

## 4

# Formulação Matemática e Método de Solução Numérica

Este capítulo faz a descrição da formulação matemática que descreve o escoamento imiscível de uma gota através de um capilar reto e um capilar com uma constrição. Logo a seguir, são apresentados os métodos utilizados para discretizar o sistema de equações diferenciais resultante, que é efetuado usando dois métodos. O método de Galerkin/Elementos Finitos é usado na discretização espacial do problema, e o método das diferenças finitas para a discretização do termo temporal das equações de conservação de quantidade de movimento.

### 4.1

## Equações de Conservação

Apresenta-se aqui o modelo físico que descreve o deslocamento de um fluido newtoniano de viscosidade  $\mu_2$  por uma gota de outro fluido newtoniano de viscosidade  $\mu_1$ . A gota deslocante se move com uma velocidade  $U$ . De forma a simplificar a análise, as equações governantes são escritas em relação a um sistema referencial colocado na ponta da interface (ver Fig.4.2). No sistema de referência o escoamento é permanente e a parede superior movimenta-se com velocidade  $U$ .

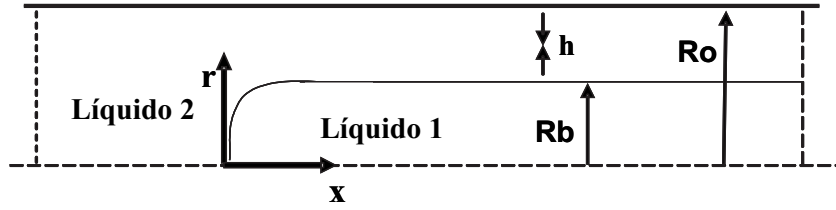


Figura 4.1: Modelo do problema a resolver.

A geometria analisada é um capilar axi-simétrico de raio  $R_o$ . É assumido que os líquidos são incompressíveis e o escoamento é laminar. Os campos de velocidade e pressão são governados pela equação de continuidade e pela equação de conservação de momento linear, descritas como:

Equação de conservação de quantidade de movimento:

$$\rho_k \left( \frac{\partial \mathbf{u}_k}{\partial t} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla \mathbf{u}_k \right) = -\nabla p_k + \nabla \cdot \tau_k + \rho_k \mathbf{g} \quad (4-1)$$

Equação da continuidade:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_k = 0 \quad (4-2)$$

Onde o índice  $k$  pode ser 1 ou 2, em referência as duas fases envolvidas. O vetor velocidade é denotado por  $\mathbf{u}$ , a pressão por  $p$ , a aceleração da gravidade local por  $\mathbf{g}$ ,  $\rho$  é a massa específica, e  $\tau$  é o tensor extra tensão. No problema em questão, os fluidos analisados apresentam comportamento Newtoniano, e assim  $\tau$  é dado por:

$$\tau_k = \mu_k \hat{\gamma} \quad (4-3)$$

onde:

$$\dot{\gamma} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (4-4)$$

Dado que o escoamento é através de um capilar, escolhe-se a representação em coordenadas cilíndricas das equações, que tomam a forma:

Equação de continuidade:

$$0 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rv_k) + \frac{\partial}{\partial x}(u_k) \quad (4-5)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento linear na direção axial

$$\rho_k \left( \frac{\partial u_k}{\partial t} + v_k \frac{\partial u_k}{\partial r} + u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} \right) = \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\tau_{(rx)k}) + \frac{\partial}{\partial x}(\tau_{(xx)k}) \right] - \frac{\partial p_k}{\partial x} \quad (4-6)$$

Equação de conservação da quantidade de movimento linear na direção radial

$$\rho_k \left( \frac{\partial v_k}{\partial t} + v_k \frac{\partial v_k}{\partial r} + u_k \frac{\partial v_k}{\partial x} \right) = \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\tau_{(rr)k}) - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} + \frac{\partial}{\partial x}(\tau_{(rx)k}) \right] - \frac{\partial p_k}{\partial r} \quad (4-7)$$

## 4.2 Condições de Contorno

As características conferidas ao escoamento pela interface e pelas fronteiras sólidas entram na descrição da mecânica do escoamento multifásico como condições de contorno, as quais são prescritas subseqüentemente nas considerações das equações de conservação para uma fase fluida simples.

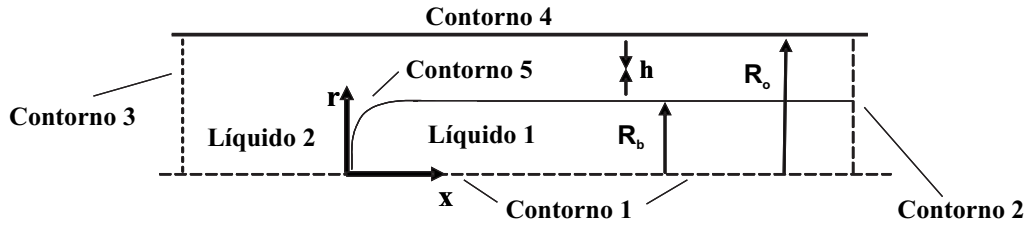


Figura 4.2: Contornos do problema do escoamento imiscível num capilar reto.

As condições de contorno utilizadas neste trabalho são aplicadas nos lugares geométricos mostrados na Fig. 4.2. A linha de simetria é uma linha de corrente do escoamento, e portanto a tensão cisalhante e a componente radial de velocidade são nulas (1). Supondo que os contornos (2) e (3) estão suficientemente distantes da ponta da interface, considera-se que o escoamento é desenvolvido. Suficientemente distante à esquerda, no contorno (3), o escoamento é desenvolvido e a pressão é imposta. Suficientemente distante à direita da ponta da interface (2), o escoamento é desenvolvido e a pressão é uniforme na seção transversal de cada líquido e livre para permitir o ajuste de forças de tensão interfacial existentes na superfície livre do contorno. A condição de impermeabilidade e não deslizamento com velocidade prescrita é considerada na parede superior, contorno (4). A linha da interface, contorno (5), corresponde também a uma linha de corrente do escoamento. Não existe salto de velocidade, mas existe uma descontinuidade de tensão na interface que é balanceada pela pressão capilar. Desta forma, as condições de contorno do problema podem ser descritas matematicamente:

$$\text{Contorno (1)} \Rightarrow \text{Simetria axial}$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_k = 0 \quad , \quad \mathbf{t} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_k) = 0 \quad (4-8)$$

Contorno (2)  $\Rightarrow$  Escoamento desenvolvido com pressão livre

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_k = 0 \quad (4-9)$$

Contorno (3)  $\Rightarrow$  Escoamento desenvolvido com pressão conhecida

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u}_2 = 0 \quad , \quad p_2 = P \quad (4-10)$$

Contorno (4)  $\Rightarrow$  Impermeabilidade e não deslizamento com velocidade prescrita na parede

$$\mathbf{u}_2 = U \mathbf{e}_x \quad (4-11)$$

Contorno (5)  $\Rightarrow$  Impermeabilidade e descontinuidade de tensão normal na interface

$$(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) = 0 \quad , \quad \mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_1 - \mathbf{T}_2) = \frac{\sigma}{R_m} \mathbf{n} \quad (4-12)$$

Nas equações apresentadas,  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{t}$  são os vetores normal e tangente à superfície respectivamente,  $\mathbf{T}$  é o tensor das tensões,  $U$  é a velocidade prescrita na parede do tubo,  $p_2$  é a pressão no contorno (4),  $\sigma$  é a tensão superficial e  $R_m$  o raio médio de curvatura entre as fases fluidas.

Em coordenadas cilíndricas, as condições de contorno são dadas por:

(Contorno 1)  $\Rightarrow$  Simetria axial (Tensão tangencial nula e impermeabilidade)

$$t_r (T_{(rr)k} n_r + T_{(xr)k} n_x) + t_x (T_{(rx)k} n_r + T_{(xx)k} n_x) = 0 \quad (4-13)$$

$$n_r v_k + n_x u_k = 0 \quad (4-14)$$

(Contornos 2 e 3)  $\Rightarrow$  Escoamento desenvolvido:

Componente radial

$$n_r \frac{\partial v_k}{\partial r} + n_x \frac{\partial v_k}{\partial x} = 0 \quad (4-15)$$

Componente axial

$$n_r \frac{\partial u_k}{\partial r} + n_x \frac{\partial u_k}{\partial x} = 0 \quad (4-16)$$

(Contorno 5)  $\Rightarrow$  Condição de contorno na interface

Impermeabilidade

$$n_r (v_1 - v_2) + n_x (u_1 - u_2) = 0 \quad (4-17)$$

Descontinuidade de tensão na direção radial ou normal

$$n_r (T_{(rr)1} - T_{(rr)2}) + n_x (T_{(xr)1} - T_{(xr)2}) = \frac{\sigma}{R_m} n_r \quad (4-18)$$

Descontinuidade de tensão na direção axial

$$n_r (T_{(xr)1} - T_{(xr)2}) + n_x (T_{(xx)1} - T_{(xx)2}) = \frac{\sigma}{R_m} n_x \quad (4-19)$$

Nas equações anteriores,  $n_r$  e  $n_x$  são os componentes do vetor normal,

$t_r$  e  $t_x$  são os componentes do vetor tangente e  $T_{rr}$ ,  $T_{rx}$ ,  $T_{xr}$ ,  $T_{xx}$  são os componentes do tensor das tensões. Os índices x e r indicam as direções axial e radial e os índices 1 e 2 indicam o fluido deslocante e o deslocado, respectivamente.

A equação (4-12) representa o efeito da tensão interfacial no salto de pressão através de uma interface curva, como descrito originalmente por Young e Laplace.

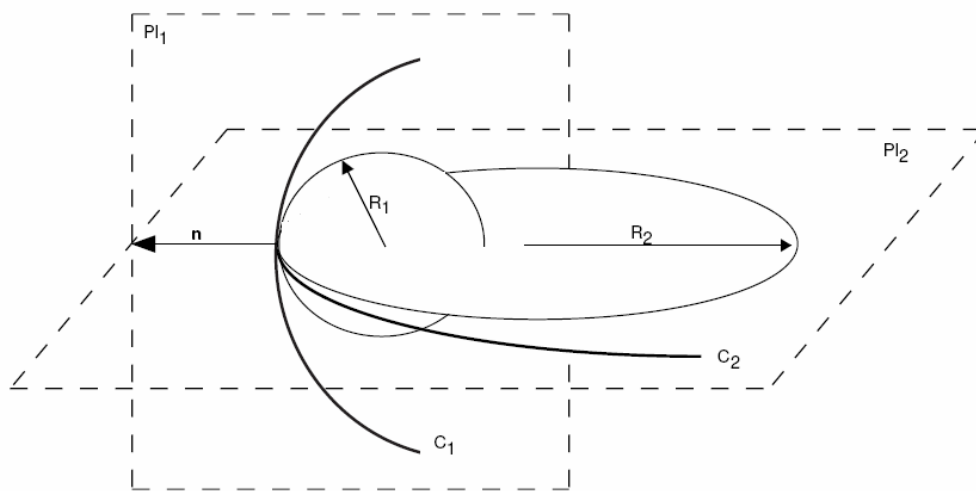


Figura 4.3: Representação dos raios principais de curvatura,  $R_1$  e  $R_2$

Para dar uma interpretação física do raio médio de curvatura,  $R_m$ , considere a Fig.4.3. O raio médio de curvatura de uma interface em um dado ponto pode ser visualizado pela construção de dois planos perpendiculares,  $P_1$  e  $P_2$ , cuja linha de intersecção coincide com o vetor normal,  $\mathbf{n}$ , apontado para fora naquele ponto. As intersecções da interface com cada plano fornecem duas curvas,  $C_1$  e  $C_2$ . O raio médio de curvatura relaciona-se com a curvatura destas duas curvas no ponto de interesse. Determina-se a curvatura de cada curva fazendo com que dois círculos (círculo de raio  $R_1$  e círculo de raio  $R_2$ ) tangenciem cada curva no ponto de interesse de modo

tal que as primeiras e segundas derivadas dos círculos no ponto sejam iguais nas derivadas das curvas. Assim, o raio médio de curvatura no ponto de interesse é dado por:

$$\frac{1}{R_m} = \pm \frac{1}{2} \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (4-20)$$

A escolha apropriada do sinal depende da configuração do problema em questão. No problema estudado, o raio de curvatura em cada ponto ao longo da interface é dado por:

$$\frac{1}{R_m} \mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{x_s^2 + r_s^2}} \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} - \frac{x_s}{r \sqrt{x_s^2 + r_s^2}} \mathbf{n} \quad (4-21)$$

onde  $s$  é comprimento de arco ( $s = \sqrt{dx^2 + dy^2}$ ) ao longo da interface.

### 4.3 Método de solução do problema

Na seção anterior foi exposta a formulação matemática do problema a resolver. Agora são considerados os passos necessários para obter a solução numérica do problema usando o método de Galerkin/Elementos Finitos para a discretização espacial do problema, e o método das diferenças finitas para a discretização de termo temporal das equações de conservação de quantidade de movimento.

#### 4.3.1 Formulação do problema de superfície livre

Devido à existência de uma superfície livre o domínio de integração em cada fase líquida é desconhecido. Um modo de resolver este problema é



reescreve-lo em um domínio de referência fixo e utilizar técnicas usuais para problemas de valores de contorno. Para fazer esta transformação é necessário definir uma função de mapeamento entre o domínio físico, desconhecido, e o domínio de referência, fixo, conforme mostrado na Fig. (4.4). O mapeamento utilizado na transformação de coordenadas faz parte da solução do problema. A função  $M$ , que relaciona o sistema de coordenadas físicas com o sistema de coordenadas fixas, é desconhecida. Existem várias maneiras de definir este mapeamento. O mapeamento usado aqui foi desenvolvido por de Santos, [22] que generalizou o método proposto por Christodoulou [23] e Christodoulou e Scriven [24]. O método baseia-se na idéia de minimizar um funcional que mede o grau de suavidade da malha, de maneira que para as coordenadas  $\xi$  e  $\eta$  no domínio de referência satisfaçam:

$$\int (D\xi|\nabla\xi|^2 + D\eta|\nabla\eta|^2)d\Omega = 0 \quad (4-22)$$

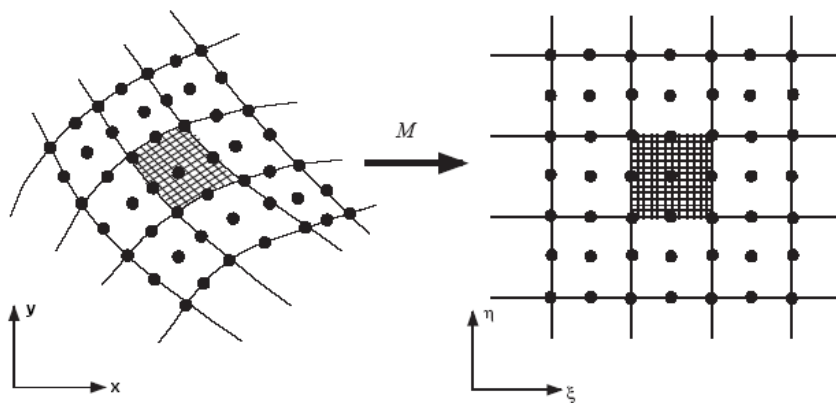


Figura 4.4: Mapeamento do domínio físico curvilíneo  $\mathbf{x}(x,r)$  em um domínio numérico retangular  $\xi(\xi, \eta)$

Onde  $D_\xi$  e  $D_\eta$  são coeficientes de difusão de potenciais de  $\xi$  e  $\eta$  que

controlam o espaçamento entre linhas de  $\xi - constante$  e  $\eta - constante$ . 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:

$$\nabla \cdot [D_\xi \nabla \xi] = 0 \quad (4-23)$$

$$\nabla \cdot [D_\eta \nabla \eta] = 0 \quad (4-24)$$

Quando  $D_\xi$  e  $D_\eta$  são constantes as Eqs. 4-23 e 4-24 se reduzem aos Laplacianos de  $\xi$  e  $\eta$ . Condições de contorno especiais devem ser aplicadas na geração de malha, tal como mostradas a seguir.

**1. Ângulo prescrito;** o ângulo  $\theta$  formado pelas coordenadas  $\xi$  e  $\eta$  é prescrito ao longo do contorno.

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \xi = |\xi| \cos(\theta) \quad (4-25)$$

**2. Nós fixos;** a localização dos nós nos contornos são fixos.

**3. Distribuição nodal prescrita;** uma função de distribuição é utilizada para distribuir os nós ao longo do contorno.

$$\xi = f^{-1}(s) \quad , \quad \eta = g^{-1}(s) \quad (4-26)$$

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

$$f(x) = 0 \quad (4-27)$$

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

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4-28)$$

A equação 4-28 esta associada implicitamente à posição da superfície livre.

As equações 4-23 e 4-24, formuladas no domínio físico descrevem o mapeamento inverso  $\xi = \xi(x)$ , isto é  $\xi$  e  $\eta$  são variáveis dependentes. Para avaliar  $x = x(\xi)$  as equações de difusão que descrevem o mapeamento devem ser transformadas à configuração de referência. O gradiente de mapeamento  $x = x(\xi)$  em um domínio bi-dimensional é definido por  $\nabla_{\xi} x \equiv \mathbf{J}$ .  $\|\mathbf{J}\| = \det \mathbf{J}$  onde  $\mathbf{J}$  é o Jacobiano da transformação.

A escolha do domínio de referência é arbitrária. Um dos mais simples domínios de referência possíveis de serem adotados é uma região quadrangular dividida em quadrados unitários. Na maioria das situações, um domínio físico complexo deve ser dividido em varias regiões, onde cada uma pode ser mapeada em regiões quadradas de referência.

Para escrever as equações que governam o problema no domínio de referência, as derivadas em relação as coordenadas no domínio físico  $(x; r)$  devem ser representadas por derivadas em relação nas coordenadas no domínio de referência  $(\xi; \eta)$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{|F|} \left( \frac{\partial r}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \quad (4-29)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{|F|} \left( -\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \quad (4-30)$$

Onde  $|F|$  é o determinante da matriz de transformação de coordenadas:

$$|F| = \frac{\partial r}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} - \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \quad (4-31)$$

#### 4.4 Deslocamento da malha

Na solução transiente do problema há uma superfície deformável onde a posição de cada ponto nodal da malha varia ao longo do tempo, devido a deformação desta. O deslocamento da malha introduz nas equações um termo de velocidade que corresponde ao deslocamento da malha, mas que não existe fisicamente e por tanto não deve ser contabilizado. Assim, o termo de aceleração devido a deformação da malha deve ser subtraído da derivada temporal. Isto é:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \dot{\mathbf{u}} - \dot{x} \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (4-32)$$

Onde  $\dot{x}$  é a derivada de cada ponto da malha em relação ao tempo. Desta forma, a equação de quantidade de movimento linear passa a ser dada por:

$$\rho(\dot{\mathbf{u}} - \dot{x} \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \quad (4-33)$$

#### 4.4.1

##### Discretização das equações

Nesta seção é apresentado o processo de discretização das equações que modelam o problema. O método de Galerkin/Elementos Finitos é usado para a discretização espacial do problema, e o método das diferenças finitas para a discretização do termo temporal da equação de quantidade de movimento linear.

#### 4.5

##### Discretização pelo Método de Galerkin/Elementos finitos

Para resolver o sistema de equações diferenciais utilizou-se o método dos resíduos ponderados, onde procura-se uma solução aproximada do problema que pertença a um espaço de funções de dimensão finita. O domínio espacial é discretizado pela subdivisão do meio contínuo em elementos de tamanhos e formas arbitrárias. Escolheu-se figuras quadriláteras como sendo a base para a subdivisão espacial. A única restrição é que os elementos não podem se sobrepor e devem cobrir completamente o domínio computacional. Define-se aqui um número de nove pontos em cada elemento, oito pontos posicionados ao longo dos lados e um ponto no centro do elemento (elemento bi-quadrático). Conforme discutido anteriormente, por se tratar de um problema com superfície livre, o domínio físico (de topologia complexa) deve ser mapeado em um domínio computacional (de topologia simples).

No método de resíduos ponderados, os campos desconhecidos são escritos como combinações lineares de funções base:

$$u = \sum_{i=1}^N U_k^i \chi_i \quad ; \quad v = \sum_{i=1}^N V_k^i \chi_i \quad ; \quad p = \sum_{i=1}^{N_p} P_k^i \chi_i \quad ; \quad (4-34)$$

$$x = \sum_{i=1}^N X_k^i \phi_i \quad ; \quad r = \sum_{i=1}^N R_k^i \phi_i \quad (4-35)$$

Se o tipo de subespaço onde a solução aproximada é procurada for escolhido apropriadamente, a precisão da solução melhora com o aumento da dimensão deste subespaço. No método de elementos finitos, as funções base  $\phi$ 's e  $\chi$ 's são não nulas apenas em uma pequena porção do domínio. As funções  $\phi$ 's usadas para descrever o campo de velocidade e posição são contínuas e biquadráticas na pequena região do domínio onde são não nulas. As funções  $\chi$ 's usadas para descrever o campo de pressão são descontínuas e lineares por partes. Uma vez escolhido o espaço, isto é, as funções  $\phi$ 's e  $\chi$ 's, as incógnitas do problema passam a ser os coeficientes  $U_k^i, V_k^i, P_k^i, X_k^i, R_k^i$  da expansão de cada campo. O método de Galerkin é um caso particular da técnica conhecida como método dos resíduos ponderados. O resíduo ponderado de uma equação diferencial é obtido multiplicando-se a função resíduo por uma função teste e integrando o produto ao longo do domínio. No caso do método de Galerkin, o resíduo deve ser ortogonal ao subespaço finito, do espaço de funções de dimensão infinita, onde a solução aproximada é definida. As funções teste podem ser escritas como uma combinação linear das funções que formam a base do subespaço escolhido, isto é,  $\phi$ 's e  $\chi$ 's. Como as funções base são não nulas apenas em uma pequena região do domínio, elas formam um subespaço quase ortogonal, o que representa uma

grande vantagem nos cálculos dos coeficientes da expansão.

## 4.6 Formulação fraca das equações

Tem-se que multiplicar o resíduo da aproximação de cada equação por um função peso e forçar a integral ao longo de todo o domínio a ser nula.

Como a equação de conservação da quantidade de movimento (4-1) é uma equação vetorial, o resíduo ponderado correspondente a esta equação é calculado através do produto interno do resíduo da aproximação com uma função peso vetorial  $\mathbf{W}$ . A equação da continuidade é uma equação escalar e desta forma, a função peso utilizada  $w$  é uma função escalar.

Os campos de velocidade e pressão são escritos em termos das funções base. Os diferentes termos dos resíduos associados a equação de conservação de quantidade de movimento contém pressão ou derivadas da velocidade. Como estes termos devem ter a mesma precisão de discretização, as funções bases utilizadas para pressão não precisam ser da mesma ordem que as usadas para o campo de velocidade. Quando os dois campos de variáveis pertencem a espaços diferentes, diz-se que a formulação é mista.

O vetor dos resíduos ponderados da equação de conservação de quantidade de movimento possui a seguinte forma:

$$R_m = \int_{\Omega} \left[ \rho_k \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho_k (\mathbf{u}_k \cdot \nabla \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{W} + tr(\mathbf{T}_k \cdot \nabla \mathbf{W}) - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{W} \right] r d\Omega - \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_k) \cdot \mathbf{W} r d\Gamma \quad (4-36)$$

O vetor resíduo ponderado da equação de conservação de massa é

representado por:

$$R_c = \int_{\Omega} [\nabla \cdot \mathbf{u}_k] \chi r d\Omega = 0 \quad (4-37)$$

Onde  $\mathbf{W}$  é a função peso vetorial da equação de conservação de quantidade de movimento e  $\chi$  é a função peso da equação de continuidade. O símbolo  $\Omega$  é utilizado para representar as integrais no volume e  $\Gamma$  para representar as integrais no contorno. Em coordenadas cilíndricas as equações são escritas na forma abaixo:

A componente axial do resíduo da equação de quantidade de movimento linear é dada por:

$$\begin{aligned} R_{mx}^i = & \int_{\Omega} \left[ \rho_k \phi_i \left( \dot{u}_k - u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} - v_k \frac{\partial u_k}{\partial r} \right) + \rho \phi_i \left( u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial u_k}{\partial r} \right) \right] r ||J|| d\bar{\Omega} + \\ & \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial \phi_i}{\partial x} T_{(xx)k} + \frac{\partial \phi_i}{\partial r} T_{(xr)k} \right] r ||J|| d\bar{\Omega} - \int_{\Omega} e_x (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_k) \phi_i r \frac{d\Gamma}{d\Gamma} d\Gamma \end{aligned} \quad (4-38)$$

E a componente radial:

$$\begin{aligned} R_{mr}^i = & \int_{\Omega} \left[ \rho \phi_i \left( \dot{u}_k - u_k \frac{\partial v_k}{\partial x} - v_k \frac{\partial v_k}{\partial r} \right) + \rho \phi_i \left( u_k \frac{\partial v_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial v_k}{\partial r} \right) \right] r ||J|| d\bar{\Omega} + \\ & \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial \phi_i}{\partial x} T_{(xr)k} + \frac{\partial \phi_i}{\partial r} T_{(xr)k} + \frac{\phi}{r} T_{(\theta\theta)k} \right] r ||J|| d\bar{\Omega} - \int_{\Omega} e_r (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_k) \phi_i r \frac{d\Gamma}{d\Gamma} d\Gamma \end{aligned} \quad (4-39)$$

o resíduo da equação de continuidade é:

$$R_c^i = \int_{\Omega} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_k) + \frac{\partial u_k}{\partial x} \right] \chi_i r ||J|| d\bar{\Omega} \quad (4-40)$$

Em coordenadas cilíndricas as equações dos resíduos de geração de malha são dadas por:



$$R_{\xi}^i = \int_{\Omega} D_{\xi} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial r} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right) \|J\| d\bar{\Omega} + \int_{\Gamma} D_{\xi} (\nabla \xi \cdot n) \phi_i \frac{d\Gamma}{d\Gamma} d\Gamma \quad (4-41)$$

$$R_{\eta}^i = \int_{\Omega} D_{\eta} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial r} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right) \|J\| d\bar{\Omega} + \int_{\Gamma} D_{\eta} (\nabla \eta \cdot n) \phi_i \frac{d\Gamma}{d\Gamma} d\Gamma \quad (4-42)$$

## 4.7

### Método das diferenças finitas

A discretização dos termos das equações diferenciais de momento em relação ao tempo pode ser realizada usando o método de elementos finitos ou usando diferenças finitas, entre outros métodos. Existem poucas evidências de alguma vantagem do uso do método de elementos finitos e a sua implementação é menos simples que o uso do método das diferenças finitas.

O método das diferenças finitas baseia-se na aproximação de derivadas por diferenças finitas para a resolução das equações diferenciais envolvidas. O domínio no qual encontram-se as equações a resolver é dividido em  $N - 1$  intervalos, os quais podem ou não ser iguais, com um total de  $N$  pontos nodais. A equação é aproximada para cada um dos pontos, substituindo-se as derivadas da função por expressões baseadas na diferença dos valores que a função assume em certos nós. Isto é:

$$\dot{f}|_{x_1} = \frac{f_{x_2} - f_{x_1}}{\Delta t} \quad (4-43)$$

Isto resulta na obtenção de uma equação para cada nó. Assim resulta

um sistema de  $N$  equações algébricas, onde as incógnitas são os valores da função nos pontos nodais escolhidos para representar a derivada. A solução do problema é obtida através da solução do sistema de equações resultante.

Os métodos de discretização de equações com termos temporais usando diferenças finitas podem ser divididos em três categorias principais: métodos explícitos, implícitos e combinados. No método explícito a equação diferencial é discretizada em termos dos valores da função  $f$  no tempo passado para encontrar a solução no tempo presente. Desta forma os valores em cada um dos pontos no instante presente podem ser calculados diretamente, uma vez conhecidos seus valores nos instantes anteriores. Nos métodos implícitos a solução do sistema é calculada em termos em termos dos valores que a função  $f$  assume no instante de tempo presente e o tempo anterior. A solução do problema para um dado nó depende da solução de todos os outros num dado instante de tempo. Se  $U(t)$  é o estado atual do sistema e  $U(t + \Delta t)$  é o estado num tempo posterior, então, no método explícito:  $U(t + \Delta t) = F(U(t))$ , e no método implícito:  $G(U(t), U(t + \Delta t)) = 0$ .

Os métodos explícitos são simples de implementar, porém são instáveis, a não ser que o passo de tempo seja extremamente pequeno. Assim, usar um método implícito, ainda que com passos de tempo maiores, resulta em menor tempo computacional.

Usa-se aqui o método de diferenças finitas recuadas, que usa o valor da função  $U$  no tempo  $t$  e no tempo  $t_n - t_{n-1}$ . O termo de velocidade, que se quer resolver no tempo, fica desta forma aproximado por:

$$\dot{u} = \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} \quad (4-44)$$

Sendo que  $t_n$  é o instante de tempo presente onde a derivada é calculada,  $t_{n-1}$  é o instante de tempo anterior e  $\Delta t = t_n - t_{n-1}$  é o passo de tempo.

## 4.8 Dedução dos termos da Matriz Massa

Como foi visto nas equações correspondentes aos resíduos da equação de quantidade de movimento linear, a parte temporal é discretizada usando diferenças finitas. Os termos correspondentes podem ser agrupados a partir das equações para os resíduos da quantidade de movimento em direção axial e radial, e constituem os componentes da denominada matriz massa.

A componente do resíduo na direção axial da matriz massa é dada por:

$$\int_{\bar{\Omega}} \rho \left[ \left( \frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} \right) - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial u}{\partial x} - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial u}{\partial r} \right] \phi_i \parallel J_T \parallel d\bar{\Omega} \quad (4-45)$$

e a componente do resíduo na direção radial da matriz massa por:

$$\int_{\bar{\Omega}} \rho \left[ \left( \frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} \right) - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial v}{\partial x} - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial v}{\partial r} \right] \phi_i \parallel J_T \parallel d\bar{\Omega} \quad (4-46)$$

A sensibilidade dos resíduos em relação a velocidade  $u$ , a posição  $x$  e  $r$  são:

$$\frac{\partial R_{mx}}{\partial t} = \int_{\bar{\Omega}} \rho \left[ \frac{\phi_j}{\Delta t} - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial \phi_j}{\partial x} - \left( \frac{r_n - r_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \right] \phi_i \parallel J_T \parallel d\bar{\Omega} \quad (4-47)$$

$$\frac{\partial R_{mx}}{\partial t} = - \int_{\bar{\Omega}} \rho \left[ \frac{\phi_j}{\Delta t} \frac{\partial u}{\partial x} - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \left( \frac{r_n - r_{n-1}}{\Delta t} \right) \left( \frac{\partial u}{\partial r} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] \phi_i \parallel J_T \parallel d\bar{\Omega} \quad (4-48)$$

$$\frac{\partial R_{mx}}{\partial t} = - \int_{\bar{\Omega}} \rho \left[ \left( \frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} \right) - \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial u}{\partial x} - \left( \frac{r_n - r_{n-1}}{\Delta t} \right) \frac{\partial u}{\partial r} \right] \phi_i \parallel J_T \parallel d\bar{\Omega} \quad (4-49)$$

## 4.9

### Solução do sistema de equações não lineares pelo Método de Newton

A solução do sistema de equações diferenciais não linear pelo método dos elementos finitos leva a um sistema de equações algébricas não linear:

$$\mathbf{R}(\mathbf{C}; \mathbf{p}) = 0 \quad (4-50)$$

onde  $\mathbf{R}$  representa o vetor dos resíduos ponderados associado com os graus de liberdade de cada elemento,  $\mathbf{C}$  representa o vetor solução (coeficientes das funções base que são as incógnitas do problema) e  $\mathbf{p}$  é o vetor de parâmetros do qual o problema depende.

Um método que se mostra satisfatório para o solução de um sistema de

equações altamente não linear é o método de Newton. A solução da equação 4-50 pelo método de Newton leva ao seguinte processo iterativo:

$$(\mathbf{J} + \frac{1}{\Delta t}\mathbf{M})\Delta\mathbf{C}^{(k+1)} = -\mathbf{R}(\mathbf{C}^{(k)}) \quad (4-51)$$

$$(\mathbf{C})^{(k+1)} = \mathbf{C}^{(k)} + \Delta\mathbf{C}^{(k+1)} \quad (4-52)$$

Onde  $\mathbf{R}$  é avaliado em  $(\mathbf{C})^k$ ,  $\mathbf{J}$  é a matriz Jacobiana do resíduo, cujos componentes são as derivadas dos termos não temporais dos resíduos,  $\mathbf{M}$  é a matriz massa do sistema, cujos componentes são as derivadas dos termos de derivadas temporais dos resíduos e  $\Delta t$  é o passo de tempo. Deve notar-se que para cada iteração a matriz massa é resolvida usando o método das diferenças finitas recuadas descrito anteriormente, o qual considera para a sua resolução o instante atual e o instante anterior. Os elementos da Matriz Jacobiana  $\mathbf{J}$ , que representam a sensibilidade da equação a cada incógnita do problema, vêm dados por:

$$J_{i,j} = \frac{\partial R_i}{\partial C_k} \quad (4-53)$$

Os componentes da matriz massa e da matriz jacobiana podem ser calculados usando métodos analíticos ou métodos numéricos. Aqui foram calculados analiticamente.

O processo iterativo começa com uma estimativa inicial  $(\mathbf{C})^0$  e continua até que a equação (4-50) seja satisfeita, de forma tal que a soma das normas do vetor de atualização  $\Delta\mathbf{C}$  e o vetor resíduo  $\mathbf{R}$  seja menor que o erro  $e$  estipulado:

$$\| \mathbf{R} \|_2 + \| \delta \mathbf{C} \|_2 \leq \epsilon \quad (4-54)$$

O método de Newton converge quadraticamente desde que a estimativa inicial esteja próxima da solução do problema e por tanto, pode divergir caso a aproximação inicial esteja fora do raio de convergência. Métodos de continuação são utilizados para avançar no caminho da solução. Em cada iteração do método de Newton a soma  $\mathbf{J} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}$  é resolvida mediante decomposição PLU utilizando o método frontal proposto por Hood [25]. O método frontal permite economizar memória durante a solução do problema.