

2

Formulação Matemática

Apresenta-se neste capítulo a descrição matemática do problema físico proposto, isto é o escoamento bi-dimensional, em regime permanente de um líquido newtoniano na região limitada pela fenda de alimentação, o substrato apoiado em um cilindro deformável, e dos meniscos à montante e à jusante. Certamente será requerido um conjunto de ferramentas para realizar tal tarefa.

2.1

Equações de Conservação

Num processo de revestimento deseja-se que a camada de filme depositada seja uniforme tanto na direção longitudinal quanto transversal do substrato. Pode-se por tanto considerar o escoamento como bi-dimensional. Adicionalmente também se pode considerar o processo em regime permanente e em condições isotérmicas. Como a região de análise onde ocorre o revestimento é pequena pode-se desprezar o efeito gravitacional.

Nos processos de revestimento os escoamentos são usualmente dominados por efeitos viscosos e apresentam superfícies livres, este último significa que o domínio do escoamento é desconhecido a priori.

Os parâmetros que descrevem o escoamento são a pressão e o campo de velocidades e elas são governadas pelas equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear.

A equação vetorial simplificada da quantidade de movimento é:

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = \nabla \cdot \underline{\underline{T}} \quad (2-1)$$

onde \vec{v} é o vetor de velocidade, $\underline{\underline{T}}$ é o tensor das tensões e ρ é a densidade do fluido.

A equação de conservação de massa para um líquido incompressível também de forma simplificada é dada por:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2-2)$$

Para avaliar as tensões é necessário introduzir uma equação constitutiva. O líquido é considerado como sendo líquido Newtoniano, e assim:

$$\underline{\underline{T}} = -p \underline{\underline{I}} + \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \quad (2-3)$$

onde \vec{v} é o vetor velocidade e p é a pressão (parte isotrópica do tensor) e $\underline{\underline{I}}$ é o tensor unitário.

2.2

Condições de contorno para resolver as equações de conservação

As equações diferenciais parciais de conservação de quantidade de movimento precisam de condições de contorno. As condições de contorno podem ser de dois tipos: informação sobre a velocidade na fronteira, ou informações sobre a força (tração) que atua na fronteira.

A Figura 2.1 apresenta esquematicamente as condições de contorno utilizadas:

1. Na superfície da barra, aplicação da condição de não deslizamento e não penetração

$$\vec{v} = \vec{0}$$

2. No substrato, condição de não deslizamento e não penetração

$$\vec{v} = V_w \vec{i}$$

3. Entrada do escoamento, perfil parabólico

$$\vec{v} = -\frac{6Q}{H} \left[\left(\frac{x}{H} \right) - \left(\frac{x}{H} \right)^2 \right] \vec{j}$$

4. Saída do escoamento, completamente desenvolvido

$$\vec{n} \cdot \nabla \vec{v} = \vec{0}$$

5. Superfícies livres,

- Condição cinemática

$$\vec{n} \cdot \vec{v} = 0$$

- Balanço de forças na interface

$$\vec{n} \cdot \underline{\underline{T}} = \mathbf{K} \sigma - \vec{n} \cdot Pa$$

$$\vec{n} \cdot \left(\underline{\underline{T}} \cdot \vec{n} \right) = \mathbf{K} \sigma - \vec{n} \cdot Pa$$

$$\vec{t} \cdot (T \cdot \vec{n}) = 0$$

onde σ é a tensão superficial, \mathbf{K} é a curvatura da superfície livre e Pa é a pressão atmosférica.

6. Linha de contato dinâmica (LCD)

- Condição de Navier-Slip

$$\vec{t} \cdot (T \cdot \vec{n}) = \frac{1}{\beta} \vec{t} (\vec{v} - \vec{V}_w)$$

onde β é o coeficiente de deslizamento, \vec{v} é vetor velocidade do fluido e \vec{V}_w é o vetor velocidade da superfície sólida.

- Ângulo de molhamento

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_w = \cos \theta_d$$

\vec{n} e \vec{n}_w são o vetor normal na interface líquida e a superfície do substrato respectivamente, θ_d é o ângulo de contato dinâmico aparente imposto para especificar a inclinação do menisco a montante sobre o substrato.

7. Linha de contato estática à Jusante

$$\vec{x}_{LCE} = \vec{x}_{quina}$$

onde \vec{x}_{LCE} é o vetor posição do fluido que fica na linha de contato estática a jusante que é fixada na quina da barra de revestimento \vec{x}_{quina}

8. Linha de contato estática à Montante

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_w = \cos \theta_d$$

também se deve impor um ângulo de contato entre a interface líquida e a superfície da barra de revestimento, sendo que ele pode se movimentar ao longo da geometria da barra assim:

$$\vec{j} \cdot \vec{x} = H$$

onde H é a posição do perfil do lábio a montante da barra de revestimento acima do substrato

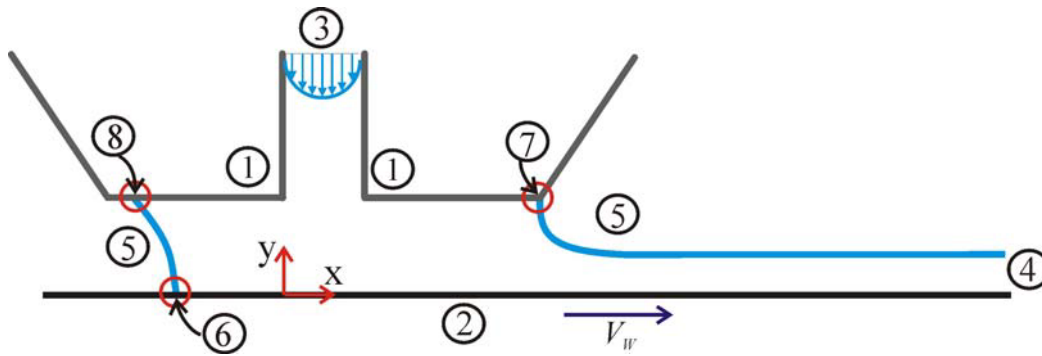


Figura 2.1 - Esquema mostrando a numeração utilizada para descrever as condições de contorno para a equação de quantidade de movimento linear.

2.2.1

Deformação da superfície do cilindro - Modelo unidimensional de molas

Um dos objetivos importantes a se tratar neste trabalho é o análise do processo de revestimento com o substrato apoiado em um cilindro deformável, esta secção apresenta o modelo utilizado para descrever esta interação fluído-estrutura.

Uma simples maneira de descrever a deformação de uma parede elástica é assumindo que o deslocamento de cada ponto na parede não deformada é somente normal a ela e depende apenas da carga aplicada naquele ponto. Tal modelo equivale a uma distribuição contínua de molas independentes orientadas perpendicularmente à parede não deformada, como esquematizado na Figura 2.2.

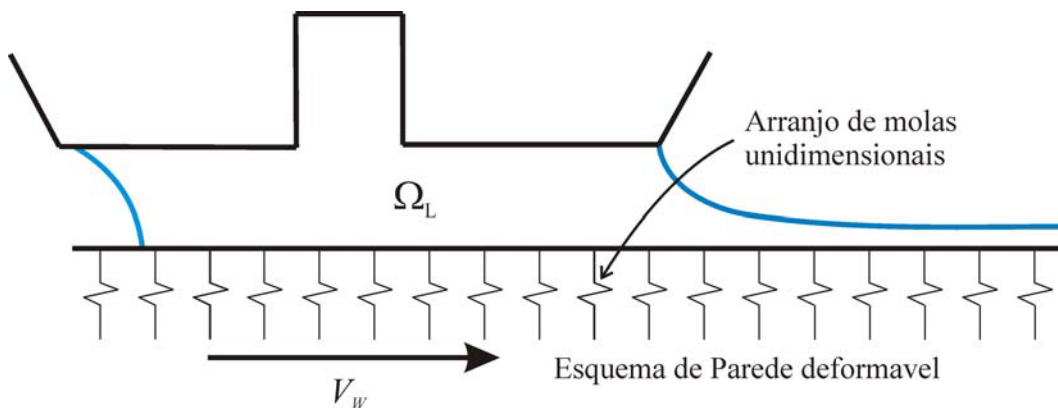


Figura 2.2 - Esquema do modelo de molas.

Na interpretação deste modelo Hookeano, o deslocamento na direção normal na superfície não deformada é uma função linear da componente normal da tração hidrodinâmica, como mostrado na Figura 2.3:

$$\vec{N}_0 \cdot (\vec{n} \cdot \underline{T}) = -K \Delta X \quad (2-4)$$

onde $\Delta X \equiv \vec{N}_0 \cdot (\vec{x} - \vec{X}_0)$ é o deslocamento normal da parede; \vec{X}_0 é a posição de um ponto da parede no seu estado não deformado. \vec{N}_0 é o vetor normal unitário da parede não deformada em \vec{X}_0 ; \vec{n} é o vetor normal unitário da parede deformada em \vec{x} ; \underline{T} é o tensor de tensão de Cauchy no líquido, e K é a constante de proporcionalidade, referido simplesmente como a constante da mola, o qual relaciona-se com as propriedades elásticas da cobertura do cilindro.

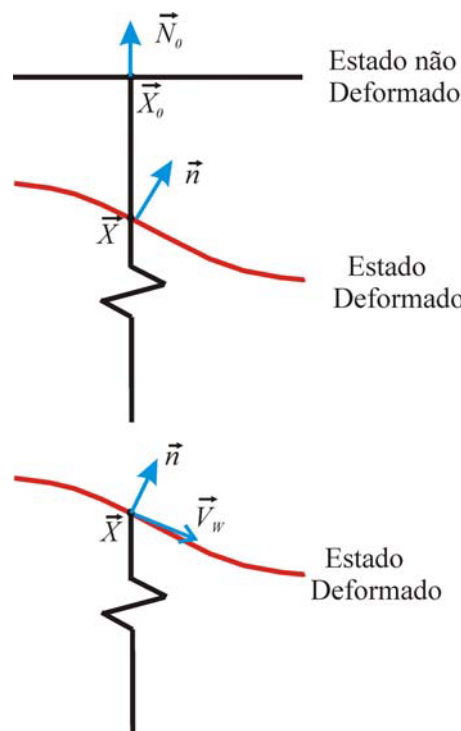


Figura 2.3 - Esquema da deformação da superfície com o modelo de molas.

A força da carga por unidade de área, ou tração, que o líquido faz sobre a parede elástica é $\vec{n} \cdot \underline{T}$. Para o caso de líquido newtoniano, a força de carga é:

$$\vec{n} \cdot \underline{T} = -p\vec{n} + \mu\vec{n} \cdot [\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T] \quad (2-5)$$

Onde p é a pressão do líquido e \vec{v} é a sua velocidade.

A velocidade do fluido que esta em contato com a parede deformável deve ser igual a velocidade da parede, devido à condição de não deslizamento e não penetração. A distribuição da velocidade ao longo da superfície da parede

deformável depende de como se deforma ela. A velocidade da parede deformável é tangencial à parede e corresponde à combinação do movimento de corpo rígido da parede com o movimento de deformação da mola.

A desvantagem deste modelo é que não representa a tensão de cisalhamento que o líquido exerce, a incompressibilidade do material ou o efeito do coeficiente de Poisson.

2.2.2

Parâmetros que governam o problema

No processo de revestimento por extrusão os parâmetros mais importantes estão dados na seguinte tabela Tabela 1:

Parâmetro	Unidades (SI)	Faixa de Operação
Velocidade do substrato, V_w	m/s	0,1 - 5
Distancia barra/substrato, H	m	5 - 1×10^{-4}
Viscosidade do líquido de revestimento, μ	Pa.s	0,0005 - 0,1
Densidade do líquido de revestimento, ρ	Kg/m ³	1000 - 1200
Tensão superficial, σ	Kg/s ²	0,025 - 0,045
Número de Reynolds, Re		0,05 - 1000
Número de Capilaridade, Ca		10^{-4} - 25
Número de elasticidade, Ne		10^{-5} - 0,1

Tabela 1 - Faixas típicas dos parâmetros de operação em processos de revestimento por extrusão - Gates, (1999).

2.3

Escoamento viscoso em processos de revestimento por Extrusão

Analisa-se agora o tipo de escoamento nas zonas de alimentação, na zona à montante e à jusante em função das suas variáveis físicas e geométricas, como mostrado na Figura 2.4. Deve-se indicar que neste análise consideramos a distância barra/substrato diferente na região do lábio à montante H_M e na região do lábio à jusante H_J .

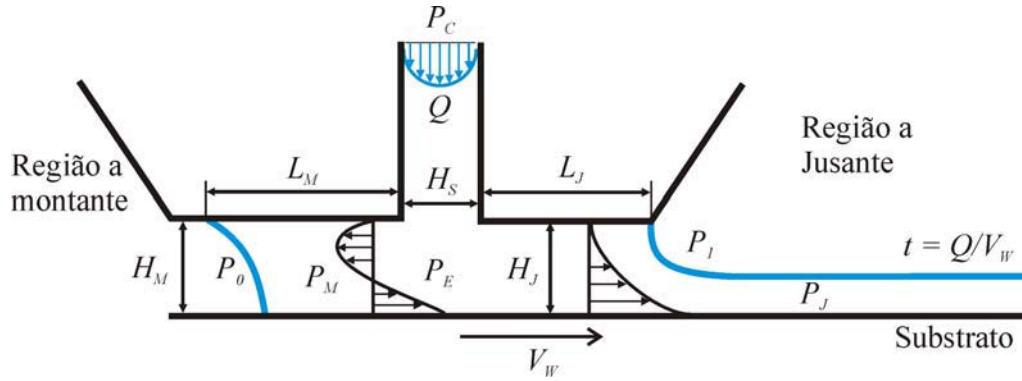


Figura 2.4 - Esquema dos perfis de velocidade no processo de revestimento por extrusão.

A. Escoamento na zona de alimentação (tipo Poiseuille)

$$Q = \frac{H_S^3}{12\mu} \frac{P_C - P_E}{L_F} \quad (2-6)$$

onde P_C é a pressão na câmara de distribuição e P_E é a pressão na região de aplicação sob a fenda de alimentação.

B. Escoamento na zona à montante (combinação Poiseuille + Couette)

$$Q = 0 = \underbrace{\frac{H_M^3}{12\mu} \frac{P_M - P_E}{L_M}}_{< 0} + \frac{V_W H_M}{2} \quad (2-7)$$

$$< 0 \Rightarrow P_M \approx P_0 < P_E$$

onde P_M é a pressão na região de aplicação sob o lábio à montante e P_0 é a pressão do ar próxima ao menisco à montante, H_M distância entre o lábio à montante da barra de revestimento e o substrato.

C. Escoamento na zona à jusante (combinação Poiseuille + Couette)

$$Q = V_W \cdot t = \frac{H_J^3}{12\mu} \cdot \frac{P_E - P_J}{L_J} + \frac{V_W \cdot H_J}{2} \quad (2-8)$$

$$\Rightarrow t = \frac{H_J}{2} + \frac{H_J^3}{12\mu V_W} \cdot \frac{P_E - P_J}{L_J} \quad (2-9)$$

$$\text{caso } t > \frac{H_J}{2} \Rightarrow P_E > P_J \text{ (Para } L_J > 0) \quad (2-10)$$

$$\text{caso } t < \frac{H_J}{2} \Rightarrow P_E < P_J \approx P_1 \text{ (Para } L_J > 0) \quad (2-11)$$

$$\Rightarrow P_0 \approx P_M < P_E < P_J \approx P_1 \quad (2-12)$$

$$\Rightarrow P_1 = P_{atm} \Rightarrow P_0 < P_{atm} \quad (2-13)$$

onde P_J é a pressão na região de aplicação sob o lábio à jusante, P_1 é a pressão do ar próxima ao menisco à jusante e H_J distância entre o lábio à jusante da barra de revestimento e o substrato.

É justamente esse o motivo pelo qual a pressão de vácuo é necessária como mostrado na eq. (1-15), de outro modo o escoamento chegaria a se tornar instável apresentando defeitos.

O escoamento na região à montante e à jusante é uma combinação dos escoamentos de Couette e *Poiseuille*, como se pode observar nos esquemas da Figura 2.5.

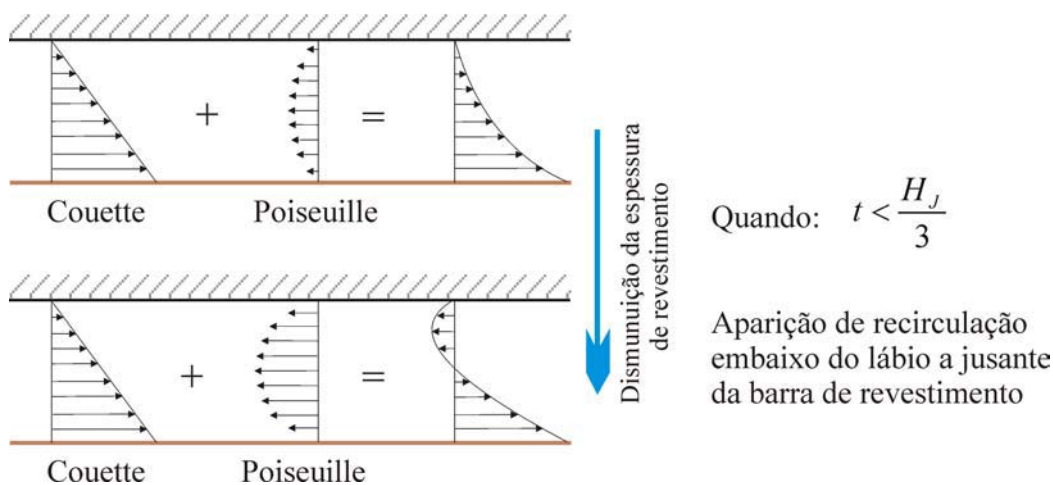


Figura 2.5 - Esquemas dos escoamentos de Couette e Poiseuille entre duas placas paralelas.

2.3.1

Relação entre o Vácuo e a longitude da região de aplicação

Considera-se o termo Vácuo como a diferença entre a pressão ambiental aplicada na região à jusante e a pressão subatmosférica aplicada na região à montante. Analisaremos a influência da pressão de vácuo no comprimento da

região de aplicação, que é a soma dos comprimentos L_M e L_J , mostrados na Figura 2.4.

Da eq. (1.9) e a eq. (1.10) considerando as aproximações da Eq. (1.14), obtemos a seguinte expressão:

$$Vac = P_{atm} - P_{vac} = \frac{12\mu V_w L_J}{H_J^3} \left(\frac{H_J}{2} - t \right) + \frac{6\mu V_w L_M}{H_M^3} (H_M) \quad (2-14)$$

É importante indicar que uma barra de revestimento apresenta uma longitude fixa do lábio à jusante L_J , mais isso não quer dizer que L_J não possa ser uma variável a se analisar, dado que isto implicaria ter outra barra equivalente mas com outra L_J .

Quanto maior for o vácuo, maior será o comprimento à montante L_M , e para o caso limite de não ter a região de aplicação à montante ($L_M = 0$) o mínimo vácuo necessário para obter uma espessura de revestimento, t , é:

$$Vac_{min} = P_{atm} - P_{vac} = \frac{12\mu V_w L_J}{H_J^3} \left(\frac{H_J}{2} - t \right) \quad (2-15)$$

Este regime é instável e impossível de se manter como escoamento permanente e bidimensional, assim o escoamento 2D se tornaria instável dando origem a defeitos no filme revestido.

Quanto maior o comprimento da região de aplicação à montante, maior será a estabilidade do escoamento e maior será a habilidade de acomodar as flutuações na zona de aplicação.

Também existe um valor máximo para o vácuo que pode ser aplicado antes que o comprimento da região à montante aumente demais e o líquido invada a caixa do vácuo.

Desta forma, existe uma faixa de valores de pressão de vácuo de forma que o escoamento seja bi-dimensional e em regime permanente. Fora desta faixa, o processo de revestimento não leva a um produto livre de defeitos.

2.4

Solução de Problemas com superfícies livres e deformáveis

A solução de equações de Navier-Stokes que são válidas em domínios fixos podem se tratar sem muita dificuldade, já que a forma do domínio é conhecida.

Geralmente, é suficiente usar um método algébrico para discretizar esses domínios baseados na distribuição dos subdomínios numa fronteira prescrita pelo usuário, por exemplo, a Interpolação Transfinita (Thompson, Warsi e Mastin (1985)). Mas problemas com superfícies livres como os considerados no presente trabalho apresentam uma dificuldade adicional. Porque a forma do domínio é desconhecida *a priori*, a discretização do domínio não pode ser prescrita, porque esta é parte da solução do problema.

Uma maneira de resolver este inconveniente seria transferir aquele domínio físico desconhecido a outro domínio de referencia fixo, i.e. que o sistema de equações conservação e as condições de contorno formuladas no domínio físico devem ser transformadas para um sistema equivalente definido num domínio de referencia fixo. Esta transformação é efetuada mediante um mapeamento. O mapeamento pode ser efetivado por diversos métodos já existentes como são: o método dos “Splines” ou “Geração elíptica da malha” ou por “deformação do domínio”.

O método mais simples é o **Método dos Splines** (Kistler (1984)). Neste método os nós localizados na superfície livre “deslizam” sobre linhas “splines” pré-definidas como mostrado na Figura 2.6. Nos primeiros trabalhos com “splines” apenas os nós da superfície mudavam de posição. Os demais nós eram fixos, então apresentavam problemas com a malha quando esse deslocamento era maior. Nos trabalhos mais recentes, os nós interiores também se deslocam acompanhando o movimento dos nós da superfície livre; a limitação que apresentaram é que as programações não eram generalizadas e novas “splines” teriam que ser definidas para cada problema.

Os outros métodos como de **Geração da Malha Elíptica** (Christodoulou (1991), Benjamin (1994)) e o **Método da Deformação do Domínio** (de Almeida (1995), Musson (2001)) usam equações diferenciais para gerar a malha. O primeiro deles será utilizado no presente trabalho e será explicado com mais detalhes no Capítulo 2.4.1.

Para resolver este problema aplicando os métodos já mencionados para problemas de valor de contorno, o sistema de equações diferenciais e as condições de contorno formuladas no domínio físico Ω devem ser transformadas para um sistema equivalente definido num domínio de referência ou computacional

$\bar{\Omega}$ conhecido. Esta transformação é efetuada mediante um mapeamento $\bar{x} = \bar{x}(\bar{\xi})$ (mapeamento direto) que conecta os dois domínios ($\Omega \rightarrow \bar{\Omega}$). O domínio físico é parametrizado pelo vetor posição $\bar{x} = (x,y)$ e o domínio de referência por $\bar{\xi} = (\xi, \eta)$ como mostrado na Figura 2.7.

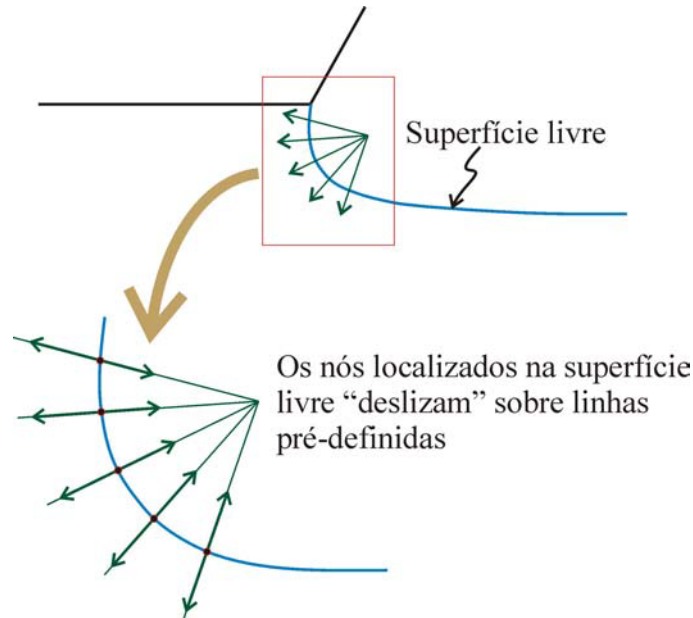


Figura 2.6 - Esquema do método dos Splines.

O mapeamento utilizado faz parte da solução do problema. Existem várias maneiras de definir este mapeamento como já mencionamos acima, como o cálculo de \bar{x} , vetor posição no sistema de coordenadas físicas, corresponde ao cálculo das coordenadas dos pontos nodais da malha, costuma-se denominar as equações que descrevem este mapeamento como equações de geração de malha.

Para escrever as equações que governam o problema no domínio de referência, as derivadas em relação às coordenadas do domínio físico (x,y) devem ser representadas por derivadas em relação as coordenadas do domínio de referência (ξ, η) . Para isto define-se o Tensor Gradiente de Deformação do Mapeamento $(\nabla_{\bar{\xi}} \bar{x})$ que no caso 2D é:

$$\nabla_{\bar{\xi}} \bar{x} = \frac{\partial \bar{x}}{\partial \bar{\xi}} = J_T = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (2-16)$$

Para uma variável $\varphi = \varphi(\xi, \eta)$ qualquer, temos, aplicando a regra da cadeia

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \end{pmatrix} = J_T \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (2-17)$$

Logo, as derivadas em relação às coordenadas x e y podem ser escritas em função das coordenadas do domínio de referência através das seguintes equações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= \frac{1}{|J_T|} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{1}{|J_T|} \left(-\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right) \end{aligned} \quad (2-18)$$

onde,

$$|J_T| = J_T = \det J_T = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (2-19)$$

é o determinante do jacobiano da transformação.

Duas condições devem ser satisfeitas pelo mapeamento:

1. O contorno do domínio de referência deve ser mapeado sobre o contorno do domínio físico (ver Figura 2.7)

$$\bar{\Gamma} \Leftrightarrow \Gamma \quad (2-20)$$

2. O mapeamento deve ser inversível

$$J_T > 0 \quad (2-21)$$

O determinante do jacobiano representa a relação entre as áreas diferenciais dos domínios:

$$d\Omega = |J_T| d\bar{\Omega} \quad (2-22)$$

2.4.1

Geração de Malha Elíptica

Uma possibilidade que se tem mostrado satisfatória para a solução de problemas como superfícies livres é utilizar o método proposto por Benjamin (1994), que é uma generalização do método desenvolvido por Christodoulou

(1988) e Christodoulou e Scriven (1991), e baseia-se na idéia de minimizar um funcional que mede o grau de suavidade da malha:

$$\int_{\Omega} (D_{\xi} |\nabla \xi|^2 + D_{\eta} |\nabla \eta|^2) d\Omega = 0 \quad (2-23)$$

D_{ξ} e D_{η} são os coeficientes de difusão das coordenadas potenciais ξ e η , e controlam o espaçamento das curvas de ξ e η constante. As equações de Euler que minimizam este funcional são um par de equações diferenciais parciais elípticas, similares às encontradas em problemas de transferência de calor com condutividade térmica variável.

$$\nabla \cdot (D_{\xi} \nabla \xi) = 0 \quad (2-24)$$

$$\nabla \cdot (D_{\eta} \nabla \eta) = 0 \quad (2-25)$$

A forma geral destas equações pode ser escrita da seguinte forma:

Quando os coeficientes de difusão são constantes, as equações anteriores se reduzem à equação de Laplace.

As equações anteriormente indicadas, formuladas no domínio físico, descrevem o mapeamento inverso $\vec{\xi} = \vec{\xi}(\vec{x})$, isto é ξ e η são variáveis dependentes. Como o objetivo do esquema de geração da malha é encontrar o mapeamento direto $\vec{x} = \vec{x}(\vec{\xi})$, estas equações são reescritas no domínio de referência, calculado assim as coordenadas no domínio físico em função de coordenadas no domínio de referência.

O mais simples domínio de referência a ser adotado é uma região quadrangular dividida em quadrados unitários.

Em muitas situações um domínio físico complexo deve ser dividido em várias regiões, cada uma das quais pode ser mapeada em regiões quadradas de referência, tal como é mostrado na Figura 2.7. Quando isto acontece condições de contorno especiais são necessárias, como por exemplo, para as interfaces entre regiões, ou quando várias regiões coincidem num único ponto.

Esta técnica tem sido aplicada com muito sucesso por diversos pesquisadores porque malhas estruturadas, suaves, quase ortogonais e com espaçamento controlado são obtidas.

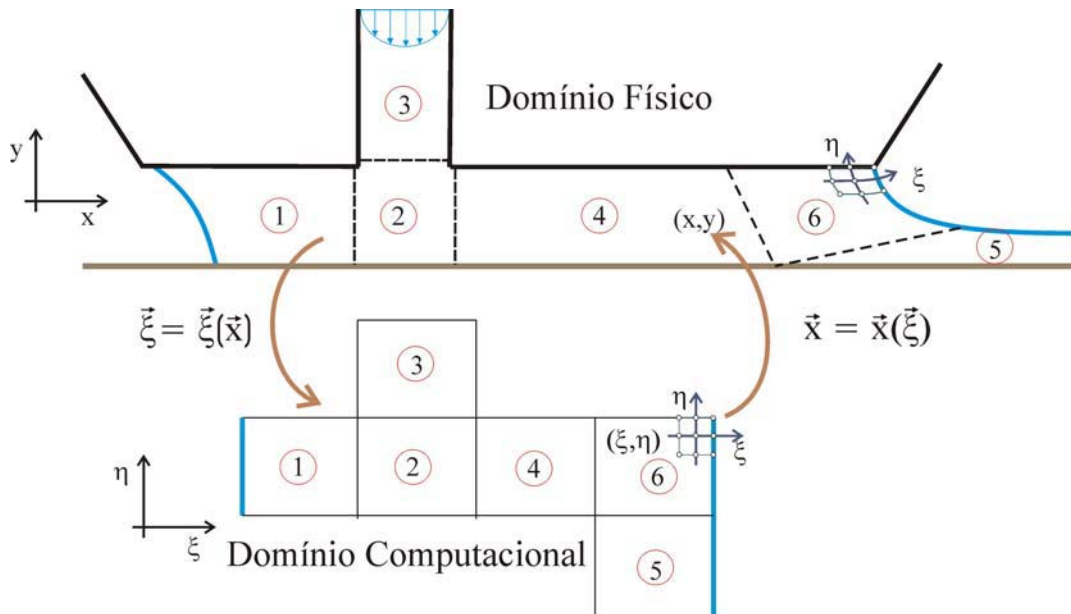


Figura 2.7 - Esquema mostrando o processo de mapeamento.

Para resolver o par de equações diferenciais parciais apresentadas na eq. (2-24), e na eq. (2-25) é necessário ter condições de contorno. Estas são apresentadas à continuação.

2.4.2 Condições de contorno para a Geração da Malha

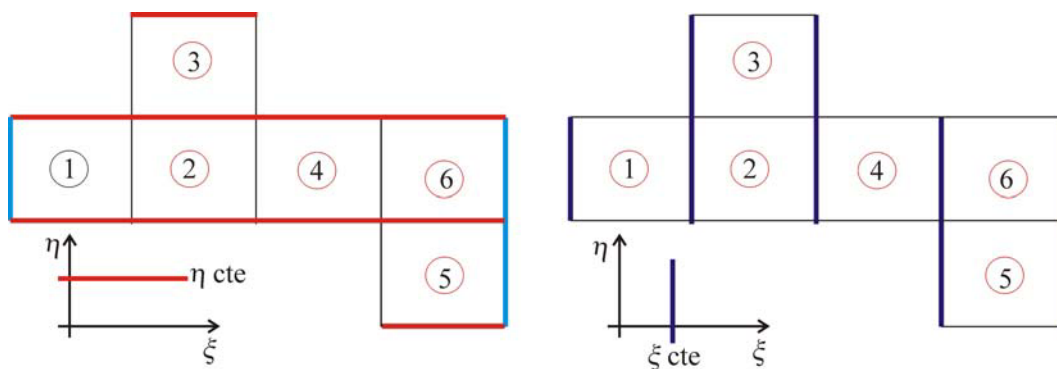


Figura 2.8 - Representação das condições de contorno para a geração da malha: a) η da eq. (2-25), b) ξ da eq. (2-24).

As condições de contorno que são comumente utilizadas para as equações de geração de malha como referenciado com a Figura 2.9, serão descritas a seguir:

1. **Ângulo prescrito:** O ângulo θ formado pelas coordenadas ξ ou η (como mostrado na Figura 2.8) é prescrito ao longo do contorno.

$$\vec{n} \cdot \nabla \vec{\xi} = |\nabla \vec{\xi}| \cos(\theta) \quad (2-26)$$

2. **Nós fixos:** A posição dos nós nos contornos é fixa.
3. **Distribuição nodal prescrita:** uma função de distribuição é utilizada para distribuir os nós ao longo do contorno.

$$\xi = f^{-1}(s), \eta = g^{-1}(s) \quad (2-27)$$

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.

$$f(x) = 0 \quad (2-28)$$

5. **Condição cinemática:** O líquido não pode atravessar a superfície livre, esta condição associada com a física do problema é formulada por:

$$\vec{n} \cdot \vec{v} = 0 \quad (2-29)$$

Esta relação localiza implicitamente a posição de uma superfície livre, e é responsável pelo acoplamento das equações de conservação e as equações que descrevem a posição dos nós da malha.

Uma representação esquemática das condições de contorno de malha elíptica foram apresentadas no trabalho de Zevallos (2003) como mostrado na Figura 2.9.

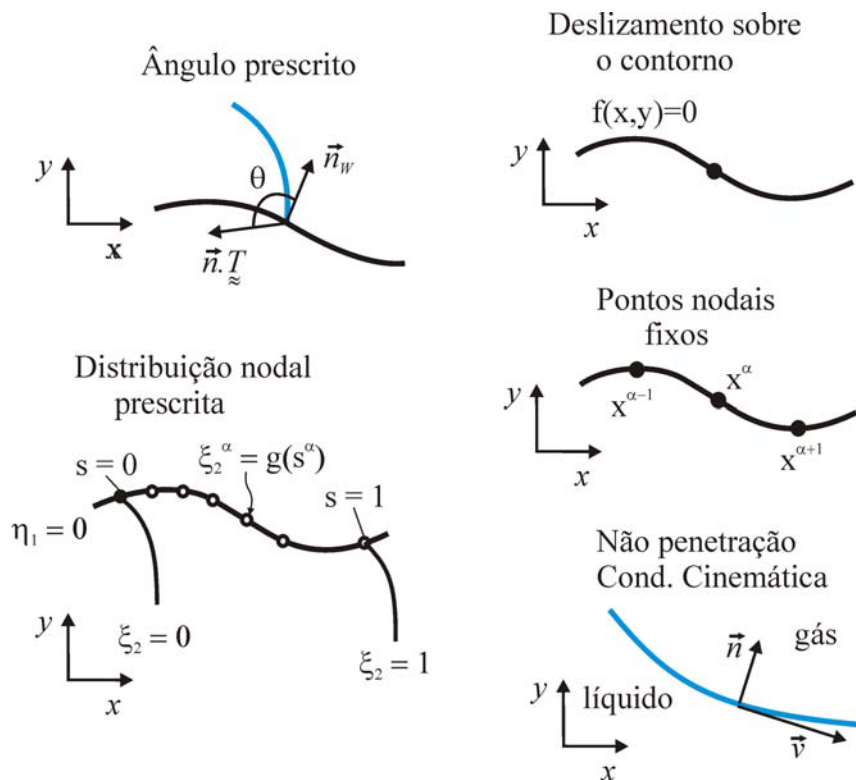


Figura 2.9 - Condição de contorno das equações de geração de malha elíptica. A condição de pontos nodais fixos é apropriada para contornos cuja localização é fixa e conhecida. A condição de não penetração é apropriada para superfícies livres. A condição de ângulo prescrito, distribuição nodal prescrita, e a equação prescrita dos contornos (pontos nodais que podem deslizar) são apropriadas para contornos conhecidos tanto quanto contornos cuja localização forma parte do problema.