

RESSALVA

Atendendo solicitação do(a) autor(a), o texto completo desta dissertação será disponibilizado somente a partir de 24/04/2025.



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

Câmpus de Presidente Prudente - SP

Diego Alecsander de Aguiar

Predição do Balanço de Energia na Dinâmica de Gotículas: Uma Abordagem com Redes Neurais Recorrentes

Presidente Prudente - SP

2024

Diego Alecsander de Aguiar

**Predição do Balanço de Energia na Dinâmica de Gotículas:
Uma Abordagem com Redes Neurais Recorrentes**

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação, junto ao Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação, do Universidade Estadual Paulista (UNESP) da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Câmpus de Presidente Prudente - SP.

Financiadora: DS/CAPES

Presidente Prudente - SP 2024

A282p

Aguiar, Diego Alecsander de

Predição do balanço de energia na dinâmica de gotículas: uma abordagem com redes neurais recorrentes / Diego Alecsander de Aguiar. -- Presidente Prudente, 2024

90 p. : il., tabs.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências e Tecnologia, Presidente Prudente

Orientador: Cassio Machiaveli Oishi

1. Inteligência artificial. 2. Dinâmica dos fluidos. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca da Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências e Tecnologia, Presidente Prudente. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE DIEGO ALECSANDER DE AGUIAR, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO, DA FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA - CÂMPUS DE PRESIDENTE PRUDENTE.

Aos 24 dias do mês de abril do ano de 2024, às 09:00 horas, por meio de Videoconferência, realizou-se a defesa de DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de DIEGO ALECSANDER DE AGUIAR, intitulada **Predição do Balanço de Energia na Dinâmica de Gotículas: Uma Abordagem com Redes Neurais Recorrentes**. A Comissão Examinadora foi constituída pelos seguintes membros: Prof. Dr. CÁSSIO MACHIAVELI OISHI (Orientador(a) - Participação Virtual) do(a) Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente, Prof. Dr. DANIEL CARLOS GUIMARÃES PEDRONETTE (Participação Virtual) do(a) IGCE / UNESP / Rio Claro (SP), Prof. Dr. DIEGO SAMUEL RODRIGUES (Participação Virtual) do(a) Faculdade de Tecnologia / Universidade Estadual de Campinas. Após a exposição pelo mestrando e arguição pelos membros da Comissão Examinadora que participaram do ato, de forma presencial e/ou virtual, o discente recebeu o conceito final: __ Aprovado __ __ __ __. Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi assinada pelo(a) Presidente(a) da Comissão Examinadora.

Prof. Dr. CÁSSIO MACHIAVELI OISHI



Documento assinado digitalmente

CASSIO MACHIAVELI OISHI

Data: 24/04/2024 11:17:18-0300

Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Agradecimentos

Eu gostaria de agradecer primeiramente ao meu orientador, Cassio M. Oishi, por ter me ajudado e me ensinado muito desde a minha graduação. O tempo que passei trabalhando com ele foi o que despertou meu interesse pelo meio acadêmico, espero que possamos continuar seguindo esse caminho.

Agradeço ao Fernando P. Martins que, embora não esteja diretamente envolvido com o projeto, me auxiliou em diversas etapas, principalmente na utilização do cluster do Laboratório de Simulação Numérica (LSN).

Agradeço também ao Hugo L. França por ter disponibilizado o código base para a execução das simulações numéricas.

Por fim, mas não menos importante, agradeço aos meus pais por todo o apoio emocional que me deram ao longo de todos esses anos. Sem eles, o caminho teria sido muito mais difícil.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

Resumo

Este estudo explora a aplicação de modelos Long Short-Term Memory (LSTM) para prever o balanço de energia (energias cinética, de superfície e de dissipação viscosa) no contexto de dois regimes de escoamento de fluidos distintos e sob diferentes efeitos de viscosidade e tensão superficial: gotículas com formatos iniciais variáveis impactando em superfícies sólidas e duas gotículas coalescendo após colidirem. Além disso, uma predição estática dos números adimensionais também foi explorada. A aplicação de redes neurais LSTM é proposta para lidar com as limitações observadas ao utilizar redes neurais *feedforward* simples para manipular dados transientes. Os modelos foram treinados usando números adimensionais e séries temporais geométricas extraídas de simulações numéricas. Adicionalmente, a necessidade de simular formas não convencionais motivou o desenvolvimento de um método inovador para extrair partículas de interfaces presentes em imagens digitais para a representação por Front-Tracking.

A avaliação de desempenho dos modelos incluiu métricas como o Coeficiente de Determinação, o Erro Quadrático Médio e o Erro Quadrático Médio Normalizado. A análise dessas métricas revela que as predições dos modelos estão profundamente alinhadas com seus valores ideais, destacando a adaptabilidade e precisão da arquitetura escolhida. Dado que os regimes explorados têm múltiplas aplicações significativas, como impressão por jato de tinta, aplicação de pesticidas agrícolas, operação de motores de combustão, transmissão de doenças respiratórias, entre outros, este trabalho abrir caminho para o desenvolvimento de novos modelos de aprendizado de máquina aproveitando o desempenho oferecido pelas arquiteturas LSTM para prever diferentes tipos de dados transientes em outros cenários de escoamento.

Palavras-chave: cálculo de energias, espalhamento de gotículas, colisão de gotículas, aprendizado de máquina.

Abstract

This study explores the application of Long Short-Term Memory (LSTM) models to predict the energy balance (kinetic, surface and viscous dissipation energies) within the context of two distinct fluid flow regimes under different viscous and surface tension effects: droplets with varying initial shapes impacting on solid surfaces and two droplets coalescing after colliding. Additionally, a static prediction of the dimensionless numbers was also explored. The application of LSTM neural networks is proposed to address the limitations observed when utilizing simple Feedforward neural networks for handling transient data. The models were trained using dimensionless numbers and geometric time series data from numerical simulations. Additionally, the need to simulate unconventional shapes prompted the development of a novel method for extracting Front-Tracking particles from interfaces present in digital images.

Evaluation of performance included metrics such as the Coefficient of Determination, Root Mean Square Error, and Normalized Root Mean Square Error. The analysis of these metrics reveals that predictions from the models closely align with their ideal values, emphasizing the adaptability and precision of the chosen architecture. Given that the explored regimes have multiple significant applications, such as inkjet printing, application of agricultural pesticides, operation of combustion engines, transmission of respiratory diseases, among others, this work could pave the way for the development of new machine learning models leveraging the performance offered by LSTM architectures to predict different types of transient data in other flow scenarios.

Keywords: energy calculation, droplet spreading, droplet collision, machine learning.

Sumário

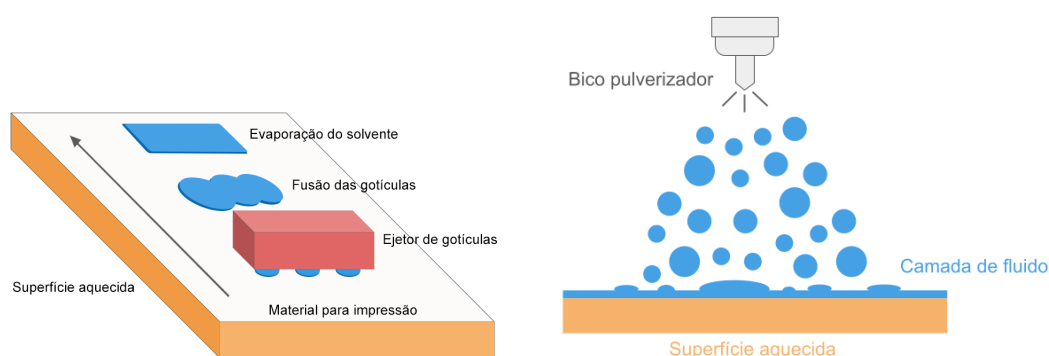
1	Introdução	9
1.1	Objetivos	13
2	Modelagem matemática	14
2.1	Equações e adimensionalização	14
2.2	Condições de contorno	15
2.3	Solução numérica	16
3	Método Front-Tracking	18
3.1	Representação de interfaces	18
3.2	Construção da malha	20
3.2.1	Modificação	22
3.3	Tratamento das mudanças topológicas	24
4	Extração de interfaces em imagens	37
4.1	Teste do funcionamento da extração	40
4.2	Limitações e algumas possíveis soluções	42
4.3	Método de suavização com conservação de massa - TSUR	43
5	Cálculo do balanço de energias	46
6	Descrição dos conjuntos de dados	50
6.1	Dataset de espalhamento	51
6.2	Dataset de colisão	55
7	Aprendizado de máquina para predição de dados	58
7.1	Long Short-Term Memory (LSTM)	58
7.2	Predições de interesse	65
7.3	Fatiamento dos dados	67
8	Resultados	69
8.1	Performance dos modelos formulados	69

8.2	Análise da predição das energias	72
8.3	Predição em duas etapas com redes neurais sequenciais	74
8.3.1	Predição do balanço de energia	75
8.3.2	Predição dos números adimensionais	77
9	Conclusões	79
	REFERÊNCIAS	82
	APÊNDICE A - Predições estáticas dos números adimensionais usando dados geométricos	89

1 Introdução

O estudo das dinâmicas de colisão entre gotículas e de espalhamento de gotículas impactando superfícies sólidas é importante para inúmeras aplicações em diferentes áreas da ciência e da engenharia, como a impressão a jato de tinta (Figura 1a), o resfriamento por pulverização (Figura 1b), a aplicação de defensivos agrícolas, o funcionamento de motores de combustão, a transmissão de doenças respiratórias, entre outras [1].

Em particular, a complexidade do processo de impressão a jato de tinta [2] destaca-se por envolver tanto a dinâmica de colisão das gotículas durante sua trajetória quanto o eventual impacto em uma superfície, ilustrando o vínculo existente entre diferentes fenômenos da dinâmica dos fluidos. Compreender o comportamento da colisão é essencial para que seja possível controlar a distribuição, o formato e o tamanho das gotículas de tinta durante a sua queda. Por outro lado, o estudo do espalhamento visa garantir o bom funcionamento de fatores relacionados ao contato com a superfície de impressão, como a velocidade e o ângulo de impacto, as propriedades das gotículas e as características da superfície.



(a) Funcionamento da impressão a jato de tinta. (b) Esquema de resfriamento por pulverização.

Figura 1 – Exemplos de aplicações práticas que envolvem a colisão e o espalhamento de gotas.

Ao longo do tempo, pesquisas sobre tais dinâmicas resultaram em diversas publicações que buscam compreender as particularidades dos diferentes regimes de escoamento. Entre elas, investigações experimentais foram adotadas para encontrar relações entre propriedades dos fluidos tanto no regime de espalhamento [3, 4, 5, 6, 7, 8] como no de colisão entre gotículas [9, 10, 11, 12, 13]. Outras contribuições notáveis são os artigos [14, 15, 16] que abordam, entre outros temas, a conexão entre o espalhamento máximo e os números adimensionais, a relação das energias de um sistema e a caracterização de diferentes regimes antes e depois do impacto de

uma gota.

Como a exploração experimental de problemas práticos nem sempre é viável, as simulações numéricas das dinâmicas mais complexas podem ser alternativas eficientes [17]. Em tais simulações, as equações governantes do escoamento de fluidos podem ser resolvidas através de esquemas de discretização clássicos, como o método dos elementos finitos [18], o método dos volumes finitos [19], o método das diferenças finitas [20], entre outros. Além da solução das equações, outro aspecto importante a considerar é o tratamento adequado das interfaces móveis que separam os fluidos. Esse tratamento envolve representar computacionalmente a interface e possibilitar que ela se mova a cada instante de tempo, além de mitigar eventuais inconsistências que possam surgir durante a simulação. Para isso, existem vários métodos descritos na literatura, incluindo representações explícitas, como o Front-Tracking [21, 22], representações implícitas, como o Volume-of-Fluid (VoF) [23], ou representações híbridas.

Em um trabalho anterior [24], explorou-se a aplicação do método VoF, que utiliza uma malha com frações de volume para representar as interfaces. Algumas vantagens do método incluem a sua implementação relativamente simples e sua capacidade de tratar as mudanças topológicas em sua formulação, sem que haja a necessidade de desenvolver verificações e modificações específicas para esse fim. No entanto, suas limitações incluem a capacidade de representar apenas dois fluidos em sua versão clássica e a necessidade de aplicar um método para reconstrução da interface à partir das frações de volume para visualizar a geometria original da gota.

Para o presente trabalho, decidiu-se utilizar um *solver* que implementa o método Front-Tracking, uma abordagem explícita que representa interfaces por meio de partículas interligadas. Seu principal ponto positivo é lidar com algumas das limitações observadas no VoF, permitindo a representação de mais de dois fluidos e não havendo a necessidade de um método para reconstrução da geometria da interface, uma vez que as próprias partículas podem ser utilizadas para tal. Apesar de sua eficiência, o método possui uma implementação mais complexa, exigindo também o desenvolvimento de uma adaptação para lidar com as mudanças topológicas. Para uma compreensão mais aprofundada sobre o Front-Tracking, uma implementação minimalista do processo de advecção, utilizando apenas o campo de velocidades, foi desenvolvida.

O uso de estratégias de aprendizado de máquina na área de dinâmica dos fluidos tem sido bastante explorado nos últimos anos graças ao surgimento de técnicas mais eficientes e de *fra-*

metworks e bibliotecas, como TensorFlow, Pytorch e MXNet, que simplificam o desenvolvimento, teste e otimização de diferentes arquiteturas de redes neurais. Como as simulações numéricas podem ter um alto custo computacional, a aplicação de aprendizado de máquina para prever determinadas propriedades ou encontrar correlações entre parâmetros pode ser uma estratégia eficaz para acelerar o processo ou até mesmo eliminar a necessidade de executar uma simulação completa.

No contexto da dinâmica de gotículas, diferentes modelos de aprendizado de máquina têm sido adotados para prever propriedades físicas ou geométricas observadas em escoamentos complexos, como por exemplo a predição do espalhamento máximo de uma gota através de números adimensionais e propriedades relacionadas a cada regime abordado [25, 26, 27, 28, 29, 30]. A ideia de aplicar propriedades relacionadas às dinâmicas para prever outras propriedades também foi explorada em diversas outras situações, como na predição de morfologias de gotas a partir de dados de imagens [31], na classificação de impactos com ou sem respingo, utilizando imagens capturadas no momento em que metade da gota atinge a superfície [32], no uso de uma inteligência artificial explicável (XAI) para interpretar como o classificador citado funciona e descobrir uma possível correlação entre a propagação de uma gota e a força de impacto em uma superfície sólida [33], na predição da curvatura da interface através de partículas vizinhas no método de representação Front-Tracking [34], na predição do tamanho, velocidade e forma de gotículas de um jato de metal líquido sob demanda (DoD-LMJ) [35], na predição de características geométricas de jatos de fluido, como o ângulo de espalhamento e o comprimento laminar, através de fatores físicos, como o número de Reynolds (Re) e o número de Arquimedes (Ar) [36], o uso de uma rede neural LSTM na predição do escoamento de fluidos complexos através de medições de sensores que apresentam ruídos [37], etc.

Dentro do tema de correlação entre fatores, a conexão entre a dinâmica das gotículas e o balanço de energia tem sido extensivamente explorada. Quando uma gotícula se aproxima de uma superfície ou colide com outra gotícula, inicia-se um processo de transferência de energia que envolve componentes cinéticos, superficiais e dissipativos. A análise do balanço de energia aprimora não só a compreensão sobre os princípios fundamentais da dinâmica dos fluidos, mas também facilita o desenvolvimento de modelos analíticos baseados nele. Por exemplo, expressões derivadas da conservação de energia podem ser empregadas para construir equações que predizem o diâmetro máximo de uma gotícula se espalhando em uma superfície sólida. Publicações como [3, 38, 39, 8] exemplificam aplicações de tais princípios.

A exploração das conexões entre o balanço de energia e a dinâmica de gotículas tem uma grande importância prática, visto que diversas das aplicações citadas anteriormente requerem um controle preciso sobre a dinâmica de impacto das gotículas para guiá-las de acordo com o resultado esperado. Dentre trabalhos que exploram tais conexões, [40] investigou os efeitos de baixas e altas velocidades na energia superficial e na dissipação viscosa para gotículas impactando superfícies sólidas. Já a conexão entre a formação de respingos e a dissipação de energia foi abordada por [1], que utilizou resultados experimentais envolvendo uma gota de ferrofluido com formato assimétrico. Em relação aos estudos de colisão de gotículas, [41] explorou o balanço de energia durante a coalescência e a quebra após a colisão, [42] aplicou um esquema numérico com representação Front-Tracking para estudar o balanço de energia usando gotículas de tamanhos diferentes e [43] reavaliou a delimitação do regime de rebote do mapa proposto por [11], aplicando, por meio de experimentos, uma estratégia baseada em energia e colisões binárias de gotículas.

Apesar da grande quantidade de estudos, esses temas são normalmente abordados apenas no contexto de análises estáticas, havendo poucos trabalhos [44, 40] que lidam com as variações transientes das propriedades das gotículas, como o diâmetro durante o espalhamento, e do balanço de energia. A concentração na análise estática dos dados também pode ser observada em investigações mais recentes que usam algoritmos de aprendizado de máquina.

Neste trabalho, propomos modelos de aprendizado de máquina baseados em uma arquitetura de rede neural recorrente chamada de Long Short-Term Memory (LSTM) [45] para a predição não apenas de características estáticas, como números adimensionais, mas também de características transientes, como a variação temporal do balanço de energia. Para testar os modelos, geramos dois conjuntos de dados dos regimes comentados anteriormente: impacto de gotículas de formatos diferentes em superfícies sólidas e colisão entre gotículas. Embora nossos testes tenham empregado exclusivamente conjuntos de dados gerados por simulações numéricas, a versatilidade dessa metodologia não impossibilita a extensão da aplicação para investigações experimentais.

Para executar as simulações numéricas, o *solver* desenvolvido por [34], em linguagem de programação C, foi adaptado de forma a aceitar a entrada de gotículas com formatos diferentes e gravar os dados necessários. Para a implementação da versão minimalista do Front-Tracking, o método de extração de interfaces em imagens, a construção de arquiteturas de redes neurais e a geração das visualizações dos resultados, foi utilizada a linguagem de programação Python

com o auxílio das bibliotecas NumPy (estruturação dos dados), Matplotlib (visualização dos dados), OpenCV (processamento de imagens) e Tensorflow (implementação em alto nível das arquiteturas de redes neurais).

1.1 Objetivos

Neste trabalho, teve-se como objetivo explorar e desenvolver os seguintes temas:

- Representar interfaces através do método Front-Tracking, construindo malhas com classificação de células e tratando as mudanças topológicas;
- Extrair interfaces de gotículas presentes em imagens de experimentos;
- Definir o cálculo do balanço das energias presentes em um sistema (cinética, superficial e de dissipação viscosa);
- Apresentar conceitos de aprendizado de máquina, em específico o funcionamento de uma arquitetura de rede neural recorrente chamada Long Short-Term Memory (LSTM);
- Comentar os resultados da aplicação de redes neurais para predição das energias pelo tempo e/ou dos parâmetros adimensionais em dois conjuntos de dados gerados por simulações numéricas;
- Explorar as possibilidades de correlação entre propriedades físicas e geométricas.

No Capítulo 2, é elaborada uma descrição resumida da modelagem matemática do problema e da adimensionalização dos termos. No Capítulo 3, é definida a implementação de uma versão simplificada do método de representação Front-Tracking, sendo aplicada uma advecção por campo de velocidades para testá-lo. No capítulo 4, é descrito um método de extração de partículas de interfaces presentes em imagens digitais, destacando os problemas relacionados ao método e as possíveis soluções. No capítulo 5, é demonstrado o cálculo das energias de um sistema. No Capítulo 6, são apresentados os regimes selecionados para a geração de dois conjuntos de dados, além da esquematização do processo de extração e processamento dos dados. No Capítulo 7, é explicado o funcionamento geral da arquitetura de rede neural LSTM. No Capítulo 8, são apresentados os resultados obtidos através de duas abordagens que visam aplicabilidade no meio experimental. Por fim, no Capítulo 9, são realizadas as considerações finais sobre o projeto e levantados alguns dos possíveis próximos passos do estudo.

9 Conclusões

Inicialmente, nós propusemos dois modelos LSTM para prever o balanço de energia em dois problemas de superfície livre em movimento: o impacto de uma gotícula com diferentes formatos iniciais em uma superfície sólida e a colisão de duas gotículas de mesmo tamanho e formato. Como o primeiro dataset exigia a geração de dados a partir de formatos diferentes e incomuns, também foi desenvolvido um método capaz de extrair partículas de interfaces presentes em imagens digitais (como mostrado na Seção 4). Após o desenvolvimento dos dois primeiros modelos de teste, uma abordagem de predição sequencial em duas etapas foi aplicada na tentativa de prever propriedades importantes utilizando exclusivamente dados geométricos. Este método mostra-se especialmente útil para observações experimentais, uma vez que usa apenas dados geométricos, que podem ser facilmente extraídos de imagens ou vídeos de experimentos. Ele fornece uma ferramenta de fácil uso para a desafiadora tarefa de prever parâmetros de fluidos, como as energias e os números adimensionais.

No contexto dos dois primeiros modelos, com a abordagem de etapa única, ambos compartilharam a mesma arquitetura geral, sendo a única variação os dados utilizados para o treinamento. O primeiro modelo foi treinado usando dados de 95 simulações numéricas envolvendo sete formatos diferentes, extraídos de imagens de experimentos reais, impactando uma superfície sólida e espalhando ao longo do tempo. O segundo modelo utilizou dados de 50 simulações numéricas de duas gotículas idênticas que colidem horizontalmente, coalescem e sofrem oscilações de espalhamento e retração, causando também oscilações no balanço de energia.

Para avaliar a performance de cada modelo, nós conduzimos uma análise abrangente de métricas comumente empregadas na validação de modelos de aprendizado de máquina, como o Coeficiente de Determinação (R^2), a Raiz do Erro Quadrático Médio ($RMSE$) e a Raiz do Erro Quadrático Médio Normalizada ($NRMSE$). As métricas R^2 , $RMSE$ e $NRMSE$ para ambos os modelos são, respectivamente, 0.99429 e 0.99559, 0.02957 e 0.0137, e 0.02961 e 0.02096. Após analisar as métricas, pudemos observar que ambos os modelos alcançaram performances suficientemente próximas aos valores ideais de cada métrica, com R^2 s próximos de um e $RMSE$ s se aproximando de zero. Os modelos analisados são precisos de maneira similar mesmo quando aplicados a problemas consideravelmente diferentes, o que pôde ser avaliado pela similaridade da

magnitude de seus *NRMSEs*. O modelo para o espalhamento mostrou resultados promissores ao lidar adequadamente com um formato de gotícula completamente novo. Da mesma forma, o modelo para a colisão teve um bom desempenho para instâncias com conjuntos de parâmetros não utilizados no treinamento. A acurácia dos modelos também foi avaliada através de gráficos que mostram as energias cinética, superficial e de dissipação viscosa em algumas instâncias, confirmando excelente concordância entre os dados da simulação e os valores preditos. Isto sugere que as arquiteturas de aprendizado de máquina definidas têm o potencial de ser altamente adaptáveis e precisas para uma variedade de regimes de fluidos diferentes.

Para as previsões em duas etapas, as arquiteturas permaneceram similares, com a diferença de que agora utilizamos dois modelos conectados para realizar previsões sequenciais. Primeiramente, uma rede LSTM prevê o balanço de energia usando apenas dados geométricos. Em seguida, as energias preditas servem como entrada em uma segunda rede LSTM responsável por prever os números adimensionais estáticos Re e We . As métricas para a primeira etapa (energias) e a segunda (números adimensionais) são, respectivamente, 0.9776 e 0.99823, 0.03087 e 1.39455, e 0.04725 e 0.0141. Apesar de um leve aumento no erro quando comparado à estratégia de previsão de uma etapa, as métricas para as previsões de duas etapas ainda demonstram alta precisão. Além de uma análise das métricas, foi feita também uma análise visual do comportamento dos números adimensionais preditos. Os resultados mostram boa concordância para valores baixos de Re e We , mas o modelo parece ter maiores dificuldades de estabelecer previsões acuradas para valores maiores. Esta dificuldade pode ser atribuída ao fato de que, para os dados de treinamento, há menos instâncias com valores mais altos de Re e We , como visto na Tabela 3. Por fim, justifica-se a aplicação dessa abordagem dado que, ao tentar prever diretamente os números adimensionais através dos dados geométricos, os *RMSEs* resultantes foram consideravelmente mais altos, como demonstrado no Apêndice A.

Embora as métricas indiquem uma alta versatilidade, ainda há algumas questões a serem exploradas. Uma importante tarefa é o desafio de prever regimes além da coalescência no modelo de colisão, dado que nosso modelo atual depende predominantemente de dados de casos em que há apenas coalescência. Por exemplo, capturar os comportamentos distintos associados ao regime de rebote representa um desafio significativo, já que detectar a transição entre os regimes é uma tarefa complexa para modelos de aprendizado de máquina. Pesquisas futuras podem se aprofundar na busca de novos parâmetros de fluido apropriados para o fenômeno de rebote (ou qualquer outro regime, para ser exato) e explorar a interpretação e a generalização dos modelos.

Esperamos que esta pesquisa venha a destacar as vantagens de aproveitar o desempenho oferecido pelas arquiteturas LSTM para realizar previsões de diferentes tipos de dados estáticos ou transientes em escoamentos complexos de fluidos complexos, como, por exemplo, na dinâmica de gotículas viscoelásticas [61, 62].

Referências

- 1 LIU, Q.; LO, J. H. Y.; LI, Y.; LIU, Y.; ZHAO, J.; XU, L. The role of drop shape in impact and splash. *Nature communications*, Springer Nature, v. 12, p. 3068, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41467-021-23138-4>>.
- 2 LOHSE, D. Fundamental fluid dynamics challenges in inkjet printing. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Review, v. 54, p. 349–382, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-022321-114001>>.
- 3 CHANDRA, S.; AVEDISIAN, C. T. On the collision of a droplet with a solid surface. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society, v. 432, p. 13–41, 1991. Disponível em: <<https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1991.0002>>.
- 4 LAAN, N.; BRUIN, K. G. de; BARTOLO, D.; JOSSERAND, C.; BONN, D. Maximum diameter of impacting liquid droplets. *Phys. Rev. Appl.*, American Physical Society, v. 2, p. 044018, 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.2.044018>>.
- 5 FUKAI, J.; SHIIBA, Y.; YAMAMOTO, T.; MIYATAKE, O.; POULIKAKOS, D.; MEGARIDIS, C. M.; ZHAO, Z. Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: Experiment and modeling. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 7, p. 236–247, 1995. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.868622>>.
- 6 LEE, J. B.; DEROME, D.; GUYER, R.; CARMELIET, J. Modeling the maximum spreading of liquid droplets impacting wetting and nonwetting surfaces. *Langmuir*, ACS Publications, v. 32, p. 1299–1308, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b04557>>.
- 7 LIN, S.; ZHAO, B.; ZOU, S.; GUO, J.; WEI, Z.; CHEN, L. Impact of viscous droplets on different wettable surfaces: Impact phenomena, the maximum spreading factor, spreading time and post-impact oscillation. *Journal of Colloid and Interface Science*, Elsevier, v. 516, p. 86–97, 2018. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979717314765>>.
- 8 UKIWE, C.; KWOK, D. Y. On the maximum spreading diameter of impacting droplets on well-prepared solid surfaces. *Langmuir*, ACS Publications, v. 21, p. 666–673, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/la0481288>>.
- 9 PAN, K.-L.; LAW, C. K.; ZHOU, B. Experimental and mechanistic description of merging and bouncing in head-on binary droplet collision. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 103, p. 064901, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2841055>>.
- 10 ESTRADE, J.-P.; CARENTZ, H.; LAVERGNE, G.; BISCOS, Y. Experimental investigation of dynamic binary collision of ethanol droplets – a model for droplet coalescence and bouncing. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 20, p. 486–491, 1999. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X99000363>>.
- 11 QIAN, J.; LAW, C. K. Regimes of coalescence and separation in droplet collision. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 331, p. 59–80, 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/S0022112096003722>>.

- 12 QIAN, J.; TRYGGVASON, G.; LAW, C.; QIAN, J.; TRYGGVASON, G.; LAW, C. *An experimental and computational study of bouncing and deformation in droplet collision*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1997. Disponível em: <<https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.1997-129>>.
- 13 WILLIS, K. D.; ORME, M. E. Experiments on the dynamics of droplet collisions in a vacuum. *Experiments in Fluids*, Springer Nature, v. 29, p. 347–358, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s003489900092>>.
- 14 YARIN, A. L. Drop impact dynamics: Splashing, spreading, receding, bouncing. . . . *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews, v. 38, p. 159–192, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.38.050304.092144>>.
- 15 STONE, H. A. Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews, v. 26, p. 65–102, 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fl.26.010194.000433>>.
- 16 JOSSERAND, C.; THORODDSEN, S. T. Drop impact on a solid surface. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews, v. 48, p. 365–391, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122414-034401>>.
- 17 SCHROLL, R. D.; JOSSERAND, C.; ZALESKI, S.; ZHANG, W. W. Impact of a viscous liquid drop. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 104, p. 034504, 2010. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.034504>>.
- 18 EGGERS, J.; FONTELOS, M. A.; JOSSERAND, C.; ZALESKI, S. Drop dynamics after impact on a solid wall: theory and simulations. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 22, p. 062101, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3432498>>.
- 19 LEE, T.; LIU, L. Lattice boltzmann simulations of micron-scale drop impact on dry surfaces. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 229, p. 8045–8063, 2010. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110003761>>.
- 20 LUNKAD, S. F.; BUWA, V. V.; NIGAM, K. Numerical simulations of drop impact and spreading on horizontal and inclined surfaces. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 62, p. 7214–7224, 2007. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250907005386>>.
- 21 TRYGGVASON, G.; BUNNER, B.; ESMAEELI, A.; JURIC, D.; AL-RAWAHI, N.; TAUBER, W.; HAN, J.; NAS, S.; JAN, Y. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 169, p. 708–759, 2001. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101967269>>.
- 22 PAN, Y.; SUGA, K. Numerical simulation of binary liquid droplet collision. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 17, p. 082105, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.2009527>>.
- 23 QI, Y.; LU, J.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S.; TRYGGVASON, G. Computing curvature for volume of fluid methods using machine learning. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 377, p. 155–161, 1981. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999118307046>>.
- 24 ALECSANDER, D. Aproximação numérica de curvaturas de interface: frações de volume e aplicação de redes neurais. *TCC (Graduação) – Ciência da Computação, FCT-Unesp*, 2021.

- 25 YANG, S.; HOU, Y.; SHANG, Y.; ZHONG, X. Bpnn and cnn-based ai modeling of spreading and icing pattern of a water droplet impact on a supercooled surface. *AIP Advances*, AIP Publishing, v. 12, p. 045209, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/5.0082568>>.
- 26 TEMBELY, M.; VADILLO, D. C.; DOLATABADI, A.; SOUCEMARIANADIN, A. A machine learning approach for predicting the maximum spreading factor of droplets upon impact on surfaces with various wettabilities. *Processes*, MDPI, v. 10, p. 1141, 2022. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2227-9717/10/6/1141>>.
- 27 TANG, J.; YU, S.; HOU, X.; WU, T.; LIU, H. Universal model for predicting maximum spreading of drop impact on a smooth surface developed using boosting machine learning models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, ACS Publications, v. 62, p. 15268–15277, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c01560>>.
- 28 AU-YEUNG, L.; TSAI, P. A. Predicting impact outcomes and maximum spreading of drop impact on heated nanostructures using machine learning. *Langmuir*, ACS Publications, v. 39, p. 18327–18341, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c02405>>.
- 29 HEIDARI, E.; DAEICHIAN, A.; SOBATI, M. A.; MOVAHEDIRAD, S. Prediction of the droplet spreading dynamics on a solid substrate at irregular sampling intervals: Nonlinear auto-regressive exogenous artificial neural network approach (narx-ann). *Chemical Engineering Research and Design*, Elsevier, v. 156, p. 263–272, 2020. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876220300460>>.
- 30 CHOUDHURY, R.; NASIR, D. M. T.; KAISER, D. R.; GHIMIRE, R.; ALIYU, D. A.; SOHANI, D. B.; ATANBORI, D. J.; RATHAUR, D. R.; MISHRA, D. R. Uncovering the effect of physical conditions and surface roughness on the maximum spreading factor of impinging droplets using a supervised artificial neural network model. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, ACS Publications, v. 62, p. 21208–21221, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c02650>>.
- 31 YEE, J.; IGARASHI, D.; MIYATAKE, S.; TAGAWA, Y. Prediction of the morphological evolution of a splashing drop using an encoder–decoder. *Machine Learning: Science and Technology*, IOP Publishing, v. 4, p. 025002, 2023. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/2632-2153/acc727>>.
- 32 YEE, J.; YAMANAKA, A.; TAGAWA, Y. Image features of a splashing drop on a solid surface extracted using a feedforward neural network. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 34, p. 013317, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/5.0077050>>.
- 33 YEE, J.; IGARASHI, D.; PRADIPTO; YAMANAKA, A.; TAGAWA, Y. *Correlation between morphological evolution of splashing drop and exerted impact force revealed by interpretation of explainable artificial intelligence*. 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.48550/arXiv.2309.10266>>.
- 34 FRANÇA, H. L. Numerical simulation of complex fluid flows with free surfaces. *Dissertação de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)*, 2022.
- 35 GAIKWAD, A.; CHANG, T.; GIERA, B.; WATKINS, N.; MUKHERJEE, S.; PASCALL, A.; STOBBE, D.; RAO, P. In-process monitoring and prediction of droplet quality in droplet-on-demand liquid metal jetting additive manufacturing using machine learning. *Journal*

- of Intelligent Manufacturing*, Springer Nature, v. 33, p. 2093–2117, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10845-022-01977-2>>.
- 36 HASSANZADEH, H.; JOSHI, S.; TAGHAVI, S. M. Predicting buoyant jet characteristics: a machine learning approach. *Chemical Product and Process Modeling*, De Gruyter, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1515/cppm-2023-0026>>.
- 37 ZHANG, X.; JI, T.; XIE, F.; ZHENG, H.; ZHENG, Y. Unsteady flow prediction from sparse measurements by compressed sensing reduced order modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 393, p. 114800, 2022. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004578252200130X>>.
- 38 PASANDIDEH-FARD, M.; QIAO, Y. M.; CHANDRA, S.; MOSTAGHIMI, J. Capillary effects during droplet impact on a solid surface. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 8, p. 650–659, 1996. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.868850>>.
- 39 HADJICONSTANTINO, N. G. Estimating the maximum splat diameter of a solidifying droplet. *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, American Society of Mechanical Engineers, Heat Transfer: Volume 1, p. 311–316, 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.1115/IMECE1999-0998>>.
- 40 LEE, J. B.; DEROME, D.; DOLATABADI, A.; CARMELIET, J. Energy budget of liquid drop impact at maximum spreading: Numerical simulations and experiments. *Langmuir*, ACS Publications, v. 32, p. 1279–1288, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5b03848>>.
- 41 ANTONOV, D.; SHLEGEL, N.; STRIZHAK, P.; TARLET, D.; BELLETTRE, J. Energy analysis of secondary droplet atomization schemes. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 117, p. 104666, 2020. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0735193320301949>>.
- 42 ZHANG, Z.; ZHANG, P. Kinetic energy recovery and interface hysteresis of bouncing droplets after inelastic head-on collision. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 29, p. 103306, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5000547>>.
- 43 AL-DIRAWI, K. H.; BAYLY, A. E. A new model for the bouncing regime boundary in binary droplet collisions. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 31, p. 027105, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5085762>>.
- 44 RAMÍREZ-SOTO, O.; SANJAY, V.; LOHSE, D.; PHAM, J. T.; VOLLMER, D. Lifting a sessile oil drop from a superamphiphobic surface with an impacting one. *Science Advances*, Science Advances, v. 34, p. eaba4330, 2020. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/sciadv.aba4330>>.
- 45 HOCHREITER, S.; SCHMIDHUBER, J. Long short-term memory. *Neural Computation*, MIT Press, v. 9, p. 1735–1780, 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>>.
- 46 CHORIN, A. J.; MARSDEN, J. E. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1979. ISBN 9783540904069.

- 47 GUERMOND, J.; MINEV, P.; SHEN, J. An overview of projection methods for incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier, v. 195, p. 6011–6045, 2006. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782505004640>>.
- 48 REIS, G. A.; TASSO, I. V. M.; SOUZA, L. F.; CUMINATO, J. A. A compact finite differences exact projection method for the navier–stokes equations on a staggered grid with fourth-order spatial precision. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 118, p. 19–31, 2015. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004579301500198X>>.
- 49 OISHI, C. M.; THOMPSON, R. L.; MARTINS, F. P. Transient motions of elasto-viscoplastic thixotropic materials subjected to an imposed stress field and to stress-based free-surface boundary conditions. *International Journal of Engineering Science*, Elsevier, v. 109, p. 165–201, 2016. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020722516308175>>.
- 50 FRANÇA, H. L. Um método numérico para o tratamento de mudanças topológicas em escoamentos viscoelásticos com superfície livre. *Dissertação de mestrado em Matemática Aplicada e Computacional FCT-Unesp*, 2018.
- 51 GLIMM, J.; GROVE, J.; LINDQUIST, B.; MCBRYAN, O. A.; TRYGGVASON, G. The bifurcation of tracked scalar waves. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, SIAM, v. 9, p. 61–79, 1988. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/0909006>>.
- 52 GLIMM, J.; GROVE, J. W.; ZHANG, Y. Interface tracking for axisymmetric flows. *SIAM Journal on Scientific Computing*, SIAM, v. 24, p. 208–236, 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/S1064827500366690>>.
- 53 TAMIM, S. I.; BOSTWICK, J. B. Oscillations of a soft viscoelastic drop. *npj Microgravity*, Nature Portfolio, v. 7, p. 42, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41526-021-00169-1>>.
- 54 SASHITTAL, P.; CHIODI, R.; MORGAN, T. B.; DESJARDINS, O.; HEINDEL, T. J.; BODONY, D. J. Modal analysis and interface tracking of multiphase flows using dynamic mode decomposition. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 157, p. 104198, 2022. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932222001781>>.
- 55 NONATO, L.; MANGIAVACCHI, N.; SOUSA, F. S.; CASTELO, A.; CUMINATO, J. A mass-conserving smooth method. *Mecânica Computacional*, Asociación Argentina de Mecánica Computacional, v. 23, p. 1897–1910, 2004.
- 56 STAUDEMEYER, R. C.; MORRIS, E. R. Understanding lstm – a tutorial into long short-term memory recurrent neural network. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.48550/arXiv.1909.09586>>.
- 57 JAIN, L. C.; MEDSKER, L. R. *Recurrent Neural Networks: Design and Applications*. 1st ed. [S.l.]: CRC Press, Inc., 1999. ISBN 0849371813.
- 58 NOH, S.-H. Analysis of gradient vanishing of rnns and performance comparison. *Information*, MDPI, v. 12, p. 11, 2021. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2078-2489/12/11/442>>.
- 59 GROSSE, R. Lecture 15: Exploding and vanishing gradients. *University of Toronto Computer Science*, 2017.

-
- 60 OPTUNA - A hyperparameter optimization framework. <<https://optuna.org/>>. Accessed: 2024-03-07.
- 61 OISHI, C. M.; THOMPSON, R. L.; MARTINS, F. P. Impact of capillary drops of complex fluids on a solid surface. *Physics of Fluids*, AIP Publishing, v. 31, p. 123109, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5129640>>.
- 62 FRANÇA, H. L.; OISHI, C. M. Numerical investigation of shear-thinning and viscoelastic binary droplet collision. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Elsevier, v. 302, p. 104750, 2022. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025722000076>>.