

### 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,

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

onde  $W$  é uma função peso vetorial definida como,

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

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

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

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,

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

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

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

## 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  $\phi_j$  para os campos de velocidade e função escalar  $c$ , e funções lineares descontínuas  $\chi_j$  para escrever a pressão.

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

As funções Lagrangeanas biquadráticas  $\phi_j$ [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  $\chi_j$  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  $\xi$  e  $\eta$  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  $\psi_i$  é escrita como,

$$\psi_i = \phi_i + h_e \frac{\bar{u}}{\|\bar{u}\|} \cdot \bar{\nabla} \phi_i \quad (3-10)$$

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  $R_{mr}^i$  e  $R_{mz}^i$ , a seguinte é o resíduo da equação de *Level Set*  $R_c^i$  e a última parte é o resíduo da equação de conservação de massa  $R_{mc}^i$ ,

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} R_{mr}^i \\ R_{mz}^i \\ R_c^i \\ R_{mc}^i \end{pmatrix} \quad (3-11)$$

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

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

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

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

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

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

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

### 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:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{S}_v} \quad (3-16)$$

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  $C_j$ ):

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

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.

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M} + \mathbf{J}_{\mathbf{RP}} \quad (3-18)$$

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

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

e a matriz  $\mathbf{J}_{\mathbf{RP}}$  como,

$$\mathbf{J}_{\mathbf{RP}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial R_{mr}^{i*}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_{mr}^{i*}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_{mr}^{i*}}{\partial C_j} & \frac{\partial R_{mr}^{i*}}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_{mz}^{i*}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_{mz}^{i*}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_{mz}^{i*}}{\partial C_j} & \frac{\partial R_{mz}^{i*}}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_c^{i*}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_c^{i*}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_c^{i*}}{\partial C_j} & \frac{\partial R_c^{i*}}{\partial P_j} \\ \frac{\partial R_{mc}^{i*}}{\partial V_{Rj}} & \frac{\partial R_{mc}^{i*}}{\partial V_{Zj}} & \frac{\partial R_{mc}^{i*}}{\partial C_j} & \frac{\partial R_{mc}^{i*}}{\partial P_j} \end{pmatrix} \quad (3-20)$$

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

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

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

– Jacobiano de  $R_{mr}^{i*}$ :

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

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

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

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

– Jacobiano de  $R_{mz}^{i*}$ :

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

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

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

$$\frac{\partial R_{mz}^{i*}}{\partial P_j} = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial T_{zz}}{\partial P_j} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \right) d\Omega; i = 1, \dots, 9; j = 1, 2, 3 \quad (3-29)$$

– Jacobiano de  $R_{mc}^{i*}$ :

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

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

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

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

– Jacobiano de  $R_c^{i*}$ :

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

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

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

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

É preciso calcular a derivada das componentes do tensor de tensões  $\bar{T}$  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,

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

### 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  $\|\mathbf{R}\| < \text{erro}$ .

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



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

### 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.

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

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,

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

onde  $\sigma$  e  $k$  foram definidos anteriormente.

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

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

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

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

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  $\frac{\partial R_{mr}^{i*}}{\partial C_j}$ :

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

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

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

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

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

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 descontínuas 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:

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

onde  $\varphi_j$  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:

$$R_{c_r}^i = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial c}{\partial r} - c_r \right) \varphi_i d\Omega; i = 1, \dots, 4 \tag{3-48}$$

$$R_{c_z}^i = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial c}{\partial z} - c_z \right) \varphi_i d\Omega; i = 1, \dots, 4 \tag{3-49}$$

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 descontínua |
| $c$             | 9                  | biquadrática       |
| $c_r$           | 4                  | bilinear           |
| $c_z$           | 4                  | bilinear           |
| Total           | 38                 |                    |