



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto Politécnico

Narcisa Corrêa da Silva

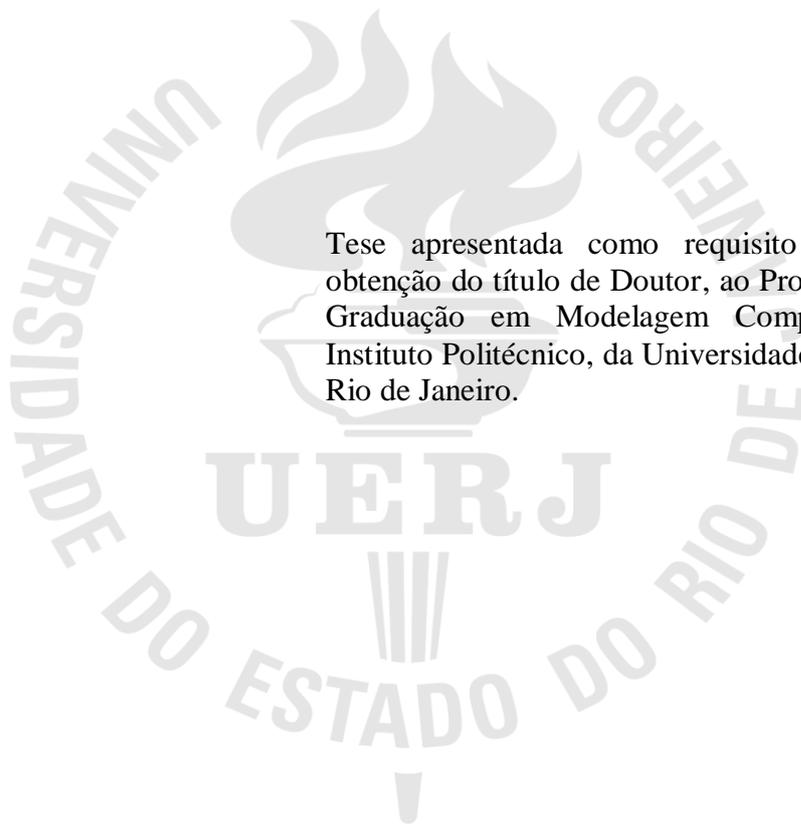
**Modelagem e simulação do escoamento de películas finas em
superfícies sólidas**

Nova Friburgo

2022

Narcisa Corrêa da Silva

Modelagem e simulação do escoamento de películas finas em superfícies sólidas



Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira

Nova Friburgo

2022

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

S586 Silva, Narcisa Corrêa da.
Modelagem e simulação do escoamento de películas finas em superfícies sólidas / Narcisa Corrêa da Silva. – 2022.
106 f. : il.

Orientadores: Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira.
Tese (doutorado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Escoamento - Métodos de simulação – Teses. 2. Lubrificação e lubrificantes – Teses. 3. Determinantes jacobianos – Teses. I. Oliveira, Luiz Nélio Henderson Guedes de. II.. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. III. Título.

CDU 532.5

Bibliotecária Pâmela Lisboa CRB7/ 5965

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Narcisa Corrêa da Silva

Modelagem e simulação do escoamento de películas finas em superfícies sólidas

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 29 de junho de 2022.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz Nélio Henderson Guedes de Oliveira – (Orientador)
Instituto Politécnico – UERJ

Prof. Dr. Joaquim Teixeira de Assis
Instituto Politécnico – UERJ

Prof. Dr. Adolfo Puime Pires
Universidade Estadual do Norte Fluminense – UENF

Prof. Dr. Maicon Ribeiro Correa
Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Prof. Dr. Sanderson Lincoln Gonzaga de Oliveira
Universidade Federal de São Paulo - UNIFESP

Nova Friburgo

2022

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a Deus, por me permitir mais essa conquista. À minha mãe, Maria da Graça, por estar sempre ao meu lado me incentivando e apoiando, ao meu pai, José Joaquim, que lá do céu está cuidando de mim, e a todos que torceram por mim.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, a Deus, por ter me dado força, saúde, disposição e sabedoria para concluir este trabalho.

Em especial a minha mãe, Maria da Graça, por todo amor, carinho e orações, por estar sempre comigo me incentivando a nunca desistir e por me ensinar a manter a fé, mesmo nos momentos mais difíceis e angustiantes.

Ao meu orientador, Nélio Henderson, pelas sugestões e por me incentivar à pesquisa.

Aos membros da banca examinadora, professores Joaquim, Adolfo, Maicon e Sanderson, por aceitarem o convite e pela cooperação na conclusão desta tese.

As minhas amigas Anny e Janaína, por todo apoio, incentivo, carinho, amizade e por estarem sempre ao meu lado, nos momentos bons e ruins.

Aos meus amigos do LABMACC (Laboratório de Matemática Aplicada e Computação Científica), em especial a Adriana, por ter feito de tudo para o conserto e manutenção do computador do laboratório, para que eu pudesse executar à distância todos os códigos das simulações; ao Marroni, por todas as sugestões e apoio; ao Sérgio e a Gêssica, pela parceria e incentivo; a Gisiane, Gilza e Tânia, pela gentileza.

Aos professores, colegas e servidores do Campus Regional Instituto Politécnico da UERJ, por todo apoio.

Muito obrigada a todos!

O presente trabalho foi realizado com o apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro – FAPERJ.

Nobody said it was easy... no one ever said it would be so hard.

The scientist, Coldplay

RESUMO

SILVA, N. C. *Modelagem e simulação do escoamento de películas finas em superfícies sólidas*. 2022. 106f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2022.

O presente trabalho visou o estudo e implementação de esquemas numéricos para uma classe de problemas modelados por equações diferenciais parciais de alta ordem, as quais são não lineares. Os problemas considerados surgem em teoria da lubrificação, onde películas finas constituídas de fluidos viscosos deslocam-se em contato com superfícies sólidas. Tais equações, em geral de quarta ordem, podem ser degeneradas. De fato, esses modelos podem apresentar termos singulares adicionais de segunda ordem, os quais comumente descrevem efeitos de gravidade e de interações moleculares. Além disso, um modelo teórico e numérico é formulado para descrever a dinâmica de uma fina camada de líquido em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade. Este trabalho utiliza o chamado algoritmo espectral, o qual é um método para a solução de sistemas não lineares de grande porte, que não resolve sistemas lineares, nem usa qualquer informação explícita associada com a matriz Jacobiana. Simulações numéricas características da evolução de películas finas são apresentadas e os resultados obtidos mostram que o algoritmo espectral é um método eficiente para a simulação de escoamentos de películas finas em superfícies sólidas.

Palavras-chave: Películas finas. Teoria de lubrificação. Equações diferenciais parciais não lineares. Método espectral.

ABSTRACT

SILVA, N. C. *Modeling and simulation of thin film flow on solid surfaces*. 2022. 106f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2022.

The present work aims at the study and implementation of numerical schemes for a class of problems modeled by high order partial differential equations, which are nonlinear. The problems considered arise in lubrication theory, where thin films made up of viscous fluids move in contact with solid surfaces. Such equations, in general of fourth order, can be degenerate. In fact, these models may have additional second-order singular terms, which commonly describe the effects of gravity and molecular interactions. Furthermore, a theoretical and numerical model is formulated to describe the dynamics of a thin layer of liquid on an inclined surface driven by gravity. This work uses the so-called spectral algorithm, which is a method for solving large nonlinear systems, which does not solve linear systems, nor does it use any explicit information associated with the Jacobian matrix. Numerical simulations characteristic of thin-film evolution are presented and the results obtained show that the spectral algorithm is an efficient method for the simulation of thin-film flows on solid surfaces.

Keywords: Thin films. Lubrication theory. Nonlinear partial differential equations. Spectral method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – A superfície de interface vista como o gráfico de uma função.....	15
Figura 2 – Uma pequena parte da superfície de interface englobada por uma curva C	17
Figura 3 – Esboço do fluido em geometria bidimensional.....	38
Figura 4 – A malha de blocos centrados	52
Figura 5 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 1, em três diferentes instantes de tempo: (a) $T = 10^{-5}$, (b) $T = 10^{-1}$, (c) $T = 1$	76
Figura 6 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 2, em três diferentes instantes de tempo: (a) $T = 10^{-5}$, (b) $T = 10^{-1}$, (c) $T = 0,10222$	80
Figura 7 – Superfície da espessura da película de fluido logo após a ruptura e sua curva de nível para o instante de tempo $T = 0,10223$	81
Figura 8 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 3, em três diferentes instantes de tempo: (a) $T = 10^{-7}$, (b) $T = 10^{-4}$, (c) $T = 10^{-2}$	83
Figura 9 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 4, em três diferentes instantes de tempo: (a) $T = 10^{-7}$, (b) $T = 10^{-4}$, (c) $T = 0,0005$	86
Figura 10 – Superfície da espessura da película de fluido logo após a ruptura e sua curva de nível para o instante de tempo $T = 0,0008436$	87
Figura 11 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 5 - Caso $D = 0$	89
Figura 12 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 5 - Caso $D = 0,5$	91
Figura 13 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 5 - Caso $D = 1$	93
Figura 14 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 6 - Caso $D = 0$	96
Figura 15 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 6 - Caso $D = 0,5$	98
Figura 16 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 6 - Caso $D = 1$	100

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Algumas formas especiais da equação de película fina.....	37
Tabela 2 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 1.....	75
Tabela 3 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 2.....	78
Tabela 4 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 3.....	82
Tabela 5 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 4.....	85
Tabela 6 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 5 – Caso $D = 0$	88
Tabela 7 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 5 – Caso $D = 0,5$	90
Tabela 8 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 5 – Caso $D = 1$	92
Tabela 9 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 6 – Caso $D = 0$	95
Tabela 10 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 6 – Caso $D = 0,5$	97
Tabela 11 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 6 – Caso $D = 1$	99

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	12
1 TEORIA DE PELÍCULAS FINAS	14
1.1 Superfície de Interface e Tensão Superficial	14
1.2 Equação de Laplace Generalizada e a Condição Cinemática.....	16
1.3 As Equações de Navier-Stokes e a Hipótese de Escoamento Lento	28
1.4 Integrando as Equações de Navier-Stokes.....	30
1.5 Equações Governantes	35
1.5.1 <u>Modelo Parabólico</u>	35
1.5.2 <u>Modelo Hiperbólico</u>	38
2 AS EQUAÇÕES DO ESCOAMENTO DE PELÍCULAS FINAS EM SUPERFÍCIES SÓLIDAS E INCLINADAS.....	40
2.1 Adimensionalização da Primeira Equação Governante	40
2.1.1 <u>Caso 1</u>	41
2.1.2 <u>Caso 2</u>	41
2.1.3 <u>Caso 3</u>	42
2.1.4 <u>Caso 4</u>	42
2.2 Adimensionalização da Segunda Equação Governante	43
2.3 Um Modelo Básico da Equação de Películas Finas	44
2.4 Formas Generalizadas da Equação de Películas Finas	46
2.4.1 <u>Forças Intermoleculares ou Forças de Van der Waals</u>	47
2.4.2 <u>Gravidade</u>	48
2.4.3 <u>Gravidade com Forças Intermoleculares</u>	49
2.5 Modelo Hiperbólico da Equação de Películas Finas	49
3 DISCRETIZAÇÕES DAS EQUAÇÕES DOS MODELOS	52
3.1 Malha numérica	52
3.2 Discretização do Modelo Básico (Caso 1)	53
3.3 Discretização das Formas Generalizadas	55
3.3.1 <u>Caso 2 – Forças Intermoleculares</u>	55
3.3.2 <u>Caso 3 – Gravidade</u>	57
3.3.3 <u>Caso 4 – Gravidade com Forças Intermoleculares</u>	58

3.4	Discretização do Modelo Hiperbólico	58
4	O MÉTODO NUMÉRICO PARA AS EQUAÇÕES NÃO LINEARES	61
4.1	Aspectos Gerais	61
4.2	O Método DFSANE e suas Modificações	62
5	RESULTADOS	72
5.1	Os Aspectos Gerais	72
5.2	Exemplo 1	74
5.3	Exemplo 2	78
5.4	Exemplo 3	82
5.5	Exemplo 4	84
5.6	Exemplo 5	88
5.7	Exemplo 6	95
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	102
	REFERÊNCIAS	104

INTRODUÇÃO

As películas líquidas finas aparecem em uma variedade de processos industriais. Podem ser compostas de líquidos comuns como água ou óleo, de materiais complexos tais como soluções de polímeros ou fusões, ou misturas complexas de fases ou componentes. Quando as películas são submetidas à ação de vários fatores mecânicos ou térmicos, exibem fenômenos dinâmicos interessantes, como propagação de ondas, intensificação de ondas e desenvolvimento de respostas caóticas. Tais películas podem exibir fenômenos de ruptura, criando buracos, espalhando frentes e desenvolvendo dedos, Oron, Davis e Bankoff (1997).

Fluxos de película surgem na engenharia em processos de transferência de calor e massa e outras operações unitárias. Uma aplicação importante destes fluxos é o processo de revestimento. A tecnologia de revestimento é utilizada para fabricar diversos produtos, incluindo papéis, materiais de construção, tais como pavimentos e telhas, componentes eletrônicos, materiais de embalagem e filmes ópticos, Kheshgi (1989).

Nas películas finas constituídas de fluidos viscosos, verifica-se que a maioria dos fenômenos de ruptura e instabilidade ocorrem em escalas longas, sendo necessário a compreensão da teoria de onda longa.

A teoria de onda longa baseia-se na redução assintótica das equações governantes e condições de contorno para um sistema simplificado que consiste frequentemente em uma única equação diferencial parcial não linear formulada em termos da espessura local da película. O restante das incógnitas, isto é, a velocidade do fluido, a temperatura do fluido, etc., são então determinados por meio da solução dessa equação diferencial, Oron, Davis e Bankoff (1997).

Uma película fina que umedece um substrato sólido está normalmente sujeita a instabilidades, podendo se comportar de maneira essencialmente imprevisível. Essas instabilidades surgem em um sistema quando uma solução é instável para perturbações transversais à sua direção de propagação.

Um exemplo de fluxo instável de película fina é o fenômeno de dedilhado (ou formação de dedos), que pode ocorrer quando uma camada de fluido escoar em um plano inclinado. Em tal situação, a frente líquida avança com diferentes velocidades em diferentes posições ao longo da linha de contato trifásica, e é basicamente impossível prever a forma exata que a frente de avanço assume, Isojärvi (2013).

Estudos de métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais parciais que modelam a evolução de películas finas é uma área da matemática aplicada, a qual se encontra no início de seu desenvolvimento.

O presente trabalho tem como objetivo a modelagem e simulação computacional de esquemas numéricos para a resolução de tais equações. A metodologia escolhida abordará métodos de diferenças finitas para problemas não lineares, com condições de contorno de Neumann e Dirichlet.

Serão apresentados alguns casos particulares da chamada equação de película fina, os quais descrevem diferentes fenômenos físicos particulares, como efeitos de gravidade e ação de forças de Van der Waals. Tais casos particulares são de grande importância para a engenharia e para a ciência aplicada. Além disso, será também apresentado um modelo numérico envolvendo a dinâmica de uma fina camada de líquido em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade.

As equações resultantes das discretizações numéricas dão origem a sistemas de equações (algébricas ou transcendentais) altamente não lineares, os quais necessitam ser resolvidos a cada passo de tempo do processo de evolução. Para resolver tais sistemas não lineares, é necessário o uso de métodos iterativos eficientes e fáceis de implementar, ver, por exemplo, Nocedal e Wright (1999).

Neste trabalho, utilizamos um método espectral, destinado a problemas não lineares de grande porte, chamado DFSANE (Derivative-Free Spectral Algorithm for Nonlinear Equations), de La Cruz, Martinez e Raydan (2006), na resolução destes sistemas.

Uma grande vantagem do uso do método DFSANE é que ele não requer qualquer informação associada à matriz Jacobiana, sendo uma abordagem livre de derivadas.

Para apresentar o problema de interesse, as formulações a serem utilizadas e os resultados obtidos, esta tese será organizada da seguinte forma: no Capítulo 1, será realizada uma apresentação teórica sobre a dinâmica da película fina de um líquido viscoso. No Capítulo 2, serão descritas as equações diferenciais que modelam o escoamento de películas finas em superfícies sólidas e inclinadas. Já no Capítulo 3, serão discretizadas as equações dos modelos, de forma implícita no tempo, e também serão apresentados alguns casos particulares referentes a forças intermoleculares entre a superfície sólida e a película de fluido, e efeitos de gravidade, além dos casos que envolvem o fluxo de películas líquidas em um plano inclinado. O método numérico para as equações não lineares, DFSANE, será descrito no Capítulo 4. Os resultados das simulações numéricas estarão no Capítulo 5. Por fim, serão apresentadas as principais conclusões e perspectivas futuras.

1 TEORIA DE PELÍCULAS FINAS

1.1 Superfície de Interface e Tensão Superficial

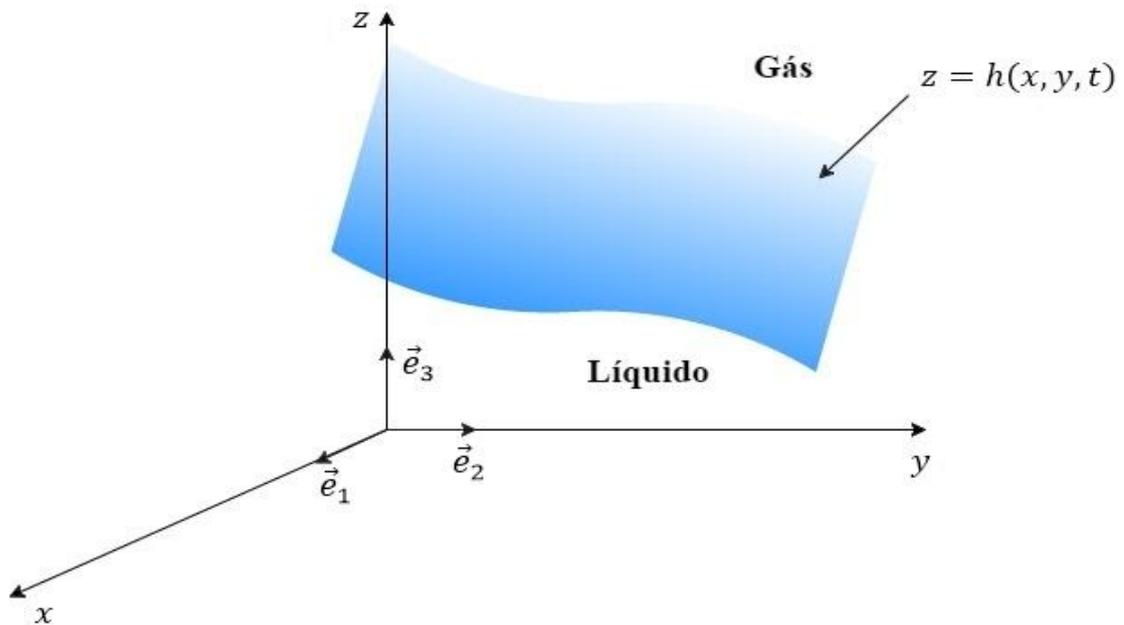
O objeto deste estudo é a dinâmica da película fina de um líquido viscoso, a qual se encontra limitada inferiormente por uma superfície sólida, na forma de um plano horizontal, e superiormente por um gás.

Tais fluidos são supostamente imiscíveis, o que garante a existência de uma superfície de interface bem definida entre a película de líquido e o gás.

Na teoria de películas finas, a superfície de interface é tratada como o gráfico de uma função, a qual descreve a altura da película de líquido em um dado instante de tempo, medida a partir da superfície sólida. Como esboçado na Figura 1, essa função será representada por $z = h(x, y, t)$, onde x , y e z denotam as coordenadas de um sistema cartesiano ortogonal e t é o tempo.

Mais precisamente, o sistema de coordenadas usado aqui será descrito por uma base ortonormal do espaço Euclidiano tridimensional, denotada por $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$, onde \vec{e}_1 , \vec{e}_2 e \vec{e}_3 são os vetores unitários que apontam, respectivamente, nas direções positivas dos eixos x , y e z . Tal conjunto ordenado será referido como a base natural (ou canônica) do \mathbb{R}^3 . Desse modo, qualquer vetor $\vec{q} \in \mathbb{R}^3$ admitirá uma representação vetorial, com relação à origem deste sistema de coordenadas cartesianas, dada por $\vec{q} = q_1\vec{e}_1 + q_2\vec{e}_2 + q_3\vec{e}_3$, onde q_1 , q_2 e q_3 são as coordenadas de \vec{q} .

Figura 1 – A superfície de interface vista como o gráfico de uma função.



Fonte: A autora, 2022.

As moléculas próximas à superfície de interface estão sujeitas a forças atrativas provenientes das moléculas da fase líquida vizinha à interface. Por outro lado, tais moléculas da interface sofrem também (em menor intensidade) ação de forças oriundas das moléculas de gás que estão na vizinhança da interface, as quais se encontram mais dispersas do que as moléculas de líquido. Este fato dá origem a um fenômeno de desbalanceamento das forças de coesão que atuam na interface das fases, fazendo com que as moléculas que estão próximas à superfície de interface se movam para o interior do líquido, provocando variações na área da superfície de interface.

Em vista disso, pressupõe-se a transferência de energia, na forma de trabalho, através da fronteira das fases. Assim, para quantificar tal trabalho, do ponto de vista mecânico, se faz necessário supor a existência (em uma escala macroscópica) de uma força atuando na superfície de interface entre o líquido e o gás.

Como descrito em mais detalhes por Batchelor (1994), por exemplo, considera-se que ao longo de qualquer curva tomada sobre a superfície de interface atua uma força que age na direção normal a essa curva e tangencial à superfície de interface. A magnitude desta força, por unidade de comprimento da curva, é chamada de tensão superficial, a qual é comumente denotada por σ .

1.2 Equação de Laplace Generalizada e a Condição Cinemática

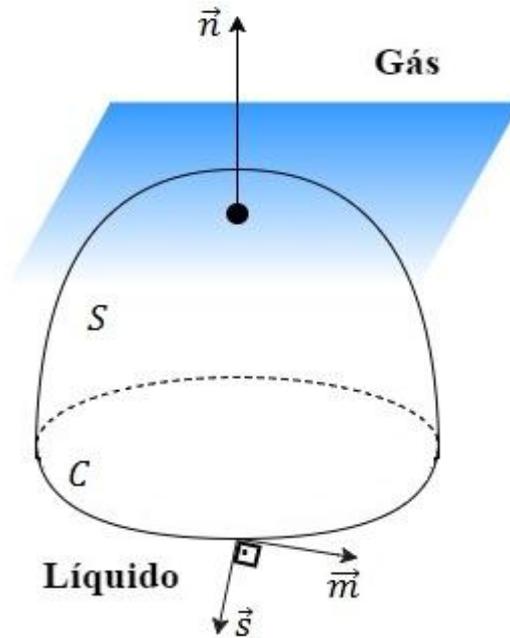
Como ilustrado na Figura 2, considere uma pequena parte S de uma superfície de interface, entre o líquido e o gás, a qual é curvada e está delimitada por uma curva C . Nesta figura, \vec{m} denota o vetor unitário tangente à C , em um dado ponto de C , e \vec{s} representa o vetor unitário normal à curva C , no referido ponto, sendo \vec{s} um vetor tangente à superfície de interface. Desse modo, a força normal à C (atuando ao longo desta curva) associada com o trabalho que é realizado através da fronteira das fases é dada por $\sigma\vec{s}$.

Assim, suponha que S é uma superfície suave infinitesimal tomada em torno de um ponto a , sendo \vec{n} o vetor unitário normal exterior à S neste ponto, de modo que o conjunto $\{\vec{s}, \vec{m}, \vec{n}\}$ constitui uma base (ordenada) ortonormal de \mathbb{R}^3 , orientada positivamente. Isso é possível, desde que se tome a curva C contida em um plano paralelo ao plano tangente à S no ponto a , de forma que, em qualquer ponto de C , o plano gerado pelos vetores \vec{s} e \vec{m} se mantém paralelo ao referido plano tangente à S em a .

O tensor das tensões agindo no líquido será denotado por T , enquanto que o tensor das tensões agindo no gás será representado por \hat{T} . Assim, desconsiderando-se os movimentos das fases fluidas que se encontram na vizinhança da superfície de interface, e conseqüentemente desprezando-se o movimento da própria superfície de interface, um balanço de forças de contato que atuam na superfície S fornece a seguinte relação integral:

$$\iint_S T \cdot \vec{n} dA - \iint_S \hat{T} \cdot \vec{n} dA + \oint_C \sigma \vec{s} d\ell = 0, \text{ em } z = h. \quad (1)$$

Figura 2 – Uma pequena parte da superfície de interface englobada por uma curva C .



Fonte: A autora, 2022.

Para transformar a integral de linha, que aparece na última parcela do lado esquerdo da Eq. (1) em uma integral de superfície, serão necessários alguns resultados teóricos, os quais serão abordados a seguir.

Proposição 1 (Forma matricial do teorema de Stokes generalizado). Sejam $\mathcal{T}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ uma transformação linear e $\beta = \{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$ qualquer base (ordenada) ortonormal de \mathbb{R}^3 , a qual está orientada positivamente. Dado um ponto de \mathbb{R}^3 , considere uma superfície infinitesimal \mathcal{S} (suave) tomada em torno de tal ponto, a qual se encontra delimitada por uma curva fechada \mathcal{C} , também suave e regular. Denote por $\vec{n} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$ o vetor unitário normal à \mathcal{S} em tal ponto, e por $\vec{m} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$ um vetor unitário tangente à \mathcal{C} , com ponto de aplicação em \mathcal{C} . As orientações dos vetores \vec{n} e \vec{m} são tais que, tomando-se um vetor unitário $\vec{s} = s_1\vec{b}_1 + s_2\vec{b}_2 + s_3\vec{b}_3$ traçado de um ponto interior de \mathcal{S} até à curva \mathcal{C} , então o conjunto $\{\vec{s}, \vec{m}, \vec{n}\}$ constitui uma base (ordenada) ortonormal de \mathbb{R}^3 , orientada positivamente. Seja $[[\mathcal{T}]]_\beta \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ a representação matricial da transformação linear \mathcal{T} , com relação à base β , dada por

$$[\mathcal{T}]_\beta = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_{11} & \mathcal{T}_{12} & \mathcal{T}_{13} \\ \mathcal{T}_{21} & \mathcal{T}_{22} & \mathcal{T}_{23} \\ \mathcal{T}_{31} & \mathcal{T}_{32} & \mathcal{T}_{33} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Se cada função componente $\mathcal{T}_{ij}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ é continuamente diferenciável em um domínio contendo \mathcal{S} , e se $\partial_k \mathcal{T}_{ij}$ denota a derivada direcional de \mathcal{T}_{ij} na direção do vetor $\vec{b}_k \in \beta$, então se tem a forma matricial da fórmula de Stokes generalizada, dada por

$$\oint_{\mathcal{C}} [\mathcal{T}]_\beta \cdot \vec{m} \, d\ell = \iint_{\mathcal{S}} (\nabla_\beta \times [\mathcal{T}]_\beta) \cdot \vec{n} \, dA, \quad (3)$$

onde

$$\nabla_\beta \times [\mathcal{T}]_\beta = \begin{pmatrix} \partial_2 \mathcal{T}_{13} - \partial_3 \mathcal{T}_{12} & \partial_3 \mathcal{T}_{11} - \partial_1 \mathcal{T}_{13} & \partial_1 \mathcal{T}_{12} - \partial_2 \mathcal{T}_{11} \\ \partial_2 \mathcal{T}_{23} - \partial_3 \mathcal{T}_{22} & \partial_3 \mathcal{T}_{21} - \partial_1 \mathcal{T}_{23} & \partial_1 \mathcal{T}_{22} - \partial_2 \mathcal{T}_{21} \\ \partial_2 \mathcal{T}_{33} - \partial_3 \mathcal{T}_{32} & \partial_3 \mathcal{T}_{31} - \partial_1 \mathcal{T}_{33} & \partial_1 \mathcal{T}_{32} - \partial_2 \mathcal{T}_{31} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

é a representação matricial (na base β) do chamado rotacional da aplicação linear \mathcal{T} .

Observação 1. Sob as mesmas condições da Proposição 1, usando notação indicial, Milne (1948) apresenta uma prova para a fórmula de Stokes generalizada, dada por

$$\oint_{\mathcal{C}} \varphi_{ij} dx_i = \iint_{\mathcal{S}} \epsilon_{pqr} \partial_q \varphi_{rj} n_p \, dA, \quad \forall j = 1, 2, 3. \quad (5)$$

Na Eq. (5), as funções φ_{ij} são os componentes do um tensor de segunda ordem (tomados com relação a uma base arbitrária), dx_i é a diferencial do i -ésimo componente do vetor normal à curva \mathcal{C} (com relação à mesma base), n_p é o p -ésimo componente do vetor normal à superfície (com relação à referida base), e ϵ_{pqr} denota o tensor de permutação, definido por

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{se } ijk = 123, 231, \text{ ou } 312 \\ -1, & \text{se } ijk = 321, 132, \text{ ou } 213 \\ 0, & \text{se quaisquer dos índices são iguais.} \end{cases} \quad (6)$$

Assim, considerando-se a base como sendo $\beta = \{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$, fazendo-se $\varphi_{ij} = \mathcal{T}_{ji}$, $dx_i = m_i d\ell$ e $n_p = n_p$, então, a partir dessa fórmula de Stokes demonstrada por Milne (1948), pode-se escrever a seguinte equação mais apropriada:

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathcal{T}_{ji} m_i d\ell = \iint_{\mathcal{S}} \epsilon_{pqr} \partial_q \mathcal{T}_{jr} n_p dA, \quad \forall j = 1, 2, 3. \quad (7)$$

A última equação é exatamente a representação indicial da fórmula de Stokes generalizada considerada na Eq. (3).

Corolário 1. Se $\mathcal{T}: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ é uma transformação linear antissimétrica com representação matricial, com relação a uma base $\beta = \{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$, dada por

$$\llbracket \mathcal{T} \rrbracket_{\beta} = \begin{pmatrix} 0 & u_3 & -u_2 \\ -u_3 & 0 & u_1 \\ u_2 & -u_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

onde $\vec{u} = u_1 \vec{b}_1 + u_2 \vec{b}_2 + u_3 \vec{b}_3$ é um campo vetorial, então, sob as mesmas condições descritas na Proposição 1, tem-se

$$\oint_{\mathcal{C}} (\vec{u} \times \vec{m}) d\ell = \iint_{\mathcal{S}} [(\nabla_{\beta} \vec{u})^T \cdot \vec{n} - (\nabla_{\beta} \cdot \vec{u}) \vec{n}] dA, \quad (9)$$

onde

$$\nabla_{\beta} \cdot \vec{u} \equiv \partial_1 u_1 + \partial_2 u_2 + \partial_3 u_3, \quad (10)$$

$$\nabla_{\beta} \vec{u} \equiv \begin{pmatrix} \partial_1 u_1 & \partial_2 u_1 & \partial_3 u_1 \\ \partial_1 u_2 & \partial_2 u_2 & \partial_3 u_2 \\ \partial_1 u_3 & \partial_2 u_3 & \partial_3 u_3 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

$$\vec{u} \times \vec{m} \equiv \begin{vmatrix} \vec{b}_1 & \vec{b}_2 & \vec{b}_3 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{vmatrix}. \quad (12)$$

Prova: Sob tais condições, pode-se ver que

$$\nabla_{\beta} \times \llbracket \mathcal{J} \rrbracket_{\beta} = \begin{pmatrix} 0 & \partial_2 u_1 & \partial_3 u_1 \\ \partial_1 u_2 & 0 & \partial_3 u_2 \\ \partial_1 u_3 & \partial_2 u_3 & 0 \end{pmatrix}^T - \begin{pmatrix} \partial_2 u_2 + \partial_3 u_3 & 0 & 0 \\ 0 & \partial_1 u_1 + \partial_3 u_3 & 0 \\ 0 & 0 & \partial_1 u_1 + \partial_2 u_2 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Assim, somando-se e subtraindo-se a matriz diagonal $D = \text{diag}(\partial_1 u_1, \partial_2 u_2, \partial_3 u_3) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ao lado direito da Eq. (13) obtém-se

$$\nabla_{\beta} \times \llbracket \mathcal{J} \rrbracket_{\beta} = (\nabla_{\beta} \vec{u})^T - (\nabla_{\beta} \cdot \vec{u})I, \quad (14)$$

onde $I \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ é a matriz identidade. Por outro lado, aplicando-se a matriz $\llbracket \mathcal{J} \rrbracket_{\beta}$, indicada na Eq. (8), ao vetor $\vec{m} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$, obtém-se o seguinte resultado:

$$\llbracket \mathcal{J} \rrbracket_{\beta} \cdot \vec{m} = (u_2 m_3 - u_3 m_2) \vec{b}_1 + (u_3 m_1 - u_1 m_3) \vec{b}_2 + (u_1 m_2 - u_2 m_1) \vec{b}_3, \quad (15)$$

o qual pode ser escrito na forma resumida

$$\llbracket \mathcal{J} \rrbracket_{\beta} \cdot \vec{m} = \begin{vmatrix} \vec{b}_1 & \vec{b}_2 & \vec{b}_3 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{vmatrix} \equiv \vec{u} \times \vec{m}. \quad (16)$$

Finalmente, substituindo-se as Eqs. (14) e (16) na Eq. (3), chega-se à relação pretendida, mostrada na Eq. (9), concluindo-se, dessa forma, a prova deste corolário. \square

Corolário 2. A integral de linha que aparece na última parcela do lado esquerdo da Eq. (1) pode ser escrita na seguinte forma equivalente:

$$\oint_c \sigma \vec{s} d\ell = \iint_s [\sigma(\nabla \cdot \vec{n})\vec{n} - \nabla\sigma] dA, \quad (17)$$

onde os operadores diferenciais “ ∇ ” e “ $\nabla \cdot$ ” estão associados as coordenadas relativas à base canônica de \mathbb{R}^3 .

Prova: De volta ao problema descrito na Figura 1, estabelecendo-se as relações óbvias $\vec{s} = \vec{s}$, $\vec{m} = \vec{m}$, $\vec{n} = \vec{n}$, $\mathcal{S} = S$ e $\mathcal{C} = C$, pode-se notar que tal problema encontra-se sob as condições da Proposição 1. Assim, escolhendo-se $\vec{u} = \sigma \vec{n}$, onde σ é a tensão superficial ao longo da curva C , e selecionando-se (por conveniência!) β como sendo a base canônica do \mathbb{R}^3 , ou seja, fazendo-se $\beta = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$, então do Corolário 1 (mais precisamente da Eq. 9) segue que

$$\oint_C \sigma(\vec{n} \times \vec{m}) d\ell = \iint_S [(\nabla(\sigma\vec{n}))^T \cdot \vec{n} - \nabla \cdot (\sigma\vec{n})\vec{n}] dA, \quad (18)$$

onde agora $\vec{m} \times \vec{n}$ é o produto vetorial tradicional de \vec{m} por \vec{n} , ou seja, descrito em termos dos vetores da base canônica $\beta = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$. De forma semelhante, os operadores diferenciais “ ∇ ” e “ $\nabla \cdot$ ” denotam, respectivamente, gradiente e divergente associados com a base canônica.

Em seguida, note que

$$\begin{aligned} (\nabla(\sigma\vec{n}))^T \cdot \vec{n} - \nabla \cdot (\sigma\vec{n})\vec{n} &= (\nabla\sigma \cdot (\vec{n})^T) \cdot \vec{n} + \sigma(\nabla\vec{n})^T \cdot \vec{n} \\ &\quad - \sigma(\nabla \cdot \vec{n})\vec{n} - (\nabla\sigma \cdot \vec{n})\vec{n}. \end{aligned} \quad (19)$$

Observe também que

$$(\nabla\sigma \cdot (\vec{n})^T) \cdot \vec{n} = \nabla\sigma, \quad (20)$$

$$(\nabla\vec{n})^T \cdot \vec{n} = \frac{1}{2}\nabla(\vec{n} \cdot \vec{n}) = \frac{1}{2}\nabla(1) = \vec{0}. \quad (21)$$

Além disso, como a curva C encontra-se no plano gerado pelos vetores \vec{s} e \vec{m} , então a taxa de variação na direção de \vec{n} da tensão superficial σ (uma função definida em C) é zero, ou seja,

$$\nabla\sigma \cdot \vec{n} = 0. \quad (22)$$

Assim, substituindo-se as Eqs. (20), (21) e (22) na Eq. (19), chega-se à relação:

$$[\nabla(\sigma\vec{n}) \cdot \vec{n} - \nabla \cdot (\sigma\vec{n})]\vec{n} = \nabla\sigma - \sigma(\nabla \cdot \vec{n})\vec{n}. \quad (23)$$

Por outro lado, como a base $\{\vec{s}, \vec{m}, \vec{n}\}$ é orientada positivamente, então $\vec{m} \times \vec{n} = \vec{s}$, ou seja,

$$\vec{n} \times \vec{m} = -\vec{s}. \quad (24)$$

Substituindo-se as Eqs. (23) e (24) na Eq. (18), obtém-se o importante resultado mostrado na Eq. (17), concluindo-se a prova deste segundo corolário. \square

Devido à escolha da base canônica, se $\vec{n} = n_1\vec{e}_1 + n_2\vec{e}_2 + n_3\vec{e}_3$, então observe que na Eq. (17) tem-se

$$\nabla \cdot \vec{n} = \frac{\partial n_1}{\partial x} + \frac{\partial n_2}{\partial y} + \frac{\partial n_3}{\partial z}. \quad (25)$$

Além disso, na Eq. (17), deve-se notar que o vetor gradiente de σ é dado por

$$\nabla\sigma = \frac{\partial\sigma}{\partial x}\vec{e}_1 + \frac{\partial\sigma}{\partial y}\vec{e}_2 + \frac{\partial\sigma}{\partial z}\vec{e}_3. \quad (26)$$

A seguir, o termo $\sigma(\nabla \cdot \vec{n})\vec{n}$ que aparece no lado direito da Eq. (17) será reescrito em uma forma mais apropriada para a teoria de películas finas. Para isso, considere a função

$$f(x, y, z, t) = z - h(x, y, t). \quad (27)$$

Assim, fixado t , a superfície de interface pode ser vista como a superfície de nível desta função f , no nível zero. Logo, para este instante de tempo, o vetor normal à S é dado por

$$\vec{n} = \pm \frac{\nabla f}{\sqrt{1 + (\partial h/\partial x)^2 + (\partial h/\partial y)^2}} = \pm \frac{-\nabla_{xy}h + \vec{e}_3}{\sqrt{1 + \|\nabla_{xy}h\|^2}}, \quad (28)$$

onde

$$\nabla_{xy}h = \frac{\partial h}{\partial x}\vec{e}_1 + \frac{\partial h}{\partial y}\vec{e}_2, \quad \text{e} \quad \|\nabla_{xy}h\| = \sqrt{(\partial h/\partial x)^2 + (\partial h/\partial y)^2}. \quad (29)$$

Então, pode-se escrever

$$\sigma(\nabla \cdot \vec{n})\vec{n} = -\sigma \nabla_{xy} \cdot \left(\frac{\nabla_{xy} h}{\sqrt{1 + \|\nabla_{xy} h\|^2}} \right) \vec{n}, \quad (30)$$

onde

$$\nabla_{xy} \cdot (h) = \frac{\partial(h)}{\partial x} + \frac{\partial(h)}{\partial y}. \quad (31)$$

Em geometria diferencial, a curvatura média da superfície determinada pelo gráfico da função $z = h(x, y)$ é dada por, Dubrovin et al. (1984),

$$H = \nabla_{xy} \cdot \left(\frac{\nabla_{xy} h}{\sqrt{1 + \|\nabla_{xy} h\|^2}} \right). \quad (32)$$

Combinando-se as Eqs. (30) e (32) chega-se à relação

$$\sigma(\nabla \cdot \vec{n})\vec{n} = -\sigma H \vec{n}. \quad (33)$$

Assim, substituindo-se a Eq. (33) na Eq. (17) obtém-se

$$\oint_C \sigma \vec{s} \, d\ell = \iint_S (-\sigma H \vec{n} - \nabla \sigma) \, dA. \quad (34)$$

De volta à Eq. (1), usando a Eq. (34), o balanço de forças de contato sobre a superfície S pode ser reescrito como

$$\iint_S (T \cdot \vec{n} - \hat{T} \cdot \vec{n} - \sigma H \vec{n} - \nabla \sigma) = 0, \text{ em } z = h. \quad (35)$$

Desde que S é uma parte arbitrária da superfície de interface, então da Eq. (35) segue que

$$T \cdot \vec{n} - \hat{T} \cdot \vec{n} - \sigma H \vec{n} - \nabla \sigma = 0, \text{ em } z = h. \quad (36)$$

A equação de Laplace generalizada é o componente, na direção do vetor normal \vec{n} , do balanço de forças de contato descrito na Eq. (36), a qual é dada por

$$(T \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n} - (\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n} - \sigma H (\vec{n} \cdot \vec{n}) - \nabla \sigma \cdot \vec{n} = 0, \text{ em } z = h. \quad (37)$$

Como $\nabla \sigma \cdot \vec{n} = 0$ e $\vec{n} \cdot \vec{n} = 1$, a equação de Laplace generalizada (Eq. 37) pode ser reescrita na forma

$$(T \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n} - \pi = \sigma H, \text{ em } z = h, \quad (38)$$

onde $\pi \equiv (\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}$ é o componente do vetor tensão $\hat{T} \cdot \vec{n}$ na direção normal \vec{n} .

Interpretando-se $(T \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n}$ e π como sendo os componentes normais das tensões que atuam, respectivamente, no líquido e no gás que se encontram na vizinhança da interface, então a equação de Laplace generalizada (Eq. 38) afirma que tais componentes de tensão experimentam um salto ao cruzarem a interface das fases, o qual é exatamente a tensão superficial vezes a curvatura média da superfície de interface.

A seguir, será obtida uma expressão para o termo $T \cdot \vec{n}$ que aparece no lado esquerdo da Eq. (38). Para isso, considera-se que a película fina é constituída de um fluido Newtoniano incompressível, ver, por exemplo, Leal (2007). Assim, o tensor das tensões no líquido é da forma (Slattery, 1999):

$$T = -pI + 2\mu D, \quad (39)$$

onde μ e p são, respectivamente, a viscosidade e a pressão do líquido. Como o líquido é incompressível, essa pressão não pode ser tratada como uma pressão termodinâmica, sendo na realidade uma pressão média, Slattery (1999),

$$p = -\frac{1}{3} \text{tr}(T), \quad (40)$$

onde $\text{tr}(T)$ denota o traço de T . Na Eq. (39) D é o tensor taxa de deformação do líquido, definido por

$$D = \frac{1}{2} \left(\nabla \vec{V} + (\nabla \vec{V})^T \right), \quad (41)$$

onde o vetor $\vec{V} = V_1 \vec{e}_1 + V_2 \vec{e}_2 + V_3 \vec{e}_3$ denota o campo de velocidade do líquido, tomado aqui com relação à base canônica do \mathbb{R}^3 .

Considerando no Corolário 1 $\vec{u} = \vec{V}$, $\vec{m} = \vec{m}$, $\vec{n} = \vec{n}$, $\beta = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$, $\mathcal{C} = C$ e $\mathcal{S} = S$, então da Eq. (9) segue que

$$\oint_C (\vec{V} \times \vec{m}) d\ell = \iint_S \left[(\nabla \vec{V})^T \cdot \vec{n} - (\nabla \cdot \vec{V}) \vec{n} \right] dA. \quad (42)$$

A fim de se manter coerente à hipótese usada na formulação da Eq. (1), a seguir, no tratamento do termo $T \cdot \vec{n}$, será desconsiderado o descolamento da fase líquida que se encontra na vizinhança da superfície de interface. Desse modo, ao longo da curva C , tem-se a aproximação $\vec{V} \times \vec{m} = \vec{0}$. Assim, a Eq. (42) torna-se

$$\iint_S \left[(\nabla \vec{V})^T \cdot \vec{n} - (\nabla \cdot \vec{V}) \vec{n} \right] dA = \vec{0}. \quad (43)$$

Logo, da Eq. (43) segue que

$$(\nabla \vec{V})^T \cdot \vec{n} = (\nabla \cdot \vec{V}) \vec{n}. \quad (44)$$

Como o líquido é incompressível, sua equação de conservação de massa toma a forma, Bird et al. (2002),

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0. \quad (45)$$

Combinando-se as Eqs. (44) e (45), obtém-se

$$(\nabla \vec{V})^T \cdot \vec{n} = 0. \quad (46)$$

Em vista das Eqs. (41) e (46), pode-se escrever

$$D \cdot \vec{n} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{V} + (\nabla \vec{V})^T) \cdot \vec{n} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{V} - (\nabla \vec{V})^T) \cdot \vec{n}, \quad (47)$$

ou de forma equivalente

$$D \cdot \vec{n} = W \cdot \vec{n}, \quad (48)$$

onde $W = (1/2) (\nabla \vec{V} - (\nabla \vec{V})^T)$ é o tensor taxa de rotação do líquido, um tensor antissimétrico associado com a rotação de corpo rígido de um elemento de fluido da película líquida, Slattery (1999). A partir de um cálculo direto, pode-se ver que

$$W \cdot \vec{n} = \frac{1}{2} \vec{\omega} \times \vec{n}, \quad (49)$$

onde $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{V}$ é o chamado vetor axial (ou de vorticidade) do líquido. Assim, usando-se as Eqs. (48) e (49) obtém-se

$$D \cdot \vec{n} = \frac{1}{2} \vec{\omega} \times \vec{n}. \quad (50)$$

Em vista da Eq. (50), ao se tomar o produto escalar de ambos os lados da Eq. (39) com relação ao vetor \vec{n} obtém-se

$$T \cdot \vec{n} = -p\vec{n} + \mu \vec{\omega} \times \vec{n}, \quad (51)$$

A partir da Eq. (51), e do fato de que $\vec{n} \cdot \vec{n} = 1$, chega-se à relação

$$(T \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n} = -p, \quad (52)$$

pois $(\vec{\omega} \times \vec{n}) \cdot \vec{n} = \vec{\omega} \cdot (\vec{n} \times \vec{n}) = \vec{0}$.

Substituindo-se a Eq. (52) na Eq. (38), obtém-se a seguinte condição associada com a pressão média do líquido incompressível, válida na superfície de interface:

$$-p - \pi = \sigma H, \text{ em } z = h. \quad (53)$$

Seja $\vec{\chi}(t) = x(t)\vec{e}_1 + y(t)\vec{e}_2 + z(t)\vec{e}_3$ o vetor posição, em um instante arbitrário t , de uma partícula do líquido viscoso, a qual se move arbitrariamente próxima à superfície de interface. Logo, neste instante de tempo, a altura dessa partícula (com relação à superfície sólida) pode ser aproximada por

$$z(t) = h(x(t), y(t), t). \quad (54)$$

Derivando-se ambos os lados da Eq. (54) com relação ao tempo, da regra da cadeia segue que

$$\dot{z}(t) = \frac{\partial h}{\partial x} \dot{x}(t) + \frac{\partial h}{\partial y} \dot{y}(t) + \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (55)$$

Desde $V_1 = \dot{x}(t)$, $V_2 = \dot{y}(t)$ e $V_3 = \dot{z}(t)$, então a partir da Eq. (55) obtém-se a seguinte condição cinemática, a qual vale na superfície de interface:

$$V_3 = \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial x} V_1 + \frac{\partial h}{\partial y} V_2, \quad \text{em } z = h. \quad (56)$$

Considerando a condição de contorno dada por

$$V_3 = 0, \quad \text{em } z = h, \quad (57)$$

pode-se integrar a equação de conservação de massa do líquido (Eq. 45), ao longo da camada de líquido, obtendo-se

$$V_3 = - \left(\int_0^{h(x,y,t)} \frac{\partial V_1}{\partial x} dz + \int_0^{h(x,y,t)} \frac{\partial V_2}{\partial y} dz \right), \quad \text{em } z = h. \quad (58)$$

Combinando-se as Eqs. (56) e (58), chega-se à relação

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial x} V_1 + \int_0^{h(x,y,t)} \frac{\partial V_1}{\partial x} dz + \frac{\partial h}{\partial y} V_2 + \int_0^{h(x,y,t)} \frac{\partial V_2}{\partial y} dz, \quad \text{em } z = h. \quad (59)$$

A partir da regra de Leibniz para a diferenciação de integrais com respeito a um parâmetro (Kaplan, 1973), sabe-se que

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\int_0^{h(x,y,t)} V_1 dz \right) = \frac{\partial h}{\partial x} V_1 + \int_0^{h(x,y,t)} \frac{\partial V_1}{\partial x} dz, \text{ em } z = h, \quad (60)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\int_0^{h(x,y,t)} V_2 dz \right) = \frac{\partial h}{\partial y} V_2 + \int_0^{h(x,y,t)} \frac{\partial V_2}{\partial y} dz, \text{ em } z = h. \quad (61)$$

Substituindo-se as Eqs. (60) e (61) na Eq. (59), obtém-se a seguinte lei de conservação, Myers (1998):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_0^{h(x,y,t)} V_1 dz \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\int_0^{h(x,y,t)} V_2 dz \right) = 0. \quad (62)$$

1.3 As Equações de Navier-Stokes e a Hipótese de Escoamento Lento

Como o líquido é um fluido Newtoniano incompressível, então o balanço de quantidade de movimento linear da película líquida é descrito pelas equações de Navier-Stokes, as quais possuem a seguinte forma vetorial, Slattery (1999):

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\nabla \vec{V}) \cdot \vec{V} \right] = -\nabla p + \mu \nabla \cdot (\nabla \vec{V}) + \vec{b}, \quad (63)$$

onde ρ é a densidade do líquido. O somatório de todas as forças de corpo, que agem no volume da película fina, está resumido no termo \vec{b} , o qual aparece no lado direito da Eq. (63). Supondo-se que \vec{b} pode ser descrito como o gradiente de um dado campo escalar,

$$\vec{b} = -\nabla \phi, \quad (64)$$

então a Eq. (63) pode ser reescrita como

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\nabla \vec{V}) \cdot \vec{V} \right] = -\nabla \mathcal{P} + \mu \nabla \cdot (\nabla \vec{V}), \quad (65)$$

onde \mathcal{P} é a chamada pressão modificada, definida por

$$\mathcal{P} = p + \phi. \quad (66)$$

Nesta seção serão consideradas as seguintes variáveis adimensionais:

$$\vec{V}^* = \frac{\vec{V}}{v_0}, \quad (67)$$

$$x^* = \frac{x}{h_0}, \quad y^* = \frac{y}{h_0}, \quad z^* = \frac{z}{h_0}, \quad (68)$$

$$\mathcal{P}^* = \frac{\mathcal{P}}{\mathcal{P}_0}, \quad (69)$$

$$t^* = \frac{t}{t_0}, \quad (70)$$

onde v_0 é uma magnitude característica da velocidade da fase líquida, h_0 é uma altura característica da película, \mathcal{P}_0 é uma pressão modificada característica, e t_0 é um tempo característico.

Em termos dessas variáveis adimensionais, a Eq. (65) pode ser reescrita na seguinte forma, Slattery (1999):

$$\frac{1}{N_{St}} \frac{\partial \vec{V}^*}{\partial t^*} + (\nabla \vec{V}^*) \cdot \vec{V}^* = -\frac{1}{N_{Ru}} \nabla \mathcal{P}^* + \frac{1}{N_{Re}} \nabla \cdot (\nabla \vec{V}^*). \quad (71)$$

Na Eq. (71), N_{St} , N_{Ru} e N_{Re} são, respectivamente, o número de Strouhal, o número de Ruark, e o número de Reynolds, dados por:

$$N_{St} = \frac{t_0 v_0}{h_0}, \quad N_{Ru} = \rho \frac{v_0^2}{\mathcal{P}_0}, \quad N_{Re} = \frac{h_0 v_0 \rho}{\mu}. \quad (72)$$

O número de Reynolds descreve a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas que agem no escoamento de um fluido. Quando as forças de inércias prevalecem sobre as

forças viscosas, o que ocorre quando $N_{Re} \rightarrow 0$, o regime de deslocamento do fluido é denominado de *escoamento lento*.

Hipótese 1 (Primeira hipótese básica da teoria de películas finas). Supõe-se que o descolamento da película de líquido se dá em um regime de *escoamento lento*.

Se N_{St} e N_{Ru} tomam valores arbitrários quando $N_{Re} \rightarrow 0$, deve-se esperar que na Eq. (71) o termo inercial $(\nabla \vec{V}^*) \cdot \vec{V}^*$ torne-se negligenciavelmente pequeno, com relação ao termo viscoso $1/N_{Re} \nabla \cdot (\nabla \vec{V}^*)$. Em vista disso, considerando-se a hipótese de escoamento lento, ou seja, no limite $N_{Re} \rightarrow 0$, as equações de Navier-Stokes (Eq. 71) se reduzem à forma

$$\frac{1}{N_{St}} \frac{\partial \vec{V}^*}{\partial t^*} = -\frac{1}{N_{Ru}} \nabla \mathcal{P}^* + \frac{1}{N_{Re}} \nabla \cdot (\nabla \vec{V}^*). \quad (73)$$

Como observado por Slattery (1999), usualmente o número de Strouhal assume um valor diferente da unidade somente em um escoamento periódico. Assim, para um escoamento não periódico pode-se escolher $t_0 = h_0/v_0$, de forma que $N_{St} = 1$. Desse modo, no limite considerado anteriormente, quando $N_{Re} \rightarrow 0$, a Eq. (71) torna-se

$$0 = -\frac{1}{N_{Ru}} \nabla \mathcal{P}^* + \frac{1}{N_{Re}} \nabla \cdot (\nabla \vec{V}^*), \quad (74)$$

ou seja,

$$0 = -\nabla \mathcal{P} + \mu \nabla \cdot (\nabla \vec{V}). \quad (75)$$

1.4 Integrando as Equações de Navier-Stokes

Hipótese 2 (Segunda hipótese básica da teoria de películas finas). Supõe-se que a magnitude do componente vertical da velocidade da película de líquido é negligenciavelmente pequena, quando comparada com as magnitudes dos demais componentes dessa velocidade, ou seja,

$$|V_3| \ll |V_i|, \quad \forall i = 1, 2. \quad (76)$$

Além disso, supõe-se que

$$\frac{\partial V_i}{\partial x} \ll \frac{\partial V_i}{\partial z}, \quad \text{e} \quad \frac{\partial V_i}{\partial y} \ll \frac{\partial V_i}{\partial z}, \quad \forall i = 1, 2. \quad (77)$$

Na presença da Hipótese 2, o tensor gradiente de velocidade da fase líquida toma a seguinte forma aproximada

$$\nabla \vec{V} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\partial V_1}{\partial z} \\ 0 & 0 & \frac{\partial V_2}{\partial z} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (78)$$

Usando a Eq. (78), pode-se notar que (em termos dos seus componentes) a Eq. (75) torna-se

$$0 = -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 V_1}{\partial z^2}, \quad (79)$$

$$0 = -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 V_2}{\partial z^2}, \quad (80)$$

$$0 = -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial z}. \quad (81)$$

A Eq. (81) informa que a pressão modificada não depende da variável z , sendo no máximo uma função das variáveis x , y e t , ou seja,

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}(x, y, t). \quad (82)$$

A seguir, as Eqs. (79) e (80) serão integradas com relação à variável z . Para isso serão consideradas duas condições de contorno apropriadas. A primeira é aquela que descreve a condição de não deslizamento do líquido na superfície sólida,

$$V_1 = 0 \quad \text{e} \quad V_2 = 0, \quad \text{em} \quad z = 0. \quad (83)$$

A fim de se estabelecer a segunda condição de contorno, seja \vec{t} um vetor unitário qualquer paralelo ao plano tangente à superfície de interface mostrada na Figura 2, tal que

$$\vec{n} \cdot \vec{t} = 0. \quad (84)$$

Então, em vista das Eqs. (39) e (84), o componente tangencial (na direção do vetor unitário \vec{t}) do balanço de forças de contato mostrado na Eq. (36) pode ser escrito como

$$2\mu(D \cdot \vec{n}) \cdot \vec{t} - (\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{t} - \nabla\sigma \cdot \vec{t} = 0, \text{ em } z = h. \quad (85)$$

Mas, das Eqs. (41) e (46) sabe-se que

$$2\mu(D \cdot \vec{n}) = \mu(\nabla\vec{V}) \cdot \vec{n}. \quad (86)$$

Então, combinando-se as Eqs. (85) e (86), pode-se escrever

$$\left((\nabla\vec{V}) \cdot \vec{n} \right) \cdot \vec{t} = \frac{1}{\mu} \left((\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{t} + \nabla\sigma \cdot \vec{t} \right), \text{ em } z = h, \quad (87)$$

onde $\nabla\vec{V}$ é dado pela Eq. (78).

Em um dado instante de tempo t , a equação do plano tangente à superfície de interface em um ponto (x_0, y_0, z_0) , com $z_0 = h(x_0, y_0, t)$, é dada por

$$z = \frac{\partial h(x_0, y_0, t)}{\partial x} (x - x_0) + \frac{\partial h(x_0, y_0, t)}{\partial y} (y - y_0) + z_0, \quad (88)$$

onde $\partial h(x_0, y_0, t)/\partial x$ e $\partial h(x_0, y_0, t)/\partial y$ são, respectivamente, as inclinações deste plano com relação as direções das coordenadas x e y .

A próxima hipótese estabelece que, no estudo da dinâmica de uma película fina, as inclinações relativas às direções x e y , de qualquer plano tangente à superfície de interface, podem ser negligenciadas.

Hipótese 3 (Terceira hipótese básica da teoria de películas finas). Supõe-se que as inclinações, com relação às direções x e y , de qualquer plano tangente à superfície de interface são desprezivelmente pequenas, quando comparadas com a unidade,

$$\left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \ll 1, \quad \text{e} \quad \left| \frac{\partial h}{\partial y} \right| \ll 1. \quad (89)$$

Na presença da Hipótese 2.3, tem-se que

$$\cos \theta = \vec{n} \cdot \vec{e}_3 \cong 1, \quad (90)$$

onde θ é o ângulo entre os vetores unitários \vec{n} e \vec{e}_3 . Em outras palavras, o ângulo entre o vetor unitário \vec{n} , normal exterior à superfície de interface, e o vetor unitário \vec{e}_3 , que aponta na direção positiva do eixo da variável z , se mantém próximo de zero, para qualquer ponto sobre a superfície de interface das fases fluidas. Em vista disso, a Eq. (87) pode ser aproximada pela relação:

$$\left((\nabla \vec{V}) \cdot \vec{e}_3 \right) \cdot \vec{\tau} = \frac{1}{\mu} \left((\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{\tau} + \nabla \sigma \cdot \vec{\tau} \right), \quad \text{em } z = h. \quad (91)$$

Da relação descrita na Eq. (90), decorre também que os vetores unitários \vec{e}_1 e \vec{e}_2 (pertencentes à base canônica de \mathbb{R}^3) são, essencialmente, sempre paralelos a qualquer plano tangente tomado sobre a superfície de interface. Isso permite escolher, por exemplo, $\vec{\tau} = \vec{e}_1$. Feita esta escolha, segue das Eq. (91) e (78) que

$$\frac{\partial V_1}{\partial z} = \frac{1}{\mu} \left(\tau_1 + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right), \quad \text{em } z = h, \quad (92)$$

onde $\tau_1 \equiv (\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{e}_1$ é o componente, na direção do vetor \vec{e}_1 , da tensão de cisalhamento que a fase gás exerce sobre a superfície de interface.

De forma análoga, escolhendo $\vec{\tau} = \vec{e}_2$, chega-se à equação

$$\frac{\partial V_2}{\partial z} = \frac{1}{\mu} \left(\tau_2 + \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right), \quad \text{em } z = h. \quad (93)$$

Na Eq. (93), $\tau_2 \equiv (\hat{T} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{e}_2$ é o componente, na direção do vetor \vec{e}_2 , da tensão de cisalhamento que a fase gás exerce sobre a superfície de interface. Assim, as relações mostradas nas Eq. (92) e (93) são chamadas de condições de contorno de tensão de cisalhamento na superfície que separa o líquido do gás.

Agora, se podem integrar as Eqs. (79) e (80). Para isso, a partir da relação funcional mostrada na Eq. (82), inicialmente nota-se que a derivada parcial $\partial\mathcal{P}/\partial x$ não depende de z . Assim, integrando-se a Eq. (79) com relação à z , se obtém uma equação da forma

$$\frac{\partial V_1}{\partial z} + d_1(x, y, t) = \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} z. \quad (94)$$

Considerando-se a condição de contorno de tensão de cisalhamento descrita na Eq. (92), a partir da Eq. (94) obtém-se que

$$d_1(x, y, t) = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} h - \left(\tau_1 + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \right]. \quad (95)$$

Combinando-se as Eqs. (94) e (95), chega-se a uma equação diferencial parcial de primeira ordem, dada por

$$\frac{\partial V_1}{\partial z} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} (z - h) + \left(\tau_1 + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \right]. \quad (96)$$

Como τ_1 (a tensão de cisalhamento na direção do vetor \vec{e}_1) e a tensão superficial σ não dependem de z , então integrando a Eq. (96), com relação à variável z , obtém-se uma expressão da forma

$$V_1 + d_2(x, y, t) = \frac{1}{\mu} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} (z - h)^2 + \left(\tau_1 + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) z \right]. \quad (97)$$

Agora, impondo-se à Eq. (97) a condição de contorno de não deslizamento na parede sólida, descrita na Eq. (83), verifica-se que

$$d_2(x, y, t) = \frac{1}{\mu} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} h^2 \right]. \quad (98)$$

Substituindo-se a Eq. (98) na Eq. (97), obtém-se a expressão que define o primeiro componente do campo de velocidade da película líquida:

$$V_1 = \frac{1}{\mu} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} [(z - h)^2 - h^2] + \left(\tau_1 + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) z \right\}. \quad (99)$$

De forma inteiramente análoga, pode-se mostrar que o segundo componente desse campo de velocidade é dado por

$$V_2 = \frac{1}{\mu} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial y} [(z-h)^2 - h^2] + \left(\tau_2 + \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) z \right\}. \quad (100)$$

1.5 Equações Governantes

1.5.1 Modelo Parabólico

Integrando-se as Eqs. (99) e (100) no intervalo da camada de líquido entre $z = 0$ e $z = h$, seguem as respectivas relações:

$$\int_0^{h(x,y,t)} V_1 dz = \frac{1}{\mu} \left[-\frac{h^3}{3} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \left(\tau_1 + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) \right], \quad (101)$$

$$\int_0^{h(x,y,t)} V_2 dz = \frac{1}{\mu} \left[-\frac{h^3}{3} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial y} + \frac{h^2}{2} \left(\tau_2 + \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right) \right]. \quad (102)$$

Combinando-se as Eqs. (101), (102) e (62), chega-se a equação diferencial parcial que governa a dinâmica da altura da película fina, dada por:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{h^2}{2\mu} (\vec{\tau} + \nabla_{xy} \sigma) \right] - \nabla_{xy} \cdot \left(\frac{h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \mathcal{P} \right) = 0, \quad (103)$$

onde $\vec{\tau} = \tau_1 \vec{e}_1 + \tau_2 \vec{e}_2$ é o vetor tensão de cisalhamento, o qual atua tangencialmente à superfície de interface, sendo uma consequência da ação do gás sobre essa superfície.

Assim, dado um intervalo de tempo (t_0, t_f) , a Eq. (103) governa a variação de $h(x, y, t)$ no espaço-tempo $\mathbb{R}^3 \times (t_0, t_f)$, de modo que a solução de tal equação diferencial determina a altura da película de líquido, em função do tempo e com relação a cada ponto

(x, y) de um dado domínio bidimensional $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, o qual está associado com a superfície sólida.

Combinando-se as Eqs. (53) e (66), a pressão modificada que aparece na Eq. (103) assume a seguinte forma

$$\mathcal{P} = -\sigma H + \phi - \pi, \text{ em } z = h. \quad (104)$$

Devido à forma da expressão que define a curvatura média da superfície de interface H , mostrada na Eq. (32), a relação indicada na Eq. (104) é efetivamente uma equação diferencial parcial, a qual é bastante complexa, sendo altamente não linear na variável h . No entanto, a Hipótese 3 simplifica esse modelo matemático. De fato, em vista da relação descrita na Eq. (89) tem-se que $\|\nabla_{xy} h\|^2 \ll 1$. Desse modo, a Eq. (32) pode ser reescrita na seguinte forma aproximada:

$$H = \nabla_{xy} \cdot (\nabla_{xy} h). \quad (105)$$

Substituindo-se a Eq. (105) na Eq. (104), chega-se a seguinte aproximação para a expressão associada com a pressão modificada, válida na superfície de interface:

$$\mathcal{P} = -\sigma \Delta_{xy} h + \phi - \pi, \text{ em } z = h \quad (106)$$

onde “ Δ_{xy} ” denota o operador Laplaciano associado com as variáveis x e y , dado por

$$\Delta_{xy} h = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2}. \quad (107)$$

Finalmente, substituindo a Eq. (106) na Eq. (103), obtém-se a equação que governa a altura da película fina, escrita na forma de uma equação diferencial parcial não linear de quarta ordem na variável h :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{h^2}{2\mu} (\vec{\tau} + \nabla_{xy} \sigma) \right] - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{h^3}{3\mu} \nabla_{xy} (-\sigma \Delta_{xy} h + \phi - \pi) \right] = 0. \quad (108)$$

Na Eq. (108) o campo escalar ϕ (associado com o somatório de todas as forças de corpo) é considerado na superfície de interface, ou seja, em $z = h$.

A Tabela 1 mostra alguns casos especiais da equação diferencial parcial não linear considerada na Eq. (108), os quais serão resolvidos numericamente aqui. No primeiro caso, temos uma forma básica da equação da película fina, onde $\vec{\tau} = \vec{0}$, $\phi = \pi = 0$ e a tensão superficial é considerada constante.

Já o segundo caso tem uma grande importância para o presente trabalho. Neste caso são desconsiderados os efeitos de $\vec{\tau}$ e π , supondo que σ é constante. Além disso, note que tal forma de interesse trata ϕ como uma função de h (a altura da película), a qual é denotada por $\psi(h)$. Este é o caso onde é levada em consideração a ação das chamadas forças de Van der Waals, as quais são forças de corpo de origem intermolecular, essencialmente provenientes das interações existentes entre as moléculas de líquido e sólido, veja Israelachvili (2011), por exemplo.

No terceiro caso temos que as forças de corpo estão associadas somente ao campo gravitacional, tendo uma forma hidrostática típica, dada por $\pm\rho gh$, onde g é o valor da aceleração da gravidade local. Neste caso, note que a escolha do sinal \pm depende se o líquido está aderido acima ou abaixo da superfície sólida.

Por fim, no último caso temos um modelo para o problema de película fina que concomitantemente descreve os fenômenos de interesse referidos acima.

Tabela 1 – Algumas formas especiais da equação de película fina.

Caso	$\vec{\tau}$	σ	ϕ	π	Forma
1	zero	const	zero	zero	$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} (-\Delta_{xy} h) \right] = 0$
2	zero	const	$\psi(h)$	zero	$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \left(-\Delta_{xy} h + \frac{\psi}{\sigma} \right) \right] = 0$
3	zero	const	$\pm\rho gh$	zero	$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \left(-\Delta_{xy} h \pm \frac{\rho gh}{\sigma} \right) \right] = 0$
4	zero	const	$\psi(h) \pm \rho gh$	zero	$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \left(-\Delta_{xy} h \pm \frac{\rho gh + \psi}{\sigma} \right) \right] = 0$

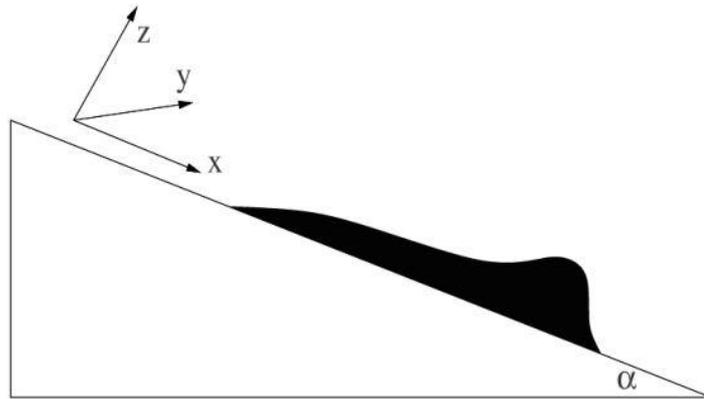
Fonte: A autora, 2022.

1.5.2 Modelo Hiperbólico

Além dos quatro casos citados acima, também será apresentado neste trabalho outro caso particular da equação de películas finas, envolvendo a dinâmica de uma fina camada de líquido em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade, assim como descrito por Li, Jeong e Kim (2014). Esse modelo matemático também é derivado das equações de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos incompressíveis.

Na Figura 3 podemos observar um diagrama esquemático do fluxo de película fina em um plano inclinado impulsionado pela gravidade, onde a coordenada x aumenta na direção do fluxo, y mede a distância na direção transversal e z é a elevação perpendicular ao substrato.

Figura 3 – Esboço do fluido em geometria bidimensional



Fonte: KONDIC, L. SIAM Review, vol. 45, p.97, 2003.

Considerando uma película líquida fluindo para baixo em uma superfície inclinada, podemos reescrever a Eq. (63) da seguinte forma

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \vec{V} + g \sin \alpha \vec{i} - g \cos \alpha \vec{k}. \quad (109)$$

Com o objetivo de simplificar a Eq. (109) utilizaremos a aproximação de lubrificação. Denotando a velocidade do fluido como $\vec{V} = (\vec{v}, w)$, onde w representa o componente z e \vec{v} para os componentes no plano, e ignorando a viscosidade do ar, obtém-se

$$\vec{v} = \left[\frac{1}{\mu} \nabla_2 p - \frac{1}{\mu} \rho g \sin \alpha \vec{i} \right] \left[\frac{z^2}{2} - hz \right], \quad (110)$$

onde $\nabla_2 = (\partial_x, \partial_y)$. Na interface, $z = h(x, y)$, a pressão é dada por

$$p = -\rho g(z - h) \cos \alpha - \sigma \kappa + p_0, \quad (111)$$

onde κ é a curvatura da interface e p_0 é a pressão atmosférica na fase de ar. A próxima etapa é definir a velocidade média no plano como:

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h \vec{v} dz = -\frac{h^2}{3\mu} (\nabla_2 p - \rho g \text{sen } \alpha \vec{i}). \quad (112)$$

Em termos físicos, pode-se também exigir que a equação de conservação de massa seja válida:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h \langle \vec{v} \rangle) = 0. \quad (113)$$

Introduzindo uma aproximação para a curvatura $\kappa \approx \nabla^2 h$ e combinando a Eq. (112) com a Eq. (113) obtemos

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{1}{3\mu} \nabla \cdot [\sigma h^3 \nabla \nabla^2 h - \rho g h^3 \nabla h \cos \alpha + \rho g h^3 \text{sen } \alpha \vec{i}], \quad (114)$$

que é uma equação diferencial parcial não linear que governa o fluxo de uma película fina em um plano inclinado impulsionado pela gravidade. Derivações mais detalhadas podem ser encontradas em Oron et al. (1997) e Kondic (2003).

O modelo hiperbólico descrito pela Eq. (114) também será resolvido numericamente nesta Tese.

2 AS EQUAÇÕES DO ESCOAMENTO DE PELÍCULAS FINAS EM SUPERFÍCIES SÓLIDAS E INCLINADAS

Neste capítulo serão descritas algumas equações que modelam o problema do escoamento de películas finas em superfícies sólidas e inclinadas.

2.1 Adimensionalização da Primeira Equação Governante

Tendo em conta a Tabela 1, consideraremos algumas formas adimensionais da equação diferencial parcial que governa a altura da película fina, dada pela Eq. (108), onde serão consideradas as seguintes variáveis adimensionais:

$$h^* = \frac{h}{U_0}, \quad (115)$$

$$x^* = \frac{x}{h_0}, \quad y^* = \frac{y}{h_0}, \quad (116)$$

$$t^* = \frac{U_0 t}{h_0}, \quad (117)$$

$$\sigma^* = \frac{h_0 \sigma}{\mu U_0}. \quad (118)$$

Aqui, U_0 é uma velocidade característica do problema e h_0 é uma altura característica da película de líquido.

No que segue, apresentaremos os quatro casos particulares que foram considerados neste trabalho.

2.1.1 Caso 1

Para este primeiro caso, consideraremos $\vec{\tau} = 0$, $\phi = 0$, $\pi = 0$ e σ é igual a uma constante.

Assim, a Eq. (108) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} (-\Delta_{xy} h) \right] = 0. \quad (119)$$

Em termos das variáveis adimensionais, dadas pelas Eqs. (115)-(118), podemos escrever a Eq. (119) na seguinte forma

$$\frac{\partial h^*}{\partial t^*} - \nabla_{x^*y^*} \cdot [\mathcal{M} \nabla_{x^*y^*} (-\Delta_{x^*y^*} h^*)] = 0. \quad (120)$$

Na Eq. (120), \mathcal{M} é dado por

$$\mathcal{M} = \frac{\sigma^*(h^*)^3 U_0^3}{3h_0^4}. \quad (121)$$

2.1.2 Caso 2

Neste segundo caso, consideraremos $\vec{\tau} = 0$, $\pi = 0$, $\phi = \psi$ e σ é igual a uma constante. Desta forma, podemos reescrever a Eq. (108) como

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \left(-\Delta_{xy} h + \frac{\psi}{\sigma} \right) \right] = 0. \quad (122)$$

Considerando-se as variáveis adimensionais dadas pelas Eqs. (115)-(118), a Eq. (122) pode ser escrita na seguinte maneira

$$\frac{\partial h^*}{\partial t^*} - \nabla_{x^*y^*} \cdot [\mathcal{M} \nabla_{x^*y^*} (-\Delta_{x^*y^*} h^* + w)] = 0, \quad (123)$$

onde w é dado por:

$$w = \frac{h_0^3 \psi}{\sigma^* \mu U_0^2}. \quad (124)$$

2.1.3 Caso 3

Consideraremos, neste caso, $\vec{\tau} = 0$, $\pi = 0$, $\phi = \pm \rho g h$ e σ é uma constante, tal que a Eq. (108) pode ser reescrita na forma

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \left(-\Delta_{xy} h \pm \frac{\rho g h}{\sigma} \right) \right] = 0. \quad (125)$$

Em vista das variáveis adimensionais dadas pelas Eqs. (115)-(118), pode-se escrever a Eq. (125) na forma

$$\frac{\partial h^*}{\partial t^*} - \nabla_{x^*y^*} \cdot \left[\mathcal{M} \nabla_{x^*y^*} \left(-\Delta_{x^*y^*} h^* + C \right) \right] = 0, \quad (126)$$

onde C é dado por

$$C = \pm \frac{h_0^3 \rho g h}{\sigma^* \mu U_0^2}. \quad (127)$$

2.1.4 Caso 4

Neste quarto caso, consideraremos $\vec{\tau} = 0$, $\pi = 0$, $\phi = \pm \rho g h + \psi$ e σ é uma constante. Deste modo, a Eq. (108) passa a ser escrita na forma

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{\sigma h^3}{3\mu} \nabla_{xy} \left(-\Delta_{xy} h \pm \frac{\rho g h + \psi}{\sigma} \right) \right] = 0. \quad (128)$$

De acordo com as variáveis adimensionais dadas pelas Eqs. (115)-(118), a Eq. (128) pode então ser reescrita da seguinte maneira

$$\frac{\partial h^*}{\partial t^*} - \nabla_{x^*y^*} \cdot [\mathcal{M} \nabla_{x^*y^*} (-\Delta_{x^*y^*} h^* + C + w)] = 0. \quad (129)$$

2.2 Adimensionalização da Segunda Equação Governante

Nesta seção, consideraremos uma forma adimensional da equação diferencial parcial que governa o fluxo de uma película líquida fluindo em uma superfície inclinada, dada pela Eq. (114), onde serão consideradas as seguintes variáveis adimensionais:

$$\bar{h} = \frac{h}{h_c}, \quad (130)$$

$$\bar{x} = \frac{x}{x_c}, \quad \bar{y} = \frac{y}{x_c}, \quad (131)$$

$$\bar{t} = \frac{t}{t_c}. \quad (132)$$

Aqui, h_c é a espessura da parte plana da película, e temos que x_c e t_c são respectivamente, uma coordenada característica no plano e um tempo característico, os quais são dados por

$$x_c = \left(\frac{\sigma h_c}{\rho g \sin \alpha} \right)^{1/3} \quad \text{e} \quad t_c = \frac{3\mu x_c}{\rho g h_c^2 \sin \alpha}. \quad (133)$$

Substituindo as Eqs. (130)-(132) na Eq. (133) e considerando, para efeito de simplificação, $\bar{h} = u$, $\bar{t} = t$, $\bar{x} = x$ e $\bar{y} = y$, pode-se então reescrever a Eq. (114) da seguinte forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot [u^3 \nabla \nabla^2 u] + D(\alpha) \nabla \cdot [u^3 \nabla u] - \frac{\partial u^3}{\partial x}, \quad (134)$$

onde α é o ângulo de inclinação do plano e $D(\alpha)$ é dado por

$$D(\alpha) = \left(\frac{h_c^2 \rho g \operatorname{sen} \alpha}{\sigma} \right)^{1/3} \cot \alpha \quad (135)$$

2.3 Um Modelo Básico da Equação de Películas Finas

Neste modelo, consideraremos o primeiro caso particular, o qual decorre da forma mostrada na Eq. (120).

Para efeito de simplificação, denominaremos $h^* = u$, $t^* = t$, $\nabla_{x^*y^*} = \nabla$, $\Delta_{x^*y^*} = \nabla^2$ e $\mathcal{M} = \mathcal{M}(u)$.

Feito isso, basicamente o problema teste aqui considerado consiste em encontrar um par de funções $u, p: \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$, onde Ω é um conjunto limitado em \mathbb{R}^2 , tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathcal{M}(u) \nabla p) = 0, \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (136)$$

$$p = -\nabla^2 u, \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (137)$$

$$u(x, y, t = 0) = u_0(x, y), \quad \text{em } \Omega \times (0, T). \quad (138)$$

Aqui, u representa a espessura da película de fluido e p é a pressão. A função $\mathcal{M}(u)$, chamada de mobilidade do fluido, é não negativa e anula-se em $u = 0$.

Como enfatizado antes no Capítulo 1, este modelo matemático simplificado é derivado das Equações de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos incompressíveis, veja Oron et al. (1997), Zhornitskaya e Bertozzi (2000) e Schlichting e Gersten (2016), por exemplo.

Em geral, a mobilidade é uma função não linear, a qual depende das condições de contorno na superfície sólida.

No presente trabalho, de acordo com a Eq. (121), será considerada a função de mobilidade do fluido dada por

$$\mathcal{M}(u) = u^3, \quad (139)$$

o que é uma consequência da condição de não deslizamento na superfície sólida.

Substituindo a Eq. (137) na Eq. (136), costuma-se escrever a chamada equação simplificada de película fina (um caso pouco mais geral da denominada equação de lubrificação) na seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{M}(u) \nabla \nabla^2 u) = 0, \quad (140)$$

a qual é uma equação diferencial parcial parabólica de quarta ordem não linear.

Em vista das Eqs. (136) e (137), notamos que as equações diferenciais deste modelo para o escoamento de películas finas podem também ser tratadas como um sistema de duas equações diferenciais parciais com duas variáveis, dadas pelas funções u e p , que dependem da posição e do tempo.

Para finalizar a descrição matemática deste problema básico, modelado por essas duas equações diferenciais parciais, é necessário descrever o domínio de interesse, o qual está associado com a superfície sólida. Além disso, são também necessárias as especificações das condições iniciais e de contorno relativas a este problema.

Neste trabalho, consideraremos o domínio $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$, onde L_x e L_y são as magnitudes dos lados desse domínio, medidas nas direções dos eixos coordenados x e y , respectivamente.

A condição de contorno empregada na resolução das Eqs. (136) e (137) pode ser escrita da seguinte maneira

$$\nabla u \cdot n = \nabla p \cdot n = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega, \quad (141)$$

em que $\partial\Omega$ é a fronteira de Ω e n é o vetor unitário normal à $\partial\Omega$.

Considerando-se a Eq. (138), neste exemplo, a condição inicial para a altura adimensional u é dada pela função teste

$$u_0(x, y) = \delta + e^{-\sigma(x^2+y^2)}, \quad (142)$$

onde $\delta > 0$ representa a espessura de uma camada ultrafina de uma gotícula de fluido com geometria gaussiana centrada na origem, Witelski e Bowen (2003).

Dada a Eq. (142), para obtermos a condição inicial da função p , é necessário encontrarmos a segunda derivada de $u_0(x, y)$ em relação à x e y .

Calculando-se a derivada de $u_0(x, y)$ em relação à x , obtém-se

$$\frac{\partial u_0}{\partial x} = -2\sigma(xe^{-\sigma(x^2+y^2)}). \quad (143)$$

Derivando a Eq. (143) também em relação à x , podemos escrever a segunda derivada de $u_0(x, y)$ em relação à x ,

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} = -2\sigma e^{-\sigma(x^2+y^2)}(1 - 2\sigma x^2). \quad (144)$$

De forma análoga, obtém-se a segunda derivada de $u_0(x, y)$ em relação à y :

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial y^2} = -2\sigma e^{-\sigma(x^2+y^2)}(1 - 2\sigma y^2). \quad (145)$$

Assim, somando-se as Eqs. (144) e (145) e multiplicando por -1 , obtemos a condição inicial da função p para este exemplo, dada por

$$p_0(x, y) = 4\sigma e^{-\sigma(x^2+y^2)}[1 - \sigma(x^2 + y^2)]. \quad (146)$$

2.4 Formas Generalizadas da Equação de Películas Finas

Em muitas aplicações físicas, processos de evolução de películas finas de fluidos viscosos não são apenas influenciados pela tensão superficial existente entre o sólido e o líquido, sua principal força motriz. Como observado na obtenção das equações consideradas na Tabela 1, essas evoluções ocorrem também devido a diferentes efeitos físicos, como gravitacionais e forças intermoleculares, por exemplo. A incorporação de tais efeitos conduz a modelos matemáticos mais gerais, os quais são usados na predição da espessura da película u e no cálculo da chamada pressão generalizada \mathcal{P} .

Em tais condições, o chamado problema generalizado consiste em encontrar um par de funções $u, \mathcal{P}: \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$, onde Ω é um conjunto limitado em \mathbb{R}^2 , tal que

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathcal{M}(u) \nabla \mathcal{P}) = 0, \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (147)$$

$$\mathcal{P} = -\nabla^2 u + w(u), \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (148)$$

$$u(x, y, t = 0) = u_0(x, y), \quad \text{em } \Omega \times (0, T). \quad (149)$$

Neste modelo, a pressão generalizada dada pela Eq. (148), é a soma do termo de pressão com a função $w(u)$, em geral a derivada de um potencial externo usado para descrever diferentes efeitos físicos (não lineares) adicionais. Em muitos casos, esta função é singular em $u = 0$.

A função de mobilidade do fluido $\mathcal{M}(u)$ é dada pela Eq. (139) e a condição de contorno para este problema generalizado, pode ser escrita da seguinte maneira

$$\nabla u \cdot n = \nabla \mathcal{P} \cdot n = 0, \quad \text{sobre } \partial\Omega. \quad (150)$$

Em relação à Tabela 1, no que segue consideraremos os casos 2, 3 e 4. Estes casos particulares descrevem a ação das chamadas forças de Van der Waals (forças intermoleculares agindo no fluido) e efeitos de gravidade.

Novamente, para efeito de simplificação, estamos considerando $h^* = u$, $t^* = t$, $\nabla_{x^*y^*} = \nabla$, $\Delta_{x^*y^*} = \nabla^2$, $\mathcal{M} = \mathcal{M}(u)$, $w = w(u)$ e $C = -C_1 u$.

2.4.1 Forças Intermoleculares ou Forças de Van der Waals

Como descrito por Witelski e Bowen (2003), um simples modelo para as forças intermoleculares entre a superfície sólida e a película de fluido pode ser escrito pela função $w(u)$, dada por

$$w(u) = \left(\frac{1}{u^3} - \frac{\varepsilon}{u^4} \right). \quad (151)$$

Neste exemplo, usaremos as seguintes condições iniciais:

$$u_0(x, y) = 0,5 + 0,0025 \operatorname{sen}(6(x - 0,65)^2) + 0,0025 \operatorname{sen}(6(y - 0,65)^2), \quad (152)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_0(x, y) = & 0,03[12(x - 0,65)^2 \operatorname{sen}(6(x - 0,65)^2) - \cos(6(x - 0,65)^2)] \\ & + 0,03[12(y - 0,65)^2 \operatorname{sen}(6(y - 0,65)^2) - \cos(6(y - 0,65)^2)] \\ & + \left(\frac{1}{(u_0(x, y))^3} - \frac{\varepsilon}{(u_0(x, y))^4} \right). \end{aligned} \quad (153)$$

Tais condições descrevem uma película fina de altura 0,5, ligeiramente perturbada por senoides.

2.4.2 Gravidade

Para introduzir efeitos de gravidade na evolução de películas finas escoando abaixo de um plano horizontal, a pressão generalizada \mathcal{P} (Eq. 148), pode ser escrita na seguinte forma

$$\mathcal{P} = -(\nabla^2 u + C_1 u), \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (154)$$

onde a constante positiva adimensional C_1 refere-se à gravidade.

Neste exemplo, as condições iniciais são dadas por

$$u_0(x, y) = (1 + 0,005 \operatorname{sen}(50(x - 0,4)^2))(1 + 0,005 \operatorname{sen}(50(y - 0,4)^2)) + R(x, y), \quad (155)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_0(x, y) = & -1 - 0,005 \operatorname{sen}(50(x - 0,4)^2)(0,5(y - 0,4) \cos(50(y - 0,4)^2)) \\ & - 1 - 0,005 \operatorname{sen}(50(y - 0,4)^2)(0,5(x - 0,4) \cos(50(x - 0,4)^2)) - \\ & C_1 u_0(x, y), \end{aligned} \quad (156)$$

onde $R(x, y)$ é um número aleatório no intervalo $[-1, 1]$, o qual introduz uma perturbação estocástica na condição inicial.

2.4.3 Gravidade com Forças Intermoleculares

Na evolução de películas finas, se considerarmos forças intermoleculares (forças de Van der Waals) dadas pela função $w(u)$ (Eq. 151), agindo juntamente com a gravidade, a pressão generalizada \mathcal{P} pode ser escrita na seguinte forma

$$\mathcal{P} = -(\nabla^2 u + C_1 u) + w(u) \quad \text{em } \Omega \times (0, T). \quad (157)$$

Para este exemplo, a condição inicial para a função u é a mesma descrita na Eq. (155). Em vista da Eq. (156), podemos obter a condição inicial da função \mathcal{P} :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_0(x, y) = & -1 - 0,005 \text{sen}(50(x - 0,4)^2)(0,5(y - 0,4) \cos(50(y - 0,4)^2)) \\ & -1 - 0,005 \text{sen}(50(y - 0,4)^2)(0,5(x - 0,4) \cos(50(x - 0,4)^2)) \\ & -C_1 u_0(x, y) + \left(\frac{1}{(u_0(x, y))^3} - \frac{\varepsilon}{(u_0(x, y))^4} \right). \end{aligned} \quad (158)$$

2.5 Modelo Hiperbólico da Equação de Películas Finas

Nesta seção, consideraremos um modelo para a dinâmica de uma fina camada de líquido em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade.

Em vista da Eq. (134), nós dividimos essa equação de quarta ordem em um sistema de equações de segunda ordem, de tal forma que o problema agora consiste em encontrar um par de funções $u, p: \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$, onde Ω é um conjunto limitado em \mathbb{R}^2 :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = \nabla \cdot (\mathcal{M}(u) \nabla p), \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (159)$$

$$p = D(\alpha)u - \nabla^2 u, \quad \text{em } \Omega \times (0, T), \quad (160)$$

$$u(x, y, t = 0) = u_0(x, y), \quad \text{em } \Omega \times (0, T). \quad (161)$$

Aqui, $f(u) = u^3$ e p é uma nova pressão generalizada, onde a constante positiva $D(\alpha)$ mede o tamanho do componente normal da gravidade.

A função de mobilidade do fluido é a mesma dada na seção 2.3 e as condições de contorno de Neumann e Dirichlet empregadas na resolução deste problema, são dadas pelas seguintes equações:

$$u(0, y, t) = u_\infty, \quad u(L_x, y, t) = b, \quad (162)$$

$$u(x, 0, t) = u(x, L_y, t), \quad (163)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x}(0, y, t) = \frac{\partial p}{\partial x}(L_x, y, t) = 0, \quad (164)$$

$$p(x, 0, t) = p(x, L_y, t), \quad (165)$$

onde u_∞ é uma altura constante e b é uma espessura da película, Li et al. (2014).

Com o objetivo de estudar as instabilidades que ocorrem quando um fluxo de película líquida é movido pela gravidade em uma superfície inclinada, e capturar o fenômeno físico de formação de *fingers*, ou seja, a formação de dedos na película, foram feitas simulações numéricas considerando duas perturbações iniciais.

Considerando-se a Eq. (161), para todos os casos da primeira simulação envolvendo o modelo hiperbólico, utilizaremos as seguintes condições iniciais:

$$u_0(x, y) = 0,5[u_\infty + b - (u_\infty - b) \tanh(3(x - 10) + R(x, y))], \quad (166)$$

$$p_0(x, y) = Du_0(x, y) - 9(u_\infty - b)[1 - \tanh^2(3(x - 10) + R(x, y))] \times \tanh(3(x - 10) + R(x, y)), \quad (167)$$

onde, como foi visto anteriormente, $R(x, y)$ é um número aleatório no intervalo $[-1, 1]$.

Para os casos considerados na segunda simulação, as condições iniciais são dadas por

$$u_0(x, y) = 0,5 \left[u_\infty + b - (u_\infty - b) \tanh \left(3(x - 5) + \cos \left(\frac{\pi y}{25} \right) \right) \right], \quad (168)$$

$$p_0(x, y) = Du_0(x, y) - (u_\infty - b) \left(1 - \tanh^2 \left(3(x - 5) + \cos \left(\frac{\pi y}{25} \right) \right) \right) \times \left[9 \tanh \left(3(x - 5) + \cos \left(\frac{\pi y}{25} \right) \right) + \frac{0,02\pi^2}{25} \left[\cos \left(\frac{\pi y}{25} \right) + 2 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\pi y}{25} \right) \tanh \left(3(x - 5) + \cos \left(\frac{\pi y}{25} \right) \right) \right] \right]. \quad (169)$$

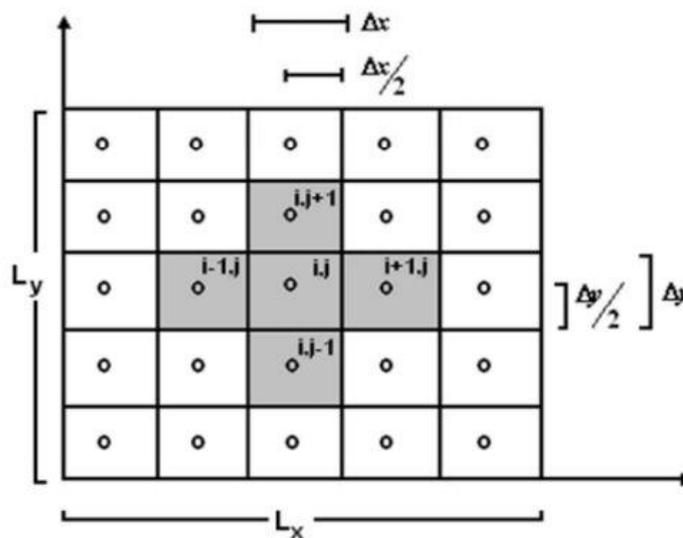
Tais condições descrevem uma perturbação na linha de contato provocada pela função senoidal.

3 DISCRETIZAÇÕES DAS EQUAÇÕES DOS MODELOS

3.1 Malha numérica

Como pode ser visto na Figura 4, o domínio espacial $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ será discretizado utilizando uma malha de blocos centrados, denotada por $\widehat{\Omega} = \{(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2; i = 1, \dots, N_x \text{ e } j = 1, \dots, N_y\}$, onde os inteiros N_x e N_y indicam as quantidades de blocos na grade espacial, nas respectivas direções x e y . Dessa forma, dados N_x e N_y , tem-se um total de $N_x \times N_y$ blocos de discretização.

Figura 4 – A malha de blocos centrados



Fonte: HENDERSON; SAMPAIO; PENA, 2011.

A malha de discretização é considerada uniforme. Logo, fazendo-se $\Delta x = L_x/N_x$, pode-se escrever $x_i = (i - 1/2)\Delta x$, para todo $i = 1, \dots, N_x$. De forma semelhante, tem-se $y_j = (j - 1/2)\Delta y$, para todo $j = 1, \dots, N_y$, com $\Delta y = L_y/N_y$.

Cada ponto $(x_i, y_i) \in \widehat{\Omega}$ representará um nó da malha $\widehat{\Omega}$, onde os valores das funções incógnitas do problema em questão serão efetivamente calculados.

O conjunto $\widehat{\Omega}_{ij} = [x_{i+1/2}, x_{i-1/2}] \times [y_{j+1/2}, y_{j-1/2}]$ é chamado o bloco ij (ou célula ij) da malha $\widehat{\Omega}$, cujo centro (ou nó) é representado pelo ponto (x_i, y_i) . Assim, observe que $x_{i+1/2} = x_i + \Delta x/2$, $y_{j-1/2} = y_j + \Delta y/2$ etc.

O domínio temporal será representado pelo intervalo fechado $[t_0, t_f]$, onde t_0 denotará o instante inicial, considerado como sendo o tempo zero e t_f o instante final. Esse intervalo será particionado na forma $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_{n_t} = t_f$, dando origem a uma grade temporal. Aqui, n_t representará um dado número inteiro que define a quantidade de níveis de tempos utilizados. Assim, pode-se escrever $[t_0, t_f] = U_{n=1}^{n_t} I_n$, onde $I_n = [t_{n-1}, t_n]$, para todo $n = 1, \dots, n_t$. Cada subintervalo de tempo $[t_{n-1}, t_n]$ terá comprimento uniforme, denotado por $\Delta t = t_n - t_{n-1}$.

Neste trabalho, o valor $f(x_i, y_i, t_n)$, de uma dada função f em um ponto (x_i, y_i) da malha $\widehat{\Omega}$, no nível de tempo t_n , será representado pela notação clássica $f_{i,j}^n$.

3.2 Discretização do Modelo Básico (Caso 1)

Nesta seção, primeiramente consideraremos a equação diferencial parcial parabólica de segunda ordem (Eq. 136) discretizada implicitamente no tempo, com relação à p e u ,

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} = 0. \quad (170)$$

Usando-se diferenças finitas centradas, as derivadas parciais indicadas na Eq. (170) são discretizadas na forma

$$\begin{aligned} & \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] \\ & - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] = 0. \end{aligned} \quad (171)$$

Em vista das condições de contorno indicadas na Eq. (141), notam-se as seguintes condições nas faces dos blocos de fronteira, as quais ocorrem para todos os níveis de tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2},j} = 0, \quad \text{se } i = n_x, \\ \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2},j} = 0, \quad \text{se } i = 1, \\ \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} = 0, \quad \text{se } j = n_y, \\ \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} = 0, \quad \text{se } j = 1. \end{array} \right. \quad (172)$$

Aproximando-se novamente as derivadas parciais restantes na Eq. (171) por diferenças centradas, obtemos a forma totalmente discretizada da Eq. (136):

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{p_{i,j+1}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] = 0. \end{aligned} \quad (173)$$

Na Eq. (173), os valores de $\mathcal{M}(u^{n+1})$ nos pontos localizados nas faces do bloco $\widehat{\Omega}_{ij}$ serão aproximados por médias harmônicas dos respectivos valores definidos nos blocos vizinhos. Então, por exemplo, temos que

$$[\mathcal{M}(u^{n+1})]_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{2[\mathcal{M}(u^{n+1})]_{i,j}[\mathcal{M}(u^{n+1})]_{i+1,j}}{[\mathcal{M}(u^{n+1})]_{i,j} + [\mathcal{M}(u^{n+1})]_{i+1,j}}. \quad (174)$$

Agora, consideraremos a Eq. (137), uma equação diferencial parcial de segunda ordem dada por

$$p_{i,j}^{n+1} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} = 0. \quad (175)$$

Para efetuar a discretização espacial, as derivadas parciais indicadas na Eq. (175) são aproximadas por diferenças finitas centradas,

$$p_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] = 0. \quad (176)$$

Novamente, as condições de contorno indicadas na Eq. (141) nos permitem considerar as seguintes condições nas faces dos blocos de fronteira:

$$\begin{cases} \left[\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2},j} = 0, & \text{se } i = n_x, \\ \left[\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2},j} = 0, & \text{se } i = 1, \\ \left[\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} = 0, & \text{se } j = n_y, \\ \left[\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} = 0, & \text{se } j = 1. \end{cases} \quad (177)$$

Em seguida, usando-se novamente diferenças finitas centradas, podemos aproximar as derivadas parciais da Eq. (176), obtendo

$$p_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] = 0. \quad (178)$$

3.3 Discretização das Formas Generalizadas

3.3.1 Caso 2 – Forças Intermoleculares

Como mencionado anteriormente, no Capítulo 2, o termo \mathcal{P} é a pressão generalizada, a qual descreve diferentes efeitos físicos. Para este problema generalizado, consideraremos a Eq. (147) discretizada implicitamente no tempo, com relação à \mathcal{P} e u ,

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} = 0. \quad (179)$$

Para efetuar a discretização espacial, as derivadas parciais indicadas na Eq. (179) são aproximadas por diferenças finitas centradas, dadas por

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] \\ - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] = 0. \end{aligned} \quad (180)$$

As condições de contorno indicadas na Eq. (150) nos permitem considerar as seguintes condições nas faces dos blocos de fronteira, as quais ocorrem para todos os níveis de tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2},j} = 0, \quad \text{se } i = n_x, \\ \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2},j} = 0, \quad \text{se } i = 1, \\ \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j+\frac{1}{2}} = 0, \quad \text{se } j = n_y, \\ \left[\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial \mathcal{P}^{n+1}}{\partial y} \right]_{i,j-\frac{1}{2}} = 0, \quad \text{se } j = 1. \end{array} \right. \quad (181)$$

Em seguida, aproximando-se novamente as derivadas parciais restantes na Eq. (180) por diferenças centradas, obtemos então a forma totalmente discretizada da Eq. (147):

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i+1,j}^{n+1} - \mathcal{P}_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} - \mathcal{P}_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i,j+1}^{n+1} - \mathcal{P}_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} - \mathcal{P}_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] = 0. \end{aligned} \quad (182)$$

Considerando-se a Eq. (148) e o modelo que descreve as forças intermoleculares, temos que

$$\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} - w_{i,j}(u^{n+1}) = 0. \quad (183)$$

No que segue, as derivadas parciais indicadas na Eq. (183) são aproximadas por diferenças finitas centradas, dadas por

$$\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] - w_{i,j}(u^{n+1}) = 0. \quad (184)$$

onde o termo $w_{i,j}(u^{n+1})$ é dado pela seguinte equação

$$w_{i,j}(u^{n+1}) = \left(\frac{1}{(u_{i,j}^{n+1})^3} - \frac{\varepsilon}{(u_{i,j}^{n+1})^4} \right). \quad (185)$$

Em vista das condições indicadas na Eq. (177) e aproximando por diferenças centradas as derivadas parciais restantes na Eq. (184), obtém-se

$$\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] + \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] - w_{i,j}(u^{n+1}) = 0. \quad (186)$$

3.3.2 Caso 3 – Gravidade

Para efeitos de gravidade, a pressão generalizada \mathcal{P} passa a ser tratada como na Eq. (154), a qual pode ser escrita na seguinte forma

$$\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} + C_1 u_{i,j}^{n+1} = 0. \quad (187)$$

Assim, baseando-se na Eq. (187), podemos escrever a forma totalmente discretizada da Eq. (154), dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ + \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] + C_1 u_{i,j}^{n+1} = 0. \end{aligned} \quad (188)$$

3.3.3 Caso 4 – Gravidade com Forças Intermoleculares

Para o caso de forças intermoleculares agindo juntamente com a gravidade, podemos escrever a pressão generalizada \mathcal{P} dada pela Eq. (157), da seguinte maneira

$$\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} + C_1 u_{i,j}^{n+1} - w_{i,j}(u^{n+1}) = 0. \quad (189)$$

onde o termo $w_{i,j}(u^{n+1})$ é dado pela Eq. (185).

Em seguida, obtemos a forma totalmente discretizada da Eq. (157):

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ + \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] + C_1 u_{i,j}^{n+1} - w_{i,j}(u^{n+1}) = 0. \end{aligned} \quad (190)$$

3.4 Discretização do Modelo Hiperbólico

Primeiramente, consideraremos a Eq. (159) discretizada implicitamente no tempo, com relação à p e u ,

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} - \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\mathcal{M}(u^{n+1}) \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} \\ + \left[\frac{\partial f(u^{n+1})}{\partial x} \right]_{i,j} = 0. \end{aligned} \quad (191)$$

Em seguida, usando-se diferenças finitas centradas, as derivadas parciais indicadas na Eq. (191) são discretizadas na seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] \\ - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \left(\frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] \\ + \frac{f_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} = 0. \end{aligned} \quad (192)$$

Aproximando-se novamente as derivadas parciais restantes na Eq. (192) por diferenças centradas, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{p_{i,j+1}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] \\ + \frac{f_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} = 0. \end{aligned} \quad (193)$$

Na Eq. (193), os valores de $f_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}$ e $f_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}$ serão calculados utilizando o método de Rusanov, onde para todo u entre $u_{i,j}^{n+1}$ e $u_{i+1,j}^{n+1}$, podemos definir um fluxo numérico desta equação como (veja, Trangenstein 2007, por exemplo):

$$f_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[f(u_{i,j}^{n+1}) + f(u_{i+1,j}^{n+1}) - \lambda_{i+\frac{1}{2},j} (u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}) \right]. \quad (194)$$

O parâmetro $\lambda_{i+\frac{1}{2},j}$ que aparece na Eq. (194), é um valor médio da velocidade característica encontrada no problema, dado por

$$\lambda_{i+\frac{1}{2},j} = \max\{f'(u_{i,j}^{n+1}), f'(u_{i+1,j}^{n+1})\}. \quad (195)$$

De forma análoga, temos que para todo u entre $u_{i,j}^{n+1}$ e $u_{i-1,j}^{n+1}$, obtém-se

$$f_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[f(u_{i,j}^{n+1}) + f(u_{i-1,j}^{n+1}) - \lambda_{i-\frac{1}{2},j} (u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}) \right], \quad (196)$$

onde o valor de $\lambda_{i-\frac{1}{2},j}$ é dado por

$$\lambda_{i-\frac{1}{2},j} = \max\{f'(u_{i,j}^{n+1}), f'(u_{i-1,j}^{n+1})\}. \quad (197)$$

Assim, substituindo-se as Eqs. (194) e (196) na Eq. (193), obtemos a forma totalmente discretizada da Eq. (159):

$$\begin{aligned} & \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x} \left[\mathcal{M}_{i+\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i+1,j}^{n+1} - \mathcal{P}_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \mathcal{M}_{i-\frac{1}{2},j}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} - \mathcal{P}_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ & - \frac{1}{\Delta y} \left[\mathcal{M}_{i,j+\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i,j+1}^{n+1} - \mathcal{P}_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \mathcal{M}_{i,j-\frac{1}{2}}(u^{n+1}) \frac{\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} - \mathcal{P}_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] \\ & + \frac{1}{2\Delta x} \left[f(u_{i+1,j}^{n+1}) - \lambda_{i+\frac{1}{2},j} (u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}) - f(u_{i-1,j}^{n+1}) + \lambda_{i-\frac{1}{2},j} (u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}) \right] \\ & = 0. \end{aligned} \quad (198)$$

No que segue, a pressão generalizada \mathcal{P} passa a ser tratada como na Eq. (160), a qual pode ser escrita na forma

$$\mathcal{P}_{i,j}^{n+1} - D u_{i,j}^{n+1} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} \right) \right]_{i,j} + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \right) \right]_{i,j} = 0. \quad (199)$$

Aproximando por diferenças centradas as derivadas parciais da Eq. (199), podemos escrever a forma totalmente discretizada da Eq. (160), dada por

$$\begin{aligned} & \mathcal{P}_{i,j}^{n+1} - D u_{i,j}^{n+1} + \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right] \\ & + \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \right] = 0. \end{aligned} \quad (200)$$

4 O MÉTODO NUMÉRICO PARA AS EQUAÇÕES NÃO LINEARES

4.1 Aspectos Gerais

Considerando, por exemplo, as discretizações das Eqs. (136) e (137) ao longo de todos os nós da grade mostrada na Figura 4, obtêm-se dois sistemas não lineares cada um com $N_x \times N_y$ equações, cujas $N_x \times N_y$ variáveis de cada sistema são, respectivamente, os valores da espessura da película de fluido e da pressão, em cada nó da grade de blocos centrados, usada na discretização espacial.

Em outras palavras, depois de discretizadas, as equações diferenciais de interesse neste trabalho são transformadas em sistemas não lineares com $N = 2 \times N_x \times N_y$ equações algébricas (ou transcendentais), possuindo $N = 2 \times N_x \times N_y$ variáveis.

Então, durante a evolução temporal, para obter-se os campos de espessura da película de fluido e a pressão (ou pressão generalizada), a resolução numérica de um sistema não linear é exigida a cada passo de tempo Δt que separa o nível de tempo n do nível futuro $n + 1$.

As sucessivas resoluções numéricas desse sistema não linear, resultante do esquema temporal implícito utilizado na discretização da chamada equação de película fina, gastam grande parte do tempo de CPU (*Central Processing Unit*) destinado à execução dos procedimentos computacionais. Com a finalidade de se obter um simulador que seja eficiente para o escoamento de películas finas em superfícies sólidas, onde a espessura da película de fluido e a pressão são tratadas implicitamente no tempo, se faz necessário à aplicação de um método numérico que consuma pouco tempo de CPU. Percebe-se também que tempos de CPU relativamente pequenos não são os únicos aspectos esperados. De fato, além disso, deseja-se que o método numérico usado seja suficientemente robusto, de forma que o seu processo iterativo não divirja, ou convirja para um ponto inapropriado.

Neste trabalho, utilizaremos um método desenhado para ser robusto e eficiente, o qual é um algoritmo desenvolvido por La Cruz, Martínez e Raydan (2006) para a resolução de sistemas não lineares. Tal método, denominado de DFSANE (*Derivative-Free Spectral Algorithm for Nonlinear Equations*), não emprega resoluções de sistemas lineares, sendo um

método de busca direta que essencialmente utiliza, a cada iteração, o valor da aplicação que define o sistema não linear no ponto corrente.

A formulação original do DFSANE é equipada com uma busca linear inexata que satisfaz uma condição de não monotonicidade baseada na conhecida condição de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986), a fim de proporcionar convergência global. Como mostrado por Cheng e Li (2008), uma outra condição de não monotonicidade pode também ser incorporada à estrutura do método DFSANE.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, observamos que nenhuma das condições de não monotonicidade desenvolvidas para o DFSANE em sua forma original, são eficientes para tornar esse algoritmo capaz de resolver o sistema mal condicionado considerado aqui.

Observamos também que para superar essas dificuldades impostas pela natureza desse sistema, se faz necessário à utilização de uma busca linear inexata gerada a partir de uma condição altamente não monótona. Para contemplar essa exigência, modificamos nesta tese o algoritmo DFSANE. Isso foi feito adaptando a condição proposta por Cheng e Li (2008), a fim de torná-la altamente não monótona.

4.2 O Método DFSANE e suas Modificações

Dada uma função suficientemente diferenciável $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, existem vários métodos iterativos desenvolvidos para resolver o problema de otimização

$$\begin{cases} \text{Min } f(\mathbf{x}) \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (201)$$

os quais buscam determinar $\mathbf{x} \in \mathbb{R}$, tal que

$$\nabla f(\mathbf{x}) = 0, \quad (202)$$

onde ∇f denota o vetor Gradiente de f .

Dentre os métodos utilizados para resolver o problema mostrado na Eq. (201) há uma classe de métodos iterativos que se valem de baixa estocagem, sendo, dessa maneira, convenientes para problemas de grande porte. Nessa classe está o chamado método do

gradiente (“*steepest descent*”), o qual busca por \mathbf{x} ao longo da direção definida pelo vetor gradiente de f , veja Dennis e Schnabel (1983), por exemplo.

Mais especificamente, dado \mathbf{x}_0 , um método do tipo gradiente gera uma sequência da forma $\{\mathbf{x}_k\}$, tal que

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \lambda_k \nabla f(\mathbf{x}_k), \quad (203)$$

onde λ_k é o tamanho do passo tomado na iteração k .

Como verificado na solução de muitos problemas práticos, métodos desse tipo em geral costumam convergir lentamente.

Com o objetivo de acelerar a convergência da sequência descrita na Eq. (203), Barzilai e Borwein (1988) propuseram um método do tipo gradiente definido por

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{1}{\alpha_k} \nabla f(\mathbf{x}_k), \quad (204)$$

onde, para todo $k \geq 1$, o escalar α_k é o argumento que minimiza a função $\|\alpha \mathbf{s}_{k-1} - \mathbf{y}_{k-1}\|^2$, com $\mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ e $\mathbf{y}_{k-1} = \nabla f(\mathbf{x}_k) - \nabla f(\mathbf{x}_{k-1})$, o qual é dado por

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1}}{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{s}_{k-1}}. \quad (205)$$

O parâmetro definido na Eq. (205) é denominado de coeficiente espectral. Para elucidar tal denominação, considere, por exemplo, o caso particular onde f é uma forma quadrática dada por $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$, sendo \mathbf{A} uma matriz quadrada de ordem N , $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$ e $c \in \mathbb{R}$. Neste caso, tem-se que $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}$. Assim, o coeficiente espectral pode ser escrito como $\alpha_k = \frac{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{A} \mathbf{s}_{k-1}}{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{s}_{k-1}}$. Tal quociente é o chamado de quociente de Rayleigh. Se a matriz \mathbf{A} é simétrica e se \mathbf{s}_{k-1} é um autovetor de \mathbf{A} , então α_k , assim definido, é um autovalor de \mathbf{A} correspondente ao autovetor \mathbf{s}_{k-1} , justificando assim a denominação referida acima, Raydan (1997).

O método do Gradiente Espectral pode ser escrito na forma padrão mostrada na Eq. (203). Para isso, considere

$$\lambda_k = \frac{1}{\alpha_k} = \frac{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{s}_{k-1}}{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1}}. \quad (206)$$

Como enfatizado por Barzilai e Borwein (1988), o método do Gradiente Espectral não gera uma sequência monótona, no sentido de que não ocorre $f(\mathbf{x}_{k-1}) \leq f(\mathbf{x}_k)$, para todo k .

Há uma clara relação entre o problema de minimização mostrado na Eq. (201) e o problema de resolver um sistema não linear, resumindo na forma:

Determinar $\mathbf{x} \in \mathbb{R}$, tal que

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0, \quad (207)$$

onde $\mathbf{F}: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ é uma aplicação não linear suficientemente diferenciável.

De fato, considerando $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2$, pode-se mostrar que $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{F}'(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x})$. Assim, se $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$ (a matriz Jacobiana da aplicação \mathbf{F}) é invertível, então $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$ se, e somente se, $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0$.

O método DFSANE, proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), é um método para a resolução de sistemas não lineares $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0$, o qual procura resolver o problema de mínimos quadrados não lineares

$$\begin{cases} \text{Min } f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 \\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (208)$$

usando uma busca linear que emprega o coeficiente espectral sugerido por Barzilai e Borwein (1988).

Para resolver o problema (208), La Cruz e Raydan (2003) observaram que em vez de usar a direção do gradiente de $f = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2$, dado por $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{F}'(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x})$, a qual exige o cálculo da Jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$, pode-se definir um método espectral fazendo-se simplesmente:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k \pm \frac{1}{\alpha_k} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k), \quad (209)$$

onde agora

$$\frac{1}{\alpha_k} = \frac{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{s}_{k-1}}{\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1}} \quad (210)$$

é calculado utilizando $\mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ e $\mathbf{y}_{k-1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k-1})$.

Na Eq. (209), a opção dos sinais \pm vem do fato de que, em geral, o vetor $\mathbf{d}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ pode não ser necessariamente uma direção de descida de $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$, a partir do ponto \mathbf{x}_k , isto é, em geral $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k = -2\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k) \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ não é necessariamente um número negativo. Assim, quando isso ocorrer, escolhe-se $\mathbf{d}_k = +\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ como sendo a tal direção de descida a ser utilizada.

Observe que o uso de $\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ na Eq. (209), em vez de $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{F}'(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x})$, equivale à seguinte aproximação

$$\mathbf{F}'(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{2} \mathbf{I} \quad (211)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem N .

Como resultado da utilização do coeficiente espectral, a sequência gerada pelo método mostrado na Eq. (209) também não é monótona. Assim, sua convergência pode depender da localização do dado inicial.

Para tratar essa questão de convergência, as iterações do algoritmo DFSANE (*Derivative-Free Spectral Algorithm for Nonlinear Equations*) proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), são da forma

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \left(\pm \frac{1}{\alpha_k} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) \right), \quad (212)$$

onde, para todo $k \geq 1$, $(1/\alpha_k)$ é definido pela Eq. (210) e $(1/\alpha_0) = 1$.

Na Eq. (212), $\lambda_k > 0$ é o tamanho do passo tomado na direção de busca $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, o qual é determinado usando-se uma busca linear inexata. Desse modo, procura-se agregar ao método DFSANE boas propriedades de convergência global provenientes de escolhas criteriosas para λ_k .

A busca linear inexata originalmente empregada no algoritmo DFSANE foi desenvolvida para satisfazer uma condição baseada na clássica condição de não monotonicidade de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986). Mais precisamente, no algoritmo apresentado por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), o tamanho do passo λ_k só é aceito se satisfazer a seguinte condição:

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq \max_{0 \leq j \leq M-1} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \epsilon_k - \gamma \lambda_k^2 f(\mathbf{x}_k), \quad (213)$$

onde $\{\epsilon_k\}$ é uma sequência (de números reais não negativos) convergente, M é um inteiro não negativo, $0 < \gamma < 1$ e $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$.

A condição mostrada na Eq. (213) é de não monotonicidade porque ela permite a geração de uma sequência $f(\mathbf{x}_k)$, onde não ocorre, necessariamente, a relação de decrescimento $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$, para todo k . Desse modo, em uma vizinhança do dado inicial \mathbf{x}_0 , o algoritmo DFSANE pode aceitar pontos da forma $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$, onde a função objetivo $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2$ cresce de valor.

Ao contrário da condição de não monotonicidade clássica de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986), dada por

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq \max_{0 \leq j \leq M-1} f(\mathbf{x}_{k-j}) + \gamma \lambda_k \nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k, \quad (214)$$

a qual foi usada em uma proposta inicial formulada por La Cruz e Raydan (2003) que originou um método semelhante ao DFSANE, chamado simplesmente de SANE, deve-se notar que a condição definida na Eq. (213) não depende do gradiente $\nabla f(\mathbf{x}) = 2\mathbf{F}'(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x})$ que aparece na Eq. (214). Assim, o DFSANE é um método espectral totalmente livre do cálculo de derivadas, as quais geralmente são empregadas na construção da matriz Jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$.

O método DFSANE, inicia com $\lambda_k = 1$. Caso esse tamanho de passo unitário não satisfaça a condição (213), o DFSANE usa uma técnica de “backtracking” semelhante àquela descrita na Kelley (1995), a qual emprega um polinômio quadrático obtido por uma interpolação quadrática em dois pontos.

Para isso, considerando $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ e seguindo a estratégia mostrada no livro de Kelley (1995), La Cruz, Martínez e Raydan (2006) construíram o polinômio interpolador $p(\lambda)$, exigindo que $p(0) = f(\mathbf{x}_k) \equiv \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$, $p'(0) = -2f(\mathbf{x}_k) \equiv -2\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$ e $p(\lambda_c) = f(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) \equiv \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + \lambda_c \mathbf{d}_k\|^2$, onde λ_c denota o tamanho do passo corrente que foi rejeitado, por não satisfazer a condição de não monotonicidade mostrada na Eq. (213).

Portanto, para $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, obtém-se o seguinte polinômio quadrático:

$$p(\lambda) = f(\mathbf{x}_k) - 2f(\mathbf{x}_k)\lambda + \left[\frac{f(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) - f(\mathbf{x}_k) + 2f(\mathbf{x}_k)\lambda_c}{\lambda_c^2} \right] \lambda^2. \quad (215)$$

Devido à escolha $p'(0) = -2\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^2$, a derivada de $p(\lambda)$ no ponto $\lambda = 0$ é sempre negativa. Tal escolha é coerente, pois no DFSANE o sinal de $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ é selecionado para obrigar o vetor \mathbf{d}_k ser sempre uma direção de descida de f em \mathbf{x}_k , ou seja, sempre se tem $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{d}_k < 0$.

O ponto crítico do polinômio mostrado na Eq. (215) é determinado analiticamente por

$$\lambda_t = \frac{\lambda_c^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) + (2\lambda_c - 1)f(\mathbf{x}_k)}, \quad (216)$$

o qual é um minimizador de $p(\lambda)$, se $f(\mathbf{x}_k + \lambda_c \mathbf{d}_k) \geq f(\mathbf{x}_k)$.

Considerando-se o mesmo procedimento de salvaguarda usado por Kelley (1995), no DFSANE o tamanho do passo futuro é determinado por

$$\lambda_{\pm} = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_c, & \text{se } \lambda_t < \sigma_0 \lambda_c \\ \sigma_1 \lambda_c, & \text{se } \lambda_t < \sigma_1 \lambda_c \\ \lambda_t, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (217)$$

onde $0 < \sigma_0 < \sigma_1$ são escalares prefixados. Observe que a condição de salvaguarda mostrada na Eq. (217) procura evitar que o tamanho do passo se torne muito grande ou muito pequeno.

Após esse cálculo, para prosseguir com a determinação do tamanho do passo de busca na iteração k , verifica-se novamente se o candidato λ_{\pm} satisfaz ou não a condição mostrada na Eq. (213). Em caso afirmativo, aceita-se o tamanho de passo como sendo $\lambda_k = \lambda_{\pm}$. Caso contrário, faz-se a atualização $\lambda_c = \lambda_{\pm}$ e repete-se novamente esse processo de busca linear inexata ao longo de $\mathbf{d}_k = \pm(1/\alpha_k)\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ até que a condição (213) seja finalmente satisfeita.

Influenciada pela condição de não monotonicidade de Grippo, Lampariello e Lucidi (1986), observa-se que a condição de não monotonicidade livre de derivadas mostrada na Eq. (213) depende da escolha do parâmetro $M > 0$, cujo valor pode estar fortemente associado às características do sistema não linear considerado e da dimensão desse tal sistema.

Para contornar esse problema, mais recentemente, Cheng e Li (2009) modificaram o método DFSANE. Para isso, esses autores trocaram a condição (213) por outra condição de não monotonicidade que não depende do parâmetro M . Essa condição, que também é livre de derivadas, tem se mostrado mais adequada para a busca linear não monótona, associada com a etapa de globalização do algoritmo DFSANE. Tal condição é dada por:

$$f(\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \leq C_k + \epsilon_k - \gamma \lambda_k^2 f(\mathbf{x}_k), \quad (218)$$

onde $C_0 = f(\mathbf{x}_0)$ e C_k é atualizado pelas seguintes regras:

$$Q_{k+1} = \beta_k Q_k + 1, \quad (219)$$

$$C_{k+1} = \frac{\beta_k Q_k (C_k + \epsilon_k) + f(\mathbf{x}_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad (220)$$

com $Q_0 = 1$ e $\beta_k \in [0,1]$, para todo k .

Durante o desenvolvimento deste trabalho, notamos que a condição de não monotonicidade de Cheng e Li (2009) e também aquela proposta originalmente por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), Eq. (213), não são totalmente apropriadas para resolver os sistemas não lineares resultantes das discretizações numéricas das equações diferenciais parciais que modelam a evolução de películas finas.

De fato, após vários testes computacionais, verificamos que o mal condicionamento desses sistemas impõe restrições a realização da busca linear inexata. Mais precisamente, tal mal condicionamento cria severas dificuldades para a determinação de um valor $\lambda_k > 0$ que satisfaça a Eq. (213), ou a Eq. (218), após um número de tentativas razoável. Consequentemente, tais condições tornam o DFSANE extremamente lento, quando empregado para resolver os sistemas considerados.

Com isso, observamos que a utilização do método DFSANE na resolução de sistemas mal condicionados, exige uma condição de não monotonicidade que tenha a propriedade de relaxar as exigências impostas pelas condições descritas nas Eqs. (213) e (218), as quais são muito severas para os sistemas não lineares considerados aqui. Isso implica na utilização de uma condição apropriada para aceitar tamanhos de passos que, possivelmente, produzirão uma sequência $f(\mathbf{x}_k)$ altamente não monótona.

Para satisfazer essa exigência imposta pelo mal condicionamento dos sistemas, neste trabalho modificaremos o método DFSANE. Para isso, utilizaremos uma condição de não monotonicidade livre de derivadas, a qual é capaz de aceitar tamanhos de passos após poucas tentativas e em um intervalo de tempo de computação razoável, produzindo uma sequência $f(\mathbf{x}_k)$ altamente não monótona.

Usaremos a condição de Cheng e Li (2009), descrita na Eq. (218). No entanto, em vez da atualização mostrada na Eq. (220), a fim de gerar uma sequência altamente não monótona, consideraremos a seguinte atualização para o parâmetro C_k :

$$C_{k+1} = \frac{\beta_k Q_k (C_k + w_k) + f(\mathbf{x}_{k+1})}{Q_{k+1}}, \quad (221)$$

onde agora $\{w_k\}$ é uma sequência (de números reais não negativos) ligeiramente crescente, em vez de convergente.

O Algoritmo 1 abaixo descreve em detalhes os passos do método DFSANE modificado usado aqui, onde consideramos $\gamma = 10^{-4}$, $\beta_k = 0,85$, $w_k = (k + 1)^{1,3}$ e $\epsilon_k = \frac{\|F(\mathbf{x}_0)\|}{w_k}$, para todo $k \geq 0$.

No Passo 6 do Algoritmo 1 encontra-se um procedimento prático proposto por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), usado para evitar que a magnitude de $\frac{1}{\alpha_{k+1}}$ se torne muito grande, ou muito pequena.

A condição de interrupção do processo iterativo gerado pelo método DFSANE é definida no Passo 2 do Algoritmo 1, a qual é exatamente a mesma proposta por La Cruz, Martínez e Raydan (2006), onde e_a e e_r são as tolerâncias absoluta e relativa, respectivamente.

A menos que seja dito explicitamente ao contrário, nos exemplos considerados aqui será utilizado (a princípio) $e_a = 10^{-5}$ e $e_r = 10^{-4}$.

Algoritmo 1 – (DFSANE)

Dados. $N \in \mathbb{N}$, $x_0 \in \mathbb{R}^N$, $\sigma_0 = 0,1$, $\sigma_1 = 0,5$ e $\gamma = 10^{-4}$.

Passo 1. Faça $C_0 = f(\mathbf{x}_0)$, $Q_0 = 1$, $\epsilon_0 = \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|$, $\left(\frac{1}{\alpha_0}\right) = 1$ e $k = 0$.

Passo 2. Se $\frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|}{\sqrt{N}} \leq e_a + e_r \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|}{\sqrt{N}}$, então pare.

Passo 3. Faça $d_k = -\left(\frac{1}{\alpha_k}\right) \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$, $\lambda_+ = 1$ e $\lambda_- = 1$.

Passo 4. Se $f(\mathbf{x}_k + \lambda_+ \mathbf{d}_k) \leq C_k + \epsilon_k - \gamma \lambda_+^2 f(\mathbf{x}_k)$ então

$$\text{faça } \lambda_k = \lambda_+, \text{ e } \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k,$$

se não

$$\text{se } f(\mathbf{x}_k + \lambda_- \mathbf{d}_k) \leq C_k + \epsilon_k - \gamma \lambda_-^2 f(\mathbf{x}_k) \text{ então}$$

$$\text{faça } \lambda_k = \lambda_-, \text{ e } \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \lambda_k \mathbf{d}_k,$$

se não faça

$$\lambda_t^+ = \frac{\lambda_+^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k + \lambda_+ \mathbf{d}_k) + (2\lambda_+ - 1)f(\mathbf{x}_k)},$$

$$\lambda_t^- = \frac{\lambda_-^2 f(\mathbf{x}_k)}{f(\mathbf{x}_k - \lambda_- \mathbf{d}_k) + (2\lambda_- - 1)f(\mathbf{x}_k)},$$

$$\lambda_+ = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_+, & \text{se } \lambda_t^+ < \sigma_0 \lambda_+ \\ \sigma_1 \lambda_+, & \text{se } \lambda_t^+ > \sigma_1 \lambda_+ \\ \lambda_t^+, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$\lambda_- = \begin{cases} \sigma_0 \lambda_-, & \text{se } \lambda_t^- < \sigma_0 \lambda_- \\ \sigma_1 \lambda_-, & \text{se } \lambda_t^- > \sigma_1 \lambda_- \\ \lambda_t^-, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e vá para o início do Passo 4.

fim do se

fim do se

Passo 5. Faça $Q_{k+1} = 0,85Q_k + 1$, $w_k = (k + 1)^{1,3}$ e $C_{k+1} = \frac{0,85Q_k(C_k + w_k) + f(\mathbf{x}_{k+1})}{Q_{k+1}}$.

Passo 6. Faça $\mathbf{s}_{k+1} = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, $\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$ e $\frac{1}{\alpha_{k+1}} = \frac{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{s}_{k+1}}{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{y}_{k+1}}$.

Se $\left|\frac{1}{\alpha_{k+1}}\right| \notin [10^{-10}, 10^{+10}]$, então faça

$$\frac{1}{\alpha_{k+1}} = \begin{cases} 1, & \text{se } \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| > 1 \\ \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\|^{-1}, & \text{se } 10^{-5} \leq \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| \leq 1 \\ 10^5, & \text{se } \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k)\| < 10^{-5}. \end{cases}$$

fim do se

Passo 7. Faça $\epsilon_{k+1} = \frac{\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)\|}{w_k}$.

Passo 8. Faça $k = k + 1$ e volte para o Passo 2.

Para finalizar, observaremos que o DFSANE é um método genuinamente espectral. Utilizando uma expansão em série de Taylor, com resto integral, podemos determinar a seguinte relação (veja, Dennis e Schnabel 1983):

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) = \left[\int_0^{\lambda_k} \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k) dt \right] \mathbf{d}_k. \quad (222)$$

Como $\lambda_k \mathbf{d}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k = \mathbf{s}_{k+1}$, temos que

$$\mathbf{y}_{k+1} = \left[(1/\lambda_k) \int_0^{\lambda_k} \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k) dt \right] \mathbf{s}_{k+1}. \quad (223)$$

Utilizando a Eq. (223) obtemos

$$\alpha_{k+1} = \frac{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{y}_{k+1}}{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{s}_{k+1}} = \frac{\mathbf{s}_{k+1}^T \left[(1/\lambda_k) \int_0^{\lambda_k} \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k) dt \right] \mathbf{s}_{k+1}}{\mathbf{s}_{k+1}^T \mathbf{s}_{k+1}}, \forall k \geq 0. \quad (224)$$

O valor α_{k+1} assim definido é um quociente de Rayleigh associado à matriz $(1/\lambda_k) \int_0^{\lambda_k} \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k) dt$, a qual representa uma média integral dos valores da Jacobiana $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k)$, tomada quando t varia no intervalo $[0, \lambda_k]$. Logo, se a matriz $\mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k)$ é simétrica, para todo $0 \leq t \leq \lambda_k$, e se \mathbf{s}_{k+1} se aproxima de um autovetor de $(1/\lambda_k) \int_0^{\lambda_k} \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k) dt$, então o coeficiente espectral do método DFSANE se aproxima de um autovalor da matriz $(1/\lambda_k) \int_0^{\lambda_k} \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k) dt$.

5 RESULTADOS

5.1 Os Aspectos Gerais

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos das simulações numéricas para o escoamento de películas finas em superfícies sólidas e inclinadas, as quais foram desenvolvidas neste trabalho usando os modelos e métodos descritos nos capítulos anteriores.

Assim, as equações diferenciais parciais que modelam a evolução de películas finas foram discretizadas no espaço usando-se diferenças finitas centradas. A discretização temporal é totalmente implícita.

Os sistemas não lineares, resultantes das discretizações numéricas de tais equações, foram resolvidos numericamente usando-se o algoritmo DFSANE, proposto por La Cruz, Martinez e Raydan (2006), o qual é um método espectral totalmente livre de derivadas, destinado à resolução de sistemas não lineares de larga escala, assim como os descritos no Capítulo 2.

Um dos objetivos do presente capítulo é mostrar o desempenho do DFSANE para problemas altamente não lineares. Para isso, consideraremos seis exemplos distintos. Nos quatro primeiros exemplos, o domínio espacial Ω é discretizado usando-se uma grade com 40×40 blocos. Já nos dois exemplos seguintes, considera-se uma grade com 100×40 blocos na discretização do domínio espacial.

A metodologia numérica mostrada no Algoritmo 1 não requer o cálculo ou armazenamento da matriz de coeficientes associada aos sistemas não lineares resultantes das discretizações das diferentes formas da equação de película fina. De fato, o método DFSANE requer essencialmente a computação e armazenagem dos vetores x e F , que são, respectivamente, o vetor variável e o vetor de busca, ambos de tamanho $N = 2 \times N_x \times N_y$, sendo $F(x)$ uma aplicação não linear suficientemente diferenciável.

Assim, o maior custo computacional do algoritmo DFSANE reside essencialmente na computação do vetor $F(x)$, em cada iteração. Do ponto de vista de programação, este vetor pode ser construído usando laços independentes. Em outras palavras, no cálculo de $F(x)$, observa-se que o resultado de uma iteração de um laço não depende do resultado de qualquer outra iteração. Isso significa que diferentes iterações de um laço podem ser executadas

simultaneamente por diferentes processadores. Portanto, neste contexto, o método DFSANE é altamente paralelizável.

No presente trabalho, o cálculo de $F(x)$, e apenas este cálculo, foi paralelizado em cada iteração do algoritmo DFSANE. Para isso, usamos o OpenMP (*Open Multi-Processing*, ou Multi-processamento aberto), o qual é uma interface de programação de aplicação (API). Para mais detalhes sobre este assunto, recomendamos, por exemplo, o livro de Chandra et al. (2001).

No entanto, gostaríamos de observar que o OpenMP é um modelo de programação paralela relativamente novo, que é muito apropriado para computadores equipados com multiprocessadores de memória compartilhada, como o usado para obter os resultados deste trabalho.

Aqui, o OpenMP funciona em conjunto com a linguagem C++. Isso foi feito usando modificações de um código inicialmente escrito para computação serial. Estas modificações são compostas de um conjunto de diretivas do compilador que descrevem o paralelismo da sub-rotina usada para calcular $F(x)$, no código-fonte.

Todos os resultados numéricos mostrados aqui foram obtidos usando-se um computador equipado com 2 processadores Intel Xeon E5-2420 Hexa-Core, com 1,9 GHz e 10 MB de memória cache LGA. Os códigos foram compilados e executados usando o software Intel Parallel Studio XE 2013, que hospeda o OpenMP como uma API nativa. Esta tecnologia de software e hardware permitiu um processamento multi-core, com 12 núcleos físicos mais 12 núcleos virtuais.

5.2 Exemplo 1

Neste exemplo, consideraremos o modelo básico descrito pelas Eqs. (136)-(138), o qual modela a altura de películas finas de fluidos viscosos que, movidos exclusivamente pela tensão superficial, se espalham em superfícies planas e sólidas. Tomaremos $\Delta x = \Delta y = 0,025$ e o tamanho do passo de tempo usado é $\Delta t = 10^{-5}$, o qual foi selecionado após intensivos testes computacionais.

Em vista das condições iniciais dadas pelas Eqs. (142) e (146), consideraremos os parâmetros $\delta = 10^{-2}$ e $\sigma = 80$, os quais são aqueles descritos por Witelski e Bowen (2003).

Para este exemplo, o desempenho do método DFSANE (*Derivative-Free Spectral Algorithm for Nonlinear Equations*) está quantificado na Tabela 2, abaixo.

Na Tabela 2, pode-se observar o número de passos de tempo NTS , o número total de avaliações de F (a aplicação não linear associada com o sistema que representa a equação de película fina discretizada) no último passo de tempo, o número total de iterações realizadas pelo DFSANE na resolução do sistema não linear no último passo de tempo, o número total de etapas de globalização e o valor final da $\|F\|$ no último passo de tempo. Tais quantificadores descritos na Tabela 2 foram medidos para quatro diferentes instantes, os quais se encontram em intervalos de tempo que variam de $T = 10^{-5}$ até $T = 1$. Estes intervalos de tempo também foram escolhidos após intensivos testes computacionais.

A partir dos resultados descritos na Tabela 2, podemos notar que o DFSANE é um método robusto para a simulação do escoamento de películas finas em superfícies sólidas, pois mesmo tratando-se de um problema de grande porte altamente não linear, o DFSANE não divergiu em nenhum momento.

Na Figura 5, encontram-se as ilustrações dos resultados das simulações numéricas usando-se o método DFSANE. Nesta figura, ilustram-se as superfícies da espessura da película de fluido e suas curvas de nível, respectivamente para 3 diferentes instantes de tempo, $T = 10^{-5}$, $T = 10^{-1}$ e $T = 1$.

Tabela 2 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 1.

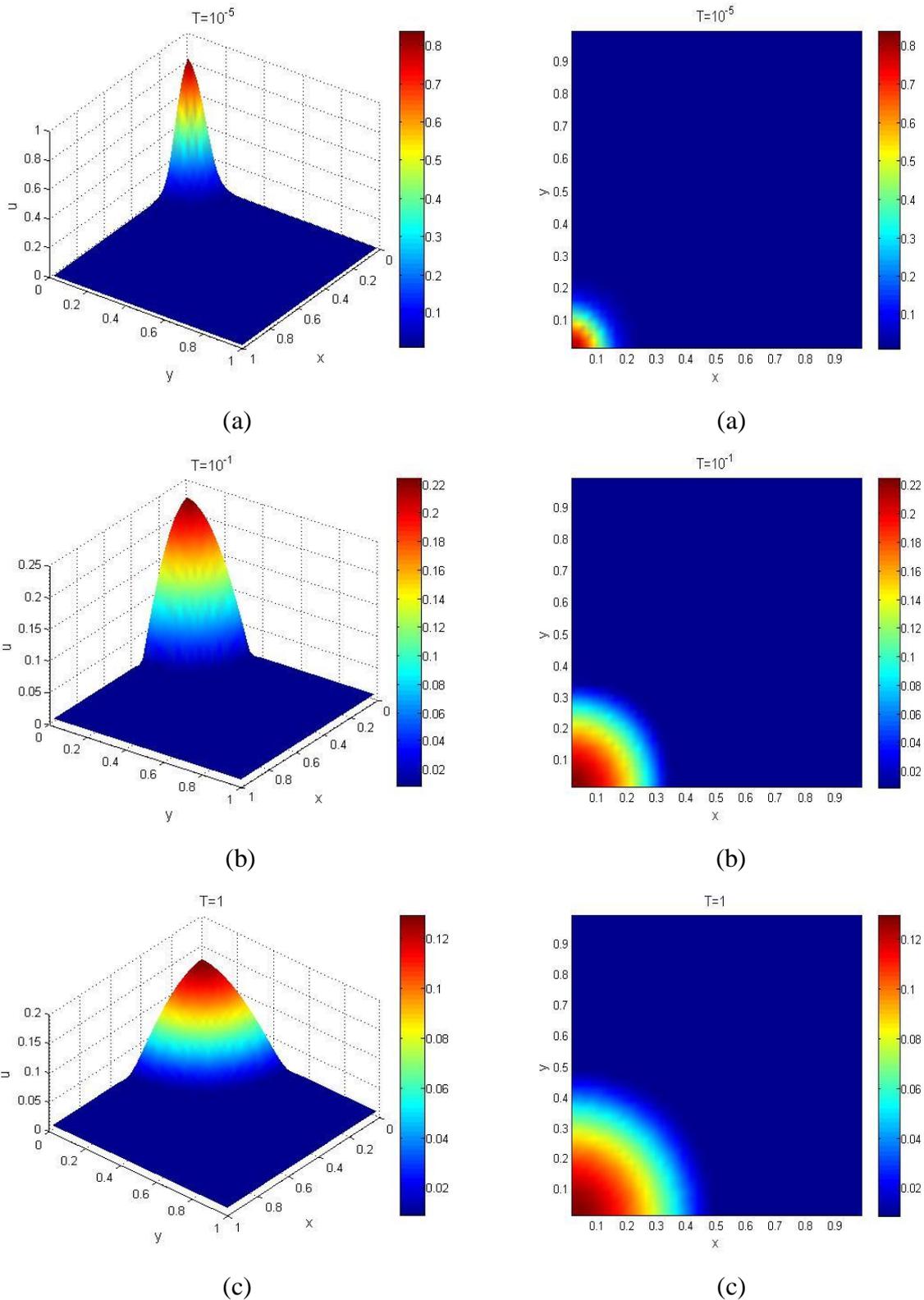
$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-5} \times 1 = 10^{-5}$	498895	461919	36976	$1,758 \times 10^{-2}$
$10^{-5} \times 10^2 = 10^{-3}$	5167	2457	2708	$2,512 \times 10^{-5}$
$10^{-5} \times 10^4 = 10^{-1}$	115	63	52	$6,801 \times 10^{-7}$
$10^{-5} \times 10^5 = 1$	28	9	18	$5,875 \times 10^{-7}$

Fonte: A autora, 2022.

Observando-se a Figura 5, nas condições consideradas neste exemplo, pode-se notar a dinâmica de evolução da espessura (altura) da película de fluido, com o passar do tempo.

Figura 5 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 1, em três diferentes instantes de tempo:

(a) $T = 10^{-5}$, (b) $T = 10^{-1}$, (c) $T = 1$.



Finalmente, para este primeiro exemplo, notamos que, com os equipamentos computacionais usados aqui, a simulação numérica consumiu em torno de 37,22 minutos de CPU (*Central Processing Unit*). Tempo relativamente pequeno, que qualifica o DFSANE como um eficiente método para o estudo do escoamento de películas finas em superfícies sólidas.

5.3 Exemplo 2

Para estudar o caso da existência de forças intermoleculares entre a superfície sólida e a película de fluido, descrito nas Eqs. (147)-(153), e em vista da Eq. (151), consideraremos o parâmetro $\varepsilon = 0,01$. Como no Exemplo 1, também utilizaremos $\Delta x = \Delta y = 0,025$, e o tamanho do passo de tempo $\Delta t = 10^{-5}$.

Neste segundo exemplo, os quantificadores para a análise do desempenho do método DFSANE estão descritos na Tabela 3, para instantes que variam de $T = 10^{-5}$ até $T = 0,10223$, os quais foram calculados usando nosso código e selecionados após intensivos testes computacionais.

Para este Exemplo 2, os resultados das simulações numéricas usando-se o método DFSANE são ilustrados na Figura 6, para os instantes de tempo: $T = 10^{-5}$, $T = 10^{-1}$ e $T = 0,10222$ e na Figura 7 para o instante de tempo $T = 0,10223$.

Tabela 3 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 2.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-5} \times 1 = 10^{-5}$	1506	748	758	$2,092 \times 10^{-6}$
$10^{-5} \times 10^2 = 10^{-3}$	91	71	20	$3,264 \times 10^{-7}$
$10^{-5} \times 10^3 = 10^{-2}$	65	47	18	$8,292 \times 10^{-7}$
$10^{-5} \times 10^4 = 10^{-1}$	1294	1020	274	$2,144 \times 10^{-5}$
$10^{-5} \times 10221$ $= 0,10221$	51969	35995	15974	$1,831 \times 10^{-4}$
$10^{-5} \times 10222$ $= 0,10222$	148063	112610	35432	$2,093 \times 10^{-4}$
$10^{-5} \times 10223$ $= 0,10223$	$1,636 \times 10^7$	9×10^6	$1,205 \times 10^6$	21034,9

Fonte: A autora, 2022.

Observando-se a Figura 5, podemos notar que a película é muito suscetível à pequena perturbação inicial, diminuindo de valor em certas regiões do domínio e aumentando em outras. Esse comportamento é típico da ação de forças intermoleculares, e deve produzir

rupturas na película, as quais se apresentam como singularidades associadas com a superfície solução do problema considerado. De fato, já na Figura 7 pode-se observar a superfície da espessura da película de fluido logo após a ruptura. Como enfatizado antes, tal fenômeno de ruptura ocorre devido à ação de forças intermoleculares, ou forças de Van der Waals, sendo também observado em experimentos realizados em laboratórios.

Como mostrado na Tabela 3, podemos notar que no instante de tempo $T = 0,10223$ a norma $\|F\|$ não atingiu um valor suficientemente pequeno, pois neste instante de tempo já havia ocorrido à ruptura da película de fluido, como pode ser observado na Figura 7, e o problema se tornou singular. Para capturar este fenômeno de ruptura, o DFSANE utilizou o número máximo de iterações considerado na simulação deste exemplo, isto é, 9×10^6 iterações para resolver o sistema não linear. Após as 9×10^6 iterações, a simulação numérica parou, não havendo então convergência, nem diminuição da norma $\|F\|$ no dado instante de tempo.

Figura 6 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 2, em três diferentes instantes de tempo:

(a) $T = 10^{-5}$, (b) $T = 10^{-1}$, (c) $T = 0,10222$.

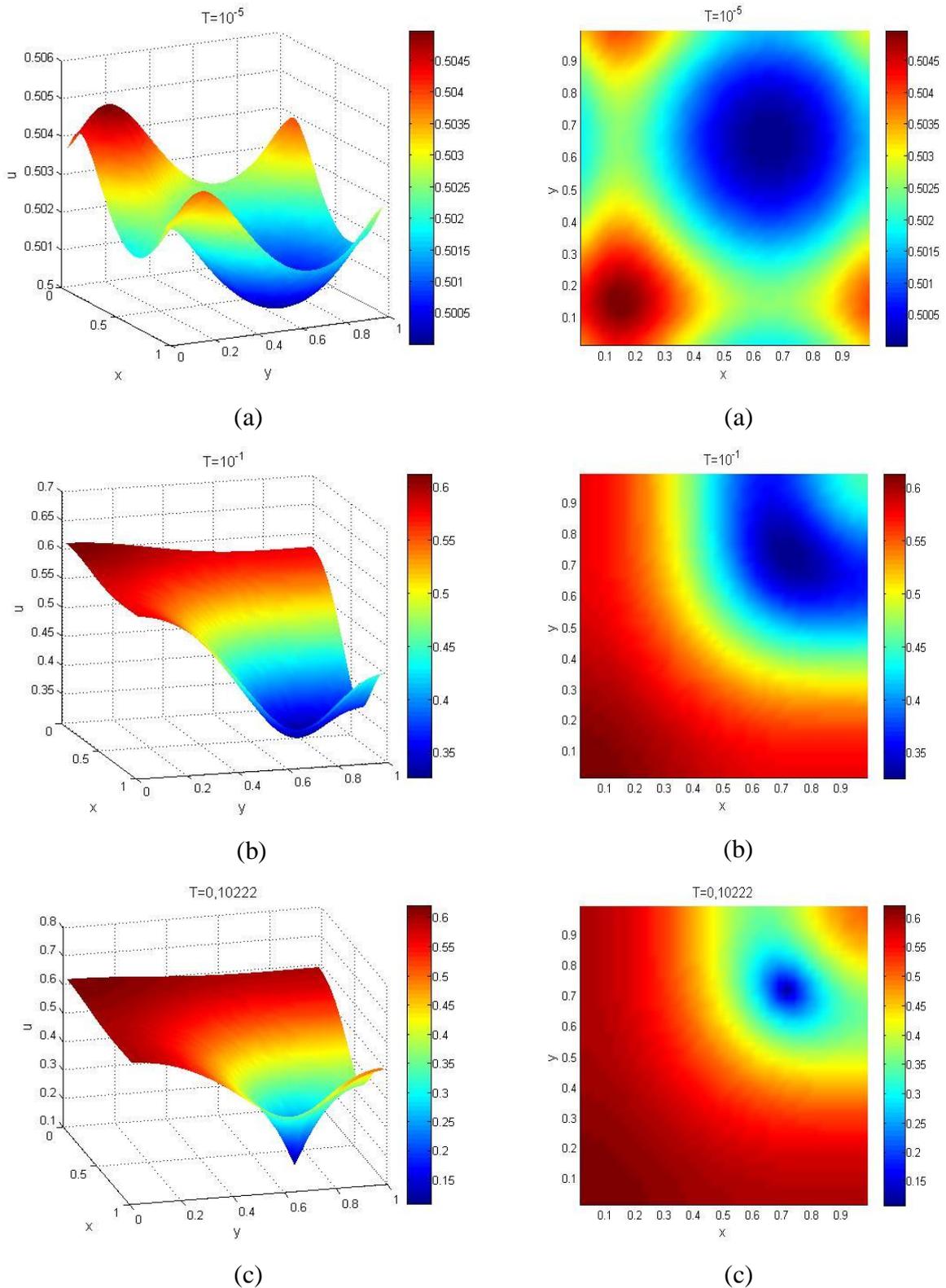
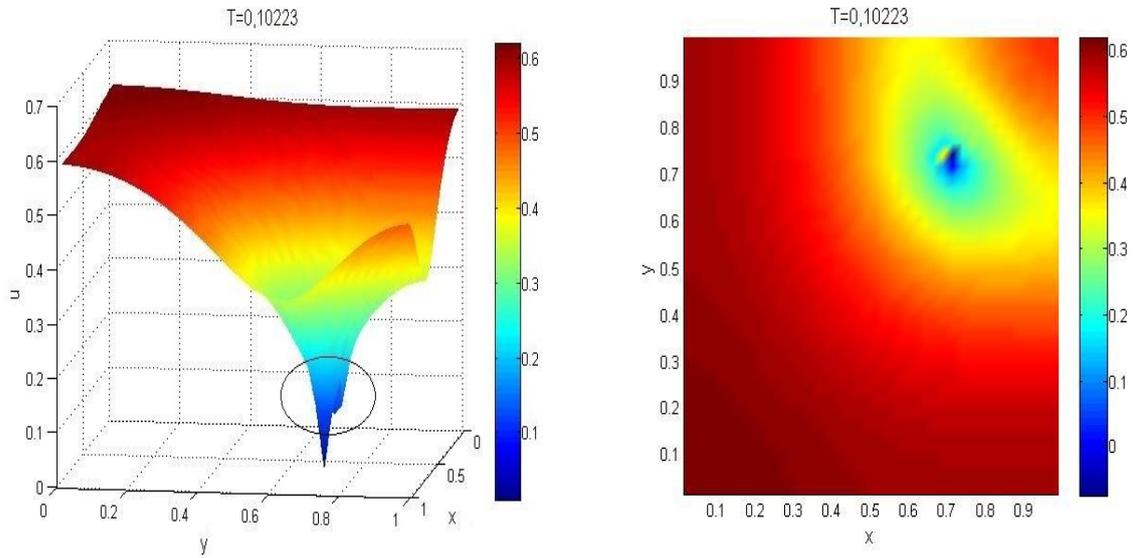


Figura 7 – Superfície da espessura da película de fluido logo após a ruptura e sua curva de nível para o instante de tempo $T = 0,10223$.



Fonte: A autora, 2022.

Para este segundo exemplo, notamos que a simulação numérica, usando-se o método DFSANE, consumiu em torno de 66,44 minutos de CPU.

5.4 Exemplo 3

Para observar os efeitos de gravidade na evolução de películas finas, em vista da Eq. (154), consideraremos neste exemplo, uma constante positiva $C_1 = 200$, a qual é mesma descrita por Becker et al. (2002), $\Delta x = \Delta y = 0,05$ e o tamanho do passo de tempo $\Delta t = 10^{-7}$, o qual foi selecionado após intensivos testes computacionais. Aqui, resolveremos o problema mostrado nas Eqs. (147)-(149) com condições iniciais dadas nas Eqs. (145) e (156).

Para este terceiro exemplo, os valores calculados dos parâmetros considerados para o estudo do desempenho da presente metodologia são descritos na Tabela 4, para diferentes intervalos de tempo, de $T = 10^{-7}$ até $T = 10^{-2}$, os quais foram selecionados após intensivos testes computacionais.

Neste Exemplo 3, são ilustrados na Figura 8 os resultados das simulações numéricas usando-se a presente metodologia, para $T = 10^{-7}$, $T = 10^{-4}$ e $T = 10^{-2}$, onde consideramos, para efeito de apresentação, a função $-u$, em vez da função u .

Tabela 4 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 3.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-7} \times 1 = 10^{-7}$	362838	144086	218752	$4,169 \times 10^{-3}$
$10^{-7} \times 10^2 = 10^{-5}$	48	12	36	$3,209 \times 10^{-4}$
$10^{-7} \times 10^3 = 10^{-4}$	67	23	44	$2,044 \times 10^{-5}$
$10^{-7} \times 10^4 = 10^{-3}$	14799	5279	9520	$8,224 \times 10^{-3}$
$10^{-7} \times 10^5 = 10^{-2}$	377	157	220	$8,359 \times 10^{-5}$

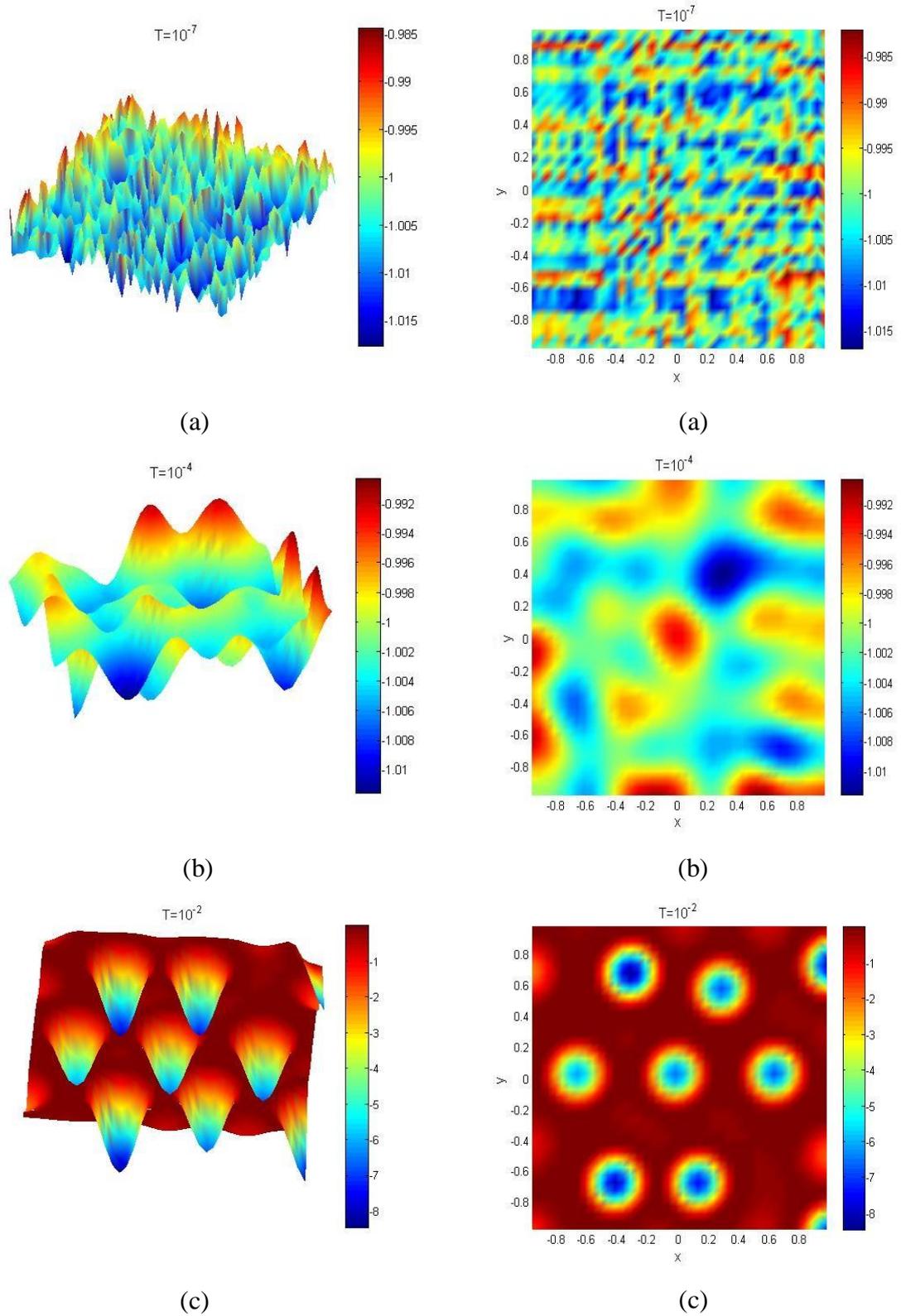
Fonte: A autora, 2022.

Na Figura 8, pode-se notar o fenômeno físico da formação de gotas, provocado pela ação da gravidade sobre um líquido aderido abaixo de uma superfície sólida. Tais gotas apresentam diferentes magnitudes, ou seja, assumem diferentes alturas, devido à introdução de uma perturbação estocástica na condição inicial do problema, ver as Eqs. (155) e (156).

Para capturar este fenômeno físico, o DFSANE consumiu em torno de 1194,07 minutos de CPU (aproximadamente 20 horas), o que consideramos um tempo relativamente razoável, devido à complexidade do problema considerado aqui.

Figura 8 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 3, em três diferentes instantes de tempo:

(a) $T = 10^{-7}$, (b) $T = 10^{-4}$, (c) $T = 10^{-2}$.



5.5 Exemplo 4

Neste quarto exemplo, consideraremos as forças intermoleculares agindo concomitantemente com a gravidade. Assim, este exemplo trata essencialmente do problema resolvido no Exemplo 3, onde a Eq. (154) foi substituída pela Eq. (157) e a condição inicial dada na Eq. (156), foi trocada pela Eq. (158). Como antes, utilizaremos $\varepsilon = 0,01$ e $C_1 = 200$. Como no Exemplo 3, tomaremos $\Delta x = \Delta y = 0,05$ e $\Delta t = 10^{-7}$.

Os resultados obtidos para os parâmetros selecionados para o desempenho do método DFSANE, para este exemplo, estão descritos na Tabela 5, para diferentes intervalos de tempo que variam de $T = 10^{-7}$ até $T = 0,0008436$, os quais foram selecionados após intensivos testes computacionais.

Para este Exemplo 4, as ilustrações gráficas dos resultados das simulações numéricas usando-se a presente metodologia são mostradas na Figura 9, para três diferentes instantes de tempo: $T = 10^{-7}$, $T = 10^{-4}$ e $T = 0,0005$, e na Figura 10 para o instante de tempo $T = 0,0008436$, onde, a fim de facilitar o entendimento físico, nós apresentamos os gráficos de $-u$, em vez dos gráficos de u .

Neste exemplo, conseguimos novamente capturar o fenômeno de ruptura. De fato, observando-se a Figura 10 podemos notar a superfície da espessura da película de fluido logo após a gota romper. Para capturar este fenômeno físico de ruptura da gota, o DFSANE consumiu em torno de 609,016 minutos de CPU (aproximadamente 10 horas).

Tabela 5 – Resultados do desempenho do método DFSANE para o Exemplo 4.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-7} \times 1 = 10^{-7}$	387170	153116	234054	$4,814 \times 10^{-3}$
$10^{-7} \times 10^2 = 10^{-5}$	48	12	36	$3,033 \times 10^{-4}$
$10^{-7} \times 10^3 = 10^{-4}$	63	23	40	$2,913 \times 10^{-5}$
$10^{-7} \times 5000$ $= 0,0005$	8404	2850	5554	$5,453 \times 10^{-3}$
$10^{-7} \times 8435$ $= 0,0008435$	319141	133481	185660	$1,816 \times 10^{-2}$
$10^{-7} \times 8436$ $= 0,0008436$	324471	135703	188768	$1,819 \times 10^{-2}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 9 – Superfícies da espessura da película de fluido e suas respectivas curvas de nível para o Exemplo 4, em três diferentes instantes de tempo:

(a) $T = 10^{-7}$, (b) $T = 10^{-4}$, (c) $T = 0,0005$.

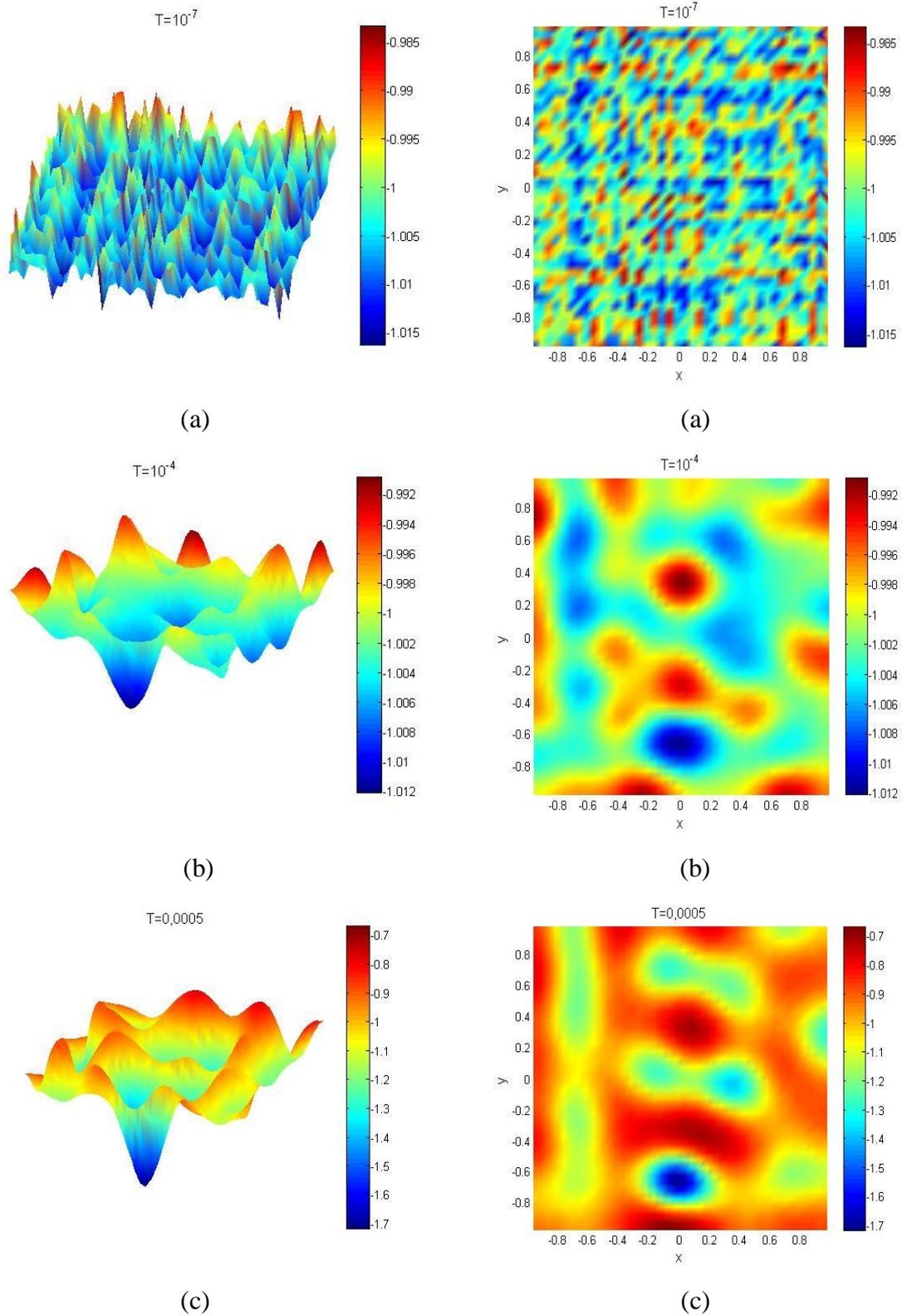
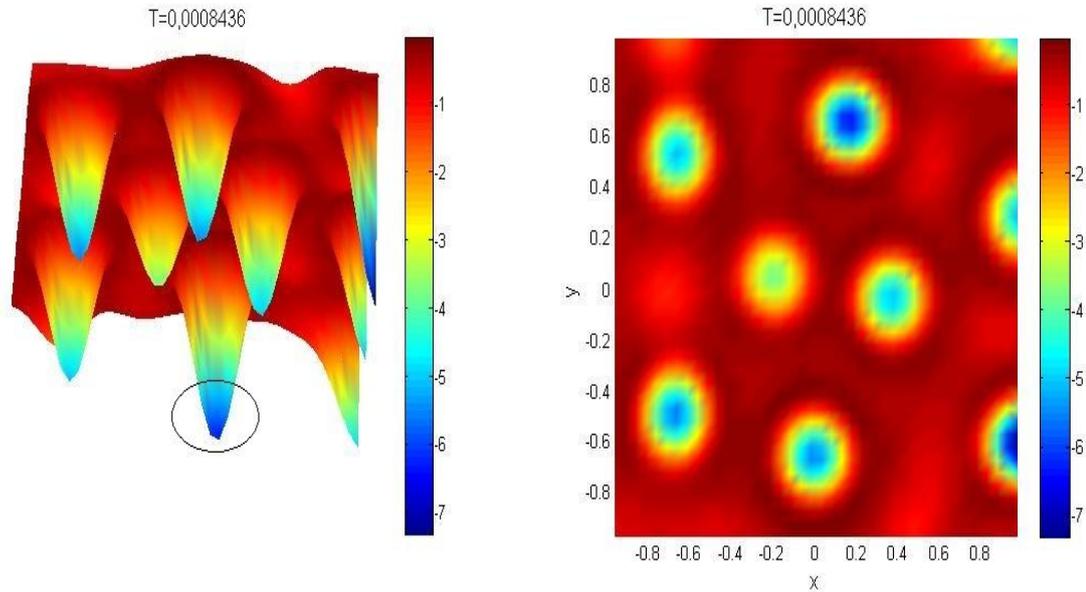


Figura 10 – Superfície da espessura da película de fluido logo após a ruptura e sua curva de nível para o instante de tempo $T = 0,0008436$.



Fonte: A autora, 2022.

Comparando este exemplo com o Exemplo 2, temos que agora a ruptura ocorreu em $T = 0,0008436$, levando menos passos de tempo que o Exemplo 2, cujo rompimento ocorreu em $T = 0,10223$. Já em relação ao Exemplo 3, a simulação numérica do presente exemplo consumiu em torno de 609,016 minutos de CPU, menos tempo que no Exemplo 3, que consumiu 1194,07 minutos de CPU.

Assim, podemos concluir que o estudo dos fenômenos decorrentes das ações de forças intermoleculares junto com a gravidade, na evolução de películas finas, faz com que os fenômenos físicos de formação de gotas, e da ruptura destas gotas, ocorram em menos passos de tempo e consumam menos tempo de máquina, do que quando estudados separadamente, como nos Exemplos 2 e 3.

5.6 Exemplo 5

A fim de estudar os fenômenos físicos que ocorrem quando uma fina camada de líquido escorre para baixo em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade, consideraremos o modelo descrito pelas Eqs. (159)-(165) com condições iniciais dadas nas Eqs. (166) e (167). Nesta simulação, utilizaremos o domínio espacial $\Omega = [0,120] \times [0,16]$, onde $\Delta x = 1,2$ e $\Delta y = 0,4$ e o tamanho do passo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$.

Em vista das condições iniciais e de contorno deste problema, consideraremos os parâmetros $u_\infty = 1$ e $b = 0,01$, os quais são aqueles descritos por Li, Jeong e Kim (2014).

Para ver o efeito do parâmetro D na evolução da película líquida fina, iremos fazer uma comparação entre os resultados de três simulações numéricas, considerando $D = 0$ (plano vertical), $D = 0,5$ e $D = 1$ (planos inclinados). Para todas as três simulações foram utilizadas intervalos de tempo que variam de $T = 10^{-3}$ até $T = 40$, os quais foram calculados usando nosso código e selecionados após intensivos testes computacionais.

- **Caso $D = 0$:**

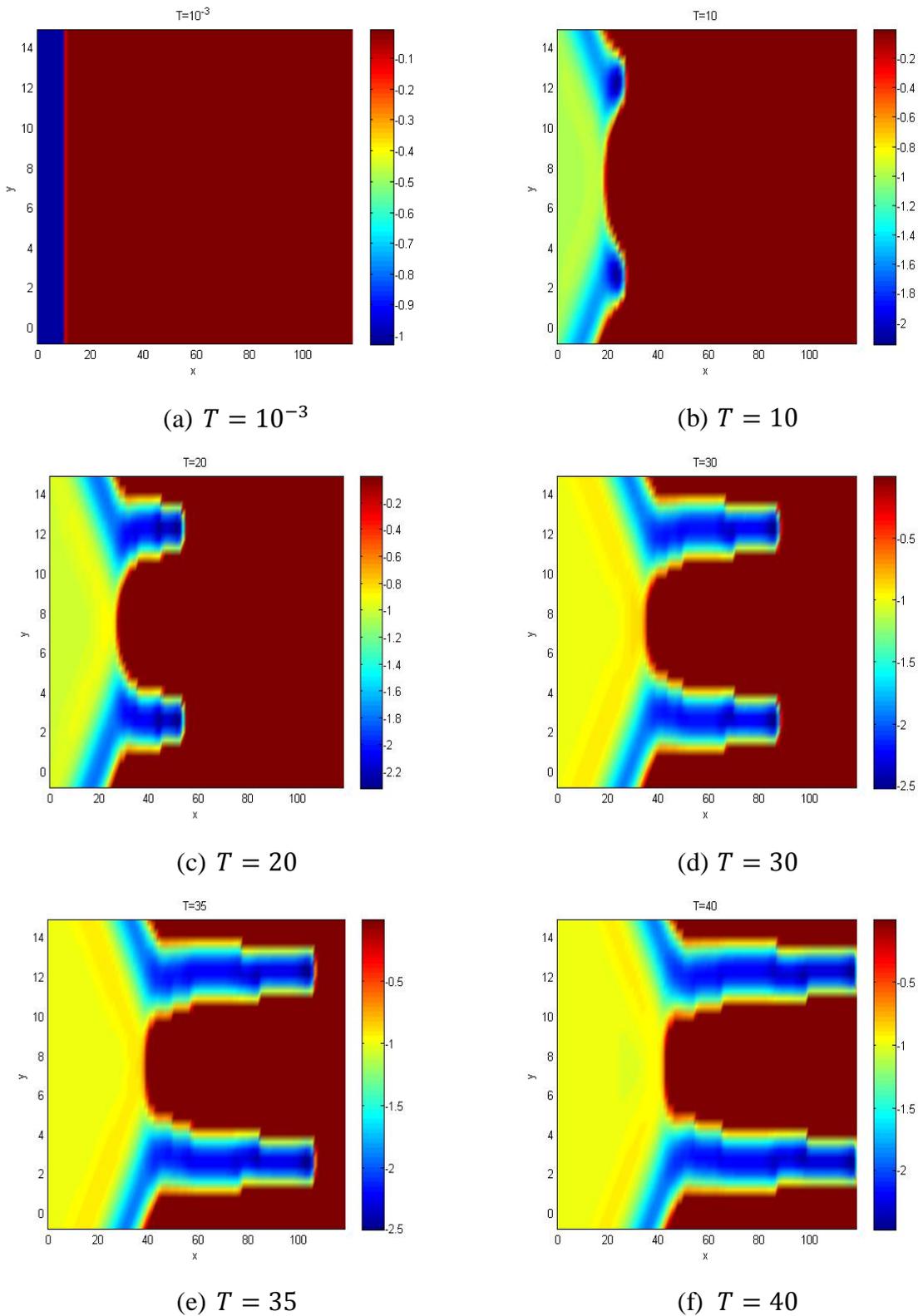
Primeiramente mostraremos os resultados da simulação para o plano vertical. Na Tabela 6 são descritos os valores calculados dos parâmetros considerados para o estudo do desempenho do DFSANE. A Figura 11 demonstra os resultados das simulações ao longo de diferentes instantes de tempo.

Tabela 6 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 5 – Caso $D = 0$.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-3} \times 1 = 10^{-3}$	319	163	156	$7,996 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 10000 = 10$	62	48	14	$1,412 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 20000 = 20$	96	72	24	$1,585 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 30000 = 30$	100	80	20	$1,340 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 35000 = 35$	85	67	18	$3,206 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 40000 = 40$	56	44	12	$1,239 \times 10^{-6}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 11 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 5 – Caso $D = 0$.



Fonte: A autora, 2022.

Observando-se a Figura 11, podemos notar o desenvolvimento de *fingers*, ou seja, formas semelhantes a dedos ao longo do tempo. A linha de contato após ser afetada pela perturbação estocástica introduzida na condição inicial do problema, é incorporada com padrões de dedilhados em que os dedos possuem comprimentos semelhantes.

Para capturar este fenômeno físico, o DFSANE consumiu em torno de 18,78 minutos de CPU, o que consideramos um tempo pequeno para a obtenção dos *fingers*, qualificando essa metodologia numérica como eficiente para o estudo do escoamento de películas líquidas finas em um plano vertical ou inclinado.

- **Caso $D = 0,5$:**

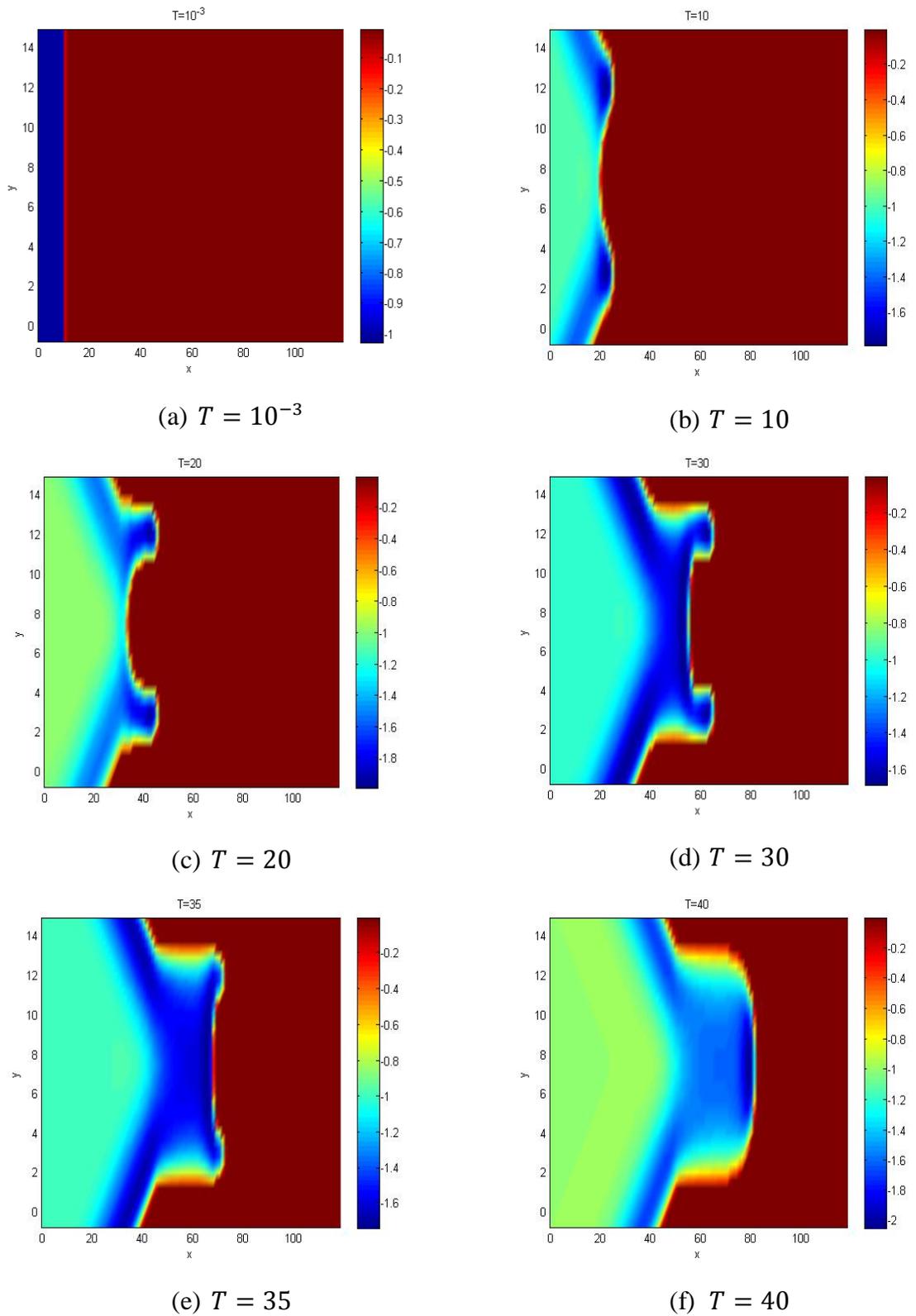
Neste segundo caso, mostraremos os resultados para um plano inclinado. Os quantificadores para a análise do desempenho da presente metodologia numérica estão descritos na Tabela 7 e os resultados das simulações são ilustrados na Figura 12.

Tabela 7 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 5 – Caso $D = 0,5$.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-3} \times 1 = 10^{-3}$	452	219	232	$8,815 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 10000 = 10$	45	31	14	$1,328 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 20000 = 20$	63	49	14	$5,959 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 30000 = 30$	45	31	14	$1,931 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 35000 = 35$	56	42	14	$1,251 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 40000 = 40$	56	42	14	$3,731 \times 10^{-7}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 12 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 5 – Caso $D = 0,5$.



Fonte: A autora, 2022.

Na Figura 12, pode-se observar que para os primeiros instantes de tempo as linhas de contato evoluem para dois dedos. Porém, após o tempo $T = 30$, nota-se que os dois dedos se fundem para formar um dedo mais largo, “anormal”. O resultado da fusão destes dedos, pode ser vista no instante de tempo $T = 40$. O DFSANE consumiu em torno de 17,85 minutos de CPU para capturar este fenômeno físico.

- **Caso $D = 1$:**

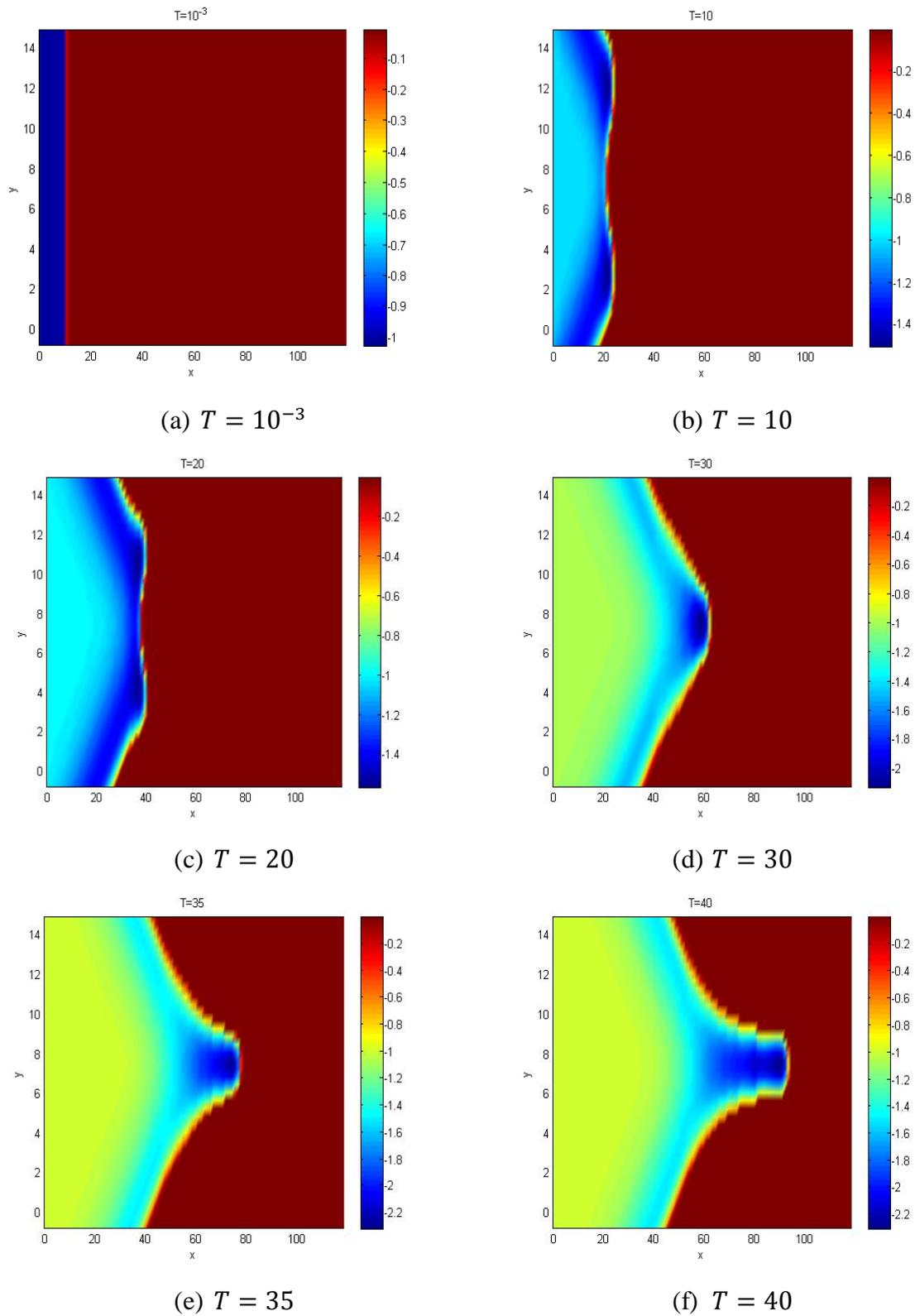
Nesta simulação também consideraremos os resultados para um plano inclinado. Na Tabela 8 estão descritos os parâmetros selecionados para o desempenho do método DFSANE. Observando-se a Figura 13 podemos notar que a fusão dos dois dedos ocorre mais cedo em comparação aos resultados obtidos no caso $D = 0,5$. De fato, observa-se que desde os primeiros instantes de tempo considerados, as linhas de contato evoluem para a formação de somente um dedo e nota-se também que a partir do tempo $T = 30$, o dedo assume uma forma mais “normal” do que no caso anterior.

Tabela 8 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 5 – Caso $D = 1$.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-3} \times 1 = 10^{-3}$	410	208	202	$8,183 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 10000 = 10$	35	25	10	$9,131 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 20000 = 20$	41	31	10	$1,066 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 30000 = 30$	55	43	12	$1,155 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 35000 = 35$	106	86	20	$2,186 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 40000 = 40$	61	49	12	$2,085 \times 10^{-6}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 13 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 5 – Caso $D = 1$.



Fonte: A autora, 2022.

Para esta simulação, o método DFSANE consumiu cerca de 13,82 minutos de CPU. A partir dos resultados mostrados nas Figuras 11, 12 e 13, podemos notar que há importantes diferenças entre o caso vertical ($D = 0$) e os inclinados ($D = 0,5$ e $D = 1$). Observa-se que os dedos evoluem de forma muito mais rápida em $D = 0$ do que nos casos inclinados. Além disso, os resultados também mostraram uma descoberta interessante, que foi a fusão entre dois dedos que ocorreu nos casos dos planos inclinados (mais nitidamente em $D = 0,5$). Esta fusão não aconteceu para o plano vertical, pois como foi visto na Figura 11, os dois dedos cresceram mais rápidos e permaneceram independentes, os tornando mais resistentes à fusão.

5.7 Exemplo 6

Neste exemplo, também consideraremos o problema descrito pelas Eqs. (159)-(165). Assim como no Exemplo 5, tomaremos o domínio espacial $\Omega = [0,120] \times [0,16]$, $\Delta x = 1,2$, $\Delta y = 0,4$, o tamanho do passo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$ e os parâmetros $u_\infty = 1$ e $b = 0,01$.

Novamente faremos comparações entre os resultados das simulações numéricas envolvendo o plano vertical ($D = 0$) e os planos inclinados ($D = 0,5$ e $D = 1$). Para todas as simulações foram utilizadas intervalos de tempo que variam de $T = 10^{-3}$ até $T = 50$, os quais também foram selecionados após intensivos testes computacionais.

- **Caso $D = 0$:**

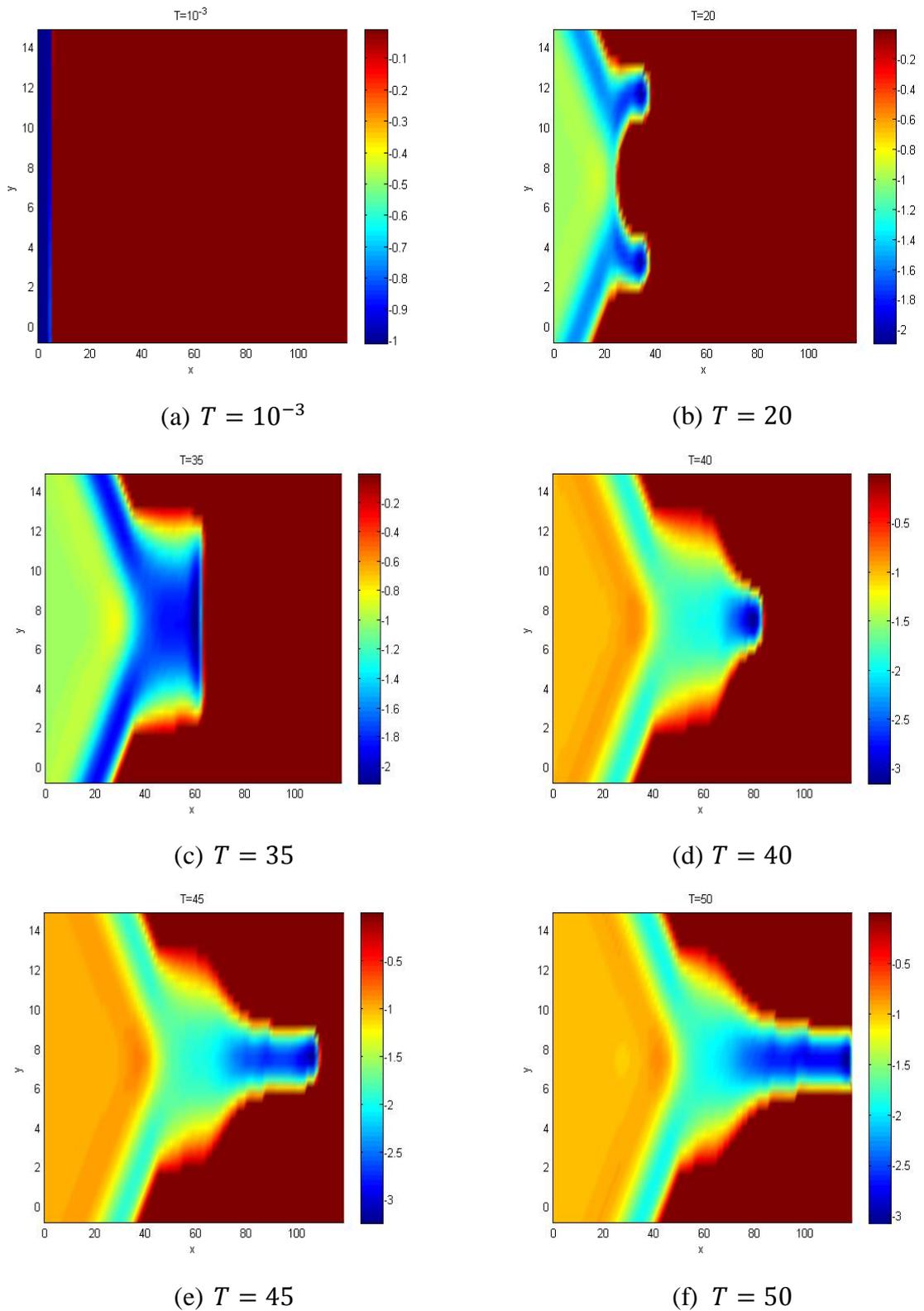
Considerando um plano vertical, os quantificadores para a análise do desempenho do DFSANE estão descritos na Tabela 9 e os resultados das simulações numéricas para diferentes instantes de tempo são ilustrados na Figura 14.

Tabela 9 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 6 – Caso $D = 0$.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-3} \times 1 = 10^{-3}$	376	182	194	$1,814 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 20000 = 20$	91	73	18	$2,019 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 35000 = 35$	62	48	14	$1,749 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 40000 = 40$	118	94	24	$2,122 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 45000 = 45$	169	141	28	$1,171 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 50000 = 50$	98	80	18	$7,893 \times 10^{-7}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 14 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 6 – Caso $D = 0$.



Fonte: A autora, 2022.

Observando a Figura 14, pode-se notar que diferentemente do que aconteceu no Exemplo 5, nesta simulação ocorreu o processo de fusão entre os dedos em um plano vertical, como pode ser observado no instante de tempo $T = 35$, onde temos um dedo muito mais largo do que o normal. Após esse tempo, os dedos assumem formas um pouco mais finas, porém as linhas de contato se comportam de maneira instável. Tais instabilidades ocorrem porque a linha de contato é afetada pela perturbação inicial do problema. Além disso, pode ser impossível de prever o padrão exato do desenvolvimento do dedo devido à natureza caótica do fenômeno.

Para esta simulação numérica, o DFSANE consumiu cerca de 26,63 minutos de CPU.

- **Caso $D = 0,5$:**

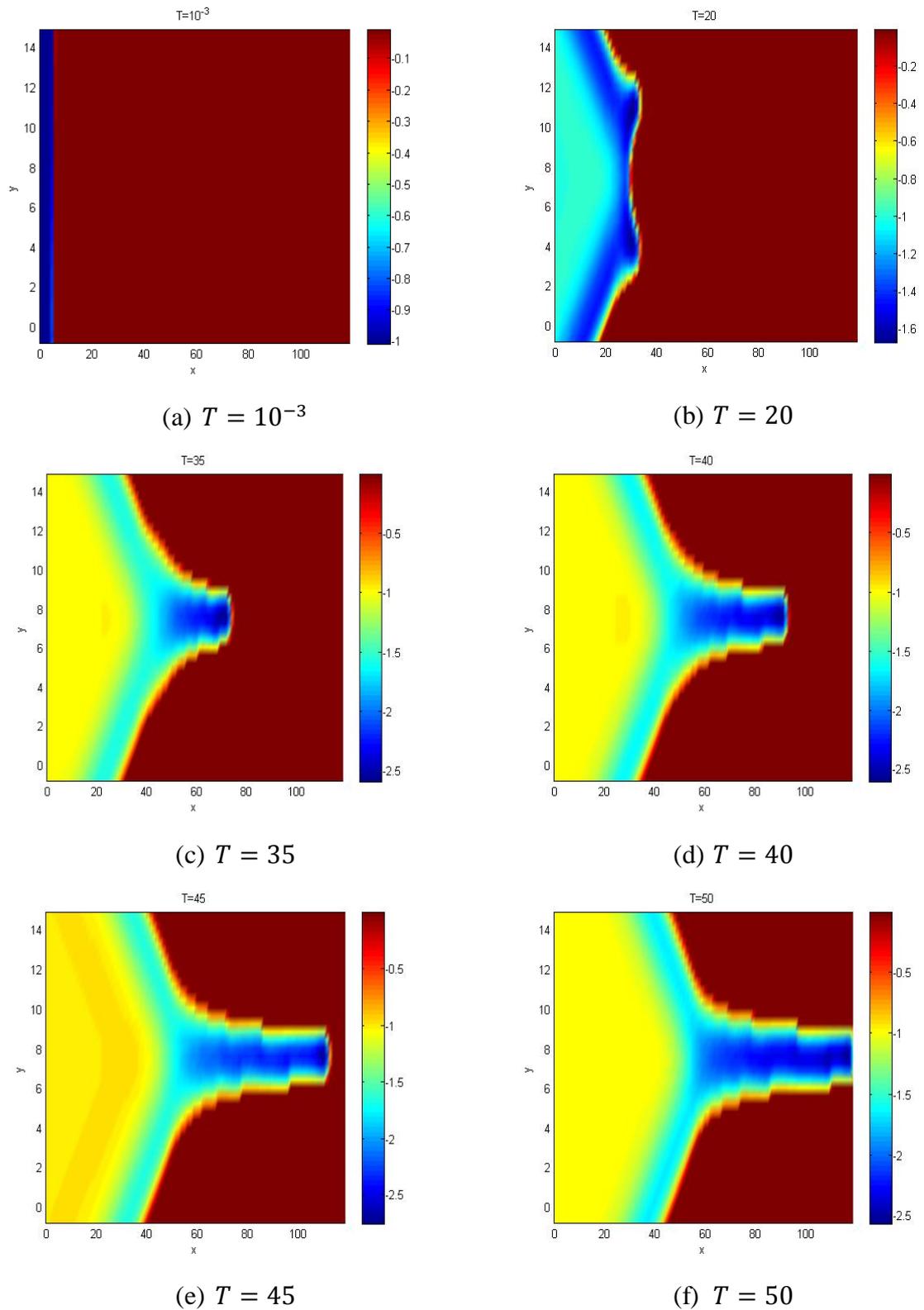
Considerando agora um plano inclinado, temos na Tabela 10 os dados para a análise do desempenho do método DFSANE e na Figura 15 os resultados das simulações numéricas.

Tabela 10 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 6 – Caso $D = 0,5$.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-3} \times 1 = 10^{-3}$	414	208	206	$8,473 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 20000 = 20$	50	36	14	$7,745 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 35000 = 35$	117	99	18	$7,986 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 40000 = 40$	102	80	22	$1,899 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 45000 = 45$	86	66	20	$2,102 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 50000 = 50$	83	69	14	$3,761 \times 10^{-7}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 15 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 6 – Caso $D = 0,5$.



Fonte: A autora, 2022.

Da Figura 15 observa-se que a fusão dos dois dedos ocorre desde os primeiros instantes de tempo considerados, e que após o tempo $T = 20$, as linhas de contato evoluem para a formação de somente um dedo. Percebe-se também que o crescimento do dedo ocorre de forma rápida e constante. Além disso, podemos notar que as linhas de contato em $D = 0,5$ são bem mais estáveis do que no caso vertical.

Nesta simulação, o método DFSANE consumiu em torno de 26,7 minutos de CPU.

- **Caso $D = 1$:**

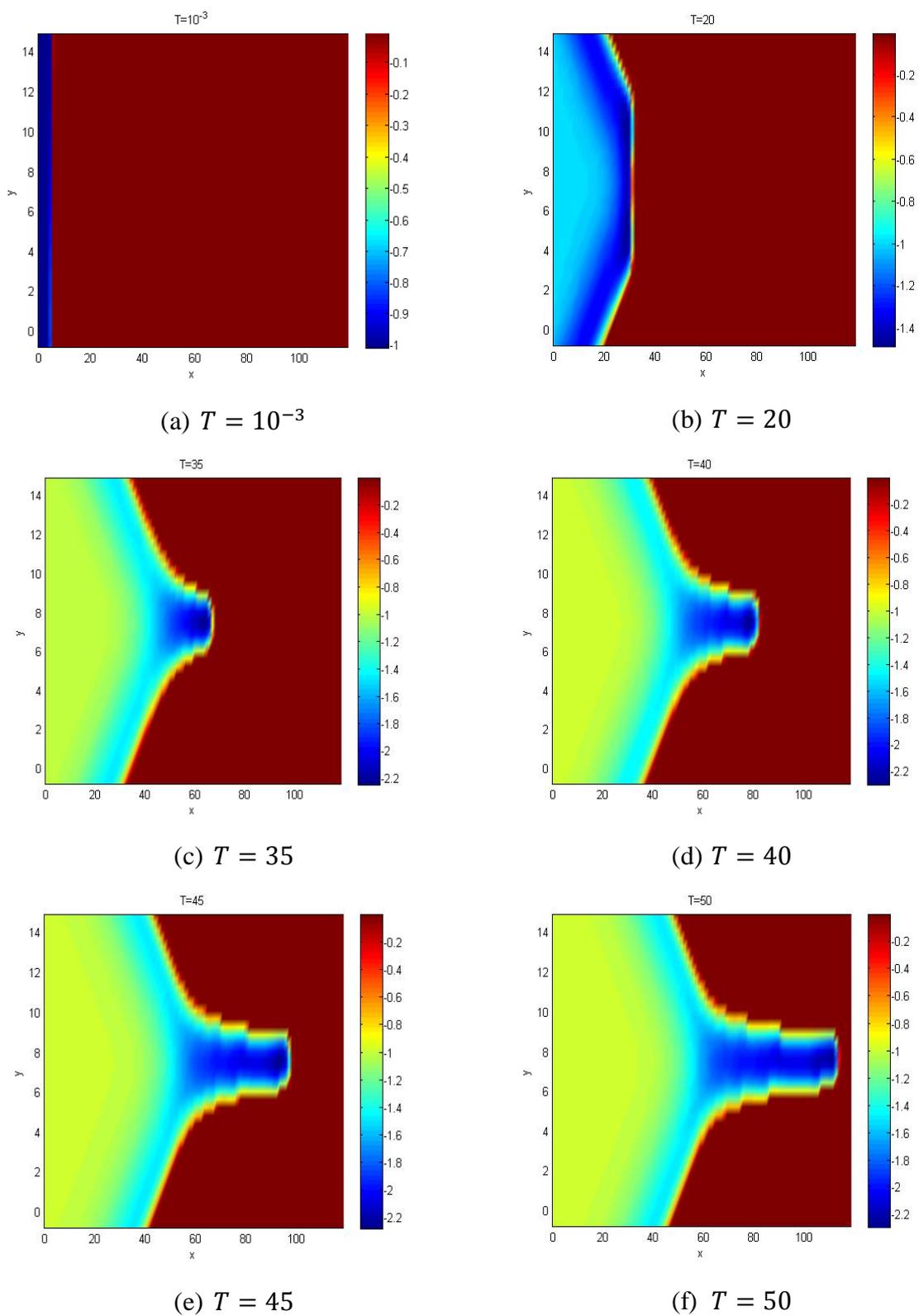
Nesta simulação, os valores selecionados para a análise do desempenho da metodologia empregada encontram-se na Tabela 11. Observando-se a Figura 16 podemos ver que ao longo do tempo, a taxa de crescimento do comprimento do dedo diminui e se aproxima de uma velocidade constante mais lenta. Esse comportamento ocorre devido ao fato de que dependendo da inclinação do plano considerada, em tempos mais longos, apenas um pequeno domínio na frente é afetado pela tensão superficial.

Tabela 11 – Resultados do desempenho do DFSANE para o Exemplo 6 – Caso $D = 1$.

$T = \Delta t \times NTS$	Avaliações de F	Iterações	Etapas de Globalização	Norma de F
$10^{-3} \times 1 = 10^{-3}$	398	192	206	$7,530 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 20000 = 20$	35	25	10	$2,811 \times 10^{-7}$
$10^{-3} \times 35000 = 35$	94	74	20	$2,153 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 40000 = 40$	95	75	20	$1,308 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 45000 = 45$	88	66	22	$2,172 \times 10^{-6}$
$10^{-3} \times 50000 = 50$	68	56	12	$8,149 \times 10^{-7}$

Fonte: A autora, 2022.

Figura 16 – Resultados da simulação numérica para o Exemplo 6 – Caso $D = 1$.



Fonte: A autora, 2022.

Para este último caso, notamos que a simulação numérica usando-se o método DFSANE, consumiu cerca de 30,9 minutos de CPU.

Comparando os resultados mostrados nas Figuras 14, 15 e 16, podemos notar que à medida que a inclinação se aproxima da vertical, os comprimentos dos dedos são maiores e a taxa de crescimento é mais rápida. Vimos também que o processo de fusão entre os dedos ocorreu para todos os três casos considerados, podendo ser observado mais nitidamente no plano vertical.

Fazendo uma comparação geral entre os Exemplos 5 e 6, que modelam o escoamento de uma película líquida fina em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade, temos que os resultados mostraram que a linha de contato do fluido tende a ser mais instável para um plano vertical ($D = 0$) do que para planos inclinados ($D = 0,5$ e $D = 1$). As simulações também mostraram a fusão de dedos formando padrões atípicos comumente observados em fluxos e experimentos reais de revestimento.

Por fim, este estudo pode ser usado em aplicações de fluxo de revestimento para ajudar a evitar a ocorrência ou a ampliação dos padrões de dedilhado.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho foi deduzido e resolvido numericamente um conjunto de equações diferenciais que modelam o problema do escoamento de películas finas aderidas em superfícies sólidas e o problema envolvendo a dinâmica de uma fina camada de líquido em uma superfície inclinada impulsionada pela gravidade, assim como destacamos alguns casos particulares de interesse da ciência aplicada e da engenharia. Avaliamos o comportamento das equações diferenciais parciais discretizadas por diferenças finitas centradas, de forma implícita no tempo, obtendo sistemas não lineares. Para a resolução de tais sistemas, utilizamos o método DFSANE.

O DFSANE constitui uma abordagem livre de Jacobiana desenvolvida para resolução de sistemas não lineares de larga escala, o qual não resolve sistemas lineares e nem usa qualquer informação explícita associada com a matriz jacobiana. No presente trabalho, aplicamos com sucesso o método DFSANE para resolver diferentes formas discretizadas de dois modelos distintos da equação de película fina, onde o primeiro modelo consiste essencialmente em equações parabólicas altamente não lineares, as quais modelam a evolução de tais películas, e o segundo modelo envolve equações hiperbólicas, as quais também são altamente não lineares.

As formas de discretização das equações diferenciais parciais deram origem a sistemas não lineares com 3200 variáveis para o modelo parabólico e 8000 variáveis para o modelo hiperbólico, os quais foram resolvidos várias vezes, ao longo de muitos passos de tempo. Para o primeiro modelo, simulamos quatro deslocamentos diferentes de fluidos viscosos, incluindo efeitos de gravidade e ação de forças intermoleculares, também conhecidas como forças de Van der Waals. No segundo modelo, fizemos dois exemplos, considerando três simulações numéricas para cada um deles, com o objetivo de obter outros fenômenos físicos, como a formação de *fingers*.

Em relação ao desempenho do método numérico utilizado, os resultados obtidos neste trabalho nos permitem dizer que o DFSANE foi capaz de resolver todos os problemas aqui abordados e de simular diferentes fenômenos físicos.

Assim, podemos afirmar que o DFSANE é um método confiável e eficiente do ponto de vista da computação paralela, para a simulação do escoamento de películas finas em superfícies sólidas.

Para futuros trabalhos, considera-se a possibilidade de ampliar a aplicação do DFSANE à simulação de outros modelos utilizados no estudo da evolução de películas finas, descritos também por equações diferenciais parciais não lineares, adicionando-se casos que incluem outros fatores mecânicos, térmicos e de transferência de massa, assim como ampliar os estudos sobre a dinâmica de uma película líquida fluindo para baixo em uma superfície inclinada, explorando outros problemas físicos de linhas de contato mais complexos. Considera-se também a possibilidade da abordagem de outros métodos numéricos para a resolução de sistemas não lineares, e suas comparações com o método usado aqui.

REFERÊNCIAS

- BARZILAI, J.; BORWEIN, J. M. Two-point step size gradient methods. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 8, 141-148, 1988.
- BATCHELOR, G. K. An introduction to fluid dynamics. *Cambridge University Press*, New York, 1994.
- BECKER, J.; GRUN, G. AND LENZ, M.; BONN AND RUMPF, M.; DUISBURG. Numerical methods for fourth order nonlinear degenerate diffusion problems. *Applications of Mathematics*, 6, 517-543, 2002.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport phenomena*. Second edition. New York: Wiley, 2002.
- CHANDRA, R.; DAGUM, L.; KOHR, D.; MAYDAN, D.; MCDONALD, J.; MENON, R. Parallel Programming in OpenMP. *Morgan Kaufmann Publishers*. USA, 2001.
- CHENG, W.; LI, D. H. A derivative-free nonmonotone line search and its application to the spectral residual method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 29, 814-825, 2009.
- DENNIS, J. E.; SCHNABEL, R. B. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. New Jersey: Prentice-Hall Inc, 1983.
- DUBROVIN, B. A.; FOMENKO, A. T.; NOVIKOV, S. P. *Modern geometry-methods and applications*. Springer, New York, 1984.
- GRIPPO, L; LAMPARIELLO, F; LUCIDI, S. A nonmonotone line search technique for Newton's Method. *Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 23, n. 4, p. 707-716, 1986.
- HENDERSON, N.; SAMPAIO, M.; PENA, L. Developing New Approaches for the Path Tubes Methods. *Applied Mathematical Modelling*, 35, p.285-302, 2011.
- ISOJÄRVI, T. *Unstable Thin Film Spreading of Volatile Binary Mixtures*. 2013. Master's Thesis – University of Jyväskylä.

ISRAELACHVILI, J. N. Intermolecular and Surface Forces. Third Edition. *Academic Press*, USA, 2011.

KAPLAN, W. *Advanced calculus*. Second edition. Wesley, London, 1973.

KELLY, C. T. *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*. SIAM, 1995.

KHESHGI, H. S. Profile Equations for Film Flows at Moderate Reynolds Numbers. *AIChE Journal*, vol. 35, pp.1719-1727, 1989.

KONDIC, L. Instabilities in Gravity Driven Flow of Thin Fluid Films. *SIAM Review*, vol. 45, pp.95-115, 2003.

LA CRUZ, W.; MARTÍNEZ, J. M.; RAYDAN, M. Spectral residual method without gradient information for solving large-scale nonlinear systems of equations. *Mathematics of Computation*, vol. 75, 1429-1448, 2006.

LA CRUZ, W.; RAYDAN, M. Nonmonotone spectral methods for large-scale nonlinear systems. *Optim. Methods Softw.*, 18, 583-599, 2003.

LEAL, L. G. Advanced Transport Phenomena – Fluid Mechanics and Convective Transport Processes. *Cambridge University Press*, New York, 2007.

LI, Y.; JEONG, D.; KIM, J. Adaptive mesh refinement for simulation of thin film flows. *Meccanica*, 49, 239–252, 2014.

MA, C.; LIU, J. Thin-film evolution and fingering instability of self-rewetting films flowing down an inclined plane. *Physics of Fluids*, 33, 000–000, 2021.

MILNE, E. A. Vectorial mechanics. *Interscience Publishers*, New York, 1948.

MYERS, T. G. Thin Films with high surface tension. *SIAM Review*, 40, 441-462, 1998.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. *Numerical Optimization*. Springer, 1999.

ORON, A.; DAVIS, S. H.; BANKOFF, S. G. Long-scale evolution of thin liquid films. *Reviews of Modern Physics*, vol. 69, 931-980, 1997.

RAYDAN, M. The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem. *SIAM J. OPTIM.*, vol. 7, pp.26-33, 1997.

SCHLICHTING, H.; GERSTEN, K. *Boundary-Layer Theory*, 9th ed., Springer, 2016.

SLATTERY, J. C. Advanced transport phenomena. *Cambridge University Press*, New York, 1999.

TRANGENSTEIN, J. A. *Numerical Solution of Hyperbolic Partial Differential Equations*. Cambridge University Press, 2007.

WITELSKI, T. P.; BOWEN, M. ADI schemes for higher-order nonlinear diffusion equations. *Applied Numerical Mathematics*, vol. 45, 331-351, 2003.

ZHORNITSKAYA, L.; BERTOZZI, A. L. Positivity preserving numerical schemes for lubrication-type equations. *SIAM J. Numer. Anal.* 37, 523-555, 2000.