XIX ENMC
ENCONTRO NACIONAL DE MODELAGEM COMPUTACIONAL
VII ECTM
ENCONTRO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE LANDAU-LEVICH PARA ALTURA DE FILMES FINOS

Adélcio Carlos de Oliveira - adelcio@ufsj.edu.br
Alexandre Celestino Leite Almeida - celestino@ufsj.edu.br
Universidade Federal de São João Del - Rei, Campus Alto Paraopeba - Ouro Branco, MG, Brazil
Departamento de Estatística, Física e Matemática

Resumo. *Neste trabalho estudamos a equação de Landau-Levich, no caso estacionário. A equação modela espessura de filme finos sob superfícies em movimento e pode ser considerada como um caso particular de difusão modelada por equações diferenciais de ordem superior. Utilizamos o método de Optimização de Parâmetros para a solução da equação em dois casos distintos. O método se mostrou eficaz para resolução desse tipo de equação não linear.*

Palavras-Chave: *Difusão, equação de Landau-Levich, Escoamento de filmes finos, método de otimização de parâmetros*

1. INTRODUÇÃO

O movimento Browniano foi primeiramente estudado matematicamente por Thiele (Thiele, 1880, 1903), onde ela deriva o movimento Browniano com incrementos e variâncias independentes e normalmente distribuídos, além de descrever procedimentos computacionais recursivos para filtragem e previsão (filtro Kalman (Kalman & Bucy, 1961)). O termo processo estocástico nasce devido ao uso de técnicas de análise de flutuações aletórias aplicadas ao Mercado de Opções na tese de doutorado de Louis Bachelier em 1900 sobre "a teoria De especulação"(Bachelier, 1900). Posteriormente e de maneira independente, Albert Einstein em 1905 (Einstein, 1905) relacionou o movimento errático de grãos de pólen à uma modelagem matemática com foco nos incrementos e variâncias, o que indiretamente confirmava a existência das moléculas e dos átomos. Essa ferramenta matemática tornou-se útil para análise de diversos fenômenos naturais e aplicações em Engenharia e entre outros (Vlahos & Isliker, 2008; Oliveira et al., 2013; Sistat & Pourcelly, 1999).

Apesar do grande sucesso da Teoria Estocástica, nem todos os fenômenos seguem distribuições normais. Até mesmo o caso do mercado de ações não se ajusta em modelos gaussianos, como frisou Sornette (Sornette, 2003) "*large market drops are "outliers" and that they reveal fundamental properties of the stock market*", cuja tradução literal é "Grandes quedas do mercado são "pontos fora da curva"que revelam propriedades fundamentais do mercado de ações". Na extensa obra do Físico erradicado no Brasil Constantino Tsallis existem vários exemplos onde a lógica Browniana falha (Tsallis and Bukman, 1996; Tsallis & Lenzi, 2002) (e referências destes) e com várias comprovações experimentais e/ou computacionais (Combe et al., 2015; Ott et al., 1991; Peng et al., 1993; Solomon et al., 1993; Bardou et al., 1994; Zaslavsky et al., 1994; Klafter & Zumofen, 1994). Já em 1937, Muskat apresenta em seu livro resultados que apontam para a necessidade de um tratamento matemático diferente no estudo do transporte de um fluido compressível por meio de um meio poroso, como fica evidente na equação (5), da página 132 da referência (Muskat, 1937). Atualmente, sabe-se que a difusão anômala é o processo que governa vários sistemas, desde as batidas do coração de um indivíduo (Peng et al., 1993), passando por sistemas biológicos simples (Paiva et al., 2013; Miramontes et al., 2014) com aplicações na área da aúde no estudo do câncer (Paiva et al., 2009) e no estudo da arterioesclerose (Hidalgo & Tello, 2017), sistemas físicos de grande magnitude como difusão de ondas sísmicas (Wegler, 2004), ou em escala muito maior das poeiras estelares (Hughes & Armitage, 2010). Como observado por Tsallis (Tsallis and Bukman, 1996; Tsallis & Lenzi, 2002), a frequência com que a difusão anômola, ou não convencional, é a abordagem adequada é tão grande que não podemos considera-la como um mero "desvio da curva"ou "outliers", sendo necessária portanto haver uma teoria subjacente, e a proposta do Tsallis é a da Mecânica Estatística não Extensiva.

Neste trabalho, mostra-se que a equação de Landau-Levich (Landau & Levich, 1942) para filmes finos pode é um caso particular da equação de padrão de lubrificação (Myers, 1998), tendo como resultado principal a soulução via Métos de Otimização de parâmetros (Oliveira, 2019). A principal vantagem do método é a sua facilidade de implementação e de ser aplicável a qualquer equação diferencial com problema de contorno que seja solúvel via integradores usuais.

2. DIFUSÃO ANÔMALA VIA DERIVADAS DE ORDEM SUPERIOR

Em geral, a introdução da tensão superficial na teoria padrão de lubrificação (Myers, 1998) leva a uma equação parabólica não-linear de quarta ordem do tipo

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left\{C\frac{h^3}{3}\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + f(h, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2})\right\} \tag{1}$$

onde $h = h(x,t)$ é a altura do filme de fluido. No caso estacionário, e equção é de terceira órdem, dada por

$$C\frac{h^3}{3}\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + f(h, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}) = K \tag{2}$$

onde K é uma constante. Esta equação foi usada para modelar fluxos de fluidos em vários casos, como revestimento, drenagem de espumas entre outros (Myers, 1998, 1996) . A abordagem de Bevilacqua e colaboradores (Bevilacqua et al., 2011a, 2013, 2016, 2011b) é na verdade um caso particular desse tipo de processo, que pode ser modelado, em sua forma mais geral, pela equação de ordem superior (Tehseen & Broadbridge, 2012) dada por

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{G(h)\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + f(h, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2})\right\} \tag{3}$$

onde $G(h)$ é uma função de h.

No caso em que $G(h) = -k_4$, e $f(h, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}) = k_2 \frac{\partial h}{\partial x}$, onde k_2 e k_4 são constantes, temos a equação

$$\frac{\partial h}{\partial t} = k_2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - k_4 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4}, \tag{4}$$

proposta por Bevilacqua e colaboradores para processos de difusão anômola (Bevilacqua et al., 2011a,b, 2013, 2016). Como observado por (Almeida & Oliveira, 2018), ela representa difusão anômola mas não pode ser considerada como sendo deduzida a partir de um processo com retenção. Um grande problema para este tipo de equação é que as soluções nem sempre permanecem positivas e a entropia do sistema nem sempre é crescente, portanto as escolhas de G e f devem ser criteriosas, como aponta Tehseen e Broadbridge (Tehseen & Broadbridge, 2012). Esse tipo de abordagem tem atraído atenção de pesquisadores brasileiros, principalmente pela facilidade de realização numérica (Bevilacqua et al., 2011a,b, 2013, 2016).

Seguindo nesta linha, como caso particular, o problema de modelagem para filmes finos tem sido objeto de estudo.

2.1 Equação para filmes finos no regime estacionário

A Eq. 3 em seu regime estacionário é dada por

$$\frac{\partial}{\partial x}\left\{G(h)\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + f(h, \frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial^2 h}{\partial x^2})\right\} = 0 \tag{5}$$

A equação de Landau-Levich, originalmente deduzida em (Landau & Levich, 1942), é obtida fazendo-se $G(h) = Ch^3$, e $f = 3U(h_\infty - h)$ e dada por

$$\frac{\partial}{\partial x}\left\{Ch^3\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + 3Uh_\infty - 3Uh\right\} = 0 \tag{6}$$

onde C é o inverso do número de capilaridade, h_∞ é a espessura de equilíbrio do filme e U é a velocidade do banho, suposta constante.

3. MÉTODOS

Para resolver a equação de Landau-Levich, utilizamos o método de otimização de Parâmetros (Oliveira, 2019). Consideramos o estado estacionário regido pela Eq. 6, da qual diretamente obtemos

$$\left\{Ch^3\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + 3Uh_\infty - 3Uh\right\} = \kappa. \tag{7}$$

onde κ é uma constante qualquer.

As condições de contorno foram fixadas para $x \in [0, 1]$, sendo conhecidas $h(0) = a$ e $h(1) = b$. E de valores deconhecidos $h'(0) = h'(1) = p_0$ e $h"(0) = z$. Apesar de em condições ideais h_∞ ser um parâmetro dado, consideramos o mesmo como um valor a ser buscado, uma vez que nem sempre é possível saber ao certo qual é este valor.

Primeiramente, reescrevemos a Eq. 7 fazendo $Y_1(x) = h(x)$, $Y_2(x) = h'(x)$, $Y_3(x) = h"(x)$, e obtemos o PVI:

$$\begin{bmatrix} Y_1' \\ Y_2' \\ Y_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_2 \\ Y_3 \\ \frac{3U}{CY_1^2} - \frac{3Uh_\infty}{CY_1^2} + \kappa \end{bmatrix} \tag{8}$$

O vetor inicial é

$$\begin{bmatrix} Y_1(0) \\ Y_2(0) \\ Y_3(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ p_0 \\ z \end{bmatrix} \tag{9}$$

sendo z, p_0 e h_∞ desconhecidos.

Definimos a seguinte função objetivo:

$$Obj(z, p_0, h_\infty) = [Y_1(1, z, p_0, h_\infty) - b]^2 + [Y_3(1, z, p_0, h_\infty) - p_0]^2, \tag{10}$$

onde $Y_i(x, z, p_0, h_\infty)$ é a solução em x do problema de valor inicial dado pelas equações 8 e 9 observados os valores de (z, p_0, h_∞).

O método consiste, então, em achar uma solução para o seguinte problema de otimização:

$$(z^*, p_0^*, h_\infty^*) = \arg \min_{z, p_0, h_\infty} Obj(z, p_0, h_\infty). \tag{11}$$

Os valores (z^*, p_0^*, h_∞^*) completam a parte desconhecida do PVI em questão, e uma solução pode ser encontrada.

O método de otimização utilizado neste trabalho foi o método do gradiente. Contudo, o método de otimização a ser utilizado pode ser de livre escolha. Na próxima seção, mostramos alguns resultados numéricos deste método.

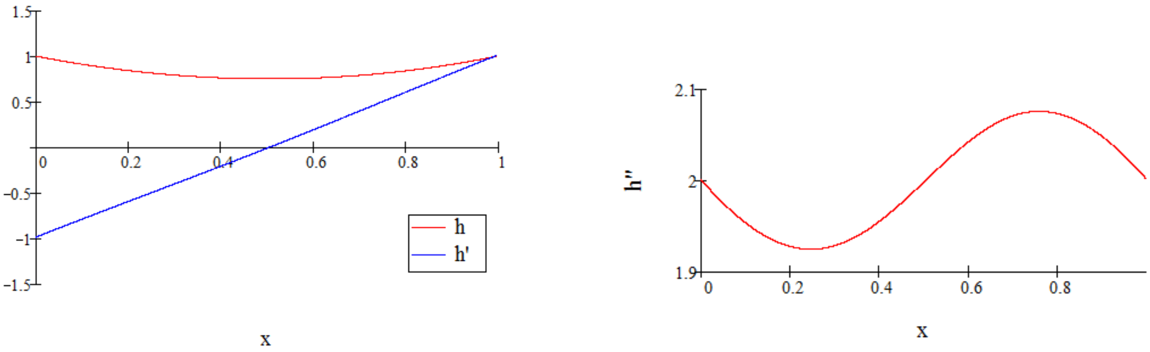
4. RESULTADOS NUMÉRICOS

As condições de contorno foram fixadas para $x \in [0, 1]$, sendo que para a Fig. 1 temos $\kappa = 0$, $h(0) = 1$, $h(1) = 1$, $h''(0) = h''(1) = p_0$" sendo que p_0, h_∞ e $h'(0) = z$ são encontrados via otimização. Os valores encontrados são $z = -0.987670346190658$, $h_\infty = 0.8154383794473$ e $p_0 = 2.001086864915693$.

Para Fig. 2 temos $\kappa = -1$, $h(0) = 1$, $h(1) = 1/2$, $h''(0) = h''(1) = p_0$" sendo que p_0, h_∞ e $h'(0) = z$ são encontrados via optimização. Os valores encontrados são $z = 0.045696625130407$, $h_\infty = 0.680352135527286$ e $p_0 = -0.800636407976613$.

5. CONCLUSÃO

Nesse trabalho nós mostramos que o Método de Otimização de Parâmetros (Oliveira, 2019) é eficaz na solução de problemas de contorno em equações diferenciais de órdem superior. Em particular, mostramos que é possível resolver a equa ção de Landau-Levich para duas condições de contorno distintas.



(a) h é a altura do filme e h' sua derivada primeira.

(b) h'' a derivada segunda de h

Figura 1- h, h' e h'' em função de x, para $h(0) = h(1) = 1$

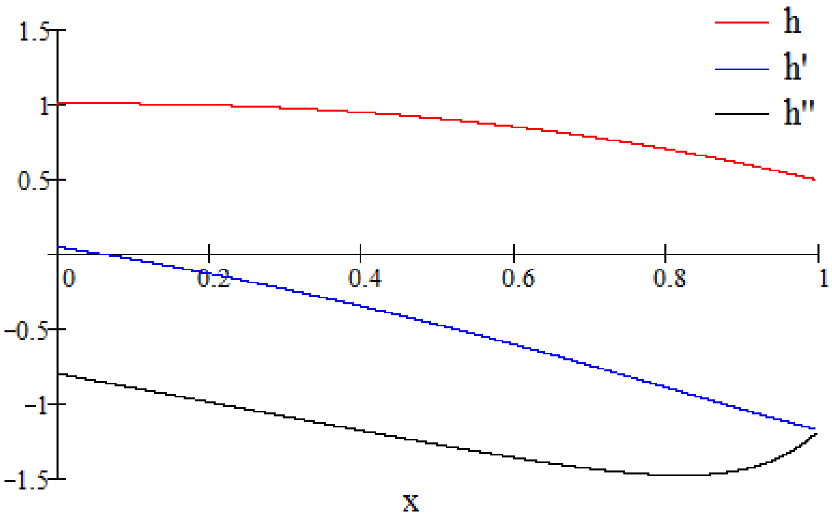


Figura 2- h é a altura do filme, h' sua derivada primeira e h'' a derivada segunda.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), através do termo APQ-01366-16.

Referências

Almeida, A. C. L. & Oliveira, A. C. .Diffusion processes modeled with higher order differential terms. Far East Journal of Applied Mathematics, artigo aceito para publicação.

Bachelier, L., The Theory of Speculation,Translated by D. May from, Annales scientifiques de l'Ecole Normale Supérieuré, Sér. 3,17(1900),p. 21-86 - Texto completo disponível em http://www.radio.goldseek.com/bachelier-thesis-theory-of-speculation-en.pdf

Bagley, R. L. & Torvik, P. J., Journal of Rheology 3, 133 (1986).

Bardou, F., Bouchaud, J.P., O. Emile, A. Aspect, C. Cohen- Tannoudji, Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 203.

Bevilacqua, L., Galeao, A. C., and Costa, F. P. A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion processes. *Anais da Academia Brasileira de Ciências 83* 12 , 1443 – 1464 (2011a).

Bevilacqua, L., Galeo, A. C. N. R., and Costa, F. P. On the significance of higher order differential terms in diffusion processes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering 33* , 166 – 175 (2011b).

Bevilacqua, L., Galeão, A. C. N. R., Simas, J. G., and Doce, A. P. R. A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering 35*, 4 (Nov 2013), 431–440.

Bevilacqua, L., Jiang, M., Silva Neto, A., and Galeão, A. C. R. N. An evolutionary model of bi-flux diffusion processes. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering 38*, 5 (Jun 2016), 1421–1432.

Carpinteri, A.,Chiaia, B. , Cornetti, P. ; Static-Kinematic duality and the principle of virtual work in the mechanics of fractal media, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 191 (2001) 3-19 .

Gaël Combe, Vincent Richefeu, Marta Stasiak, and Allbens P. F. Atman, Phys. Rev. Lett. 115, 238301, (2015).

Einstein, A., Ann. Phys. 17, 549 (1905).

Hidalgo, A. & Tello, L., Numerical simulation of a porous medium-type atherosclerosis initiation model, Computers and Fluids (2017), doi:10.1016/j.compfluid.2017.07.019

Hughes, A. L. H. & Armitage, P; J., Particle Transport in Evolving Protoplanetary Disks: Implications for Results from Stardust, The Astrophysical Journal, Volume 719, Number 2 (2010).

Incropera, F. P. & DeWitt, D. P. (2002). Fundamentals of heat and mass transfer. New York: J. Wiley.

Kalman, R. E. & Bucy, R. (1961). New results in linear filtering and prediction. Journal of Basic Engineering, 83 D, 95–108.

Klafter, J. & Zumofen, G. , Phys. Rev. E 49 (1994) 4873.

Landau, L. & Levich, B. , Dragging of a Liquid by a Moving Plate, Acta Physicochimica URSS, Vol. 17, No. 42, pp. 42-54 (1942).

Muskat, M. The flow of homogenous fluids through porous media (International series in physics). New York: McGraw- Hill, 1937.

Machado, J. T. & Galhano, A. M., A fractional calculus perspective of distributed propeller design, Commun Nonlinear Sci Numer Simulat **55** (2018) 174–182

Martin, P. A. , Thermal Grooving by Surface Diffusion: Mullins Revisited and Extended to Multiple Grooves, Quarterly of Applied Mathematics Vol. 67, No. 1 (2009), pp. 125-136

Miramontes, O. De Souza, O. Paiva, L. R., and Marins, A. e Orozco, S. , Plos One, v. 9, p. e111183, (2014).

Myers, T. G. , Thin Films with High Surface Tension, Society for Industrial and Applied Mathematics Vol. 40, No. 3, pp. 441-462 (1998).

Myres, T.G. , Surface tension driven thin film flows, in The Mechanics of Thin Film Coatings, Wiley, (1996).

Mullins, W. W. , Theory of Thermal Grooving, Journal of Applied Physics **28**, 333 (1957); doi: 10.1063/1.1722742

Oliveira, A. C.,Using the Parameter Optimization Method for Solving Differential Equations with Contour Conditions: The nonlinear Euler-Bernoulli beam. To appear in Discontinuity, Nonlinearity, and Complexity, 2019.

Oliveira, A. C.; Amado, F. D. R. and Moura, R. C. A. Steady state of ion transport in homopolar ion-exchange membrane: a theoretical study Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, (2016),38, 1165-1170.

Ott, A. ,Bouchaud, J.P. , Langevin, D. ,Urbach, W. , Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 2201; J.P. Bouchaud, A. Ott, D. Langevin, W. Urbach, J. Phys. II France 1 (1991) 1465.

Paiva, L.R ; Silva, H. S. ; Ferreira, S. C. ; Martins, M. L., Physical Biology (Online), v. 10, p. 025005, (2013).

Paiva, L. R. , Binny, C., Ferreira Jr., S. C. , and Martins, M. L., A Multiscale Mathematical Model for Oncolytic Virotherapy , Cancer Res , 69. (3). February 1, (2009) p. 1205.

Peng, C.K. et al. Long-range anticorrelations and non-Gaussian behavior of the heartbeat. Phys. Rev. Lett., v. 70, p. 1343–1346, 1993.

Peng, C.-K., Mietus, J. ,Hausdorff, J.M. ,Havlin, S. , Stanley, H.E. , Goldberger, A.L., Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 1343.

Sistat, P. & Pourcelly, G., (1999). Jour. Elec Chem., **460**, 53.

Solomon, T.H. , Weeks, E.R., Swinney, H.L. , Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 3975.

Sornette, D., Why Stock Markets Crash: Critical Events in Complex Financial System , Princeton University Press, (2003).

Thiele, T. N. (1880). Om Anvendelse af mindste Kvadraters Methode i nogle Tilfalde, hvor en Komplikation af visse Slags uensartede tilf aldige Fejlkilder giver Fejlene en 'systematisk' Karakter. Vidensk. Selsk. Skr. 5. Rk., naturvid. og mat. Afd., 12, 381–408. French version: Sur la Compensation de quelques Erreurs quasi-systématiques par la Méthode des moindres Carrés. Reitzel, Copenhague, 1880.

Thiele, T. N. (1903). Theory of Observations. Dayton, London. Reprinted in Annals of Mathematical Statistics 2,165–308, 1931.

Tehseen, N. & Broadbridge, P., Fourth Order Diffusion Equations with Increasing Entropy, Entropy 2012, 14, 1127-1139; doi:10.3390/e14071127.

Tsallis, C. & Lenzi, E. K., Chemical Physics 284 (2002) 341–347.
Tsallis, C. & Bukman, D. J., Phys. Rev. E 54, R2197(R) – (1996).
Vlahos, L. , Isliker, H., Normal and Anomalous Diffusion: A Tutorial, arXiv:0805.0419 [nlin.CD] (2008).
Vieira, Igor Pereira; Oliveira, Adélcio C. *Study of Diffusion Applied to Electrodialysis: Three-Dimensional Model in Cylindrical Coordinates*. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, (2016).
Wegler, U., Diffusion of seismic waves in a thick layer:Theory and application to Vesuvius volcano, JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, VOL. 109, B07303, (2004) doi:10.1029/2004JB003048.
Zaslavsky, G.M. , Stevens, D., Weitzner, H., Phys. Rev. E 48 (1993) 1683; G.M. Zaslavsky, Physica D 76 (1994) 110; Chaos 4 (1994) 25, and references therein.

NUMERICAL SOLUTION OF LANDAU-LEVICH EQUATION

Abstract.

In this work we study the equation of Landau-Levich, in the case stationary The equation modulates thin film thickness under moving surfaces and can be considered as a case diffusion model modeled by differential equations of higher order. We used the Parameter Optimization Method for the solutions of the Landau-Levich equation in two different cases. O This method proved been effective for solving this type of nonlinear differential equation and can be useful to large scope of nonlinear equations.

Keywords: Landau-Levich, Diffusion, Thin Films, Stationary Regime, Parameters Optimization Method