UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



DYNAMIKA TENKÝCH KVAPALNÝCH VRSTIEV

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2024 Bc. Andrea ŠEVČOVIČOVÁ

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

DYNAMIKA TENKÝCH KVAPALNÝCH VRSTIEV

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program:	Ekonomicko-finančná matematika a modelovanie
Študijný odbor:	Matematika
Školiace pracovisko:	Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci práce:	doc. RNDr. Peter Guba, PhD.

Bratislava 2024 **Bc. Andrea ŠEVČOVIČOVÁ**





Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Bc. Andrea Ševčovičová
Študijný program: ekonomicko-finančná matematika a modelovanie (Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)
Študijný odbor: matematika
Typ záverečnej práce: diplomová
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický

Názov: Dynamika tenkých kvapalných vrstiev
Dynamics of thin liquid films

Anotácia: PDR pre časo-priestorový vývoj tenkého kvapalného filmu. Konečno-diferenčná schéma na riešenie PDR kvapalného filmu. Konečné deformácie kvapalného filmu s neideálnou kontaktnou podmienkou.

Cieľ: Konštrukcia matematického modelu pre popis dynamiky prekorneálneho slzného filmu. Odvodenie evolučnej rovnice pre voľnú hranicu slzného filmu. Numerická analýza konečných deformácii a ruptúr filmu aplikáciou konečno-diferenčných metód. Porovnanie výsledkov modelu konštantnej rýchlosti evaporácie s modelom priestorovo-závislého parciálneho zmáčania.

Vedúci: doc. RNDr. Peter Guba, PhD.
Katedra: FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry: doc. Mgr. Igor Melicherčík, PhD.

Dátum zadania: 10.01.2023

Dátum schválenia: 11.01.2023

prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Poďakovanie Rada by som využila túto príležitosť na vyjadrenie úprimnej vďaky všetkým, ktorí mi pomohli pri vypracovaní tejto diplomovej práce.

V prvom rade by som chcela poďakovať môjmu školiteľovi, doc. RNDr. Petrovi Gubovi, PhD., za jeho neoceniteľnú pomoc, odborné vedenie a trpezlivosť počas celého procesu tvorby tejto diplomovej práce. Jeho výnimočná znalosť predmetu diplomovej práce a ochota zdieľať svoje skúsenosti so mnou mi umožnili hlbšie porozumieť teoretickým aspektom mojej práce a úspešne riešiť technické výzvy spojené s implementáciou.

Taktiež by som rada vyjadrila svoju vďaku mojej sestre za jej kreativitu a pomoc pri tvorbe niektorých ilustrácií a obrázkov, ktoré vizuálne obohatili moju diplomovú prácu a prispeli k estetickému a profesionálnemu vzhľadu celej práce.

Rovnako by som chcela vyjadriť vďaku mojej rodine, ktorá ma vždy povzbudila v časoch, keď mi kód nepočítal čo mal a motivovala ma skúšať to znova a znova.

Bez vašej podpory by táto diplomová práca nebola možná. Ešte raz ďakujem všetkým, ktorí ma inšpirovali a pomohli mi dosiahnuť tento míľnik.

Abstrakt v štátnom jazyku

ŠEVČOVIČOVÁ, Andrea: Dynamika tenkých kvapalných vrstiev [Diplomová práca], Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; školiteľ: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2024, 40 s.

Cieľom práce je formulácia a analýza kvapalno-dynamického modelu pre vývoj predrohovkového slzného filmu. Model zahrňuje vyparovanie, parciálne zmáčanie rohovky, kapilarity a transport tepla. Riadiace rovnice zahrňujú Navier-Stokesove rovnice pre rýchlostné pole a advektívno difúznu rovnicu pre teplotné pole v kvapalnej fáze.

Úplný model je redukovaný na skalárnu evolučnú parciálnu diferenciálnu rovnicu v limite tenkého kvapalného filmu. Numerické riešenia sú získané implementáciou v jazyku Python pomocou metódy sietí. Pôvodné výsledky sú získané pre prípad parciálneho a priestorovo závislého zmáčania rohovky slzným filmom.

Kľúčové slová: Slzný film, Python, Metóda sietí, Numerické metódy

Abstract

ŠEVČOVIČOVÁ, Andrea: Dynamics of Thin Liquid Films [Master's Thesis], Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; supervisor: doc. RNDr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2024, 40 pages.

The aim of the thesis is the formulation and analysis of a liquid-dynamic model for the development of pre-corneal tear film. The model includes evaporation, partial wetting of the cornea, capillarity, and heat transport. The governing equations include Navier-Stokes equations for velocity field and advection-diffusion equation for the temperature field in the liquid phase.

The complete model is reduced to a scalar evolutionary partial differential equation in the limit of a thin liquid film. Numerical solutions are obtained using method of lines in the Python language. Original results are obtained for the case of partial and spatially dependent wetting of the cornea by the tear film.

Keywords: Tear film, Python, Method of lines, Numerical methods

Obsah

Úvod **8**

1 Dynamický model slzného filmu **11**

1.1 Evolučné parciálne diferenciálne rovnice pre kvapalnú fázu 11

1.2 Okrajové podmienky medzi kvapalnou vrstvou a vzduchom 13

1.2.1 Podmienka nulového sklzu 14

1.2.2 Podmienka zachovania hmoty 14

1.2.3 Hydrodynamické podmienky 15

1.2.4 Podmienka zachovania tepla 17

1.3 Bezrozmerná formulácia 17

1.4 Rovnice v limite tenkej kvapalnej vrstvy 18

2 Evolučná parciálna diferenciálna rovnica slzného filmu **21**

2.1 Interpretácia parametrov 21

3 Numerická diskretizácia **23**

3.1 Metóda čiar 23

3.1.1 Formulácia úlohy 23

3.1.2 Priestorová diskretizácia pomocou metódy konečných diferencií . . . 23

3.1.3 Explicitná časová diskretizácia pomocou doprednej Eulerovej metódy 26

3.1.4 Implicitná časová diskretizácia pomocou spätnej Eulerovej metódy . 26

3.1.5 Priestorová diskretizácia PDR pre slzný film 27

3.2 Sústava obyčajných diferenciálnych rovníc v čase 28

3.3 Riešenie PDR pre slzný film 29

3.3.1 Prípad dokonalého zmáčania rohovky $B = 0$ 29

3.3.2 Prípad nedokonalého zmáčania rohovky $B = 10^{-5}$ 31

3.3.3 Prípad priestorovo-závislého zmáčania rohovky $B = B(x)$ 33

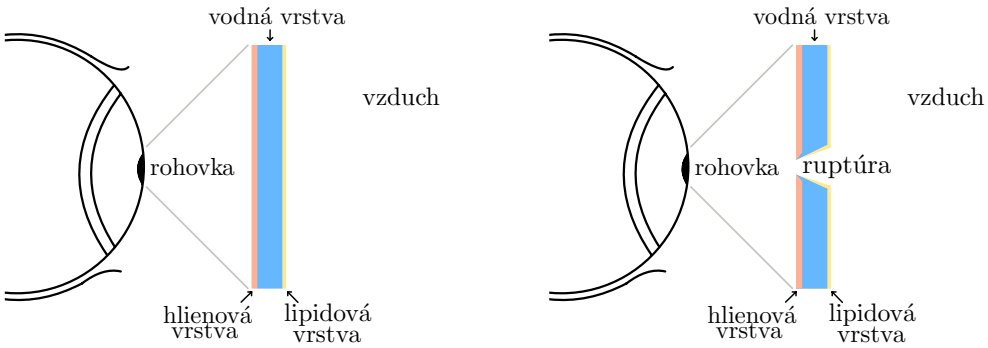
Záver **35**

Úvod

Dynamika tenkých kvapalných vrstiev je kľúčovou oblasťou vedy a techniky. Táto téma sa stala predmetom zvýšeného záujmu kvôli svojim aplikáciám v medicíne, materiálovom inžinierstve, a environmentálnych vedách. Zvlášť významné je štúdium tenkých kvapalných vrstiev v kontexte očnej fyziológie, ktoré hrá kritickú úlohu v udržiavaní zdravia a funkčnosti očí.

Na oku môžeme rozlišovať niekoľko tenkých filmov. Predrohovkový slzný film (*precorneal tear film*) je tenká vrstva tekutiny, ktorá pokrýva povrch rohovky. Má niekoľko dôležitých funkcií – vytvára hladký povrch rohovky, chráni rohovku a spojovku pred vysychaním, pôsobí ako ochrana proti infekcii, odvádza nečistoty a cudzie telieska z povrchu oka, zásobuje rohovku kyslíkom a živinami. Dysfunkcia tohto filmu vedie k suchým očiam a ďalším problémom.

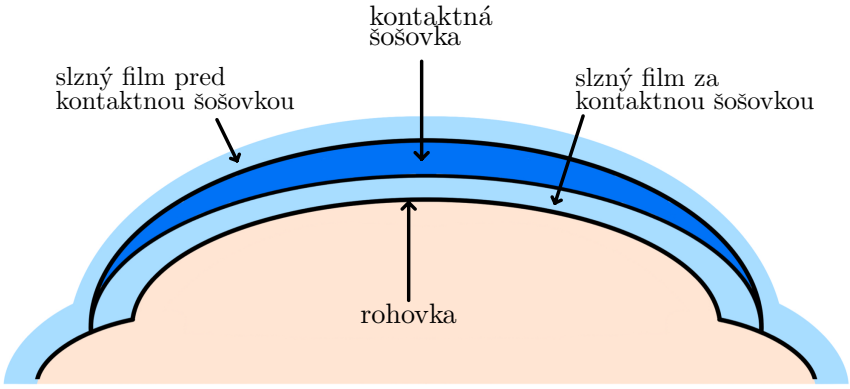
Predrohovkový slzný film sa skladá z troch vrstiev, ktoré môžeme pozorovať na obrázku 1a. Vonkajšia vrstva je tvorená lipidmi. Hrúbka tejto vrstvy je podľa [4] len približne 0,1 μm pre štandardné otvorené oko. Najhrubšia časť slzného filmu, približne 6 až 7 μm, je tvorená vodnou vrstvou. Posledná, najtenšia, vrstva slzného filmu je hlienová vrstva, ktorá má hrúbku iba niekoľko stotín μm (0,02μm - 0,05μm).



(a) Slzný film na oku. **(b)** Porušenie slzného filmu.

Obr. 1: Znázornenie vrstiev na slznom filme.

Pre užívateľov kontaktných šošoviek sú relevantné ďalšie dva typy slzného filmu: slzný film pred kontaktnou šošovkou (*prelens tear film*) a slzný film za kontaktnou šošovkou (*postlens tear film*), keďže kontaktná šošovka nie je v priamom kontakte s očným tkanivom ale pláva na slznom filme. Tieto tenké vrstvy sú znázornené na obrázku 2.



Obr. 2: Znázornenie slzného filmu na oku s kontaktnou šošovkou.

Slzný film pred kontaktnou šošovkou je obdobou predrohovkového slzného filmu, no nachádza sa na vrchnej strane prednej plochy kontaktných šošoviek. Striedavo prichádza do kontaktu so vzduchom a vnútornou stranou hornej a dolnej mihalnice. Skladá sa z vonkajšej lipidovej vrstvy a základnej vodnej vrstvy. Vodná vrstva je zvyčajne tenšia (3-4 μm) v porovnaní s vodnou vrstvou predrohovkového slzného filmu (7 μm), [3].

Slzný film za kontaktnou šošovkou je slzná vrstva medzi povrchom oka a zadnou plochou kontaktných šošoviek. Skladá sa z tenkej vodnej vrstvy (1 μm) a stlačenej hlienovej vrstvy, [2]. Hrúbka hlienovej vrstvy nie je známa, ale pravdepodobne je aspoň mierne tenšia než pre predrohovkový slzný film. Tento film hrá kritickú úlohu v zachovaní zdravia a funkčnosti oka pri nosení kontaktných šošoviek. Nedostatočne hrubý slzný film za kontaktnou šošovkou môže viesť k hypoxii rohovky a iným očným problémom.

Syndróm suchého oka

Syndróm suchého oka je jedným z najčastejšie sa vyskytujúcich očných ochorení. Podľa [5] trpí syndrómom suchého oka približne 20 percent pacientov očného lekára. V iných zdrojoch, napríklad [6], sa uvádza, že v Spojených Štátoch Amerických postihuje syndróm suchého oka približne 10 miliónov ľudí.

Ako syndróm suchého oka označujeme stav, kedy dochádza k ruptúram (roztrhnutiam) slzného filmu, znázorneným na obrázku 1b, v dôsledku nedostatočného zmáčania rohovky (nedostatku sĺz) alebo ich nadmernému vyparovaniu. Medzi najčastejšie príznaky tohoto ochorenia patrí pálenie alebo pocit cuzdieho telesa v oku. V pokročilom štádiu ochorenia môže medzi príznaky patriť aj bolesť alebo zhoršenie videnia, [5].

Matematické modely dynamiky slzného filmu

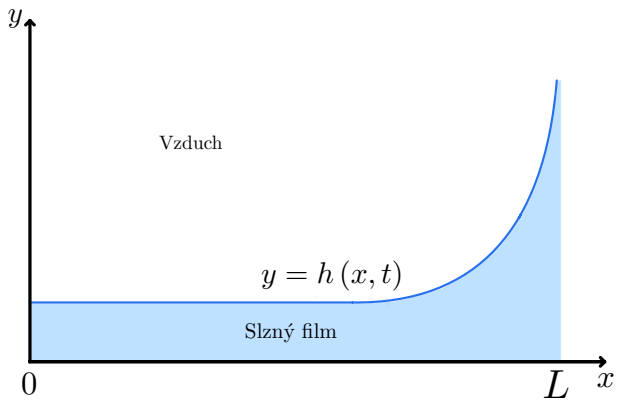
V našej práci sa budeme zameriavať na matematické modelovanie dynamiky predrohovkového slzného filmu. Matematické modelovanie slznej vrstvy pomocou parciálnych diferenciálnych rovníc umožňuje selektívne odstránenie alebo zahrnutie rôznych efektov, čo inak nie je možné u ľudských subjektov. Takéto modely dokázali poskytnúť lokálne odhady osmolarity pri prerušení slznej vrstvy, čo zatiaľ nie je možné priamo, [1].

1 Dynamický model slzného filmu

Slzný film na oku možno charakterizovať ako Newtonovskú kvapalinu, čo si vyžaduje zohľadnenie rovníc popisujúcich chovanie kvapaliny. Slzný film je umiestnený medzi hornou a dolnou mihalnicou, ktoré sa nachádzajú na pozíciách $x = \pm L$. Hrúbka slzného filmu je symetrická vzhľadom na bod $x = 0$, čo umožňuje modelovať slzný film na polovičnom intervale $[0, L]$.

1.1 Evolučné parciálne diferenciálne rovnice pre kvapalnú fázu

Na obrázku 3 je ilustrovaný typický profil hrúbky slzného filmu, označený ako $h(x,t)$ v pevnom časovom momente t.



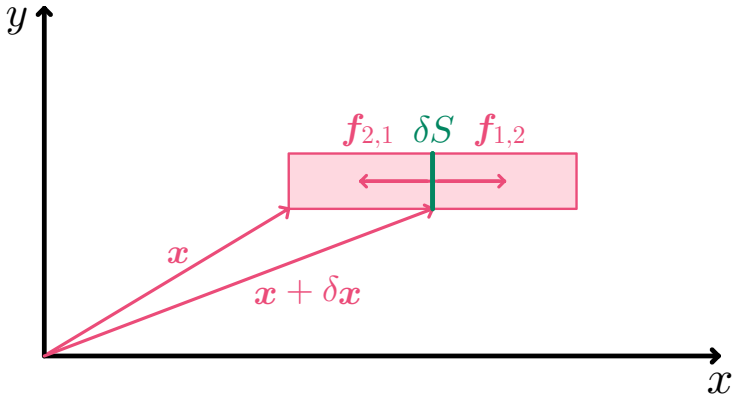
Obr. 3: Dvojrozmerný časovo závislý profil hrúbky slzného filmu v pevne zvolenom čase t.

Popis dynamiky slzného filmu vyžaduje rýchlostné pole kvapalnej fázy, ktoré označujeme vektorom $\mathbf{u} = [u(x,y,t), v(x,y,t)]^T$, kde u je horizontálna zložka rýchlosti a v je vertikálna zložka rýchlosti. Ďalšou veličinou je tlakové pole, označené ako $p = p(x,y,t)$. Pre ilustráciu, tlakové pole môžeme aproximovať v tvare $p \approx f_{1,2}/\delta S$, kde δS označuje spoločnú plochu a $f_{1,2}$ a $f_{2,1}$ silové pôsobenie medzi susediacimi konečnými prvkami, čo je zobrazené na obrázku 4.

Rovnice popisujúce rýchlostné pole $\mathbf{u}$ a tlakové pole p majú tvar:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \qquad \text{alebo} \qquad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{1}$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\, \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho g \hat{\mathbf{i}}, \tag{2}$$



Obr. 4: Ilustrácia susediacich konečných prvkov.

kde ρ je hustota kvapaliny, μ je dynamická viskozita a g je gravitačné zrýchlenie. V tejto práci uvažujeme konštantné hodnoty parametrov ρ, μ a g.

Pre detailnejšiu analýzu rozložíme rovnicu (2) do zložkového tvaru, pričom definujeme jednotkové vektory $\hat{\mathbf{i}}$ a $\hat{\mathbf{j}}$ v tvare $\hat{\mathbf{i}} = [1,0]^T$ a $\hat{\mathbf{j}} = [0,1]^T$. Skalárnym súčinom vektora $\hat{\mathbf{i}}$ s rovnicou (2) a využitím vzťahov

$$\begin{aligned}
\rho\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}\cdot\hat{\mathbf{i}} &= \rho\frac{\partial u}{\partial t},\\
\left[\rho\left(\mathbf{u}\cdot\nabla\right)\mathbf{u}\right]\cdot\hat{\mathbf{i}} &= \rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}\right),\\
\nabla p\cdot\hat{\mathbf{i}} &= \frac{\partial p}{\partial x},\\
\mu\nabla^2\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{i}} &= \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right),\\
\rho g\hat{\mathbf{i}}\cdot\hat{\mathbf{i}} &= \rho g
\end{aligned}$$

získame horizontálnu zložku rovnice (2) v tvare:

$$\rho\left[\frac{\partial u}{\partial t}+\left(u\frac{\partial}{\partial x}+v\frac{\partial}{\partial y}\right)u\right] = -\frac{\partial p}{\partial x}+\mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u+\rho g. \tag{3}$$

Jednotlivé členy v rovnici majú nasledovnú interpretáciu:

$$\begin{aligned}
\left(u\frac{\partial}{\partial x}+v\frac{\partial}{\partial y}\right) &: \text{advektívny člen (unášanie kvapaliny rýchlostným poľom)},\\
\frac{\partial p}{\partial x} &: \text{tlakový člen}\\
\mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) &: \text{viskózny člen}\\
\rho g &: \text{gravitačný člen}.
\end{aligned}$$

Podobne, skalárnym súčinom vektora $\hat{\mathbf{j}}$ s rovnicou (2) dostaneme pre vertikálnu zložku tvar:

$$\rho\left[\frac{\partial v}{\partial t}+\left(u\frac{\partial}{\partial x}+v\frac{\partial}{\partial y}\right)v\right]=-\frac{\partial p}{\partial y}+\mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)v, \tag{4}$$

pričom zohľadňujeme, že gravitačná zložka pôsobí len v horizontálnom smere, teda $\mathbf{g} = [g, 0]^T$.

Pri popise slzného filmu je potrebné zohľadniť aj efekt vyparovania, ktorý je ovplyvnený teplotným poľom $T = T(\mathbf{x}, t)$. Rovnica pre teplotné pole má tvar.

$$\rho C_p\left(\frac{\partial T}{\partial t}+(\mathbf{u}\cdot\nabla)\,T\right)=k\nabla^2 T, \tag{5}$$

kde člen $(\mathbf{u}\cdot\nabla)\,T$ reprezentuje advekciu, teda prenos tepla prostredníctvom rýchlostného poľa $\mathbf{u}$. Konštanty v tejto rovnici, C_p a k, predstavujú špecifické teplo a tepelnú vodivosť.

V prípade, keď nie je prítomné prúdenie ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$), sa rovnica (5) redukuje na štandardnú difúznu rovnicu.

$$\rho C_p\frac{\partial T}{\partial t}=k\nabla^2 T.$$

Rovnice tohoto typu sú základom pre formuláciu Stefanových úloh, ktoré popisujú fázové premeny s voľnými hranicami. Charakteristickým znakom týchto úloh je, že hranice oblasti nie sú vopred známe ale sú súčasťou samotného riešenia.

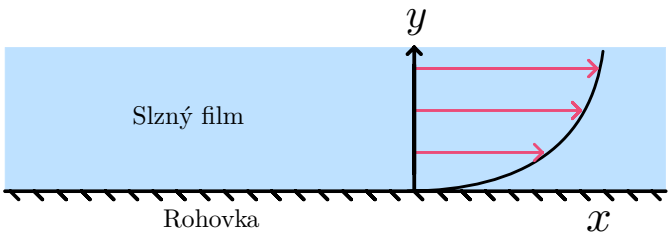
1.2 Okrajové podmienky medzi kvapalnou vrstvou a vzduchom

Ako prvú definujeme podmienku na spodnej hranici pre $y = 0$ a $u = v = 0$, ktorá sa označuje ako podmienka nulového sklzu. Pre $y = h\,(x, t)$ definujeme podmienky, ktoré budú vychádzať z rovníc (1), (2) a (5). Tieto podmienky sú:

- podmienka zachovania hmoty (*mass balance*), spojená s (1),
- hydrodynamické podmienky spojitosti normálového a tangenciálneho napätia kvapaliny pri prechode rozhraním (*normal and tangential stress balance*), spojená s (2),
- podmienka zachovania tepela (*heat conservation*), spojená s (5),

1.2.1 Podmienka nulového sklzu

Podmienka nulového sklzu hovorí o tom, že na spodnej hranici $y = 0$ kvapalina stojí, teda každý element má nulové rýchlostné pole, čo ilustruje obrázok 5. Alternatívne je možné túto podmienku interpretovať tak, že ak je kvapalina v kontakte s pevnou hranicou, tak sa po nej nekĺže. Z toho môžeme definovať $T = T_{eye}$, čo je konštanta.



Obr. 5: Ilustrácia podmienky nulového sklzu $\boldsymbol{u} = 0$ na hranici $y = 0$.

Okolo spodnej hranice existujú aj rôzne variácie, ako napríklad, či kvapalina reálne má alebo nemá nulový sklz, prípadne má nejakú malú mieru kĺzania sa po hranici, čo však predstavuje slabé efekty a v našej práci sa nimi nebudeme zaoberať.

1.2.2 Podmienka zachovania hmoty

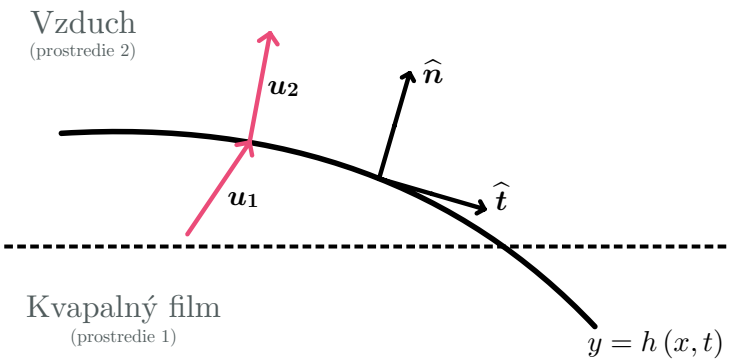
Podmienka zachovania hmoty vychádza z hmotnostného toku $\rho\boldsymbol{u}$, kde $[\rho\boldsymbol{u}] = \mathrm{kgm^{-2}s}$. Hmotnostný tok predstavuje množstvo kvapaliny, ktoré prechádza jednotkovou plochou za jednotku času. Obrázok 6 je ilustráciou k odvodeniu podmienky zachovania hmoty na rozhraní, kde $\hat{\boldsymbol{n}}$ a $\hat{\boldsymbol{t}}$ sú normálový a tangenciálny jednotkový vektor, ktoré sú definované v tvare $\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{1}{n}\left[-h_x, 1\right]^T$ a $\hat{\boldsymbol{t}} = \frac{1}{n}\left[1, h_x\right]^T$, kde $n \equiv (1 + h_x^2)^{\frac{1}{2}}$ a $h_x = \partial h/\partial x$. Podmienka zachovania hmoty má pre statické rozhranie, kedy $h = h\,(x)$, tvar

$$\rho_1 \boldsymbol{u}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}} = \rho_2 \boldsymbol{u}_2 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$$

Pre dynamické rozhranie je možné podmienku zachovania hmoty zovšeobecniť na tvar

$$\rho_1 \left(\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{V}\right) \cdot \hat{\boldsymbol{n}} = \rho_2 \left(\boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{V}\right) \cdot \hat{\boldsymbol{n}}, \tag{6}$$

kde V predstavuje rýchlosť rozhrania, $V = (\partial h/\partial t)\,\hat{\mathbf{j}}$, ktorá má iba vertikálnu zložku. Pre zjednodušenie zápisu v ďalšom texte zavedieme normálový hmotnostný tok $J \equiv \rho\left(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{V}\right) \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$.



Obr. 6: Ilustrácia podmienky zachovania hmoty na rozhraní kvapalný film/vzduch.

1.2.3 Hydrodynamické podmienky

Podmienka nulového sklzu (*no slip*) na $y = h(x,t)$ má tvar

$$\boldsymbol{u}_1\widehat{\boldsymbol{t}} = \boldsymbol{u}_2\widehat{\boldsymbol{t}}.$$

Ďalej potrebujeme špecifikovať podmienky pre spojitosť normálového a tangenciálneho napätia kvapaliny pri prechode rozhraním. Spojitosť celkového napätia na $y = h\,(x,t)$ môžeme zapísať vo vektorovom tvare

$$\underline{\underline{\sigma}}_2 \cdot \widehat{\boldsymbol{t}} - \underline{\underline{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{t}} = \gamma \nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}},$$

kde $\underline{\underline{\sigma}}$ je tenzor napätia, γ je koeficient povrchového napätia, pričom uvažujeme, že $\gamma =$ const.. $\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}$ predstavuje geometrické zakrivenie, pričom $[\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}] = \mathrm{m}^{-1}$. Poznamenávame, že koeficient povrchového napätia sa prejaví iba v prípade, ak je geometrická krivosť nenulová. Explicitne môžeme krivosť vyjadriť ako

$$\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \widehat{\boldsymbol{i}}\right) = -\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial h/\partial x}{\left(1 + (\partial h/\partial x)^2\right)^{\frac{1}{2}}}\right],$$

čo po linearizácii predstavuje približne $-\partial^2 h/\partial x^2$.

Tenzor napätia $\underline{\underline{\sigma}}$ reprezentuje lokálne napätie v kvapaline, teda $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}(\boldsymbol{x}, t)$. Rozmer $\underline{\underline{\sigma}}$ je $\left[\underline{\underline{\sigma}}\right] = \text{Pa} = \text{Nm}^{-2}$. Keďže slzný film prúdi, $\underline{\underline{\sigma}}$ závisí od hydrostatického tlaku $p(\boldsymbol{x}, t)$ a rýchlostného poľa $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$. Pre Newtonovskú kvapalinu je $\underline{\underline{\sigma}}$ definovaná ako

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + \frac{1}{2}\mu\left[\nabla\boldsymbol{u} + (\nabla\boldsymbol{u})^T\right],$$

kde $\underline{\underline{I}}$ je jednotkový tenzor a μ je koeficient dynamickej viskozity s rozmenrom $[\mu] = \text{Pas}$ a $\nabla\boldsymbol{u}$ je gradient rýchlostného poľa

$$\nabla\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} \partial u/\partial x & \partial u/\partial y \\ \partial v/\partial x & \partial v/\partial y \end{bmatrix}$$

s rozmerom $[\nabla\boldsymbol{u}] = \text{s}^{-1}$. Tento tenzor reprezentuje rýchlosť relatívnej deformácie kvapalných elementov.

Podmienky spojitosti normálového a tangenciálneho napätia na rozhraní potom môžeme vyjadriť ako

$$\left[\widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}\right]_1^2 = \gamma\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}},$$
$$\left[\widehat{\boldsymbol{t}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}\right]_1^2 = 0.$$

Pre prípad konštantného tlaku vo vzduchu (2) na $\widehat{\boldsymbol{n}}$ zložke dostaneme

$$\widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma_2}} \cdot \widehat{\boldsymbol{n}} - \widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma_1}} \cdot \widehat{\boldsymbol{n}} = \gamma\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}$$
$$-p_v - .\widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma_1}} \cdot \widehat{\boldsymbol{n}} = \gamma\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}},$$

kde p_v je konštantný tlak vzduchu. Táto rovnica platí pre prípad bez *conjoining pressure*, čo reprezentuje efekt tlaku na rozhraní, ak má rozhranie dynamické vlastnosti v zmysle vyparovania, čo je uvedené v [10]. Pridaním *conjoining pressure* dostávame

$$-p_v - \widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \underline{\underline{\sigma_1}} \cdot \widehat{\boldsymbol{n}} = \gamma\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}} - \Pi^*.$$

Conjoining pressure $\Pi^* = \Pi^*(h) = \frac{1}{6\pi}A^*\frac{1}{h^3}$, kde A^* je Hamakerova konštanta. Ak by sme sa pozreli na limitné situácie pre h konštantné, tak člen $\nabla \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}$ by bol nulový, tak Π^* je stále prítomné, čo znamená, že ak máme rovinné rozhranie, tak molekuly z neho odchádzajú (vyparujú sa) a tým pádom menia povrchové napätie aj keď rozhranie nie je zdeformované. Ak by sme sa pozreli na prípad, kedy je h veľké, teda máme veľké deformácie, tak efekt Π^* sa zmenšuje. Rozmery jednotlivých zložiek sú $[\Pi^*] = \text{Nm}^{-2}$, $[A^*] = \text{Nm}$ a $[\gamma] = \text{Nm}^{-1}$.

1.2.4 Podmienka zachovania tepla

Táto podmienka vychádza z toho, že na rozhraní dochádza k vyparovaniu, teda rozhranie je zdrojom latentného tepla, ktoré sa musí prejaviť. Matematicky môžeme túto podmienku vyjadriť ako

$$[k\widehat{\boldsymbol{n}} \cdot \nabla T]_1^2 = L_m J,$$

kde L_m je latentné teplo vyparovania. $J = \rho_1 (\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{V}) \cdot \widehat{\boldsymbol{n}}$, kde $\boldsymbol{V} = \partial h / \partial t \widehat{\boldsymbol{k}}$. Pre J môžeme odvodiť konštitučný vzťah

$$k^* J = \delta^* (p - p_v) + T - T_s.$$

T_s predstavuje referenčnú konštantná, saturačná, teplota, k^* je koeficient kinetiky vyparovania a δ^* je parameter vyparovacieho tlaku, teda

$$J = J(p, T) = \frac{\delta^*}{k^*} (p - p_v) + \frac{1}{k^*} (T - T_s).$$

1.3 Bezrozmerná formulácia

Z predošlého odvodenia dostávame dve nezávislé priestorové premenné x a y. Premennú $x = l\overline{x}$ vieme reprezentovať pomocou bezrozmernej premennej $\overline{x}$ a priestorovej škály l, kde $[l] = \mathrm{m}$, a premennú $y = d\overline{y}$ pomocou bezrozmernej premennej $\overline{y}$ a priestorovej škály $d = \epsilon l$, kde $[d] = \mathrm{m}$ a ϵ je malý bezrozmerný parameter.

Ďalej dostávame závislé premenné u a v, ktoré predstavujú horizontálnu a vertikálnu zložku vektora $\mathbf{u}(u, v)$. Vieme ich reprezentovať pomocou bezrozmerných premenných $u = U_0 \overline{u}$, kde U_0 je rýchlostná škála s rozmerom $[U_0] = \mathrm{ms}^{-1}$, a $v = V_0 \overline{v}$, kde $V_0 = \epsilon U_0$ je rýchlostná škála s rozmerom $[V_0] = \mathrm{ms}^{-1}$.

Čas t, ktorý je tiež nezávislá premenná, vieme reprezentovať pomocou bezrozmernej premennej $t = (l/U_0)\, \overline{t}$, kde l/U_0 je časová škála.

Porovnaním viskózneho a tlakového člena z Navier-Stokesovej rovnice dostávame bezrozmernú formuláciu pre tlakové pole $p = (\mu U_0 / l\epsilon^2)\, \overline{p}$, kde $\mu U_0 / l\epsilon^2$ je tlaková škála s rozmerom $[\mu U_0 / l\epsilon^2] = \mathrm{Pa}$. Pre teplotu dostávame bezrozmernú formuláciu $T = T_s + (T_{eye} - T_s)\, \overline{T}$, kde $\overline{T} = (T - T_s) / (T_{eye} - T_s)$.

Na odvodenie bezrozmernej formulácie rovnice pre vertikálnu zložku rýchlostného pola

(3) nahradíme pôvodné premenné pomocou formulácií s bezrozmernými parametrami

$$\rho\left(\frac{U_0^2}{l}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{t}}+\frac{U_0^2}{l}\overline{u}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{x}}+\frac{U_0^2}{l}\overline{v}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{y}}\right)=-\frac{\mu U_0}{\epsilon^2 l^2}\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{y}}+\frac{\mu U_0^2}{l^2}\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{x}^2}+\frac{\mu U_0^2}{\epsilon^2 l^2}\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{y}^2}+\rho g.$$

Prenásobením faktorom $\left(\epsilon^2 l^2\right)/\left(\mu U_0\right)$ dostávame upravený tvar

$$\epsilon^2\frac{\rho U_0 l}{\mu}\left(\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{t}}+\overline{u}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{x}}+\overline{v}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{y}}\right)=-\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{x}}+\epsilon^2\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{x}^2}+\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{y}^2}+\frac{\rho g d^2}{\mu U_0},$$

kde faktor $\frac{\rho U_0 l}{\mu}$ predstavuje Raynoldsovo číslo Re a $\frac{\rho g d^2}{\mu U_0}$ predstavuje bezrozmerný gravitačný parameter, ktorý budeme v ďalšom texte označovať G. Vo výsledku dostávame bezrozmernú rovnicu

$$\epsilon^2\mathrm{Re}\left(\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{t}}+\overline{u}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{x}}+\overline{v}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{y}}\right)=-\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{x}}+\epsilon^2\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{x}^2}+\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{y}^2}+G. \tag{7}$$

Podobne môžeme odvodiť aj bezrozmernú formuláciu rovnice pre horizontálnu zložku rýchlostného pola

$$\epsilon^4\mathrm{Re}\left(\frac{\partial\overline{v}}{\partial\overline{t}}+\overline{u}\frac{\partial\overline{v}}{\partial\overline{x}}+\overline{v}\frac{\partial\overline{v}}{\partial\overline{y}}\right)=-\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{y}}+\epsilon^4\frac{\partial^2\overline{v}}{\partial\overline{x}^2}+\epsilon^2\frac{\partial^2\overline{v}}{\partial\overline{y}^2} \tag{8}$$

a pre teplotnú rovnicu

$$\epsilon^2\mathrm{RePr}\left(\frac{\partial\overline{T}}{\partial\overline{t}}+\overline{u}\frac{\partial\overline{T}}{\partial\overline{x}}+\overline{v}\frac{\partial\overline{T}}{\partial\overline{y}}\right)=\epsilon^2\frac{\partial^2\overline{T}}{\partial\overline{x}^2}+\frac{\partial^2\overline{T}}{\partial\overline{y}^2}, \tag{9}$$

kde Pr je Prandtlovo číslo.

1.4 Rovnice v limite tenkej kvapalnej vrstvy

Limita tenkej kvapalnej vrstvy zodpovedá $\epsilon << 1$. Ak v bezrozmerných rovniciach pôjdeme s ϵ do nuly, dostávame

$$\begin{aligned}\frac{\partial\overline{u}}{\partial\overline{x}}+\frac{\partial\overline{v}}{\partial\overline{y}}&=0,\\ 0&=-\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{x}}+\frac{\partial^2\overline{u}}{\partial\overline{y}^2}+G,\\ 0&=-\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{y}},\\ 0&=\frac{\partial^2\overline{T}}{\partial\overline{y}^2}+G.\end{aligned}$$

Pre podmienky na rozhraní dostávame po prechode ϵ do nuly nasledovné bezrozmerné formulácie. Na $\overline{y}=0$ $\overline{u}=0,\ \overline{v}=0,\ \overline{T}=T_{eye}$.

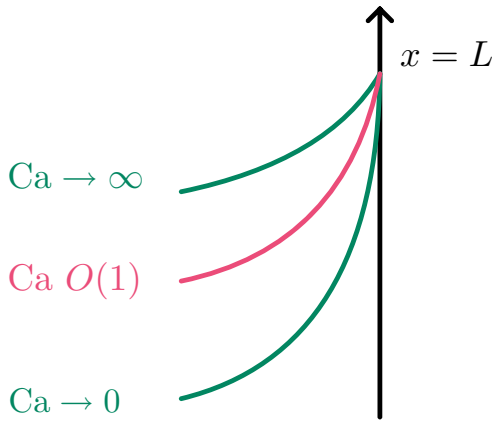
Na $\overline{y} = \overline{h}\left(\overline{\boldsymbol{x}}, \overline{t}\right)$ dostávame

$$E\overline{J} = -\overline{u}\frac{\partial \overline{h}}{\partial \overline{x}} - \overline{v}\frac{\partial \overline{h}}{\partial \overline{t}},$$

kde $\overline{J} = \{J\}\, J$ so škálou $\{J\} = \left(K\left(T_{eye} - T_s\right)\right) / \left(dL_m\right)$ a $E = \left(K\left(T_{eye} - T_s\right)\right) / \left(\epsilon dL_m U_0\right)$ je bezrozmerný parameter, ktorý predstavuje inverzné latentné teplo. Na $\overline{y} = \overline{h}\left(\overline{\boldsymbol{x}}, \overline{t}\right)$ rovnako platí aj

$$\overline{p} - \overline{p_v} = -\frac{1}{\mathrm{Ca}}\frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial \overline{x}^2} - A\frac{1}{\overline{h}^3},$$

kde Ca je kapilárny parameter definovaný ako $\mathrm{Ca} = \left(\mu U_0\right) / \left(\gamma \epsilon^3\right)$. Parameter kapilarity mení krivosť menisku, čo ilustrujeme na obrázku 7.



Obr. 7: Ilustrácia vplyvu kapilárneho parametra na tvar menisku.

Z kontinuity tangenciálnych napätí dostávame

$$\overline{u} = 0,$$

kde po redukcií zo strany vzduchu (prostredia 2) zanedbáme rýchlostné pole, teda dostávame 0 na pravej strane rovnice.

Pre tepelný tok dostávame podmienku

$$-\frac{\partial \overline{T}}{\partial \overline{y}} = \overline{J},$$

ktorá zabezpečuje väzbu medzi teplotnou rovnicou a rýchlostnou rovnicou.

Integráciou získaných rovníc dostávame nasledujúce tvary

$$\begin{aligned}
\overline{u}\left(\overline{x},\overline{y},\overline{t}\right) &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{x}} - G\right)\overline{y}\left(\overline{y}-\overline{h}\right),\\
\overline{v}\left(\overline{x},\overline{y},\overline{t}\right) &= \frac{1}{2}\frac{\partial^2\overline{p}}{\partial\overline{x}^2}\left(\frac{1}{3}\overline{y}^3 - \frac{1}{2}\overline{h}\overline{y}^2\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{\partial\overline{p}}{\partial\overline{x}} - G\right)\frac{\partial\overline{h}}{\partial\overline{x}}\overline{y}^2,\\
\overline{p}\left(\overline{x},\overline{t}\right) &= p_v - \frac{1}{\mathrm{Ca}}\frac{\partial^2\overline{h}}{\partial\overline{x}^2} - A\frac{1}{\overline{h}^3},\\
\overline{T}\left(\overline{x},\overline{y},\overline{t}\right) &= -\overline{J}\overline{y} + 1.
\end{aligned}$$

Elimináciou $\overline{u}$, $\overline{v}$, $\overline{p}$ a $\overline{T}$ dostaneme rovnicu pre $\overline{h} = \overline{h}\left(\overline{\boldsymbol{x}},\overline{t}\right)$. Pre zjednodušenie zápisu rovníc budeme ďalej používať označenie bez prúžku.

2 Evolučná parciálna diferenciálna rovnica slzného filmu

Výsledná rovnica pre hrúbku slzného filmu má tvar

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{E}{\overline{K}+h}\left[1-\delta\left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}+\Pi\right)\right]-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{h^3}{12}\left(\frac{\partial^3 h}{\partial x^3}+\frac{\partial \Pi}{\partial x}+G\right)\right],$$

kde

$$\Pi = \frac{1}{h^3}\left[A+B\left(2hh_x^2h_{xx}-h_x^4\right)\right]$$

a A, B, G, E, K a δ sú bezrozmerné parametre definované nasledovne:

$$\begin{aligned} A &= \frac{A^*}{\mu U_0 dl}, \quad B = \epsilon^4\frac{B^*}{\mu U_0 dl},\\ G &= \frac{\rho g d^2}{\mu U_0}, \quad E = \frac{k\Delta T}{\rho U_0 \epsilon d L_m},\\ \overline{K} &= \frac{kK}{dL_m}, \quad \delta = \frac{\alpha\mu U_0}{\epsilon^2 l\left(T_{eye}-T_s\right)}. \end{aligned}$$

Hraničné podmienky sú zvolené v tvare

$$\begin{aligned} h\left(\pm L,t\right) &= h^0,\\ h_{xx}\left(\pm L,t\right) &= h^0_{xx},\\ h(x,t=0) &= \begin{cases} h_{\min} & |x| < L-\Delta x_m,\\ h_{\min}+\Delta h_m\left(|x|-\left(L-\Delta x_m\right)\right)^2 & |x| \geq L-\Delta x_m. \end{cases} \end{aligned}$$

2.1 Interpretácia parametrov

Hamakerova konštanta A

V kontexte slzného filmu parameter A predstavuje veľkosť van der Waalsových síl pôsobiacich na slznú vrstvu. Tieto sily ovplyvňujú zmáčanie slzného filmu na povrchu rohovky.

Parameter parciálneho zmáčania rohovky B

Parameter B reprezentuje efektivitu zmáčania rohovky. Ak $B = 0$, tak ide o dokonalé zmáčanie rohovky, a pre $B \neq 0$ ide o čiastočné zmáčanie rohovky, ktoré vzniká pri kontakte dvoch prostredí s rôznym povrchovým napätím.

Efekt gravitácie G

Parameter G v kontexte slzného filmu zahŕňa vplyv gravitácie na rozloženie a tok slzného filmu. Tento efekt je dôležitý najmä pri väčších hrúbkach slzného filmu. Pri tenkých filmoch je efekt gravitácie potlačený povrchovým napätím.

Koeficient vyparovania E

Parameter E predstavuje rýchlosť, akou sa slzný film vyparuje z povrchu oka.

Koeficient viskozity $\overline{K}$

Parameter $\overline{K}$ charakterizuje vnútorné trenie v tekutine. Tento parameter reprezentuje disipáciu hybnosti prúdového poľa slzného filmu na povrchu oka.

Parameter δ

Parameter δ je úmerný rozdielu hydrodynamických tlakov medzi prostrediami, ktoré sú v kontakte (pozri obrázok 6). Tento parameter ovplyvňuje deformáciu slzného filmu a tvorbu ruptúr. Pre $\delta \neq 0$ hrúbka slzného filmu klesá pomalšie ako pre $\delta = 0$.

3 Numerická diskretizácia

3.1 Metóda čiar

Cieľom metódy čiar je transformovať priestorovo-časovú parciálnu diferenciálnu rovnicu na sústavu časových obyčajných diferenciálnych rovníc. Tento proces sa uskutočňuje diskretizáciou priestorovej oblasti, ktorú možno realizovať dvoma rôznymi prístupmi: (i) pomocou metódy konečných diferencií, (ii) využitím spektrálnej diskretizácie.

3.1.1 Formulácia úlohy

Uvažujme jednorozmernú priestorovú oblasť $\Omega \equiv [0, L]$, $x \in \Omega$ a časový interval $[0, T]$, $t \in [0, T]$. Numerickú diskretizáciu budeme ilustrovať na úlohe

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + g, \quad x \in (0, L), \quad t \in (0, T], \tag{10}$$

$$t = 0, \quad x \in [0, L]: \qquad u(x, 0) = a(x), \tag{11}$$

$$x = 0, \quad t \in (0, T]: \qquad u(0, t) = b(t), \tag{12}$$

$$x = L, \quad t \in (0, T]: \qquad \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{(L,t)} = c(t). \tag{13}$$

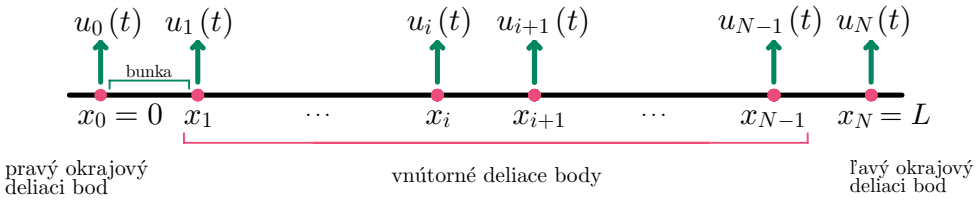
kde $u = u(x, t)$ je teplota (neznáma), $g = g(x, t)$ je zdrojový člen (známa alebo predpísaná funkcia), reprezentujúci generovanie alebo stratu tepla v oblasti, $a(x)$ je počiatočný profil teploty (známy), $b(t)$ je časovo závislá teplota predpísaná na ľavej hranici a $c(t)$ je časovo závislý teplotný gradient (tepelný tok) na pravej hranici.

3.1.2 Priestorová diskretizácia pomocou metódy konečných diferencií

Diskretizácia parciálnej diferenciálnej rovnice (10)
Pre diskretizáciu rovnice (10) pomocou metódy konečných diferencií najprv zavedieme priestorovú sieť nad oblasťou Ω. Táto sieť pozostáva z bodov

$$x_0 \equiv 0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{N-1} < x_N \equiv L,$$

čo ilustrujeme na obrázku 8, kde pre jednoduchosť predpokladáme, že každá bunka siete má rovnakú veľkosť $\Delta x \equiv x_{i+1} - x_i$ pre $i = 0, \ldots, N-1$.



Obr. 8: Ilustrácia diskretizácie priestorovej oblasti pre metódu čiar.

Uvažujme PDR vo vnútorných bodoch siete

$$\frac{\partial u\left(x_i,t\right)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u\left(x_i,t\right)}{\partial x_i^2} + g\left(x_i,t\right), \quad i = 1,\ldots,N-1. \tag{14}$$

Pre aproximáciu priestorovej derivácie v tejto rovnici použijeme centrálnu konečnú diferenciu s presnosťou druhého rádu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u\left(x_i,t\right)}{\partial x_i^2} &\approx \frac{u\left(x_{i+1},t\right) - 2u\left(x_i,t\right) + u\left(x_{i-1},t\right)}{\Delta x^2}, \\ &\equiv \frac{u_{i+1}\left(t\right) - 2u_i\left(t\right) + u_{i-1}\left(t\right)}{\Delta x^2}, \end{aligned} \tag{15}$$

kde $u_i(t) \equiv u\left(x_i,t\right)$.

Použitím aproximácie (15) v rovnici (14) získavame systém obyčajných diferenciálnych rovníc (ODR) v čase pre $N-1$ neznámych funkcií $u_1(t), u_2(t), \ldots, u_{N-2}(t), u_{N-1}(t)$,

$$\frac{\mathrm{d}u_i\left(t\right)}{\mathrm{d}t} = \kappa \frac{u_{i+1}\left(t\right) - 2u_i\left(t\right) + u_{i-1}\left(t\right)}{\Delta x^2} + g_i\left(t\right). \tag{16}$$

Pôvodnú priestorovo-časovú PDR sme tak zredukovali na systém časových ODR.

Diskretizácia počiatočnej podmienky (11)

Pomocou počiatočnej podmienky (11) môže byť explicitne reprezentovaný pre každý diskrétny bod pozdĺž našej priestorovej siete ako

$$u_i(0) \equiv u(x_i,0) = a(x_i), \tag{17}$$

kde i zahŕňa všetky body siete (vrátane okrajových bodov). Každá $u_i(t)$ zodpovedá špecifickému sieťovému bodu x_i a jej počiatočná hodnota je daná hodnotou $a(x_i)$.

Diskretizácia okrajovej podmienky (12)

Na ľavom okraji $x = 0$ potrebujeme skonštruovať ODR pre $u_0\left(t\right)$, ktorá musí vychádzať

z okrajovej podmienky (12). Túto ODR môžeme skonštruovať derivovaním podmienky (12).

$$x = 0,\ t \in (0, T] : \qquad \frac{\mathrm{d}u_0(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t}.$$

Z rovnice (17) pre $i = 0$ máme ďalej podmienku $a(x_0) = b(0)$, ktorá zabezpečuje konzistentnosť okrajovej podmienky s počiatočnou podmienkou.

Diskretizácia okrajovej podmienky (13)

Priestorovú deriváciu v okrajovej podmienke (13) aproximujeme pomocou konečnej diferencie druhého rádu a dostaneme

$$\frac{u_{N+1}(t) - u_{N-1}(t)}{2\Delta x} = c(t). \tag{18}$$

Platnosť diskretizovanej PDR (16) predĺžime do bodu $i = N$ (pravý okraj oblasti), eliminujeme $u_{N+1}(t)$ pomocou (18) a dostávame

$$\frac{\mathrm{d}u_N(t)}{\mathrm{d}t} = \kappa \frac{2c(t)\Delta x - 2u_N(t) + 2u_{N-1}(t)}{\Delta x^2} + g_N(t). \tag{19}$$

ODR (19) uzatvára systém rovníc pre $u_i(t)$ vo všetkých bodoch siete.

Zhrnutie

Vo výsledku dostávame systém obyčajných diferenciálnych rovníc

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}u_0(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t} \\
\frac{\mathrm{d}u_i(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\kappa}{\Delta x^2}\left[u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)\right] + g_i(t), \qquad i = 1, \ldots, N-1 \\
\frac{\mathrm{d}u_N(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{2\kappa}{\Delta x^2}\left[c(t)\Delta x - u_N(t) + u_{N-1}(t)\right] + g_N(t)
\end{aligned} \tag{20}$$

s počiatočnými podmienkami

$$\begin{aligned}
u_0(t) &= b(0), \\
u_i(0) &= a(x_i), \quad i = 1, \ldots, N.
\end{aligned} \tag{21}$$

3.1.3 Explicitná časová diskretizácia pomocou doprednej Eulerovej metódy

Diskretizáciou (20) a (21) pomocou doprednej Eulerovej schémy v časovej oblasti máme

$$\begin{aligned}
\frac{u_0^{n+1}-u_0^n}{\Delta t} &= b^{'}(t^n),\\
\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} &= \frac{\kappa}{\Delta x^2}(u_{i+1}^n-2u_i^n+u_{i-1}^n)+g_i(t^n), \qquad i=1,2,\ldots,N-1,\\
\frac{u_N^{n+1}-u_N^n}{\Delta t} &= \frac{2\kappa}{\Delta x^2}(c(t^n)\Delta x-u_N^n+u_{N-1}^n)+g_N(t^n),\\
u_0^0 &= b(0),\\
u_i^0 &= a(x_i), \qquad i=1,2,\ldots,N.
\end{aligned}$$

Funkcia $f(u,t)$ je lineárna v u, čo umožňuje vyjadriť neznáme u_i^n explicitne v tvare

$$\begin{aligned}
u_0^{n+1} &= u_0^n + b^{'}(t^n)\Delta t\\
u_i^{n+1} &= u_i^n + \frac{\kappa\Delta t}{\Delta x^2}\left[u_{i+1}^n-2u_i^n+u_{i-1}^n\right]+g_i\left(t^n\right)\Delta t, \quad i=1,2,\ldots,N-1,\\
u_N^{n+1} &= u_N^n + \frac{2\kappa\Delta t}{\Delta x^2}\left[c\left(t^n\right)\Delta x-u_N^n+u_{N-1}^n\right]+g_N\left(t^n\right)\Delta t\\
u_0^0 &= b\left(0\right),\\
u_i^0 &= a\left(x_i\right), \quad i=1,2,\ldots,N,
\end{aligned}$$

kde $i=1,2,\ldots,N$ a $n=1,2,\ldots,N_t$.

Dopredná Eulerova schéma je stabilná, ak časový krok Δt spĺňa podmienku

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\kappa} \equiv \Delta t_{\max}. \tag{22}$$

3.1.4 Implicitná časová diskretizácia pomocou spätnej Eulerovej metódy

Dopredná Eulerova metóda nie je vždy najvhodnejšou voľbou, pretože vyžaduje splnenie kritéria (22). Rovnako môžu nastať situácie, kedy potrebujeme zvoliť Δt také, ktoré kritériu stability (22) nevyhovuje, napríklad, ak máme záujem o asymptotické chovanie riešenia pre $t \to \infty$. V takýchto prípadoch je vhodné použitie implicitných metód na riešenie obyčajných diferenciálnych rovníc.

Spätnú Eulerovu metódu môžeme vyjadriť v tvare

$$u^{n+1} = u^n + f\left(u^{n+1}, t^{n+1}\right)\Delta t, \quad n=0,1,\ldots,N_t-1.$$

Ak túto schému aplikujeme na náš systém, dostaneme sústavu rovníc

$$\begin{aligned}
\frac{u_0^{n+1}-u_0^n}{\Delta t} &= b'(t^{n+1}),\\
\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t} &= \frac{\kappa}{\Delta x^2}(u_{i+1}^{n+1}-2u_i^{n+1}+u_{i-1}^{n+1})+g_i(t^{n+1}), \qquad i=1,2,\ldots,N-1,\\
\frac{u_N^{n+1}-u_N^n}{\Delta t} &= \frac{2\kappa}{\Delta x^2}(c(t^{n+1})\Delta x-u_N^{n+1}+u_{N-1}^{n+1})+g_N(t^{n+1}).
\end{aligned}$$

V maticovom tvare ide o systém lineárnych rovníc $\mathbf{A}\cdot\mathbf{u}^{n+1}=\mathbf{b}$, kde $\mathbf{A}$ je matica koeficientov s nulovými zložkami okrem

$$\begin{aligned}
A_{0,0} &= 1,\\
A_{i,i-1} = -\frac{\kappa}{\Delta x^2/\Delta t}, \qquad A_{i,i} &= 1+2\frac{\kappa}{\Delta x^2/\Delta t}, \quad A_{i,i+1} = -\frac{\kappa}{\Delta x^2/\Delta t}, \quad i=1,\ldots,N-1,\\
A_{N,N-1} = -2\frac{\kappa}{\Delta x^2/\Delta t}, \quad A_{N,N} &= 1+2\frac{\kappa}{\Delta x^2/\Delta t},
\end{aligned}$$

a $\mathbf{u}^{n+1}=\left[u_0^{n+1},u_1^{n+1},\ldots,u_N^{n+1},u_{N+1}^{n+1}\right]^T$ je vektor neznámych.

3.1.5 Priestorová diskretizácia PDR pre slzný film

V tejto časti predstavujeme semidiskretizáciu parciálnej diferenciálnej rovnice pre vnútorné body, ktorá modeluje dynamiku hrúbky slzného filmu na oku. Výsledná PDR je uvedená v kapitole 2.

Na aproximáciu priestorových derivácií v práci využívame centrálnu konečno-diferenčnú schému.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial h}{\partial x} &= \frac{h_{i+1}(t)-h_{i-1}(t)}{2\Delta x},\\
\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} &= \frac{h_{i+1}(t)-2h_i(t)+h_{i-1}(t)}{\Delta x^2},\\
\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} &= \frac{h_{i+2}(t)-2h_{i+1}(t)+2h_{i-1}(t)+h_{i-2}(t)}{2\Delta x^3}.
\end{aligned}$$

Priestorovú deriváciu Π môžeme vyjadriť tiež pomocou centrálnej konečno-diferenčnej schémy

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x} = \frac{\Pi_{i+1}-\Pi_{i-1}}{2\Delta x},$$

kde Π_i predstavuje

$$\Pi_i = \frac{1}{h_i^3}\left[A+B\left(2h_i\left(\frac{h_{i+1}-h_{i-1}}{2\Delta x}\right)^2\frac{h_{i+1}-2h_i+h_{i-1}}{\Delta x^2}-\left(\frac{h_{i+1}-h_{i-1}}{2\Delta x}\right)^4\right)\right].$$

Zavedieme označenie

$$U(x) = \frac{h^3}{12}\left(\frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + \frac{\partial \Pi}{\partial x} + G\right),$$

čím po diskretizácii dostávame

$$U_i = \frac{h_i^3}{12}\left(\frac{h_{i+2} - 2h_{i+1} + 2h_{i-1} + h_{i-2}}{2\Delta x^3} + \frac{\Pi_{i+1} - \Pi_{i-1}}{2\Delta x} + G\right).$$

Finálna semidiskretizovaná rovnica pre vnútorné body má tvar

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{E}{\overline{K} + h_i}\left[1 - \delta\left(\frac{h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1}}{\Delta x^2} + \Pi_i\right)\right] - \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2\Delta x}.$$

Podobné odvodenie by sme analogicky vedeli získať aj pre okrajové body.

3.2 Sústava obyčajných diferenciálnych rovníc v čase

V našej práci budeme na numerické riešenie využívať programovací jazyk Python, konkrétne knižnicu *SciPy* so solverom `solve_ivp`. Riešenie budeme hľadať prevažne na intervale $[-L, L]$, kde nie je potrebné definovať podmienku na zachovanie symetrie riešenia pre $x = 0$.

Na numerické riešenie počiatočnej úlohy budeme používať metódu BDF (Backward Differentiation Formula). Metóda BDF je implicitná metóda a patrí do skupiny lineárnych multikrokových metód. V metóde BDF sa derivácia $\mathrm{d}u/\mathrm{d}t$ v časovom okamihu t^{n+1} aproximuje pomocou lineárnej kombinácie hodnôt u v predchádzajúcich okamihoch t^{n+1-i}, t.j.:

$$\frac{\mathrm{d}u^{n+1}}{\mathrm{d}t} \approx \sum_{i=0}^{k} \alpha_i u^{n+1-i},$$

kde k je rád metódy (počet predchádzajúcich krokov, ktoré sa berú do úvahy) a α_i sú koeficienty určené podľa konkrétneho rádu metódy. Hodnotu u^{n+1} potom získame riešením implicitnej rovnice:

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(t_{n+1-i}, u^{n+1-i}),$$

kde Δt je krok integrovania a β_i sú ďalšie koeficienty, ktoré súvisia s váhami diferenciálnej časti formuly. Táto metóda je implementovaná v `solve_ivp` v *SciPy*, a je vhodná pre situácie, kde je potrebná vysoká stabilita pri riešení tzv. "*stiff*"systémov.

3.3 Riešenie PDR pre slzný film

V tejto časti sa budeme zaoberať riešením PDR pre hrúbku slzného filmu pomocou rovnomerne rozdelenej priestorovej oblasti, podobne ako v článku [9]. Na rozdiel od článku [9] budeme riešenie hľadať aj na celkom intervale $[-L, L]$, čo v našich výpočtoch vykazuje lepšiu numerickú stabilitu riešení ako riešenie na intervale $[0, L]$ alebo $[-L, 0]$, pričom vo všetkých výpočtoch uvažujeme hodnotu $L = 14$. Uvedieme tiež výsledky pre prípad priestorovo-závislého kapilárneho parametra $B = B(x)$. Tento prípad nebol v literatúre doteraz študovaný.

Pre aproximáciu priestorových derivácií použijeme konečné diferencie s presnosťou $O(\Delta x^2)$. Výnimku predstavuje aproximácia tretej derivácie v druhom a predposlednom diskretizačnom bode, kde použijeme schému s presnosťou $O(h)$, ktorá zabezpečuje stabilnejšie správanie pri zväčšovaní počtu časových krokov. Navyše pri hľadaní riešenia na polovičnom intervale je potrebné nastaviť nulovú deriváciu v bode $x = 0$, pre zabezpečenie symetrie riešenia okolo bodu $x = 0$. Toto nastavenie spôsobuje rozdiely v časoch pretrhnutia slzného filmu získaných v našej práci a v práci [7].

Pri numerickom riešení budeme uvažovať hodnoty parametrov $E = 14,1$ a $K = 4930$, čo korešponduje s nastavením parametrov v článku [9]. Ďalej nastavíme parametre $h_{min} = 1$, $h^0 = 9$, $h^0_{xx} = 4$ a $\Delta x_m = \Delta h_m = 2$. Pre rôzne prípady nastavenia zvyšných parametrov budeme uvažovať rôzne hodnoty N, aby sme optimalizovali výpočtovú náročnosť.

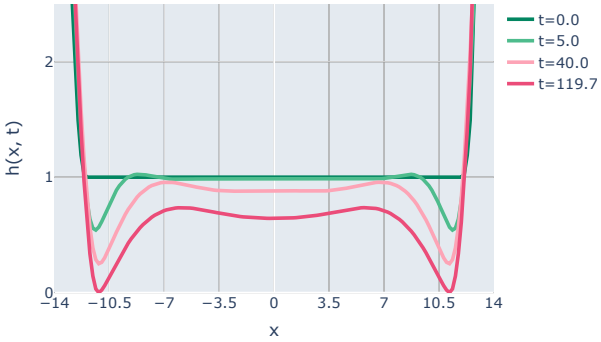
3.3.1 Prípad dokonalého zmáčania rohovky $B = 0$

V tejto časti rozoberieme prípad pre dokonalé zmáčanie rohovky ($B = 0$). Dokonalé zmáčanie rohovky je ideálny stav, v ktorom slzný film úplne a bez prerušenia pokrýva rohovku. Tento prístup umožňuje preskúmať dynamiku slzného filmu bez komplikácií spôsobených nehomogénnosťou pokrytia rohovky slzným filmom, čo je často prítomné pri nenulových a priestorovo-závislých hodnotách B.

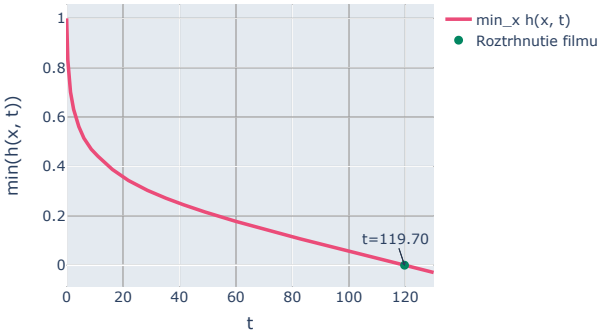
Riešenie pre parametre $A = G = \delta = 0$

Ako prvým sme sa zaoberali prípadom konštantného vyparovania s dokonalým zmáčaním rohovky bez prítomnosti van der Waalsovej interakcie, čo zodpovedá parametrom $A = B = G = \delta = 0$. Tento prípad je popísaný aj v práci [9]. Kvantitatívny rozdiel na-

šich výsledkov oproti výsledkom v práci [9] prisudzujeme použitiu výkonnejších počítačov umožňujúcich jemnejšiu diskretizáciu v priestorovej a časovej oblasti.

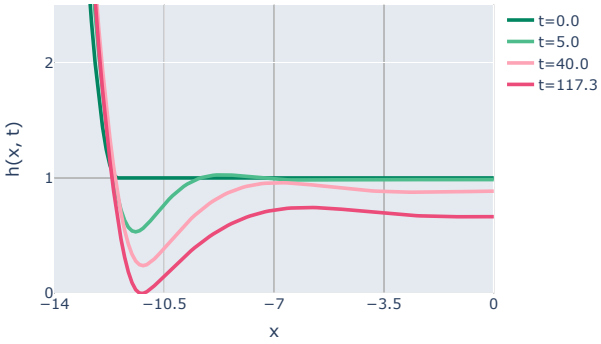


(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch.

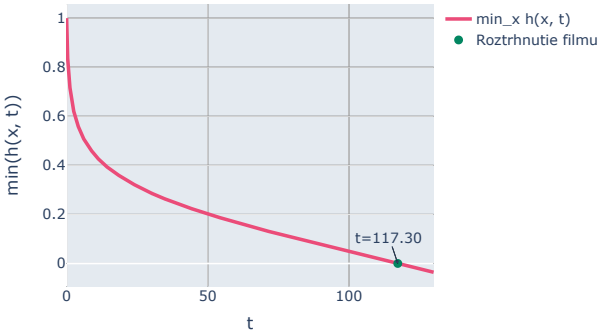


(b) Vývoj minimálnej hrúbky profilu riešenia.

Obr. 9: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 14]$ pre prípad konštantného vyparovania, dokonalého zmáčania rohovky a bez prítomnosti van der Waalsovej interakcie $A = B = G = \delta = 0$.



(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch.



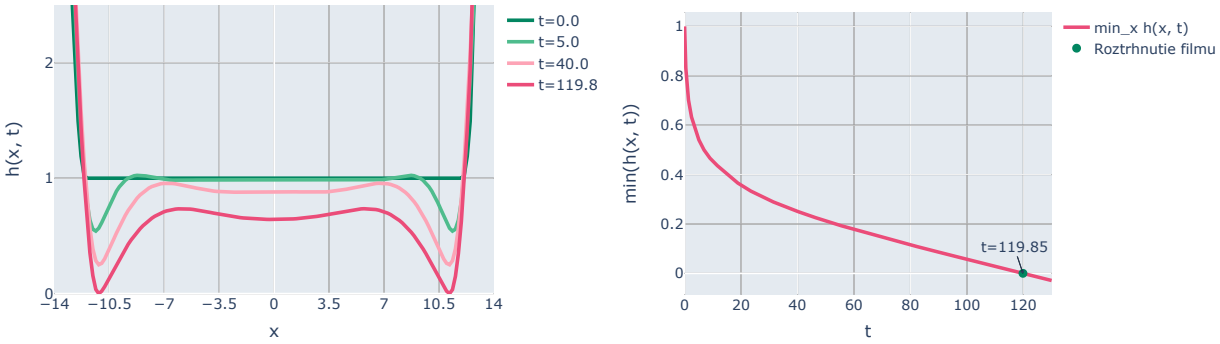
(b) Vývoj minimálnej hrúbky profilu riešenia.

Obr. 10: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 0]$ pre prípad konštantného vyparovania, dokonalého zmáčania rohovky a bez prítomnosti van der Waalsovej interakcie $A = B = G = \delta = 0$.

Na obrázku 9a môžeme vidieť profily riešenia na intervale $[-14, 14]$ pre zvolené parametre vo vybratých časoch. Tieto výsledky môžeme porovnať s riešením na polovičnom intervale $[-14, 0]$, ktoré je zobrazené na obrázku 10a, kde k roztrhnutiu slzného filmu dochádza o niečo skôr. Tento jav je možné vysvetliť vyššou hustotou deliacich bodov použitých pre polovičný interval (150 deliacich bodov pre celý interval, 120 deliacich bodov pre polovičný interval).

Riešenie pre parametre $A = G = 0$ a $\delta = 10^{-3}$

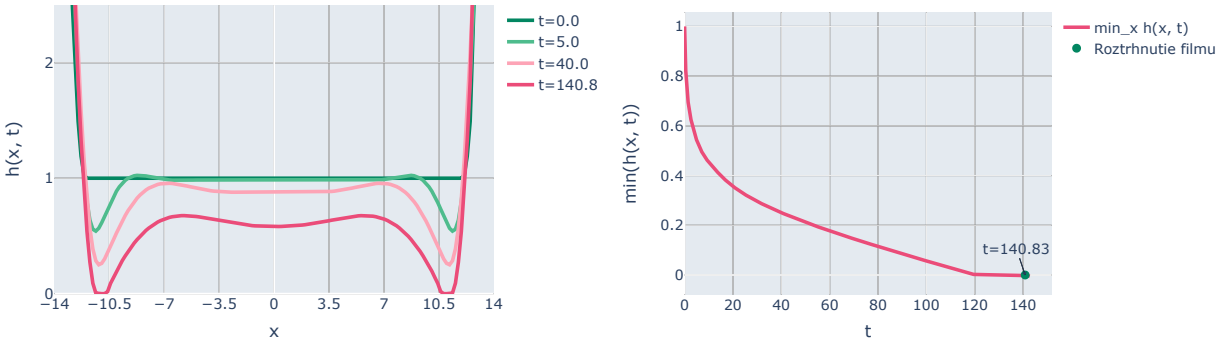
Prípad $\delta = 10^{-3}$ zodpovedá nekonštantnému vyparovaniu slzného filmu. Pri riešení na intervale $[-14, 14]$ sme použili 150 deliacich bodov. Čas roztrhnutia slzného filmu je podobný ako v prípade konštantného vyparovania, približne $t = 119.9$ pre 150 deliacich bodov.



(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch. **(b)** Vývoj minimálnej hrúbky profilu riešenia.

Obr. 11: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 14]$ pre prípad konštantného vyparovania, dokonalého zmáčania rohovky a bez prítomnosti van der Waalsovej interakcie $A = B = G = 0$ a $\delta = 10^{-3}$.

Riešenie pre parametre $A = 10^{-6}$, $G = 0$ a $\delta = 4,5 \times 10^{-8}$



(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch. **(b)** Vývoj minimálnej hrúbky profilu riešenia.

Obr. 12: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 14]$ pre prípad konštantného vyparovania, dokonalého zmáčania rohovky s prítomnosťou van der Waalsovej interakcie $A = 10^{-6}$, $B = G = 0$ a $\delta = 4,5 \times 10^{-8}$.

Takéto nastavenie zodpovedá prípadu s dokonalým zmáčaním, konštantným vyparova-

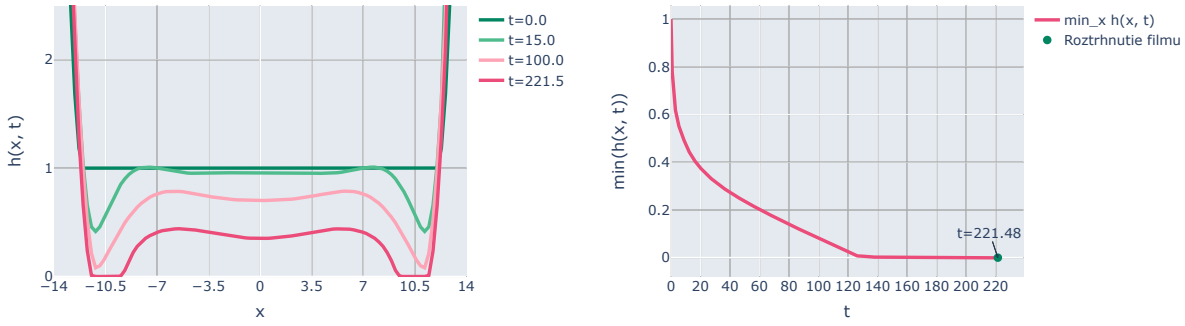
ním s prítomnosťou van der Waalsovej interakcie. Na získaných profiloch riešenia (pre 150 deliacich bodov), zobrazených na obrázku 12a, si môžeme všimnúť, že profil riešenia vykazuje na okrajoch nižšiu ostrosť v porovnaní s predchádzajúcimi prípadmi na obrázkoch 11a a 9a.

3.3.2 Prípad nedokonalého zmáčania rohovky $B = 10^{-5}$

Nedokonalé zmáčanie rohovky predstavuje prípad, kedy sa slzný film neaplikuje rovnomerne, napríklad z dôvodu rôznych povrchových napätí prostredí.

Riešenie pre parametre $A = 10^{-6}$, $G = 0$ a $\delta = 4,5 \times 10^{-8}$

Na obrázku 13a vidíme správanie sa profilu riešenia pre parametre $A = 10^{-6}$, $G = 0$ a $\delta = 4,5 \times 10^{-8}$. K roztrhnutiu slzného filmu dochádza až približne v čase $t = 221,5$ pre 100 deliacich bodov.

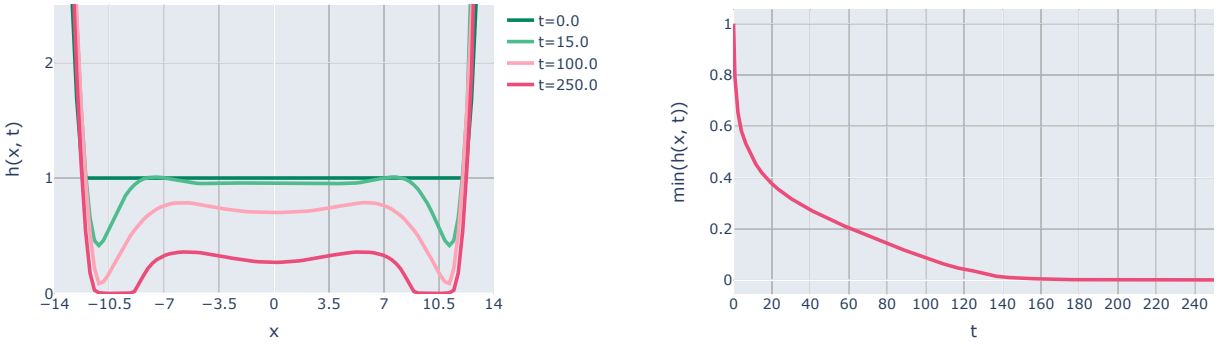


(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch. **(b)** Vývoj minimálnej hrúbky profilu riešenia.

Obr. 13: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 14]$ pre prípad nekonštantného vyparovania, nedokonalého zmáčania rohovky s prítomnosťou van der Waalsovej interakcie $A = 10^{-6}$, $B = 10^{-5}$, $G = 0$ a $\delta = 4,5 \times 10^{-8}$.

Riešenie pre parametre $A = 10^{-4}$, $G = 0$ a $\delta = 10^{-5}$

Pre prípad $A = 10^{-4}$, $G = 0$ a $\delta = 10^{-5}$ sú profily riešenia zobrazené na obrázku 14a. Vidíme, že na sledovanom časovom intervale (pre 100 priestorových deliacich bodov) nedochádza k roztrhnutiu slzného filmu.



(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch.

(b) Vývoj minimálnej hrúbky profilu riešenia.

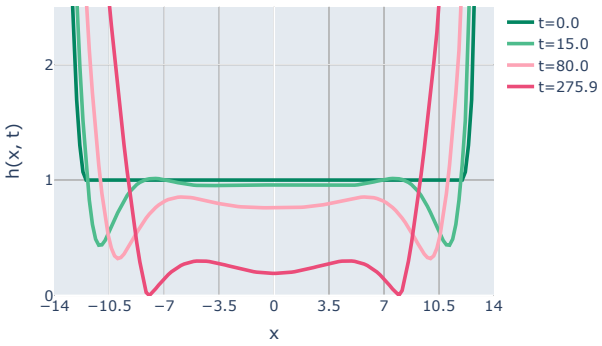
Obr. 14: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 14]$ pre prípad nekonštantného vyparovania a nedokonalého zmáčania rohovky s prítomnosťou van der Waalsovej interakcie $A = 10^{-4}$, $B = 10^{-5}$, $G = 0$ a $\delta = 10^{-5}$.

3.3.3 Prípad priestorovo-závislého zmáčania rohovky $B = B(x)$

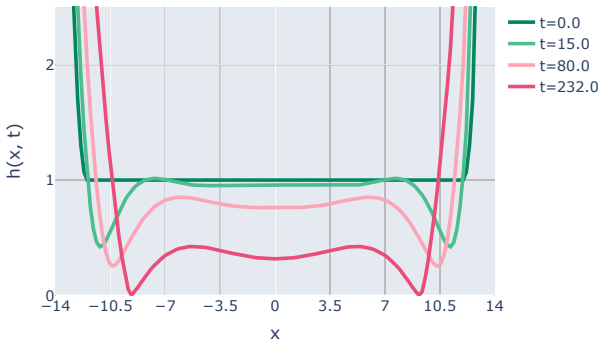
Ďalej v našej práci uvažujeme prípad priestorovo-závislého zmáčania rohovky. Podľa článku [8] zvolíme funkciu $B(x)$ v tvare

$$B\left(x\right) = B_0 \left(1 + \epsilon \cos \frac{\pi x}{L}\right),$$

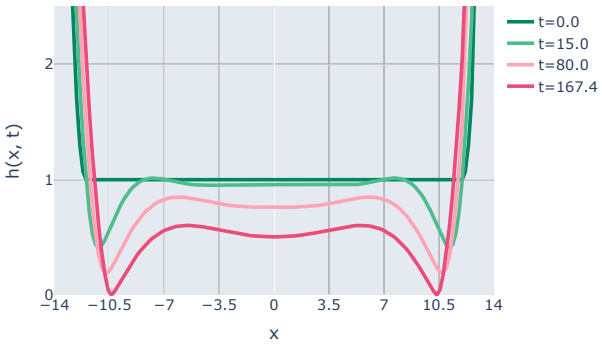
kde $B_0 = 10^{-4}$ a parameter ϵ budeme voliť z intervalu $[0, 1]$. Na obrázkoch 15a až 15d môžeme vidieť profily riešenia parciálnej diferenciálnej rovnice pre slzný film s priestorovo-závislým zmáčaním rohovky v závislosti od rôznych hodnôt parametra ϵ. Rovnako môžeme pozorovať, že s narastajúcou hodnotou ϵ sa priamo úmerne znižuje čas do roztrhnutia slzného filmu. Vo všetkých prípadoch sme uvažovali 140 priestorových deliacich bodov.



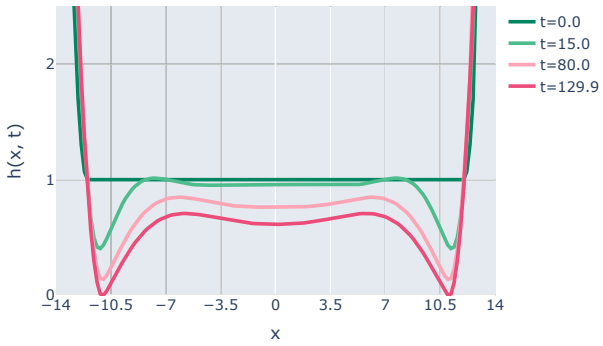
(a) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch pre $\epsilon = 0$.



(b) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch pre $\epsilon = 0,3$.



(c) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch pre $\epsilon = 0,6$.



(d) Profil riešenia vo vybraných časových rezoch pre $\epsilon = 0,9$.

Obr. 15: Riešenie evolučnej PDR pre slzný film na intervale $[-14, 14]$ pre prípad konštantného vyparovania, nedokonalého zmáčania rohovky a bez prítomnosti van der Waalsovej interakcie $A = G - \delta = 0$ a $B = 10^{-4}\,(1 + \epsilon \cos(\pi x/14))$.

Záver

V tejto práci sme sa venovali formulácii a numerickej analýze modelu slzného filmu s použitím parciálnych diferenciálnych rovníc.

Úvod práce je venovaný motivácii pre matematické modelovanie slzného filmu. Zdôrazňuje nemožnosť eliminácie alebo započítania niektorých mechanických efektov. Poskytli sme čitateľovi podrobný pohľad na slzný film, jeho zloženie a rôzne typy, ako sú slzné filmy pred a za kontaktnou šošovkou. Tiež sme sa venovali syndrómu suchého oka, ktorý ovplyvňuje značnú časť populácie a je hlavnou motiváciou nášho štúdia a matematického modelovania.

Prvá kapitola poskytuje teoretický základ k problematike a vysvetľuje základné princípy, ktoré je potrebné aplikovať pre konzistentné odvodenie evolučnej parciálnej diferenciálnej rovnice slzného filmu. Uviedli sme všeobecné parciálne diferenciálne rovnice, ktoré sú aplikovateľné na ľubovoľnú kvapalnú fázu, nielen na slzný film, špecifikovali sme okrajové podmienky medzi kvapalnou vrstvou a vzduchom, a stručne načrtli zbezrozmernenie odvodeného systému rovníc. Na záver prvej kapitoly sme predstavili odvodenie jednej rovnice v kontexte limity tenkej kvapalnej vrstvy (*thin-film limit*).

V druhej kapitole uvádzame formuláciu začiatočnej úlohy pre PDR slzného filmu spolu so špecifikáciou potrebných hraničných podmienok.

V tretej kapitole sme sa venovali numerickej integrácii evolučnej parciálnej diferenciálnej rovnice slzného filmu aplikáciou numerickej metódy čiar implementovanej v jazyku Python. Skúmali sme prípady dokonalého zmáčania rohovky a pôvodné výsledky sme priniesli pre prípady parciálneho a priestorovo závislého zmáčania rohovky. Pri numerických simuláciách sme zaznamenali rozdiely v stabilite riešení, keď sme porovnali výpočty vykonané na polovičnom intervale s tými na celom intervale. Tieto rozdiely sú spôsobené prenosom chýb v profile riešenia, ktoré by sa dali eliminovať použitím *up-wind* diskretizácie priestorových derivácií v advektívnych členoch PDR.

Výsledky tejto práce doplnili doterajšie výskumy, ktoré sa zaoberali modelovaním a numerickým riešením evolučnej parciálnej diferenciálnej rovnice slzného filmu iba pre prípad konštantného zmáčania. Bolo by potenciálne zaujímavé rozšíriť túto prácu o výpočet prúdovej funkcie rýchlostného poľa a aplikovať alternatívne numerické diskretizácie (napríklad spektrálnu priestorovú diskretizáciu).

Zoznam použitej literatúry

[1] Braun, R. J., Driscoll, T. A., Begley, C.: *Mathematical Models of the Tear Film*, Springer International Publishing, Cham, 2019

[2] Contact Lens Update: Post-Lens Tear Film (PoLTF), dostupné na internete (20.11.2023): `https://contactlensupdate.com/2012/03/20/post-lens-tear-film-poltf/`

[3] Contact Lens Update: Pre-Lens Tear Film (PrlTF), dostupné na internete (20.11.2023): `https://contactlensupdate.com/2012/03/20/pre-lens-tear-film-prltf/`

[4] Holly, F. J. a Lemp, M. A.: *Tear physiology and dry eyes*, Survey of Ophthalmology 22 (1977), 69–87

[5] Palos, M., a kol.: *Syndrom suchého oka*, Medicína pro praxi 8 (2011), 276–279

[6] Schaumberg, D. A.,a kol.: *Epidemiology of Dry Eye Syndrome*, Springer US, Boston, MA, 2002

[7] Šostáková, K.: *Modelovanie tenkých kvapalných vrstiev*, diplomová práca, FMFI UK, Bratislava, 2017, , dostupné na internete (20.11.2023): `https://opac.crzp.sk/?fn=detailBiblioFormChildG1416V&sid=877A1C170D2F97A1D93BAF2BFB25&seo=CRZP-detail-kniha`

[8] Thiele, U., a kol.: *Modelling thin-film dewetting on structured substrates and templates: Bifurcation analysis and numerical simulations*, European Physical Journal E 11 (2003), 255–271

[9] Winter, K. N., Anderson, D. M., Braun, R. J.: *A model for wetting and evaporation of a post-blink precorneal tear film*, Mathematical Medicine and Biology: A Journal of the IMA 27 (2009), 211-225

[10] Wu, Q., Wong, H.: *A slope-dependent disjoining pressure for non-zero contact angles*, Journal of Fluid Mechanics 506 (2009), 157–185

Riešenie na intervale $[-L, L]$ pre priestorovo závislé zmáčanie rohovky pomocou BDF metódy

```
"""
Import potrebnych balikov
"""
import numpy as np
from scipy.integrate import solve_ivp
import datetime

import plotly.graph_objects as go
import plotly.io as pio
import matplotlib.pyplot as plt

"""
Definovanie parametrov
"""
A = 0 #Hamakerova konstanta
G = 0 # Efekt gravitacie
E = 14.1 # Koeficient vyparovania
K = 4930 # Koeficient viskozity

delta = 0
n = 140 # pocet deliacich bodov
L = 14

# Hranicne podmienky
hmin = 1
h0L = 9
h0xx = 4
dhm = 2
dxm = 2

# Casove a priestorove delenie
t0 = 0
tf = 130
xl = - L
xu = L

k = (xu - xl) / (n - 1)
x = np.linspace(xl, xu, n)

nout = int(((tf - t0) / (k**2)) / 0.45 - n + 1)
tout = np.linspace(t0, tf, nout)

# Priestorovo-zavisly parameter parcialneho zmacania rohovky
B0 = 1e-4
eps = 0
```

```
B = B0 * (1 + eps * np.cos(np.pi * x / L))
B = B.reshape((n, -1))

# Profil riesenia pre cas t=0
h0 = np.where(np.abs(x) < (L - dxm), hmin, hmin + dhm * (np.abs(x) - (L - dxm))**2)

# Tolerancia
reltol = 1e-03
abstol = 1e-05

"""
Definovanie numerickych derivacii
"""
def grad1(h, k):
    # Funkcia vracia numericku aproximaciu prvej derivacie
    h_x = np.zeros_like(h)

    # centralna diferencia pre vnutorne body
    h_x[1:-1] = (h[2:] - h[:-2]) / (2 * k)
    # dopredna diferencia pre lavy okraj
    h_x[0] = (-3 * h[0] + 4 * h[1] - h[2]) / (2 * k)
    # dozadna diferencia pre pravy okraj
    h_x[-1] = (3 * h[-1] - 4 * h[-2] + h[-3]) / (2 * k)

    return h_x

def grad2(h, k):
    # Funkcia vracia numericku aproximaciu druhej derivacie
    h_xx = np.zeros_like(h)

    # centralna diferencia pre vnutorne body
    h_xx[1:-1] = (h[:-2] - 2 * h[1:-1] + h[2:]) / (k ** 2)
    # okrajova podmienka pri x = -L
    h_xx[0]  = h0xx
    # okrajova podmienka pri x = +L
    h_xx[-1] = h0xx

    return h_xx

def grad3(h, k):
    # Funkcia vracia numericku aproximaciu tretej derivacie
    h_xxx = np.zeros_like(h)

    # centralna diferencia pre vnutorne body
    h_xxx[2:-2] = (-h[:-4] + 2 * h[1:-3] - 2 * h[3:-1] + h[4:]) / (2 * k ** 3)
    # dopredna diferencia pre lavy okraj
    h_xxx[0]  = (-5 * h[0] + 18 * h[1] - 24 * h[2] + 14 * h[3] - 3 * h[4]) / (2 * k ** 3)
    h_xxx[1]  = ( - h[1] + 3 * h[2] - 3 * h[3] + h[4]) / (k ** 3)
```

```
    # dozadna diferencia pre pravy okraj
    h_xxx[-2] = (h[-2] - 3 * h[-3] + 3 * h[-4] - h[-5]) / (k ** 3)
    h_xxx[-1] = (3 * h[-5] - 14 * h[-4] + 24 * h[-3] - 18 * h[-2] + 5 * h[-1]) / (2 * k
    ** 3)

    return h_xxx

"""
Riesenie zaciatocneho problemu pomocou BDF metody
"""
def systemODE(t, y):
    # Riesenie pociatocneho problemu
    h = y.reshape((n, -1))

    h[-1] = h0L
    h[0]  = h0L

    h_x = grad1(h, k)
    h_xx = grad2(h, k)
    h_xxx = grad3(h, k)

    Pi = (1 / h**3) * (A + B * (2 * h * h_x**2 * h_xx - h_x**4))
    ins = (h**3 / 12) * (h_xxx + grad1(Pi, k) + G)
    dht_dt = -E / (K + h) * (1 - delta * (h_xx + Pi)) - grad1(ins, k)

    return dht_dt.reshape(-1)

solution = solve_ivp(systemODE, (t0, tf), h0, method='BDF', t_eval=tout,
                     rtol=reltol, atol=abstol)

"""
Vykreslenie vybratych profilov riesenia
"""
def find_indices(x, numbers, array_with_columns):
    indices = []
    for number in numbers:
        index = (np.abs(x - number)).argmin()
        indices.append(index)
    first_negative_column_index = -1
    for col_index in range(array_with_columns.shape[1]):
        if np.any(array_with_columns[:, col_index] < 0):
            first_negative_column_index = col_index
            break

    if first_negative_column_index != -1:
        indices = [index for index in indices if index <= first_negative_column_index]
        indices.append(first_negative_column_index)
```

```
    return sorted(indices)

fig = go.Figure()
colors = ['#028661', '#4EBC8D', '#FDA4B6', '#EB4C79']

for idx, i in enumerate(find_indices(solution.t, [t0, 15, 80, tf], solution.y)):
    color = colors[idx % len(colors)]
    fig.add_trace(go.Scatter(x=x, y=solution.y[:, i], mode='lines', name=f't={round(
    solution.t[i],1)}',
                             line=dict(color=color, width=4)))

fig.update_layout(
    xaxis=dict(title="x", dtick=3.5, tickangle=0),
    yaxis=dict(title="h(x, t)", dtick=1, range=[0, 2.5]),
    plot_bgcolor='#E4EAF0'
)
fig.show()

min_y = np.min(solution.y, axis=0)
first_negative_index = np.where(min_y < 0)[0][0] if np.any(min_y < 0) else None

fig = go.Figure()
fig.add_trace(go.Scatter(x=solution.t, y=min_y, mode='lines', name=f'min_x h(x, t)',
                         line=dict(color='#EB4C79', width=4)))

if first_negative_index is not None:
    fig.add_trace(go.Scatter(x=[solution.t[first_negative_index]],
                             y=[min_y[first_negative_index]],
                             mode='markers',
                             marker=dict(color='#028661', size=10),
                             name='Roztrhnutie filmu'))
    fig.add_annotation(
        x=solution.t[first_negative_index],
        y=min_y[first_negative_index],
        text=f"t={solution.t[first_negative_index]:.2f}",
        showarrow=True,
        arrowhead=1
    )

fig.update_layout(
    xaxis=dict(title="t", dtick=40, tickangle=0),
    yaxis=dict(title="min(h(x, t))"),
    plot_bgcolor = '#E4EAF0'
)
fig.show()
```