$, $N = 256$, κ^{*hf}).	111
Figura 40 – A variação das frações entre $t^* = 0$ e $t^* \approx 0.6$ pouco alterou o erro na normal, ao contrário da curvatura em Fig 38. Ambos os stencils mantiveram-se horizontais no Método HF, com (3.12), (3.13) $H_M = 1.9635170$, $H_T = 1.994790$, $H_B = 1.9008790$ ($\kappa^{*hf} \approx 40.015$) em $t^* = 0$ e $H_M = 1.9684330$, $H_T = 2.0006510$, $H_B = 1.905930$ ($\kappa^{*hf} \approx 38.635$) em $t^* = 1$, sendo $\kappa^{*ex} = 40$	112
Figura 41 – Oscilação da bolha (valores dimensionais), sendo M os valores de (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).	115
Figura 42 – Informações (valores dimensionais) da ascensão da bolha sendo H os valores de (HYSING <i>et al.</i> , 2007, sec. 4.1) e M os valores de (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009)	119
Figura 43 – Informações (valores adimensionais) da ascensão da bolha sendo (O) os valores de (OLSSON; KREISS, 2005, sec. 5.3) e (K) os valores de (KALLAND, 2008, p. 107).	121
Figura 44 – Parâmetro ϕ em função do tempo, sendo (F) de (FIGUEIREDO, 2016).	123
Figura 45 – Interface (valores adimensionais) em $t = 10$, sendo (F) de (FIGUEIREDO, 2016).	124
Figura 46 – Esta malha hierárquica, modifica-se para acompanhar a interface e possui maior resolução nas vizinhanças da mesma.	125
Figura 47 – Para capturar os filamentos e as rupturas nas interfaces acima com a técnica VOF, necessita-se de maior resolução para o método HF (Fig 9).126	
Figura 48 – As figuras acima mostram que uma bolha (newtoniana) em ascensão, numa matriz viscoelástica, pode não apresentar axissimetria, observando-se também um ponto angularo (cúspide) no bordo de fuga.127	
Figura 49 – Diagrama ilustrando Prop A.2	142
Figura 50 – Diagrama ilustrando a decomposição polar de Γ (Teo B.1).	147

Figura 51 – Ilustração da base convectiva (bidimensional): g_1 tangente às linhas $a^2 = \text{const}$ e g_2 tangente às linhas $a^1 = \text{const}$. Essas linhas podem se deformar com o tempo. Quantificam-se essas deformações, propondo-se modelos constitutivos. 151

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Erros na área para inicialização aproximada da fração de volume (na exata o erro foi $\mathcal{O}(e-16)$).	94
Tabela 2 – Erros da curvatura (6.4) para inicialização exata e aproximada.	95
Tabela 3 – Erros da normal (6.7) para inicialização exata e aproximada.	95
Tabela 4 – Erros da curvatura (6.4), área, normal (6.7) e média das curvaturas (6.10).	96
Tabela 5 – Correntes espúrias, e erros na equação de Young-Laplace (8.1) em $t^* = 1$, com a curvatura exata imposta (κ^{*ex}) e a calculada pelo Método HF (κ^{*hf}).	111
Tabela 6 – Erros (ver Fig 38) da normal, da curvatura e da área (relativa à área em $t^* = 0$)	112
Tabela 7 – Comparação (valores dimensionais) entre o período obtido numericamente e o período estimado ($\tau_{ref}^* = 1.5893$) em (8.9), sendo M os valores (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).	116
Tabela 8 – Comparação da circularidade, centro de massa e velocidade do centro de massa (8.16) sendo (H) os valores de (HYSING <i>et al.</i> , 2007, sec. 4.1), e (M) os de (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).	117

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Viscoelasticidade	20
1.2	Escoamento Multifásico	20
1.3	Proposta deste Trabalho	21
2	VISCOELASTICIDADE, MODELOS OLDROYD-B E UCM	23
2.1	Viscosidade, Elasticidade e Viscoelasticidade	23
2.2	Modelo de Maxwell	24
2.3	Relaxação	26
2.4	Fluência	26
2.5	Modelos UCM e Oldroyd-B	27
3	ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS: MÉTODOS VOF, PLIC E HF	29
3.1	Método VOF	30
3.2	Método HF	32
3.3	PLIC	37
3.4	PLIC: Construção da Interface pela Fração de Volume	38
3.4.1	<i>PLIC: Construção a Interface pela Fração de Volume, se</i> <i>$n_x \cdot n_y \neq 0$</i>	40
3.4.1.1	<i>Encontrar a Distância (d_{SW}) Conhecendo-se a Fração de Volume e o</i> <i>Vetor Normal (n_x, n_y), se $n_x \cdot n_y > 0$</i>	41
3.4.1.2	<i>Encontrar a Distância (d_{SE}) Conhecendo-se a Fração de Volume e o</i> <i>Vetor Normal (n_x, n_y), se $n_x \cdot n_y < 0$</i>	47
3.4.2	<i>PLIC: Construção a Interface pela Fração de Volume, se</i> <i>$n_x \cdot n_y = 0$</i>	49

3.4.2.1	<i>Encontrar a Distância (d_{SW}) Conhecendo-se a Fração de Volume e o Vetor Normal (n_x, n_y), se $n_x \cdot n_y = 0$</i>	50
3.5	PLIC: Transporte da Interface	50
3.5.1	<i>Método de Passo Fracionado</i>	51
3.5.2	<i>Cálculo dos Fluxos</i>	53
3.6	Inicialização da Fração de Volume	59
3.6.1	<i>Inicialização Exata da Fração de Volume</i>	61
4	EQUAÇÕES PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS, INCOMPRESSÍVEIS, E COM VISCOELASTICIDADE NO HIG-FLOW	65
4.1	Modelagem	66
4.2	Escoamento Bifásico	70
4.3	Condições de Contorno e Condições Iniciais	71
4.4	Adimensionalização	72
4.4.1	<i>Outros Adimensionais</i>	74
4.5	Os sistemas HIG-FLOW e HIG-TREE	75
4.6	Stencil no HIG-FLOW	77
4.6.1	<i>Método dos Mínimos Quadrados Móveis</i>	78
5	DISCRETIZAÇÕES E MÉTODOS NUMÉRICOS NO HIG-FLOW	81
5.1	Posicionamento das Propriedades nas Células	81
5.2	Escoamento Bifásico: Discretizações	84
5.2.1	<i>Viscosidade e Densidade</i>	84
5.2.2	<i>Tensor Viscoelástico</i>	84
5.2.3	<i>Termo Difusivo</i>	85
5.2.4	<i>Curvatura e Tensão Superficial</i>	87
5.2.5	<i>Termos de Inércia e Equação de Poisson</i>	88
5.3	Equação Constitutiva: Tensor Viscoelástico	88
5.4	Algoritmo Empregado	90
5.5	Algoritmo VOF-PLIC-HF	91
6	TESTES PARA INTERFACE	93

6.1	Inicialização da Fração de Volume	93
6.2	Método HF	94
6.3	Advecção da Fração	96
7	TESTES PARA ESCOAMENTO VISCOELÁSTICO	101
7.1	Equações	101
7.2	Descrição do Domínio	102
7.3	Hagen-Poiseuille	103
7.4	Couette	106
8	VERIFICAÇÃO DOS RESULTADOS	109
8.1	Bolha Estática	109
8.2	Bolha Oscilante	114
8.3	Ascensão da Bolha (Caso 1)	116
8.4	Ascensão da Bolha (Caso 2)	120
8.5	Bolha sob Cisalhamento	122
9	CONCLUSÃO	125
REFERÊNCIAS		129
APÊNDICE A TENSORES		135
A.1	Coordenadas contra-variantes e co-variantes em vetores	135
A.2	Mudança de coordenadas para vetores	136
A.3	Tensor como operador linear	139
A.4	Mudança de coordenadas para tensores	140
A.5	Coordenadas (Transformações) contra-variantes e co-variantes em tensores	142
APÊNDICE B DIFERENCIAÇÃO DE TENSORES, TENSORES DE DEFORMAÇÃO E DE CAUCHY		145
B.1	Tensores de Deformação	146
B.2	Tensor de Cauchy	149
B.3	Coordenadas Convectivas	150

B.4	Derivadas Convectivas Superior (Contra-Variante) e Inferior (Co-Variante)	154
B.5	Objetividade do Tensor Taxa de Deformação	157

INTRODUÇÃO

Os fluidos estão amplamente presentes da natureza. A vida como é conhecida necessita de um meio fluido para desenvolver-se. Os mecanismos de transporte observados nos sistemas biológicos ocorrem na presença de algum fluido. A humanidade também utiliza-se dos fluidos para os problemas cotidianos: os processos de lubrificação, refrigeração, hidráulicos, extração de algum material, pinturas, catalisadores, etc. Necessitam-se muitas páginas só para listar as diversas aplicações dos fluidos na sociedade.

Para estudá-los sistematicamente, pelo menos três grandes áreas devem ser consideradas:

- A análise experimental, pela proposição de equações.
- A análise teórico-numérica pelo desenvolvimento de teorias para avaliar o comportamento ou solubilidade destas equações (ou mesmo propondo-se outras), com um conjunto de métodos apropriados.
- Finalmente, análise computacional, ao tentar resolver computacionalmente grandes sistemas de equações em domínios compostos por fluidos, superfícies interfaciais, dentre outros elementos. Esta última área (CFD, *Computational Fluid Dynamics*) apenas encontrou sua consagração recentemente com o advento dos computadores.

1.1 Viscoelasticidade

A viscoelasticidade é um fenômeno modelado pelo menos desde Robert Hooke, no século XVII (MACOSKO; LARSON, 1994), ao trabalhar com molas. Hooke verificou que a mola, quando sujeita a uma força estirava-se ou comprimia-se, e esta dependência em alguns casos era linear, determinando-se a famosa relação $F = Kx$. No entanto, esta constante dependia da geometria da mola e não apenas do material, o que levou Hooke a desenvolver os conceitos de tensão (a força por unidade de área) e deformação, essenciais em reologia

Geralmente associa-se a elasticidade aos sólidos e a viscosidade aos líquidos, dadas as diferenças na resposta às tensões (ou deformações) destes meios. Ainda assim, na natureza e nas aplicações estão presentes materiais que apresentam os efeitos combinados dos sólidos e dos líquidos, sendo nomeados de materiais viscoelásticos, dentre os quais podemos citar alguns polímeros, sacolas, saliva, sangue, pele, ossos etc.

Num regime viscoso ideal (newtoniano) o fluido deforma-se sem qualquer resistência quando sujeito a tensões, havendo dissipação, assim como o fenômeno do amortecimento em sistemas de controle. A elasticidade é um fenômeno conservativo: um meio idealmente elástico ao deformar-se, retorna à sua configuração original. As relações constitutivas viscoelásticas procuram relacionar a deformação às tensões exercidas.

1.2 Escoamento Multifásico

O escoamento multifásico é aquele contendo mais de uma fase. As fases são separadas por uma interface. Tais escoamentos apresentam inúmeras aplicações industriais, dentre as quais citamos processos de refinamento de petróleo, em que várias fases estão presentes, além de, é claro, do transporte em fenômenos biológicos (sangue), fenômenos naturais como a formação de bolhas, formação de nuvens, etc.

Modelá-los não é tarefa simples, devendo-se compreender claramente os fenômenos ocorridos na interface:

- Se há troca de massa, se não há.
- Se há continuidade da velocidade.

- Se a interface possui espessura (há uma transição).
- Se a interface gera descontinuidades (e como devem ser resolvidas).
- Se o escoamento multifásico pode ser entendido como um escoamento monofásico, com tratamento implícito da interface, ou analisar cada fase do fluido independentemente, fornecendo à interface condições apropriadas sobre a interação entre as fases.
- Computacionalmente, como deve ser tratada a interface: uma estrutura de dados discretizando-a, ou construindo-a através de algum parâmetro.

Tal complexidade se traduz, através de várias metodologias para simular estes escoamentos.

1.3 Proposta deste Trabalho

No [Capítulo 2](#), discutem-se os conceitos de viscosidade, elasticidade e viscoelasticidade, apresentando-se o Modelo de Maxwell, e em consequência o UCM e o Oldroyd-B.

No [Capítulo 3](#), são discutidos os escoamentos interfaciais, e apresentam-se os métodos HF, VOF e PLIC e finalmente os elementos para o desenvolvimento do algoritmo VOF-PLIC-HF, implementado no HIG-FLOW.

No [Capítulo 4](#) são apresentadas as equações de Navier-Stokes para fluido bifásico e viscoelástico consideradas neste trabalho, os sistemas HIG-FLOW/HIG-TREE e o Método dos Mínimos Quadrados Móveis, que é a estratégia empregada no sistema HIG-TREE para aproximar propriedades em malhas hierárquicas.

No [Capítulo 5](#) são apresentados as discretizações, aproximações e métodos numéricos, no contexto do HIG-FLOW e, finalmente o algoritmo utilizado neste trabalho.

No [Capítulo 6](#) são exibidos os testes para verificar a codificação do módulo multifásico.

No [Capítulo 7](#) são exibidos os testes para verificar a codificação do módulo viscoelástico.

No [Capítulo 8](#) são apresentados os resultados obtidos com aqueles encontrados na literatura.

Finalmente, no [Capítulo 9](#) são apresentadas as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

No [Apêndice A](#) é introduzida a ideia de tensor, dado que tais objetos aparecem nos modelos constitutivos viscoelásticos. Em sequência, no [Apêndice B](#), são apresentadas as coordenadas convectivas, o Princípio da Objetividade, e a diferenciação de um tensor nessas coordenadas, dado que os modelos diferenciais constitutivos fazem uso de derivadas apropriadas para tensores.

VISCOELASTICIDADE, MODELOS OLDROYD-B E UCM

Neste capítulo, são discutidas noções sobre viscoelasticidade, sendo apresentado o modelo Oldroyd-B, utilizado neste trabalho para a simulação de escoamentos com viscoelasticidade.

2.1 Viscosidade, Elasticidade e Viscoelasticidade

Nos fluidos, resistência à deformação (ao fluir) é conhecida como *viscosidade*, nos sólidos é conhecida como *rigidez*. Duas propriedades devem ser destacadas (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 109):

- Se a deformação observada durante a aplicação de uma *carga constante* sobre um material é *finita*, e se, após a remoção da mesma, o material se *recupera*.
- Se as tensões observadas após a aplicação de uma *deformação constante* são *não nulas*.

O fluido dito *newtoniano* não atende a essas duas propriedades, já o sólido dito *hookeano* satisfaz ambas, sendo ambos modelos lineares.

No clássico experimento das placas paralelas em Fig 1, o fluido newtoniano se *deforma continuamente* no tempo (taxa de deformação), quando uma carga constante é aplicada. Agora, se uma deformação constante é aplicada a um fluido newtoniano (taxa de deformação nula), ele não desenvolve tensões viscosas.

Se um sólido hookeano é submetido a uma carga constante, ele irá se *deformar finitamente* e se a carga é removida, ele irá recuperar sua configuração original. Agora, se uma deformação constante é aplicada a um sólido hookeano ele ficará tensionado.

O material viscoelástico linear (KELLY, 2019) apresenta os efeitos combinados do fluido newtoniano e do sólido hookeano. O modelo de Maxwell, discutido abaixo, captura estes dois comportamentos.

Figura 1 – Respostas do sólido hookeano (b) e do fluido newtoniano (a) ao experimento de cisalhamento (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 256).

2.2 Modelo de Maxwell

Considere-se uma mola em série com um amortecedor, ambos ideais, isto é, transmitem integralmente a força sobre eles exercida, conforme ilustra Fig. 2.

Figura 2 – Série mola-amortecedor. Maxwell propôs este modelo para gases, embora tenha se popularizado em reologia (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 117).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A força τ transmitida pela mola é então modelada por:

$$\tau = K_p(l_s(t) - l_s(0)) \Rightarrow l_s(t) - l_s(0) = \frac{\tau}{K_p}, \quad l_s(t) = x_2(t) - x_m(t). \quad (2.1)$$

A força τ transmitida pelo amortecedor é modelada por:

$$\tau = \mu_p D_t(x_m(t) - x_1(t)) \Rightarrow D_t l_b(t) = \frac{\tau}{\mu_p}. \quad (2.2)$$

O comprimento da série na Fig. 2 é:

$$\gamma = l_s(t) + l_b(t). \quad (2.3)$$

Diferenciando-se γ (2.3) no tempo, mais as relações (2.1) e (2.2), tem-se o Modelo de Maxwell (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 258), (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 117) abaixo:

$$D_t \gamma = \frac{1}{\mu_p} \tau + \frac{1}{K_p} D_t \tau, \quad \mu_p D_t \gamma = \tau + \lambda D_t \tau, \quad \lambda = \frac{\mu_p}{K_p}. \quad (2.4)$$

Em (2.4), λ é conhecido como *tempo de relaxação* (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 113). A solução para (2.4) é dada por:

$$\tau = e^{-\frac{t-a}{\lambda}} \left(\int_a^t e^{\frac{t-a}{\lambda}} K_p \frac{d\gamma}{dt} dt + \tau(a) \right), \quad \lambda = \frac{\mu_p}{K_p}. \quad (2.5)$$

2.3 Relaxação

Se $\gamma = \text{const}$, a equação (2.5) assume: $\tau = e^{-\frac{t-a}{\lambda}} \tau(a)$. Logo, se a deformação for constante, a tensão decai do seu valor em $t = a$. Este comportamento (3) é observado em alguns líquidos poliméricos (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 110), sendo tal fenômeno conhecido como *relaxação* (GUEDES, 2010, p. 7), (KELLY, 2019). Quanto maior o tempo de relaxação, λ , mais tempo é levado para o material relaxar (livre de tensões).

Figura 3 – Resposta de diferentes materiais a um experimento de relaxação (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 110).

2.4 Fluência

Outro exemplo de fenômeno viscoelástico é a *fluência* (*creep*), deformação variável no tempo, quando uma carga constante é aplicada (GUEDES, 2010, p. 4), (KELLY, 2019). O modelo de Maxwell também contempla este comportamento. Se $\tau = \tau_0 = \text{const}$, a solução para (2.4) é dada por:

$$\gamma(t) = \gamma(a) + \frac{\tau_0}{\mu_p}(t - a). \quad (2.6)$$

ou seja, diferente do modelo hookeano (deformação constante após a aplicação de uma carga constante e completa recuperação após a remoção da carga), no modelo de Maxwell há uma deformação contínua.

Figura 4 – Resposta a um experimento de fluência (creep) (GUEDES, 2010, p. 5).

Segundo (GUEDES, 2010, p. 4), o estudo da fluência ($\tau = \text{const}$) e da relaxação ($\gamma = \text{const}$) são fundamentais para o exame das propriedades viscoelásticas dos polímeros. Conforme (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 259), generalizações não lineares do modelo de Maxwell, permitem equacionar o comportamento de outros fluidos viscoelásticos.

2.5 Modelos UCM e Oldroyd-B

O modelo UCM (*Upper Convective Maxwell*), é a adaptação do modelo de Maxwell (2.4) aos tensores contra-variantes (A.44) deviatório $\bar{\tau}^g$ (B.36), e taxa de deformação $\bar{D}^g$ (Def B.5), considerando-se o Princípio da Objetividade Material (Def B.8). Note-se que ambos os tensores representados nas bases convectivas (B.49). Assim, estabelecendo-se $D_t \gamma = \bar{D}^g$ e $\tau = \bar{\tau}^g$ em (2.4), sendo D_t a derivada material (B.30), obtém-se (como em Obs B.3 os tensores na base cartesiana, e, não serão tracejados):

$$2\mu_p \bar{D}^g = \bar{\tau}^g + \lambda D_t \bar{\tau}^g. \quad (2.7)$$

Por (B.53) e (B.57):

$$\bar{\tau}^g \stackrel{(B.53)}{=} F^{-t} \tau^e F^{-1}, \quad (2.8)$$

$$D_t \bar{\tau}^g \stackrel{(B.57)}{=} F^{-t} (-\nabla V^e \tau^e + D_t \tau^e - \tau^e [\nabla V^e]^t) F^{-1}. \quad (2.9)$$

Por (B.66) e (B.53):

$$\bar{D}^g \stackrel{(B.53)}{=} F^{-t} D^e F^{-1}, \quad D^e \stackrel{(B.69)}{=} \nabla V^e + [\nabla V^e]^t. \quad (2.10)$$

Substituindo-se [(2.8), (2.9), (2.10)] em (2.7):

$$F^{-t} 2\mu_p D^e F^{-1} = F^{-t} \tau^e F^{-1} + \lambda F^{-t} (-\nabla V^e \tau^e + D_t \tau^e - \tau^e [\nabla V^e]^t) F^{-1} \Rightarrow \quad (2.11)$$

$$2\mu_p D^e = \tau^e - \lambda (\nabla V^e \tau^e + D_t \tau^e - \tau^e [\nabla V^e]^t), \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs } B.1)}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j, \quad (2.12)$$

$$D_t \tau^e \stackrel{(B.60)}{=} \frac{\partial}{\partial t} \tau^e + (V^e \cdot \nabla) \tau^e, \quad V^e \stackrel{(B.31)}{=} u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3, \quad (2.13)$$

$$D_t \tau_{ij}^e \stackrel{(B.61)}{=} \partial_t \tau_{ij}^e + u_1 \partial_{x_1} \tau_{ij}^e + u_2 \partial_{x_2} \tau_{ij}^e + u_3 \partial_{x_3} \tau_{ij}^e, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}. \quad (2.14)$$

Def 2.1. (*Upper Convective Maxwell ou UCM*) O modelo (cartesiano) UCM (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 149) é dado por:

$$\sigma^e \stackrel{(B.36)}{=} -pI + \tau^e, \quad \mu = \mu_p, \quad (2.15)$$

$$2\mu_p D^e \stackrel{(2.12)}{=} \tau^e - \lambda (\nabla V^e \tau^e + D_t \tau^e - \tau^e [\nabla V^e]^t), \quad (2.16)$$

$$2\mu_p D^e \stackrel{(\text{Def } B.10)}{=} \tau^e - \lambda \bar{D}_t \tau^e. \quad (2.17)$$

O modelo de Oldroyd-B pode ser obtido do Modelo UCM adicionando-se um termo newtoniano (MACOSKO; LARSON, 1994, p. 157):

$$\bar{\tau}^g = \bar{\tau}_p^g + 2\mu_s \bar{D}^g, \quad \mu = \mu_s + \mu_p. \quad (2.18)$$

Def 2.2. (*Oldroyd-B*) O modelo (cartesiano) Oldroyd-B é então dado por:

$$\sigma^e \stackrel{(B.36)}{=} -pI + \tau_g^e + 2\mu_s D^e, \quad \mu = \mu_s + \mu_p, \quad (2.19)$$

$$2\mu_p D^e \stackrel{(2.12)}{=} \tau^e - \lambda (\nabla V^e \tau^e + D_t \tau^e - \tau^e [\nabla V^e]^t), \quad (2.20)$$

$$2\mu_p D^e \stackrel{(\text{Def } B.10)}{=} \tau^e - \lambda \bar{D}_t \tau^e. \quad (2.21)$$

ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS: MÉTODOS VOF, PLIC E HF

De acordo com ([PROSPERETTI; TRYGGVASON, 2009](#), p. 1), o termo escoamento multifásico relaciona-se a uma variedade de problemas, sendo difícil uma definição precisa, pois esta designação, muitas vezes, depende do ponto de vista do investigador.

Para este trabalho, os *escoamentos multifásicos* caracterizam-se por de pelo menos duas *fases fluidas*, separadas por *interfaces*, sendo as equações resolvidas para ambas as fases.

As maiores dificuldades destes escoamentos estão:

- Na vizinhança da(s) interface(s), em que descontinuidades podem ocorrer como, por exemplo, variação descontínua da densidade, da viscosidade, presença de tensão superficial, e como devem-se resolvê-las: esquemas de interpolação próprios, formulações próprias (como tratar a tensão superficial), técnicas de pré-condicionamento, etc.
- Na determinação da interface: utilizar uma estrutura de dados para discretizá-la ou construí-la pela informação de algum parâmetro. Considerações de geometria computacional, como casos de interseções, mudanças topológicas (ruptura da

interface, colisão de interfaces), etc.

Dentre as técnicas utilizadas para tratar os escoamentos interfaciais, destacam-se:

- *Front Tracking* (acompanhamento da fronteira)
- *Level Set* (curva ou superfície de nível)
- *Volume of Fluid* (VOF) (volume de fluido)

Em (PUCKETT *et al.*, 1997), referências a estes métodos podem ser encontradas.

Destacamos quatro monografias sobre escoamentos interfaciais, cada qual com uma variedade de referências, avaliadas para a realização dos testes de comparação e métodos numéricos empregados. São elas: (LAGES, 2016), que utiliza o método Front Tracking na HIG-TREE (Sec 4.5), (FIGUEIREDO, 2016) que usa a técnica VOF em escoamentos viscoelásticos multifásicos, e (RIBERA *et al.*, 2015) com um extenso conjunto de testes e referências sobre o método VOF. Este último autor também utiliza malhas hierárquicas. Por último (MEDEIROS, 2017), que utiliza *Superfície Livre* para tratar o escoamento com interface.

3.1 Método VOF

Neste trabalho, foi escolhido o Método VOF (HIRT; NICHOLS, 1981). Para este método, é introduzida uma *função marcadora ou característica*:

$$\chi(x(X,t),t) = \chi = \begin{cases} 1, & x \in \text{FASE 1, em } t \\ 0, & x \in \text{FASE 0, em } t \end{cases} \quad (3.1)$$

sendo X as coordenadas *lagrangeanas* (*referenciais*) e x as coordenadas *eulerianas* (*espaciais*) (4.1).

Baseando-se na hipótese da continuidade do fluxo de massa e da não mudança de fase (não há fluxo de massa de uma fase a outra) (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011, p. 37), é possível modelar o movimento da interface como (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999, p. 571):

$$\partial_t \chi(x,t) + V \nabla \cdot \chi(x,t) = 0, \quad (3.2)$$

sendo V a velocidade. Na equação acima, a função χ não é diferenciável no sentido clássico, porém métodos integrais permitem resolvê-la.

Def 3.1. (*Fração de Volume*) Para tanto (será analisado o caso bidimensional), considere-se a *função (discreta)* fração de volume (ou fração de área), f_{ij} (Fig 5), que na fase de referência (FASE 1) vale 1 (3.1). Esta função é definida num volume de controle (quadrado) ou célula (i, j) como (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999, p. 581):

$$f_{ij}h^2 = \int_{(i,j)} \chi dx dy. \quad (3.3)$$

Figura 5 – Figura ilustrando a fração de volume (Def 3.1) numa interface.

Fonte: Figueiredo (2016).

A evolução de f_{ij} (que será denotada por f) é então modelada pela seguinte equação de transporte:

$$\partial_t f + V \cdot \nabla f = 0. \quad (3.4)$$

Como os escoamentos tratados neste trabalho são considerados incompressíveis, a equação anterior pode ser escrita em termos conservativos:

$$\partial_t f + \nabla \cdot (Vf) = 0, \quad (3.5)$$

Consideraremos métodos integrais (a ser visto adiante) para resolver a equação anterior.

De acordo com (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999, p. 582), o VOF apresenta as seguintes vantagens:

- Precisão na Conservação da Massa.
- Facilidade em mudanças topológicas (desconexão ou reconexão da interface).
- Paralelizável.
- Facilmente estendido do caso bidimensional para o tridimensional.

A última vantagem listada merece cuidado: O VOF é facilmente estendido no sentido de que a equação da advecção da fração é a mesma (a menos da dimensão), embora os cálculos se tornem complexos e caros computacionalmente. Observa-se também outra vantagem do VOF, que é o armazenamento da fração de volume, apenas um número por célula; outra facilidade do VOF, é um esquema natural para aproximação das propriedades de um fluido numa célula, por exemplo, se a densidade da FASE 0 é ρ_0 e da FASE 1 é ρ_1 então a densidade em uma célula (i, j) pode ser aproximada por:

$$\rho_{ij} = f_{ij}\rho_1 + (1 - f_{ij})\rho_0. \quad (3.6)$$

Este esquema foi empregado neste trabalho (também para viscosidade, etc).

3.2 Método HF

O método da função de altura *Height Function (HF)* é um método gráfico para estimar a normal e a curvatura pela determinação de funções explícitas locais (Fig 6). As referências consultadas para este método (nelas há também discussões de outros métodos correlatos ao HF, como *ELVIRA*, *Convolução*, *Parker-Youngs*) foram: (CUMMINS; FRANCOIS; KOTHE, 2005), (BORNIA *et al.*, 2011), (PATEL; KUIPERS; PETERS, 2018), (POPINET, 2009), (JR; PUCKETT, 2004). Esta última contém uma série de testes comparando vários métodos que estimam a curvatura e a normal pela fração de volume.

Antes, serão definidas a curvatura e a normal, e depois será mostrado como elas podem ser obtidas através da fração de volume no caso bidimensional. Primeiro, é necessário definir uma orientação à interface, que em duas dimensões reduz-se a uma curva.

Figura 6 – Figura mostrando as parametrizações locais de uma curva, $y = y(x)$ e $x = x(y)$.

Fonte: [Bornia et al. \(2011\)](#).

Def 3.2. (*Convenção para o vetor normal e o vetor tangente*) A orientação estabelecida é a seguinte (Def 3.1, (3.1)):

- FASE 1 a esquerda (do vetor tangente) da curva.
- FASE 0 a direita (do vetor tangente) da curva (Fig 7).

Esta adoção irá definir o sentido do vetor tangente ($\hat{u}_t$). O vetor normal ($\hat{u}_n$) é determinado de maneira que o produto vetorial $\hat{u}_t \times \hat{u}_n$ aponte para fora do plano da curva. Portanto, o vetor normal irá apontar para a FASE 1.

Seja $C = (x(s, t), y(s, t))$ uma curva parametrizada no instante t (em coordenadas cartesianas), então a normal $\hat{u}_n = \hat{u}_n(s, t)$ e a curvatura $\kappa = \kappa(s, t)$ em t são:

$$\kappa = \frac{-y'x'' + x'y''}{(x'^2 + y'^2)^{1.5}}, \quad u_n = \frac{1}{(x'^2 + y'^2)^{0.5}}(-y', x'). \quad (3.7)$$

Os apóstrofes acima denotam diferenciação em relação ao parâmetro s . Para o método HF, aparecem quatro parametrizações (será omitida a dependência temporal):

$$x = s, \quad x = -s, \quad y \stackrel{\text{(Fig 6)}}{=} y(x), \quad \text{ou} \quad y = s, \quad y = -s \quad x \stackrel{\text{(Fig 6)}}{=} x(y). \quad (3.8)$$

Que podem ser escritas resumidamente como (Fig 7):

$$x \stackrel{\text{(Fig 7)}}{=} \alpha s, \quad y = \alpha s, \quad \alpha \in \{1, -1\}. \quad (3.9)$$

As fórmulas para curvatura e normal em (3.7) então assumem ($\alpha \stackrel{(3.9)}{\in} \{1, -1\}$):

Figura 7 – Parametrizações $x = s$ e $x = -s$, sendo $Y_M \approx y(x_M)$ uma aproximação de $y(x_M)$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

$$\kappa(x) = \frac{\alpha y''(x)}{(1 + y'(x)^2)^{1.5}}, \quad \hat{u}_n = \frac{\alpha}{1 + y'(x)^2}(-y'(x), 1), \quad (3.10)$$

$$\kappa(y) = \frac{-\alpha x''(y)}{(1 + x'(y)^2)^{1.5}}, \quad \hat{u}_n = \frac{\alpha}{1 + x'(y)^2}(-1, x'(y)). \quad (3.11)$$

A discretização das equações acima por diferenças finitas centradas em x_M , para as parametrizações $x \stackrel{(3.9)}{=} \alpha s$, $\alpha \in \{1, -1\}$, conforme ilustrado em Fig 7 fornece:

$$\kappa(x_M) \approx \frac{\alpha Y_M''}{(1 + Y_M'^2)^{1.5}}, \quad \hat{u}_n(x_M) \approx \frac{\alpha}{1 + Y_M'^2}(-Y_M', 1), \quad (3.12)$$

$$Y_M' = \frac{\alpha}{2dx}(|Y_R| - |Y_L|), \quad Y_M'' = \frac{\alpha}{dx^2}(|Y_R| - 2|Y_M| + |Y_L|), \quad (3.13)$$

sendo $Y_M \stackrel{(3.14)}{\approx} y(x_M)$, a altura em x_M , uma aproximação de $y(x_M)$ e $Y_R \approx y(x_R)$, $Y_L \approx y(x_L)$. Expressões análogas são obtidas para $y \stackrel{(3.9)}{=} \alpha s$, $\alpha \in \{1, -1\}$.

A altura Y_M é encontrada (BORNIA *et al.*, 2011, sec. 3.1), observando-se Fig 8a:

$$Y_M = \frac{1}{dx} \int_{x_M - \frac{dx}{2}}^{x_M + \frac{dx}{2}} y(u) du \stackrel{\text{(Fig 8a)}}{=} \frac{1}{dx} \sum_{k=-n}^N f_{i,j+k} dx dy \approx y(x_M) + \mathcal{O}(dx^2), \quad (3.14)$$

sendo f a fração de volume (Def 3.1 e Fig 5). As alturas Y_R e Y_L são determinadas analogamente a Y_M . As aproximações descritas de (3.12) a (3.14) são calculadas desde que o stencil considerado seja admissível, como discutido em Obs 3.2.

Fonte: Cummins, Francois e Kothe (2005).

Fonte: Popinet (2009).

Figura 8 – Stencils fixo e variável para o cálculo da altura numa célula interfacial. No variável, estabelece-se uma origem $\bullet$ em comum.

O método HF utilizado segue os passos acima descritos. Assim para o caso ilustrado em Fig 8a, valeria:

$$Y_L = 2.67dy, \quad Y_M = 3.62dy, \quad Y_R = 3.78dy, \quad (3.15)$$

e a normal, $\hat{u}_n(x_M)$ e curvatura, $\kappa(x_M)$, na célula interfacial cuja fração de volume, $f = 0.62$, seriam aproximadas por (3.12) e (3.13). O parâmetro α (3.9) seria dado por:

$$\alpha \stackrel{\text{(Obs 3.1)}}{=} -1. \quad (3.16)$$

Obs 3.1. Para encontrar o valor de α (3.9) no stencil vertical (VER), procede-se da seguinte maneira: sejam NORTE (N) e SUL (S) os extremos superior e inferior das colunas ($y_N > y_S$), respectivamente. Então α é dado por:

$$\text{VER, } y = y(x), \quad \alpha = \begin{cases} -1, & \text{se } 0 = f(N) < f(S) = 1 \\ 1, & \text{se } 1 = f(N) > f(S) = 0 \end{cases}, \quad y_N > y_S. \quad (3.17)$$

Para o stencil horizontal (HOR) (Obs 3.2), sendo LESTE (E) e OESTE (W) os extremos direito e esquerdo das linhas ($x_E > x_W$), respectivamente, α assumiria:

$$\text{HOR, } x = x(y), \quad \alpha = \begin{cases} 1, & \text{se } 0 = f(E) < f(W) = 1 \\ -1, & \text{se } 1 = f(E) > f(W) = 0 \end{cases}, \quad x_E > x_W, \quad (3.18)$$

sendo f a fração de volume (Def 3.1 e Fig 5).

Obs 3.2. (*Admissibilidade do Stencil, Diferenças Finitas Descentradas*) Os casos acima expostos (stencil VERTICAL) são aqueles em que $y = y(x)$. Caso não seja possível obter $y = y(x)$, deve-se verificar, se existe $x = x(y)$ (HORIZONTAL). Uma condição necessária para obter uma função explícita, é que em cada coluna (linha) relativa a uma altura (largura) as células dos extremos NORTE e SUL (ou LESTE e OESTE) correspondam a fases distintas (BORNIA *et al.*, 2011, sec. 3.1), e isto deve ser satisfeito para todas as colunas (ou linhas) no stencil, e do mesmo modo: todas as colunas (ou linhas) devem ter o mesmo α (Obs 3.1). Em Fig 8a esta exigência é respeitada (e o stencil vertical é considerado admissível), pois em cada coluna, a célula do extremo inferior (SUL) pertence à FASE 1 e do extremo superior (NORTE), à FASE 0. Se não for possível obter um stencil de diferenças finitas centradas, como exibido na célula destacada em Fig 9, tenta-se um esquema de diferenças finitas descentradas (progressivas ou regressivas) com três colunas (ou linhas). Se esta última tentativa falhar, a curvatura e a normal são consideradas nulas (deixamos o tratamento desse caso para trabalhos futuros).

Obs 3.3. O stencil utilizado não precisa ser fixo, como em Fig 8b. Neste caso, basta impor uma origem em comum após o cálculo das três alturas. Este procedimento, cujos

detalhes podem ser encontrados em (POPINET, 2009, p. 16, 17), foi adotado por este trabalho.

Figura 9 – Na célula destacada, com a resolução acima, não é possível construir um stencil de diferenças finitas centradas.

Fonte: Popinet (2009).

3.3 PLIC

O *Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC)* é uma técnica que aproxima a interface por retas, pela informação da fração de volume. Referências a este método podem ser encontradas em (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999, p. 583). Um algoritmo VOF/PLIC pode ser dividido em duas partes:

- Construir a interface a partir da informação da fração de volume.
- Movimentar (Evoluir) a interface no tempo.

As etapas acima apresentadas serão discutidas nas próximas duas seções.

3.4 PLIC: Construção da Interface pela Fração de Volume

Figura 10 – Comparação entre a interface original e com aproximação por retas

Fonte: Elaborada pelo autor.

Considere-se a célula de centro C em Fig 10b. Seja f a fração de volume (Def 3.1 e Fig 5) da célula. O vetor normal $\hat{u}_n = (n_x, n_y)$ é determinado (Obs 3.5), por exemplo, como em (3.12). A equação da reta, com origem em C , é dada por:

$$n_x x_C + n_y y_C = d_C. \quad (3.19)$$

sendo d_C a distância entre a reta e C (Fig 10b).

Obs 3.4. (*Sinal de d_C*) Seja $p_C = (x_{p_C}, y_{p_C})$ a projeção ortogonal do centro C da célula sobre a reta orientada de normal $\hat{u}_n = (n_x, n_y)$ e vetor tangente $\hat{u}_t$ (Def 3.2):

- Se C estiver a direita (Fig 10b) de $\hat{u}_t$:

$$\langle p_C, \hat{u}_n \rangle = n_x x_{p_C} + n_y y_{p_C} \stackrel{(3.19)}{=} d_C > 0. \quad (3.20)$$

- Se C estiver a esquerda de $\hat{u}_t$:

$$\langle p_C, \hat{u}_n \rangle = n_x x_{p_C} + n_y y_{p_C} \stackrel{(3.19)}{=} d_C < 0. \quad (3.21)$$

O método PLIC: Construir a Interface pela Fração de Volume, determina o valor de d_C (discutido nas próximas seções) e do vetor normal em cada célula, a partir da fração de volume.

Obs 3.5. Ressalta-se que diferentes métodos para estimar a normal podem resultar em interfaces lineares distintas. Novamente, neste trabalho a normal é estimada por (3.12).

(a) Caso $n_x \cdot n_y > 0$, sendo:

$$|d_{SW}| < |d_{SE}| < |d_{NW}|$$

$$a_{SW} < a_{SE} < a_{NW}$$

e a_{SW} , a_{SE} e a_{NW} as áreas, respectivamente:

$$\text{area}\{SW, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\}$$

$$\text{area}\{SW, SE, y_{se}^*\}$$

$$\text{area}\{SW, SE, y_{nw}^*, NW\}$$

(b) Caso $n_x \cdot n_y < 0$, sendo:

$$|d_{SE}| < |d_{NE}| < |d_{SW}|$$

$$a_{SE} < a_{NE} < a_{SW}$$

e a_{SE} , a_{NE} e a_{SW} as áreas respectivamente:

$$a_{SE} = \text{area}\{SE, y_{se0}^*, x_{se0}^*\}$$

$$\text{area}\{SE, NE, x_{ne}^*\}$$

$$\text{area}\{SE, NE, x_{sw}^*, SW\}$$

Figura 11 – Mudanças de coordenadas para $n_x \cdot n_y > 0$ e $n_x \cdot n_y < 0$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.4.1 PLIC: Construção a Interface pela Fração de Volume, se

$$n_x \cdot n_y \neq 0$$

Consideram-se as seguintes mudanças de coordenadas, com o vetor normal (n_x, n_y) obtido da fração de volume por (3.12):

Se $n_x \cdot n_y > 0$, transladar a origem do centro C para o canto SW (Fig 11a). (3.22)

Se $n_x \cdot n_y < 0$, transladar a origem do centro C para o canto SE (Fig 11b). (3.23)

Para as mudanças de coordenadas em (3.22) e (3.23), sejam:

a_{SW} a área do polígono P_{SW} , triangular ou não triangular (Obs 3.6), $SW \in P_{SW}$, que corta x_{SW} em x_{sw0}^* e y_{SW} em y_{sw0}^* (Fig 11a). (3.24)

a_{SE} a área do polígono P_{SE} , triangular ou não triangular (Obs 3.6), $SE \in P_{SE}$, que corta x_{SE} em x_{se0}^* e y_{SE} em y_{se0}^* (Fig 11b). (3.25)

Então a_{SW} e a_{SE} são (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999, p. 586):

$$a_{SW} \stackrel{\text{(Fig 11a)}}{=} \frac{1}{2|n_x||n_y|} \left[d_{SW}^2 - \underbrace{R(h_x)h_x^2}_{area_x} - \underbrace{R(h_y)h_y^2}_{area_y} \right] \quad (n_x \cdot n_y > 0), \quad (3.26)$$

$$R(h) \stackrel{\text{(Obs 3.7)}}{=} \begin{cases} 1, & h > 0 \\ 0, & h \leq 0 \end{cases}, \quad (3.27)$$

$$h_x = |d_{SW}| - dx|n_x| \quad area_x \stackrel{\text{(Obs 3.7)}}{=} h_x^2 / (2|n_x||n_y|), \quad (3.28)$$

$$h_y = |d_{SW}| - dy|n_y| \quad area_y \stackrel{\text{(Obs 3.7)}}{=} h_y^2 / (2|n_x||n_y|), \quad (3.29)$$

$$a_{SE} \stackrel{\text{(Fig 11b)}}{=} \frac{1}{2|n_x||n_y|} \left[d_{SE}^2 - \underbrace{R(h_x)h_x^2}_{area_x} - \underbrace{R(h_y)h_y^2}_{area_y} \right] \quad (n_x \cdot n_y < 0), \quad (3.30)$$

$$R(h) \stackrel{\text{(Obs 3.7)}}{=} \begin{cases} 1, & h > 0 \\ 0, & h \leq 0 \end{cases}, \quad (3.31)$$

$$h_x = |d_{SE}| - dx|n_x| \quad area_x \stackrel{\text{(Obs 3.7)}}{=} h_x^2 / (2|n_x||n_y|), \quad (3.32)$$

$$h_y = |d_{SE}| - dy|n_y| \quad area_y \stackrel{\text{(Obs 3.7)}}{=} h_y^2 / (2|n_x||n_y|). \quad (3.33)$$

Obs 3.6. Em Fig 11a e Fig 11b, há apenas o caso do polígono triangular. Os casos trapezoidais e pentagonais, que estão ilustrados apenas para $n_x \cdot n_y > 0$ (sendo aqueles para $n_x \cdot n_y < 0$ semelhantes) podem ser vistos de Fig 13 a Fig 14.

Obs 3.7. As quantidades $area_x$ e $area_y$ em (3.26):

$$area_x = \underbrace{area\{\text{SE}, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\}}_{\text{Fig 13a, Fig 14}} = \frac{1}{2} \frac{R(h_x)h_x^2}{|n_x||n_y|}, \quad (3.34)$$

$$area_y = \underbrace{area\{\text{NW}, x_{sw}^*, y_{sw0}^*\}}_{\text{Fig 13b, Fig 14}} = \frac{1}{2} \frac{R(h_y)h_y^2}{|n_x||n_y|}, \quad (3.35)$$

são as áreas, se existirem, dos triângulos em SE e NW (Fig 12 a Fig14), ou seja:

- Se $h_x > 0$ o triângulo em SE $\{\text{SE}, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\}$ existe e $R(h_x) = 1$ (Fig 13a e Fig 14). Caso contrário, não existe e $R(h_x) = 0$ (Fig 12 e Fig 13b).
- Se $h_y > 0$ o triângulo em NW $\{\text{NW}, x_{sw}^*, y_{sw0}^*\}$ existe e $R(h_y) = 1$ (Fig 13b e Fig 14). Caso contrário não existe e $R(h_y) = 0$ (Fig 13a, Fig 12).

A área do pentágono $a_{sw} = area\{\text{SW}, \text{SE}, y_{sw}^*, x_{sw}^*, \text{NW}\}$ em Fig 14a é calculada como:

$$a_{sw} = area\{\text{SW}, \text{SE}, y_{sw}^*, x_{sw}^*, \text{NW}\} = area\{\text{SW}, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\} - R(h_x) \underbrace{area\{\text{SE}, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\}}_{\substack{area_x \\ (3.34)}} - R(h_y) \underbrace{area\{\text{NW}, x_{sw}^*, y_{sw0}^*\}}_{\substack{area_y \\ (3.35)}}, \quad (3.36)$$

que é a fórmula (3.26). Raciocínio análogo é empregado para o caso $n_x \cdot n_y < 0$ (3.30).

3.4.1.1 Encontrar a Distância (d_{sw}) Conhecendo-se a Fração de Volume e o Vetor Normal (n_x, n_y), se $n_x \cdot n_y > 0$

A discussão na seção anterior permitirá inverter diretamente a relação (3.26), isto é, encontrar d_{sw} , conhecendo-se a_{sw} . Os casos $n_x \cdot n_y \stackrel{(3.26)}{>} 0$ serão analisados nesta subseção (d_{sw} e a_{sw}) e aqueles para $n_x \cdot n_y \stackrel{(3.30)}{<} 0$ (d_{se} e a_{se}) na seguinte. Para a elaboração do algoritmo de inversão, descrito abaixo, consultou-se (TRYGGVASON; SCARDOVELLI; ZALESKI, 2011, p. 104-105, 284-286).

Considere-se a versão adaptada da equação (3.26):

$$a_I = \frac{1}{2|n_x||n_y|} \left[d_I^2 - R(h_{xI})h_{xI}^2 - R(h_{yI})h_{yI}^2 \right] \quad (n_x \cdot n_y > 0), \quad \text{ou ainda:} \quad (3.37)$$

$$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I = 0, \quad I \in \{\text{SW}, \text{SE}, \text{NW}\}, \quad (3.38)$$

$$A_I = \frac{1}{|n_x||n_y|} (1 - R(h_{xI}) - R(h_{yI})), \quad B_I = 2 \left(\frac{1}{|n_y|} R(h_{xI}) dx + \frac{1}{|n_x|} R(h_{yI}) dy \right),$$

$$C_I = -2a_I - \frac{|n_x|}{|n_y|} R(h_{xI}) dx^2 - \frac{|n_y|}{|n_x|} R(h_{yI}) dy^2, \quad (3.39)$$

$$R(h) = \begin{cases} 1, & h > 0 \\ 0, & h \leq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad \begin{cases} h_{xI} = |d_I| - dx|n_x| \\ h_{yI} = |d_I| - dy|n_y| \end{cases}. \quad (3.40)$$

Se dados o vetor normal $\hat{u}_n = (n_x, n_y)$, com $n_x \cdot n_y > 0$, e a fração de volume f (Def 3.1 e Fig 5), tem-se:

$$a_{\text{SW}} \stackrel{(\text{Obs 3.8})}{=} \begin{cases} f \cdot dx dy, & n_x < 0 \quad \text{SW a esquerda de } \hat{u}_t \\ (1-f) \cdot dx dy, & n_x > 0 \quad \text{SW a direita de } \hat{u}_t \end{cases}. \quad (3.41)$$

Calculam-se:

$$|d_{\text{SE}}| = |n_x| \cdot dx, \quad |d_{\text{NW}}| = |n_y| \cdot dy, \quad (3.42)$$

e as áreas a_{SE} e d_{NW} , atribuindo-se:

$$a_{\text{SE}} \stackrel{(3.37)}{=} a_I, \quad I \stackrel{(3.38)}{=} \text{SE}, \quad a_{\text{NW}} \stackrel{(3.37)}{=} a_I, \quad I \stackrel{(3.38)}{=} \text{NW}. \quad (3.43)$$

Obs 3.8. (Sinal de d_{SW}) Como a reta aproximando interface intersecta os eixos x_{SW} e y_{SW} (Fig 11a) em valores *estritamente positivos* (pois $n_x \cdot n_y > 0$), e a equação da reta é dada por $n_x x_{\text{SW}} + n_y y_{\text{SW}} = d_{\text{SW}}$, então para $y_{\text{SW}} = 0$:

$$\text{sinal}(d_{\text{SW}}) = \text{sinal}(n_x). \quad (3.44)$$

Logo, se SW estiver a esquerda de $\hat{u}_t$ ($d_{\text{SW}} \stackrel{(3.21)}{<} 0 \stackrel{(3.44)}{\Rightarrow} n_x < 0$) a área de P_{SW} (3.24) é $a_{\text{SW}} \stackrel{(\text{Fig 10b})}{=} f \cdot dx dy$, pois $\text{SW} \in \text{FASE 1}$ (Def 3.2). Se SW estiver a direita de $\hat{u}_t$ ($d_{\text{SW}} \stackrel{(3.20)}{>} 0 \stackrel{(3.44)}{\Rightarrow} n_x > 0$), com $\text{SW} \in \text{FASE 0}$ e a área do polígono P_{SW} é $a_{\text{SW}} = (1-f) \cdot dx dy$.

Listam-se os seguintes casos:

$$\underbrace{\text{Caso 1 (Fig 12):}}_{a_{SW} < \min\{a_{NW}, a_{SE}\}} \quad \text{Se } \begin{cases} a_{SW} < a_{SE} < a_{NW} & \text{Fig 12a} \\ a_{SW} < a_{NW} < a_{SE} & \text{Fig 12b} \end{cases} \quad (3.45)$$

$$\text{tem-se } \begin{cases} R(h_{xI}) = 0 & \text{e } R(h_{yI}) = 0, I = SW \\ R(h_{xI}) = 0 & \text{e } R(h_{yI}) = 0, I = SW \end{cases} \quad (3.46)$$

$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I \stackrel{(3.38)}{=} 0$, $I \stackrel{(3.38)}{=} SW$, tem duas raízes de mesmo módulo $|d_I|$ e:

$$d_{SW} \stackrel{(3.44)}{=} \text{sin}(\alpha_x) |d_I|. \quad (3.47)$$

$$\underbrace{\text{Caso 2 (Fig 13):}}_{\min\{a_{NW}, a_{SE}\} < a_{SW} < \max\{a_{NW}, a_{SE}\}} \quad \text{Se } \begin{cases} a_{SE} < a_{SW} < a_{NW} & \text{Fig 13a} \\ a_{NW} < a_{SW} < a_{SE} & \text{Fig 13b} \end{cases} \quad (3.48)$$

$$\text{tem-se } \begin{cases} R(h_{xI}) = 1 & \text{e } R(h_{yI}) = 0, I = SW \\ R(h_{xI}) = 0 & \text{e } R(h_{yI}) = 1, I = SW \end{cases} \quad (3.49)$$

$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I \stackrel{(3.38)}{=} 0$, $I \stackrel{(3.38)}{=} SW$, tem duas raízes positivas iguais d_I e:

$$d_{SW} \stackrel{(3.44)}{=} \text{sin}(\alpha_x) d_I. \quad (3.50)$$

$$\underbrace{\text{Caso 3 (Fig 14):}}_{a_{SW} > \max\{a_{NW}, a_{SE}\}} \quad \text{Se } \begin{cases} a_{SE} < a_{NW} < a_{SW} & \text{Fig 14a} \\ a_{NW} < a_{SE} < a_{SW} & \text{Fig 14b} \end{cases} \quad (3.51)$$

$$\text{tem-se } \begin{cases} R(h_{xI}) = 1 & \text{e } R(h_{yI}) = 1, I = SW \\ R(h_{xI}) = 1 & \text{e } R(h_{yI}) = 1, I = SW \end{cases} \quad (3.52)$$

$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I \stackrel{(3.38)}{=} 0$, $I \stackrel{(3.38)}{=} SW$, tem duas raízes positivas d_I^{min} e d_I^{max}

e como $d_I^{min} < \frac{1}{2}(d_I^{min} + d_I^{max}) = -\frac{B_I}{2A_I} \stackrel{(\text{Fig 11a})}{=} |d_{NE}|$, então:

$$d_{SW} \stackrel{(3.44)}{=} \text{sin}(\alpha_x) d_I^{min}. \quad (3.53)$$

(a) Caso $n_x \cdot n_y > 0$, sendo:

$$|d_{SW}| < |d_{SE}| < |d_{NW}|$$

$$a_{SW} < a_{SE} < a_{NW}$$

$$h_x \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dx \cdot |n_x|$$

$$h_y \stackrel{(3.29)}{=} |d_{SW}| - dy \cdot |n_y|$$

$$R(h_x) \stackrel{(3.27)}{=} 0$$

$$R(h_y) \stackrel{(3.27)}{=} 0$$

$$area_x \stackrel{(3.28)}{=} 0$$

$$area_y \stackrel{(3.29)}{=} 0$$

e a_{SW} , a_{SE} e a_{NW} as áreas dos polígonos:

$$a_{SW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\}$$

$$a_{SE} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{se}^*\}$$

$$a_{NW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{nw}^*, NW\}$$

(b) Caso $n_x \cdot n_y > 0$, sendo:

$$|d_{SW}| < |d_{NW}| < |d_{SE}|$$

$$a_{SW} < a_{NW} < a_{SE}$$

$$h_x \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dx \cdot |n_x|$$

$$h_y \stackrel{(3.29)}{=} |d_{SW}| - dy \cdot |n_y|$$

$$R(h_x) \stackrel{(3.27)}{=} 0$$

$$R(h_y) \stackrel{(3.27)}{=} 0$$

$$area_x \stackrel{(3.28)}{=} 0$$

$$area_y \stackrel{(3.29)}{=} 0$$

e a_{SW} , a_{SE} e a_{NW} as áreas dos polígonos:

$$a_{SW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, x_{sw0}^*, y_{sw0}^*\}$$

$$a_{SE} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, x_{se}^*, NW\}$$

$$a_{NW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, x_{nw}^*, NW\}$$

Figura 12 – Caso 1: $a_{SW} < \min\{a_{SE}, a_{NW}\}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

(a) Caso $n_x \cdot n_y > 0$, sendo:

$$|d_{SE}| < |d_{SW}| < |d_{NW}|$$

$$a_{SE} < a_{SW} < a_{NW}$$

$$h_x \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dx \cdot |n_x|$$

$$h_y \stackrel{(3.29)}{=} |d_{SW}| - dy \cdot |n_y|$$

$$R(h_x) \stackrel{(3.27)}{=} 1$$

$$R(h_y) \stackrel{(3.27)}{=} 0$$

$$area_x \stackrel{(3.28)}{=} area\{SE, x_{sw}^*, y_{sw}^*\}$$

$$area_y \stackrel{(3.29)}{=} 0$$

e a_{SW} , a_{SE} e a_{NW} as áreas dos polígonos:

$$a_{SW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{sw}^*, y_{sw0}^*\}$$

$$a_{SE} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{se}^*\}$$

$$a_{NW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{nw}^*, NW\}$$

(b) Caso $n_x \cdot n_y > 0$, sendo:

$$|d_{NW}| < |d_{SW}| < |d_{SE}|$$

$$a_{NW} < a_{SW} < a_{SE}$$

$$h_x \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dx \cdot |n_x|$$

$$h_y \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dy \cdot |n_y|$$

$$R(h_x) \stackrel{(3.27)}{=} 0$$

$$R(h_y) \stackrel{(3.27)}{=} 1$$

$$area_x \stackrel{(3.28)}{=} 0$$

$$area_y \stackrel{(3.29)}{=} area\{NW, x_{sw}^*, y_{sw0}^*\}$$

e a_{SW} , a_{SE} e a_{NW} as áreas dos polígonos:

$$a_{SW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, x_{sw0}^*, x_{sw}^*, NW\}$$

$$a_{SE} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, x_{se}^*, NW\}$$

$$a_{NW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, x_{nw}^*, NW\}$$

Figura 13 – Caso 2: $\min\{a_{SE}, a_{NW}\} < a_{SW} < \max\{a_{SE}, a_{NW}\}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

(a) Caso $n_x \cdot n_y > 0$, sendo:

$$|d_{SE}| < |d_{NW}| < |d_{SW}|$$

$$a_{SE} < a_{NW} < a_{SW}$$

$$h_x \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dx \cdot |n_x|$$

$$h_y \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dy \cdot |n_y|$$

$$R(h_x) \stackrel{(3.27)}{=} 1$$

$$R(h_y) \stackrel{(3.27)}{=} 1$$

$$area_x \stackrel{(3.28)}{=} area\{SE, x_{sw0}^*, y_{sw}^*\}$$

$$area_y \stackrel{(3.29)}{=} area\{NW, x_{sw}^*, y_{sw0}^*\}$$

e a_{SW} , a_{SW} e a_{SW} as áreas dos polígonos de vértices:

$$a_{SW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{sw}^*, x_{sw}^*, NW\}$$

$$a_{SE} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{se}^*\}$$

$$a_{NW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{nw}^*, NW\}$$

(b) Caso $n_x \cdot n_y < 0$, sendo:

$$|d_{NW}| < |d_{SE}| < |d_{SW}|$$

$$a_{NW} < a_{SE} < a_{SW}$$

$$h_x \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dx \cdot |n_x|$$

$$h_y \stackrel{(3.28)}{=} |d_{SW}| - dy \cdot |n_y|$$

$$R(h_x) \stackrel{(3.27)}{=} 1$$

$$R(h_y) \stackrel{(3.27)}{=} 1$$

$$area_x \stackrel{(3.28)}{=} area\{SE, x_{sw0}^*, y_{sw}^*\}$$

$$area_y \stackrel{(3.29)}{=} area\{NW, x_{sw}^*, y_{sw0}^*\}$$

e a_{SW} , a_{SW} e a_{SW} as áreas dos polígonos de vértices:

$$a_{SW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, y_{sw}^*, x_{sw}^*, NW\}$$

$$a_{SE} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, SE, x_{se}^*, NW\}$$

$$a_{NW} \stackrel{(3.37)}{=} area\{SW, x_{nw}^*, NW\}$$

Figura 14 – Caso 3: $a_{SW} > \max\{a_{SE}, a_{NW}\}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

3.4.1.2 Encontrar a Distância (d_{SE}) Conhecendo-se a Fração de Volume e o Vetor Normal (n_x, n_y), se $n_x \cdot n_y < 0$

Segue a mesma discussão da Seção 3.4.1.1 anterior, permitindo-se inverter diretamente (3.30). Pode-se escrever (3.30):

$$a_I = \frac{1}{2|n_x||n_y|} \left[d_I^2 - R(h_{xI})h_{xI}^2 - R(h_{yI})h_{yI}^2 \right] \quad (n_x \cdot n_y < 0), \text{ ou ainda:} \quad (3.54)$$

$$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I = 0, \quad I \stackrel{(\text{Fig } 11b)}{\in} \{SE, NE, SW\}, \quad (3.55)$$

com A_I, B_I e C_I dados em (3.39) e $R(h), h_{xI}$ e h_{yI} em (3.40).

Se dados o vetor normal $\hat{u}_n = (n_x, n_y)$, com $n_x \cdot n_y < 0$, e a fração de volume f (Def 3.1 e Fig 5), tem-se:

$$a_{SE} \stackrel{(\text{Obs } 3.9)}{=} \begin{cases} f \cdot dxdy, & n_x > 0 \quad SE \text{ a esquerda de } \hat{u}_t \\ (1-f) \cdot dxdy, & n_x < 0 \quad SE \text{ a direita de } \hat{u}_t \end{cases}, \quad (3.56)$$

Calculam-se:

$$|d_{NE}| = |n_y| \cdot dy, \quad |d_{SW}| = |n_x| \cdot dx, \quad (3.57)$$

e as áreas a_{NE} e d_{SW} , atribuindo-se:

$$a_{NE} \stackrel{(3.54)}{=} a_I, \quad I \stackrel{(3.55)}{=} NE, \quad a_{SW} \stackrel{(3.54)}{=} a_I, \quad I \stackrel{(3.55)}{=} SW. \quad (3.58)$$

Obs 3.9. (Sinal de d_{SE}) Como a reta aproximando interface intersecta o eixo x_{SE} (Fig 11b) em valores *estritamente negativos* (pois $n_x \cdot n_y < 0$), e a equação da reta é dada por $n_x x_{SE} + n_y y_{SE} = d_{SE}$, então para $y_{SE} = 0$:

$$\text{sinal}(d_{SE}) = -\text{sinal}(n_x). \quad (3.59)$$

Logo, se SE estiver a esquerda de $\hat{u}_t$ ($d_{SW} \stackrel{(3.21)}{<} 0 \stackrel{(3.59)}{\Rightarrow} n_x > 0$) a área de P_{SE} (3.25) é $a_{SE} \stackrel{(\text{Fig } 10b)}{=} f \cdot dxdy$, pois $SE \in \text{FASE 1}$ (Def 3.2). Se SE estiver a direita de $\hat{u}_t$ ($d_{SW} \stackrel{(3.20)}{>} 0 \stackrel{(3.59)}{\Rightarrow} n_x < 0$), com $SE \in \text{FASE 0}$ e a área do polígono P_{SE} é $a_{SE} = (1-f) \cdot dxdy$.

Listam-se os seguintes casos:

$$\underbrace{\text{Caso 1:}}_{a_{SE} < \min\{a_{SW}, a_{NE}\}} \quad \text{Se} \quad \begin{cases} a_{SE} < a_{NE} < a_{SW} \\ a_{SE} < a_{SW} < a_{NE} \end{cases} \quad (3.60)$$

$$\text{tem-se} \quad \begin{cases} R(h_{xI}) = 0 \quad \text{e} \quad R(h_{yI}) = 0, I = SE \\ R(h_{xI}) = 0 \quad \text{e} \quad R(h_{yI}) = 0, I = SE \end{cases} \quad (3.61)$$

$$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I \stackrel{(3.55)}{=} 0, I \stackrel{(3.55)}{=} SE, \text{ tem duas raízes de mesmo módulo } |d_I| \text{ e:} \\ d_{SE} \stackrel{(3.59)}{=} -\text{sinal}(n_x) |d_I|. \quad (3.62)$$

$$\underbrace{\text{Caso 2:}}_{\min\{a_{SW}, a_{NE}\} < a_{SE} < \max\{a_{SW}, a_{NE}\}} \quad \text{Se} \quad \begin{cases} a_{NE} < a_{SE} < a_{SW} \\ a_{SW} < a_{SE} < a_{NE} \end{cases} \quad (3.63)$$

$$\text{tem-se} \quad \begin{cases} R(h_{xI}) = 0 \quad \text{e} \quad R(h_{yI}) = 1, I = SE \\ R(h_{xI}) = 1 \quad \text{e} \quad R(h_{yI}) = 0, I = SE \end{cases} \quad (3.64)$$

$$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I \stackrel{(3.55)}{=} 0, I \stackrel{(3.55)}{=} SE, \text{ tem duas raízes positivas iguais } d_I \text{ e:} \\ d_{SE} \stackrel{(3.59)}{=} -\text{sinal}(n_x) d_I. \quad (3.65)$$

$$\underbrace{\text{Caso 3:}}_{a_{SE} > \max\{a_{SW}, a_{NE}\}} \quad \text{Se} \quad \begin{cases} a_{NE} < a_{SW} < a_{SE} \\ a_{SW} < a_{NE} < a_{SE} \end{cases} \quad (3.66)$$

$$\text{tem-se} \quad \begin{cases} R(h_{xI}) = 1 \quad \text{e} \quad R(h_{yI}) = 1, I = SE \\ R(h_{xI}) = 1 \quad \text{e} \quad R(h_{yI}) = 1, I = SE \end{cases} \quad (3.67)$$

$$A_I d_I^2 + B_I d_I + C_I \stackrel{(3.55)}{=} 0, I \stackrel{(3.55)}{=} SE, \text{ tem duas raízes positivas } d_I^{\min} \text{ e } d_I^{\max} \\ \text{e como } d_I^{\min} < \frac{1}{2}(d_I^{\min} + d_I^{\max}) = -\frac{B_I}{2A_I} \stackrel{(\text{Fig } 11b)}{=} |d_{NW}|, \text{ então:}$$

$$d_{SE} \stackrel{(3.59)}{=} -\text{sinal}(n_x) d_I^{\min}. \quad (3.68)$$

3.4.2 PLIC: Construção a Interface pela Fração de Volume, se

$$n_x \cdot n_y = 0$$

Figura 15 – Casos paralelos $n_x = 0$ e $n_y = 0$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Considera-se a seguinte mudança de coordenadas:

$$\text{Transladar a origem de centro } C \text{ para o canto } \text{SW} \text{ (Fig 15)}. \quad (3.69)$$

Para a mudança de coordenadas em (3.69), seja:

$$a_{\text{SW}} \stackrel{\text{(Fig 15)}}{=} \begin{cases} \text{area}\{\text{SW}, x_{\text{sw}}^*, x_{\text{sw}}^*, \text{NW}\}, n_y \stackrel{\text{(Fig 15a)}}{=} 0, \\ \text{area}\{\text{SW}, \text{SE}, y_{\text{sw}}^*, y_{\text{sw}}^*\}, n_x \stackrel{\text{(Fig 15b)}}{=} 0. \end{cases} \quad (3.70)$$

Então a_{SW} é:

$$a_{\text{SW}} \stackrel{(3.70)}{=} \begin{cases} |d_{\text{sw}}| \cdot dy, n_y \stackrel{\text{(Fig 15a)}}{=} 0, \\ |d_{\text{sw}}| \cdot dx, n_x \stackrel{\text{(Fig 15b)}}{=} 0. \end{cases} \quad (3.71)$$

3.4.2.1 Encontrar a Distância (d_{SW}) Conhecendo-se a Fração de Volume e o Vetor Normal (n_x, n_y) , se $n_x \cdot n_y = 0$

Se conhecidos o vetor normal $\hat{u}_n = (n_x, n_y)$, com $n_x \cdot n_y = 0$, e a fração de volume f (Def 3.1 e Fig 5), tem-se:

$$\text{Se } n_y \stackrel{\text{(Fig 15a)}}{=} 0, \quad a_{SW} \stackrel{\text{(Obs 3.10)}}{=} \begin{cases} f \cdot dx dy, & n_x > 0 \\ (1-f) \cdot dx dy, & n_x < 0 \end{cases}, \quad (3.72)$$

$$\text{Se } n_x \stackrel{\text{(Fig 15b)}}{=} 0, \quad a_{SW} \stackrel{\text{(Obs 3.10)}}{=} \begin{cases} f \cdot dx dy, & n_y > 0 \\ (1-f) \cdot dx dy, & n_y < 0 \end{cases}. \quad (3.73)$$

Obs 3.10. (*Sinal de d_{SW}*) Como a reta aproximando interface intersecta os eixos x_{SW} e y_{SW} (Fig 15) em valores *estritamente positivos*, e a equação da reta é dada por $n_x x_{SW} + n_y y_{SW} = d_{SW}$, então:

$$\text{sinal}(d_{SW}) = \begin{cases} \text{sinal}(n_x), & n_y \stackrel{\text{(Fig 15a)}}{=} 0 \\ \text{sinal}(n_y), & n_x \stackrel{\text{(Fig 15b)}}{=} 0 \end{cases}. \quad (3.74)$$

Portanto, se SW estiver a esquerda de $\hat{u}_t$ ($d_{SW} \stackrel{(3.21)}{<} 0 \stackrel{(3.74)}{\Rightarrow} n_x < 0, n_y < 0$), $a_{SW} \stackrel{(3.70)}{=} f \cdot dx dy$, pois $SW \in \text{FASE 1}$ (Def 3.2). Se $n_x < 0$ e $n_y < 0$, então SW estará a direita de $\hat{u}_t$ ($d_{SW} \stackrel{(3.20)}{>} 0 \stackrel{(3.74)}{\Rightarrow} n_x > 0, n_y > 0$), com $SW \in \text{FASE 0}$, e $a_{SW} = (1-f) \cdot dx dy$.

Há o seguinte caso:

$$\text{Caso 1: } d_{SW} \stackrel{(3.71),(3.74)}{=} \begin{cases} \text{sinal}(n_x) \frac{a_{SW}}{dy}, & n_y \stackrel{\text{(Fig 15a)}}{=} 0 \\ \text{sinal}(n_y) \frac{a_{SW}}{dx}, & n_x \stackrel{\text{(Fig 15b)}}{=} 0. \end{cases} \quad (3.75)$$

3.5 PLIC: Transporte da Interface

A segunda parte do PLIC consiste em resolver a equação (3.5):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (fV) = 0. \quad (3.76)$$

Esta equação é integrada em cada célula $C(i, j)$, $n \in \{(1, 0), (-1, 0), (0, 1), (0, -1)\}$, fornecendo $(i \pm 1/2, j)$ facetas leste e oeste, $(i, j \pm 1/2)$ facetas norte e sul):

$$\begin{aligned} \int_C \frac{\partial f}{\partial t} + \int_C \nabla \cdot (fV) &\approx \\ dxdy \cdot \frac{\partial f_{i,j}}{\partial t} + dy \underbrace{(f_{i+\frac{1}{2},j} u_{i+\frac{1}{2},j} - f_{i-\frac{1}{2},j} u_{i-\frac{1}{2},j})}_{F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j}} + dx \underbrace{(f_{i,j+\frac{1}{2}} v_{i,j+\frac{1}{2}} - f_{i,j-\frac{1}{2}} v_{i,j-\frac{1}{2}})}_{G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}}} &\approx \\ \frac{\partial f_{i,j}}{\partial t} + \frac{1}{dx} (F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j}) + \frac{1}{dy} (G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}}) &= 0. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Neste trabalho foi utilizado um *Método de Passo Fracionado*, descrito em (PUC-KETT *et al.*, 1997, p. 273) para resolver (3.77). Em (RIBERA *et al.*, 2015, sec. 3.9) e (FIGUEIREDO, 2016, sec. 3.2.2), também são utilizados métodos de passo fracionado.

3.5.1 Método de Passo Fracionado

Considere-se uma célula qualquer, um método de passo fracionado (alternado) poderia ser:

- Advectar primeiro na direção x e depois na direção y :

$$f_{i,j}^{n+\theta} = f_{i,j}^n - \frac{dt}{dx} (F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n), \quad (3.78)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^{n+\theta} - \frac{dt}{dy} (G_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\theta} - G_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\theta}). \quad (3.79)$$

- Advectar primeiro na direção y e depois na direção x :

$$f_{i,j}^{n+\theta} = f_{i,j}^n - \frac{dt}{dy} (G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n), \quad (3.80)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^{n+\theta} - \frac{dt}{dx} (F_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\theta} - F_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\theta}). \quad (3.81)$$

Este procedimento foi testado neste trabalho, porém apresenta limitações. Seja $f_{i,j} = 1$ a fração de uma célula que em t é preenchida pela FASE 1. Suponha-se que as frações:

$$f_{i+1,j} = f_{i-1,j} = f_{i,j+1} = f_{i,j-1} = 1.$$

Deste modo, deve ocorrer, com a condição de incompressibilidade:

$$f_{i+\frac{1}{2},j} = f_{i-\frac{1}{2},j} = f_{i,j+\frac{1}{2}} = f_{i,j-\frac{1}{2}} = 1, \quad (3.82)$$

$$\frac{1}{dx} \left(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j} \right) + \frac{1}{dy} \left(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \right) = 0. \quad (3.83)$$

Um método de passo único forneceria (3.77):

$$\begin{aligned} f_{i,j}^{n+1} &= f_{i,j}^n - \underbrace{\frac{dt}{dy} \left(f_{i+\frac{1}{2},j} u_{i+\frac{1}{2},j} - f_{i-\frac{1}{2},j} u_{i-\frac{1}{2},j} \right) - \frac{dt}{dx} \left(f_{i,j+\frac{1}{2}} v_{i,j+\frac{1}{2}} - f_{i,j-\frac{1}{2}} v_{i,j-\frac{1}{2}} \right)}_{0 \text{ por (3.82) e (3.83)}} \Rightarrow \\ f_{i,j}^{n+1} &= f_{i,j}^n = 1. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Agora para o método de passo fracionado em (3.78) e admitindo-se que $u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j} = \varepsilon > 0$:

$$f_{i,j}^{n+\theta} = f_{i,j}^n - \frac{dt}{dx} \varepsilon, \quad (3.85)$$

e esta célula se tornaria interfacial ($0 < f_{i,j}^{n+\theta} < 1$) para dt suficientemente pequeno.

Tal situação gera difusão da interface, porque células suficientemente distantes são erroneamente marcadas como interfaciais no passo intermediário. Assim, adota-se: (PUCKETT *et al.*, 1997):

$$\frac{\partial f_{i,j}}{\partial t} + \frac{1}{dx} \left(F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j} \right) + \frac{1}{dy} \left(G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \stackrel{(3.77)}{=} \frac{\partial u}{\partial x} + f \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (3.86)$$

e o método de passo fracionado (alternado) em (3.78)-(3.81), modifica-se para:

- Advectar primeiro implicitamente na direção x , e depois, explicitamente em y :

$$f_{i,j}^{n+\theta} = \frac{f_{i,j}^n - \frac{dt}{dx} (F_{i+\frac{1}{2},j}^n - F_{i-\frac{1}{2},j}^n)}{1 - \frac{dt}{dx} (u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})}, \quad (3.87)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^{n+\theta} \left(1 + \frac{dt}{dy} (v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}) \right) - \frac{dt}{dy} (G_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\theta} - G_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\theta}). \quad (3.88)$$

- Advectar primeiro implicitamente na direção y e, depois, explicitamente em x :

$$f_{i,j}^{n+\theta} = \frac{f_{i,j}^n - \frac{dt}{dy}(G_{i,j+\frac{1}{2}}^n - G_{i,j-\frac{1}{2}}^n)}{1 - \frac{dt}{dy}(v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}})}, \quad (3.89)$$

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^{n+\theta} \left(1 + \frac{dt}{dx}(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}) \right) - \frac{dt}{dx}(F_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\theta} - F_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\theta}). \quad (3.90)$$

Deeste forma, não aparece problema em (3.85), pois em (3.87), ocorrerá:

$$f_{i,j}^{n+\theta} = \frac{f_{i,j}^n - \frac{dt}{dx}(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})}{1 - \frac{dt}{dx}(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j})} = \frac{1 - \varepsilon'}{1 - \varepsilon'} = 1, \quad (3.91)$$

e a célula suficientemente distante da interface não se torna interfacial, evitando-se o problema da difusão. Na próxima seção discute-se o cálculo dos fluxos F^n , $F^{n+\theta}$ e G^n , $G^{n+\theta}$.

3.5.2 Cálculo dos Fluxos

Para o cálculo dos fluxos, apenas o caso da direção x (F^n , $F^{n+\theta}$) será analisado.

Seja (i, j) , uma célula interfacial, com normal $\hat{u}_{ni,j} = (n_{xi,j}, n_{yi,j}) \stackrel{\text{(Obs 3.2)}}{\neq} 0$.

- Se a reta r não corta o retângulo de base $|u_{i+\frac{1}{2},j} dt|$, centrado em C' , como em Fig 16 e Fig 17, então:

– Se $u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 16)}}{>} 0$, seja $R = \{SW', SE, NE, D\}$. Então:

$$F_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} 1, & R \stackrel{\text{(Def 3.2)}}{\subset} \text{FASE 1} \\ 0, & R \stackrel{\text{(Def 3.2)}}{\subset} \text{FASE 0} \end{cases}. \quad (3.92)$$

– Se $u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 17)}}{<} 0$, seja $R = \{SW, SE', D, NW\}$, $F_{i+\frac{1}{2},j}$ é dado por (3.92).

- Se $n_x \cdot n_y \neq 0$ (não paralelo), e a reta r corta o retângulo de base $|u_{i+\frac{1}{2}} dt|$ centrado em C' , como em Fig 18 e Fig 19, então:

- Se $u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 18)}}{>} 0$, transladar $C_{i,j}$ para $C'_{i,j}$ e:

$$F_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \left(\frac{a_I}{|u_{i+\frac{1}{2}} dt| dy} \right) u_{i+\frac{1}{2},j}, & d_I \stackrel{\text{(Obs 3.8, 3.9)}}{<} 0 \text{ (ou } n_y < 0) \\ \left(\frac{|u_{i+\frac{1}{2},j} dt| dy - a_I}{|u_{i+\frac{1}{2},j} dt| dy} \right) u_{i+\frac{1}{2},j}, & d_I > 0 \text{ (ou } n_y > 0) \end{cases} \quad (3.93)$$

sendo:

$$I = \begin{cases} SW' \in C'_{i,j}, & n_x \cdot n_y \stackrel{\text{(3.24),(3.26)}}{>} 0, & a_{SW'} \stackrel{\text{(Fig 18)}}{=} \text{area}\{SW', SE, B, A\} \\ SE' \in C'_{i,j}, & n_x \cdot n_y \stackrel{\text{(3.25),(3.30)}}{<} 0 \end{cases} \quad (3.94)$$

- Se $u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 19)}}{<} 0$, transladar $C_{i+1,j}$ para $C'_{i+1,j}$, e $F_{i+\frac{1}{2},j}$ é dado por (3.93), sendo:

$$I = \begin{cases} SW' \in C'_{i+1,j}, & n_x \cdot n_y \stackrel{\text{(3.24),(3.26)}}{>} 0 \\ SE' \in C'_{i+1,j}, & n_x \cdot n_y \stackrel{\text{(3.25),(3.30)}}{<} 0, & a_{SE'} \stackrel{\text{(Fig 19)}}{=} \text{area}\{SW, SE', B, A\} \end{cases} \quad (3.95)$$

- Se $n_x \cdot n_y = 0$ (paralelo), e a reta r corta o retângulo de base $|u_{i+\frac{1}{2}} dt|$ centrado em C' , como em Fig 20 e Fig 21, então:

- Se $u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 20)}}{>} 0$, $F_{i+\frac{1}{2},j}$ é dado como em (3.93), sendo:

$$I = SW', \quad a_{SW'} \stackrel{\text{(3.71)}}{=} \begin{cases} |d_{SW'}| \cdot dy, & n_y = 0 \\ |d_{SW'}| \cdot dx, & n_x = 0 \end{cases} \quad (3.96)$$

- Se $u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 21)}}{<} 0$, $F_{i+\frac{1}{2},j}$ é dado como na fórmula anterior com $I = SW$

Agora, para uma célula não interfacial ($f_{i,j} = 0$ ou $f_{i,j} = 1$) ou sem normal $\hat{u}_{ni,j} = (n_{xi,j}, n_{yi,j}) \stackrel{\text{(Obs 3.2)}}{=} 0$, como em Fig 22 e Fig 23:

$$F_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} f_{i,j} u_{i+\frac{1}{2},j}, & u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 22)}}{>} 0 \\ f_{i+1,j} u_{i+\frac{1}{2},j}, & u_{i+\frac{1}{2},j} \stackrel{\text{(Fig 23)}}{<} 0 \end{cases} \quad (3.97)$$

Figura 16 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $r_{i,j} \cap \{SW', SE, NE, D\} = \emptyset$.

Figura 17 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $r_{i+1,j} \cap \{SW, SE', D, NW\} = \emptyset$.

Figura 20 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $n_{x_{i,j}} \cdot n_{y_{i,j}} = 0$.

Figura 21 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $n_{x_{i+1,j}} \cdot n_{y_{i+1,j}} = 0$.

Figura 22 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} > 0$, $f_{i,j} = 1$ ou $f_{i,j} = 0$, ou $n_{x i,j} = n_{y i,j} = 0$.

Figura 23 – Caso $u_{i+\frac{1}{2},j} < 0$, $f_{i+1,j} = 1$ ou $f_{i+1,j} = 0$, ou $n_{x i+1,j} = n_{y i+1,j} = 0$.

3.6 Inicialização da Fração de Volume

Na inicialização da fração de volume, a interface é vista como uma função implícita $\phi(x, y, 0) = 0$ (RIBERA *et al.*, 2015, sec. 3.6.1.1). Em um ponto (x, y) , o sinal de $\phi = \phi(x, y, 0)$, indicará se ele está dentro ou fora ($\phi \neq 0$), ou na interface ($\phi = 0$). Deste modo, ϕ é avaliada em cada célula ij sobre seus vértices $v_{i,j}^K$, $K \in \{SW, SE, NE, NW\}$. Os sinais obtidos em cada $v_{i,j}^K$, determinarão a configuração da interseção da interface (vazia ou não vazia) na célula.

Se uma interseção não vazia ocorrer numa célula ij , conforme Fig 26, como $\phi(NE) > 0$ e $\phi(SE) < 0$, então, assumindo-se regularidade para ϕ , existe $p_{i+\frac{1}{2},j}$, satisfazendo:

$$\phi(p_{i+\frac{1}{2},j}) = 0, \quad p_{i+\frac{1}{2},j} = (x_{i+\frac{1}{2},j}^p, y_{i+\frac{1}{2},j}^p), \quad (3.98)$$

e, admitindo-se que o tamanho das células seja suficientemente pequeno $p_{i+\frac{1}{2},j}$ será único. Para este caso, obtem-se a seguinte equação para λ :

$$\phi(SE + \lambda(SE - NE)) = 0, \quad \lambda \in [0, 1]. \quad (3.99)$$

Para resolver (3.99), ϕ é aproximada linearmente por $\phi_{i+\frac{1}{2},j}^*$ na aresta $\{NE, SE\}$ como (Fig 26):

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j}^*(p_\lambda^*) = \phi(SE) + \lambda(\phi(SE) - \phi(NE)), \quad (3.100)$$

$$p_\lambda^* = SE + \lambda(NE - SE). \quad (3.101)$$

e o ponto $p_{i+\frac{1}{2},j}$ (3.98) é aproximado por $p_{i+\frac{1}{2},j}^*$:

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j}^*(p_{i+\frac{1}{2},j}^*) = 0, \quad (3.102)$$

$$p_{i+\frac{1}{2},j} \approx p_{i+\frac{1}{2},j}^* = SE + \frac{-\phi(SE)}{\phi(NE) - \phi(SE)}(NE - SE). \quad (3.103)$$

Raciocínio análogo é empregado para a aresta $\{NW, SW\}$, obtendo-se (Fig 26) $\phi_{i-\frac{1}{2},j}^*$ e $p_{i-\frac{1}{2},j}^* \approx p_{i-\frac{1}{2},j}$, $\phi_{i-\frac{1}{2},j}^*(p_{i-\frac{1}{2},j}^*) = 0$.

Deste modo a fração de volume $f_{i,j}$ na célula em Fig 26 é aproximada por:

$$f_{i,j} \approx \frac{\text{area}\{SW, SE, p_{i+\frac{1}{2},j}^*, p_{i-\frac{1}{2},j}^*\}}{dx \cdot dy}. \quad (3.104)$$

Figura 24 – Configurações de intersecções consideradas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 25 – Configurações de intersecções (ambíguas) desconsideradas (a malha é refinada, caso ocorra).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Obs 3.11. Para melhorar a aproximação da fração (3.104), cada célula interfacial ($0 < f_{i,j} < 1$) é então subdividida em nsc^2 subcélulas, e para cada subcélula, o procedimento apresentado anteriormente é aplicado. Em princípio, 2^4 configurações de intersecção seriam possíveis para cada célula, porém 2 casos são desconsiderados (caso ocorram, a malha é refinada) como exibido em Fig 24 e Fig 25.

3.6.1 Inicialização Exata da Fração de Volume

Na inicialização "exata" da fração de volume, utilizam-se quadraturas de maior ordem (BORNIA *et al.*, 2011, fig. 2), (FRANCO, 2006, cap. 11) sobre a função implícita $\phi(x,y,0) = 0$. Por exemplo, suponha-se que para uma célula interfacial ($0 < f_{i,j} < 1$) de centro $C_{i,j} = (x_{i,j}, y_{i,j})$, a intersecção seja como Fig 27. Para a escolha de pontos $\mathcal{R}_{i,j-\frac{1}{2}}$

Figura 26 – Configuração de um tipo de interseção, sendo ϕ^* uma aproximação linear de ϕ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

numa quadratura sobre a aresta $\{SW, SE\}$:

$$\mathcal{R}_{i,j-\frac{1}{2}} = \{r_{1,j-\frac{1}{2}}, \dots, r_{N,j-\frac{1}{2}}\}, \quad r_{k,j-\frac{1}{2}} = \left(x_k, y_{i,j} - \frac{dy}{2}\right),$$

$$x_k \in \left[x_{i,j} - \frac{dx}{2}, x_{i,j} + \frac{dx}{2}\right], \quad (3.105)$$

seja $\mathcal{R}_{i,j+\frac{1}{2}}$ o conjunto de pontos sobre a aresta $\{NW, NE\}$, $r_{k,j+\frac{1}{2}} = \left(x_k, y_{i,j} + \frac{dy}{2}\right)$.

Então, para cada $k \in \{1, \dots, N\}$, deve-se resolver a seguinte equação para $\lambda \in [0, 1]$:

$$p_{k,\lambda} = r_{k,j-\frac{1}{2}} + \lambda(r_{k,j+\frac{1}{2}} - r_{k,j-\frac{1}{2}}), \quad p_{k,\lambda} = (x_k, y_{k,\lambda}), \quad (3.106)$$

$$\phi(p_{k,\lambda}) = 0, \quad (3.107)$$

admitindo-se, tal como em (3.99), que a resolução da célula seja suficiente para a unicidade da solução de (3.107). Uma maneira aproximada de resolver (3.107), poderia ser a mesma em (3.100). É possível ainda escolher outras, como o *Método de Newton*.

Figura 27 – Nós para uma quadratura de 5 pontos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Se os $p_{k,\lambda}$ são conhecidos, procede-se a alguma fórmula de quadratura (Fig 27):

$$\int_{x_{i,j}-\frac{dx}{2}}^{x_{i,j}+\frac{dx}{2}} y(u) du \approx \sum_{k=1}^N w_k y_{k,\lambda} \Rightarrow \quad (3.108)$$

$$f_{i,j} \approx \frac{1}{dx \cdot dy} \left(-dx \cdot \left(y_{i,j} - \frac{dy}{2} \right) + \sum_{k=1}^N w_k y_{k,\lambda} \right). \quad (3.109)$$

Em alguns casos não é necessário resolver (3.107), por exemplo em uma circunferência de raio R centrada em (x_c, y_c) , é possível encontrar diretamente os $p_{k,\lambda}$, mediante as fórmulas:

$$x(y) = x_c \pm \sqrt{R^2 - (y - y_c)^2}, \quad (3.110)$$

$$y(x) = y_c \pm \sqrt{R^2 - (x - x_c)^2}. \quad (3.111)$$

Para este trabalho, foi empregada a inicialização aproximada da fração de volume, pela sua maior simplicidade (3.100)-(3.104). Ainda assim, foi considerada uma inicialização exata para a circunferência (a função *quadgk* do *Octave* que utiliza a quadratura de *Gauss-Kronrod*), pois que a segunda ordem nas alturas (3.14) só é garantida se as frações

são calculadas exatamente e, assim se espera segunda ordem de convergência para o vetor normal (3.12) e a curvatura (3.13). A comparação entre as duas inicializações para uma circunferência é discutida em Sec 6.1 e Sec 6.2.

EQUAÇÕES PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS, INCOMPRESSÍVEIS, E COM VISCOELASTICIDADE NO HIG-FLOW

As equações de Navier-Stokes modelam a dinâmica do fluido contínuo, e seu uso é consagrado em muitas aplicações. Elas assumem diversas formas, dependendo do problema considerado. Ainda não se sabe se existe solução para casos de domínios e condições de contorno gerais, sendo este um problema em aberto.

Mesmo assim, uma série de métodos numéricos estão disponíveis para "resolvê-las", o que também não é nada simples, devido a questões de estabilidade ou convergência. Para tanto, é fundamental discretizar o domínio, ou seja, gerar uma malha, o que requer uma estrutura de dados eficiente para armazenamento e acesso aos seus elementos. O posicionamento das variáveis, e as interpolações na malha, podem afetar substancialmente o desempenho dos métodos numéricos e a factibilidade dos resultados, sendo portanto uma questão crítica.

Os sistemas HIG-FLOW/HIG-TREE empregam a ideia de controle adaptativo de malha cartesiana, possibilitando-se zonas de refinamento local. Este tratamento é útil ante instabilidades, ou alguma geometria complexa, permitindo altas resoluções localizadas, barateando ou mesmo tornando viável (computacionalmente) determinados problemas.

Neste capítulo, será feita uma breve incursão sobre as equações de Navier-Stokes. Depois serão discutidos os sistemas HIG-TREE e HIG-FLOW, utilizados para a realização dos testes e verificação dos resultados deste trabalho.

4.1 Modelagem

Def 4.1. (*Hipótese do Fluido Contínuo*) Um fluido contínuo $\Omega(t) \subset \mathfrak{R}^3$ é idealizado como um conjunto de pontos materiais distribuídos continuamente ao longo do domínio $\Omega(t)$. O conjunto de pontos materiais de um fluido são ditos partículas. Há duas formas clássicas de descrever o fluido contínuo:

- A *descrição lagrangeana ou referencial* (MALVERN, 1969, p. 138), que supõe a existência de uma função $\phi_t = \phi$, mapeando cada partícula $P \in \Omega(0)$ da sua posição inicial (ou de referência), à sua posição atual $p \in \Omega(t)$, $p = \phi_t(P) = \phi(P, t)$, e reciprocamente, $P = \phi_t^{-1}(p) = \phi^{-1}(p, t)$ (CHORIN; MARSDEN, 2013, p. 7).
- A *descrição euleriana ou espacial* (MALVERN, 1969, p. 138), que fixa a atenção sobre uma região do espaço, e não sobre o histórico de um conjunto de partículas, como na descrição lagrangeana.

A relação entre a formulação euleriana e lagrangeana é: para cada ponto $x \in \Omega(t) = \Omega$, existe uma única partícula fluida p ocupando-o, $x = p = \phi(P, t)$. Logo, para uma função escalar $f : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}$, $f(x, t) = f(\phi(P, t), t)$, isto é, a função avaliada na partícula assume o valor da função do ponto que ela (e apenas ela) ocupa.

Def 4.2. (*Massa, Momentos Linear e Angular de um contínuo*) Seja $\Omega(t) = \Omega \subset \mathfrak{R}^3$ um fluido e $V : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}^3$ seu campo de velocidade e $\rho : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}$ seu campo de densidade. A massa de um conjunto $W(t) = W \subset \Omega$ de partículas materiais $M(t)$ em $W(t)$ é definida por:

$$M(t) = \int_{W(t)} \rho dW. \quad (4.1)$$

O momento linear $L(t) = L$ e o momento angular $H(t)$ de W em t são definidos por:

$$L(t) = \int_{W(t)} \rho V dW, \quad (4.2)$$

$$H(t) = \int_{W(t)} r \times \rho V dW. \quad (4.3)$$

O vetor r acima é a posição. Todas as funções envolvidas serão supostas diferenciáveis pelo menos até a ordem mais conveniente.

Def 4.3. (*Equações da Massa e dos Momentos Linear e Angular*) A equação da massa de um contínuo (MALVERN, 1969, p. 208, 209), (CHORIN; MARSDEN, 2013, p. 10) é definida por:

$$\frac{d}{dt}M(t) = \frac{d}{dt} \int_{W(t)} \rho dW \stackrel{\text{(Obs 4.1)}}{=} \int_{W(t)} \frac{D}{Dt} \rho + \rho \operatorname{div}(V) dW = Q(t). \quad (4.4)$$

Se $Q(t) = 0$ a massa é dita conservada, o que será considerado neste trabalho.

As equações dos momentos linear e angular, são postuladas como uma extensão para meios contínuos contínuos da 2ª Lei de Newton (MALVERN, 1969, p. 213), dadas por (MALVERN, 1969, p. 214, 215), (CHORIN; MARSDEN, 2013, p. 7, 32):

$$\frac{d}{dt} \int_{W(t)} \rho V dW \stackrel{\text{(Obs 4.1)}}{=} \int_{W(t)} \frac{D}{Dt} (\rho V) + (\rho V) \operatorname{div}(V) dW = F(t), \quad (4.5)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{W(t)} r \times \rho V dW \stackrel{\text{(Obs 4.1)}}{=} \int_{W(t)} \frac{D}{Dt} (r \times \rho V) + (r \times \rho V) \operatorname{div}(V) dW = T(t). \quad (4.6)$$

Sendo $F(t) = F_{surf} + F_{vol}$ a força resultante (externa, assumindo que a interna seja nula) exercida sobre as partículas fluidas em $W(t)$, decomposta como a soma entre a resultante das forças (externas), por unidade de volume f_{vol} , $F_{vol} = F_{vol}(t)$ e a resultante das forças (externas), por unidade de área f_{surf} , $F_{surf} = F_{surf}(t)$ (MALVERN, 1969, p. 70). $T(t) = T_{surf} + T_{vol}$ é o momento resultante entre f_{vol} e f_{surf} :

$$F_{vol}(t) = \int_{W(t)} f_{vol} dW, \quad T_{vol}(t) = \int_{W(t)} r \times f_{vol} dW, \quad (4.7)$$

$$F_{surf}(t) = \int_{\partial W(t)} f_{surf} dS, \quad T_{surf}(t) = \int_{\partial W(t)} r \times f_{surf} dS. \quad (4.8)$$

Obs 4.1. Este é o Teorema do Transporte de Reynolds (CHORIN; MARSDEN, 2013, p. 10), (MALVERN, 1969, p. 210) e $\frac{D}{Dt}$ é a derivada material.

Def 4.4. (*Fluido Incompressível*) Um fluido é dito incompressível se a seguinte condição for satisfeita ([CHORIN; MARSDEN, 2013](#), p. 10, 11):

$$\frac{d}{dt} \int_{W(t)} dW \stackrel{(\text{Obs 4.1})}{=} \int_{W(t)} \text{div}(V) dW = 0 \Leftrightarrow \quad (4.9)$$

$$\text{div}(V) = 0. \quad (4.10)$$

e o volume será conservado. Se $Q(t) = 0$ em (4.4), então a condição de incompressibilidade acarreta:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0. \quad (4.11)$$

Reciprocamente, se $Q(t) = 0$ e $\frac{D\rho}{Dt} = 0$, tem-se $\text{div}(V) = 0$, pois $\rho > 0$.

Def 4.5. (*Volume Espacial*) Seja $\Omega(t) = \Omega \subset \mathbb{R}^3$ um fluido e $\omega \subset \Omega$ uma região fixada. Em t , ω é ocupada por um certo conjunto de partículas. Pela descrição lagrangeana (Def 4.1), as partículas $p \in \omega$ são as mesmas que em $t = 0$ formavam uma região $W(0)$ e que em t formarão a região $W(t) = \omega = \phi_t(W(0))$, conforme Fig 28. A região fixada ω é dita o volume espacial, que em t coincide com o *volume material* $W(t)$ ([MALVERN, 1969](#), p. 210).

Figura 28 – Mapeamento de uma região W (descrição lagrangeana).

Fonte: [Chorin e Marsden \(2013\)](#).

Nas considerações subsequentes, todas as equações serão expressas em coordenadas cartesianas. Será omitido o uso de super-índices (como τ^e ou V^e).

Neste texto, f_{surf} em (4.7) e (4.8) será decomposta como:

$$f_{surf} = f_{surf}(r, n, t) = \sigma \cdot n = -pI \cdot n + \tau_p \cdot n + \mu_s(\nabla V + [\nabla V]^t) \cdot n. \quad (4.12)$$

sendo p a pressão, τ_p a parcela que modela a viscoelasticidade e $\mu_s(\nabla V + [\nabla V]^t)$ o termo newtoniano. Para este trabalho, o modelo adotado para τ_p é o Oldroyd-B.

Considere-se um fluido $\Omega(t) = \Omega$ incompressível (Def 4.4) e um volume espacial (Def 4.5) $\omega = W(t) = \phi_t(W(0))$. Se $Q(t) = 0$, então a equação da massa (Def 4.3) acarreta (4.11) e a equação do momento linear (4.5), juntamente com as relações (4.7), (4.8) e (4.12) fica:

$$\int_{\omega} \rho \frac{DV}{Dt} d\omega = \int_{\omega} f_{vol} d\omega + \int_{\partial\omega} \sigma \cdot ndS. \quad (4.13)$$

Aplicando-se o Teorema da Divergência à integral de superfície acima e sendo ω arbitrário obtem-se (MALVERN, 1969, p. 214):

$$\int_{\omega} \rho \frac{DV}{Dt} d\omega = \int_{\omega} f_{vol} d\omega + \int_{\omega} \text{div}(\sigma) d\omega \Rightarrow \quad (4.14)$$

$$\rho \frac{DV}{Dt} - f_{vol} - \text{div}(\sigma) = 0. \quad (4.15)$$

Agora será mostrado a simetria do tensor de Cauchy σ (Def B.17). A equação do momento angular (4.5) com a condição de incompressibilidade (4.11), mais as relações (4.7), (4.8) e (4.12) fica:

$$\begin{aligned} \int_{\omega} \frac{D}{Dt} (r \times \rho V) dW &= \int_{\omega} r \times \rho \frac{DV}{Dt} + \rho V \times V = \\ &= \int_{\omega} r \times f_{vol} d\omega + \int_{\partial\omega} r \times \sigma \cdot ndS \Rightarrow \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\int_{\omega} r \times \rho \frac{DV}{Dt} = \int_{\omega} r \times f_{vol} d\omega + \int_{\partial\omega} r \times \sigma \cdot ndS. \quad (4.17)$$

Aplicando-se o Teorema da Divergência à integral de superfície (σ_j é a j -ésima coluna

de σ) acima e sendo ω arbitrário tem-se (MALVERN, 1969, p. 216):

$$\begin{aligned} \int_{\omega} r \times \rho \frac{DV}{Dt} d\omega &= \int_{\omega} r \times f_{vol} d\omega + \int_{\omega} r \times f_{vol} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} (r \times \sigma_j) d\omega = \\ &= \int_{\omega} r \times f_{vol} + \left(\sum_j r \times \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_j + \frac{\partial r}{\partial x_j} \times \sigma_j \right) d\omega = \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\omega} r \times (f_{vol} + \text{div}(\sigma)) + \sum_j e_j \times \sigma_j d\omega \Rightarrow \\ &= \int_{\omega} \sum_j e_j \times \sigma_j = \int_{\omega} r \times \left(\rho \frac{DV}{Dt} - f_{vol} - \text{div}(\sigma) \right) d\omega \stackrel{(4.15)}{=} 0 \Rightarrow \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\sum_j e_j \times \sigma_j = 0 \Rightarrow \sigma_{ij} = \sigma_{ji}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}. \quad (4.20)$$

Portanto a matriz do tensor de Cauchy em coordenadas cartesianas $\sigma \stackrel{(4.12)}{=} \tau_p + \mu_s(\nabla V + \nabla V) - pI$ é simétrica (logo τ_p é simétrica).

Com as relações (4.12) e (4.15), a condição de incompressibilidade (Def 4.4) e mais (4.20), obtém-se o seguinte modelo diferencial de fluido homogêneo, em coordenadas cartesianas:

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \sum_j u_j \partial_{x_j} V + \text{grad}(p) - \text{div}(\mu_s(\nabla V + [\nabla V]^t) + \tau_p) - f_{vol} = 0, \quad (4.21)$$

$$\text{div}(V) = 0, \quad \nabla V_{ij} \stackrel{(\text{Obs B.1})}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}, \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \tau_p}{\partial t} + (V \cdot \nabla) \tau_p - \left(\nabla V \tau_p + \tau_p [\nabla V]^t \right) = \frac{1}{\lambda} \left(\mu_p(\nabla V + [\nabla V]^t) - \tau_p \right). \quad (4.23)$$

4.2 Escoamento Bifásico

Neste trabalho, um único conjunto de equações é resolvido (RIBERA *et al.*, 2015, p. 29), (LAGES, 2016, p. 29). Assim, as equações do escoamento bifásico são praticamente as mesmas para o fluido homogêneo, apenas com a adição da tensão superficial (RIBERA *et al.*, 2015, sec 2.2), que neste trabalho é tratada pela técnica CSF (*Continuum Surface Force*), ou seja, ela é incorporada como uma força por unidade de volume: F_{CSF} (RIBERA *et al.*, 2015, sec. 3.5). A densidade e a viscosidade também variam na interface. Com o emprego da técnica VOF (Sec 3.1), a tensão superficial F_{CSF}

é modelada (RIBERA *et al.*, 2015, p. 32), (FIGUEIREDO, 2016, p. 74) por:

$$F_{CSF} = \gamma \kappa \nabla f, \quad (4.24)$$

sendo γ o coeficiente de tensão superficial, f a fração de volume (Def 3.1 e Fig 5) e κ a curvatura (3.7).

As equações para o escoamento bifásico (bidimensional, $DIM = 2$), incompressível, Oldroyd-B, com as hipóteses de não mudança de fase e da continuidade do fluxo de massa (Sec 3.1), adotadas para este trabalho são:

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \sum_j u_j \partial_{x_j} V = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu_s (\nabla V + [\nabla V]^t) + \tau_p) - \rho |g| \hat{g} - \gamma \kappa \nabla f = 0, \quad (4.25)$$

$$\nabla \cdot V = 0, \quad \nabla V_{ij} \stackrel{\text{(Obs B.1)}}{=} \partial_{x_j} u_i \quad [V]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j, \quad i, j \in \{1, \dots, DIM\}, \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial \tau_p}{\partial t} + (V \cdot \nabla) \tau_p - \left(\nabla V \tau_p + \tau_p [\nabla V]^t \right) = \frac{1}{\lambda} \left(\mu_p (\nabla V + [\nabla V]^t) - \tau_p \right), \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (fV) = 0. \quad (4.28)$$

4.3 Condições de Contorno e Condições Iniciais

Para resolver as equações (4.25)-(4.28), são necessárias condições auxiliares: *condições de contorno* e *condições iniciais*. As condições adotadas para este trabalho são (KALLAND, 2008, p. 30,31), (SIQUIERI, 2002, p. 9,13):

- Condições iniciais (exceto no contorno) nulas para o tensor não-newtoniano (τ_p), pressão (p), e velocidade (V).

As condições de contorno consideradas para V e p (V_t é a componente tangencial a borda do vetor velocidade e V_n a componente normal) são:

- Entrada de Fluido (*Inflow, Inlet, Injetor*):

$$V_t = 0, \quad (4.29)$$

$$V_n = V_{inflow}, \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0. \quad (4.31)$$

- Parede ou Fronteira Sólida sem Escorregamento:

$$V_n = 0, \quad (4.32)$$

$$V_t = V_{parede}, \quad (4.33)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0. \quad (4.34)$$

- Saída de Fluido (*Outflow, Outlet, Ejetor*):

$$\frac{\partial V_t}{\partial n} = 0, \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial V_n}{\partial n} = 0, \quad (4.36)$$

$$p = 0. \quad (4.37)$$

- Simetria (*Free Slip*)

$$V_n = 0, \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial V_t}{\partial n} = 0 \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad (4.40)$$

Para o tensor não-newtoniano τ_p , não são impostas condições de contorno. Como foram analisados apenas problemas envolvendo bolhas suficientemente distantes da fronteira do domínio, não são impostas condições de contorno para a fração de volume f .

4.4 Adimensionalização

Um procedimento recorrente, é adimensionalizar as equações (4.25)-(4.28), porquanto reduz o número de parâmetros, possibilitando analisar mais claramente o peso de cada termo nessas equações (se predomina a inércia ou a viscosidade, por exemplo).

Obs 4.2. Neste trabalho, quando houver distinção entre variáveis dimensionais e adimensionais, as variáveis dimensionais serão escritas com *.

Definindo-se as escalas:

- L^* para o comprimento.
- U^* para a velocidade.
- $T^* = \frac{L^*}{U^*}$ para o tempo.
- ρ_{ref}^* e μ_{ref}^* para densidade e viscosidade respectivamente.

As variáveis adimensionais e dimensionais (*) relacionam-se por:

$$\begin{aligned} x^* &= L^* x, \quad u^* = U^* u, \quad t^* = \frac{L^*}{U^*} t, \quad \nabla^* = \frac{1}{L^*} \nabla, \quad p^* = \rho_{ref}^* U^{*2} p \\ S^* &= \rho_{ref}^* U^{*2} S, \quad \tau_p^* = \rho_{ref}^* U^{*2} \tau_p, \quad \mu^* = \mu_{ref}^* \mu, \quad \rho^* = \rho_{ref}^* \rho, \quad \kappa^* = \frac{\kappa}{L^*}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

O tensor não-newtoniano τ_p^* é escrito como:

$$\tau_p^* = 2\mu_p^* D^* + S^*, \quad D^* = \frac{1}{2}(\nabla V^* + [\nabla V^*]^t). \quad (4.42)$$

substituindo-se (4.41) e (4.42) em (4.25)-(4.28), obtém-se a a versão adimensionalizada de (4.25)-(4.28):

$$\frac{\partial V}{\partial t} + (V \cdot \nabla)V = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{Fr^2} \hat{g} + \frac{1}{\rho Re} \nabla \cdot (2\mu D) + \frac{1}{\rho} \nabla S + \frac{1}{\rho We} \kappa \nabla f, \quad (4.43)$$

$$\nabla \cdot V = 0, \quad \nabla V_{ij} \stackrel{(\text{Obs } B.1)}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j, \quad i, j \in \{1, \dots, DIM\}, \quad (4.44)$$

$$\tau_p = \frac{2(1-\beta)}{Re} \mu D + S, \quad D = \frac{1}{2} (\nabla V + [\nabla V]^t), \quad (4.45)$$

$$\frac{\partial \tau_p}{\partial t} + (V \cdot \nabla) \tau_p - \left(\nabla V \tau_p + \tau_p [\nabla V]^t \right) = \frac{1}{De} \left(2\mu \frac{1-\beta}{Re} D - \tau_p \right), \quad (4.46)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (fV) = 0, \quad (4.47)$$

$$Re = \frac{\rho_{ref}^* U^* L^*}{\mu_{ref}^*}, \quad We = \frac{\rho_{ref}^* U^{*2} L^*}{\sigma^*}, \quad Fr = \frac{U^*}{(|g^*| L^*)^{\frac{1}{2}}}, \quad De = \frac{U^* \lambda^*}{L^*}, \quad (4.48)$$

$$\rho = \frac{\rho^*}{\rho_{ref}^*}, \quad \mu = \frac{\mu^*}{\mu_{ref}^*}, \quad \mu^* = \mu_s^* + \mu_p^*, \quad \beta = \frac{\mu_s^*}{\mu^*}, \quad (4.49)$$

sendo Re o número de *Reynolds*, We o número de *Weber*, Fr o número de *Froude* e De o número de *Deborah*.

4.4.1 Outros Adimensionais

Dependendo do problema, outros números adimensionais podem ser considerados. Devido a variedade de nomenclaturas encontradas nos textos consultados, serão apresentados alguns desses números.

O número de *Capilaridade* (Ca) (DREYER, 2007, p. 9), (FIGUEIREDO, 2016, p. 115), (LAGES, 2016, p. 58):

$$Ca = \frac{\mu_{ref}^* U^*}{\sigma^*}, \quad Re \stackrel{(4.48)}{=} \frac{We}{Ca}. \quad (4.50)$$

O número de *Laplace* (La) (LAGES, 2016, p. 58), (FIGUEIREDO, 2016, p. 101) ou *Suratman* (Su) (DREYER, 2007, p. 10)

$$La = Su = \frac{\sigma^* \rho^* L^*}{\mu_{ref}^{*2}} \stackrel{(4.48)}{=} \frac{Re^2}{We} \stackrel{(4.50)}{=} \frac{We}{Ca^2}. \quad (4.51)$$

O número de *Ohnesorge* (Oh) (FIGUEIREDO, 2016, p. 101), (DREYER, 2007, p. 10)

$$Oh = \frac{\mu_{ref}^*}{(\rho_{ref}^* \sigma^* L^*)^{\frac{1}{2}}} \stackrel{(4.48)}{=} \frac{(We)^{\frac{1}{2}}}{Re} \stackrel{(4.50)}{=} \frac{Ca}{(We)^{\frac{1}{2}}} \stackrel{(4.51)}{=} \frac{1}{La^{\frac{1}{2}}} = \frac{1}{Su^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.52)$$

O número de *Bond* (Bo) (DREYER, 2007, p. 9) ou *Eötvös* (Eo) (LAGES, 2016, p. 63):

$$Bo = \frac{\rho_{ref}^* |g^*| L^{*2}}{\sigma^*} \stackrel{(4.48)}{=} \frac{We}{Fr^2}. \quad (4.53)$$

Para certas escolhas na escala da velocidade (U^*), alguns adimensionais, reduzem-se à unidade, assim:

- Se $U^* = (|g^*| L^*)^{\frac{1}{2}}$, então:

$$Fr \stackrel{(4.48)}{=} 1 \stackrel{(4.53)}{\Rightarrow} We = Bo. \quad (4.54)$$

- Se $U^* = \left(\frac{\sigma^*}{\rho_{ref}^* L^*} \right)^{\frac{1}{2}}$, então:

$$We \stackrel{(4.48)}{=} 1 \stackrel{(4.52)}{\Rightarrow} Oh = \frac{1}{Re} = Ca = \frac{1}{La^{\frac{1}{2}}} = \frac{1}{Su^{\frac{1}{2}}}, \quad Fr \stackrel{(4.53)}{=} \frac{1}{Bo^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.55)$$

- Se $U^* = \frac{\sigma^*}{\mu_{ref}^*}$, então:

$$Ca \stackrel{(4.50)}{=} 1 \Rightarrow We = Re \stackrel{(4.52)}{=} La = Su = \frac{1}{Oh^2}. \quad (4.56)$$

4.5 Os sistemas HIG-FLOW e HIG-TREE

O HIG-FLOW (SOUSA *et al.*, 2019) é um software em Linguagem C, ainda em desenvolvimento no ICMC, reunindo uma série de métodos para resolver numericamente Navier-Stokes Incompressível (adimensional ou dimensional), com a Técnica das Diferenças Finitas (LEVEQUE, 2007). Em princípio (quando objetos geométricos como curvas e superfícies são desconsiderados), para domínios formados por blocos cartesianos n –dimensionais (Fig 29), sob condições de contorno *Neumann* ou *Dirichlet* (Sec 4.3), atualmente com os Métodos de Projeção Incremental e Não-Incremental para desacoplar a pressão da velocidade (SOUSA; OISHI; BUSCAGLIA, 2015, sec. 2.2, 2.3), com a já consagrada metodologia MAC (HARLOW; WELCH, 1965), segundo a qual as incógnitas de pressão e velocidade são posicionadas, respectivamente nos centros e nas facetas das células.

Figura 29 – Exemplo de domínio complexo formado por blocos cartesianos tridimensionais.

Fonte: Sousa *et al.* (2019).

Estratégias de Paralelização também são empregadas através da biblioteca PETSc

(*Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*), em desenvolvimento desde a década de 1990, e atualmente bastante popular para o desenvolvimento de códigos de processamento paralelo, especialmente códigos CFD. Esta biblioteca contém um conjunto de funções implementando os métodos mais conhecidos para representação de matrizes, vetores e dados em paralelo, solução de sistemas lineares com pré-condicionamento, solução sistemas lineares e não-lineares, equações diferenciais ordinárias, etc.

(a) Refinamento adaptativo do problema do degrau.

(b) Linhas de corrente para o problema do degrau, $Re = 100$.

Figura 30 – Problema do degrau simulado no HIG-FLOW

Fonte: Elaborada pelo autor.

A estrutura de dados responsável pela malha do domínio é a HIG-TREE (*Hierarchical Grid*), ilustrada em Fig 31, havendo um conjunto de módulos no sistema HIG-TREE para:

- Acesso aos elementos desta estrutura
- Resolvedores de sistemas lineares e não lineares
- Particionamento de domínios e subdomínios

- Aproximações e interpolações

Cada bloco do domínio (Fig 29) é discretizado pelo sistema HIG-TREE, possibilitando-se refinamentos adaptativos de acordo com a necessidade (Fig 30). O domínio é particionado pela biblioteca ZOLTAN-TRILINOS, que permite uma boa distribuição de carga entre os processos durante a execução. Este módulo também é responsável pelo armazenamento das propriedades nas células e facetas.

Finalmente, o módulo de aproximações e interpolações para as propriedades nas células e facetas, pelo *Método dos Mínimos Quadrados Móveis* (LAGES, 2016, p. 38) a ser descrito a seguir.

4.6 Stencil no HIG-FLOW

Considere-se o estêncil (Fig 32) de cinco pontos de diferenças finitas para a seguinte equação de Poisson, num domínio retangular $\Omega \in \mathbb{R}^2$, com condições de contorno adequadas (SOUSA *et al.*, 2019, sec. 2.2):

$$\nabla^2 u = f. \quad (4.57)$$

Aplicando-se o método de diferenças finitas central de ordem 2 para aproximar $\nabla^2 u_C$:

$$\frac{U_L - 2U_C + U_R}{dx^2} + \frac{U_T - 2U_C + U_B}{dy^2} = f_C. \quad (4.58)$$

Numa malha tão geral quanto uma *higtrees*, os pontos para o estêncil na equação (4.58) não necessariamente estarão na malha (nó virtual), tal qual ocorre em Fig 32. Esta dificuldade, exige, naturalmente, um procedimento genérico para ser superada. Em princípio, a estratégia é aproximar U_B e U_L (nós virtuais) por valores de U em nós vizinhos:

$$U_L = \sum_{k \in I_L} w_k^L U_k, \quad U_B = \sum_{k \in I_B} w_k^B U_k, \quad (4.59)$$

sendo $I_L = \{i_1, \dots, i_{N_L}\}$ e $I_B = \{i_1, \dots, i_{N_B}\}$ os identificadores dos pontos (nós físicos) vizinhos *presentes na malha*. Para aproximações deste tipo, o Método dos Mínimos Quadrados Móveis ou Ponderados é empregado.

(a) Células de uma malha

(b) Estrutura de dados HIG-TREE.

Figura 31 – As figuras acima ilustram a ideia de uma *higtree*: uma árvore na qual as folhas são as células do domínio (em vários níveis de refinamento) discretizado.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.6.1 Método dos Mínimos Quadrados Móveis

Seja $u : V \subset (\mathbb{R}^n, <, >) \rightarrow (\mathbb{R}, <, >)$, $<, >$, usuais, $\mathcal{P} = \{p_1, \dots, p_k\}$ um conjunto de funções linearmente independentes e suficientemente regulares. Admita-se u

Figura 32 – Estêncil de diferenças finitas sobre U_C . Os pontos em U_L e U_R estão na malha enquanto U_B e U_T não estão. Para obter os valores de U_B e U_L uma interpolação (sobre os pontos da malha vizinhos) vizinhança é feita.

Fonte: Elaborada pelo autor.

conhecida em $\{x_1, \dots, x_m\}$. Deseja-se aproximar $u(x)$ por $U(x)$ em um ponto x :

$$u(x) \approx U(x) = \sum_{i=1}^k c_j p_j(x). \quad (4.60)$$

Seja:

$$E(c) = E = \Lambda(U - u), \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m), \quad (4.61)$$

$$E_i = \lambda_i(u(x_i) - U(x_i)) = \lambda_i(u_i - U_i), \quad (4.62)$$

$$\lambda_i = \frac{1}{\|x - x_i\|_2 + \varepsilon}, \quad i \in \{1, \dots, m\}. \quad (4.63)$$

A presença dos pesos λ_i justifica o termo móveis ou ponderados, e eles introduzem uma dependência entre os coeficientes c_j a serem determinados (4.60), e o ponto x , valorizando os pontos mais próximos, em detrimento daqueles mais distantes.

Com (4.60), a equação (4.61) é escrita matricialmente:

$$E = \Lambda \cdot \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix} - \Lambda \cdot \begin{bmatrix} p_1(x_1) & p_2(x_1) & p_3(x_1) & \dots & p_k(x_1) \\ p_1(x_2) & p_2(x_2) & p_3(x_2) & \dots & p_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ p_1(x_m) & p_2(x_m) & p_3(x_m) & \dots & p_k(x_m) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} \quad (4.64)$$

ou mais resumidamente:

$$E = b - Mc, \quad M = \Lambda P, \quad b = \Lambda u. \quad (4.65)$$

O vetor c é determinado minimizando-se $\langle E(c), E(c) \rangle$, através do *Método QR*, obtendo-se:

$$Mc = b, \quad M = Q \cdot \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = [Q_M \quad Q_\perp] \cdot \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.66)$$

$$Q_M^t M = R, \quad Q_\perp^t M = 0. \quad (4.67)$$

Assim:

$$\begin{aligned} \langle E(c), E(c) \rangle &= \|Mc - b\|_2^2 = \|Q^t(Mc - b)\|_2^2 = \\ &= \left\| \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} c - \begin{bmatrix} Q_M^t \\ Q_\perp^t \end{bmatrix} b \right\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} Rc - Q_M^t b \\ Q_\perp^t b \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \\ &= \|Rc - Q_M^t b\|_2^2 + \|Q_\perp^t b\|_2^2. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Assim, o vetor de c , que minimiza (4.68) é:

$$c = R^{-1} Q_M^t b. \quad (4.69)$$

que substituído em (4.60), fornece a aproximação desejada.

DISCRETIZAÇÕES E MÉTODOS NUMÉRICOS NO HIG-FLOW

Neste capítulo, consideram-se os métodos numéricos para resolver (4.43)-(4.49), observando-se as adaptações e notações apropriadas para o sistema HIG-FLOW. Devido a natureza não matricial de uma higtree, uma reformulação da notação tradicional (índices matriciais) é necessária para resolver estas equações, sendo assim, as metodologias numéricas e identificação dos pontos do domínio são expressas em termos dos centros das células e suas facetas. Ainda, é discutido o tratamento das descontinuidades na interface, exibindo-se ao final do capítulo os algoritmos contendo as técnicas adotadas para este trabalho.

5.1 Posicionamento das Propriedades nas Células

Para o posicionamento das propriedades em (4.43)-(4.49), foi considera-se a metodologia MAC (*Marker and Cell*) (HARLOW; WELCH, 1965), (FIGUEIREDO, 2016, p. 58), (RIBERA *et al.*, 2015, p. 9, 10), (LAGES, 2016, p. 35) de diferenças finitas centradas cujas propriedades, digam-se primárias, da velocidade são posicionadas nas

facetas das células e as de pressão nos centros das células. As demais:

$$\phi = \begin{cases} S \stackrel{(4.45)}{=} \{S^{xx}, S^{xy}, S^{yy}\}, \\ \rho, \mu, \\ f \text{ (Def 3.1)}, \\ \kappa, \hat{u}_n \text{ (3.7)}, \\ d \text{ (3.19)}, \\ F_{CSF} \text{ (4.24)}, \end{cases} \quad (5.1)$$

também são posicionadas nos centros das células.

Numa malha geral como a higtree (Fig 31), não é mais possível a maneira usual (matricial) de identificar por índices os pontos (i, j) , da mesma forma os pontos a esquerda $(i - 1, j)$, a direita $(i + 1, j)$, ao norte $(i, j + 1)$ ao sul $(i, j - 1)$. Tendo em vista esta ressalva, os identificadores dos nós presentes na malha se tornam:

$$c(x_c), f_{dim,r}(x_{f_{dim,r}}), f_{dim,l}(x_{f_{dim,l}}), \quad (5.3)$$

para o centro de uma célula e o centro de uma faceta (ortogonal a dimensão dim , esquerda ou direita) respectivamente.

Para pontos vizinhos ao centro c (não necessariamente nós da malha) identificam-se, por exemplo, a esquerda:

$$(c, l, dim) = x_c - \alpha dx_{dim} e_{dim}, \quad (5.4)$$

ou a direita:

$$(c, r, dim) = x_c + \alpha dx_{dim} e_{dim}, \quad (5.5)$$

para uma dada dimensão $dim \in \{1, \dots, DIM\}$, com um certo passo α conforme Fig 33. Para o cálculo das propriedades nesses pontos, a função *compute-value-at-point* está disponível, retornando diretamente o valor da propriedade no ponto caso seja um nó, ou um valor aproximado através do Método dos Mínimos Quadrados Móveis (Sec 4.6.1) caso não seja (virtual). Tal procedimento, evidentemente trata, em particular, o caso de malhas matriciais.

Figura 33 – Célula computacional (bidimensional) de centro C , e facetas f , sendo os centros das células (virtuais ou físicas) vizinhas expressos em (5.2).

Fonte: Elaborada pelo autor.

$$\begin{aligned}
 C_{r,1} &= f_{0,r} - 0.5dx_0e_0 + dx_1e_1 = C + dx_1e_1 \\
 C_{l,1} &= f_{0,r} - 0.5dx_0e_0 - dx_1e_1 = C - dx_1e_1 \\
 C_{r,0} &= f_{0,r} + 0.5dx_0e_0 - dx_0e_0 = C + dx_0e_0 \\
 C_{l,0} &= f_{0,l} - 0.5dx_0e_0 - dx_0e_0 = C - dx_0e_0 \\
 C_{r,1,r,0} &= f_{0,r} + 0.5dx_0e_0 + dx_1e_1 = C + dx_0e_0 + dx_1e_1
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

5.2 Escoamento Bifásico: Discretizações

Nesta seção e na seguinte são apresentadas as metodologias para aproximar as propriedades, e as discretizações apropriadas para tratar as dificuldades e particularidades do escoamento bifásico, mediante o método VOF, tendo em vista, outrossim, as adaptações para uma hightree. Os procedimentos adotados, baseiam-se naqueles encontrados na literatura, sendo as referências citadas oportunamente.

Na equações, a notação adequa-se ao sistema HIG-FLOW, identificando-se centros e facetas de células, diferindo-se da notação usual para malhas matriciais

5.2.1 Viscosidade e Densidade

As propriedades nos centros das células $\phi \stackrel{(5.1)}{=} \{\rho, \mu\}$ são aproximadas para cada instante t , tendo em vista a fração de volume f como (RIBERA *et al.*, 2015, p. 30):

$$\phi = f\phi_1 + (1 - f)\phi_0, \quad (5.6)$$

sendo $\phi_0 \in \text{FASE 0}$ e $\phi_1 \in \text{FASE 1}$ (3.1)

5.2.2 Tensor Viscoelástico

O procedimento para aproximar S , difere dos adotados por (FIGUEIREDO, 2016, p. 115), (CHINYOKA *et al.*, 2005, sec. 2) e (PILLAPAKKAM; SINGH, 2001, sec. 2.2), que interpolam parâmetros viscoelásticos como a concentração de solvente β ou a relaxação (λ) e não o tensor. Em analogia a (YUE *et al.*, 2006, sec. 2), o tensor S é aproximado como:

$$\phi = fS_1 + (1 - f)S_0. \quad (5.7)$$

Embora a aproximação acima tenha custo na memória, é mais simples de ser codificada, além mais genérica.

5.2.3 Termo Difusivo

O termo difusivo (4.43) é aproximado:

$$\nabla \cdot (\mu(\nabla V + [\nabla V]^t)) \Big|_{f_{dim,r}}^{n+\theta} \approx \underbrace{\sum_{dim2} \frac{\partial}{\partial x_{dim2}} \mu \frac{\partial V^{dim}}{\partial x_{dim2}} \Big|_{f_{dim,r}}^{n+\theta}}_{\text{quadrático}} + \underbrace{\sum_{dim2} \frac{\partial}{\partial x_{dim2}} \mu \frac{\partial V^{dim2}}{\partial x_{dim}} \Big|_{f_{dim,r}}^n}_{\text{misto}} \approx$$

$$\text{quadrático} \left\{ \begin{aligned} & \sum_{dim2} \left(\frac{\mu_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{\partial V^{dim}}{\partial x_{dim2}} \Big|_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^{n+\theta}}{dx_{dim2}} - \right. \\ & \left. \frac{\mu_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{\partial V^{dim}}{\partial x_{dim2}} \Big|_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^{n+\theta}}{dx_{dim2}} \right) + \end{aligned} \right. \quad (5.8)$$

$$\text{misto} \left\{ \begin{aligned} & \sum_{dim2} \left(\frac{\mu_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{\partial V^{dim2}}{\partial x_{dim}} \Big|_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^n}{dx_{dim2}} - \right. \\ & \left. \frac{\mu_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{\partial V^{dim2}}{\partial x_{dim}} \Big|_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^n}{dx_{dim2}} \right) \end{aligned} \right. \quad (5.9)$$

$$\{dim, dim2\} \in \{1, \dots, DIM\}.$$

Atrasam-se os termos mistos nos esquemas implícitos, desacoplando-se as componentes da velocidade como (LAGES, 2016, p. 39), (FIGUEIREDO, 2016, p. 59), para reduzir o custo computacional.

As derivadas da velocidade, nos termos quadráticos e mistos são aproximadas:

$$\begin{aligned}
 \text{quadrático} \quad (5.8) \quad & \left\{ \begin{aligned} & \sum_{dim2} \left(\mu_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}} \frac{V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})+dx_{dim2}e_{dim2}}^{n+\theta} - V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})}^{n+\theta}}{dx_{dim2}^2} - \right. \\ & \mu_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})}^{n+\theta} - V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})-dx_{dim2}e_{dim2}}^{n+\theta}}{dx_{dim2}^2} \Bigg) = \\ & \sum_{dim2} \left(\mu_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})+dx_{dim2}e_{dim2}}^{n+\theta}}{dx_{dim2}^2} - \right. \\ & (\mu_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}} + \mu_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}}) \frac{V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})}^{n+\theta}}{dx_{dim2}^2} \\ & \left. + \mu_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{V^{dim} \Big|_{(f_{dim,r})-dx_{dim2}e_{dim2}}^{n+\theta}}{dx_{dim2}^2} \right), \end{aligned} \right. \\
 \text{misto} \quad (5.9) \quad & \left\{ \begin{aligned} & \sum_{dim2} \left(\mu_{(f_{dim,r})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{V^{dim2} \Big|_{(f_{dim,r}+0.5dx_{dim}e_{dim})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^n}{dx_{dim2}dx_{dim}} - \right. \\ & \frac{V^{dim2} \Big|_{(f_{dim,r}-0.5dx_{dim}e_{dim})+0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^n}{dx_{dim2}dx_{dim}} \\ & - \mu_{(f_{dim,r})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}} \frac{V^{dim2} \Big|_{(f_{dim,r}+0.5dx_{dim}e_{dim})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^n}{dx_{dim2}dx_{dim}} \\ & \left. - \frac{V^{dim2} \Big|_{(f_{dim,r}-0.5dx_{dim}e_{dim})-0.5dx_{dim2}e_{dim2}}^n}{dx_{dim2}dx_{dim}} \right), \end{aligned} \right.
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

$\{dim, dim2\} \in \{1, \dots, DIM\}.$

A viscosidade (μ) é aproximada no termo difusivo, é aproximada como (SOUSA *et al.*, 2004, sec. 3), (LAGES, 2016, p. 39):

$$\mu|_{f_{dim,r} \pm 0.5 dx_{dim2} e_{dim2}} \stackrel{(Fig\ 33)}{=} \begin{cases} 4 \left(\frac{1}{\mu_{r,dim}^{f_{dim,r}}} + \frac{1}{\mu_{l,dim}^{f_{dim,r}}} + \frac{1}{\mu_{l,dim2}^{f_{dim,r}}} + \frac{1}{\mu_{r,dim2}^{f_{dim,r}}} \right)^{-1}, & dim \neq dim2 \\ \mu|_{f_{dim,r} \pm 0.5 dx_{dim2} e_{dim2}}, & dim = dim2 \end{cases}, \quad (5.11)$$

sendo:

$$\mu_{r,dim}^{f_{dim,r}} = \mu|_{f_{dim,r} + 0.5 dx_{dim} e_{dim}}, \quad \mu_{l,dim}^{f_{dim,r}} = \mu|_{f_{dim,r} - 0.5 dx_{dim} e_{dim}}, \quad (5.12)$$

$$\mu_{r,dim2}^{f_{dim,r}} = \mu|_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim} \pm dx_{dim2} e_{dim2}}, \quad \mu_{l,dim2}^{f_{dim,r}} = \mu|_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim} \pm dx_{dim2} e_{dim2}}, \quad (5.13)$$

os valores da viscosidade nos centros (não necessariamente nós) das células (podem ser virtuais) vizinhas.

O procedimento acima foi fundamental para simular escoamentos com altas razões entre as viscosidades.

5.2.4 Curvatura e Tensão Superficial

A curvatura (κ) e a força de tensão superficial (F_{CSF}) são aproximadas, na equação do momento, por (RENARDY; RENARDY, 2002, sec. 2.3), (FIGUEIREDO, 2016, p. 75), (RIBERA *et al.*, 2015, p. 43):

$$\kappa|_{f_{dim,r}} \stackrel{(Fig\ 33)}{=} \begin{cases} \left(w_{f_{dim,r} + 0.5 dx_{dim} e_{dim}} \mathbf{K}_{f_{dim,r} + 0.5 dx_{dim}} + w_{f_{dim,r} - 0.5 dx_{dim} e_{dim}} \mathbf{K}_{f_{dim,r} - 0.5 dx_{dim}} \right) / \left(w_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim}} + w_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim}} \right), \\ w_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim}} + w_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim}} > 0 \\ 0, \quad w_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim}} + w_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim}} = 0 \end{cases}, \quad (5.14)$$

sendo:

$$w_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim}} = f_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim}} \cdot (1 - f_{f_{dim,r} + 0.5 e_{dim}}), \quad (5.15)$$

$$w_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim}} = f_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim}} \cdot (1 - f_{f_{dim,r} - 0.5 e_{dim}}), \quad (5.16)$$

e f a fração de volume.

$$F_{CSF}|_{f_{dim,r}} \stackrel{\text{(Fig 33)}}{=} \kappa_{f_{dim,r}} \frac{f_{f_{dim,r}+0.5e_{dim}} - f_{f_{dim,r}-0.5e_{dim}}}{dx_{dim}}. \quad (5.17)$$

5.2.5 Termos de Inércia e Equação de Poisson

A densidade, na equação do momento (termos de inércia), é aproximada como (SOUSA *et al.*, 2004, sec. 3), (LAGES, 2016, p. 41) como:

$$\rho|_{f_{dim,r}} = \frac{1}{2}(\rho_{f_{dim,r}+0.5e_{dim}} + \rho_{f_{dim,r}-0.5e_{dim}}). \quad (5.18)$$

Devido aos baixos números de Reynolds considerados, adota-se a discretização central para o termo convectivo. Para o Método de Projeção, a Equação de Poisson (aproximação da densidade) assume:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \psi \right) \Big|_c &= \sum_{dim} \frac{\partial}{\partial x_{dim}} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial x_{dim}} \right) \Big|_c \approx \\ &\sum_{dim} \frac{1}{dx_{dim}} \left(\frac{1}{\rho} \underbrace{\left| \frac{\partial \psi}{\partial x_{dim}} \right|_{f_{dim,r}}}_{\substack{c+0.5dx_{dim} \\ \text{(Fig 33)}}} - \frac{1}{\rho} \underbrace{\left| \frac{\partial \psi}{\partial x_{dim}} \right|_{f_{dim,l}}}_{\substack{c-0.5dx_{dim} \\ \text{(Fig 33)}}} \right). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Detalhes para os métodos de projeção podem ser encontrados em (SOUSA; OISHI; BUSCAGLIA, 2015).

5.3 Equação Constitutiva: Tensor Viscoelástico

Para resolver numericamente (4.45) e (4.46), considera-se o tensor de conformação A (BEZERRA; CASTELO; AFONSO, 2019, sec. 2), (FIGUEIREDO, 2016, p. 61), (TOMÉ *et al.*, 2012, sec. 2.1). Este tensor é simétrico e positivo definido, uma propriedade importante para a construção de transformações ou decomposições matriciais. Este

tensor é definido por:

$$\tau_p^* \stackrel{(4.42)}{=} \frac{\mu_p^*}{\lambda^*} (A - I) \stackrel{(4.45)}{\Rightarrow} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} 2\mu\mu_{ref}^*(1-\beta)\frac{U^*}{L^*}D + \rho_{ref}^*U^{*2}S &= \frac{\mu\mu_{ref}^*(1-\beta)}{\lambda^*}(A - I) \Rightarrow \\ S &= \mu(1-\beta)\frac{\mu_{ref}^*}{\rho_{ref}^*U^*L^*}\frac{L^*}{U^*\lambda^*}(A - I) - 2\mu(1-\beta)\frac{\mu_{ref}^*}{\rho_{ref}^*U^*L^*}D \Rightarrow \\ S &= \mu(1-\beta)\frac{1}{DeRe}(A - I - 2DeD) \Leftrightarrow A = \frac{DeRe}{\mu(1-\beta)}S + I + 2DeD. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Observe-se que A é uma matriz adimensional. A equação constitutiva (Oldroyd-B) para A é dada por (4.27):

$$\frac{\partial A}{\partial t^*} + (V^* \cdot \nabla^*)A - \left(\nabla V^* A + A[\nabla V^*]^t \right) = \frac{1}{\lambda^*} (I - A). \quad (5.22)$$

Para a decomposição (TOMÉ *et al.*, 2012, sec. 2):

$$\nabla V^* = \Omega^* + B^* + N^*A^{-1}, \quad [\nabla V^*]^t = -\Omega^* + B^* - A^{-1}N, \quad (5.23)$$

sendo Ω , N matrizes anti-simétricas, B é simétrica e comuta com A . A equação (5.22) assume:

$$\frac{\partial A}{\partial t^*} + (V^* \cdot \nabla^*)A - \left(\Omega^* A - A\Omega^* \right) - 2B^*A = \frac{1}{\lambda^*} (I - A). \quad (5.24)$$

Para determinados números de Deborah (FIGUEIREDO, 2016, p. 61, 62), métodos numéricos para resolver (5.24) tornam-se instáveis. Tendo em vista esta dificuldade, a seguinte reformulação de (5.24) para $\mathbb{K}(A)$ é considerada (FIGUEIREDO, 2016, p. 62), (BEZERRA; CASTELO; AFONSO, 2019, sec. 2):

$$\frac{\partial \mathbb{K}(A)}{\partial t^*} + (V^* \cdot \nabla^*)\mathbb{K}(A) = \Omega^*\mathbb{K}(A) - \mathbb{K}(A)\Omega^* + 2\mathbb{B}^* + \frac{1}{\lambda}\mathbb{M}, \quad (5.25)$$

$$\mathbb{B}^* = O D_{\mathbb{B}^*} O^t = O \tilde{B}^* \Lambda J O^t, \quad \mathbb{M} = O(I - A) J O^t,$$

$$J = \text{diag} \left(\frac{\partial \mathbb{K}(\Lambda_1)}{\partial \Lambda_1}, \dots, \frac{\partial \mathbb{K}(\Lambda_{DIM})}{\partial \Lambda_{DIM}} \right). \quad (5.26)$$

Definindo-se os seguintes adimensionais por:

$$\Omega^* = \frac{U^*}{L^*} \Omega, \quad B^* = \frac{U^*}{L^*}, \quad N^* = \frac{U^*}{L^*} N, \quad (5.27)$$

$$\mathbb{B}^* = \frac{U^*}{L^*} \mathbb{B} \Leftrightarrow D_{\mathbb{B}^*} = \frac{U^*}{L^*} D_{\mathbb{B}} \Leftrightarrow \tilde{B}^* = \frac{U^*}{L^*} B. \quad (5.28)$$

As equações anteriores assumem:

$$\frac{U^*}{L^*} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{U^*}{L^*} (V \cdot \nabla) A - \frac{U^*}{L^*} \left(\nabla V A + A [\nabla V]^t \right) = \frac{1}{\lambda^*} (I - A) \Rightarrow \quad (5.29)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + (V \cdot \nabla) A - \left(\nabla V A + A [\nabla V]^t \right) = \frac{1}{De} (I - A), \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial \mathbb{K}(A)}{\partial t} + (V \cdot \nabla) \mathbb{K}(A) = \Omega \mathbb{K}(A) - \mathbb{K}(A) \Omega + 2\mathbb{B} + \frac{1}{De} \mathbb{M}, \quad (5.31)$$

$$\mathbb{B} = O D_{\mathbb{B}} O^t = O \tilde{B} \Lambda J O^t \quad \mathbb{M} = O(I - A) J O^t, \quad (5.32)$$

$$J = \text{diag} \left(\frac{\partial \mathbb{K}(\Lambda_1)}{\partial \Lambda_1}, \dots, \frac{\partial \mathbb{K}(\Lambda_{DIM})}{\partial \Lambda_{DIM}} \right). \quad (5.33)$$

A reformulação (5.31) é conhecida como *Generic Kernel Conformation*. Veja-se que (5.30) é um caso particular de (5.31). Neste trabalho adota-se $\mathbb{K}(A)$, dado pelos auto valores (matriz diagonal) de A (5.33).

Finalmente, para tratar termo convectivo de (5.31), utiliza-se o Método CUBISTA (*Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection*), combinado ao Método Euler-Explícito para a discretização temporal (VIEZEL, 2015, p. 51), (TOMÉ *et al.*, 2008, sec. 4). Detalhes do CUBISTA podem ser encontrados em (LIMA, 2010, p. 19).

5.4 Algoritmo Empregado

Nesta seção será descrito o algoritmo para resolver um passo para as equações (4.43)-(4.49). Para estimar o passo temporal, considera-se a restrição de estabilidade *CFL* (PUCKETT *et al.*, 1997, sec. 4.1.1) (apenas esquemas implícitos para a discretização temporal são utilizados):

$$|V^{dim}| \delta t_{CFL} < 0.5 dx_{dim}. \quad (5.34)$$

O algoritmo é:

1. Aproximar as propriedades nos Centros das Células (Sec 5.2).
2. Atualizar a velocidade e a pressão com o Método Euler Semi-Implicito e o Método de Projeção (Incremental ou Não Incremental) (LAGES, 2016, p. 40,41), com as discretizações discutidas em Sec 5.2.3, Sec 5.2.4 e Sec 5.2.5.
3. Com a velocidade calculada atualizar o tensor viscoelástico (Generic Kernel Conformation) com o Método Euler Explícito para a discretização temporal combinado ao Método CUBISTA para o termo convectivo (Sec 5.3).
4. Advectar a equação da fração de volume com o algoritmo VOF-PLIC-HF (Sec 5.5)

Os sistemas lineares (Equação do Momento e para o Método de Projeção) são resolvidos (LAGES, 2016, p. 41) com o Método BCGS (*Bi-Conjugate Gradient Squared*) com Pré-Condicionador Jacobi Por Blocos, ambos da biblioteca Petsc.

5.5 Algoritmo VOF-PLIC-HF

Nesta seção será descrito um passo do algoritmo VOF-PLIC-HF codificado neste trabalho.

O algoritmo é (devendo-se primeiro inicializar a fração de volume, aproximada ou exata, conforme Sec 3.6 ou Sec 3.6.1):

1. (Reconstrução) **Construir a Interface pela Fração de Volume**, isto é, achar d_C (3.19), descrito em Sec 3.4, sendo a normal e a curvatura determinadas pelo método HF (3.12). Há dois casos a considerar:
 - a) Se para normal calculada (n_x, n_y) ocorrer $\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{n}_y \neq 0$ (Sec 3.4.1), determina-se, com a fração de volume o valor d_C , a partir de (transladando-se *SW* ou *SE* para *C* (Fig 10)):
 - i. $\mathbf{d}_{SW}$, se $\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{n}_y > 0$, em (3.47), (3.50) e (3.53)

- ii. $\mathbf{d}_{SE}$, se $\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{n}_y < 0$, em (3.62), (3.65) e (3.68)
 - b) Se para normal calculada (n_x, n_y) ocorrer $\mathbf{n}_x \cdot \mathbf{n}_y = 0$ (Sec 3.4.2) determina-se, com a fração de volume o valor d_C (transladando-se *SW* para *C* (Fig 10)) a partir de 3.75:
- 2. (Propagação) **Movimentar a Interface no Tempo** (Sec 3.5), através do **Método de Passo Fracionado** em (3.78)-(3.81), cujos fluxos são determinados em Sec 3.5.2.

TESTES PARA INTERFACE

Neste capítulo são apresentados testes (em interfaces originalmente circulares) para verificar a codificação da Inicialização da Fração de Volume em Sec 3.6 e Sec 3.6.1, Método HF em Sec 3.2 e PLIC em Sec 3.3.

6.1 Inicialização da Fração de Volume

Serão considerados dois casos: Uma inicialização exata (função `quadgk` do Octave) e uma aproximada, ambas para uma interface circular de raio R e centro (x_c, y_c) , em um domínio $[0, L]^2$, sendo:

$$\begin{aligned} R &= 0.25, \quad x_c = 0.5, \quad y_c = 0.5, \\ L &= 1, \end{aligned} \tag{6.1}$$

para as resoluções:

$$N_x = N_y = N = \{32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048, 4096\}, \tag{6.2}$$

com cada célula interfacial subdividida em 16×16 subcélulas (Obs 3.11) na aproximada.

N	aproximada	ordem
32	3.9306e-06	-
64	9.8730e-07	1.99319
128	2.4765e-07	1.99519
256	6.2060e-08	1.99657
512	1.5541e-08	1.99758
1024	3.8899e-09	1.99827
2048	9.7330e-10	1.99878
4096	2.4347e-10	1.99914

Tabela 1 – Erros na área para inicialização aproximada da fração de volume (na exata o erro foi $\mathcal{O}(e-16)$).

Fonte: Dados da pesquisa.

6.2 Método HF

Os dados do domínio, da interface e da resolução são os mesmos de (6.1) e (6.2) e são considerados dois casos: inicialização exata e aproximada.

A curvatura (teórica) para uma circunferência de raio R é dada por:

$$\kappa^{exata} \stackrel{(3.7)}{=} \frac{1}{R}, \quad (6.3)$$

e a curvatura numérica (k^{num}) é obtida por (3.12) e (3.13). O erro na curvatura (δ^κ) é:

$$\delta^\kappa \stackrel{(Obs\ 6.1)}{=} \max_{ij} \{|k_{ij}^{num} - \kappa^{exata}|\}, \quad 0 < f_{ij} < 1, \quad i, j \in \{1, \dots, N\}. \quad (6.4)$$

Seja (x_{ij}, y_{ij}) o centro de uma célula interfacial. A normal teórica:

$$\hat{u}_n^{exata} = \hat{u}_n^{exata}(x_{ij}, y_{ij}) = (n_x^{exata}, n_y^{exata}), \quad (6.5)$$

numa circunferência de raio R e centro (x_c, y_c) é:

$$\hat{u}_n^{exata} = \begin{cases} [x_{ij} - x_c, y(x_{ij}) - y_c]/R, & y = y(x) = y_c \pm \sqrt{R^2 - (x - x_c)^2} \\ [x(y_{ij}) - x_c, y_{ij} - y_c]/R, & x = x(y) = x_c \pm \sqrt{R^2 - (y - y_c)^2} \end{cases}. \quad (6.6)$$

A escolha de uma das expressões da equação (6.6) depende da parametrização escolhida para o método HF (Fig 6), na célula ij . A normal numérica $\hat{u}_n^{num} = (n_x^{num}, n_y^{num})$ é obtida

em (3.12) e (3.13). O erro no vetor normal ($\delta^{\hat{u}_n}$) é calculado como:

$$\delta^{\hat{u}_n} \stackrel{\text{(Obs 6.1)}}{=} \max\left\{\max_{ij}\{|n_x^{\text{exata}}(x_{ij}, y_{ij}) - n_x^{\text{num}}(x_{ij}, y_{ij})|\}, \max_{ij}\{|n_y^{\text{exata}}(x_{ij}, y_{ij}) - n_y^{\text{num}}(x_{ij}, y_{ij})|\}\right\},$$

$$0 < f_{ij} < 1, i, j \in \{1, \dots, N\}. \quad (6.7)$$

Obs 6.1. As fórmulas para os erros no vetor normal (6.7) e na curvatura (6.4), são aplicadas em células interfaciais ij ($0 < f_{ij} < 1$), desde que o estêncil sobre ij seja admissível (Obs 3.2). Para o caso da circunferência testada (6.1), com as resoluções $N_x = N_y = N \geq 32$, todas as células interfaciais foram admissíveis.

N	aproximada	ordem	exata	ordem
32	0.050078	-	5.0030e-02	-
64	0.024125	1.05365	2.4108e-02	1.05328
128	0.012744	0.92071	1.2741e-02	0.92003
256	0.0029204	2.12558	2.9219e-03	2.12450
512	0.0013126	1.15374	6.5121e-04	2.16571
1024	0.0021006	-0.67837	1.8459e-04	1.81880
2048	0.0020166	0.05888	5.4875e-05	1.75010
4096	0.0021210	-0.07282	1.3573e-05	2.01541

Tabela 2 – Erros da curvatura (6.4) para inicialização exata e aproximada.

Fonte: Dados da pesquisa.

N	aproximada	ordem	exata	ordem
32	1.3933e-02	-	1.3926e-02	-
64	1.2415e-02	0.16642	1.2411e-02	0.16616
128	9.8083e-03	0.34001	9.8067e-03	0.33978
256	2.7109e-03	1.85523	2.7105e-03	1.85521
512	6.0870e-04	2.15497	6.0861e-04	2.15497
1024	1.8982e-04	1.68110	1.8980e-04	1.68104
2048	6.3216e-05	1.58627	6.3209e-05	1.58628
4096	1.5573e-05	2.02124	1.5571e-05	2.02127

Tabela 3 – Erros da normal (6.7) para inicialização exata e aproximada.

Fonte: Dados da pesquisa.

As tabelas 3 e 2 mostram que a convergência da normal (Tab 3) é mantida para a inicialização aproximada da fração de volume, o que não é observado para a curvatura (Tab 2). Na aproximada, cada célula interfacial foi subdividida em 16×16 subcélulas. Para subdivisões maiores, a "convergência" da curvatura "pode ser obtida" (o que foi constatado neste trabalho, embora o tenha sido para as mesmas resoluções em Tab 2). A segunda ordem para a inicialização exata condiz com (3.14).

6.3 Advecção da Fração

A inicialização da fração de volume para este teste é aproximada. Uma circunferência de raio R e centro (x_c, y_c) , no domínio $[0, L^2]$, é advectada (3.76), sob o campo (*Single Vortex Flow*) V (ZAINALI *et al.*, 2013, sec. 3.1), (FIGUEIREDO, 2016, p. 94):

$$x_c = 0.5, \quad y_c = 0.75, \quad R = 0.15, \quad L = 1, \quad (6.8)$$

$$V = (u, v)_e = \begin{cases} (u_0, v_0)_e = -2\sin^2(\pi x)\sin(\pi y)\cos(\pi y)\mathbf{e}_1 + \\ \quad 2\sin^2(\pi y)\sin(\pi x)\cos(\pi x)\mathbf{e}_2, & t \in [0, 1[\\ -(u_0, v_0)_e & t \in [1, 2] \end{cases} \quad (6.9)$$

A média das curvaturas κ^m , e o erro δ^{κ^m} em Tab 4 são calculados como:

-	$t = 0$	$t = 2$
$\delta_{1/250}^{area}$	6.5010e-08	1.2799e-06
$\delta_{1/500}^{area}$	1.6210e-08	2.9766e-07
$\delta_{1/250}^{u_n}$	0.0091999	0.058292
$\delta_{1/500}^{u_n}$	0.0025393	0.030654
$\delta_{1/250}^{\kappa}$	0.018598	5.7761
$\delta_{1/500}^{\kappa}$	0.0042251	5.7312
$\delta_{1/250}^{\kappa_m}$	0.0030132	0.074048
$\delta_{1/500}^{\kappa_m}$	6.9260e-04	0.061712

Tabela 4 – Erros da curvatura (6.4), área, normal (6.7) e média das curvaturas (6.10).

Fonte: Dados da pesquisa.

$$\kappa_m^{(\text{Obs } 6.1)} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \kappa_{ij}, \quad \delta^{\kappa_m} = |\kappa_m - \kappa^{\text{exata}}|, \quad 0 < f_{ij} < 1, \quad i, j \in \{1, \dots, N\}. \quad (6.10)$$

Para obter a curva de referência resolve-se, com a função *lsode* do Octave, a seguinte equação diferencial para o tempo t : $\dot{x} = u$, $\dot{y} = v$, $t \in [0, 2]$.

Os resultados deste teste são apresentados em Fig 34 e Fig 35 e Tab 4.

Figura 34 – Dispersão das curvaturas (linha contínua é a curvatura exata) para células interfaciais (eixo x , identificadas por números inteiros) e admissíveis (Obs 6.1).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Note-se as resoluções adotadas (que consideramos caras): $1/250$ e $1/500$. Em resoluções mais grosseiras a interface se degenera na cauda, porque o stencil do Método

Figura 35 – Interface em $t = 1$ e $t = 2$, sendo as linhas de referência (pontilhada e contínua) obtidas pela função *lsode* do Octave.

Fonte: Elaborada pelo autor.

HF se torna insuficiente para capturá-la. Em malhas uniformes, caso a resolução necessária seja muito fina para capturar pontos angulosos (como na cauda da interface em $t = 1$ na Fig. 35), filamentos, etc, o custo se torna proibitivo, e outras estratégias devem ser empregadas, como, por exemplo, o refinamento adaptativo nas células próximas da interface (o que torna o tratamento computacional complexo).

Como se pode observar, a curvatura em Tab 4 e Fig 34, calculada pelo método VOF (VOF-PLIC-HF) apresenta um erro substancial, embora a interface obtida numericamente esteja próxima da interface teórica. A dificuldade para estimar precisamente a curvatura pela técnica VOF está relatada na literatura (POPINET, 2009, p. 15), e alguns autores sugerem combinar o VOF à outras técnicas.

Para o Método HF, uma possibilidade seria a consideração de stencils maiores, embora não tenhamos avaliado. Entendemos que caberá ao investigador decidir se uma grande precisão no cálculo da curvatura é ou não relevante, e caso seja, módulos específicos devem ser incorporados ao VOF, de modo a atender a especificidade de cada problema. Devido ao caráter introdutório deste trabalho, deixamos esta questão para projetos futuros.

TESTES PARA ESCOAMENTO VISCOELÁSTICO

Apresentam-se testes numéricos para a verificar a implementação do Modelo Oldroyd-B no clássico problema do canal ([VIEZEL, 2015](#), p.107)

7.1 Equações

As equações (adimensionais) são (foi omitida a equação da incompressibilidade):

$$\partial_t u + u \partial_x u + v \partial_y u = -p_x + (\beta/Re)(\partial_{xx} u + \partial_{yy} u) + \partial_x \tau^{xx} + \partial_y \tau^{xy} \quad (7.1)$$

$$\partial_t v + u \partial_x v + v \partial_y v = -p_y + (\beta/Re)(\partial_{xx} v + \partial_{yy} v) + \partial_x \tau^{xy} + \partial_y \tau^{yy} \quad (7.2)$$

$$\tau^{xx} + De(\partial_t \tau^{xx} + u \partial_x \tau^{xx} + v \partial_y \tau^{xx} - 2\tau^{xx} \partial_x u - 2\tau^{xy} \partial_y u) = (2(1-\beta)/Re) \partial_x u \quad (7.3)$$

$$\tau^{xy} + De(\partial_t \tau^{xy} + u \partial_x \tau^{xy} + v \partial_y \tau^{xy} - \tau^{xx} \partial_x v - \tau^{yy} \partial_y u) = ((1-\beta)/Re)(\partial_x v + \partial_y u) \quad (7.4)$$

$$\tau^{yy} + De(\partial_t \tau^{yy} + u \partial_x \tau^{yy} + v \partial_y \tau^{yy} - 2\tau^{xy} \partial_x v - 2\tau^{yy} \partial_y v) = (2(1-\beta)/Re) \partial_y v \quad (7.5)$$

Considerando-se o escoamento totalmente desenvolvido:

$$p_x = const_1, \quad p_y = const_2, \quad \partial_t = 0, \quad \partial_x u = 0, \quad v = 0, \quad \partial_x \tau = 0. \quad (7.6)$$

As equações (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.5) fornecem:

$$\frac{\beta}{Re} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = p_x - \frac{\partial \tau^{xy}}{\partial y}, \quad (7.7)$$

$$\tau^{yy} = 0, \quad p_y = 0, \quad (7.8)$$

$$\tau^{xx} - 2De\tau^{xy} \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad (7.9)$$

$$\tau^{xy} = \frac{1}{Re}(1 - \beta) \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (7.10)$$

Diferenciando-se (7.10) em y , e substituindo-se este resultado em (7.7):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = Re p_x, \quad (7.11)$$

cujas solução é dada por:

$$u(y) = \frac{p_x Re}{2} y^2 + C_1 y + C_2 \quad (7.12)$$

o tensor τ é então:

$$\tau^{yy} = 0, \quad \tau^{xy} = \frac{1}{Re}(1 - \beta)[(p_x Re)y + C_1], \quad (7.13)$$

$$\tau^{xx} = \frac{2De}{Re}(1 - \beta)[(p_x Re)y + C_1]^2. \quad (7.14)$$

7.2 Descrição do Domínio

Um domínio retangular, com escala para o comprimento L^* :

$$\Omega^* = [0, L_x^*] \times [0, L_y^*], \quad \Omega = [0, L_x^*/L^*] \times [0, L_y^*/L^*], \quad (7.15)$$

com bordas:

$$\partial E^*(x^* = 0), \quad \partial W^*(x^* = L_x^*), \quad \partial N^*(y^* = L_y^*), \quad \partial S^*(y^* = 0), \quad (7.16)$$

$$\partial E(x = 0), \quad \partial W(x = L_x^*/L^*), \quad \partial N(y = L_y^*/L^*), \quad \partial S(y = 0), \quad (7.17)$$

7.3 Hagen-Poiseuille

Impondo-se:

$$u(0) = 0, u(H^*/L^*) = 0 \stackrel{(7.12)}{\Rightarrow} \quad (7.18)$$

$$u(y) = \frac{p_x Re}{2} y(y - L_y^*/L^*), \quad (7.19)$$

o tensor τ em (7.13) e (7.14) assume, com $C_1 = -p_x Re H^*/2L^*$:

$$\tau^{yy} = 0, \quad (7.20)$$

$$\tau^{xy} = (1 - \beta) p_x (y - L_y^*/2L^*), \quad (7.21)$$

$$\tau^{xx} = 2DeRe(1 - \beta) p_x^2 (y - L_y^*/2L^*)^2. \quad (7.22)$$

Considera-se o domínio (adimensional) $[0, 10] \times [0, 1]$, com as resoluções e respectivos passos de tempo:

$$N_x = 400, N_y = 40, \delta t = 5.0e-3, \quad (7.23)$$

$$N_x = 200, N_y = 20, \delta t = 2.5e-3, \quad (7.24)$$

com $Re = 0.4$, $\beta = 0.5$, $p_x = -1$, $De = 1$. Utiliza-se o método de Euler Semi-Implícito na equação do momento, sendo os demais métodos os mesmos de Sec 5.4. As condições iniciais são nulas para todas as incógnitas (exceto nas bordas) e as condições de contorno (Sec 4.3) são:

$$u(\partial I) = 0, v(\partial I) = 0, \frac{\partial p}{\partial y}(\partial I) = 0, I \in \{N, S\}, \quad (7.25)$$

$$u(\partial W) = \frac{p_x Re}{2} y(y - L_y^*/L^*), v(\partial W) = 0, \frac{\partial p}{\partial y}(\partial W) = 0, \quad (7.26)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(\partial E) = 0, \frac{\partial v}{\partial x}(\partial E), p(\partial E) = 0, \quad (7.27)$$

e para o tensor viscoelástico (τ^p), não foram impostas condições de contorno. Os resultados são exibidos em Fig 36.

(e)

(f)

(g)

(h)

Figura 36 – Erros ($\|\cdot\|_\infty$) para o tensor e velocidade (Poiseuille) no domínio e no centro do canal.

Fonte: Elaborada pelo autor.

7.4 Couette

Assumindo-se:

$$u(0) = u_S, \quad u\left(\frac{H^*}{L^*}\right) = u_N \stackrel{(7.12)}{\Rightarrow} \quad (7.28)$$

$$u(y) = \frac{p_x Re}{2} y \left(y - \frac{H^*}{L^*} \right) + \frac{L^*}{H^*} (u_N - u_S) y + u_S. \quad (7.29)$$

O tensor τ (7.13) e (7.14) assume, com $C_1 = -p_x Re \frac{H^*}{2L^*} + \frac{L^*}{H^*} (u_N - u_S)$:

$$\tau^{yy} = 0, \quad (7.30)$$

$$\tau^{xy} = \frac{1}{Re} (1 - \beta) \left[p_x Re \left(y - \frac{H^*}{2L^*} \right) + \frac{L^*}{H^*} (u_N - u_S) \right], \quad (7.31)$$

$$\tau^{xx} = \frac{2De}{Re} (1 - \beta) \left[p_x Re \left(y - \frac{H^*}{2L^*} \right) + \frac{L^*}{H^*} (u_N - u_S) \right]^2. \quad (7.32)$$

Os dados do domínio, os parâmetros e os métodos numéricos são os mesmos do problema anterior.

As condições iniciais são nulas para todas as incógnitas (exceto nas bordas) e as condições de contorno são (Sec 4.3):

$$u(\partial N) = u_N, \quad u(\partial S) = u_S, \quad v(\partial I) = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y}(\partial I) = 0, \quad I \in \{N, S\}, \quad (7.33)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(\partial I) = 0, \quad \frac{\partial v^*}{\partial x}(\partial I) = 0, \quad p(\partial I) = 0 \quad (p_x = 0), \quad I \in \{W, E\}. \quad (7.34)$$

e para o tensor viscoelástico (τ^p), não foram impostas condições de contorno. Os resultados são exibidos em Fig 37.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

(g)

(h)

Figura 37 – Erros ($\|\cdot\|_\infty$) para o tensor e velocidade (Couette) no domínio e no centro do canal

Fonte: Elaborada pelo autor.

VERIFICAÇÃO DOS RESULTADOS

Neste capítulo apresentam-se os resultados de problemas clássicos envolvendo bolhas, amplamente encontrados na literatura para verificar/validar códigos CFD multifásicos com viscoelasticidade, dentre os quais destacamos (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009), (SOUSA *et al.*, 2004), (ZAINALI *et al.*, 2013), (CHINYOKA *et al.*, 2005), (YUE *et al.*, 2006), (PILLAPAKKAM; SINGH, 2001), (HYSING; TUREK, 2015), (HYSING *et al.*, 2007), (HUA; LOU, 2007), (OLSSON; KREISS, 2005), (KALLAND, 2008).

8.1 Bolha Estática

Uma bolha (bidimensional) originalmente circular de raio R^* de etanol (FASE 0) imersa em uma caixa $[0, L_x^*] \times [0, L_y^*]$ de ar (FASE 1) (Def 3.1, (3.1)), centrada em (x_c^*, y_c^*) sem ação da gravidade.

O resultado esperado é um salto de pressão (Δp^*) satisfazendo a equação de *Young-Laplace* (SOUSA *et al.*, 2004, sec. 6.2):

$$\Delta p^* = \sigma^* \kappa^* = \sigma^* \frac{1}{R^*}, \quad (8.1)$$

e as velocidades devem ser nulas.

Contudo, flutuações ocorrem (*correntes parasitas ou espúrias*) (SOUSA *et al.*, 2004, sec. 6.3), (FIGUEIREDO, 2016, p. 100) nos resultados numéricos. Em Fig 38 e

Figura 38 – Informações do salto de pressão e velocidades para o problema da bolha estática (valores dimensionais).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 39 – Salto da pressão ($t^* = 1$, $N = 256$, κ^{*hf}).

Fonte: Elaborada pelo autor.

$N(t^* = 1)$	64	128	256
$ V^*(\kappa^{*hf}) _2 _\infty$	1.30000e-05	7.00000e-06	1.41421e-06
$ V^*(\kappa^{*ex}) _2 _\infty$	$\mathcal{O}(e-16)$	$\mathcal{O}(e-16)$	$\mathcal{O}(e-16)$
$ \Delta p^* - \sigma^* \kappa^{*hf} _\infty$	2.77200e-03	1.083000e-03	2.39000e-04
$ \Delta p^* - \sigma^* \kappa^{*ex} _\infty$	$\mathcal{O}(e-16)$	$\mathcal{O}(e-16)$	$\mathcal{O}(e-16)$

Tabela 5 – Correntes espúrias, e erros na equação de Young-Laplace (8.1) em $t^* = 1$, com a curvatura exata imposta (κ^{*ex}) e a calculada pelo Método HF (κ^{*hf}).

Fonte: Dados da pesquisa.

Tab 5 são apresentados o salto de pressão e as velocidades espúrias.

Para a discretização temporal utilizou-se o método de Euler-Semi-Implícito, com o método de Projeção Incremental, sendo os demais métodos os mesmos de Sec 5.4.

Os dados do domínio são:

$$\begin{aligned}
 L_x^* &= L_y^* = L^* = 100 \text{ mm}, \\
 R^* &= 25 \text{ mm}, \\
 x_c^* &= 50 \text{ mm}, y_c^* = 50 \text{ mm}.
 \end{aligned} \tag{8.2}$$

As condições iniciais são nulas para todas as incógnitas e as condições de

$N(t^* = 0)$	64	128	256
$\ \delta^{\hat{u}_n}\ _\infty$	1.241125e-02	9.806859e-03	2.710536e-03
$\ \delta^\kappa\ _\infty$	2.412642e-01	1.275460e-01	2.918026e-02
δ^{area}	0	0	0

$N(t^* = 1)$	64	128	256
$\ \delta^{\hat{u}_n}\ _\infty$	1.268480e-02	1.040575e-02	2.798430e-03
$\ \delta^\kappa\ _\infty$	1.281715e-01	5.946478e-02	2.426343e-02
δ^{area}	2.886719e-08	1.464844e-11	1.037598e-11

Tabela 6 – Erros (ver Fig 38) da normal, da curvatura e da área (relativa à área em $t^* = 0$)

Fonte: Dados da pesquisa.

Figura 40 – A variação das frações entre $t^* = 0$ e $t^* \approx 0.6$ pouco alterou o erro na normal, ao contrário da curvatura em Fig 38. Ambos os stencils mantiveram-se horizontais no Método HF, com (3.12), (3.13) $H_M = 1.9635170$, $H_T = 1.994790$, $H_B = 1.9008790$ ($\kappa^{*hf} \approx 40.015$) em $t^* = 0$ e $H_M = 1.9684330$, $H_T = 2.0006510$, $H_B = 1.905930$ ($\kappa^{*hf} \approx 38.635$) em $t^* = 1$, sendo $\kappa^{*ex} = 40$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

contorno (Sec 4.3) são (Sec 7.2):

$$u^*(\partial I^*) = 0, \quad v^*(\partial I^*) = 0, \quad \frac{\partial p^*}{\partial y^*}(\partial I^*) = 0, \quad I^* \in \{E^*, W^*, N^*, S^*\}, \quad (8.3)$$

como a bolha está suficientemente distante das bordas não são consideradas condições de contorno para a fração de volume.

Os demais dados de entrada são (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009, sec. 3.1):

$$\begin{aligned} \rho_0^* &= 1.17688 \text{ kg/m}^3, \quad \rho_1^* = 787.88 \text{ kg/m}^3, \\ \mu_0^* &= 2.0 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}, \quad \mu_1^* = 2.4 \cdot 10^{-2} \text{ Pa.s}, \\ \sigma^* &= 0.02361 \text{ N/m}^2, \quad \sigma^* \kappa^* = 0.94440 \text{ N/m}^3. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Para este problema, a restrição de capilaridade (BALCÁZAR *et al.*, 2015, eq. 22), (FIGUEIREDO, 2016, p. 75) é respeitada:

$$\delta t^* < h^{*1.5} \left(\frac{\rho_1^* + \rho_0^*}{4\pi\sigma^*} \right)^{0.5}. \quad (8.5)$$

São consideradas as resoluções:

$$h = \frac{100}{N} \text{ mm}, \quad N = N_x = N_y = \{64, 128, 256\}, \quad (8.6)$$

fornecendo-se as restrições de capilaridade (δt_{cap}^*), com os seguintes passos ($\delta t^* = t_{adm}^*$) adotados (tempo de simulação é 1s):

$$\begin{aligned} \delta t_{cap}^* &= \{3.18\text{e-}03, 1.12\text{e-}03, 3.90\text{e-}04\}, \\ \delta t_{adm}^* &= \{1.00\text{e-}03, 4.00\text{e-}04, 1.00\text{e-}04\}. \end{aligned} \quad (8.7)$$

Em Fig 38 pode-se observar alguns picos nas velocidades espúrias e no erro da equação de Young-Laplace. Estes saltos são devido aos erros cometidos na aproximação da curvatura pelo Método HF (Fig 40), uma vez que ao se impor o valor exato, obtem-se precisão de máquina, conforme Tab 5. Esta última tabela também indica que, para este problema, a aproximação da tensão superficial pela técnica CSF (4.24) com a aproximação da curvatura nas facetas em (5.14) produz bons resultados. Erros para a normal, curvatura e na área são apresentados em Tab 6 (esta tabela evidencia a boa

propriedade na conservação da massa do Método VOF, mesmo com os arredondamentos da fração de volume).

Novamente, como em Tab 4, Tab 2 e Tab 3, o Método HF apresentou bons resultados na aproximação da normal, porém limitações ao se aproximar a curvatura, sugerindo que melhorias devem ser consideradas para aproximá-la, caso interesse ao investigador.

8.2 Bolha Oscilante

Uma bolha (bidimensional) originalmente elíptica de raios R_x^* e R_y^* de etanol (FASE 0) imersa em uma caixa $[0, L_x^*] \times [0, L_y^*]$ de ar (FASE 1) (Def 3.1, (3.1)), centrada em (x_c^*, y_c^*) sem ação da gravidade.

Espera-se que a bolha oscile devido ao desbalanço da tensão superficial (variação da curvatura). Com o amortecimento causado pelos efeitos viscosos, a forma da bolha deverá se estabilizar numa circunferência de raio R_m^* (escoamento incompressível):

$$\pi R_x^* \cdot R_y^* = \pi R_m^{*2} \Rightarrow R_m^* = \sqrt{R_x^* \cdot R_y^*}, \quad (8.8)$$

com período (τ^*) e frequência (ω^*) de oscilação (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009, sec. 3.2), (FYFE; ORAN; FRITTS, 1988, sec. 2) dados aproximadamente:

$$\omega^* = \sqrt{\frac{(n^3 - n)\sigma^*}{(\rho_0^* + \rho_1^*)R_m^{*3}}}, \quad \tau^* = \frac{2\pi}{\omega^*}, \quad (8.9)$$

tomando-se $n = 2$.

Os dados do domínio são:

$$\begin{aligned} L_x^* &= L_y^* = L^* = 75 \text{ mm}, \\ R_x^* &= 17.858 \text{ mm}, \quad R_y^* = 28.500 \text{ mm}, \quad R_m^* = 22.560 \text{ mm}, \\ x_c^* &= 37.5 \text{ mm}, \quad y_c^* = 37.5 \text{ mm}. \end{aligned} \quad (8.10)$$

As condições de contorno e iniciais são as mesmas de (8.3). Os demais dados de entrada, são os mesmos de (8.4). Os resultados são exibidos em Fig 41 e Tab 7 .

(a) Coordenada y^* do pólo norte em função do tempo. (b) Interface em $t^* = 0$, $t^* = 10$, e círculo R_m^* (8.8)

Figura 41 – Oscilação da bolha (valores dimensionais), sendo M os valores de (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).

Fonte: Elaborada pelo autor.

N	τ^*	$\tau^*_*(M)$	$\delta\tau^*(\%)$	$\delta\tau^*(\%)(M)$
64	1.600	1.5759	0.67	0.81
128	1.600	1.6150	0.67	1.6

Tabela 7 – Comparação (valores dimensionais) entre o período obtido numericamente e o período estimado ($\tau_{ref}^* = 1.5893$) em (8.9), sendo M os valores (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).

Fonte: Dados da pesquisa.

A restrição de capilaridade também é respeitada ($N = \{64, 128\}$) fornecendo assim ($\delta t^* = \delta t_{adm}^*$) como em (8.7):

$$\begin{aligned}\delta t_{cap}^* &= \{2.07\text{e-}03, 7.31\text{e-}04\}, \\ \delta t_{adm}^* &= \{1.00\text{e-}03, 4.00\text{e-}04\}.\end{aligned}\quad (8.11)$$

8.3 Ascensão da Bolha (Caso 1)

Uma bolha (bidimensional) originalmente circular de raio R^* imersa em $[0, L_x^*] \times [0, L_y^*]$, centrada em (x_c^*, y_c^*) sob ação da gravidade. A densidade do fluido no interior da bolha (FASE 1) é menor do que a do fluido na fase externa a bolha (FASE 0).

Espera-se que a bolha (menos densa) se mova na direção contrária à gravidade, atingindo um formato terminal.

Os dados do domínio são (HYSING *et al.*, 2007, sec. 2.2):

$$L_x^* = 2, L_y^* = 1, R^* = 0.25, x_c^* = 0.5, y_c^* = 0.5. \quad (8.12)$$

As condições iniciais são nulas para todas as incógnitas e as condições de contorno (Sec 4.3) são:

$$\begin{aligned}u^*(\partial I^*) &= 0, \quad v^*(\partial I^*) = 0, \quad \frac{\partial p^*}{\partial y^*}(\partial I^*) = 0, \quad I^* \in \{E^*, W^*\}, \\ \frac{\partial u^*}{\partial x^*}(\partial I^*) &= 0, \quad v^*(\partial I^*) = 0, \quad \frac{\partial p^*}{\partial y^*}(\partial I^*) = 0, \quad I^* \in \{N^*, S^*\}.\end{aligned}\quad (8.13)$$

como a bolha está suficientemente distante das bordas não são consideradas condições de contorno para a fração de volume.

Os demais dados de entrada são (HYSING *et al.*, 2007, sec. 2.4):

$$\begin{aligned}\rho_0 &= 1000, \quad \rho_1 = 100, \\ \mu_0 &= 10, \quad \mu_1 = 1, \\ Re &\stackrel{(4.48)}{=} 35, \quad Eo \stackrel{(4.54)}{=} 10 \quad (\sigma^* = 24.5, \quad |g^*| = 0.98).\end{aligned}\quad (8.14)$$

As seguintes resoluções (h), com passo temporal $\delta t = \frac{h}{16}$ são consideradas:

$$\begin{aligned}N_x &= 160, \quad N_y = 80, \\ N_x &= 320, \quad N_y = 160.\end{aligned}\quad (8.15)$$

Para este problema, consideram-se a circularidade (razão entre o perímetro da bolha e a bolha circular inicial de raio R) ϕ , o centro de massa (x) x_{cm} e a velocidade (x) do centro de massa (U_{cm}) da bolha (Ω), definidos:

$$\phi = \frac{\int_{\partial\Omega^*} ds^*}{2\pi R^*}, \quad x_{cm}^* = \int_{\Omega^*} x^*, \quad U_{cm}^* = \frac{d}{dt^*} x_{cm}^*. \quad (8.16)$$

h^*	ϕ_{min}	$t^* _{\phi_{min}}$	$U_{cm,max}^*$	$t^* _{U_{cm,max}^*}$	$x_{cm}^*(t^* = 3)$
1/80	0.8496	1.8680	0.2498	0.9211	1.0767
1/80(H)	0.9014	1.8734	0.2418	0.9375	1.0810
1/160	0.8562	1.8000	0.2496	0.8500	1.0769
1/160(H)	0.9014	1.9070	0.2419	0.9281	1.0812
(M)	0.8876	1.8915	0.2457	0.9235	1.0679

Tabela 8 – Comparação da circularidade, centro de massa e velocidade do centro de massa (8.16) sendo (H) os valores de (HYSING *et al.*, 2007, sec. 4.1), e (M) os de (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).

Fonte: Dados da pesquisa.

A circularidade pode ser aproximada: extraindo-se das curvas de nível (para $f = 0.5$, por exemplo) com a função *contourc* do Octave, ou pelos pontos $P^* = C^* + |d_C^*| \hat{u}_n$ em células interfaciais, sendo C^* o centro da célula, $|d_C^*|$ a distância da reta (construída sobre a célula) a C^* e $\hat{u}_n$ o vetor normal à reta (Fig. 10). Com os pontos ordenados (anti-horário, por exemplo), o cálculo do perímetro torna-se fácil. Consideramos o segundo procedimento (não houve diferenças notáveis entre os dois).

Os resultados são exibidos em Fig 42 e Tab 8.

(a) Interface em $t = 3$.

(b) Circularidade em função do tempo.

(c) Posição (direção x) do centro de massa em função do tempo. (d) Velocidade (direção x) do centro de massa (derivada do gráfico anterior).

Figura 42 – Informações (valores dimensionais) da ascensão da bolha sendo H os valores de (HYSING *et al.*, 2007, sec. 4.1) e M os valores de (ŠTRUBELJ; TISELJ; MAVKO, 2009).

Fonte: Elaborada pelo autor.

8.4 Ascensão da Bolha (Caso 2)

Este caso trata de uma bolha ascendente tal como no caso anterior, porém com parâmetros mais críticos.

Os dados do domínio são (OLSSON; KREISS, 2005, sec. 5.3), (KALLAND, 2008, p. 102):

$$\begin{aligned} L_x &= 4, L_y = 2, \\ R &= 0.5, \\ x_c &= 1, y_c = 1. \end{aligned} \quad (8.17)$$

As condições de contorno são:

$$u(\partial I) = 0, \quad v(\partial I) = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y}(\partial I) = 0, \quad I \in \{E, W, N, S\}. \quad (8.18)$$

Os demais dados (valores adimensionais) de entrada (OLSSON; KREISS, 2005, sec. 5.3), (KALLAND, 2008, p. 102) são:

$$\rho_0 = 1, \quad \rho_1 = 0.0013, \quad (8.19)$$

$$\mu_0 = 1, \quad \mu_1 = 0.016,$$

$$Re \stackrel{(4.48)}{=} 500, \quad We = 0.68, \quad Fr = 0.45. \quad (8.20)$$

Para este caso ($Re = 500$), o termo convectivo é discretizado pelo Método Upwind de 1ª ordem.

As resoluções, com os respectivos passos de tempo são:

$$\begin{aligned} N_x &= 100, N_y = 50, dt = 0.0010 \\ N_x &= 200, N_y = 100, dt = 0.0005 \end{aligned} \quad (8.21)$$

Os resultados são exibidos em Fig 43.

(a) Interface em $t = 0.5$ (b) Velocidade (direção x) do centro de massa em função do tempo.

Figura 43 – Informações (valores adimensionais) da ascensão da bolha sendo (O) os valores de (OLSSON; KREISS, 2005, sec. 5.3) e (K) os valores de (KALLAND, 2008, p. 107).

Fonte: Elaborada pelo autor.

8.5 Bolha sob Cisalhamento

Uma bolha (bidimensional) originalmente circular de raio R^* imersa em uma caixa $[0, L_x^*] \times [0, L_y^*]$, centrada em (x_c^*, y_c^*) sem ação da gravidade. As paredes superior e inferior da caixa se movem com velocidades $u_{N^*}^*$ e $u_{S^*}^*$, com hipótese de não escorregamento.

As simulações são feitas para: bolha (I) (FASE 1) numa matriz (FASE 0) (J): (IJ) (por exemplo, bolha newtoniana numa matriz viscoelástica (NV)). Para a fase viscoelástica, o modelo Oldroyd-B é empregado.

Espera-se que a bolha se deforme (mais quando as fases são fluidos newtonianos e menos quando são viscoelásticos) devido ao cisalhamento gerado.

Os dados do domínio (valores adimensionais com escala para comprimento $L^* = R^*$) são (CHINYOKA *et al.*, 2005, sec. 4), (FIGUEIREDO, 2016, p. 115):

$$L_x = 16, L_y = 8, R = 1, x_c = 8, y_c = 4. \quad (8.22)$$

As escalas adotadas são:

$$U^* = \frac{R^*}{L_y^*} (u_{N^*}^* - u_{S^*}^*), \quad T^* = \frac{L^*}{U^*} = \frac{L_y^*}{u_{N^*}^* - u_{S^*}^*}, \quad (8.23)$$

$$\rho_{ref}^* = \rho_0^* = \rho_1^*, \quad \mu_{ref}^* = \mu_0^* = \mu_1^*. \quad (8.24)$$

Os demais dados (valores adimensionais) de entrada, com $u_{N^*}^* = -u_{S^*}^*$ são:

$$\begin{aligned} u_N &= 4 = -u_S, \\ \rho_0 &= 1, \quad \rho_1 = 1, \quad \mu_0 = 1, \quad \mu_1 = 1, \\ De &\stackrel{(4.48)}{=} 0.4, \quad \beta = 0.5, \quad Re \stackrel{(4.48)}{=} 0.3, \quad Ca = 0.6 \quad (We \stackrel{(4.50)}{=} Re \cdot Ca). \end{aligned} \quad (8.25)$$

A resolução da malha é: $N_x = 512$ e $N_y = 256$ com $\delta t = 0.001$. Os métodos numéricos são os mesmos de Sec 5.4. As condições de contorno (Sec 7.4) são:

$$\begin{aligned} u(\partial N) &= u_N, \quad u(\partial S) = u_S, \quad v(\partial I) = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y}(\partial I) = 0, \quad I \in \{N, S\}, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(\partial I) &= 0, \quad \frac{\partial v}{\partial x}(\partial I) = 0, \quad p(\partial I) = 0, \quad I \in \{W, E\}. \end{aligned} \quad (8.26)$$

Para o tensor viscoelástico (τ^p) e a fração de volume, não foram impostas condições de contorno. As condições iniciais são nulas, exceto para a velocidade:

$$u(x, y, 0) = \frac{u_N - u_S}{L_y} y + u_S, \quad v(x, y, 0) = 0 \quad (8.27)$$

Para quantificar a deformação da bolha define-se o parâmetro ϕ :

$$\phi = (R_{max} - R_{min}) / (R_{max} + R_{min}), \quad (8.28)$$

$$R_{max, min} = \max_{ij}, \min_{ij} \{ |(x_c, y_c) - [(x_{ij}, y_{ij}) + |d_c| \cdot (n_x, n_y)]|_2 \}, \quad (8.29)$$

$$0 < f_{ij} < 1, \quad i \in \{1, \dots, N_x\}, \quad j \in \{1, \dots, N_y\}, \quad (8.30)$$

sendo a distância do centro da célula à reta da interface (3.19).

Os resultados são exibidos em Fig 44 e Fig 45.

Figura 44 – Parâmetro ϕ em função do tempo, sendo (F) de (FIGUEIREDO, 2016).

Figura 45 – Interface (valores adimensionais) em $t = 10$, sendo (F) de (FIGUEIREDO, 2016).

CONCLUSÃO

Neste trabalho, foi incorporado o módulo bifásico ao sistema HIG-FLOW, com tratamento da interface pela técnica VOF, para a simulação de escoamentos viscoelásticos.

Figura 46 – Esta malha hierárquica, modifica-se para acompanhar a interface e possui maior resolução nas vizinhanças da mesma.

Fonte: [Popinet \(2009\)](#).

Embora limitado a duas dimensões, bifásico, malhas uniformes, e com um modelo de viscoelasticidade diferencial (Oldroyd-B) relativamente simples (quando comparado a modelos mais sofisticados e realistas, como os modelos integrais, que também estão

em implementação no HIG-FLOW), puderam ser levantadas dificuldades de natureza computacional, numérica, e de factibilidade, nos processos de codificação e verificação dos resultados em simulações de escoamentos bifásicos com viscoelasticidade.

A6	E=237 M= 8.2×10^{-4} Re=259		Bo*=237 Re*=357 U*= Unstable
A7	E=339 M=43.1 Re=18.3		Bo*=339 Re*=30.83 U*=0.581
A8	E=641 M=43.1 Re=30.3		Bo*=641 Re*=49.72 U*= 6.02×10^{-1}

Figura 47 – Para capturar os filamentos e as rupturas nas interfaces acima com a técnica VOF, necessita-se de maior resolução para o método HF (Fig 9).

Fonte: [Hua e Lou \(2007\)](#).

Esta experiência, certamente motivará o desenvolvimento de trabalhos futuros, como por exemplo a incorporação de módulos, em princípio, n-fásicos, em três dimensões com domínios mais gerais, e malhas mais complexas. Algumas questões a considerar, se o método VOF for escolhido para tratar a interface, tratam-se de malhas hierárquicas que se modificam no tempo, conforme Fig 46.

Na referência ([POPINET, 2009](#)), tal procedimento é adotado, e como se pode observar, não parece nada simples: em termos de custo e técnica, deverá haver remalhamento ao longo da simulação, com questões de interpolação relevantes (como transferir a informação da malha anterior para a malha atualizada), como calcular os fluxos (Sec 3.5.2) entre células com diferentes níveis de refinamento, como estabelecer critérios para a frequência do remalhamento. Não obstante, em três dimensões aproximações lineares (planar) da interface pela técnica PLIC (Sec 3.3), demandariam um alto número de casos a serem analisados, e versões mais complexas dos casos em p.43, p.48, e p.50, por exemplo.

As questões acima demonstram a dificuldade ao se utilizar uma única malha para simular um escoamento bifásico, indicando uma maior facilidade para se implementar o *Front-Tracking* (LAGES, 2016), controlando-se a resolução da interface, sem estas preocupações.

Ainda assim, surge o custo para se trabalhar com outra malha e, não obstante o método VOF-HF permite estratégias de paralelização que podem ser atrativas. Resoluções maiores em interfaces são fundamentais para baratear o custo de simulações, e mesmo para tratar dificuldades topológicas como rupturas da interface ou filamentos em casos mais críticos, como exibido em Fig 47.

Figura 48 – As figuras acima mostram que uma bolha (newtoniana) em ascensão, numa matriz viscoelástica, pode não apresentar axissimetria, observando-se também um ponto anguloso (cúspide) no bordo de fuga.

Em problemas envolvendo bolhas em ascensão em meios viscoelásticos, mais fenômenos são constatados, como a ausência de aximetria, formação de pontos angulosos (cúspides) (Fig 48) e descontinuidade da velocidade, como nos estudos experimentais de (LIU; LIAO; JOSEPH, 1995), e nos estudos qualitativos numéricos de (PILLAPAKKAM *et al.*, 2007) (com modelo Oldroyd-B para tratar a viscoelasticidade), sendo necessários estudos em três dimensões, com malhas mais refinadas, o que certamente exige aprimoramento das técnicas utilizadas até o momento.

Para trabalhos futuros, pretendemos tornar o sistema HIG-FLOW operacional

para a simulação de escoamentos viscoelásticos, com modelos constitutivos integrais, multifásicos, tridimensionais em domínios complexos, com controle de refinamento sobre a interface e estratégias de paralelização apropriadas para realização de simulações mais realistas em tempo factível.

REFERÊNCIAS

BALCÁZAR, N.; LEHMKUHL, O.; JOFRE, L.; OLIVA, A. Level-set simulations of buoyancy-driven motion of single and multiple bubbles. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, Elsevier, v. 56, p. 91–107, 2015. Citado na página [113](#).

BEZERRA, W. D. S.; CASTELO, A.; AFONSO, A. M. Numerical study of electro-osmotic fluid flow and vortex formation. **Micromachines**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 10, n. 12, p. 796, 2019. Citado nas páginas [88](#) e [89](#).

BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O. Dynamics of polymeric liquids. vol. 1: Fluid mechanics. 1987. Citado nas páginas [9](#), [24](#), [25](#), [27](#), [140](#), [145](#), [147](#), [148](#), [149](#), [150](#), [151](#), [152](#), [153](#), [155](#) e [156](#).

BORNIA, G.; CERVONE, A.; MANSERVISI, S.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. On the properties and limitations of the height function method in two-dimensional cartesian geometry. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 230, n. 4, p. 851–862, 2011. Citado nas páginas [32](#), [33](#), [35](#), [36](#) e [61](#).

BOWEN, R. M.; WANG, C.-C. **Introduction to vectors and tensors. 1. Linear and multilinear algebra**. [S.l.]: Plenum Press, 1976. Citado nas páginas [135](#) e [139](#).

CHINYOKA, T.; RENARDY, Y.; RENARDY, M.; KHISMATULLIN, D. Two-dimensional study of drop deformation under simple shear for oldroyd-b liquids. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 130, n. 1, p. 45–56, 2005. Citado nas páginas [84](#), [109](#) e [122](#).

CHORIN, A. J.; MARSDEN, J. E. **A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 4. Citado nas páginas [66](#), [67](#), [68](#), [150](#) e [152](#).

CUMMINS, S. J.; FRANCOIS, M. M.; KOTHE, D. B. Estimating curvature from volume fractions. **Computers & structures**, Elsevier, v. 83, n. 6-7, p. 425–434, 2005. Citado nas páginas [32](#) e [35](#).

DREYER, M. **Free surface flows under compensated gravity conditions**. [S.l.]: Springer, 2007. v. 221. Citado na página [74](#).

- FIGUEIREDO, R. A. **Simulação numérica de escoamentos viscoelásticos multifásicos complexos**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2016. Citado nas páginas 11, 30, 31, 51, 71, 74, 81, 84, 85, 87, 88, 89, 96, 109, 113, 122, 123 e 124.
- FRANCO, N. B. **Cálculo numérico**. [S.l.]: Pearson, 2006. Citado na página 61.
- FYFE, D. E.; ORAN, E. S.; FRITTS, M. **Surface tension and viscosity with Lagrangian hydrodynamics on a triangular mesh**. [S.l.], 1988. Citado na página 114.
- GUEDES, R. M. **Creep and Fatigue in Polymer Matrix Composites**. [S.l.]: Elsevier, 2010. Citado nas páginas 9, 26 e 27.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. **The physics of fluids**, AIP, v. 8, n. 12, p. 2182–2189, 1965. Citado nas páginas 75 e 81.
- HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981. Citado na página 30.
- HUA, J.; LOU, J. Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 222, n. 2, p. 769–795, 2007. Citado nas páginas 109 e 126.
- HYSING, J. S.-R.; TUREK, S. Evaluation of commercial and academic cfd codes for a two-phase flow benchmark test case. **International journal of computational science and engineering**, Inderscience Publishers (IEL), v. 10, n. 4, p. 387–394, 2015. Citado na página 109.
- HYSING, S.; TUREK, S.; KUZMIN, D.; PAROLINI, N.; BURMAN, E.; GANESAN, S.; TOBISKA, L. Proposal for quantitative benchmark computations of bubble dynamics. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, 2007. Citado nas páginas 11, 13, 109, 116, 117 e 119.
- JR, J. E. P.; PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 199, n. 2, p. 465–502, 2004. Citado na página 32.
- KALLAND, K. M. **A Navier-Stokes Solver for Single-and Two-Phase Flow**. Dissertação (Mestrado), 2008. Citado nas páginas 11, 71, 109, 120 e 121.
- KELLY, P. **Mechanics lecture notes: An introduction to solid mechanics**. 2019. Citado nas páginas 24 e 26.

LAGES, C. F. A. **Métodos numéricos para escoamentos multifásicos em malhas hierárquicas**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2016. Citado nas páginas 30, 70, 74, 77, 81, 85, 87, 88, 91 e 127.

LEVEQUE, R. J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. [S.l.]: Siam, 2007. v. 98. Citado na página 75.

LIMA, E. L. **Álgebra linear**. [S.l.: s.n.], 2006. Citado nas páginas 135, 143, 147 e 148.

LIMA, G. A. B. d. **Desenvolvimento de estratégias de captura de discontinuidades para leis de conservação e problemas relacionados em dinâmica de fluidos**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2010. Citado na página 90.

LIU, Y.; LIAO, T.; JOSEPH, D. A two-dimensional cusp at the trailing edge of an air bubble rising in a viscoelastic liquid. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 304, p. 321–342, 1995. Citado na página 127.

LODGE, A. S. **Body tensor fields in continuum mechanics: With applications to polymer rheology**. [S.l.]: Academic Press, 2014. Citado nas páginas 135 e 139.

MACOSKO, C. W.; LARSON, R. G. **Rheology: principles, measurements, and applications**. Vch New York, 1994. Citado nas páginas 9, 20, 23, 25, 26 e 28.

MALVERN, L. E. **Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium**. [S.l.: s.n.], 1969. Citado nas páginas 66, 67, 68, 69, 70, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 143, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 152, 153 e 157.

MEDEIROS, D. d. O. Tratamento numérico da condição de tensão normal para métodos de projeção em escoamentos com superfície livre. Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2017. Citado na página 30.

MOLDENAERS, P.; KEUNINGS, R. **Theoretical and Applied Rheology: Proceedings of the XIth International Congress on Rheology, Brussels, Belgium, August 17-21, 1992**. [S.l.]: Elsevier, 2013. Citado na página 153.

MOROZOV, A.; SPAGNOLIE, S. E. Introduction to complex fluids. In: **Complex Fluids in Biological Systems**. [S.l.]: Springer, 2015. p. 3–52. Citado nas páginas 145, 147, 150, 152, 153, 155 e 156.

OLSSON, E.; KREISS, G. A conservative level set method for two phase flow. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 210, n. 1, p. 225–246, 2005. Citado nas páginas 11, 109, 120 e 121.

- PATEL, H.; KUIPERS, J.; PETERS, E. Computing interface curvature from volume fractions: A hybrid approach. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 161, p. 74–88, 2018. Citado na página [32](#).
- PILLAPAKKAM, S. B.; SINGH, P. A level-set method for computing solutions to viscoelastic two-phase flow. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 174, n. 2, p. 552–578, 2001. Citado nas páginas [84](#) e [109](#).
- PILLAPAKKAM, S. B.; SINGH, P.; BLACKMORE, D.; AUBRY, N. Transient and steady state of a rising bubble in a viscoelastic fluid. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 589, p. 215–252, 2007. Citado na página [127](#).
- POPINET, S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 228, n. 16, p. 5838–5866, 2009. Citado nas páginas [32](#), [35](#), [37](#), [99](#), [125](#) e [126](#).
- PROSPERETTI, A.; TRYGGVASON, G. **Computational methods for multiphase flow**. [S.l.]: Cambridge university press, 2009. Citado na página [29](#).
- PUCKETT, E. G.; ALMGREN, A. S.; BELL, J. B.; MARCUS, D. L.; RIDER, W. J. A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 130, n. 2, p. 269–282, 1997. Citado nas páginas [30](#), [51](#), [52](#) e [90](#).
- RENARDY, Y.; RENARDY, M. Prost: a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 183, n. 2, p. 400–421, 2002. Citado na página [87](#).
- RIBERA, R. L. *et al.* Understanding the dynamics of gas-liquid-solid contact points. Universidade Federal de Uberlândia, 2015. Citado nas páginas [30](#), [51](#), [59](#), [70](#), [71](#), [81](#), [84](#) e [87](#).
- SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. **Annual review of fluid mechanics**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 31, n. 1, p. 567–603, 1999. Citado nas páginas [30](#), [31](#), [37](#) e [40](#).
- SEDOV, L. I. **Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium**. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1965. Citado nas páginas [146](#) e [150](#).
- SIQUIERI, R. d. S. **Análise e implementação de modelos não newtonianos no sistema FreeFlow-2D**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2002. Citado na página [71](#).

SOUSA, F. D.; MANGIAVACCHI, N.; NONATO, L. G.; CASTELO, A.; TOMÉ, M. F.; FERREIRA, V. G.; CUMINATO, J. A.; MCKEE, S. A front-tracking/front-capturing method for the simulation of 3d multi-fluid flows with free surfaces. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 198, n. 2, p. 469–499, 2004. Citado nas páginas 87, 88 e 109.

SOUSA, F. S.; OISHI, C. M.; BUSCAGLIA, G. C. Spurious transients of projection methods in micro flow simulations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 285, p. 659–693, 2015. Citado nas páginas 75 e 88.

SOUSA, F. S. d.; LAGES, C.; ANSONI, J. L.; CASTELO, A.; SIMAO, A. A finite difference method with meshless interpolation for incompressible flows in non-graded tree-based grids. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 396, p. 848–866, 2019. Citado nas páginas 75 e 77.

ŠTRUBELJ, L.; TISELJ, I.; MAVKO, B. Simulations of free surface flows with implementation of surface tension and interface sharpening in the two-fluid model. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, Elsevier, v. 30, n. 4, p. 741–750, 2009. Citado nas páginas 11, 13, 109, 113, 114, 115, 116, 117 e 119.

TOMÉ, M. F.; CASTELO, A.; AFONSO, A. M.; ALVES, M. A.; PINHO, F. T. d. Application of the log-conformation tensor to three-dimensional time-dependent free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 175, p. 44–54, 2012. Citado nas páginas 88 e 89.

TOMÉ, M. F.; CASTELO, A.; FERREIRA, V. G.; MCKEE, S. A finite difference technique for solving the oldroyd-b model for 3d-unsteady free surface flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, Elsevier, v. 154, n. 2-3, p. 179–206, 2008. Citado na página 90.

TRYGGVASON, G.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. **Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado nas páginas 30 e 41.

VIEZEL, C. Estudos teóricos e numéricos de escoamentos com escorregamento. Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2015. Citado nas páginas 90 e 101.

YUE, P.; ZHOU, C.; FENG, J. J.; OLLIVIER-GOOCH, C. F.; HU, H. H. Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 219, n. 1, p. 47–67, 2006. Citado nas páginas 84 e 109.

ZAINALI, A.; TOFIGHI, N.; SHADLOO, M. S.; YILDIZ, M. Numerical investigation of newtonian and non-newtonian multiphase flows using isph method. **Computer Methods**

in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier, v. 254, p. 99–113, 2013. Citado nas páginas [96](#) e [109](#).

TENSORES

Para entender alguns modelos diferenciais constitutivos, são necessárias algumas ideias das aplicações multilineares, especialmente o conceito de tensor. Para uma análise mais abrangente, sugerem-se (BOWEN; WANG, 1976; LODGE, 2014). Neste capítulo, adapta-se a abordagem encontrada em (MALVERN, 1969). Neste trabalho, haverá atenção sobre tensores e suas representações. Nos modelos constitutivos viscoelásticos, operações sobre tensores são frequentes, sendo por isto necessária uma discussão.

A.1 Coordenadas contra-variantes e co-variantes em vetores

Prop A.1. Seja V um espaço vetorial com produto interno $\langle, \rangle$. $\underline{B} = \{b_1, b_2, \dots, b_n\} \subset V$ base de V . Existe uma única base $\overline{B} = \{b^1, b^2, \dots, b^n\} \subset V$ com a seguinte propriedade:

$$\langle b_i, b^j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Dem: (LIMA, 2006, p. 49) $\square$

Def A.1. A base $\bar{B}$ acima será dita *base dual* (ou recíproca) da base $\underline{B}$ (MALVERN, 1969, p. 573).

Def A.2. (*Coordenadas contra-variantes e co-variantes em vetores*) Seja V um espaço vetorial com produto interno $\langle, \rangle$. $\underline{B} = \{b_1, b_2, \dots, b_n\} \subset V$ uma base de V e $\bar{B} = \{b^1, b^2, \dots, b^n\} \subset V$ a base dual de $\underline{B}$. Para cada $v \in V$ denotam-se:

$$v = v^1 b_1 + \dots + v^n b_n, \quad (\text{A.1})$$

$$v = v_1 b^1 + \dots + v_n b^n. \quad (\text{A.2})$$

Em (A.1) as coordenadas v^i serão ditas contra-variantes. Em (A.2), co-variantes. A razão dos prefixos *co* e *contra* será esclarecida na próxima seção.

A.2 Mudança de coordenadas para vetores

Def A.3. (*Equivalência entre representações de um vetor*) Sejam V um espaço vetorial, $\underline{B} = \{b_1, \dots, b_n\}$, $\underline{B}' = \{b'_1, \dots, b'_n\}$ bases de V . Então:

$$b'_i = a_i^1 b_1 + \dots + a_i^n b_n, \quad \underline{b}' = A \underline{b}, \quad A_{ij} = a_i^j, \quad (\text{A.3})$$

$$b_i = c_i^1 b'_1 + \dots + c_i^n b'_n, \quad \underline{b} = C \underline{b}', \quad C_{ij} = c_i^j. \quad (\text{A.4})$$

Para cada $v \in V$ a equivalência entre representações de um vetor de v é expressa por:

$$v = v^1 b_1 + \dots + v^n b_n = v'^1 b'_1 + \dots + v'^n b'_n. \quad (\text{A.5})$$

A equação (A.5) é necessária para determinar a relação entre v^i (coordenadas de v na base $\underline{B}$) e v'^i (coordenadas de v na base $\underline{B}'$). Pela equivalência entre representações,

mais a equação (A.4):

$$\begin{aligned} v &= v^1 b'_1 + \cdots + v^n b'_n = v^1 b_1 + \cdots + v^n b_n = \\ &= v^1 (c_1^1 b'_1 + c_1^2 b'_2 + \cdots + c_1^n b'_n) + \cdots + v^n (c_n^1 b'_1 + c_n^2 b'_2 + \cdots + c_n^n b'_n) = \\ &= (c_1^1 v^1 + c_2^1 v^2 + \cdots + c_n^1 v^n) b'_1 + (c_1^2 v^1 + c_2^2 v^2 + \cdots + c_n^2 v^n) b'_2 + \cdots + (c_1^n v^1 + c_2^n v^2 + \cdots + c_n^n v^n) b'_n = \\ &= v'^1 b'_1 + v'^2 b'_2 + \cdots + v'^n b'_n. \end{aligned}$$

Assim:

$$\begin{aligned} v'^1 &= c_1^1 v^1 + c_2^1 v^2 + \cdots + c_n^1 v^n, \\ &\vdots \\ v'^n &= c_1^n v^1 + c_2^n v^2 + \cdots + c_n^n v^n. \end{aligned}$$

Note-se:

$$b'_i = a_i^1 b_1 + \cdots + a_i^n b_n, \quad \underline{b'} = A \underline{b}, \quad (\text{A.6})$$

$$v'^i = c_1^i v^1 + c_2^i v^2 + \cdots + c_n^i v^n, \quad [v]_{\underline{B'}} = C^t [v]_{\underline{B}}, \quad (\text{A.7})$$

$$b_i = c_i^1 b'_1 + \cdots + c_i^n b'_n, \quad \underline{b} = C \underline{b'}. \quad (\text{A.8})$$

A mudança de coordenadas v^i para v'^i (A.7) ocorre de maneira "contrária" à de b_i para b'_i (A.6), por isso o termo contra-variante para v^i (MALVERN, 1969, p. 577). Atente-se ao uso de colchetes em (A.7): eles serão utilizados sempre quando ocorrer uma mudança de coordenadas, sinalizando uma operação matricial (produto da matriz C^t pela matriz-coluna $[v]_{\underline{B}}$). As matrizes A (A.6) e C (A.8) são inversas uma da outra. De fato:

$$b_i = \sum_j c_i^j b'_j = \sum_j c_i^j \sum_k a_j^k b_k = \sum_k \left(\sum_j c_i^j a_j^k \right) b_k \Rightarrow \sum_j c_i^j a_j^k = \delta_{ik}. \quad (\text{A.9})$$

Na equação acima, δ_{ik} é o delta de Kronecker (Prop A.1). Agora será discutida a razão do termo co-variante.

Como $v = v^1 b_1 + \cdots + v^n b_n$, tomando-se o produto interno dos dois membros por b^i . Igualmente, para $v = v'^1 b'_1 + \cdots + v'^n b'_n$, obtêm-se as coordenadas (contra-variantes)

v^i, v'^i de v :

$$v^i = \langle v, b^i \rangle, \quad (\text{A.10})$$

$$v'^i = \langle v, b'^i \rangle. \quad (\text{A.11})$$

Analogamente para $v = v_1 b^1 + \dots + v_n b^n$ e $v = v'_1 b^1 + \dots + v'_n b^n$, obtêm-se cada coordenada (co-variante) v_i, v'_i de v :

$$v_i = \langle v, b_i \rangle, \quad (\text{A.12})$$

$$v'_i = \langle v, b'_i \rangle. \quad (\text{A.13})$$

Tem-se a seguinte relação:

$$\begin{aligned} v'_i &\stackrel{(\text{A.13})}{=} \langle v, b'_i \rangle \stackrel{(\text{A.6})}{=} \langle v, a_i^1 b_1 + \dots + a_i^n b_n \rangle = \\ &a_i^1 \langle v, b_1 \rangle + a_i^2 \langle v, b_2 \rangle + \dots + a_i^n \langle v, b_n \rangle \stackrel{(\text{A.12})}{=} a_i^1 v_1 + a_i^2 v_2 + \dots + a_i^n v_n \Rightarrow \\ v'_i &= a_i^1 v_1 + a_i^2 v_2 + \dots + a_i^n v_n. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Novamente:

$$b'_i = a_i^1 b_1 + \dots + a_i^n b_n, \quad \underline{b'} = A \underline{b}, \quad (\text{A.15})$$

$$v'_i = a_i^1 v_1 + a_i^2 v_2 + \dots + a_i^n v_n, \quad [v]_{\underline{b'}} = A[v]_{\underline{b}}, \quad (\text{A.16})$$

$$b_i = c_i^1 b'_1 + \dots + c_i^n b'_n, \quad \underline{b} = C \underline{b'}. \quad (\text{A.17})$$

A mudança de coordenadas v_i para v'_i (A.16) ocorre de maneira "análoga" à mudança de b_i para b'_i (A.15). Por isso o termo co-variante para v_i (MALVERN, 1969, p. 578).

Representam-se as equações [(A.6) , (A.7) , (A.8)] e [(A.15) , (A.16) , (A.17)] do seguinte modo:

$$\underline{B} \xrightarrow{A} \underline{B'} \quad \underline{B} \xrightarrow{A} \underline{B'} \quad (\underline{B} \xrightarrow{A^{-t}} \underline{B'}) \quad (\text{A.18})$$

$$v^i \xrightarrow{A^{-t}} v'^i \quad v_i \xrightarrow{A} v'_i \quad (\text{A.19})$$

$$[v]_{\underline{B}} \rightarrow A^{-t} [v]_{\underline{B}} = [v]_{\underline{B'}} \quad [v]_{\underline{B}} \rightarrow A [v]_{\underline{B}} = [v]_{\underline{B'}} \quad (\text{A.20})$$

$$\text{contra-variante} \quad \text{co-variante} \quad (\text{A.21})$$

Sendo $A^{-t} \stackrel{(A.9)}{=} C^t$. Na segunda coluna de (A.18):

$$\begin{aligned} b'^i &= x_1^i b^1 + x_2^i b^2 + \cdots + x_n^i b^n, \quad x_j^i = \langle b'^i, b_j \rangle = \langle b'^i, c_j^1 b'_1 + \cdots + c_j^n b'_n \rangle = \\ &= c_j^1 \langle b'^i, b'_1 \rangle + \cdots + c_j^n \langle b'^i, b'_n \rangle = c_j^i = x_j^i \Rightarrow \\ b'^i &= c_1^i b^1 + c_2^i b^2 + \cdots + c_n^i b^n \stackrel{(A.17)}{\Rightarrow} \bar{b}' = C^t \bar{b} \stackrel{(A.9)}{\Rightarrow} \bar{b}' = A^{-t} \bar{b}. \end{aligned} \quad (A.22)$$

A.3 Tensor como operador linear

Def A.4. Seja V um espaço vetorial. Um tensor T é uma aplicação $T : V \rightarrow V$ com as seguintes propriedades (MALVERN, 1969, p. 579):

$$\begin{aligned} T(u + v) &= T(u) + T(v), \quad u, v \in V, \\ T(\alpha v) &= \alpha T(v), \quad v \in V. \end{aligned}$$

Obs A.1. Formalmente, um tensor não é uma aplicação linear (BOWEN; WANG, 1976, p. 218), (LODGE, 2014, p. 99). Sabe-se da Álgebra Linear que as aplicações lineares (entre espaços vetoriais de dimensão finita) podem ser identificadas com as matrizes. Da mesma forma que as coordenadas de um vetor alteram-se, conforme se muda de base, a matriz que identifica um tensor também se modifica, quando se troca de base. Como esta modificação ocorre, será visto logo adiante.

Def A.5. (*Matriz de um tensor*) Sejam V um espaço vetorial, $T : V \rightarrow V$, um tensor e $\underline{B} = \{b_1, \dots, b_n\}$, $\underline{U} = \{u_1, \dots, u_n\}$, bases de V . Considerem-se as seguintes relações, $i \in \{1, \dots, n\}$:

$$T(b_i) = D_i^1 u_1 + D_i^2 u_2 + \dots + D_i^n u_n, \quad T(\underline{b}) = D \underline{u}. \quad (A.23)$$

A matriz de $T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}$ em relação às bases $\underline{B}, \underline{U}$ é definida por $T_{ij}^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}} = D_j^i$, $T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}} = D^t$.

Obs A.2. Há autores que adotam $T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}} = D$. Para facilitar a leitura, $T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}$ poderá ser denotada entre colchetes: $T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}} = [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}]$.

$$\begin{aligned} \text{Seja } v &= v^1 b_1 + v^2 b_2 + v^n b_n, \quad T(v) = T(v^1 b_1 + v^2 b_2 + v^n b_n) = v^1 T(b_1) + v^2 T(b_2) + \\ &+ v^n T(b_n) = v^1 (D_1^1 u_1 + D_1^2 u_2 + \cdots + D_1^n u_n) + v^2 (D_2^1 u_1 + D_2^2 u_2 + \cdots + D_2^n u_n) + \cdots + v^n (D_n^1 u_1 + \end{aligned}$$

$$D_n^2 u_2 + \cdots + D_n^n u_n = (D_1^1 v^1 + D_2^1 v^2 + \cdots + D_n^1 v^n) u_1 + (D_1^2 v^1 + D_2^2 v^2 + \cdots + D_n^2 v^n) u_2 + \cdots + (D_1^n v^1 + D_2^n v^2 + \cdots + D_n^n v^n) u_n = T(v)^1 u_1 + T(v)^2 u_2 + \cdots + T(v)^n u_n.$$

Para $i \in \{1, \dots, n\}$:

$$T(v)^i = D_1^i v^1 + \cdots + D_n^i v^n, \quad [T(v)]_{\underline{U}} \stackrel{(\text{Obs A.3})}{=} D^t[v]_{\underline{B}}, \quad [T(v)]_{\underline{U}} = [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}][v]_{\underline{B}}, \quad (\text{A.24})$$

$$T(b_i) = D_i^1 u_1 + \cdots + D_i^n u_n, \quad T(\underline{b}) = D \underline{u}, \quad T(\underline{b}) = [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}]^t \underline{u}. \quad (\text{A.25})$$

Obs A.3. Nas 2ª e 3ª colunas de (A.24), a matriz do tensor T está multiplicando a esquerda os coeficientes vetor v . Em (MALVERN, 1969, p. 31) e (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 568), considera-se também que a matriz de T possa multiplicar a direita: $[T(v)]_{\underline{U}} = [v]_{\underline{B}}^t D$. Isto pode gerar confusão: saber qual convenção está sendo utilizada.

A.4 Mudança de coordenadas para tensores

Def A.6. (*Equivalência entre representações de um tensor*) Sejam V um espaço vetorial, $T : V \rightarrow V$, um tensor, $\underline{B} = \{b_1, \dots, b_n\}$, $\underline{U} = \{u_1, \dots, u_n\}$, $\underline{B}' = \{b'_1, \dots, b'_n\}$, $\underline{U}' = \{u'_1, \dots, u'_n\}$, bases de V . A equivalência entre representações de T é expressa por:

$$T(v) = T(v)^1 u_1 + \cdots + T(v)^n u_n = T(v)^{t1} u'_1 + \cdots + T(v)^{tn} u'_n, \quad (\text{A.26})$$

$$v = v^1 b_1 + \cdots + v^n b_n = v^{t1} b'_1 + \cdots + v^{tn} b'_n. \quad (\text{A.27})$$

Estas duas últimas equações são necessárias para encontrar a relação entre $T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}$ a matriz de T nas bases $\underline{B}, \underline{U}$ e $T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{U}'}$ a matriz de T nas bases $\underline{B}', \underline{U}'$. Na próxima proposição a relação será determinada.

Prop A.2. Sejam $T : V \rightarrow V$ um tensor, $\underline{B} = \{b_1, \dots, b_n\}$, $\underline{U} = \{u_1, \dots, u_n\}$, $\underline{B}' = \{b'_1, \dots, b'_n\}$, $\underline{U}' = \{u'_1, \dots, u'_n\}$, bases de V , $i, j \in \{1, \dots, n\}$, com:

$$b'_i = \sum_j a_i^j b_j \quad (\underline{b}' = A \underline{b}), \quad b_i = \sum_j c_i^j b'_j \quad (\underline{b} = C \underline{b}') \quad (\text{A.28})$$

$$u'_i = \sum_j r_i^j u_j \quad (\underline{u}' = R \underline{u}), \quad u_i = \sum_j s_i^j u'_j \quad (\underline{u} = S \underline{u}'). \quad (\text{A.29})$$

Considerem-se $D^t = T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}$ a matriz de T nas bases $\underline{B}, \underline{U}$ e $D'^t = T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{U}'}$ a matriz de T nas bases $\underline{B}', \underline{U}'$:

$$T(b_i) = D_i^1 u_1 + D_i^2 u_2 + \cdots + D_i^n u_n, \quad [T(v)]_{\underline{U}} = D^t [v]_{\underline{B}}, \quad (\text{A.30})$$

$$T(b'_i) = D'^t_i u'_1 + D'^t_i u'_2 + \cdots + D'^t_i u'_n, \quad [T(v)]_{\underline{U}'} = D'^t [v]_{\underline{B}'}. \quad (\text{A.31})$$

Então $D^t = T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}$ e $D'^t = T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{U}'}$ relacionam-se por:

$$D'^t = S^t D^t C^{-t}, \quad T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{U}'} = S^t [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{U}}] C^{-t}. \quad (\text{A.32})$$

Dem:

Pela equivalência entre representações de T (Def A.6):

$$T(v) = T(v)^1 u_1 + \cdots + T(v)^n u_n = T(v)^1 u'_1 + \cdots + T(v)^n u'_n, \quad (\text{A.33})$$

$$v = v^1 b_1 + \cdots + v^n b_n = v'^1 b'_1 + \cdots + v'^n b'_n. \quad (\text{A.34})$$

De [(A.6), (A.7), (A.8)], tem-se ($v = v^1 b_1 + \cdots + v^n b_n = w^1 u_1 + \cdots + w^n u_n$):

$$b'_i = a_i^1 b_1 + \cdots + a_i^n b_n, \quad \underline{b}' = A \underline{b}, \quad u'_i = r_i^1 u_1 + \cdots + r_i^n u_n, \quad \underline{u} = R \underline{u}, \quad (\text{A.35})$$

$$v'^i = c_i^1 v^1 + \cdots + c_i^n v^n, \quad [v]_{\underline{B}'} = C^t [v]_{\underline{B}}, \quad w'^i = s_i^1 w^1 + \cdots + s_i^n w^n, \quad [v]_{\underline{U}'} = S^t [v]_{\underline{U}}, \quad (\text{A.36})$$

$$b_i = c_i^1 b'_1 + \cdots + c_i^n b'_n, \quad \underline{b} = C \underline{b}', \quad u_i = s_i^1 u'_1 + \cdots + s_i^n u'_n, \quad \underline{u} = S \underline{u}'. \quad (\text{A.37})$$

Logo:

$$\begin{aligned} D'^t [v]_{\underline{B}'} &\stackrel{(\text{A.31})}{=} [T(v)]_{\underline{U}'} \stackrel{(\text{A.33}), (\text{A.36})}{=} S^t [T(v)]_{\underline{U}} \stackrel{(\text{A.30})}{=} S^t D^t [v]_{\underline{B}} \Rightarrow \\ D'^t [v]_{\underline{B}'} &= S^t D^t v_{\underline{B}} \Rightarrow D'^t [v]_{\underline{B}'} \stackrel{(\text{A.34}), (\text{A.36})}{=} S^t D^t C^{-t} [v]_{\underline{B}'} \Rightarrow \\ D'^t &= S^t D^t C^{-t} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

□

Obs A.4. No diagrama em Fig 49, omitiu-se a presença dos traços (como em $\underline{Z}, \bar{\underline{Z}}$) para facilitar a notação, e também porque o resultado desta proposição independe da escolha particular das bases no domínio e contradomínio de T . Denotou-se ainda $T^{\underline{Z} \rightarrow \underline{U}}$ como $T^{\underline{Z}\underline{U}}$ por simplicidade.

Figura 49 – Diagrama ilustrando Prop A.2

Fonte: Elaborada pelo autor.

A.5 Coordenadas (Transformações) contra-variantes e co-variantes em tensores

No diagrama (Fig 49), tomando-se: $\{Z, Z'\} = \{\underline{B}, \underline{B}'\}$, e $\{U, U'\} = \{\bar{B}, \bar{B}'\}$, para: $T^{ZU} = T^{\underline{B} \rightarrow \bar{B}}$

e $T^{Z'U'} = T^{\underline{B}' \rightarrow \bar{B}'}$, com $M = A$. Como $R \stackrel{(A.18), (A.22)}{=} M^{-t} = A^{-t}$, tem-se:

$$[T^{\underline{B}' \rightarrow \bar{B}'}] = R^{-t} [T^{\underline{B} \rightarrow \bar{B}}] M^t \Rightarrow [T^{\underline{B}' \rightarrow \bar{B}'}] = A [T^{\underline{B} \rightarrow \bar{B}}] A^t. \quad (A.39)$$

Se no domínio da aplicação T for escolhida uma base $\underline{B}$, e no contra-domínio a base dual de $\underline{B}$, $\bar{B}$, e uma mudança de coordenadas do tipo $\underline{b}' = A \underline{b}$ ocorre, então a matriz de T muda de modo "análogo" à mudança de coordenadas $\underline{b}' = A \underline{b}$. Para esta escolha de bases, os coeficientes da matriz de um tensor são ditos co-variantes e denotados por T_{ij} .

Para $\{Z, Z'\} = \{\bar{B}, \bar{B}'\}$, e $\{U, U'\} = \{\underline{B}, \underline{B}'\}$, $T^{ZU} = T^{\bar{B} \rightarrow \underline{B}}$ e $T^{Z'U'} = T^{\bar{B}' \rightarrow \underline{B}'}$, com $R = A$. Como $M \stackrel{(A.18), (A.22)}{=} R^{-t} = A^{-t}$, tem-se:

$$[T^{\bar{B}' \rightarrow \underline{B}'}] = R^{-t} [T^{\bar{B} \rightarrow \underline{B}}] M^t \Rightarrow [T^{\bar{B}' \rightarrow \underline{B}'}] = A^{-t} [T^{\bar{B} \rightarrow \underline{B}}] A^{-1}. \quad (A.40)$$

Se no contra-domínio da aplicação T for escolhida uma base $\underline{B}$ e no domínio a base dual de $\underline{B}$, $\bar{B}$, e uma mudança de coordenadas $\underline{b}' = A \underline{b}$ ocorre, a matriz de T muda de modo "contrário" à mudança de coordenadas $\underline{b}' = A \underline{b}$. Para esta escolha, os coeficientes da matriz de um tensor são ditos contra-variantes e denotados por T^{ij} .

Outra possibilidade seria escolher $\{Z, Z'\} = \{\underline{B}, \underline{B}'\}$, e $\{U, U'\} = \{\underline{B}, \underline{B}'\}$, para $T^{ZU} = T^{\underline{B} \rightarrow \underline{B}}$ e $T^{Z'U'} = T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{B}'}$, com $R = M = A$:

$$[T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{B}'}] = R^{-t} [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{B}}] M^t \Rightarrow [T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{B}'}] = A^{-t} [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{B}}] A^t. \quad (\text{A.41})$$

Finalmente, tomando-se $\{Z, Z'\} = \{\bar{B}, \bar{B}'\}$, e $\{U, U'\} = \{\bar{B}, \bar{B}'\}$, para $T^{ZU} = T^{\bar{B} \rightarrow \bar{B}}$, e $T^{Z'U'} = T^{\bar{B}' \rightarrow \bar{B}'}$, com $R = M \stackrel{(\text{A.18}), (\text{A.22})}{=} A^{-t}$, obtendo-se:

$$[T^{\bar{B}' \rightarrow \bar{B}'}] = R^{-t} [T^{\bar{B} \rightarrow \bar{B}}] M^t \Rightarrow [T^{\bar{B}' \rightarrow \bar{B}'}] = A [T^{\bar{B} \rightarrow \bar{B}}] A^{-1}. \quad (\text{A.42})$$

As duas últimas equações acima são conhecidas como *transformações de similaridade ou semelhança* (LIMA, 2006, p. 90)

Def A.7. (*Transformações co-variantes, contra-variantes e mistas em tensores*) Para determinadas escolhas de bases, a matriz do tensor transforma-se de maneira especial. Nos modelos constitutivos diferenciais viscoelásticos tratados neste trabalho, a escolha das bases será tal que a mudança do tensor ocorra como em (A.39) ou (A.40). Abaixo resumem-se as transformações discutidas (MALVERN, 1969, p. 581):

$$\underline{B} \xrightarrow{A} \underline{B}'$$

$$[T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{B}'}] = A [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{B}}] A^t \quad \text{co-variante } (T^{ij}) \quad (\text{A.43})$$

$$[T^{\bar{B}' \rightarrow \bar{B}'}] = A^{-t} [T^{\bar{B} \rightarrow \bar{B}}] A^{-1} \quad \text{contra-variante } (T_{ij}) \quad (\text{A.44})$$

$$[T^{\underline{B}' \rightarrow \underline{B}'}] = A^{-t} [T^{\underline{B} \rightarrow \underline{B}}] A^t \quad \text{mista (semelhança)} \quad (\text{A.45})$$

$$[T^{\bar{B}' \rightarrow \bar{B}'}] = A [T^{\bar{B} \rightarrow \bar{B}}] A^{-1} \quad \text{mista (semelhança)} \quad (\text{A.46})$$

Obs A.5. As relações acima mostram como se comporta um tensor, para escolhas particulares de bases. Um tensor pode ser visto como um objeto, cuja representação matricial apresente alguma das leis de transformação obtidas acima. Tanto a transformação co-variante como a contra-variante preservam a "simetria" da matriz. As transformações mistas preservam, por exemplo, o determinante, o traço e o polinômio característico. Se as bases em relação às quais um tensor é representado são ortonormais então a matriz A acima será ortonormal e todas essas transformações irão coincidir, mostrando assim a conveniência de bases ortonormais na representação de um tensor.

DIFERENCIAÇÃO DE TENSORES, TENSORES DE DEFORMAÇÃO E DE CAUCHY

As deformações em um fluido viscoelástico, são analisadas em termos das coordenadas convectivas, obtidas do próprio fluido em deformação e movimento. No Apêndice [A](#) foi apresentado o conceito de tensor como um operador linear (Def [A.4](#)). Para certas escolhas de bases, a matriz do tensor transmuda-se de maneira especial (Obs [A.5](#)). As transformações co-variante e contra-variante serão consideradas. Apresentam-se o tensor de Cauchy e os tensores de Deformação, em particular, o Tensor Taxa de Deformação. Introduzem-se, também, o Princípio da Objetividade, as coordenadas convectivas, e a diferenciação no tempo de um tensor, nessas coordenadas. Estes conceitos aparecem nos modelos constitutivos viscoelásticos, por isso serão discutidos. As principais referências para este capítulo são ([MALVERN, 1969](#)), ([BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987](#)), ([MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015](#)). Procurou-se o máximo possível resumir as ideias sobre os tensores viscoelásticos apresentadas nestas referências, para uma familiarização com os tipos especiais de derivadas que aparecem, além de algumas nomenclaturas e convenções utilizadas.

B.1 Tensores de Deformação

Def B.1. (*Coordenadas lagrangeanas ou referenciais*) Considere-se um contínuo de partículas (pontos materiais) $P = M_1 Z_1 + M_2 Z_2 + M_3 Z_3 \in S(0) \subset \mathfrak{R}^3$, sendo $S(0)$ a configuração inicial (de referência), descrito por um conjunto de coordenadas lagrangeanas (M_1, M_2, M_3) , ou referenciais (MALVERN, 1969, p. 138), (SEDOV, 1965, p. 78), ou seja, relacionadas à configuração atual $S(t)$, $\mathfrak{R}^3 \supset S(t) \ni q = m_1 z_1 + m_2 z_2 + m_3 z_3$ por $p = \phi_t(P) = p(P, t)$ (leia-se: posição espacial da partícula P no tempo t), sendo esta relação suposta inversível $P = \phi_t^{-1}(p) = P(p, t)$ (leia-se: a partícula P que no tempo t ocupa a posição espacial p) para cada instante. Admitam-se $p(P, 0) = P$ e as funções ϕ_t, ϕ_t^{-1} diferenciáveis pelo menos até a ordem mais conveniente.

Def B.2. (*Equivalência entre representações na descrição lagrangeana*) Para a escolha das bases Z em $S(0)$ e z em $S(t)$, as coordenadas M_i de P e m_i de P , relacionam-se por:

$$m_i = m_i(M_1, M_2, M_3, t), \quad M_i = M_i(m_1, m_2, m_3, t). \quad (\text{B.1})$$

Para as bases Z' em $S(0)$ e z' em $S(t)$:

$$m'_i = m'_i(M'_1, M'_2, M'_3, t), \quad M'_i = M'_i(m'_1, m'_2, m'_3, t). \quad (\text{B.2})$$

Deste modo, a equivalência entre representações de ϕ_t (Def A.6) é expressa por:

$$\begin{aligned} m_1 z_1 + m_2 z_2 + m_3 z_3 &= m'_1 z'_1 + m'_2 z'_2 + m'_3 z'_3, \\ M_1 Z_1 + M_2 Z_2 + M_3 Z_3 &= M'_1 Z'_1 + M'_2 Z'_2 + M'_3 Z'_3. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Considerem-se P e $P + dP$, duas partículas muito próximas (posição relativa dP) em $S(0)$, então em $S(t)$, a posição relativa dp entre $\phi_t(P)$ e $\phi_t(P + dP)$, é escrita matricialmente nas bases Z e z por:

$$[dp]_z \stackrel{(\text{A.24})}{=} [\partial_{ZZ}] [dP]_Z, \quad [\partial_{ZZ}]_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial M_j}. \quad (\text{B.4})$$

Sejam:

$$z'_i = \sum_j h_{ij} z_j \quad (z' = hz), \quad Z'_i = \sum_j W_{ij} Z_j \quad (Z' = WZ). \quad (\text{B.5})$$

Analogamente a Prop (A.2) é possível mostrar que:

$$[\partial_{Z'Z'}] = h^{-t} [\partial_{ZZ}] W^t. \quad (\text{B.6})$$

Def B.3. (*Tensor Gradiente de Deformação*) A matriz $[\partial_{Zz}]_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial M_j}$ é dita a matriz do tensor gradiente de deformação (MALVERN, 1969, p. 156), (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 6), nas bases Z e z (Def A.5). Em (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 426), é dita *gradiente de deslocamento* (nas bases Z e z), embora em (MALVERN, 1969, p. 123, 124), este nome seja usado em situações nas quais os deslocamentos sofridos por um corpo ao deformar-se, sejam pequenos em comparação com a unidade. Este tensor será denotado por Γ :

$$\Gamma(P, t)(dP) = \Gamma(dP) = dp, \quad \Gamma = \frac{\partial}{\partial P} p(P, t). \quad (\text{B.7})$$

As equações (B.4) e (B.6) serão também escritas como:

$$[dp]_z \stackrel{(\text{A.24})}{=} [\Gamma^{Z \rightarrow z}][dP]_Z, \quad (\text{B.8})$$

$$[\Gamma^{Z' \rightarrow z'}] \stackrel{(\text{A.32})}{=} h^{-t} [\Gamma^{Z \rightarrow z}] W^t. \quad (\text{B.9})$$

Um resultado importante é o *Teorema da Decomposição Polar*. Este teorema diz que é possível decompor o tensor Γ , no produto (composição) de um tensor P não-negativo (*positivo-definido* se Γ é inversível, o que ocorre, pois ϕ_t é suposta inversível) e um tensor Q ortogonal, ou seja, a alteração de um elemento dP pode ser vista como uma rotação (movimento rígido) seguida de uma deformação ou vice-versa (MALVERN, 1969, p. 173).

Figura 50 – Diagrama ilustrando a decomposição polar de Γ (Teo B.1).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Teo B.1. (*Decomposição Polar*) Seja V um espaço vetorial de dimensão finita com produto interno. Todo operador linear $T : V \rightarrow V$, admite as decomposições $T = Q_r P_r = P_l Q_l$, sendo $P_r, P_l : V \rightarrow V$ não-negativos (LIMA, 2006, p. 161) e Q_r, Q_l ortogonais (LIMA, 2006, p. 179). Se T é inversível então cada decomposição é única.

Dem: Vejam-se (LIMA, 2006, p. 183, 184), (MALVERN, 1969, p. 178).

No teorema anterior, P_r e P_l , são determinados por:

$$P_r^2 = T^*T \quad (P_r = \sqrt{T^*T}), \quad P_l^2 = TT^* \quad (P_l = \sqrt{TT^*}) \quad (\text{B.10})$$

sendo T^* o adjunto de T (LIMA, 2006, p. 135) e $\sqrt{T^*T}$ a raiz quadrada do operador T^*T (LIMA, 2006, p. 163). A aplicação da equação anterior ao tensor gradiente de deformação Γ , permite definir outros tensores, listados abaixo.

Def B.4. (*Tensores de Deformação de Cauchy-Green a direita, de Cauchy-Green a esquerda, de Cauchy e de Finger*) Seja Γ o tensor gradiente de deformação. São notáveis as seguintes funções de Γ :

O tensor de Deformação de Cauchy-Green a direita, denotado por C , é definido por (MALVERN, 1969, p. 158, 174):

$$C = \Gamma^*\Gamma. \quad (\text{B.11})$$

O tensor de Deformação de Cauchy-Green a esquerda, ou tensor de Finger, denotado por B , é definido por (MALVERN, 1969, p. 158, 174, 410), (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 427):

$$B = \Gamma\Gamma^*. \quad (\text{B.12})$$

O tensor de Deformação Cauchy (inverso do tensor de Cauchy-Green a esquerda), denotado por B^{-1} , é definido por (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 427), (MALVERN, 1969, p. 158):

$$B^{-1} = (\Gamma\Gamma^*)^{-1} = (\Gamma^*)^{-1}\Gamma^{-1}. \quad (\text{B.13})$$

Agora serão apresentados os tensores gradiente de velocidade e taxa de deformação, que também aparecem nos modelos constitutivos viscoelásticos. Eles são obtidos quando se analisa a evolução no tempo do tensor gradiente de deformação, Γ (Def B.3), ou funções dele.

Diferenciando-se Γ no tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Gamma(P,t) \stackrel{(B.7)}{=} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial P} p(P,t) = \frac{\partial}{\partial P} \frac{\partial}{\partial t} p(P,t) = \frac{\partial}{\partial P} V(p(P,t),t) = \quad (B.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} V(p,t) \frac{\partial}{\partial P} p(P,t) = \nabla V \Gamma. \quad (B.15)$$

Diferenciando-se o tensor de Cauchy-Green a direita, $C = \Gamma^* \Gamma$ (B.11), no tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Gamma^* \Gamma \stackrel{(B.15)}{=} \Gamma^* (\nabla V^* + \nabla V) \Gamma = \Gamma^* (2D) \Gamma, \quad D = \frac{1}{2} (\nabla V^* + \nabla V). \quad (B.16)$$

Def B.5. (*Tensores Gradiente de Velocidade e Taxa de Deformação*) O tensor $\nabla V = \frac{\partial}{\partial p} V(p,t)$ (B.15) é conhecido como tensor gradiente de velocidade (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 296), (MALVERN, 1969, p. 142). O tensor D (B.16) é conhecido como tensor Taxa de Deformação (MALVERN, 1969, p. 148), (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 11), sendo ∇V^* o adjunto de ∇V (B.10). Vejam-se Obs B.1 para o tensor ∇V (convenção das componentes na sua representação matricial) e a Seção B.5 para D (objetividade deste tensor).

B.2 Tensor de Cauchy

Considerem-se um Tetraedro (de Cauchy) Π , envolvendo um ponto p com as hipóteses adotadas em (MALVERN, 1969, c. 3), e normais às suas faces dadas por $\{n_0, n_1, n_2, n_3\}$, com respectivas duais $\{n^1, n^2, n^3\}$ (Prop A.1).

Suponha-se que as tensões sobre as faces ortogonais a base $N = \{n_1, n_2, n_3\}$, sejam conhecidas: $\{\sigma(n_1), \sigma(n_2), \sigma(n_3)\}$. É possível mostrar que a tensão sobre a face normal a n_0 , $T(n_0)$ é dada por (MALVERN, 1969, p. 76):

$$\sigma(n_0) = \sum_j \langle n_0, n^j \rangle \sigma(n_j), \quad n_0 \stackrel{(A.10)}{=} \sum_j \langle n_0, n^j \rangle n_j, \quad j \in \{1, 2, 3\}. \quad (B.17)$$

A equação acima mostra que para cada ponto p , $\sigma(n)$ se comporta como uma aplicação linear (Def A.4). Agora é preciso especificar a base sobre a qual será expressa cada $\sigma(n_i)$. Seja $W = \{w_1, w_2, w_3\}$ esta base, então:

$$[\sigma(n)]_W \stackrel{(A.24)}{=} [\sigma^{N \rightarrow W}][n]_N. \quad (B.18)$$

Def B.6. (*Tensor de Cauchy*) As considerações acima permitem definir o tensor de Cauchy, σ (MALVERN, 1969, p. 77), (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 8), (CHORIN; MARSDEN, 2013, p. 32):

$$\sigma(p(P,t),t) : U \subset \mathfrak{R}^3 \rightarrow \mathfrak{R}^3, \quad (\text{B.19})$$

sendo U o conjunto dos vetores normais (unitários) e $p(P,t)$ como em Def B.1.

B.3 Coordenadas Convectivas

Def B.7. (*Base Convectiva*) Para um conjunto de coordenadas lagrangeanas (Def B.1):

$$p = p(P,t), \quad p = \sum_j x(a^1, a^2, a^3) e_j, \quad P = \sum_j a^j e_j, \quad (\text{B.20})$$

é definida a base $\underline{g} = \{g_1, g_2, g_3\} \subset \mathfrak{R}^3$:

$$g_i = \frac{\partial x}{\partial a^i} = \left(\frac{\partial x_1}{\partial a^i}, \frac{\partial x_2}{\partial a^i}, \frac{\partial x_3}{\partial a^i} \right) = \frac{\partial x_1}{\partial a^i} e_1 + \frac{\partial x_2}{\partial a^i} e_2 + \frac{\partial x_3}{\partial a^i} e_3. \quad (\text{B.21})$$

A base $\underline{g}$ é dita *base convectiva* (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 480), (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 24). Esta base está dada em termos da base canônica (usual) cartesiana $e = \{(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)\}$, e seus vetores serão tratados como matrizes-coluna, e, para facilitar a leitura, poderão ser escritos entre colchetes (como em $[g_i]$) quando alguma operação matricial for necessária (transposição $[g_i]^t$ ou produto escalar $\langle g_i, g_j \rangle = [g_i]^t [g_j]$).

Sejam a e $a + da$ duas partículas, $x(a)$ e $x(a + da)$ suas posições espaciais em t , então:

$$x(a + da) - x(a) = dx = \sum_i \frac{\partial x}{\partial a^i} da^i = \sum_i da^i g_i \Rightarrow \quad (\text{B.22})$$

$$\langle dx, dx \rangle = \left\langle \sum_i da^i g_i, \sum_j da^j g_j \right\rangle = \sum_{i,j} da^i da^j \langle g_i, g_j \rangle. \quad (\text{B.23})$$

O volume infinitesimal (SEDOV, 1965, p. 4) $d\forall$ de fluido envolvido no paralelepípedo formado por $\{da^1 g_1, da^2 g_2, da^3 g_3\}$ é dado por:

$$d\forall = da^1 da^2 da^3 |\det(\underline{G}^e)| = da^1 da^2 da^3 \sqrt{\det(\underline{C}^e)}, \quad (\text{B.24})$$

$$\underline{C}^e = \underline{G}^e \underline{G}^{e^t} \quad C_{ij}^e = \langle g_i, g_j \rangle = [g_i]^t [g_j] \quad \underline{G}^e = [g_1 \ g_2 \ g_3], \quad (\text{B.25})$$

sendo $\det(\underline{G}^e)$ o determinante da matriz, $\underline{G}^e$, a matriz do tensor gradiente de deformação (Def B.3) e $\underline{C}^e$ a matriz do tensor de Cauchy-Green a direita (Def B.11), ambas na base cartesiana.

Assim, os escalares $\langle g_i, g_j \rangle$ contêm a informação sobre a deformação de um fluido em t (Fig 51), e são ditos *coeficientes co-variantes métricos*. Segundo (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 481), todas as quantidades cinemáticas numa equação constitutiva, devem derivar desses coeficientes.

Figura 51 – Ilustração da base convectiva (bidimensional): g_1 tangente às linhas $a^2 - \text{const}$ e g_2 tangente às linhas $a^1 - \text{const}$. Essas linhas podem se deformar com o tempo. Quantificam-se essas deformações, propondo-se modelos constitutivos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Prop B.1. Seja $\underline{g} = \{g_1, g_2, g_3\} \subset \mathfrak{R}^3$ a base convectiva sobre uma partícula $a = (a^1, a^2, a^3)$. Então a base dual (Def A.1) $\bar{g} = \{g^1, g^2, g^3\} \subset \mathfrak{R}^3$ de $\underline{g}$ é dada por:

$$g^i = \frac{\partial a^i}{\partial x} = \left(\frac{\partial a^i}{\partial x_1}, \frac{\partial a^i}{\partial x_2}, \frac{\partial a^i}{\partial x_3} \right) = \frac{\partial a^i}{\partial x_1} e_1 + \frac{\partial a^i}{\partial x_2} e_2 + \frac{\partial a^i}{\partial x_3} e_3. \quad (\text{B.26})$$

Dem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a^i}{\partial a^j} = \delta_{ij} &\Rightarrow \delta_{ij} = \frac{\partial a^i}{\partial a^j} = \frac{\partial}{\partial a^j} a^i(x_1(a^1, a^2, a^3), x_2(a^1, a^2, a^3), x_3(a^1, a^2, a^3), t) = \\ &= \frac{\partial a^i}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial a^j} + \frac{\partial a^i}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial a^j} + \frac{\partial a^i}{\partial x_3} \frac{\partial x_3}{\partial a^j} = \langle g_i, g^j \rangle = \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

□

Prop B.2. Seja $\underline{g} = \{g_1, g_2, g_3\}$ a base convectiva sobre uma partícula $a = (a^1, a^2, a^3)$ e $\bar{g} = \{g^1, g^2, g^3\}$ a base dual de $\underline{g}$. Então (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 486):

$$i- D_t \underline{G}^e = \nabla V^e \underline{G}^e, \quad \underline{G}^e \stackrel{(B.25)}{=} [g_1 \ g_2 \ g_3]. \quad (B.28)$$

$$ii- D_t \bar{G}^e = -[\nabla V^e]^t \bar{G}^e, \quad \bar{G}^e = [g^1 \ g^2 \ g^3]. \quad (B.29)$$

sendo

$$D_t g_i = \partial_t g_i(x(a, t), t) \text{ a Derivada Material (CHORIN; MARSDEN, 2013, p. 5),} \quad (B.30)$$

$$V^e = u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3, \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs B.1})}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j. \quad (B.31)$$

Dem:

i-

$$D_t g_i = \partial_t (\partial_{a_i} x(a, t)) = \partial_{a_i} (\partial_t x(a, t)) = \partial_{a_i} V^e(x(a, t), t) = \partial_{x_1} V^e \partial_{a_i} x_1 + \partial_{x_2} V^e \partial_{a_i} x_2 + \partial_{x_3} V^e \partial_{a_i} x_3 = \quad (B.32)$$

$$\nabla V^e [g_i] \Rightarrow \partial_t g_i = \nabla V^e [g_i] \Rightarrow D_t \underline{G}^e = \nabla V^e \underline{G}^e. \quad (B.33)$$

ii-

$$[\bar{G}^e]^t \underline{G}^e = I \Rightarrow D_t [\bar{G}^e]^t \underline{G}^e + \bar{G}^t D_t \underline{G} \stackrel{(B.33)}{=} D_t [\bar{G}^e]^t \underline{G}^e + [\bar{G}^e]^t \nabla V^e \underline{G}^e \Rightarrow \quad (B.34)$$

$$D_t \bar{G}^e = -[\nabla V^e]^t \bar{G}^e. \quad (B.35)$$

□

Obs B.1. Em (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 10), (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 296) é adotado $\nabla V_{ij}^e = \partial_{x_i} u_j$, $V^e \stackrel{(B.31)}{=} u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3$. Em (MALVERN, 1969, p. 57, 58, 146) há duas convenções, se o tensor ∇V^e pré-multiplicar o vetor p , adota-se $\nabla V_{ij}^e = \partial_{x_j} u_i$, caso pós-multiplique $\nabla V_{ij}^e = \partial_{x_i} u_j$. Neste trabalho, será adotada a convenção pré-multiplicativa de (MALVERN, 1969).

Agora serão apresentadas as derivadas convectivas co-variante e contra-variante da parcela deviatória (B.36) do tensor de Cauchy (Def B.6). Estas derivadas aparecem frequentemente nos modelos diferenciais constitutivos viscoelásticos, e podem ser obtidas através de uma mudança de coordenadas envolvendo a base convectiva. A dedução empregada segue os passos de (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015) e (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987).

Def B.8. (*Princípio da Objetividade Material*) Em (MALVERN, 1969, p. 403), as derivadas convectivas (*convective rates*) são obtidas considerando-se o Princípio da Objetividade Material (MALVERN, 1969, p. 380-390). Segundo este princípio algumas quantidades como tensões devem ser independentes do observador, isto é, das coordenadas (bases) escolhidas.

Sejam $\sigma(p(P,t),t) : U \subset \mathfrak{R}^3 \rightarrow \mathfrak{R}^3$ o tensor de Cauchy (Def B.6) e $\underline{g} \stackrel{(\text{Def B.7})}{=} \{g_1, g_2, g_3\}$ a base convectiva sobre uma partícula de fluido e $\bar{g} \stackrel{(\text{Prop B.1})}{=} \{g^1, g^2, g^3\}$ a base dual de $\underline{g}$. O tensor σ será decomposto como:

$$\sigma = \tau - pI. \quad (\text{B.36})$$

sendo τ , a parcela *deviatória* (MALVERN, 1969, p. 90, 91), (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 10), (MOLDENAERS; KEUNINGS, 2013, p. 289), p a pressão e I o tensor identidade. Então a força (por unidade de área) f_i transmitida a qualquer plano ortogonal (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 481) a g_i , devido a τ é dada por:

$$f_i = \tau(g_i). \quad (\text{B.37})$$

O vetor g_i acima não é necessariamente unitário, porém isto pode ser corrigido considerando-se os coeficientes T_{ij}^g , na equação abaixo. É preciso definir um conjunto de bases sobre o qual será expresso a relação anterior. Se no domínio de σ for escolhida a base $\underline{g}$ e no contradomínio a base $\bar{g}$, $i, j \in \{1, 2, 3\}$, tem-se:

$$[\tau(g_i)]_{\bar{g}} = [f_i]_{\bar{g}} = T_{i1}^g g^1 + \dots + T_{i3}^g g^3, \quad T_{ij}^g \stackrel{(\text{A.12})}{=} \langle f_i, g_j \rangle, \quad \tau(\underline{g}) \stackrel{(\text{Def A.5})}{=} \underline{T}^g \bar{g}. \quad (\text{B.38})$$

Será considerada a seguinte notação:

$$\tau_{\underline{g} \rightarrow \bar{g}} \stackrel{(\text{A.43})}{=} \underline{\tau}^g \stackrel{(\text{Def A.5})}{=} [\underline{T}^g]^t. \quad (\text{B.39})$$

Obs B.2. A j -ésima coluna de $\underline{\tau}^g$ é dada pelos coeficientes de f_j na base $\bar{g}$. Deste modo, diferenciar no tempo cada componente co-variante (A.39) de $\underline{\sigma}^g$, possibilita analisar a variação das tensões exercidas (nos planos ortogonais a cada vetor de $\underline{g}$) sobre um ponto material ao se mover. Este é o princípio para a formulação dos modelos diferenciais constitutivos viscoelásticos: são propostas equações diferenciais procurando expressar relações entre a evolução das tensões viscosas, num certo conjunto de planos ortogonais a cada vetor de uma dada base (sobre uma partícula material), e as alterações nesta (Fig 51b). Escolhas convenientes das bases permitirão definir as derivadas convectivas superior e inferior: que seguem pontos materiais (partículas), contabilizando, também, a deformação do espaço. Por exemplo, a escolha efetuada em (B.38), conduzirá à derivada convectiva co-variante ou derivada convectiva inferior, pois os coeficientes co-variantes da matriz do tensor $\underline{\tau}^g$ são escritos com sub-índices (A.43). Agora serão apresentadas concretamente as derivadas convectivas inferior (co-variante) e superior (contra-variante).

B.4 Derivadas Convectivas Superior (Contra-Variante) e Inferior (Co-Variante)

Considerem-se as matrizes $\underline{\tau}^g$ (B.39) nas bases nas bases $\underline{g} \stackrel{(\text{Def B.7})}{=} \{g_1, g_2, g_3\}$, $\bar{g} \stackrel{(\text{Prop B.1})}{=} \{g^1, g^2, g^3\}$ e $\underline{\tau}^e$ nas bases $\underline{e}$ e $\bar{e}$ da parcela deviatória do tensor de Cauchy (B.36), τ , $\underline{e}$ a base cartesiana e $\bar{e}$ a base dual de $\underline{e}$ ($\bar{e} = \underline{e}$). Sendo:

$$g_i \stackrel{(\text{Def B.7})}{=} \frac{\partial x_1}{\partial a^i} e_1 + \frac{\partial x_2}{\partial a^i} e_2 + \frac{\partial x_3}{\partial a^i} e_3, \quad \underline{e} \xrightarrow{F} \underline{g}, \quad \underline{g} = F \underline{e}. \quad (\text{B.40})$$

Então as matrizes $\underline{\tau}^g$ e $\underline{\tau}^e$ relacionam-se por (A.43):

$$\underline{e} \xrightarrow{F} \underline{g}, \quad \underline{\tau}^g = F \underline{\tau}^e F^t.$$

Pelo Princípio da Objetividade (Def B.8), as variações da tensão devem ser as mesmas. Derivando-se (B.30) no tempo (D_t) ambos os membros da equação na segunda coluna acima:

$$D_t \underline{\tau}^g = D_t (F \underline{\tau}^e F^t) = (D_t F) \underline{\tau}^e F^t + F (D_t \underline{\tau}^e) F^t + F \underline{\tau}^e (D_t F^t). \quad (\text{B.41})$$

Agora, $F = [g_1 \ g_2 \ g_3]^t$, g_i , $i \in \{1, 2, 3\}$ a i -ésima linha de F , cujas entradas são as coordenadas de g_i na base cartesiana. De Prop B.2 e Obs B.1:

$$D_t F = D_t [g_1 \ g_2 \ g_3]^t = [D_t g_1 \ D_t g_2 \ D_t g_3]^t = \quad (B.42)$$

$$[\nabla V^e g_1 \ \nabla V^e g_2 \ \nabla V^e g_3]^t = [\nabla V^e [g_1 \ g_2 \ g_3]]^t \Rightarrow \quad (B.43)$$

$$D_t F = F[\nabla V^e]^t, \ D_t F^t = \nabla V^e F^t \Rightarrow (D_t F) \underline{\tau}^e F^t + F(D_t \underline{\tau}^e) F^t + F \underline{\tau}^e (D_t F^t) =$$

$$(F[\nabla V^e]^t) \underline{\tau}^e F^t + F(D_t \underline{\tau}^e) F^t + F \underline{\tau}^e (\nabla V^e F^t) \Rightarrow \quad (B.44)$$

$$D_t \underline{\tau}^e = F([\nabla V^e]^t \underline{\tau}^e + D_t \underline{\tau}^e + \underline{\tau}^e \nabla V^e) F^t.$$

Def B.9. (*Derivada Convectiva Co-Variante ou Derivada Convectiva Inferior*) A quantidade:

$$[\nabla V^e]^t \underline{\tau}^e + D_t \underline{\tau}^e + \underline{\tau}^e \nabla V^e, \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs B.1})}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j. \quad (B.45)$$

é dita derivada convectiva co-variante (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 491), ou derivada convectiva inferior (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 27) (as componentes co-variantes são escritas com sub-índices) e será denotada por:

$$D_t \underline{\tau}^e = [\nabla V^e]^t \underline{\tau}^e + D_t \underline{\tau}^e + \underline{\tau}^e \nabla V^e, \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs B.1})}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j. \quad (B.46)$$

Sendo $D_t \underline{\tau}^e$ a derivada material (B.30) de cada componente (co-variante) de $\underline{\tau}^e(x(a, t), t)$, ou seja:

$$D_t \underline{\tau}^e = \frac{\partial}{\partial t} \underline{\tau}^e + (V^e \cdot \nabla) \underline{\tau}^e, \quad V^e \stackrel{(\text{B.31})}{=} u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3, \quad (B.47)$$

$$D_t \tau_{ij}^e = \partial_t \tau_{ij}^e(x(a, t), t) = \partial_t \tau_{ij}^e + \partial_{x_1} \tau_{ij}^e \partial_t x_1 + \partial_{x_2} \tau_{ij}^e \partial_t x_2 + \partial_{x_3} \tau_{ij}^e \partial_t x_3 =$$

$$\partial_t \tau_{ij}^e + u_1 \partial_{x_1} \tau_{ij}^e + u_2 \partial_{x_2} \tau_{ij}^e + u_3 \partial_{x_3} \tau_{ij}^e, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}. \quad (B.48)$$

Agora, se no domínio de τ (B.37) for escolhida a base $\bar{g}$ e no contradomínio a base $\underline{g}$, $i, j \in \{1, 2, 3\}$, tem-se:

$$[\sigma(g^i)]_{\underline{g}} = [f_i]_{\underline{g}} = T^{g \ i 1} g_1 + \dots + T^{g \ i 3} g_3, \quad T^{g \ i j} \stackrel{(\text{A.11})}{=} \langle f_i, g^j \rangle, \quad \tau(\bar{g}) \stackrel{(\text{Def A.5})}{=} \bar{T}^g_{\underline{g}}. \quad (B.49)$$

Novamente, será denotado:

$$\tau^{\bar{g} \rightarrow \underline{g}} \stackrel{(\text{A.43})}{=} \bar{\tau}^g \stackrel{(\text{Def A.5})}{=} [\bar{T}^g]^t. \quad (B.50)$$

Considerem-se as matrizes $\bar{\tau}^g$ (B.50) nas bases nas bases $\bar{g} \stackrel{(\text{Prop B.1})}{=} \{g^1, g^2, g^3\}$, $\underline{g} \stackrel{(\text{Def B.7})}{=} \{g_1, g_2, g_3\}$ e $\bar{\tau}^e$ nas bases $\bar{e}$ e $\underline{e}$ do tensor τ , sendo:

$$g_i \stackrel{(\text{Def B.7})}{=} \frac{\partial x_1}{\partial a^i} e_1 + \frac{\partial x_2}{\partial a^i} e_2 + \frac{\partial x_3}{\partial a^i} e_3, \quad \underline{e} \xrightarrow{F} \underline{g}, \quad \underline{g} = F \underline{e}. \quad (\text{B.51})$$

$$g^i \stackrel{(\text{Prop B.1})}{=} \frac{\partial a_i}{\partial x_1} e^1 + \frac{\partial a_i}{\partial x_2} e^2 + \frac{\partial a_i}{\partial x_3} e^3, \quad \bar{e} \xrightarrow[\text{(A.18)}]{F^{-t}} \bar{g}, \quad \bar{g} = F^{-t} \bar{e}. \quad (\text{B.52})$$

Então as matrizes $\bar{\tau}^g$ e $\bar{\tau}^e$ relacionam-se por (A.44):

$$\underline{e}, \xrightarrow{F} \underline{g}, \quad \bar{e} \xrightarrow{F^{-t}} \bar{g}, \quad \bar{\tau}^g = F^{-t} \bar{\tau}^e F^{-1}. \quad (\text{B.53})$$

Aplicando-se a derivada material (B.30) em ambos os membros de (B.53), tem-se:

$$D_t \bar{\tau}^g = D_t (F^{-t} \bar{\tau}^e F^{-1}) = (D_t F^{-t}) \bar{\tau}^e F^{-1} + F^{-t} (D_t \bar{\tau}^e) F^{-1} + F^{-t} \bar{\tau}^e (D_t F^{-1}) \quad (\text{B.54})$$

Como $F^{-1} = [g^1 \ g^2 \ g^3]$, de Prop B.2 e Obs B.1, tem-se:

$$D_t F^{-1} = D_t [g^1 \ g^2 \ g^3] = [D_t g^1 \ D_t g^2 \ D_t g^3] = \quad (\text{B.55})$$

$$[-[\nabla V^e]^t g^1 - [\nabla V^e]^t - [\nabla V^e]^t g^3] = -[V^e]^t [g^1 \ g^2 \ g^3] \Rightarrow \quad (\text{B.56})$$

$$D_t F^{-1} = -[\nabla V^e]^t F^{-1}, \quad D_t F^{-t} = -F^{-t} \nabla V^e \Rightarrow$$

$$(D_t F^{-t}) \bar{\tau}^e F^{-1} + F^{-t} (D_t \bar{\tau}^e) F^{-1} + F^{-t} \bar{\tau}^e (D_t F^{-1}) =$$

$$(-F^{-t} \nabla V^e) \bar{\tau}^e F^{-1} + F^{-t} (D_t \bar{\tau}^e) F^{-1} + F^{-t} \bar{\tau}^e (-[\nabla V^e]^t F^{-1}) \Rightarrow$$

$$D_t \bar{\tau}^g = F^{-t} (-\nabla V^e \bar{\tau}^e + D_t \bar{\tau}^e - \bar{\tau}^e [\nabla V^e]^t) F^{-1}. \quad (\text{B.57})$$

Def B.10. (*Derivada Convectiva Contra-Variante ou Derivada Convectiva Superior*) A quantidade:

$$-\nabla V^e \bar{\tau}^e + D_t \bar{\tau}^e - \bar{\tau}^e [\nabla V^e]^t, \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs B.1})}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j, \quad (\text{B.58})$$

é dita derivada derivada convectiva contra-variante (BIRD; ARMSTRONG; HASSAGER, 1987, p. 491), ou derivada convectiva superior (MOROZOV; SPAGNOLIE, 2015, p. 27) (as componentes contra-variantes são escritas com super-índices) e será denotada por:

$$\bar{D}_t \bar{\tau}^e = -\nabla V^e \bar{\tau}^e + D_t \bar{\tau}^e - \bar{\tau}^e [\nabla V^e]^t, \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs B.1})}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j. \quad (\text{B.59})$$

Sendo $D_t \bar{\tau}^e$ a derivada material (B.30) de cada componente (contra-variante) de $\bar{\tau}^e(x(a, t), t)$, ou seja:

$$D_t \bar{\tau}^e = \frac{\partial}{\partial t} \bar{\tau}^e + (V^e \cdot \nabla) \bar{\tau}^e, \quad V^e \stackrel{(B.31)}{=} u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3, \quad (B.60)$$

$$\begin{aligned} D_t \tau^{eij} &= \partial_t \tau^{eij}(x(a, t), t) = \partial_t \tau^e + \partial_{x_1} \tau^{eij} \partial_t x_1 + \partial_{x_2} \tau^{eij} \partial_t x_2 + \partial_{x_3} \tau^{eij} \partial_t x_3 = \\ &= \partial_t \tau^{eij} + u_1 \partial_{x_1} \tau^{eij} + u_2 \partial_{x_2} \tau^{eij} + u_3 \partial_{x_3} \tau^{eij}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}. \end{aligned} \quad (B.61)$$

B.5 Objetividade do Tensor Taxa de Deformação

Outro tensor sobre o qual é aplicado a derivada convectiva contra-variante (ou co-variante), é o tensor taxa de deformação D (Def B.5). Para isto, deve-se primeiro verificar, se este tensor atende ao Princípio da Objetividade (Def B.8). De fato (MALVERN, 1969, p. 148, 149):

$$\langle dp, dp \rangle = \langle \Gamma dP, \Gamma dP \rangle = \langle dP, \Gamma^* \Gamma dP \rangle. \quad (B.62)$$

sendo $dp \in S(t)$ de um segmento que na configuração inicial, $S(0)$, era dP (B.7). Γ é o tensor gradiente de deformação (Def B.3) e Γ^* seu adjunto (B.10). Diferenciando-se (B.30) no tempo (D_t) a equação anterior:

$$\begin{aligned} D_t \langle dP, \Gamma^* \Gamma dP \rangle &\stackrel{(B.16)}{=} \langle dP, \Gamma^* (\nabla V + \nabla V^*) \Gamma dP \rangle = \\ &= \langle \Gamma dP, (\nabla V + \nabla V^*) \rangle = \langle dp, (\nabla V + \nabla V^*) dp \rangle \stackrel{(B.16)}{=} \\ &= 4 \langle dp, Ddp \rangle. \end{aligned} \quad (B.63)$$

Definindo-se a aplicação:

$$d : \underline{dS} \times \overline{dS} (\overline{dS} \times \underline{dS}) \rightarrow \mathfrak{R}, \quad \overline{dS} = \underline{dS} = dS \quad d(dp, dp) = \langle dp, Ddp \rangle. \quad (B.64)$$

Sejam $\underline{B} = \{b_1, b_2, b_3\}$ e $\overline{B} = \{b^1, b^2, b^3\}$ bases de dS ($\overline{B}$ dual de $\underline{B}$). Então $d(v, v)$ assume:

$$d(dp, dp) = [dp]_{\underline{B}}^t [D(dp)]_{\overline{B}} = [dp]_{\underline{B}}^t [D^{\underline{B} \rightarrow \overline{B}}] [dp]_{\underline{B}} \quad \text{co-variante (A.43),} \quad (B.65)$$

$$d(dp, dp) = [dp]_{\overline{B}}^t [D(dp)]_{\underline{B}} = [dp]_{\overline{B}}^t [D^{\overline{B} \rightarrow \underline{B}}] [dp]_{\overline{B}} \quad \text{contra-variante (A.44).} \quad (B.66)$$

A equação (B.63), mostra que o tensor taxa de deformação satisfaz (e portanto, o modelo *newtoniano*) o Princípio da Objetividade (MALVERN, 1969, p. 400), isto é, a

deformação relativa entre dois pontos distados de $|dp| \in S(t)$ é independente da mudança de coordenadas, o que deveria ser esperado, pois são mensuradas distâncias.

Como coordenadas co-variantes ou contra-variantes são utilizadas, a matriz do adjunto de ∇V , ∇V^* , pode ser encontrada, transpondo-se a matriz de ∇V , pois se $\nabla V = T$ é um operador linear:

$$T(b_i) = \sum_j t_{ij} b^j, \quad t_{ij} \stackrel{(A.12)}{=} \langle T(b_i), b_j \rangle, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}, \quad (B.67)$$

$$T^*(b_i) = \sum_j t_{ij}^* b_j, \quad t_{ij}^* = \langle T^*(b_i), b_j \rangle = \langle T(b_j), b_i \rangle = t_{ji}. \quad (B.68)$$

Se a base cartesiana é utilizada, então:

$$D^e = \nabla V^e + [\nabla V^e]^t, \quad \nabla V_{ij}^e \stackrel{(\text{Obs } B.1)}{=} \partial_{x_j} u_i, \quad [V^e]_{ij}^t = \partial_{x_i} u_j. \quad (B.69)$$

Obs B.3. Houve distinção na notação dos tensores $\bar{\tau}^e$ e $\underline{\tau}^e$. Porém eles possuem as mesmas componentes ($\bar{e} = \underline{e}$), por isso serão denotados apenas por τ^e e τ_{ij}^e , assim como D^e .