

## 2

# Modelagem Numérica do Processo de Revestimento por Cortina

Os processos de revestimento em geral apresentam um escoamento viscoso, laminar, bidimensional e com superfícies livres. O cálculo da forma da superfície livre, há muito tempo, é uma área de interesse da mecânica de fluidos em geral. A solução de problemas com este tipo de escoamento é geralmente considerada um desafio, principalmente, devido à natureza não-linear das condições de contorno nas interfaces.

A formulação matemática do escoamento e o método de solução do sistema de equações diferenciais parciais resultante são mostrados neste capítulo.

### 2.1

#### Descrição do Problema

Antes de apresentar a formulação matemática do problema, primeiro fazemos a descrição física do escoamento no processo de revestimento por cortina. Assim, na Fig.(2.1), mostramos a região de interesse do processo, desde a saída do líquido da barra de revestimento até onde ocorre a deposição da camada de líquido incluindo o substrato revestido, como também as principais variáveis de operação do processo:

- Distância entre a barra de revestimento e o substrato: Altura da cortina,  $H_o$ ;
- Velocidade do substrato:  $U$ ;
- Espessura da camada de revestimento depositada:  $t$ ;
- Vazão de alimentação por unidade de largura da fenda:  $q = Ut$  .

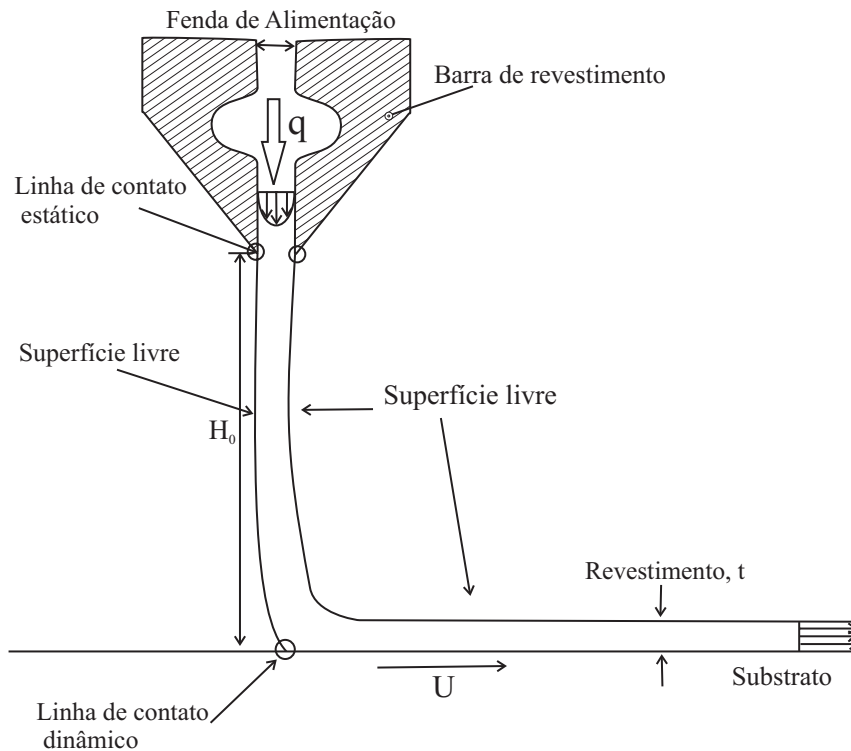


Figura 2.1: Esquema do processo de revestimento por cortina com as principais variáveis de operação

## 2.2

### Formulação Matemática

#### 2.2.1

##### Equações de Conservação

Para simplificar o problema se levam em consideração as seguintes hipóteses simplificadoras:

1. Regime permanente.
2. Fluido incompressível.
3. Escoamento bidimensional.
4. Viscosidade do ar desprezível em relação ao líquido de interesse.
5. Escoamento em condições isotérmicas.

Com essas hipóteses e sabendo que os escoamentos viscosos com superfície livre obedecem às equações baseadas nos princípios físicos de Conservação de Quantidade de Movimento Linear e da Conservação da Massa, passamos a descrever as equações que governam o escoamento:

**Conservação de Quantidade de Movimento Linear:**

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \nabla \cdot \underline{\underline{T}} + \rho \mathbf{g}. \quad (2-1)$$

$\underline{\underline{T}}$  é o tensor das tensões total normalmente dividida na contribuição da pressão  $-p\underline{\underline{I}}$ , onde  $\underline{\underline{I}}$  é o tensor unitário, e o tensor das tensões  $\underline{\underline{\tau}}$  associado com a viscosidade do fluido, podendo expressar o tensor de tensão total como:

$$\underline{\underline{T}} = -p\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\tau}}. \quad (2-2)$$

**Conservação de Massa:**

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2-3)$$

Sendo  $\mathbf{v}$  o vetor velocidade e  $\mathbf{g}$  é o vetor gravidade.

O tensor das tensões,  $\underline{\underline{T}}$ , deve ser relacionado ao tipo de fluido e à cinemática do escoamento da Eq.(2-2). Para líquidos Newtonianos esta relação é dada pela seguinte equação:

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \underline{\underline{\dot{\gamma}}}, \quad (2-4)$$

$$\underline{\underline{\dot{\gamma}}} = \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \quad (2-5)$$

sendo  $\mu$  a viscosidade,  $\underline{\underline{\dot{\gamma}}}$  o tensor taxa de deformação,  $\nabla \mathbf{v}$  o gradiente de velocidade e  $T$  operador transposta.

**2.2.2****Condições de Contorno**

Para poder resolver o sistema de equações de conservação (massa e quantidade de movimento linear), as condições do escoamento no contorno devem ser especificadas. Apresenta-se, na Fig.(2.2), um diagrama esquemático do processo de revestimento por cortina indicando as fronteiras sobre os quais se aplicam as condições de contorno.

A seguir, consideram-se as diversas condições de contorno que são geralmente aplicadas a escoamentos com superfície livre.

1. **Entrada do Domínio:** Na entrada da região de interesse é prescrito um perfil de velocidade.

$$\mathbf{v} = \left\{ \frac{3q}{h} \left[ \frac{-x}{2h} + \left( \frac{-x}{2h} \right)^2 \right] \right\} \mathbf{j}, \quad (2-6)$$

onde  $q = Ut$  é a vazão de alimentação na entrada da fenda de revestimento,  $2h$  é abertura da fenda e  $x$  é a coordenada horizontal perpendicular à direção de ingresso do líquido.

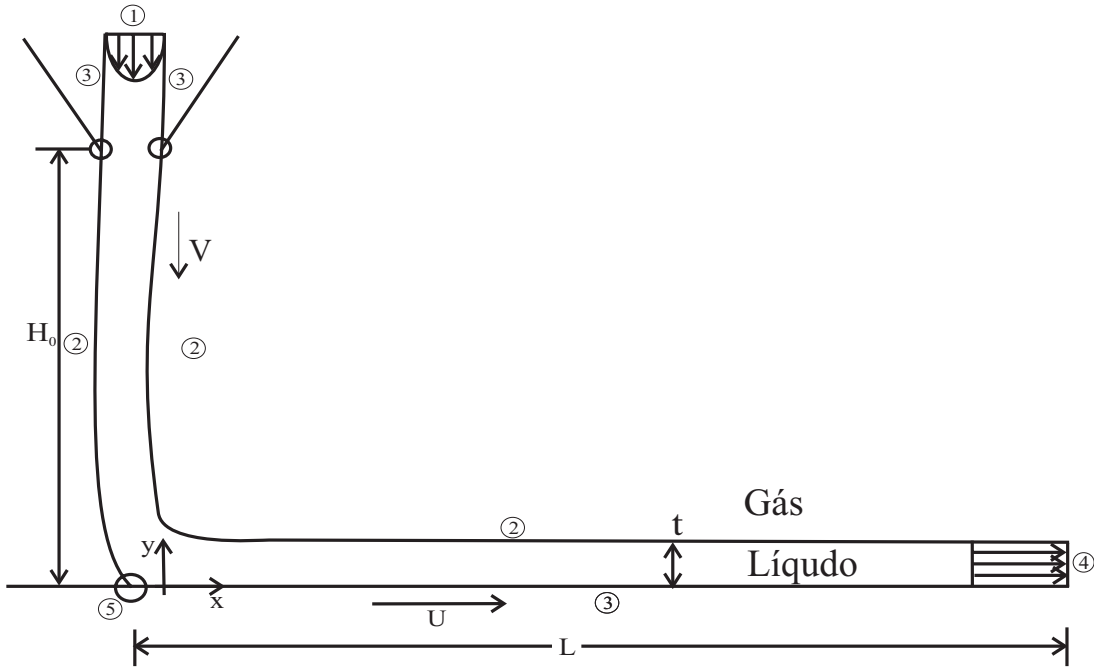


Figura 2.2: Condições de contorno no domínio físico.

2. **Interface Líquido-Gás:** A teoria para superfícies livres prescreve duas condições de contorno para a interface. A primeira condição de contorno é conhecida como condição cinemática, Eq.(2-7), que afirma que não há fluxo de massa através da interface, já que a mesma é uma linha de corrente.

$$\mathbf{n}_{fs} \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (2-7)$$

Sendo  $\mathbf{n}_{fs}$  o vetor unitário normal à superfície livre. A segunda condição de contorno é conhecida como condição dinâmica, que descreve o balanço de forças na interface Eq.(2-8).

Como uma das hipóteses do problema foi que a viscosidade do ar é muito pequena comparada com a do líquido, a tensão de cisalhamento na interface líquido-ar pode ser desprezada. Fazendo o balanço de forças pode-se dizer que a tensão normal no líquido deve equilibrar a pressão capilar e a pressão do ar, como mostra-se na Eq.(2-8).

$$\mathbf{n}_{fs} \cdot \underline{\underline{T}} = \sigma \frac{d\mathbf{t}_{fs}}{ds} + \mathbf{n}_{fs} p_a. \quad (2-8)$$

onde  $\mathbf{t}_{fs}$  é o vetor unitário tangente à superfície livre, e  $s$  é o comprimento de arco ao longo da superfície livre.  $\sigma$  é a tensão superficial e  $p_a$  é a pressão do ambiente (ar).

3. **Interface Sólido-Líquido:** A primeira hipótese utilizada é a de não

penetração do líquido no sólido. Outra hipótese largamente utilizada em escoamentos viscosos é que a componente tangencial da velocidade é contínua através de superfícies de contato. Esta hipótese é aplicada tanto para superfícies sólidas quanto fluidas. Ela é conhecida como condição de não deslizamento. Assim a componente tangencial da velocidade do líquido é igual à componente tangencial da velocidade da superfície, em nosso caso, sólida. Nas paredes da fenda de revestimento, a velocidade do líquido é igual à velocidade das paredes, Eq.(2-9):

$$\mathbf{v} = 0. \quad (2-9)$$

Na região de revestimento a velocidade do fluido é igual à velocidade do substrato,  $U$ , Eq.(2-10):

$$\mathbf{v} = U\mathbf{i}. \quad (2-10)$$

Esta *condição de não deslizamento* fornece previsões de escoamento em excelente acordo com experimentos para uma larga faixa de configurações físicas. Há, entretanto, uma exceção digna de nota em que análises matemáticas do escoamento que utilizam esta condição de contorno apresentam dificuldades. A exceção surge em campos do escoamento que envolvem uma interface fluido-fluido móvel onde a interface está em contato com uma parede sólida (na literatura inglesa conhecida como *moving contact line problem*), como nosso caso. Porém, mesmo em tais casos, a condição de não deslizamento pode ser aplicada sobre o domínio geral do fluido, ficando as dificuldades matemáticas restritas a uma região próxima da vizinhança da linha de contato entre a interface e a superfície sólida.

4. **Linha de Contato Dinâmico (LCD):** Nesta região sub-microscópica, próxima da vizinhança da linha de contato dinâmico, ocorre uma violação da condição de contorno de não deslizamento pela singularidade presente na tensão, quando esta condição é aplicada, como descrito no trabalho de Huh [30]. Esta singularidade pode ser evitada incluindo um deslizamento artificial na linha de contato dinâmico, condição de deslizamento de Navier.

$$\mathbf{t}\mathbf{n} : \underline{T} = \frac{1}{\beta} \mathbf{t} \cdot (\mathbf{v} - U\mathbf{j}), \quad (2-11)$$

na Eq.(2-11),  $\mathbf{v}$  é a velocidade do líquido,  $U$  é a velocidade do substrato e  $\beta$  é o coeficiente de deslizamento.

Em análises do deslocamento da linha de contato dinâmico é necessário especificar o ângulo de contato dinâmico. O ângulo de contato depende das propriedades do material e são observados experimentalmente, chamados ângulos de contato aparente, também dependem do campo de escoamento no domínio. Por simplificação, o ângulo de contato dinâmico,  $\theta_d$ , é considerado constante neste trabalho.

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_w = \cos \theta_d, \quad (2-12)$$

onde  $\mathbf{n}$  é o vetor normal na interface líquido-gás e  $\mathbf{n}_w$  é o vetor normal ao substrato.

5. **Saída do Domínio:** Na saída da região de interesse, supondo que a mesma está o suficientemente distante, considera-se que o escoamento é completamente desenvolvido.

$$\mathbf{n}_s \cdot \nabla \mathbf{v} = 0, \quad (2-13)$$

$\mathbf{n}_s$  é o vetor normal ao plano de saída.

## 2.3

### Problema com superfície livre: Geração de malha

A superfície livre é um contorno móvel. Para problemas deste tipo, a malha deve ser capaz de se mover e se deformar. A dificuldade gerada na solução de um problema de escoamento pela presença de uma superfície livre é a falta de conhecimento do domínio onde a equação deve ser resolvida. Um modo de superar esta dificuldade é reescrever o problema posto em um domínio físico desconhecido em um domínio de referência fixo.

O sistema de equações diferenciais e as condições de contorno no domínio desconhecido  $\Omega$  é transformado para um sistema equivalente no domínio de referência  $\Omega_o$ . É necessário definir uma função que relacione o sistema de coordenadas físicas com o sistema de coordenadas de referência, isto é definir uma função de mapeamento  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi)$ , onde  $\mathbf{x}$  e  $\xi$  são a posição no domínio físico e no domínio de referência, respectivamente, como mostra a Fig. (2.3). O mapeamento utilizado faz parte da solução do problema. A equação que descreve o mapeamento é denominada equação de geração de malha.

Para solucionar o problema no domínio de referência, todas as equações devem ser representadas em relação às coordenadas neste domínio  $(\xi, \eta)$ . Para isso utiliza-se o Tensor Gradiente de deformação do Mapeamento  $(\nabla_{\xi} \mathbf{x})$ :

$$\nabla_{\xi} \mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} = \mathbf{J}_T = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix}. \quad (2-14)$$

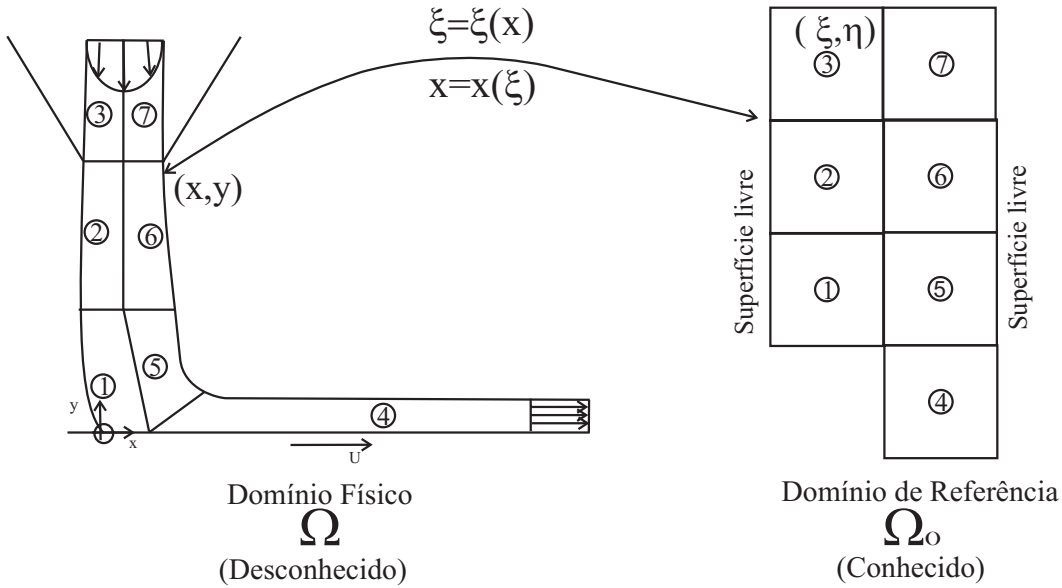


Figura 2.3: Mapeamento do domínio físico para domínio de referência.

Aplicando a regra da cadeia a uma variável qualquer temos:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \mathbf{J}_T \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}. \tag{2-15}$$

Com a Eq. (2-15), as derivadas em relação às coordenadas  $x$  e  $y$  podem ser escritas em função das coordenadas do domínio de referência através das seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{|J_T|} \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right), \tag{2-16}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{|J_T|} \left( -\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right), \tag{2-17}$$

nas equações anteriores, o Jacobiano da transformação  $|J_T|$  pode ser escrita como

$$|J_T| = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi}, \tag{2-18}$$

é o determinante da matriz de transformação de coordenadas.

As condições para realizar o mapeamento são:

- Contorno de  $\Omega$  deve ser mapeado no Contorno de  $\Omega_o$ ,
- Mapeamento deve ser inversível  $\rightarrow \det \nabla_{\xi} \mathbf{x} \neq 0$ .

Com as derivadas no domínio de referência, resta definir as equações que descrevem o mapeamento. Existe diversos métodos para poder definir estas equações, um deles é o Método de Geração Elíptica de Malha. Este método tem-se mostrado satisfatório para a solução de problemas com superfícies livres.

A versão do método de geração elíptica de malha resumida aqui é descrita em detalhe por de Santos[31] e Benjamin[32]. Eles utilizam equações do tipo difusiva e baseia-se na ideia de minimizar o funcional que mede o grau de suavidade da malha:

$$\int_{\Omega} (D_{\xi} |\nabla \xi|^2 + D_{\eta} |\nabla \eta|^2) d\Omega = 0. \quad (2-19)$$

Onde as coordenadas  $\xi$  e  $\eta$  do domínio de referência satisfaz as equações que minimizam o funcional, que são equações diferenciais parciais elípticas difusivas:

$$\nabla \cdot (D_{\xi} \nabla \xi) = 0, \quad (2-20)$$

$$\nabla \cdot (D_{\eta} \nabla \eta) = 0. \quad (2-21)$$

$D_{\xi}$  e  $D_{\eta}$ , são os coeficientes de difusão das coordenadas potenciais, que controlam o espaçamento das curvas de  $\xi$  e  $\eta$ . Quando estes coeficientes são constantes às Eq. (2-20) e Eq. (2-21) reduzem-se as equações de Laplace:

$$\nabla^2 \xi = 0, \quad (2-22)$$

$$\nabla^2 \eta = 0. \quad (2-23)$$

### 2.3.1

#### Condições de contorno para geração de malha

Para solução das equações diferenciais parciais de geração de malha, Eq. (2-20) e Eq. (2-21), é preciso, como tinha sido mencionado anteriormente, de condições de contorno que são descritas a seguir. As primeiras três condições apresentadas representam diferentes formas de localização dos nós ao longo da fronteira. As últimas duas condições representam diferentes formas de definir a localização de uma fronteira.

1. **Ângulo prescrito:** O ângulo formado pelas coordenadas  $\xi$  e  $\eta$  em uma região determinada é específica.
2. **Nós fixos:** A posição dos nós nos contornos é fixa.
3. **Distribuição nodal prescrita:** Faz-se uma distribuição dos nós ao longo do contorno.

$$\xi = f^{-1}(s); \quad \eta = g^{-1}(s), \quad (2-24)$$

onde  $s$  é a longitude de arco ao longo do contorno.



4. **Deslizamento sobre o contorno:** Os nós são livres para deslizar sobre o contorno numa linha cuja equação é conhecida.

$$f(\mathbf{x}) = 0. \quad (2-25)$$

5. **Condição cinemática:** Líquido não pode atravessar a superfície livre

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2-26)$$

esta relação localiza implicitamente a posição de uma superfície livre, acopla equações de conservação e equações que descrevem a posição dos nós na malha.

## 2.4

### Método de Solução do Sistema de Equações

Como descrito ao longo deste capítulo, a solução de problemas com superfície livre consiste na solução de equações diferenciais de geração de malha, equação de conservação de massa e a equação de conservação de quantidade de movimento linear.

É necessário a utilização de um método capaz de transformar o sistema de equações diferenciais em um sistema de equações algébricas. Neste trabalho utiliza-se o método de Resíduos Ponderados com funções base de Elementos Finitos.

#### 2.4.1

##### Discretização Espacial

Quando o domínio físico é complexo, uma prática usual é dividi-lo em várias regiões mais simples, e estas regiões são sub-divididas em elementos, que neste trabalho são retangulares. A única restrição é que os elementos não podem se sobrepor e devem cobrir completamente o domínio computacional. Em cada elemento são posicionados nove pontos, oito ao longo dos lados e um ponto no centro do elemento (elemento bi-quadrático) como mostrado na Fig. (2.4).

#### 2.4.2

##### O Método de Galerkin/Elementos finitos

O método de Galerkin pode ser compreendido como sendo uma metodologia geral para a solução de equações diferenciais, pertence à classe dos métodos variacionais. Dentro desta classe, a solução da equação pode ser aproximada como uma combinação linear de funções base apropriadamente escolhidas.

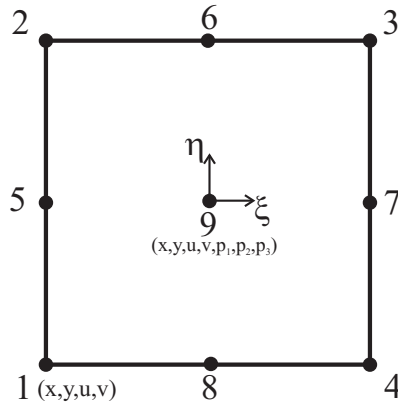


Figura 2.4: Elemento bi-quadrático.

$$f(x) = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i. \tag{2-27}$$

Na Eq. (2-27) temos um exemplo de aproximação onde  $N$  é o número de termos da combinação,  $\phi_i$  são as funções base e  $c_i$  os coeficientes das funções, que representam as incógnitas do problema.

Os valores das incógnitas são obtidos substituindo-se a solução aproximada na formulação fraca (variacional) da equação e resolvendo o sistema resultante.

Os campos desconhecidos neste problema são pressão ( $p$ ), velocidade ( $u,v$ ), e posição dos nós ( $x,y$ ) que definem a malha no domínio físico. O campo de velocidade e o campo de posição são representados por funções base contínuas e biquadráticas  $\phi_j$  e a pressão por funções base lineares e descontínuas  $\chi_j$ . Os coeficientes de expansão de cada campo em termos das funções base são  $X_j, Y_j, U_j, V_j, P_j$ , e estas representam as incógnitas do problema discretizado.

$$\begin{aligned} u &= \sum_{j=1}^n U_j \phi_j; & v &= \sum_{j=1}^n V_j \phi_j; \\ x &= \sum_{j=1}^n X_j \phi_j; & y &= \sum_{j=1}^n Y_j \phi_j; \\ p &= \sum_{j=1}^m P_j \chi_j. \end{aligned} \tag{2-28}$$

A utilização de funções bases biquadráticas em um domínio bidimensional exige que cada elemento possua nove nós, oito posicionados ao longo dos lados, com cada um destes nós possuindo quatro graus de liberdade, (dois para o campo de velocidade e dois para o de posição) e um nó no centro do elemento,

possui nove graus de liberdade (dois para o campo de velocidade, dois para o de posição e três para o campo da pressão) fazendo em total 3 graus de liberdade por elemento.

Os elementos que compõem o domínio são parametrizados em coordenadas locais por  $\varepsilon$  e  $\vartheta$ . Neste sistema de coordenadas, os elementos tem arestas que variam entre -1 e 1. As funções bases em coordenadas locais utilizadas na expansão do campo de velocidade e mapeamento correspondentes à um elemento biquadrático de nove nós são:

$$\begin{aligned}\phi_1(\varepsilon, \vartheta) &= \frac{\varepsilon(\varepsilon - 1)\vartheta(\vartheta - 1)}{4}, \phi_2(\varepsilon, \vartheta) = \frac{\varepsilon(\varepsilon + 1)\vartheta(\vartheta - 1)}{4}, \\ \phi_3(\varepsilon, \vartheta) &= \frac{\varepsilon(\varepsilon + 1)\vartheta(\vartheta + 1)}{4}, \phi_4(\varepsilon, \vartheta) = \frac{\varepsilon(\varepsilon - 1)\vartheta(\vartheta + 1)}{4}, \\ \phi_5(\varepsilon, \vartheta) &= \frac{(1 - \varepsilon^2)\vartheta(\vartheta - 1)}{2}, \phi_6(\varepsilon, \vartheta) = \frac{\varepsilon(\varepsilon + 1)(1 - \vartheta^2)}{2}, \\ \phi_7(\varepsilon, \vartheta) &= \frac{(1 - \varepsilon^2)\vartheta(\vartheta + 1)}{2}, \phi_8(\varepsilon, \vartheta) = \frac{\varepsilon(\varepsilon - 1)(1 - \vartheta^2)}{2} \\ \phi_9(\varepsilon, \vartheta) &= (1 - \varepsilon^2)(1 - \vartheta^2).\end{aligned}\quad (2-29)$$

As funções base lineares descontínuas usadas para representar os campo de pressão no sistema de coordenadas locais são:

$$\begin{aligned}\chi_1(\varepsilon, \vartheta) &= 1, \\ \chi_2(\varepsilon, \vartheta) &= \vartheta, \\ \chi_3(\varepsilon, \vartheta) &= \varepsilon.\end{aligned}\quad (2-30)$$

Estas equações foram escolhidas em base ao estudo de De Santos[31], ele mostrou que elementos biquadráticos para o campo de velocidades e lineares descontínuos para a pressão funcionam muito bem.

Já escolhidas as funções base podemos ter os resíduos ponderados das equações diferenciais. Estes são obtidos multiplicando-se as funções resíduo por uma função peso e integrando o produto ao longo do domínio.

O método de Galerkin é um caso particular do método de resíduos ponderados onde o espaço das funções peso é idêntico ao espaço das funções base usadas. Neste trabalho, elas são polinômios lagrangeanos contínuos e diferentes de zero somente em poucos elementos.

A seguir apresentam-se a formulação fraca das equações no domínio de referência :

## 1. Conservação de massa

- (a) Vetor resíduo ponderado da equação de conservação de massa:

$$\mathbf{R}_c = \int_{\Omega_o} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \chi J_T d\Omega_o. \quad (2-31)$$

(b) Expansão da equação do resíduo ponderado:

$$R_c^i = \int_{\Omega_o} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \chi_i J_T d\Omega_o. \quad (2-32)$$

em que  $\chi_i$  formam a base do espaço de funções peso da equação de conservação de massa.

## 2. Conservação de quantidade de movimento linear

(a) Vetor resíduo ponderado da equação de conservação de quantidade de movimento linear:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_m &= \int_{\Omega_o} \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) \mathbf{w} J d\Omega_o + \int_{\Omega_o} [\mathbf{T} : \nabla \mathbf{w}] J_T d\Omega_o \\ &\quad - \int_{\Gamma_o} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{w} \left( \frac{d\Gamma}{d\Gamma_o} \right) d\Gamma_o - \int_{\Omega_o} (\rho \mathbf{g}) \mathbf{w} J_T d\Omega_o. \end{aligned} \quad (2-33)$$

(b) Expansão da equação anterior para cada componente:

$$\begin{aligned} R_{mx}^i &= \int_{\Omega_o} \left[ \rho \phi_i \left( u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \phi_i}{\partial x} (-p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x}) \right. \\ &\quad \left. + \mu \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] J_T d\Omega_o - \int_{\Gamma_o} f_x \phi_i \left( \frac{d\Gamma}{d\Gamma_o} \right) d\Gamma_o \\ &\quad - \int_{\Omega_o} (\rho g_x) \phi_i J d\Omega_o. \end{aligned} \quad (2-34)$$

$$\begin{aligned} R_{my}^i &= \int_{\Omega_o} \left[ \rho \phi_i \left( u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} (-p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}) \right. \\ &\quad \left. + \mu \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] J_T d\Omega_o - \int_{\Gamma_o} f_y \phi_i \left( \frac{d\Gamma}{d\Gamma_o} \right) d\Gamma_o \\ &\quad - \int_{\Omega_o} (\rho g_y) \phi_i J d\Omega_o. \end{aligned} \quad (2-35)$$

onde  $f_x = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T})_x$  e  $f_y = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T})_y$  são os componentes da força nos contornos, são nestes termos que entram as condições de contorno. As funções  $\phi_i$  formam a base do espaço de funções peso das equações de conservação de quantidade de movimento linear.

## 3. Geração de malha

(a) Vetor resíduos ponderados da equação de geração de malha:

$$\mathbf{R}_x = \int_{\Omega_o} (\nabla \mathbf{w} \cdot \Delta \cdot \nabla \xi) J_T d\Omega_o + \int_{\Gamma_o} (\mathbf{n} \cdot \Delta \cdot \nabla \xi) \mathbf{w} \left( \frac{d\Gamma}{d\Gamma_o} \right) d\Gamma_o. \quad (2-36)$$

(b) Expansão da equação anterior para cada coordenada:

$$\begin{aligned} R_x^i = & - \int_{\Omega_o} D_\xi \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\phi_i}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\phi_i}{\partial y} \right) d\Omega_o \\ & + \int_{\Gamma_o} D_\xi \frac{1}{J_T} \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} n_x - \frac{\partial x}{\partial \eta} n_y \right) \phi_i \left( \frac{d\Gamma}{d\Gamma_o} \right) d\Gamma_o, \end{aligned} \quad (2-37)$$

$$\begin{aligned} R_y^i = & - \int_{\Omega_o} D_\eta \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\phi_i}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\phi_i}{\partial y} \right) d\Omega_o \\ & + \int_{\Gamma_o} D_\eta \frac{1}{J_T} \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} n_x - \frac{\partial x}{\partial \xi} n_y \right) \phi_i \left( \frac{d\Gamma}{d\Gamma_o} \right) d\Gamma_o. \end{aligned} \quad (2-38)$$

Estas integrais são calculadas em cada elemento pelo método da Quadratura Gaussiana.

### 2.4.3

#### Solução do Sistema de Equações não Lineares pelo Método de Newton

Quando as equações diferenciais parciais são discretizadas pelo método de Galerkin/Elementos Finitos obtém-se um sistema de equações não lineares algébricas. Este sistema de equações pode ser representada de forma compacta por:

$$\mathbf{R}(\mathbf{c}; \mathbf{b}) = 0; \quad (2-39)$$

sendo  $\mathbf{R}$  o vetor de resíduos ponderados,  $\mathbf{c}$  representa o vetor solução do problema e  $\mathbf{b}$  é o vetor de parâmetros do qual o problema depende.

Devido à não linearidade das equações, este sistema não pode ser resolvido por métodos convencionais diretos e por isso será resolvido de forma iterativa através do método de Newton, que consta do seguinte procedimento:

$$\mathbf{J} \Delta \mathbf{c} = -\mathbf{R}(\mathbf{c}; \mathbf{b}), \quad (2-40)$$

$$(\mathbf{c})^{k+1} = (\mathbf{c})^k + \delta \mathbf{c}, \quad (2-41)$$

$\mathbf{R}$  é avaliando em  $\mathbf{c}^{(k)}$ ,  $\mathbf{J}$  é a matriz Jacobiana cujas componentes são dadas por:

$$J_{ij} \equiv \frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{c}_j}. \quad (2-42)$$

No método de Newton, é necessária a solução de um sistema linear  $\mathbf{J} \Delta \mathbf{c} = -\mathbf{R}$  a cada iteração. Este sistema, por ser esparso, é resolvido pelo algoritmo de solução frontal desenvolvido por Hood [33]. Este algoritmo usa a

decomposição LU completa A iteração se inicia com uma estimativa inicial  $c^0$  da solução do problema e continua até que a Eq.(2-39) seja aproximadamente satisfeita, isto significa que a norma dos vetores resíduo e a solução devam satisfazer a desigualdade:

$$\| \Delta c \|_2 + \| \Delta R \|_2 \leq 10^{-6}. \quad (2-43)$$

O método de Newton converge quadraticamente quando o valor inicial estimado esta dentro do raio de convergência do método, isto é, quando o chute inicial esta perto da solução. Contudo, caso a estimativa inicial esteja fora do raio de convergência a solução irá divergir e uma nova estimativa inicial terá de ser usada.

O código computacional já foi testado e utilizado em anteriores trabalhos como Romero[34] e Zevallos [35] dentre outros.