3
Modelagem computacional do escoamento com superfícies livres e deformáveis

Para resolver o escoamento em processos de revestimentos por Extrusão, se fizeram uso do sistema de equações de Navier-Stokes na forma bidimensional e as condições de contorno apropriadas e como o problema apresenta superfícies livres foi preciso transferir aquele domínio físico desconhecido a outro domínio de referencia fixo, esta transformação é efetuada mediante um mapeamento representado por um par de equações diferenciais parciais elípticas indicadas no capitulo anterior. Todas estas equações diferenciais deveram ser resolvidas de forma acoplada resultando num sistema de equações diferenciais. O sistema de equações diferenciais parciais será resolvido pelo método dos Elementos Finitos especificamente o método de Galerkin.

3.1
Solução do sistema de equações pelo método de Galerkin/ Elementos Finitos

As equações da continuidade, da conservação da quantidade de movimento, da geração da malha são resolvidas utilizando o método de Galerkin. As formas fracas das equações de continuidade, da quantidade de movimento e da malha são escritas da seguinte maneira:

$$Rc = \int_{\bar{\Omega}} (\nabla \cdot \vec{v}) \chi J_T \, \mathbf{d}\bar{\boldsymbol{\Omega}}, \tag{3-1}$$

$$Rm = \int_{\bar{\Omega}} \rho (\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) \vec{W} J_T \, d\bar{\boldsymbol{\Omega}} + \int_{\bar{\Omega}} (\underset{\approx}{T} : \nabla \vec{W}) J_T \, d\bar{\boldsymbol{\Omega}} - \int_{\bar{\Gamma}} (\vec{n} \cdot \underset{\approx}{T}) \cdot \vec{W} \left(\frac{d\boldsymbol{\Gamma}}{d\bar{\boldsymbol{\Gamma}}} \right) d\bar{\boldsymbol{\Gamma}}, \tag{3-2}$$

$$Rx = -\int_{\bar{\Omega}} (\nabla \vec{W} \cdot \underset{\approx}{D} \cdot \nabla \vec{\xi}) J_T \, d\bar{\boldsymbol{\Omega}} + \int_{\bar{\Gamma}} (\vec{n} \cdot \underset{\approx}{D} \cdot \nabla \vec{\xi}) \cdot \vec{W} \left(\frac{d\boldsymbol{\Gamma}}{d\bar{\boldsymbol{\Gamma}}} \right) d\bar{\boldsymbol{\Gamma}}, \tag{3-3}$$

$\vec{W}$ = (ϕ_1, ϕ_2) é o vetor função peso da equação da conservação da quantidade de movimento e de geração da malha, χ é a função peso da equação de continuidade, e $\underset{\approx}{D}$ é o tensor de coeficientes de difusão.

Uma expansão das equações acima em coordenadas cartesianas é apresentada a seguir.

- **Resíduos da equação da continuidade:** Rc^i

$$Rc^i = \int_{\bar{\Omega}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \chi_i J_T d\bar{\mathbf{\Omega}} \qquad (3\text{-}1)$$

- **Resíduos da equação da conservação da quantidade de movimento linear:** Rm^i

$$\begin{aligned} Rm_x^i = \int_{\bar{\Omega}} \left[\rho\varphi_i \left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} T_{xx} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} T_{xy} \right) \right] J_T d\bar{\mathbf{\Omega}} - \\ \int_{\bar{\Gamma}} \varphi_i (\vec{n} \cdot \underset{\approx}{T})_x \left(\frac{d\mathbf{\Gamma}}{d\bar{\mathbf{\Gamma}}} \right) d\bar{\mathbf{\Gamma}} \end{aligned} \qquad (1\text{-}2)$$

$$\begin{aligned} Rm_y^i = \int_{\bar{\Omega}} \left[\rho\varphi_i \left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} T_{xy} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} T_{yy} \right) \right] J_T d\bar{\mathbf{\Omega}} - \\ \int_{\bar{\Gamma}} \varphi_i (\vec{n} \cdot \underset{\approx}{T})_y \left(\frac{d\mathbf{\Gamma}}{d\bar{\mathbf{\Gamma}}} \right) d\bar{\mathbf{\Gamma}} \end{aligned} \qquad (1\text{-}3)$$

- **Resíduos da equação de geração da malha:** $\boldsymbol{Rx^i}$

$$R_{\mathbf{x}}^i = -\int_{\bar{\Omega}} D_\xi \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial \eta}\frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) d\bar{\mathbf{\Omega}} + \int_{\bar{\Gamma}} D_\xi \frac{1}{J} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\eta_x - \frac{\partial x}{\partial \eta}\eta_y \right) \varphi_i \left(\frac{d\mathbf{\Gamma}}{d\bar{\mathbf{\Gamma}}} \right) d\bar{\mathbf{\Gamma}} \qquad (1\text{-}4)$$

$$R_{\mathbf{y}}^i = -\int_{\bar{\Omega}} D_\eta \left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial \xi}\frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) d\bar{\mathbf{\Omega}} + \int_{\bar{\Gamma}} D_\eta \frac{1}{J} \left(-\frac{\partial y}{\partial \xi}\eta_x + \frac{\partial x}{\partial \xi}\eta_y \right) \varphi_i \left(\frac{d\mathbf{\Gamma}}{d\bar{\mathbf{\Gamma}}} \right) d\bar{\mathbf{\Gamma}} \qquad (1\text{-}5)$$

Quando o Modelo de Molas é usado para descrever a deformação da camada elástica do cilindro, o balanço de forças na parede deformável representado pela eq. (2.4), é também aplicado dentro de uma forma integral. Uma das equações residuais da geração de malha é substituída pelo resíduo ponderado do balanço de tensões normais.

$$R_{\mathbf{y}}^i = \int_{\bar{\Gamma}} \left\{ \frac{1}{K} \vec{N}_0 \cdot (\vec{n} \cdot \underset{\approx}{T}) + \vec{N}_0 \cdot (\vec{x} - \vec{X}_0) \right\} \delta_i \left(\frac{d\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{def}}}{d\bar{\mathbf{\Gamma}}} \right) d\bar{\mathbf{\Gamma}} = 0 \qquad (1\text{-}6)$$

A deformação somente será na coordenada "*y*" como mostrada do domínio físico da Figura 2.7. As funções ponderadas δ são escolhidas para representar funções Delta Dirac (método de colocação), tais que o resíduo se torne num avaliador da condição de contorno, assim:

$$R_y^i = \left\{ \frac{1}{K} \vec{N}_0 \cdot (\vec{n} \cdot \underset{\approx}{T}) + \vec{N}_0 \cdot (\vec{x} - \vec{X}_0) \right\}_{yi} = 0 \qquad (1\text{-}7)$$

3.1.1
Representação dos campos através de funções base

As funções base são iguais às funções pesos (fundamento do método de Galerkin) e os campos desconhecidos são então representadas como uma combinação linear destas.

Os campos desconhecidos como as velocidades u e v, pressão p, posição dos nós da malha x, y são escritos em cada elemento como:

$$\vec{v} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{9} (U_j \varphi_j) \\ \sum_{j=1}^{9} (V_j \varphi_j) \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{2 \times 9 \ \ incógnitas;} \qquad (1\text{-}8)$$

$$\vec{p} = \begin{bmatrix} p \\ \partial p / \partial x \\ \partial p / \partial y \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{3} (P_j \chi_j) \Rightarrow \mathbf{3 \ \ incógnitas;} \qquad (1\text{-}9)$$

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{9} (X_j \varphi_j) \\ \sum_{j=1}^{9} (Y_j \varphi_j) \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{2 \times 9 \ \ incógnitas;} \qquad (1\text{-}10)$$

onde $\phi_j(\xi, \eta)$ são funções bases representadas por polinômios lagrangeanos biquadráticos, $\chi_j(\xi, \eta)$ são funções base linear descontínuas, U_j, V_j, P_j, X_j e Y_j são os coeficientes da expansão de cada campo em termo das funções base e representam as incógnitas do problema discretizado.

A escolha da combinação de funções base não é arbitrária porque a convergência do método pode ser prejudicada. Para o caso Newtoniano é provado que elementos biquadráticos para a velocidade e linear descontínua para a pressão funcionam bem (Santos, J. M. 0). Para esta combinação a condição de Ladyzhenskaya-Babûska-Brezzi (Brezzi e Fortin (1991)) é satisfeita.

3.2
Solução do sistema de equações não lineares pelo método de Newton

A integração numérica das equações dos resíduos ponderados é efetuada utilizando o Método da Quadratura Gaussiana com três pontos de integração em cada direção.

Quando as variáveis independentes são escritas em termos das funções base, obtém-se um sistema de equações algébricas não lineares, cuja representação em notação compacta é:

$$\vec{R}(\vec{c};\vec{b}) = 0 \qquad \textbf{(1-11)}$$

$\vec{R}$ é o vetor de resíduos ponderado associado como os graus de liberdade de cada elemento, $\vec{c}$ representa o vetor solução (coeficientes das funções base que são as incógnitas do problema) e $\vec{b}$ é o vetor de parâmetros do qual o problema depende. A equação anterior é resolvida de forma iterativa através do método de Newton:

$$J\delta\vec{c} = -\vec{R}(\vec{c};\vec{b}) \qquad \textbf{(1-12)}$$

$$\delta\vec{c} = \vec{c}^{\,k+1} - \vec{c}^{\,k} \qquad \textbf{(1-13)}$$

$\vec{R}$ é avaliado em $c^{(k)}$, **J** é a matriz Jacobiana cujos componentes são dados por:

$$\mathbf{J}_{ij} \equiv \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial \vec{c}_j} \qquad \textbf{(1-14)}$$

Neste trabalho os coeficientes da matriz Jacobiana são calculados analiticamente

A iteração começa com um valor inicial estimado c^0 e continua até que a equação da notação compacta seja aproximadamente satisfeita, isto significa que a norma L_2 dos vetores resíduos e vetor solução devem satisfazer a desigualdade

$$\|\delta c\|_2 + \|\delta R\|_2 \le \varepsilon$$

O método de Newton converge quadráticamente quando a estimativa inicial está perto da solução, mas pode divergir quando esta aproximação inicial cai fora do raio de convergência. Métodos de continuação são utilizados para garantir boas inicializações.

Em cada iteração de método de Newton, a matriz banda resultante é resolvida mediante decomposição LU utilizando o método frontal proposto por Hood (1976). Subrotinas denominadas *Basic Linear Álgebra Subprograms* (BLAS) são utilizadas para melhorar a portabilidade do código quando plataformas diferentes são usadas. O método frontal oferece a vantagem de economia de memória.

3.3 Estratégia de continuação para obter o ponto de dobra

Pontos críticos geralmente estão presentes na solução de equações diferenciais não lineares. Dentre estes, encontra-se com mais freqüência os pontos chamados de pontos de dobra, os quais podem ser determinados por análise de estabilidade ou construindo o caminho da solução (como feito neste trabalho). Em um ponto de dobra, a matriz Jacobiana do método de Newton é singular. Análises de estabilidade linear com respeito a perturbações 2D de um sistema físico prevêem uma mudança de estabilidade precisamente no ponto de dobra. Então traçando o lugar geométrico dos diversos pontos de dobra em função das variáveis de operação, encontra-se a região de operação estável do processo. Neste trabalho os pontos de dobra correspondem ao limite de espessura.

Em solução de escoamento com superfícies livres, obter uma primeira solução numérica convergida é complicado. As presenças das superfícies livres e das linhas de contato tornam as equações altamente não lineares e o processo de solução bastante complexo. O elevado número de parâmetros que controlam o escoamento e o elevado número de incógnitas incrementa o tamanho e a esparcidade da matriz a ser invertida dificultando ainda mais o processo de obtenção da solução.

Para obter uma boa estimativa inicial para o problema com superfície livre, resolve-se o escoamento em uma geometria fixa e as superfícies livres são substituídas por paredes deslizantes. Esta solução é utilizada como "chute inicial" para resolver o problema com a superfície livre com tensão superficial alta. Uma explicação detalhada das estimativas é apresentada na próxima secção.