3
Método Numérico

O sistema de equações diferenciais que descrevem o escoamento aumentado da equação de transporte de $c(\bar{x})$ do método de *Level Set* foi resolvido pelo método de resíduos ponderados e funções base de elementos finitos.

3.1
Formulação integral das equações de Navier - Stokes e Level Set

O resíduo da equação (2-1) é formulado como,

$$R_m = \int_\Omega (\rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \rho \bar{u}.\bar{\nabla} \bar{u} - \bar{\nabla}.\bar{\bar{T}} - \bar{f^B}).W \, d\Omega = 0 \qquad (3\text{-}1)$$

onde W é uma função peso vetorial definida como,

$$W = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} \phi_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \phi_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \cdots, \begin{pmatrix} \phi_n \\ 0 \end{pmatrix}}_{W_1}, \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ \phi_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \cdots, \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_n \end{pmatrix}}_{W_2} \qquad (3\text{-}2)$$

levando em conta a definição de W e escrevendo a equação (3-1) em coordenadas cilíndricas,

$$\begin{aligned} R_m \;\; = \;\; & \int_\Omega \rho [\frac{\partial v_r}{\partial t} W_1 + \frac{\partial v_z}{\partial t} W_2] \, d\Omega \\ & + \int_\Omega \rho [W_1 (v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r}) + W_2 (v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r})] \, d\Omega \\ & + \int_\Omega [T_{rr} \frac{\partial W_1}{\partial r} + T_{zr} (\frac{\partial W_2}{\partial r} + \frac{\partial W_1}{\partial z}) + T_{zz} \frac{\partial W_2}{\partial z} + \frac{1}{r} T_{\theta\theta} W_1] \, d\Omega \\ & - \int_\Gamma (f_r W_1 + f_z W_2) \, d\Gamma - \int_\Omega (f_r^B W_1 + f_z^B W_2) \, d\Omega = 0, \end{aligned} \qquad (3\text{-}3)$$

onde v_r e v_z são componentes da velocidade nas direções r e z respectivamente, f_r e f_z são componentes da força no contorno, f_r^B e f_z^B são forças distribuídas no corpo.

Os resíduos ponderados nas duas direções r e z (desenvolvidas posteriormente) são obtidos considerando-se W_1 e W_2 independentes.

Além disso, para fluidos incompressíveis de massas específicas iguais, o resíduo da equação (2-2) é reduzido a,

$$R_{mc} = \int_{\Omega} (\bar{\nabla}.\bar{u})\chi \, d\Omega = 0 \tag{3-4}$$

Finalmente, o resíduo da equação advectiva de transporte da função escalar $c(\bar{x})$, equação (2-8), é dado por:

$$R_c = \int_{\Omega} (\frac{\partial c}{\partial t} + \bar{u}.\bar{\nabla} c)\psi \, d\Omega = 0 \tag{3-5}$$

3.2 Método de elementos finitos

3.2.1 Definição das funções base

Os campos de velocidade $\bar{u}$, pressão p e função escalar c são escritos como combinação linear de funções base em cada elemento quadrilateral do domínio. Foram utilizadas funções biquadráticas ϕ_j para os campos de velocidade e função escalar c, e funções lineares discontínuas χ_j para escrever a pressão.

$$\begin{aligned}
\bar{u} &= \begin{pmatrix} v_r \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{9} V_{Rj}\phi_j \\ \sum_{j=1}^{9} V_{Zj}\phi_j \end{pmatrix} \\
p &= \sum_{j=1}^{3} P_j \chi_j \\
c &= \sum_{j=1}^{9} C_j \phi_j
\end{aligned} \tag{3-6}$$

As funções Lagrangeanas biquadráticas ϕ_j[18] são definidas como,

$$\begin{aligned}
\phi_1(\xi,\eta) &= \frac{\xi(\xi-1)\eta(\eta-1)}{4}\\
\phi_2(\xi,\eta) &= \frac{\xi(\xi+1)\eta(\eta-1)}{4}\\
\phi_3(\xi,\eta) &= \frac{\xi(\xi+1)\eta(\eta+1)}{4}\\
\phi_4(\xi,\eta) &= \frac{\xi(\xi-1)\eta(\eta+1)}{4}\\
\phi_5(\xi,\eta) &= \frac{(1-\xi^2)\eta(\eta-1)}{2}\\
\phi_6(\xi,\eta) &= \frac{\xi(\xi+1)(1-\eta^2)}{2}\\
\phi_7(\xi,\eta) &= \frac{(1-\xi^2)\eta(\eta+1)}{2}\\
\phi_8(\xi,\eta) &= \frac{\xi(\xi-1)(1-\eta^2)}{2}\\
\phi_9(\xi,\eta) &= (1-\xi^2)(1-\eta^2)
\end{aligned} \tag{3-7}$$

As funções χ_j são definidas como,

$$\begin{aligned}
\chi_1(\xi,\eta) &= 1\\
\chi_2(\xi,\eta) &= \eta\\
\chi_3(\xi,\eta) &= \xi
\end{aligned} \tag{3-8}$$

onde ξ e η são as coordenadas elementares.

O vetor solução $\mathbf{S_V}$ é formado pelos coeficientes de expansão linear:

$$\mathbf{S_V} = \begin{pmatrix} V_{Rj} \\ V_{Zj} \\ C_j \\ P_j \end{pmatrix} \tag{3-9}$$

As equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear para fluidos Newtonianos, equação de Navier - Stokes, são resolvidas usando a formulação de Galerkin, ou seja, a função peso é igual à função base. No entanto, a equação de *Level Set* é resolvida usando a formulação de Petrov-Galerkin[19], onde a função peso ψ_i é escrita como,

$$\psi_i = \phi_i + h_e \frac{\bar{u}}{\|\bar{u}\|}.\bar{\nabla}\phi_i \tag{3-10}$$

onde h_e é um parâmetro usado no método SUPG (Stream Upwind Petrov-Galerkin) para estabilizar o método.

3.2.2 Cálculo do vetor resíduo

Considera-se que o vetor resíduo é formado por quatro partes, as duas primeiras são os resíduos da equação de conservação da quantidade de movimento linear R^i_{mr} e R^i_{mz}, a seguinte é o resíduo da equação de *Level Set* R^i_c e a última parte é o resíduo da equação de conservação de massa R^i_{mc},

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R^i_{mr} \\ R^i_{mz} \\ R^i_c \\ R^i_{mc} \end{pmatrix} \tag{3-11}$$

onde os termos R^i_{mr} e R^i_{mz} são definidos segundo a equação (3-3) como,

$$\begin{aligned} R^i_{mr} &= \int_\Omega \rho \frac{\partial v_r}{\partial t}\phi_i \, d\Omega + \int_\Omega \rho(v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r})\phi_i \, d\Omega \\ &+ \int_\Omega (T_{zr}\frac{d\phi_i}{dz} + T_{rr}\frac{d\phi_i}{dr} + \frac{1}{r}T_{\theta\theta}\phi_i) \, d\Omega \\ &- \int_\Gamma f_r \phi_i \, d\Gamma - \int_\Omega f^B_r \phi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 9 \end{aligned} \tag{3-12}$$

$$\begin{aligned} R^i_{mz} &= \int_\Omega \rho \frac{\partial v_z}{\partial t}\phi_i \, d\Omega + \int_\Omega \rho(v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r})\phi_i \, d\Omega \\ &+ \int_\Omega (T_{zz}\frac{d\phi_i}{dz} + T_{zr}\frac{d\phi_i}{dr}) \, d\Omega \\ &- \int_\Gamma f_z \phi_i \, d\Gamma - \int_\Omega f^B_z \phi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 9 \end{aligned} \tag{3-13}$$

Além disso, a função resíduo da equação advectiva (3-5) é explicitada como,

$$R_c^i = \int_\Omega \frac{\partial c}{\partial t}\psi_i \, d\Omega + \int_\Omega (v_z \frac{\partial c}{\partial z} + v_r \frac{\partial c}{\partial r})\psi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 9 \tag{3-14}$$

Finalmente, apresenta-se também o resíduo explicitado da equação (3-4) em coordenadas cilíndricas,

$$R_{mc}^i = \int_\Omega (\frac{\partial v_z}{\partial z} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r})\chi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 3 \tag{3-15}$$

3.2.3 Cálculo da matriz jacobiana

Uma vez substituída as expansões dos campos nas equações (3-12), (3-13), (3-14) e (3-15); obtém-se um sistema de equações algébricas não lineares. Este sistema é resolvido utilizando-se o método de Newton.

A matriz jacobiana **J** do método de Newton é definida como:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{S_V}} \tag{3-16}$$

A matriz pode ser dividida em 16 blocos, correspondendo às derivadas dos quatro resíduos em relação aos quatro campos não conhecidos (V_{Rj}, V_{Zj}, P_j e C_j):

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial R_{mr}^i}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_{mr}^i}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_{mr}^i}{\partial C_j} & \frac{\partial R_{mr}^i}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_{mz}^i}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_{mz}^i}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_{mz}^i}{\partial C_j} & \frac{\partial R_{mz}^i}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_c^i}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_c^i}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_c^i}{\partial C_j} & \frac{\partial R_c^i}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_{mc}^i}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_{mc}^i}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_{mc}^i}{\partial C_j} & \frac{\partial R_{mc}^i}{\partial P_j} \end{pmatrix} \tag{3-17}$$

Por ser um problema transiente, a matriz jacobiana **J** deve ser dividida por uma parte relacionada com o termo transiente e uma parte relacionada com o termo permanente.

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\Delta t}\mathbf{M} + \mathbf{J_{RP}} \tag{3-18}$$

onde a matriz $\mathbf{M}$ é nomeada matriz massa e calculada como,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \int \rho\phi_j\phi_i d\Omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \int \rho\phi_j\phi_i d\Omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \int \phi_j\psi_i d\Omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3-19}$$

e a matriz $\mathbf{J_{RP}}$ como,

$$\mathbf{J_{RP}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial C_j} & \frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial C_j} & \frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R^{i*}_{c}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R^{i*}_{c}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R^{i*}_{c}}{\partial C_j} & \frac{\partial R^{i*}_{c}}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial C_j} & \frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial P_j} \end{pmatrix} \tag{3-20}$$

É importante mencionar que os termos resíduos R^{i*}_{mr}, R^{i*}_{mz}, R^{i*}_{c} e R^{i*}_{mc} não incluem o termo temporal das respectivas equações. Por exemplo,

$$\begin{aligned} R^{i*}_{mz} \;=\; & \int_\Omega \rho(v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r})\phi_i \, d\Omega \\ & + \int_\Omega (T_{zz}\frac{d\phi_i}{dz} + T_{zr}\frac{d\phi_i}{dr}) \, d\Omega \\ & - \int_\Gamma f_z \phi_i \, d\Gamma - \int_\Omega f^B_z \phi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 9 \end{aligned} \tag{3-21}$$

Em seguida mostra-se em detalhe o cálculo de cada termo:

– Jacobiano de R^{i*}_{mr}:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial V_{Rj}} \;=\; & \int_\Omega \rho(v_z \frac{\partial \phi_j}{\partial z} + v_r \frac{\partial \phi_j}{\partial r} + \phi_j \frac{\partial v_r}{\partial r})\phi_i \, d\Omega + \int_\Omega (\frac{\partial T_{zr}}{\partial V_{Rj}} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \\ & + \frac{\partial T_{rr}}{\partial V_{Rj}} \frac{\partial \phi_i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial V_{Rj}} \phi_i) \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \end{aligned} \tag{3-22}$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial V_{Zj}} = \int_{\Omega} \rho \phi_j \frac{\partial v_r}{\partial z} \phi_i \, d\Omega + \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{zr}}{\partial V_{Zj}} \frac{\partial \phi_i}{\partial z}) \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}23)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial C_j} = \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{zr}}{\partial C_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} + \frac{\partial T_{rr}}{\partial C_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial C_j} \phi_i) \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}24)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial P_j} = \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{rr}}{\partial P_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial P_j} \phi_i) \, d\Omega; i = 1, \cdots, 9; j = 1, 2, 3 \quad (3\text{-}25)$$

– Jacobiano de R^{i*}_{mz}:

$$\frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial V_{Rj}} = \int_{\Omega} \rho \phi_j \frac{\partial v_z}{\partial r} \phi_i \, d\Omega + \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{zr}}{\partial V_{Rj}} \frac{\partial \phi_i}{\partial r}) \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial V_{Zj}} &= \int_{\Omega} \rho (v_z \frac{\partial \phi_j}{\partial z} + v_r \frac{\partial \phi_j}{\partial r} + \phi_j \frac{\partial v_z}{\partial z}) \phi_i \, d\Omega + \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{zz}}{\partial V_{Zj}} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \\ &\quad + \frac{\partial T_{zr}}{\partial V_{Zj}} \frac{\partial \phi_i}{\partial r}) \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \end{aligned} \quad (3\text{-}27)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial C_j} = \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{zz}}{\partial C_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} + \frac{\partial T_{zr}}{\partial C_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial r}) \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}28)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial P_j} = \int_{\Omega} (\frac{\partial T_{zz}}{\partial P_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial z}) \, d\Omega; i = 1, \cdots, 9; j = 1, 2, 3 \quad (3\text{-}29)$$

– Jacobiano de R^{i*}_{mc}:

$$\frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial V_{Rj}} = \int_{\Omega} (\frac{\partial \phi_j}{\partial r} + \frac{\phi_j}{r}) \chi_i \, d\Omega; i = 1, 2, 3; j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}30)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial V_{Zj}} = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \chi_i \, d\Omega; i = 1, 2, 3; j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}31)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial C_j} = 0; i = 1, 2, 3; j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}32)$$

$$\frac{\partial R^{i*}_{mc}}{\partial P_j} = 0; i, j = 1, 2, 3 \quad (3\text{-}33)$$

– Jacobiano de R^{i*}_{c}:

$$\frac{\partial R^{i*}_{c}}{\partial V_{Rj}} = \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial r} \phi_j \psi_i \, d\Omega; i, j = 1, \cdots, 9 \quad (3\text{-}34)$$

$$\frac{\partial R_c^{i*}}{\partial V_{Zj}} = \int_\Omega \frac{\partial c}{\partial z}\phi_j\psi_i\, d\Omega; i,j = 1,\cdots,9 \quad (3\text{-}35)$$

$$\frac{\partial R_c^{i*}}{\partial C_j} = \int_\Omega (v_r\frac{\partial \phi_j}{\partial r} + v_z\frac{\partial \phi_j}{\partial z})\psi_i\, d\Omega; i,j = 1,\cdots,9 \quad (3\text{-}36)$$

$$\frac{\partial R_c^{i*}}{\partial P_j} = 0; i = 1,\cdots,9; j = 1,2,3 \quad (3\text{-}37)$$

É preciso calcular a derivada das componentes do tensor de tensões $\bar{\bar{T}}$ em função de V_{Rj}, V_{Zj}, C_j e P_j (para detalhes: apêndice A).

O cálculo de $\frac{d\mu}{dC_j}$ é necessário para encontrar os termos do jacobiano, considerando a viscosidade definida na equação (2-6) tem-se,

$$\begin{aligned}\frac{d\mu}{dC_j} &= (\mu_2-\mu_1)\frac{dH_\varepsilon(c)}{dC_j} \\ &= \frac{1}{2\varepsilon}(\mu_2-\mu_1)\phi_j\{1+\cos(\frac{\pi c}{\varepsilon})\}; j = 1,\cdots,9 \quad (3\text{-}38)\end{aligned}$$

3.2.4
Método de Newton, solução do problema não linear

O método de Newton foi escolhido para resolver o problema não linear devido à boa convergência. Com um chute inicial adequado a convergência é quadrática.

Então, deve-se resolver iterativamente o seguinte sistema até satisfazer o critério $\|\mathbf{R}\| < erro$.

$$\begin{aligned}\mathbf{J}\Delta\mathbf{S_V}^{n+1} &= -\mathbf{R}(\mathbf{S_V}^n) \\ \mathbf{S_V}^{n+1} &= \mathbf{S_V}^n + \Delta\mathbf{S_V}^{n+1} \quad (3\text{-}39)\end{aligned}$$

Em cada iteração resolve-se o sistema linear usando a decomposição LU utilizando o método frontal para economizar memoria.

3.2.5 Método de Euler implícito, solução do problema transiente

Para resolver o problema transiente, isto é, dependente do tempo usa-se o método de Euler implícito. O chute inicial do seguinte instante de tempo é calculado por uma extrapolação linear dos dois instantes anteriores.

$$\mathbf{Sv}_{i+1}^{0} = \mathbf{Sv}_i + \frac{\mathbf{Sv}_i - \mathbf{Sv}_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}(t_{i+1} - t_i) \tag{3-40}$$

Com esse valor usa-se o método de Newton novamente.

3.2.6 Modelagem da tensão interfacial

Até agora não foi considerado a tensão interfacial entre óleo e água na formulação numérica.

Embora a tensão interfacial seja uma força que age na superfície, considera-se para o modelo que ela é uma força distribuída no corpo[16]. Para garantir que só atua na interface, multiplica-se o novo termo força com a função $\delta(c)$, que é diferente de zero somente na faixa onde está a interface[15].

Por isso, o resíduo ponderado da equação de conservação de quantidade de movimento linear, equação (3-1), é modificado como,

$$R_m = \int_\Omega (\rho\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \rho\bar{u}.\bar{\nabla}\bar{u} - \bar{\nabla}.\bar{\bar{T}} + \sigma k\bar{\nabla}c\delta).W\, d\Omega = 0 \tag{3-41}$$

onde σ e k foram definidos anteriormente.

Por causa do novo termo, adiciona-se à equação (3-12) o seguinte,

$$+\int_\Omega \sigma k\frac{\partial c}{\partial r}\delta(c)\phi_i\, d\Omega; i = 1, \cdots, 9 \tag{3-42}$$

Da mesma maneira se incrementa à equação (3-13) o termo,

$$+\int_{\Omega}\sigma k\frac{\partial c}{\partial z}\delta(c)\phi_i\, d\Omega; i=1,\cdots,9 \tag{3-43}$$

O novo termo da equação (3-41) depende só do campo c e suas derivadas c_r e c_z, por isso apenas alguns termos do jacobiano são modificados.

– Termo adicionado a $\frac{\partial R^{i*}_{mr}}{\partial C_j}$:

$$+\int_{\Omega}\sigma k(\frac{\partial\phi_j}{\partial r}\delta(c)+\frac{\partial c}{\partial r}\frac{d\delta(c)}{dC_j})\phi_i\, d\Omega; i,j=1,\cdots,9 \tag{3-44}$$

– Termo adicionado a $\frac{\partial R^{i*}_{mz}}{\partial C_j}$:

$$+\int_{\Omega}\sigma k(\frac{\partial\phi_j}{\partial z}\delta(c)+\frac{\partial c}{\partial z}\frac{d\delta(c)}{dC_j})\phi_i\, d\Omega; i,j=1,\cdots,9 \tag{3-45}$$

onde o termo $\frac{d\delta(c)}{dC_j}$ é calculado como:

$$\frac{d\delta(c)}{dC_j}=\frac{-\pi\phi_j}{2\varepsilon^2}sin(\frac{\pi c}{\varepsilon}); j=1,\cdots,9 \tag{3-46}$$

Como foi discutido anteriormente a curvatura da interface pode ser expressa em termos do campo $c(\bar{x})$, já que a isolinha $c(\bar{x})=0$ representa a interface entre as fases. Em coordenadas cilíndricas a equação da curvatura, equação (2-14), é função de derivadas segundas do campo escalar c. Como na representação por elementos finitos, as derivadas do campo c são discontínuas nas fronteiras dos elementos, o cálculo da segunda derivada não pode ser feito.

Para contornar este problema, as componentes do gradiente de c, representadas por $c_r=\frac{\partial c}{\partial r}$ e $c_z=\frac{\partial c}{\partial z}$ são considerados campos independentes, também representados por uma combinação linear de funções base de elementos finitos:

$$c_r = \sum_{j=1}^{4} C_{Rj}\varphi_j$$
$$c_z = \sum_{j=1}^{4} C_{Zj}\varphi_j \tag{3-47}$$

onde φ_j é uma função Lagrangeana bilinear.

Desta forma, as segundas derivadas que aparecem no cálculo da curvatura são calculadas como derivadas deste campo auxiliar, denominado de gradiente de c interpolado.

Os resíduos ponderados associados a estes novos campos são:

$$R^i_{c_r} = \int_\Omega (\frac{\partial c}{\partial r} - c_r)\varphi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 4 \tag{3-48}$$
$$R^i_{c_z} = \int_\Omega (\frac{\partial c}{\partial z} - c_z)\varphi_i \, d\Omega; i = 1, \cdots, 4 \tag{3-49}$$

O vetor resíduo deve ser acrescido destes termos no caso de solução de escoamentos com número de capilaridade Ca diferente de infinito.

Da mesma forma, a matriz jacobiana deve ser acrescida dos termos associados aos novos resíduos ponderados e às novas variáveis do problema. O apêndice B desta dissertação apresenta o cálculo da nova matriz jacobiana em detalhes.

Finalmente, a tabela (3.1) resume os graus de liberdade totais por elemento. Percebe-se o grande número de graus, o que significa um alto custo computacional quando considera-se a tensão interfacial.

Tabela 3.1: Número de graus de liberdade total por elemento

Campo incógnita	Graus de liberdade	Função base
v_r	9	biquadrática
v_z	9	biquadrática
p	3	linear discontínua
c	9	biquadrática
c_r	4	bilinear
c_z	4	bilinear
Total	38	