

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

**ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΚΑΙ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΣΤΑΓΟΝΑΣ
ΔΕΣΜΕΥΜΕΝΗΣ ΣΤΟ ΤΟΙΧΩΜΑ ΜΕΣΩ ΤΡΙΧΟΕΙΔΩΝ ΚΑΙ
ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΔΥΝΑΜΕΩΝ**

υπό

ΑΝΑΣΤΑΣΙΟΥ ΟΡΦΑΝΙΔΗ

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των

απαιτήσεων για την απόκτηση του

Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού

2017

© 2017 Αναστάσιος Ορφανίδης

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής (Επιβλέπων) Δρ. Νικόλαος Πελεκάσης
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Νικόλαος Ανδρίτσος
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Δημήτριος Παντελής
Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Αρχικά θα ήθελα να πω ένα μεγάλο ευχαριστώ στον επιβλέποντα της διπλωματικής εργασίας μου, καθηγητή κ. Νίκο Πελεκάση, για την άριστη συνεργασία και τις πολύτιμες συμβουλές του κατά την διάρκεια εκπόνησης της εργασίας μου και ιδιαίτερα για την ανάπτυξη και παραχώρηση της ασυμπτωτικής λύσης η οποία περιγράφεται στην συνέχεια της λύσης. Επίσης, οφείλω ένα ευχαριστώ στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής μου εργασίας, καθηγητή κ. Νίκο Ανδρίτσο και αναπληρωτή καθηγητή κ. Δημήτρη Παντελή για τον χρόνο που αφιέρωσαν στην μελέτη και τον σχολιασμό της εργασίας μου.

Στην συνέχεια θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στην Δρ. Αλκμήνη Λύτρα για την πολύτιμη βοήθεια της, τις χρήσιμες συμβουλές της και τον χρόνο τον οποίο αφιέρωσε έτσι ώστε να με εισάγει στο θέμα αλλά και στις άριστες συνθήκες εργασίας τις οποίες δημιούργησε παρά τις ιδιαίτερα αυξημένες υποχρεώσεις της καθώς και για τις πολύτιμες γνώσεις με τις οποίες με εφοδίασε σε συνδυασμό με τον επιβλέποντα καθηγητή. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω την Δρ. Μαρία Βλαχομήτρου η οποία εκτός από την βοήθεια που μου παρείχε καθώς και τις αναγκαίες γνώσεις μέσω των μαθημάτων τα οποία μου δίδαξε με ενέπνευσε έτσι ώστε να στραφώ στον τομέα της υπολογιστικής μηχανικής και να πάρω την απόφαση να υλοποιήσω την συγκεκριμένη διπλωματική εργασία.

Θα ήταν παράλειψη μου αν δεν ευχαριστούσα τους φίλους μου για όλες τις όμορφες αλλά και δύσκολες στιγμές που περάσαμε μαζί όλα αυτά τα χρόνια στον Βόλο καθώς και για την ψυχολογική υποστήριξη που μου παρείχαν όλον αυτόν τον καιρό.

Τέλος το μεγαλύτερο ευχαριστώ το χρωστώ στους γονείς μου Μιχάλη και Γεωργία και στον αδερφό μου Θοδωρή, για την ψυχολογική αλλά και οικονομική υποστήριξη που μου παρείχαν όλα αυτά τα χρόνια και για την πολύτιμη ευκαιρία που μου δώσαν έτσι ώστε να σπουδάσω και να εφοδιαστώ με χρήσιμες γνώσεις και εμπειρίες για το μέλλον μου.

Αναστάσιος Ορφανίδης
Βόλος, Ιούνιος 2017

**ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΚΑΙ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΣΤΑΓΟΝΑΣ
ΔΕΣΜΕΥΜΕΝΗΣ ΣΤΟ ΤΟΙΧΩΜΑ ΜΕΣΩ ΤΡΙΧΟΕΙΔΩΝ ΚΑΙ
ΔΙΑΜΟΡΙΑΚΩΝ ΔΥΝΑΜΕΩΝ**

ΑΝΑΣΤΑΣΙΟΣ ΟΡΦΑΝΙΔΗΣ

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, 2017

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Νικόλαος Πελεκάσης, Καθηγητής Υπολογιστικής
Ρευστοδυναμικής

Περίληψη

Η μελέτη των σταγονιδίων κρίνεται χρήσιμη για πολλές πρακτικές εφαρμογές όπως οι συσκευές μικροσταγονιδίων (CPS) ή η ελεγχόμενη μεταφορά φαρμάκων. Οι διαμοριακές και τριχοειδείς δυνάμεις στις περισσότερες εφαρμογές όπου χρησιμοποιούνται μεγάλα σταγονίδια είναι αμελητέες, αλλά στις εφαρμογές όπου χρησιμοποιούνται τα μικροσταγονίδια είναι σημαντικές.

Στην παρούσα εργασία οι διαμοριακές και τριχοειδείς δυνάμεις λαμβάνονται υπόψιν και αυτό καθιστά την επίλυση του προβλήματος ισορροπίας του σταγονιδίου πιο απαιτητική. Για την αντιμετώπιση του προβλήματος προτείνονται δύο μέθοδοι. Η πρώτη είναι η επίλυση των εξισώσεων ισορροπίας με την μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων, ενώ η δεύτερη είναι η ασυμπτωτική επίλυση η οποία βασίζεται σε κάποιες σημαντικές αλλά λογικές παραδοχές. Μετά την επίλυση των εξισώσεων ισορροπίας του προβλήματος παρατηρείται όπως ήταν αναμενόμενο πως οι διαμοριακές δυνάμεις στα μικροσταγονίδια επηρεάζουν σημαντικά την γωνία επαφής. Πιο συγκεκριμένα παρατηρείται μείωση της γωνίας επαφής με αύξηση της επίδρασης των διαμοριακών δυνάμεων. Η παρούσα μοντελοποίηση με πεπερασμένα στοιχεία έδωσε λύσεις μόνο για αμβλείες γωνίες επαφής, δηλαδή για όσο η παράμετρος διαβροχής είναι μικρότερη από την επιφανειακή τάση ($W_0 < \sigma$). Στην ασυμπτωτική λύση, η διεπιφάνεια της σταγόνας χωρίζεται σε τρεις περιοχές: την περιοχή επαφής, την περιοχή μετάβασης και την εξωτερική περιοχή και με κατάλληλες απλοποιήσεις του ισοζυγίου των δυνάμεων προκύπτει το παραμορφωμένο σχήμα της σταγόνας. Συγκρίνοντας την ασυμπτωτική με την αριθμητική λύση παρατηρείται πολύ καλή συμφωνία.

Στην συνέχεια ακολουθεί παραμετρική μελέτη ως προς το πάχος του φιλμ και ως προς την πυκνότητα του ρευστού. Το πάχος του φιλμ επηρεάζει σημαντικά την μορφή της λύσης, αλλά μόνο στις περιοχές επαφής και μετάβασης, ενώ η βαρύτητα δεν συμβάλει σημαντικά στην διαμόρφωση του σχήματος του σταγονιδίου. Διεξάγοντας προσομοιώσεις για εξαιρετικά μεγάλες τιμές της πυκνότητας παρατηρείται απόκλιση της εξωτερικής λύσης από την σφαιρικότητα, ενώ η περιοχές επαφής και μετάβασης παραμένουν σχεδόν ίδιες.

Επιπλέον αναφέρονται μερικές προτάσεις για την συνέχεια διερεύνησης του συγκεκριμένου θέματος. Πιο συγκεκριμένα θα παρουσίαζε ιδιαίτερο ενδιαφέρον η τροποποίηση του υπάρχοντος κώδικα έτσι ώστε να επιλυθεί το πρόβλημα προβλέποντας οξείες γωνίες επαφής κάτι το οποίο πιθανώς να απαιτεί τον σχηματισμό ενός υγρού φιλμ κάτω από το σταγονίδιο. Τέλος θα ήταν χρήσιμη η ανάλυση ευστάθειας του συγκεκριμένου προβλήματος.

NUMERICAL & THEORETICAL STUDY OF A TRAPPED DROP ON FLAT SURFACE DUE TO CAPILLARY & INTERMOLECULAR FORCES

ANASTASIOS ORFANIDIS

University of Thessaly, Department of Mechanical Engineering, 2017

Supervisor: Dr. Nikos Pelekasis, Professor of Computational Fluid Dynamics

Abstract

The study of drops is essential for many practical applications like the CPS and the targeted drug delivery. The intermolecular and the capillary forces are negligible for relatively big drops, but for the above applications they are very important.

In the present thesis the intermolecular and capillary forces are considered, which make the solution more demanding. Two solutions are presented. The first is a numerical solution via the finite element method, while the second is an asymptotic solution based on some assumptions.

After solving the above problem a strong dependence between the contact angle and the wettability parameter is detected. In particular, the contact angle decreases as the influence of intermolecular forces becomes stronger. The present formulation with the finite elements gave solutions characterized only by obtuse contact angles, e.g. the wettability parameter is less than the surface tension ($W_0 < \sigma$). In the asymptotic solution, the drop interface is separated into three areas: the contact, the transition and the outer regions, where with appropriate simplifications of the normal force balance the deformed shape of the solution can be predicted. The asymptotic and numerical solutions are in very good agreement.

Next, parametric analysis is performed in the film thickness and the density of the liquid. The contact and the transition regions have a strong dependence on the thickness of the film, but the outer solution remains unaffected. The density does not affect the solution when microdroplets are considered. Simulations for extremely high values of density reveal the impact of gravity, where the outer solution deviates significantly from the spherical solution and the contact/transition remain the same.

Furthermore, future steps and suggestions for the present problem are outlined. In particular it is suggested the modification of the present fortran code in order to solve the same problem for acute angles probably in the presence of a precursor layer. Finally stability calculations will give a more complete picture of the above problem.

Πίνακας Περιεχομένων

Κεφάλαιο 1	Εισαγωγή.....	1
1.1	Κίνητρο και Υπόβαθρο	1
1.2	Βιβλιογραφική Ανασκόπηση	3
1.3	Οργάνωση Διπλωματικής Εργασίας.....	11
Κεφάλαιο 2	Περιγραφή του Προβλήματος	12
2.1	Περιγραφή Lagrange	12
2.2	Μοντελοποίηση της στατικής ισορροπίας σταγονιδίου πάνω σε επίπεδη επιφάνεια	14
Κεφάλαιο 3	Επίλυση των εξισώσεων του προβλήματος.....	20
3.1	Αριθμητική επίλυση μέσω πεπερασμένων στοιχείων	20
3.1.1	Μέθοδος Παρεμβολής «Κυβικών Splines»	20
3.1.2	Επίλυση εξισώσεων με Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων.....	22
3.2	Ασυμπτωτική επίλυση εξισώσεων.....	29
3.3	Έλεγχος αξιοπιστίας των δύο μεθόδων (Benchmark).....	37
Κεφάλαιο 4	Αποτελέσματα Επίλυσης Εξισώσεων	44
4.1	Παρουσίαση Αποτελεσμάτων.....	44
4.2	Παραμετρική Μελέτη Αποτελεσμάτων.....	47
4.2.1	Παραμετρική μελέτη ως προς το πάχος του υποστρώματος	47
4.2.2	Παραμετρική μελέτη ως προς το ειδικό βάρος.....	50
Κεφάλαιο 5	Συμπεράσματα	55
	Βιβλιογραφία.....	59

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 3-1: Σύγκριση γωνίας επαφής από FEM και από σχέση (3-32) 40

Πίνακας 4-1: Ενδεικτικές τιμές παραμέτρων για επίλυση των εξισώσεων 44

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1-1: Σχηματική αναπαράσταση της γωνίας επαφής στην περιοχή υγρού-στερεού-αερίου όπως ορίζεται από τον Young [16].....	4
Σχήμα 2-1: Λαγκραντζιανή περιγραφή του προβλήματος	15
Σχήμα 2-2: Διαφορά ακτίνας R_0 από ακτίνα R_c	15
Σχήμα 2-3: Γράφημα κατανομής δυναμικού προσκόλλησης (μαύρο) και διαμοριακών δυνάμεων (κόκκινο).....	17
Σχήμα 3-1: Παρουσίαση των τριών περιοχών από τις οποίες αποτελείτε το σταγονίδιο	30
Σχήμα 3-2: Παρουσίαση των δύο συστημάτων συντεταγμένων.....	32
Σχήμα 3-3: Σύγκριση αριθμητικής και ασυμπτωτικής λύσης για $W_0=0.25$ N/m.....	37
Σχήμα 3-4: Σύγκριση αριθμητικής και ασυμπτωτικής λύσης για $W_0=0.30$ N/m.....	38
Σχήμα 3-5: Σύγκριση αριθμητικής και ασυμπτωτικής λύσης για $W_0=0.39$ N/m.....	38
Σχήμα 3-6: Παρουσίαση λύσης για $W_0=0.25$ και εγγεγραμμένος κύκλος.....	40
Σχήμα 3-7: Παρουσίαση αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d αλλά και για διαφορετικό αριθμό κόμβων.....	42
Σχήμα 3-8: Παρουσίαση αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d και αριθμό στοιχείων 1600	43
Σχήμα 4-1: (α) Διάγραμμα συνολικής δύναμης ως προς παράμετρο W_0 , (β) Διάγραμμα συνολικής ενέργειας ως προς παράμετρο W_0 , (γ) Διάγραμμα εσωτερικής πίεσης στον πόλο ως προς παράμετρο W_0 , (δ) Διάγραμμα διαμοριακών δυνάμεων στον πόλο ως προς	

παράμετρο W_0 , (ε) Διάγραμμα μέγιστης μέσης καμπυλότητας ως προς παράμετρο W_0 , (στ) Διαγράμματα σχημάτων σταγονιδίου για διάφορες τιμές της παραμέτρου W_0	46
Σχήμα 4-2: Σύγκριση της λύσης για διαφορετικό πάχος φιλμ για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.25$ N/m.....	48
Σχήμα 4-3: Σύγκριση της λύσης για διαφορετικό πάχος φιλμ για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.30$ N/m.....	49
Σχήμα 4-4: Σύγκριση της λύσης για διαφορετικό πάχος φιλμ για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.39$ N/m.....	49
Σχήμα 4-5: (α) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.25$ N/m, (β) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.30$ N/m, (γ) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.35$ N/m.	51
Σχήμα 4-6: (α) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.20$ N/m, (β) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.25$ N/m, (γ) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.30$ N/m, (δ) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.39$ N/m.	53
Σχήμα 5-1: Μορφή σχήματος σταγονιδίου για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.55$ N/m.....	58

Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή

Στο πρώτο κεφάλαιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας γίνεται μια εισαγωγή στο πρόβλημα που μελετήθηκε. Πιο συγκεκριμένα περιγράφεται το κίνητρο της μελέτης και η συνεισφορά της στην περιοχή της αλληλεπίδρασης μικροσταγόνων με στερεές επιφάνειες. Στη συνέχεια γίνεται μία σύντομη βιβλιογραφική ανασκόπηση για την παρουσίαση σχετικών ερευνητικών εργασιών στο ίδιο αντικείμενο, ώστε να αναδειχθεί η συνεισφορά της παρούσας στην επιστημονική έρευνα. Στο τέλος αυτού του κεφαλαίου περιγράφεται η δομή και τα επόμενα κεφάλαια της εργασίας.

1.1 Κίνητρο και Υπόβαθρο

Σταγόνες με πολύ μικρή διάμετρο που επικάθονται σε μια στερεή επιφάνεια συναντώνται τόσο στην φύση (π.χ. σταγόνες της βροχής) όσο και σε μια σειρά τεχνολογικών εφαρμογών, όπως τα αδιάβροχα υφάσματα, αλλά και σε πιο σύνθετες όπως συσκευές νανοσταγονιδίων, ελεγχόμενη μεταφορά φαρμάκων, αυτοκαθαριζόμενες επιφάνειες [1]. Τα τελευταία χρόνια η τεχνολογία της σύντηξης έχει στραφεί στα υγρά μέταλλα για να προστατεύσει τα μεταλλικά (στερεά) μέρη των αντιδραστήρων από τις ιδιαίτερα υψηλές θερμοκρασίες, που μπορεί να προκαλέσουν θερμικές τάσεις και διάβρωση, μειώνοντας την μηχανική αντοχή των τοιχωμάτων οδηγώντας με αυτό τον τρόπο σε αστοχία [2]. Τα υγρά μέταλλα μπορούν να παραλάβουν υψηλά θερμικά φορτία και να προστατεύσουν τα τοιχώματα του αντιδραστήρα. Η ελεύθερη επιφάνεια του υγρού μετάλλου (PFC), καθώς αλληλεπιδρά με το μαγνητικό πεδίο και την ροή θερμότητας παραμορφώνεται και δημιουργείται ένα πολύ λεπτό υγρό φιλμ, που τελικά προστατεύει τα τοιχώματα. Ωστόσο σε ακραίες συνθήκες παρατηρούνται σταγόνες μετάλλου σε περιοχές μακριά από τα τοιχώματα,

αλλοιώνοντας έτσι το πλάσμα. Μια προταθείσα εναλλακτική της παραπάνω διάταξης είναι ένα πορώδες σύστημα, το οποίο αντλεί υγρό μέταλλο από μία δεξαμενή μέσω τριχοειδών φαινομένων (Capillary Porous System, CPS).

Η κατανόηση της συμπεριφοράς του CPS συστήματος μέσω μιας θεωρητικής μελέτης συμβάλει στον βέλτιστο σχεδιασμό και την οικονομική λειτουργία του. Σε αυτή την κατεύθυνση οι Pelekasis & Benos [3] μελετούν την στατική διαμόρφωση σταγόνας σε CPS λαμβάνοντας υπόψη τις διαμοριακές δυνάμεις, το ηλεκτρικό πεδίο και την τοπογραφία του πόρου. Σε αυτή την περίπτωση εξετάζεται η γωνία επαφής και το ενδεχόμενο σχηματισμού φιλμ, αλλά η γωνία επαφής θεωρείται συνοριακή συνθήκη στο τέλος της επαφής μεταξύ σταγόνας και στερεού υποστρώματος.

Ταυτόχρονα, μικροφουσαλίδες επικαλυμμένες με ελαστικό περίβλημα (contact agents) έχουν προταθεί για στοχευμένη διανομή φαρμάκου [4, 5] και απεικόνιση παθολογικών ιστών [6, 7]. Σε αυτές τις εφαρμογές οι μικροφουσαλίδες δεσμεύονται πάνω σε βιολογικούς ιστούς και μέσω υπερήχων ταλαντώνονται και αποδεσμεύουν τα φάρμακα στην περιοχή που απαιτείται. Σε αυτή την εφαρμογή είναι αρκετές οι παράμετροι που πρέπει να ληφθούν υπόψη. Πιο συγκεκριμένα απαιτείται ο προσδιορισμός του μέτρου ελαστικότητας και του μέτρου κάμψης, αλλά και η ικανότητα να προσκολληθεί η μικροφουσαλίδα στον παθολογικό ιστό. Σε αυτή την περίπτωση σημαντικό ρόλο αναμένεται να έχουν οι διαμοριακές δυνάμεις, καθώς θα καθορίσουν πόσο μέρος της μικροφουσαλίδας θα έρθει σε επαφή με το ιστό και πόσο ισχυρά θα είναι προσκολλημένη. Ο προσδιορισμός των μηχανικών ιδιοτήτων γίνεται πειραματικά μέσω μικροσκοπίου ατομικής δύναμης (AFM) [8, 9], αλλά έχουν αναπτυχθεί και αριθμητικά μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων που μπορούν να περιγράψουν την στατική απόκριση κάτω από AFM [10]. Αξίζει να σημειωθεί ότι και σε ένα τέτοιο μοντέλο είναι πάλι οι διαμοριακές δυνάμεις σε συνδυασμό με την ελαστικότητα που καθορίζουν την στατική

απόκριση, καθώς ανάμεσα στην μικροφουσαλίδα και τον πρόβολο του AFM υπάρχει ένα πολύ λεπτό υγρό φιλμ εξαιτίας του υδρόφιλου χαρακτήρα αυτών των φουσαλίδων. Έτσι, όταν ο πρόβολος πλησιάζει την φουσαλίδα το υγρό φιλμ συμπιέζεται αυξάνοντας τοπικά την πίεση απόσχισης και παραμορφώνεται το κέλυφος [11].

Τα δύο προβλήματα που περιγράφονται παραπάνω αποτελούν δύο συγγενικές περιοχές έρευνας, καθώς πρόκειται για εφαρμογές στις οποίες οι διαμορφικές δυνάμεις καθορίζουν την συνολική απόκριση και με κατάλληλες επιλογές της ενέργειας αλληλεπίδρασης μεταξύ του στερεού υποστρώματος και του περιβάλλοντος ρευστού [32,33] είναι δυνατό να μεταβούμε από το ένα πρόβλημα στο άλλο.

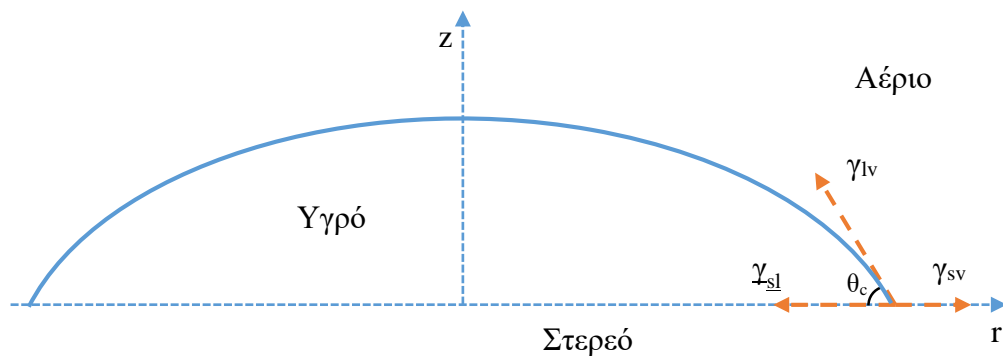
Σε αυτό το πλαίσιο, η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως σκοπό την μελέτη μικροσταγόνας πάνω σε στερεό υπόστρωμα, όπου η γωνία επαφής δεν θα είναι μια γνωστή ποσότητα. Επιπλέον μεταξύ στερεού υποστρώματος και σταγόνας θεωρείται ότι υπάρχει κάποιο αέριο φιλμ, που θα μπορούσε να περιγράφει τους ατμούς της σταγόνας στην περιοχή της επαφής. Αυτό σημαίνει ότι πρακτικά η σταγόνα δεν ακουμπάει το υπόστρωμα, αλλά συγκρατείται πάνω από αυτό μέσω των διαμορφικών δυνάμεων και της βαρύτητας. Έτσι, στην παρούσα εργασία μελετάται η στατική διαμόρφωση μικροφουσαλίδων και πιο συγκεκριμένα η γωνία επαφής. Το πεδίο επίλυσης αφορά όλη την σταγόνα (και στην γραμμή επαφής) και αναζητούνται οι συνθήκες για πλήρη διαβροχή και σχηματισμό φιλμ συναρτήσεως των φυσικών και γεωμετρικών παραμέτρων του προβλήματος.

1.2 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

Η κατανόηση της ικανότητας διαβροχής μιας επιφάνειας από μία σταγόνα είναι κεντρικής σημασίας για όλες τις παραπάνω εφαρμογές. Η παράμετρος διαβροχής (wettability- W_0) μπορεί να ελεγχθεί με πολλούς τρόπους όπως θερμικά [12], χημικά [13], μαγνητικά [14] ή

ηλεκτρικά [15]. Σε αυτή την κατεύθυνση πολλές σημαντικές επιστημονικές εργασίες έχουν πραγματοποιηθεί για τον έλεγχο της διαβροχής μέσω της γωνίας επαφής και των ιδιοτήτων της επιφάνειας.

Η κατάσταση ισορροπίας ενός ρευστού το οποίο διαβρέχεται μερικώς πάνω σε μια ομοιογενή στερεή επιφάνεια έχει μελετηθεί αρχικά από τον Young [16]. Ο Young μέσω της ελαχιστοποίησης της μακροσκοπικής ελεύθερης ενέργειας εξήγαγε μία σχέση η οποία ορίζει την μακροσκοπική γωνία επαφής θ_y ($\cos \theta_c = \frac{\gamma_{sv} - \gamma_{sl}}{\gamma_{vl}}$ όπου ως γ_{sv} , γ_{sl} , γ_{vl} ορίζονται οι τάσεις επαφής μεταξύ στερεού-αερίου, στερεού-υγρού, αερίου-υγρού αντίστοιχα). Αυτή η σχέση χρησιμοποιείται σε πολλά προβλήματα ως συνοριακή συνθήκη για την ελεύθερη επιφάνεια. Ωστόσο πολύ κοντά στην περιοχή επαφής, η γεωμετρία αλλάζει σημαντικά και το ισοζύγιο δυνάμεων δεν μπορεί να εκφραστεί με ακρίβεια μόνο με την επιφανειακή τάση προκειμένου να προβλέψει αυτές τις αλλαγές, αλλά θα πρέπει να ληφθούν υπόψη και οι διαμοριακές δυνάμεις. Συνεπώς παρατηρείται ότι η μορφή του σταγονιδίου παραμορφώνεται τοπικά σε πολύ μικρές κλίμακες έτσι ώστε να επιτευχθεί ένα ευσταθές σχήμα [17, 18]. Μακροσκοπικά ωστόσο εμφανίζεται και πάλι η γωνία του Young [19].



Σχήμα 1-1: Σχηματική αναπαράσταση της γωνίας επαφής στην περιοχή υγρού-στερεού-αερίου όπως ορίζεται από τον Young [16].

Όπως όμως ήδη αναφέρθηκε η μικροκλίμακα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον στα νανοσταγονίδια [20-22] λόγω πολλών πρακτικών εφαρμογών. Προκειμένου υπολογισθεί μία αρκετά ικανοποιητική λύση είναι αναγκαία η ενσωμάτωση των μοριακών αλληλεπιδράσεων στο ισοζύγιο δυνάμεων.

Μία συνηθισμένη τακτική που εφαρμόζεται σε πολλές μελέτες είναι η επιβολή της γωνίας επαφής τοπικά μέσω της σχέσης του Young, η οποία χρησιμοποιείται ως τοπική οριακή συνθήκη [23, 24]. Ωστόσο αυτή η μέθοδος δεν μπορεί να θεωρηθεί πλήρως έγκυρη καθώς οι επιφανειακή τάση δεν μπορεί να οριστεί με ακρίβεια σε πολύ μικρές κλίμακες.

Όλα τα παραπάνω ενίσχυσαν την ανάγκη για απάντηση στην ερώτηση του πως επιλέγεται η γωνία επαφής καθώς και στο ποιο είναι το μήκος επαφής. Οπότε αντί η γωνία επαφής να επιβάλλεται ως μία τοπική συνοριακή συνθήκη για ένα συγκεκριμένο μήκος επαφής [25] θα ήταν προτιμότερο η γωνία να προκύπτει ως μέρος της επίλυσης του ισοζυγίου δυνάμεων σε μοριακό επίπεδο.

Η αλληλεπίδραση δύο επιφανειών που βρίσκονται σε σχετικά κοντινή απόσταση περιγράφηκε αρχικά από τον Derjaguin [26, 27]. Πιο συγκεκριμένα, η δύναμη μεταξύ δύο σωμάτων (καμπύλων ή επίπεδων) περιγράφεται από το άθροισμα απειροστών δυνάμεων που αναπτύσσονται μεταξύ των δύο απειροστών επιφανειών πάνω στα σώματα λόγω κάποιας ενέργειας αλληλεπίδρασης, η οποία μπορεί να είναι ελκτική ή απωστική. Οι δυνάμεις που αναπτύσσονται οφείλονται σε διαμοριακές αλληλεπιδράσεις και περιγράφουν τις van de Waals, ηλεκτροστατικές ή άλλες δυνάμεις [26]. Έτσι, μεταξύ των επιφανειών είναι δυνατό να υπολογισθεί ένα προφίλ πίεσης που περιγράφει την αλληλεπίδραση. Στην βιβλιογραφία η πίεση λόγω διαμοριακών δυνάμεων συναντάται ως πίεση απόσχισης (disjoining pressure), αν και η μορφή των συνηθισμένων συναρτήσεων πίεσης μπορεί να προβλέψει τόσο καταστάσεις έλξης όσο και άπωσης. Αξίζει να σημειωθεί ότι έχει προταθεί ο όρος Derjaguin pressure για

την ορθή περιγραφή αυτής της πίεσης, αλλά δεν έχει γίνει ευρέως αποδεκτός από την επιστημονική κοινότητα [28]. Μία συνηθισμένη μεθοδολογία για την επίλυση αυτού το προβλήματος είναι η προσθήκη των διαμοριακών δυνάμεων στο ορθό ισοζύγιο δυνάμεων, που για την περίπτωση της σταγόνας πρόκειται για τροποποίηση της εξίσωσης Young-Laplace (ανηγγμένη Y-L εξίσωση). Έτσι μπορεί να δειχθεί μέσω ελαχιστοποίησης της συνολικής ενέργειας ότι στο ισοζύγιο των δυνάμεων εμπλέκεται η πίεση απόσχισης (disjoining pressure), καθώς και το δυναμικό αλληλεπίδρασης. Το πρόβλημα της σταγόνας που βρίσκεται πάνω από στερεή επιφάνεια, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω δεν είναι ένα καινούριο πεδίο επιστημονικής έρευνας, αλλά οι τεχνολογικές εξελίξεις των τελευταίων δεκαετιών οδήγησαν στην απαίτηση για λεπτομερέστερη μελέτη του προβλήματος τόσο σε επιστημονικό (με θεωρητικούς υπολογισμούς και πειραματικές μετρήσεις), όσο και σε τεχνολογικό επίπεδο (με βελτίωση των υλικών). Σε αυτό το πλαίσιο, τα τελευταία χρόνια πολλές σημαντικές έρευνες έχουν πραγματοποιηθεί πάνω σε σταγόνες, όπου λαμβάνεται υπόψη η επίδραση των διαμοριακών δυνάμεων. Πιο συγκεκριμένα οι Chamakos et al. [29] μελέτησαν την περίπτωση νανοσταγονιδίων τα οποία κάθονται πάνω σε μη επίπεδες επιφάνειες βλέποντας πως η διαμόρφωση της επιφάνειας επηρεάζει την γωνία επαφής και κατάφεραν να στήσουν ένα μοντέλο το οποίο μπορεί να επιλύσει καταστάσεις Cassie-Baxter, αλλά και Wenzel. Παρομοίως, οι Kavousanakis et al. [30] μελέτησαν όλες τις δυνατές λύσεις στατικής ισορροπίας μίας σταγόνας πάνω από μία μη-επίπεδη επιφάνεια αναζητώντας την θερμοδυναμικά ευσταθή λύση. Και στις δύο περιπτώσεις [29] η μοντελοποίηση βασίστηκε στην πίεση απόσχισης καταφέροντας έτσι να υπολογιστούν στατικές διαμορφώσεις, όπου δεν χρειάστηκε να θεωρηθεί η γωνία επαφής ως συνοριακή συνθήκη, αλλά πρόεκυψε ως μέρος της λύσης. Επιπλέον, υπολογίζονται [29] φαινόμενες γωνίες επαφής που είναι οξείες (καλή διαβροχή), εξαιτίας της διαμόρφωσης της επιφάνειας, ενώ η αντίστοιχη γωνία επαφής

για επίπεδη επιφάνεια αντιστοιχεί σε αμβλεία γωνία (κακή διαβροχή). Νωρίτερα, οι Ruckenstein & Berim [31] μελετούν την στατική ισορροπία σταγόνας θεωρώντας τις διαμοριακές δυνάμεις, αλλά επιπλέον χωρίζουν την σταγόνα σε τρεις περιοχές, ώστε να μελετηθούν οι περιοχές αλληλεπίδρασης υγρού/στερεού, υγρού/υγρού και υγρού/αέρα, αντίστοιχα. Δείχνουν ότι κάθε περιοχή μπορεί να μελετηθεί θεωρώντας διαφορετικό δυναμικό αλληλεπίδρασης και προτείνουν μια σχεδόν γραμμική εξάρτηση της γωνίας επαφής με το πηλίκο της χαρακτηριστικής ενέργειας υγρού/στερεού ως προς αυτής υγρού/υγρού. Οι Diaz et al. [32] εκτίμησαν την στατική γωνία επαφής σταγόνας αλκανίου θεωρώντας τις διαμοριακές δυνάμεις, παρουσία ενός αρκετά λεπτού φιλμ (precursor layer), το οποίο σχηματίζεται από απορρόφηση της υγρής φάσης πάνω στο στερεό. Σε αυτή την μελέτη υπολογίσθηκαν μόνο οξείες γωνίες επαφής για όλους τους τύπους αλκανίου.

Οι Starov & Velarde [28] και Starov [33] μελετούν την στατική διαμόρφωση σταγόνας πάνω από επίπεδη στερεή επιφάνεια και υπολογίζουν μέσω ασυμπτωτικής ανάλυσης την κατανομή του ύψους του precursor layer και περιγράφουν τις συνθήκες που πρέπει να ικανοποιηθούν ώστε να υπάρχει μερική διαβροχή ή πλήρης διαβροχή. Πιο συγκεκριμένα απαιτείται η υγρή φάση να είναι σε ισορροπία με το στερεό υπόστρωμα και την αέρια φάση, αλλά και η αέρια φάση να είναι σε ισορροπία με το στερεό. Η τελευταία απαίτηση ερμηνεύεται από το σχηματισμό ενός φιλμ που έχει απορροφηθεί πάνω στην στερεή επιφάνεια γύρω από την γραμμή επαφή. Επιπλέον σε αυτές τις εργασίες θεωρείται άλλου είδους δυναμικό αλληλεπίδρασης που προβλέπει σε κοντινές και μακρινές αποστάσεις των δύο σωμάτων άπωση και σε ενδιάμεσες έλξη για την σταγόνα. Αξίζει δε να σημειωθεί ότι θεωρούν πως μεταξύ υγρού και στερεού δεν μεσολαβεί κάποια αέρια φάση (μερική ή πλήρης διαβροχή). Οι Zatzzil et al. [34] μελετούν την εξάπλωση σταγόνας σε συνδυασμό με την στεροποίησή της. Χρησιμοποιούν τις διαμοριακές δυνάμεις θεωρώντας ένα μοντέλο για την

disjoining pressure, ώστε να εξαλείψουν όποιες ιδιομορφίες εισάγει η γραμμή επαφής. Ακόμη, οι Sibley et al. [35] παρουσιάζουν ένα μοντέλο για τη περιγραφή κινούμενης γραμμής επαφής και μέσω σύζευξης των Navier-Stokes εξισώσεων με τις διαμοριακές δυνάμεις περιγράφουν θεωρητικά την εξάπλωση σταγόνας. Επιπλέον, η θεώρηση των διαμοριακών δυνάμεων και της προκύπτουσας disjoining pressure αποτελεί μια διαδομένη τεχνική για την μοντελοποίηση και λεπτών υγρών φιλμ πάνω από στερεές επιφάνειες [3, 36, 37].

Η θεώρηση των διαμοριακών δυνάμεων έχει χρησιμοποιηθεί με επιτυχία και για την μοντελοποίηση πιο πολύπλοκων προβλημάτων. Τα πιο χαρακτηριστικά είναι περιπτώσεις στις οποίες η σταγόνα μπορεί να βρίσκεται σε μια επίπεδη επιφάνεια με μη-ομογενείς ιδιότητες διαβροχής [38-40]. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν εργασίες στις οποίες η σταγόνα διασπείρεται πάνω από μία θερμή επιφάνεια [41-43] ή πρόκειται για σταγόνες από φερομαγνητικά ρευστά [44], στα οποία η παρουσία μαγνητικού πεδίου αλλάζει την γωνία επαφής.

Στην ίδια περιοχή έχουν διεξαχθεί αρκετές πειραματικές μελέτες για μια σειρά περιπτώσεων σταγόνας πάνω από επιφάνεια στις οποίες το ενδιαφέρον επικεντρώνεται στην καταγραφή της γωνίας επαφής αλλάζοντας τις συνθήκες του πειράματος. Οι ElSherbini and Jacobi [45] μελέτησαν πειραματικά την στατική διαμόρφωση σταγόνας σε κεκλιμένο επίπεδο και εξήγαγαν μια αντιστρόφως ανάλογη σχέση μεταξύ γωνίας επαφής και γωνίας κεκλιμένου επιπέδου. Οι Bourges-Monnier and Shanahan [46] μελέτησαν πειραματικά την εξάτμιση σταγόνας και κατέγραψαν μείωση της γωνίας επαφής συναρτήσει του χρόνου. Σε αυτή την μελέτη για ένα χρονικό διάστημα η γωνία επαφής παραμένει σταθερή, αν και το ύψος της σταγόνας μειώνεται, καθώς όμως η εξάτμιση εξελίσσεται περαιτέρω η γωνία επαφής τείνει να μειωθεί μέχρι να εξατμιστεί πλήρως. Πρόκειται ωστόσο για ένα πρόβλημα με κινούμενη

γραμμή επαφής (moving contact angle), που ξεπερνάει τους σκοπούς της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Οι Li & Neumann [47] χρησιμοποιώντας οπτικά μέσα υπολόγισαν μείωση της γωνίας επαφής καθώς αυξανόταν το μήκος επαφής για σταγόνες δωδεκανίου και αιθυλενογλυκόλης. Πιο πρόσφατα, οι Stalder et al [48] ανέπτυξαν μία τεχνική για τον ταυτόχρονο υπολογισμό της γωνίας επαφής και της επιφανειακής τάσης μέσω οπτικών μέσων και επίλυση της εξίσωσης Young-Laplace.

Αξίζει επιπλέον να σημειωθεί ότι η θεώρηση των διαμοριακών δυνάμεων βρίσκει εφαρμογή και σε μια σειρά προβλημάτων που αφορούν την προσκόλληση βιολογικών κελυφών που παρουσιάζουν ελαστική συμπεριφορά πάνω σε επιφάνειες. Έτσι, Blount et al. [49] μελέτησαν θεωρητικά την προσκόλληση κελύφους επικαλυμμένο από μονή ή διπλή στοιβάδα λιπιδίου. Χρησιμοποιούν ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης ίδιο με αυτό που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία και θεωρώντας ότι η επιφάνεια έχει σταθερό μήκος (ή άπειρη αντίσταση σε εφελκυσμό), αλλά πεπερασμένη σε κάμψη υπολόγισαν στατικές διαμορφώσεις που αφορούσαν σχήματα με ισχυρή και ασθενή πρόσφυση. Επιπλέον, επιλύουν ασυμπτωτικά τις εξισώσεις ισορροπίας παράγοντας προβλέψεις του σχήματος στην περιοχή επαφής, την μεταβατική ζώνη και την εξωτερική περιοχή. Παρομοίως, οι Cantat et al. [50] ανέπτυξαν αναλυτικές σχέσεις για την συσχέτιση του μήκους επαφής με το μέτρο κάμψης και την παράμετρο διαβροχής του δυναμικού αλληλεπίδρασης. Τέλος, τέτοιου είδους θεωρητικές μελέτες είναι πολύ σημαντικές στον τομέα της στοχευμένης διανομής φαρμάκου, καθώς όπως εξηγήθηκε και παραπάνω απαιτείται καλή γνώση και σχεδιασμός της ικανότητας προσκόλλησης, ώστε το φάρμακο να αποδεσμευθεί σε πάσχοντα ιστό (πχ καρκινικά κύτταρα) και όχι σε υγιή, μειώνοντας με αυτόν τον τρόπο τις ενδεχόμενες παρενέργειες. Σε μια τέτοια εφαρμογή το ελαστικό κέλυφος σπάει με χρήση υπερήχων και μέσω ροής το φάρμακο οδηγείται στον πάσχοντα ιστό [51-54]. Η σύνδεση της μικροφουσαλίδας με τον ιστό γίνεται

μέσω ειδικών συνδέσμων (ligands), που είναι έτσι σχεδιασμένοι ώστε να ξεχωρίζουν τον παθολογικό από τον υγιή ιστό. Σε επίπεδο μοντελοποίησης δεν είναι ακόμα διαδεδομένη η χρήση διαμοριακών δυνάμεων για αυτό το πρόβλημα, αλλά σε μελέτες του εργαστηρίου μας που βρίσκονται σε αρχικό στάδιο προτείνεται η χρήση τους για την περιγραφή της γραμμής επαφής, ώστε να αποφευχθούν οι όποιες πιθανές ιδιομορφίες εισάγει η γραμμή επαφής. Σε αυτή την κατεύθυνση θα γίνει προέκταση της μοντελοποίησης που ανέπτυξε η Lytra [11] ώστε να συνδεθεί η ελαστική συμπεριφορά με τις διαμοριακές δυνάμεις για μικροφουσαλίδες δεσμευμένες πάνω σε στερεό τοίχωμα. Αναμένεται ότι πέρα από την στατική απόκριση, ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο έχει και η επίλυση των Navier-Stokes εξισώσεων στην πλήρη τους θεώρηση [55] ή για ανιζώδη ροή μέσω συνοριακών στοιχείων [56].

Αν και ο όγκος των επιστημονικών εργασιών σε αυτή την περιοχή δεν περιορίζεται στις παραπάνω αναφορές, δεν συναντήθηκε στην έως τώρα γνωστή βιβλιογραφία κάποια αναφορά στην οποία να υπολογίζονται οξείες γωνίες επαφής απουσία precursor layer και κάποιο στρώμα αέρια φάσης μεταξύ στερεού υποστρώματος και σταγόνας. Σε αυτό το πλαίσιο, στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετάται το πρόβλημα της γωνίας επαφής με σκοπό την διερεύνηση του προηγούμενου ερωτήματος και για αυτό το λόγο γίνεται θεωρητική μελέτη της στατικής διαμόρφωσης μέσω του ισοζυγίου δυνάμεων στο οποίο λαμβάνονται υπόψιν οι διαμοριακές δυνάμεις και η επιφανειακή τάση, καθώς και η διαφορά πίεσης και η βαρύτητα. Μέρος της λύσης εκτός από την μορφή του σταγονιδίου (μικροσκοπική και μακροσκοπική γωνία επαφής) σε μόνιμες συνθήκες αποτελεί η εσωτερική πίεση καθώς και το μήκος του σταγονιδίου. Επίσης γίνεται μία προσπάθεια κατανόησης και προσέγγισης της λύσης μέσω μιας ασυμπτωτικής λύσης η οποία αναλύεται παρακάτω.

1.3 Οργάνωση Διπλωματικής Εργασίας

Το υπόλοιπο αυτής της διπλωματικής αποτελείται από τέσσερα κεφάλαια. Στο κεφάλαιο 2 πραγματοποιείται η περιγραφή του προβλήματος και πιο συγκεκριμένα περιγράφεται η γεωμετρία του προβλήματος καθώς και οι εξισώσεις, οι οποίες προέρχονται από τα κατάλληλα ισοζύγια, η λύση των οποίων αποτελεί το πρόβλημα.

Στο κεφάλαιο 3 γίνεται αναφορά στους τρόπους με τους οποίους επιλύεται το πρόβλημα. Λεπτομερέστερα αναφέρονται οι εξισώσεις οι οποίες επιλύονται με την χρήση της «Μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων» καθώς και στο πως εφαρμόζεται η μέθοδος αυτή. Επίσης περιγράφεται με λεπτομέρεια η ασυμπτωτική λύση των εξισώσεων του προβλήματος και το πώς αυτή η λύση υλοποιείται σε επίπεδο κώδικα. Τέλος ακολουθεί ο απαραίτητος έλεγχος του κώδικα (benchmark) έτσι ώστε να εξασφαλισθεί η εγκυρότητα των αποτελεσμάτων.

Στην συνέχεια ακολουθεί το κεφάλαιο 4 στο οποίο παρουσιάζονται και σχολιάζονται τα αποτελέσματα τα οποία προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων του προβλήματος. Αρχικά γίνεται η παρουσίαση των αποτελεσμάτων για διάφορες τιμές της παραμέτρου διαβροχής και σχολιάζεται η φυσική σημασία αυτών και έπειτα ακολουθούν δύο παραμετρικές μελέτες, μία ως προς το πάχος του αέριου φιλμ κάτω από το σταγονίδιο και μία ως προς την πυκνότητα.

Τέλος στο κεφάλαιο 6 γίνεται αναφορά των συμπερασμάτων τα οποία προέκυψαν από την παρούσα εργασία αλλά και κάποιων αναπάντητων ερωτημάτων τα οποία μπορεί να αποτελέσουν αντικείμενο μελλοντικής έρευνας.

Κεφάλαιο 2 Περιγραφή του Προβλήματος

Στο κεφάλαιο αυτό πραγματοποιείται η περιγραφή του προβλήματος. Πρόκειται για ένα μικροσταγονίδιο το οποίο μελετάται όταν αυτό βρίσκεται σε στατική ισορροπία πάνω σε ένα επίπεδο και άκαμπτο υπόστρωμα. Στην ανάλυση λαμβάνεται υπόψιν η βαρύτητα, η διαφορά πίεσης, η επιφανειακή τάση, το δυναμικό προσκόλλησης αλλά και οι διαμοριακές δυνάμεις.

Το υπόλοιπο αυτού του κεφαλαίου οργανώνεται ως εξής. Στο Υποκεφάλαιο 2.1 πραγματοποιείται η περιγραφή Lagrange του προβλήματος ενώ στο Υποκεφάλαιο 2.2 περιγράφεται αναλυτικά το μοντέλο προς επίλυση με χρήση κατάλληλων ισοζυγίων.

2.1 Περιγραφή Lagrange

Η επιφάνεια του σταγονιδίου μελετάται ως πολλά διαφορετικά σωματίδια Lagrange τα οποία περιγράφονται από μία σχετική μεταβλητή ξ , η οποία παίρνει τιμές στο διάστημα $[0, 1]$. Η τιμή της μεταβλητής ξ παίρνει την τιμή 0 στον πρώτο κόμβο (σωματίδιο) και την τιμή 1 στον τελευταίο κόμβο. Με την χρήση της μεταβλητής ξ οι κυλινδρικές συντεταγμένες για μια αξονοσυμμετρική επιφάνεια μπορούν να γραφούν συναρτήσει της μεταβλητής ξ ως εξής:

$$r = r(\xi) \text{ και } z = z(\xi) \text{ για } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (2-1)$$

Το μοναδιαίο κάθετο και τα εφαπτόμενα διανύσματα που προκύπτουν είναι:

$$\vec{n} = z_s \vec{e}_r - r_s \vec{e}_z, \vec{t}_s = r_s \vec{e}_r + z_s \vec{e}_z, \vec{t}_\phi = r \vec{e}_\phi \quad (2-2)$$

όπου $\vec{e}_r, \vec{e}_z, \vec{e}_\varphi$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα σε κυλινδρικές συντεταγμένες [57] και ως s δηλώνεται το μήκος πάνω στην επιφάνεια του σταγονιδίου. Το μοναδιαίο κάθετο και τα εφαπτόμενα διανύσματα ως προς ξ γράφονται ως εξής:

$$\vec{n} = \frac{z_\xi \vec{e}_r - r_\xi \vec{e}_z}{s_\xi}, \vec{t}_s = \frac{r_\xi \vec{e}_r + z_\xi \vec{e}_z}{s_\xi}, \vec{t}_\varphi = r \vec{e}_\varphi \quad (2-3)$$

$$\text{Όπου } s_\xi = \frac{ds}{d\xi} = \sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2} .$$

Στην μελέτη που πραγματοποιείται το πρόβλημα θεωρείται αξονοσυμμετρικό για $\theta \in [0, \pi]$.

Αφού υπολογιστούν τα μοναδιαία διανύσματα της επιφανείας, ο τανυστής της καμπυλότητας μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\underline{\underline{B}} = \vec{\nabla}_s \vec{n} \quad (2-4)$$

Ισχύει ότι $(\vec{\alpha}_1, \vec{\alpha}_2, \vec{n}) = (\vec{t}_s, \vec{t}_\varphi, \vec{n})$ όπου τα $(\vec{\alpha}_1, \vec{\alpha}_2, \vec{n})$ θα χρησιμοποιηθούν στην σχέση

$$b_{ij} = a_i \cdot \underline{\underline{B}} \cdot a_j, \quad i, j = 1, 2. \quad \text{Το } \vec{\nabla}_s \text{ είναι η κλίση της επιφάνειας με: } \vec{\nabla}_s = \sum_{i=1}^2 \vec{a}^i \frac{\partial}{\partial u_i}, \quad u_1 = s$$

$$, \quad u_2 = \varphi \text{ και } \vec{a}^i \text{ είναι τα contra variant διανύσματα: } \vec{a}^i = \frac{(-1)^j \vec{a}_j \times \vec{n}}{|\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{n}|}, \quad i, j = 1, 2 \text{ και } i \neq j . \text{ Οι}$$

καμπυλότητες στις διευθύνσεις s και φ προκύπτουν από διαγωνιοποίηση του πίνακα $\underline{\underline{B}}$:

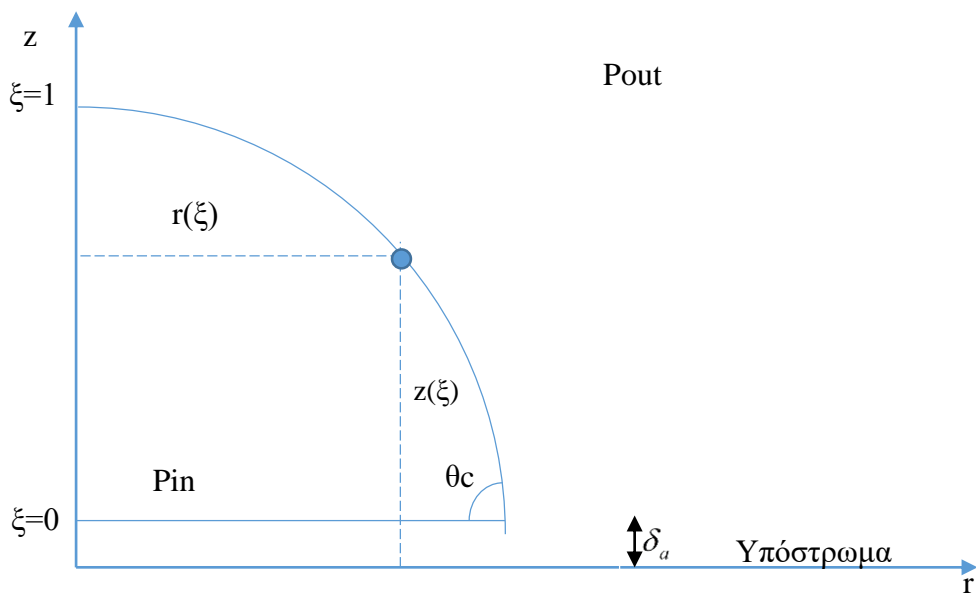
$$k_1 = k_s = \frac{r_\xi z_{\xi\xi\xi} - r_{\xi\xi} z_{\xi\xi}}{s_\xi^3} \quad (2-5)$$

$$k_2 = k_\varphi = \frac{z_{\xi\xi}}{r s_\xi}$$

Τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι τα \vec{t}_s και \vec{e}_φ , οπότε οι κύριες διευθύνσεις είναι οι s και φ . Επίσης, τα r_s και r_φ ορίζουν την τοπική ακτίνα της καμπυλότητας κατά την s και φ διεύθυνση, αντίστοιχα. Άρα η μέση καμπυλότητα είναι $k_m = (k_s + k_\varphi) / 2$

2.2 Μοντελοποίηση της στατικής ισορροπίας σταγονιδίου πάνω σε επίπεδη επιφάνεια

Στο συγκεκριμένο πρόβλημα μελετάται η στατική ισορροπία σταγονιδίου προσκολλημένο σε μία στερεή και επίπεδη επιφάνεια. Για τις ανάγκες του προβλήματος θεωρούμε πως οι παραμορφώσεις είναι αξονοσυμμετρικές ως προς τον άξονα z . Συνεπώς μελετώνται οι παραμορφώσεις μόνο για θετικές τιμές του r .



Σχήμα 2-1: Λαγκραντζιανή περιγραφή του προβλήματος

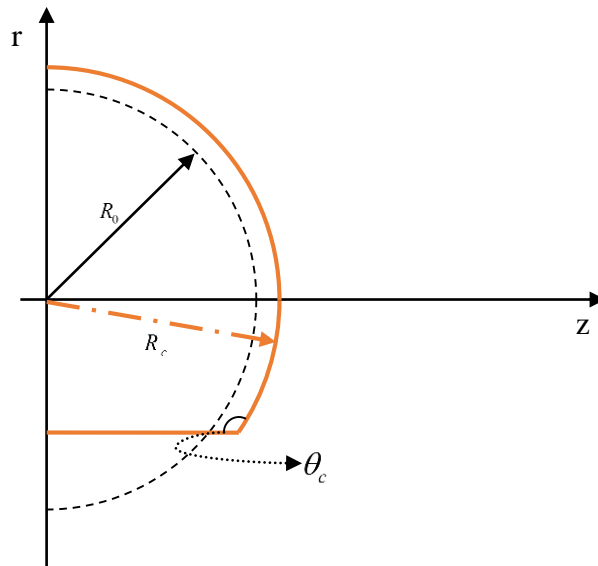
Καθώς το σταγονίδιο πλησιάζει την επιφάνεια οι διαμοριακές δυνάμεις (disjoining pressure) αυξάνονται και το σταγονίδιο παραμορφώνεται. Η γωνία επαφής (θ_c) εξαρτάται άμεσα από τον λόγο της παραμέτρου διαβροχής (wettability W_o) και της επιφανειακής τάσης (σ) μέσω της σχέσης [49]:

$$1 + \cos \theta_c = \frac{W_o}{\sigma} \quad (2-6)$$

Η τελευταία σχέση αναπαράγεται στο επόμενο κεφάλαιο μέσω της ασυμπτωτικής λύσης του παραπάνω προβλήματος. Επίσης το μήκος επαφής εξαρτάται άμεσα από την γωνία επαφής και δίνεται από την σχέση:

$$R_{con} = R_c \sin \theta_c \quad (2-7)$$

Ως R_c ορίζεται η ακτίνα του σφαιρικού σχήματος η οποία προκύπτει έτσι ώστε ο



Σχήμα 2-2: Διαφορά ακτίνας R_0 από ακτίνα R_c

όγκος του σταγονιδίου να ισούται με τον επιθυμητό.

Για την προσομοίωση του παραπάνω προβλήματος, το ισοζύγιο δυνάμεων στην διεύθυνση του κάθετου μοναδιαίου διανύσματος δίνεται από την παρακάτω σχέση [49]:

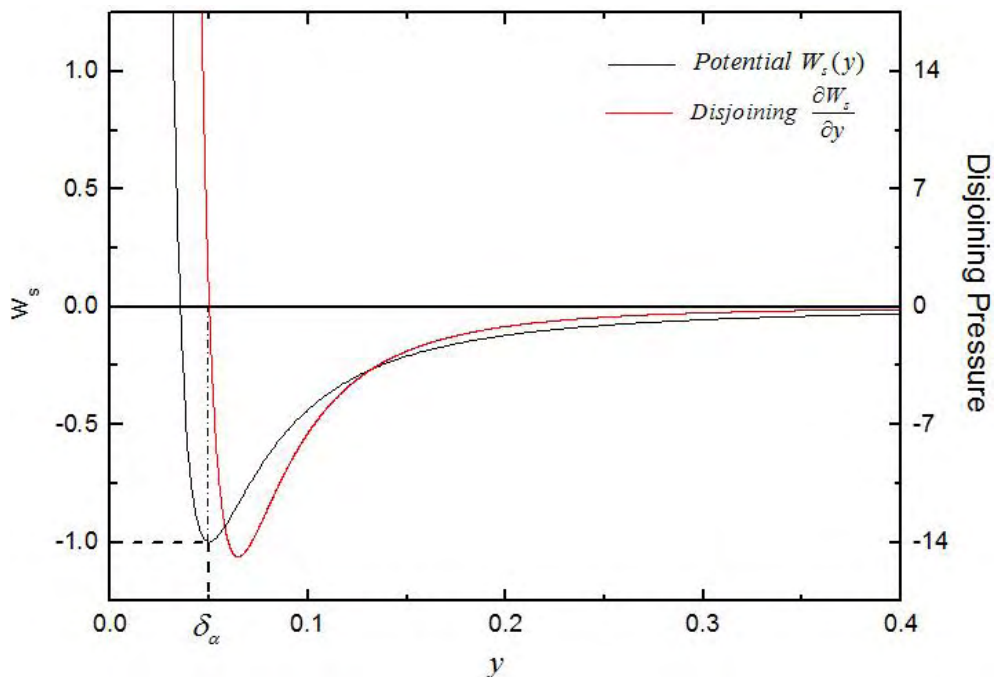
$$(P_{in} - P_{out}) \cdot \vec{n} = \frac{\partial W}{\partial n} \cdot \vec{n} + 2K_m(\sigma + W_s) \cdot \vec{n} \quad (2-8)$$

Όπου $P_{in} = P_{int} - \gamma(z - z_p)$. Ως γ ορίζεται το ειδικό βάρος, δηλαδή το γινόμενο της πυκνότητας του ρευστού με την επιτάχυνση της βαρύτητας, ως z_p ορίζεται η απόσταση της επιφάνειας από τον πόλο, δηλαδή η απόσταση της επιφάνειας από το σωματίδιο στο οποίο ισχύει $\xi=0$, ως z την κατακόρυφη συνιστώσα της θέσης κάθε κόμβου για τον οποίο γράφεται η εξίσωση και τέλος ως P_{int} η πίεση αναφοράς στον κάτω πόλο. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ισοζύγιο δυνάμεων κατά την διεύθυνση του κάθετου μοναδιαίου διανύσματος αποτελεί μία γενίκευση της Young-Laplace εξίσωσης, όπου τώρα πια η μεταβολή της πίεσης δεν εξισορροπείται μόνο από την επιφανειακή τάση, αλλά επιπλέον από τις διαμοριακές δυνάμεις και την βαρύτητα. Οι διαμοριακές δυνάμεις μπορούν να μοντελοποιηθούν μέσω προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, ωστόσο αυξάνεται κατακόρυφα ο υπολογιστικός χρόνος. Στην βιβλιογραφία η αλληλεπίδραση δύο σωμάτων που βρίσκονται σε κάποια απόσταση μοντελοποιείται μέσω ενός δυναμικού πρόσφυσης ή προσκόλλησης, το οποίο περιγράφεται από την παρακάτω συνάρτηση [49]:

$$W_s(y) = W_0 \left[\left(\frac{\delta_\alpha}{y} \right)^4 - 2 \left(\frac{\delta_\alpha}{y} \right)^2 \right] \quad (2-9)$$

Ως δ_α ορίζεται το χαρακτηριστικό πάχος ενός λεπτού αέριου φιλμ μεταξύ σταγόνας και στερεού υποστρώματος. Ενδεικτικές τιμές του όρου δ_α είναι 10-50 nm. Ο πρώτος όρος της παραπάνω συνάρτησης αποτελεί τον απωστικό όρο, ενώ ο δεύτερος όρος αποτελεί τον

ελκτικό όρο. Η παράγωγος της παραπάνω σχέσης ως προς n ισούται με τις διαμοριακές δυνάμεις (disjoining pressure) [26, 58]. Επιπλέον, όταν δύο σώματα που αλληλεπιδρούν είναι σε σχετικά μεγάλη απόσταση ($y \gg \delta_a$), τότε αυτά βρίσκονται σε έλξη, ενώ όταν βρίσκονται σε κοντινή ($y < \delta_a$) είναι σε άπωση. Αξίζει να σημειωθεί, και όπως φαίνεται από το διάγραμμα στο Σχήμα 2-3, το δυναμικό πρόσφυσης ελαχιστοποιείται ως συνάρτηση όταν $y = \delta_a$, ενώ αντίστοιχα η πίεση απόσχισης σε αυτό το σημείο αλλάζει πρόσημο.



Σχήμα 2-3: Γράφημα κατανομής δυναμικού προσκόλλησης (μαύρο) και διαμοριακών δυνάμεων (κόκκινο)

Επομένως, στην κατεύθυνση του κάθετου διανύσματος το ισοζύγιο δίνεται, σύμφωνα με, από την σχέση:

$$P_{int} - \gamma(z - z_p) - P_{out} = \frac{\partial W_s}{\partial n} + 2K_m(\sigma + W_s) \quad (2-10)$$

Η δεύτερη εξίσωση που χρησιμοποιείται αφορά το μήκος των στοιχείων. Αρχικά η εξίσωση που χρησιμοποιήθηκε ήταν η εξής:

$$(dr)^2 + (dz)^2 = (ds)^2 \Leftrightarrow r_\xi^2 + z_\xi^2 = s_\xi^2 \Leftrightarrow r_\xi^2 + z_\xi^2 = s_{\max}^2 \Leftrightarrow s_{\max} - \sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2} = 0 \quad (2-11)$$

Η σχέση αυτή προκύπτει από το πυθαγόρειο θεώρημα και την χρήση του κανόνα της αλυσίδας. Ως s_{\max} θεωρείται το συνολικό μήκος τόξου του σταγονίδιου. Ωστόσο στην πορεία παρατηρήθηκε ότι χρησιμοποιώντας την συγκεκριμένη σχέση απαιτούνταν μεγάλος αριθμός στοιχείων οπότε πραγματοποιήθηκε μια τροποποίηση της συγκεκριμένης σχέσης έτσι ώστε κατά την επίλυση το πλέγμα να μεταβάλλεται. Πιο συγκεκριμένα με την αλλαγή που πραγματοποιήθηκε το πλέγμα πύκνωνε στα σημεία όπου η καμπυλότητα ήταν σημαντικά μεγαλύτερη συγκρινόμενη με τις άλλες περιοχές και με αυτόν τον τρόπο σημαντικά λιγότερα στοιχεία ήταν αρκετά. Μετά την αλλαγή η παραπάνω εξίσωση, σύμφωνα με τον Pelekasis [59] γράφεται:

$$s_{\max} - (1 + d |K_m|) \sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2} = 0 \quad (2-12)$$

Ως d ορίζεται μία παράμετρος η οποία καθορίζει το πόσο σημαντική θα είναι η επίδραση της καμπυλότητας στο πλέγμα. Συνήθως η τιμή του d κυμαίνεται στο διάστημα $[10^{-4}, 9 \cdot 10^{-3}]$, ενώ για $d=0$ αναπαράγουμε την ισομήκη κατανομή των στοιχείων.

Η τρίτη εξίσωση η οποία χρησιμοποιείται για την επίλυση του προβλήματος προέρχεται από την αρχή διατήρησης της μάζας και έχει την εξής μορφή:

$$m = const \Leftrightarrow \rho V = \rho V_0 \Leftrightarrow V = V_0 \quad (2-13)$$

εφόσον θεωρούμε ότι το σταγονίδιο αποτελείται από ασυμπίεστο υγρό. Οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται στην επίλυση του προβλήματος προκύπτουν λόγω της αξονοσυμμετρίας και είναι οι εξής:

$$\begin{aligned} \Sigma \tau o \xi = 0 : r = 0, \frac{\partial^2 r}{\partial \xi^2} = 0, \frac{\partial z}{\partial \xi} = 0 \\ \Sigma \tau o \xi = 1 : r = 0, \frac{\partial^2 r}{\partial \xi^2} = 0, \frac{\partial z}{\partial \xi} = 0 \end{aligned} \quad (2-14)$$

Για την επίλυση του προβλήματος χρησιμοποιούνται οι αδιάστατες μορφές των εξισώσεων. Η αδιαστατοποίηση πραγματοποιείται με την επιφανειακή τάση σ αλλά και το χαρακτηριστικό μήκος R_0 . Οι αδιάστατοι όροι οι οποίοι αντικαθίστανται στις παραπάνω εξισώσεις είναι:

$$\hat{W} = \frac{W}{\sigma}, \hat{P}_{out} = \frac{P_{out} R_0}{\sigma}, \hat{\gamma} = \frac{\gamma R_0^2}{\sigma}, \hat{\sigma} = 1, \hat{\delta}_\alpha = \frac{\delta_\alpha}{R_0} \quad (2-15)$$

Μερικές ενδεικτικές τιμές για τους παραπάνω αδιάστατους αριθμούς είναι $\hat{W} = 0.5, \hat{P}_{out} = 0.94, \hat{\gamma} = 10^{-8}, \hat{\sigma} = 1, \hat{\delta}_\alpha = 0.05$.

Οι άγνωστοι του συνολικού προβλήματος είναι το σχήμα της παραμορφωμένης σταγόνας, (r, z) , η εσωτερική πίεση P_{int} και το μήκος s_{max} (δεν ταυτίζεται πάντα με το πραγματικό μήκος καθώς επηρεάζεται από την τιμή της μέσης καμπυλότητας όταν η παράμετρος $d \neq 0$).

Κεφάλαιο 3 Επίλυση των εξισώσεων του προβλήματος

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται περιγραφή των μεθόδων οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση των εξισώσεων του προβλήματος. Πιο συγκεκριμένα, στην παρούσα εργασία θεωρήθηκαν δύο μέθοδοι. Η πρώτη μέθοδος είναι η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων, ενώ η δεύτερη είναι μία ασυμπτωτική λύση η οποία προκύπτει με κάποιες απλές παραδοχές. Τέλος κρίνεται απαραίτητη η σύγκριση των δύο λύσεων έτσι ώστε να επιτευχθεί η συγκριτική αξιολόγηση (benchmark) των δύο μεθόδων.

3.1 Αριθμητική επίλυση μέσω πεπερασμένων στοιχείων

3.1.1 Μέθοδος Παρεμβολής «Κυβικών Splines»

Προκειμένου να επιλυθεί το πρόβλημα ήταν απαραίτητη η χρήση μιας μεθόδου παρεμβολής. Η μέθοδος η οποία χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία ήταν η παρεμβολή με κυβικές splines, οι οποίες εγγυώνται την συνέχεια μέχρι και της δεύτερης παραγώγου. Στο πρόβλημα που μελετάμε οι όροι της καμπυλότητας περιέχουν και την δεύτερη παράγωγο της θέσης, έτσι οι splines μπορούν να χρησιμοποιηθούν χωρίς να χρειαστεί ολοκλήρωση κατά παράγοντες, όπως γίνεται στην κλασική μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων με Λαγκραντζιανές συναρτήσεις βάσης. Η μορφή των συναρτήσεων βάσης που προκύπτουν δίνεται παρακάτω [60, 61]:

$$B_i(\xi) = \frac{1}{\ell^3} \begin{cases} (\xi - \xi_{i-2})^3, & \text{αν } \xi \in [\xi_{i-2}, \xi_{i-1}] \\ \ell^3 + 3\ell^2(\xi - \xi_{i-1}) + 3\ell(\xi - \xi_{i-1})^2 - 3(\xi - \xi_{i-1})^3, & \text{αν } \xi \in [\xi_{i-2}, \xi_{i-1}] \\ \ell^3 + 3\ell^2(\xi_{i+1} - \xi) + 3\ell(\xi_{i+1} - \xi)^2 - 3(\xi_{i+1} - \xi)^3, & \text{αν } \xi \in [\xi_{i-2}, \xi_{i-1}] \\ (\xi_{i+2} - \xi)^3, & \text{αν } \xi \in [\xi_{i-2}, \xi_{i-1}] \\ 0, & \text{για οποιοδήποτε άλλο } \xi \end{cases} \quad (3-1)$$

Όπου ως ℓ ορίζεται το πάχος του στοιχείου ($\ell = \xi_{i+1} - \xi_i$). Αποδεικνύεται εύκολα ότι ένα πολυώνυμο spline είναι μία συνάρτηση η οποία είναι μη μηδενική μέσα σε τέσσερα διαδοχικά στοιχεία. Αντικαθιστώντας τα ξ_j που αντιστοιχούν σε κόμβο στις παραπάνω συναρτήσεις B_i έχουμε ότι:

$$B_i(\xi_j) = \begin{cases} 4, & \text{αν } j = i \\ 1, & \text{αν } j = i-1 \text{ ή } j = i+1 \\ 0, & \text{αν } j = i-2 \text{ ή } j = i+2 \end{cases} \quad (3-2)$$

Στην παρούσα εργασία οι συναρτήσεις βάσεις που χρησιμοποιούνται είναι οι παραπάνω διαιρεμένες με τέσσερα. Συνεπώς γίνεται αντιληπτό ότι στον κόμβο που αντιστοιχεί στο ξ_i συνεισφέρει όχι μόνο η συνάρτηση βάσης του συγκεκριμένου κόμβου αλλά και των δύο γειτονικών του κόμβων. Αποτέλεσμα αυτού είναι οι άγνωστοι r και z να είναι διαφορετικοί από τους συντελεστές των splines. Συνεπώς τα r και z περιγράφονται ως εξής:

$$r(\xi) = \sum_{j=0}^{N+1} a_j B_j(\xi) \quad (3-3)$$

$$z(\xi) = \sum_{j=0}^{N+1} b_j B_j(\xi) \quad (3-4)$$

Όπου a_j και b_j είναι οι άγνωστοι συντελεστές της αναπαράστασης splines και N είναι ο αριθμός των κόμβων. Οι δύο φανταστικοί κόμβοι του προβλήματος (0 και $N+1$) υπολογίζονται μέσω των οριακών συνθηκών οι οποίες αναφέρθηκαν παραπάνω.

3.1.2 Επίλυση εξισώσεων με Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων

Οι κύριες εξισώσεις που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του παραπάνω προβλήματος είναι το ισοζύγιο δυνάμεων στην κάθετη στην επιφάνεια κατεύθυνση. Το ισοζύγιο αυτό προκύπτει από ελαχιστοποίηση της ενέργειας, βλέπε Appendix B στην Lytra [11]. και η εξίσωση η οποία καθορίζει το μήκος των στοιχείων λαμβάνοντας υπόψιν την τιμή της μέσης καμπυλότητας. Για την επίλυση χρησιμοποιείται η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων Galerkin ώστε οι διαφορικές εξισώσεις να μετασχηματιστούν σε μη γραμμικές αλγεβρικές εξισώσεις οι οποίες θα επιλυθούν ώστε να υπολογιστούν οι συντελεστές των r και z που χρησιμοποιούνται στην παρεμβολή με κυβικές (cubic) splines. Αρχικά οι τιμές των r και z , καθώς και οι παράγωγοι τους αντικαθίστανται μέσω της παρεμβολής των cubic splines, σχέσεις (3-3) και (3-4). Στην συνέχεια το ισοζύγιο δυνάμεων πολλαπλασιάζεται με τις συναρτήσεις βάσης και ολοκληρώνεται στην επιφάνεια του σταγονιδίου. Η σχέση που προκύπτει αποτελεί την ασθενή μορφή της διαφορικής εξίσωσης. Για όλα τα ολοκληρώματα που πρέπει να υπολογιστούν χρησιμοποιείται η ολοκλήρωση Gauss [62] με τέσσερα σημεία σε κάθε στοιχείο. Οι τελικές εξισώσεις στην ασθενή μορφή δίνονται παρακάτω:

Ισοζύγιο Δυνάμεων (Normal Force Balance):

$$R_1 = \int_0^{2\pi} \int_0^1 (P_{out} + \rho g(z - z_p) - P_{int} + \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial z}{\partial n} + 2K_m(\sigma + W_s)) B_i r s_\xi d\xi d\varphi \quad (3-5)$$

Σχέση για μήκος στοιχείων (Arc-Length Equation):

$$R_2 = \int_0^1 (s_{max} - d |K_m| \sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}) B_i s_\xi d\xi \quad (3-6)$$

Αρχή διατήρησης μάζας:

Ο πίνακας αυτός έχει διαστάσεις $(2N+6) \times (2N+6)$. Όπου N είναι ο αριθμός των κόμβων. Οι πρώτες $2N+4$ γραμμές και στήλες αφορούν τις δύο πρώτες εξισώσεις (ισοζύγιο δυνάμεων και μήκος στοιχείων) και οι τιμές των κελιών είναι οι παράγωγοι των δύο πρώτων εξισώσεων ως προς τους συντελεστές των r και των z ($R_{a_j}^{1,i} = \partial R_{1,i} / \partial a_j$ για την R_1 και τους συντελεστές του r (αντίστοιχα και τα άλλα υπόλοιπα R)). Ο πίνακας που προκύπτει έχει μη μηδενικές τιμές σε μία ζώνη με εύρος 15. Οι δύο τελευταίες στήλες περιλαμβάνουν τις ιακωβιανές των R_1 και R_2 για την εσωτερική πίεση P_{int} και για το μήκος s_{max} . Στις δύο τελευταίες γραμμές γράφονται οι ιακωβιανές των R_3 και R_4 ως προς τους συντελεστές των r και z καθώς και ως προς την εσωτερική πίεση και το μήκος στις δύο τελευταίες στήλες. Συνεπώς γίνεται κατανοητό ότι οι πρώτες $2N+4$ γραμμές και στήλες του πίνακα μπορούν να μετατραπούν σε έναν πίνακα ζώνης ο οποίος θα έχει διαστάσεις $(2N+4) \times (15)$.

$$[J] = \begin{array}{|c|c|} \hline \begin{array}{c} \textit{Banded} \\ (2N+4) \times (2N+4) \end{array} & \begin{array}{c} \textit{Right} \\ (2N+4) \times 2 \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \textit{Bottom} \\ 2 \times (2N+4) \end{array} & \begin{array}{c} \textit{Head} \\ 2 \times 2 \end{array} \\ \hline \end{array} \quad [J] = \begin{array}{|c|c|} \hline \begin{array}{c} \textit{Banded} \\ (2N+4) \times 15 \end{array} & \begin{array}{c} \textit{Right} \\ (2N+4) \times 2 \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \textit{Bottom} \\ 2 \times (2N+4) \end{array} & \begin{array}{c} \textit{Head} \\ 2 \times 2 \end{array} \\ \hline \end{array}$$

Τέλος οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος για $\xi=0$ εφαρμόζονται στις πρώτες 3 γραμμές ενώ για $\xi=1$ εφαρμόζονται στις 2 τελευταίες γραμμές του banded πίνακα. Στην συνέχεια πραγματοποιείται μέσω μιας υπορουτίνας η αντιστροφή του πίνακα και μέσω της μεθόδου Newton-Raphson ανανεώνεται η λύση. Η λύση είναι τοποθετημένη σε μία στήλη με $2N+6$ γραμμές. Οι γραμμές μονού αριθμού αφορούν τους συντελεστές ως προς r ενώ οι γραμμές περιττού αριθμού αφορούν τους συντελεστές ως προς z . Στην προτελευταία γραμμή βρίσκεται η εσωτερική πίεση (P_{int}) και στην τελευταία γραμμή βρίσκεται το μήκος (s_{max}).

Πρέπει να αναφερθεί πως προκειμένου οι λύσεις οι οποίες προκύπτουν από την επίλυση του προβλήματος να έχουν φυσικό νόημα σε κάθε βήμα για διαφορετικό W_0 η λύση

μετατοπίζεται στο σύστημα αξόνων κατά Δz_p έτσι ώστε η απόσταση του σταγονιδίου από την επιφάνεια να είναι τέτοια ώστε να εξασφαλίζεται η ελαχιστοποίηση της ενέργειας. Στην περιοχή επαφής αμελώντας την βαρύτητα η σχέση (2-10) γράφεται ως εξής:

$$P_{int} - P_{out} = \frac{\partial W_s}{\partial n} = 4W_0 \left[-\frac{\delta_\alpha^4}{z^5} + \frac{\delta_\alpha^2}{z^3} \right] \frac{\partial n}{\partial z} = 4W_0 \left[\frac{\delta_\alpha^4}{z^5} - \frac{\delta_\alpha^2}{z^3} \right] \quad (3-10)$$

Στην εξωτερική περιοχή αμελώντας την βαρύτητα η σχέση (2-10) γράφεται ως εξής:

$$P_{int} - P_{out} = 2K_m \sigma \Rightarrow \Delta P = \frac{2\sigma}{R_{curv}} \quad (3-11)$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση (3-10) την σχέση (3-11) και αντικαθιστώντας το $z = x\delta_\alpha$

προκύπτει:

$$\frac{2\sigma}{R_{curv}} = 4W_0 \left[\frac{1}{x^5\delta_\alpha} - \frac{1}{x^3\delta_\alpha} \right] \Rightarrow \frac{2\sigma\delta_\alpha}{4R_{curv}W_0} = \frac{1}{x^5} - \frac{1}{x^3} \Rightarrow 1 - x^2 - \left(\frac{2\sigma\delta_\alpha}{4R_{curv}W_0} \right) x^5 = 0 \quad (3-12)$$

Η απόσταση z_p δίνεται από το γινόμενο του δ_α με την τιμή x η οποία προκύπτει από την επίλυση της παρακάτω εξίσωσης, η οποία πραγματοποιείται με την χρήση της μεθόδου Newton-Raphson.

Αρχικά το πρόβλημα επιλύεται με την απλή τεχνική παραμετρικού βηματισμού (simple continuation) όπου η τιμή της παραμέτρου μεταβάλλεται κατά μία σταθερή τιμή σε κάθε βήμα. Η λύση του προηγούμενου βήματος χρησιμοποιείται ως πρόβλεψη για το επόμενο βήμα. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα η παραμετροποίηση πραγματοποιείται ως προς την παράμετρο διαβροχής W_0 . Για τιμές της παραμέτρου W_0 κοντά στην τιμή της επιφανειακής τάσης η σύγκλιση γίνεται δυσκολότερη, λόγω της ύπαρξης κάποιου limit point. Σε αυτήν την περίπτωση χρησιμοποιείται η τεχνική παραμετρικού βηματισμού μήκους-τόξου (Arc-Length continuation) για την διευκόλυνση της σύγκλισης [59, 64]. Στην μέθοδο μήκους-τόξου η

παράμετρος δεν μεταβάλλεται κατά μία συγκεκριμένη σταθερή τιμή αλλά αποτελεί μέρος της λύσης. Για τον υπολογισμό της χρησιμοποιείται μία ακόμη εξίσωση η οποία μπαίνει σε μια επιπλέον γραμμή στο τέλος του πίνακα. Η εξίσωση αυτή δίνεται παρακάτω:

$$\Phi = (a_j^{old} - a_j)^2 + (b_j^{old} - b_j)^2 + (P_{int}^{old} - P_{int})^2 + (S_{max}^{old} - S_{max})^2 + (W_0^{old} - W_0)^2 - \Delta s^2 \quad (3-13)$$

όπου Δs είναι μια παράμετρος η οποία αναπαριστά την γενικευμένη απόσταση δύο διαδοχικών λύσεων. Όπως και στην απλή παραμετροποίηση ο συμβολισμός x_j^i χρησιμοποιείται για την λύση του προηγούμενου βήματος με παράμετρο W_0^i . Για τον αρχικό υπολογισμό του Δs χρησιμοποιούνται οι δύο τελευταίες λύσεις οι οποίες προέκυψαν κατά την απλή παραμετροποίηση. Κατά την εφαρμογή της μεθόδου, όπως ήδη αναφέρθηκε μια γραμμή και μία στήλη προστίθενται στον πίνακα της ιακωβιανής. Στην τελευταία γραμμή μπαίνουν οι παράγωγοι της παραπάνω εξίσωσης ως προς τον κατάλληλο άγνωστο, και στην τελευταία στήλη τοποθετούνται οι παράγωγοι όλων των παραπάνω εξισώσεων ως προς την παράμετρο W_0 . Η μορφή του προβλήματος συνεπώς πλέον είναι:

$$\begin{bmatrix} J & R_{W_0}^j \\ \Phi_{x_j} & \Phi_{W_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x_j \\ \delta W_0 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R_j \\ \Phi \end{bmatrix} \quad (3-14)$$

όπου $[J]$ είναι ο πίνακας της ιακωβιανής όπως ορίζεται παραπάνω (στην απλή παραμετροποίηση), $R_{W_0}^j$ είναι ένα διάνυσμα στήλη διάστασης $2N+6$ όπου περιλαμβάνει την παράγωγο της εξίσωσης που αντιστοιχεί στην γραμμή j ως προς το W_0 , Φ_{x_j} είναι ένα διάνυσμα γραμμή με διαστάσεις $2N+6$ όπου περιλαμβάνει την παράγωγο της παραπάνω εξίσωσης

ως προς τον άγνωστο που αντιστοιχεί στην στήλη j, και τέλος ως Φ_{w_0} ορίζεται η παράγωγος της παραπάνω εξίσωσης ως προς την παράμετρο W_0 . Ως δW_0 ορίζεται το βήμα της παραμέτρου W_0 δηλαδή το κατά πόσο θα μεταβληθεί.

Κατόπιν της επίλυσης του παραπάνω συστήματος με την μέθοδο Newton-Raphson, η πρόβλεψη της λύσης για το επόμενο βήμα της επίλυσης δίνεται επιλύοντας τις παρακάτω εξισώσεις, λύση των οποίων αποτελούν οι παράγωγοι των αγνώστων και της παραμέτρου W_0 ως προς το s:

$$\begin{bmatrix} J & R_{W_0}^j \\ \Phi_{x_j} & \Phi_{W_0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial x_j / \partial s \\ \partial W_0 / \partial s \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \partial R_j / \partial s \\ \partial \Phi / \partial s \end{bmatrix} \quad (3-15)$$

Όπου $\partial R_j / \partial s = 0$ και $\partial \Phi / \partial s = -2\Delta s$. Στην συνέχεια η πρόβλεψη της λύσης για την επόμενη τιμή της παραμέτρου W_0 δίνεται από:

$$x_f^{i+1} = x_f^i + \left. \frac{\partial x_f}{\partial s} \right|^i \Delta s \quad (3-16)$$

Και η παράμετρος W_0 δίνεται από:

$$W_0^{i+1} = W_0^i + \left. \frac{\partial W_{0j}}{\partial s} \right|^i \Delta s \quad (3-17)$$

Για το πρώτο βήμα της Arc-Length παραμετροποίησης η αρχική πρόβλεψη των παραγώγων δίνεται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\left. \frac{\partial x_j}{\partial s} \right|^2 = \frac{x_j^1 - x_j^0}{\Delta s}, \forall j \in [1, 2NNODE + 6] \quad \text{και} \quad \left. \frac{\partial W_0}{\partial s} \right|^2 = \frac{W_0^1 - W_0^0}{\Delta s} \quad (3-18)$$

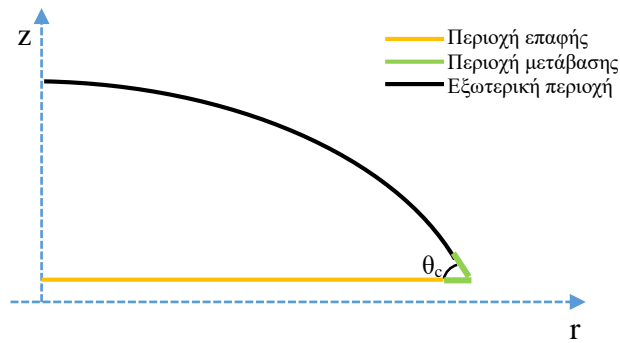
Τέλος δίνονται παρακάτω τα βήματα τα οποία εκτελούνται κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου.

- 1) Εκτίμηση της γωνίας επαφής και του μήκους επαφής μέσω των σχέσεων (2-6) και (2-7) αντίστοιχα και δημιουργία του αρχικού σχήματος που θα χρησιμοποιηθεί στην απλή παραμετροποίηση.
- 2) Καθορισμός της τιμής της παραμέτρου W_0 μέχρι την οποία θα πραγματοποιηθεί η απλή παραμετροποίηση και εκκίνηση βημάτων της.
- 3) Μετατόπιση της λύσης του προηγούμενου βήματος έτσι ώστε να αποτελέσει την αρχική πρόβλεψη για το τρέχον βήμα με βάση το νέο z_p .
- 4) Επίλυση του προβλήματος με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson και ενημέρωση των πινάκων και των μεταβλητών στους οποίους είναι αποθηκευμένη η λύση. Εγγραφή της λύσης σε αρχείο.
- 5) Αλλαγή της παραμέτρου W_0 κατά ΔW_0 . Αν η νέα τιμή της παραμέτρου είναι μικρότερη από την τιμή η οποία καθορίστηκε στο Βήμα 2 εκτελούνται ξανά τα βήματα 3-5. Διαφορετικά εκτελείται το βήμα 6.
- 6) Υπολογισμός του αρχικού Δs και των αναγκαίων παραγώγων για την εκκίνηση της παραμετροποίησης Arc-Length.
- 7) Εκκίνηση της Arc-Length παραμετροποίησης.
- 8) Εκκίνηση των επαναλήψεων της μεθόδου Newton-Raphson και μετατόπιση της λύσης στο νέο σύστημα συντεταγμένων σε κάθε επανάληψη.
- 9) Ενημέρωση της λύσης, της παραμέτρου W_0 καθώς και των παραγώγων των μεταβλητών ως προς s .
- 10) Αφού επιτευχθεί η σύγκλιση εγγραφή της λύσης σε αρχείο.

3.2 Ασυμπτωτική επίλυση εξισώσεων

Προκειμένου το πρόβλημα να επιλυθεί ασυμπτωτικά είναι αναγκαία η θεώρηση κάποιων παραδοχών οι οποίες βασίζονται στην φυσική του προβλήματος. Για την μελέτη του σχήματος του σταγονιδίου, το σταγονίδιο χωρίζεται σε τρεις περιοχές. Η πρώτη περιοχή αφορά την επίπεδη περιοχή και ονομάζεται περιοχή επαφής (contact region). Η δεύτερη περιοχή αφορά την περιοχή στην οποία πραγματοποιείται η μετάβαση από την περιοχή επαφής στη σφαιρική περιοχή και ονομάζεται περιοχή μετάβασης (transition region). Τέλος υπάρχει το σφαιρικό τμήμα της λύσης το οποίο ονομάζεται εξωτερική περιοχή (outer region) όπου οι διαμοριακές δυνάμεις είναι αμελητέες..

Πριν την έναρξη της μελέτης είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός των σημείων στα οποία πραγματοποιείται η μετάβαση από την μία περιοχή στην άλλη. Η περιοχή επαφής ορίζεται για ένα συγκεκριμένο z' για κάθε $r' < L - 10\delta_\alpha$. Ως L ορίζεται το μήκος επαφής το οποίο υπολογίζεται κατά την επίλυση. Το 10 με το οποίο πολλαπλασιάζεται το δ_α αποτελεί μία παραδοχή, είναι μια τιμή η οποία μπορεί να μεταβληθεί και αποτελεί εκτίμηση της απόστασης από το σημείο επαφής κατά την οποία η στατική ισορροπία χαρακτηρίζεται από ισοζύγιο μεταξύ διαμοριακών δυνάμεων και της διαφοράς πίεσης. Η περιοχή μετάβασης ορίζεται για $z' \in [\bar{z}_0\delta_\alpha, \bar{z}_T\delta_\alpha]$, ενώ η εξωτερική περιοχή ορίζεται για $z' > 10\delta_\alpha$.



Σχήμα 3-1: Παρουσίαση των τριών περιοχών από τις οποίες αποτελείτε το σταγονίδιο

Όσον αφορά τα συστήματα συντεταγμένων θεωρούνται δύο συστήματα. Το πρώτο είναι το ολικό και είναι το (r', z') , ενώ το δεύτερο είναι ένα τοπικό σύστημα για την περιοχή μετάβασης (\bar{r}, \bar{z}) .

Περιοχή Επαφής (Contact Region)

Αρχικά πρέπει να αναφερθεί πως λόγω του πολύ μικρού όγκου των σταγονιδίων τα οποία μελετώνται η βαρύτητα είναι ασήμαντη και στην συνέχεια θεωρείται μηδενική. Για τον υπολογισμό του z' στην περιοχή επαφής χρησιμοποιείται η εξίσωση (2-10). Γίνεται κατανοητό πως στην συγκεκριμένη περιοχή οι όροι οι οποίοι επιβιώνουν είναι οι δύο πιέσεις και οι διαμοριακές δυνάμεις. Αυτό συμβαίνει επειδή η καμπυλότητα στην περιοχή επαφής είναι μηδέν. Άρα το ισοζύγιο των δυνάμεων στην ορθή διεύθυνση γίνεται:

$$P_{int} - P_{out} = \frac{\partial W}{\partial n} \quad (3-19)$$

Αντικαθιστώντας τον τύπο του $\frac{\partial W}{\partial n}$ προκύπτει:

$$P_{int} - P_{out} = \frac{4W_0}{\delta_\alpha} \left[\left(\frac{\delta_\alpha}{z'} \right)^5 - \left(\frac{\delta_\alpha}{z'} \right)^3 \right] \frac{r_\xi L}{\underbrace{\sqrt{Lr_\xi^2 + z_\xi^2 \delta_\alpha^2}}_{=1}} \Rightarrow \frac{(P_{int} - P_{out})\delta_\alpha}{4W_0} = \left[\left(\frac{\delta_\alpha}{z'} \right)^5 - \left(\frac{\delta_\alpha}{z'} \right)^3 \right] \quad (3-20)$$

Θεωρώντας $\bar{z} = \frac{z'}{\delta_\alpha}$ και $\bar{z} = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon = \frac{\delta - \delta_\alpha}{\delta_\alpha}$ προκύπτει:

$$\frac{(P_{int} - P_{out})\delta_\alpha}{4W_0} = \bar{z}^{-5} - \bar{z}^{-3} \Rightarrow \frac{(P_{int} - P_{out})\delta_\alpha}{4W_0} = \frac{1 - \bar{z}^2}{\bar{z}^5} \Rightarrow \frac{(P_{out} - P_{int})\delta_\alpha}{4W_0} = \frac{\bar{z}^2 - 1}{\bar{z}^5} \Rightarrow \quad (3-21)$$

$$\frac{(P_{out} - P_{int})\delta_\alpha}{4W_0} = \frac{1 + 2\varepsilon - 1}{1 + 5\varepsilon}$$

Πολλαπλασιάζοντας με (1-5ε) αριθμητή και παρονομαστή στην παραπάνω σχέση και θεωρώντας το (5ε)⁵ αμελητέο επειδή ε << 1 προκύπτει:

$$\frac{(P_{out} - P_{int})\delta_\alpha}{4W_0} = 2\varepsilon \Rightarrow \varepsilon = \frac{(P_{out} - P_{int})\delta_\alpha}{8W_0} \quad (3-22)$$

Ισχύει όμως ότι $\hat{z} = \frac{\delta}{\delta_\alpha}$ όπου δ είναι το z' της περιοχής επαφής. Συνεπώς προκύπτει ότι:

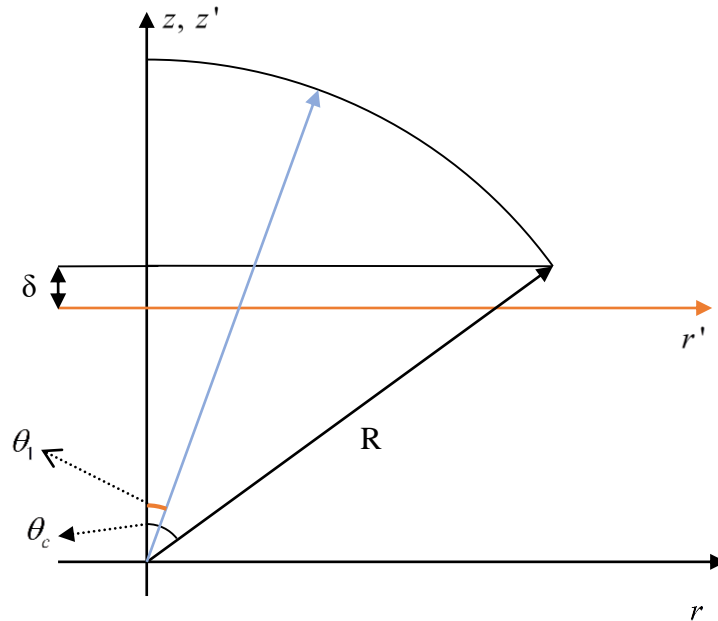
$$z' = \delta_\alpha + \frac{\Delta P \delta_a^2}{8W_0} \quad (3-23)$$

Ο όρος $\frac{\Delta P \delta_a^2}{8W_0}$ μπορεί να θεωρηθεί μηδενικός καθώς η τάξη μεγέθους του δ_a^2 είναι 10⁻¹⁸.

Εξωτερική Περιοχή (Outer Region)

Όσον αφορά την εξωτερική περιοχή θεωρούμε ότι η συνολική μας λύση είναι ένα σφαιρικό τμήμα. Συνεπώς ο όγκος του σφαιρικού αυτού σχήματος δίνεται από την σχέση:

$$V = \frac{2\pi}{3} R^3 \left[1 - \frac{3}{2} \cos \theta_c + \frac{\cos^3 \theta_c}{2} \right] \quad (3-24)$$



Σχήμα 3-2: Παρουσίαση των δύο συστημάτων συντεταγμένων

Όπου θ_c είναι η γωνία επαφής η οποία υπολογίζεται από την σχέση (2-6). Στην συνέχεια για την δημιουργία του σχήματος χρησιμοποιούνται οι σχέσεις:

$$\begin{aligned} z &= R(\cos \theta_1 - \cos \theta_c) \\ r &= R \sin \theta_1 \end{aligned} \tag{3-25}$$

Για τον ακριβή προσδιορισμό της ακτίνας R του σφαιρικού τομέα χρησιμοποιείται η εξίσωση (2-6). Οι διαμοριακές δυνάμεις καθώς και το δυναμικό προσκόλλησης είναι αμελήτα καθώς η εξωτερική περιοχή βρίσκεται σε σχετικά μεγάλη απόσταση από την επιφάνεια. Συνεπώς το R που προκύπτει για την εξωτερική περιοχή είναι:

$$P_{int} - P_{out} = 2K_m \frac{\sigma}{R} \Rightarrow R = \frac{2\sigma}{P_{int} - P_{out}} \tag{3-26}$$

Περιοχή Μετάβασης (Transition Region)

Για την περιοχή μετάβασης είναι απαραίτητος ο ορισμός και η χρήση κάποιων επιπλέον μεταβλητών οι οποίες δίνονται παρακάτω:

$$\hat{z} = \frac{z}{\delta_\alpha}, \hat{r} = \frac{r - L_c}{\ell}, \bar{r} = \frac{r}{L_c} \quad (3-27)$$

Όπου ως ℓ ορίζεται η απόσταση στην κατεύθυνση r του σημείου από το οποίο ξεκινά η περιοχή μετάβασης ως το σημείο με το μεγαλύτερο r και ως L_c ορίζεται το μήκος επαφής.

Για την μελέτη της μεταβατικής περιοχής χρησιμοποιείται και πάλι το ισοζύγιο δυνάμεων στην κατεύθυνση του κάθετου διανύσματος.

$$P_{int} - P_{out} - \frac{4W_0}{\delta_\alpha} (\hat{z}^{-5} - \hat{z}^{-3}) \frac{\hat{r}_\xi \ell}{\sqrt{\ell^2 \hat{r}_\xi^2 + \delta_\alpha^2 \hat{z}_\xi^2}} = (\sigma + W) \frac{\delta_\alpha \hat{z}_\xi}{L_c \bar{r} \sqrt{\ell^2 \hat{r}_\xi^2 + \delta_\alpha^2 \hat{z}_\xi^2}} +$$

$$(\sigma + W) \frac{\ell \hat{r}_\xi \delta_\alpha \hat{z}_{\xi\xi} - \ell r_{\xi\xi} \delta_\alpha \hat{z}_\xi}{(\ell^2 \hat{r}_\xi^2 + \delta_\alpha^2 \hat{z}_\xi^2)^{3/2}} \quad (3-28)$$

Ο όρος $\frac{\delta_\alpha \hat{z}_\xi}{L_c \bar{r} \sqrt{\ell^2 \hat{r}_\xi^2 + \delta_\alpha^2 \hat{z}_\xi^2}}$ είναι πολύ μικρός και στην συνέχεια θεωρείται αμελητέος. Στην

περίπτωση της μικρής πρόσφυσης μπορεί να δειχθεί ότι $\frac{W_0}{\delta_\alpha} \sim \frac{\sigma \delta_\alpha}{\ell^2} \Rightarrow \ell \sim \delta_\alpha \sqrt{\frac{\sigma}{W_0}}$ και επειδή

στην περίπτωση μεγάλης πρόσφυσης ισχύει ότι $\frac{\sigma}{W_0} \approx 1$ προκύπτει το συμπέρασμα ότι $\ell \sim \delta_\alpha$.

Κατόπιν μερικών απλοποιήσεων και πράξεων η παραπάνω εξίσωση παίρνει την μορφή:

$$\frac{\delta_\alpha (P_{int} - P_{out})}{W_0} - 4(\hat{z}^{-5} - \hat{z}^{-3}) \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_{\xi\xi}^2}} = \frac{(\sigma + W)}{W_0} \frac{r_\xi z_{\xi\xi} - r_{\xi\xi} z_\xi}{(r_\xi^2 + z_\xi^2)^{3/2}} \quad (3-29)$$

Παρατηρείται ότι ο όρος $\frac{\delta_\alpha (P_{int} - P_{out})}{W_0}$ είναι σημαντικά μικρότερος από τους υπόλοιπους

όρους και συνεπώς θεωρείται αμελητέος.

Αποδεικνύεται εύκολα ότι ισχύει η παρακάτω σχέση:

$$\bar{W} = \frac{W}{W_0} = (\hat{z}^{-4} - 2\hat{z}^{-2}) \Rightarrow \frac{d\bar{W}}{d\hat{z}} = -4(\hat{z}^{-5} - \hat{z}^{-3}) \quad (3-30)$$

Επίσης ισχύει ότι:

$$\frac{d}{d\xi} \left(\frac{-r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \right) = z_\xi \frac{r_\xi z_{\xi\xi} - r_{\xi\xi} z_\xi}{(r_\xi^2 + z_\xi^2)^{3/2}} \quad (3-31)$$

Λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (3-30) και (3-31) η εξίσωση (3-29) παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{W}}{d\xi} \frac{d\xi}{d\hat{z}} \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} &= - \left(\frac{\sigma}{W_0} + \bar{W} \right) \frac{1}{z_\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \right) \Rightarrow \\ \frac{d\bar{W}}{d\xi} \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} &= - \left(\frac{\sigma}{W_0} + \bar{W} \right) \frac{d}{d\xi} \left(\frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \right) \Rightarrow \\ \frac{d}{d\xi} \left[\frac{\bar{W} r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \right] &= - \frac{\sigma}{W_0} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \right) \end{aligned} \quad (3-32)$$

Με ολοκλήρωση των δύο μερών της εξίσωσης ως προς ξ προκύπτει η παρακάτω σχέση:

$$\left. \frac{\bar{W} \bar{r}_\xi}{\sqrt{\bar{r}_\xi^2 + \bar{z}_\xi^2}} \right|_0^\infty = \left. \frac{-\sigma}{W_0} \frac{\bar{r}_\xi}{\sqrt{\bar{r}_\xi^2 + \bar{z}_\xi^2}} \right|_0^\infty \quad (3-33)$$

Ισχύει ότι για $\hat{z} = 0 \rightarrow \bar{W}(0) \simeq -1$ και για $\hat{z} = \infty \rightarrow \bar{W} = 0$. Επίσης ισχύει ότι για

$$\hat{z} = 0 \rightarrow \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \simeq 1 \quad \text{ενώ} \quad \text{για} \quad \hat{z} = \infty \rightarrow \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \simeq \cos(\pi - \theta_c) = -\cos \theta_c. \quad \text{Συνεπώς}$$

αντικαθιστώντας στην παραπάνω σχέση προκύπτει ότι:

$$\frac{W_0}{\sigma} = 1 + \cos \theta_c \quad (3-34)$$

Αν αλλάζουμε τα όρια ολοκλήρωσης από 0 έως μία τιμή \hat{z} θα ισχυρε ότι:

$$-\bar{W}(\hat{z})\cos\theta + 1 = \frac{\sigma}{W_0}(1 + \cos\theta) \Rightarrow \cos\theta = \frac{1 - \sigma/W_0}{\bar{W}(\hat{z}) + \sigma/W_0} \Rightarrow \cos\varphi = \frac{\sigma/W_0 - 1}{\bar{W}(\hat{z}) + \sigma/W_0} \quad (3-35)$$

Όπου ως φ ορίζεται η γωνία του εφαπτόμενου διανύσματος στην επιφάνεια του σταγονιδίου με το οριζόντιο επίπεδο. Παρατηρείται πως για $W_0/\sigma > 1$ η γωνία φ δεν μπορεί να οριστεί

καθώς ο λόγος $\frac{\sigma/W_0 - 1}{\bar{W}(\hat{z}) + \sigma/W_0}$ τείνει να απειριστεί μέσα στην ζώνη μετάβασης.

Επίσης ισχύει ότι:

$$\cos\varphi = \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + z_\xi^2}} \Rightarrow \cos^2\varphi = \frac{r_\xi^2}{r_\xi^2 + z_\xi^2} \Rightarrow r_\xi = \frac{z_\xi \cos\varphi}{\sqrt{1 - \cos^2\varphi}} \Rightarrow$$

$$\frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{d\xi} = \frac{dz}{d\varphi} \frac{d\varphi}{d\xi} \frac{\cos\varphi}{\sqrt{1 - \cos^2\varphi}} \Rightarrow r_\varphi = z_\varphi \frac{\cos\varphi}{\sin\varphi} \quad (3-36)$$

Τέλος προκειμένου το σχήμα να είναι συνεχές πρέπει να ικανοποιείται η παρακάτω σχέση από την οποία υπολογίζεται το μήκος επαφής L_c :

$$r'(z' = \bar{z}_T \delta_\alpha) = L_c + \delta_\alpha \hat{r}(\bar{z}_T) \quad (3-37)$$

Σύνθεση της ασυμπτωτικής λύσης

$$z = \underbrace{\delta_\alpha + \frac{\Delta P \delta_\alpha^2}{8W_0}}_{\text{Contact}} + \underbrace{z(\varphi)}_{\text{Transition}} + \underbrace{R(\cos\theta_1 - \cos\theta_c)}_{\text{Outer}}, \text{ όπου } r_\varphi = \frac{\cos\varphi}{\sin\varphi} z_\varphi$$

Στην συνέχεια περιγράφεται η σειρά με την οποία εκτελούνται τα βήματα προκειμένου να πραγματοποιηθεί η εγγραφή της ασυμπτωτικής λύσης.

- 1) Αρχικά καθορίζονται τα όρια της κάθε περιοχής λύσης, δηλαδή το \bar{z}_T (z transition) η τιμή του οποίου δηλώνει μέχρι ποιο z θεωρείται μεταβατική περιοχή και το \hat{r}_{ini} που δηλώνει από ποιο r ξεκινά η μεταβατική περιοχή.

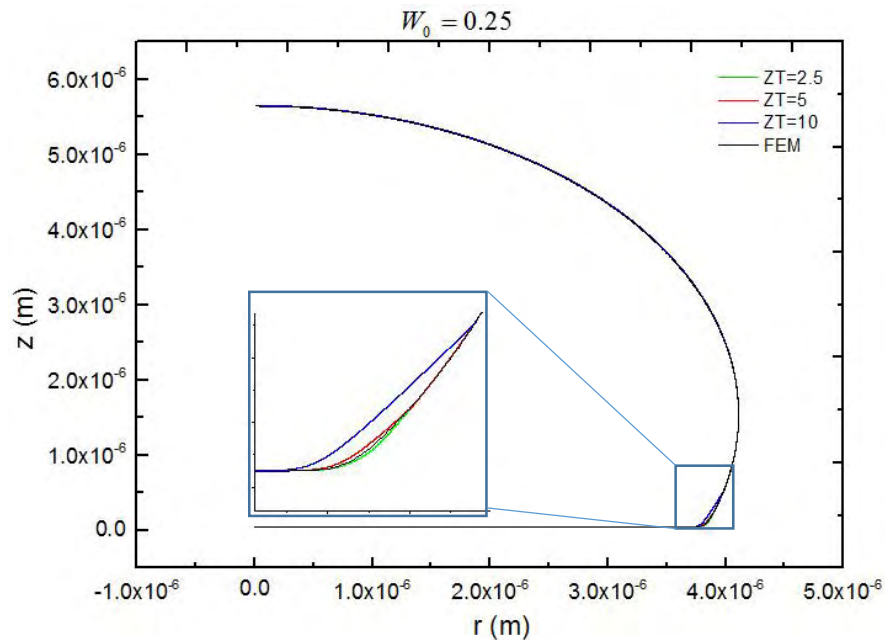
- 2) Υπολογισμός του ε και του z_0 για την περιοχή επαφής.
- 3) Έναρξη βημάτων για z που ανήκει στην μεταβατική περιοχή.
- 4) Υπολογισμός της γωνίας φ από σχέση (3-35) και στην συνέχεια υπολογισμός του \hat{r} μέσω της σχέσης (3-36) χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση Gauss και παρεμβολή με cubic splines.
- 5) Υπολογισμός της γωνίας από την οποία ξεκινά η εξωτερική λύση καθώς και του r στην γωνία αυτή.
- 6) Υπολογισμός του μήκους επαφής μέσω της σχέσης (3-37).
- 7) Εγγραφή της περιοχής επαφής για r από 0 έως $\ell - \hat{r}_{ini}$.
- 8) Μετασχηματισμός του \hat{r} σε r' μέσω της σχέσης (3-27) και εγγραφή της λύσης για z από z_0 έως \bar{z}_T .
- 9) Εγγραφή της εξωτερικής περιοχής χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3-25).

3.3 Έλεγχος αξιοπιστίας των δύο μεθόδων (Benchmark)

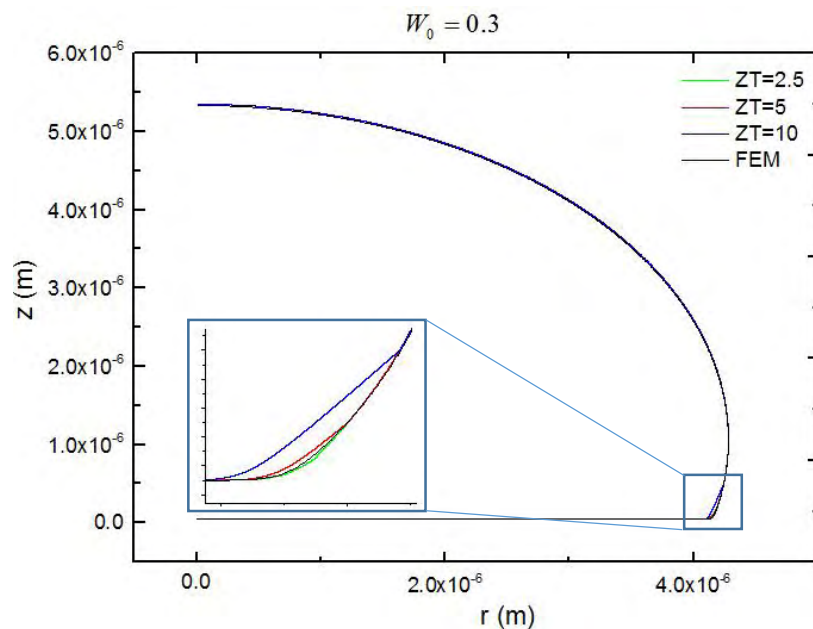
Προκειμένου να ελεγχθεί η εγκυρότητα του κώδικα μέσω του οποίου πραγματοποιείται η επίλυση των εξισώσεων με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων είναι αναγκαία η σύγκριση των αποτελεσμάτων με τα αποτελέσματα τα οποία προκύπτουν από την ασυμπτωτική λύση του προβλήματος. Στις δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν για την σύγκριση αυτή οι τιμές των παραμέτρων οι οποίες επιλέχθηκαν είναι $V = 0.2207 \times 10^{-15} \text{ m}^3$, $\delta_\alpha = 50 \times 10^{-9} \text{ m}$, $\sigma = 0.4 \text{ N/m}$, $p_{static} = 1.01 \times 10^5 \text{ Pa}$ και $\gamma = 5256 \text{ kg/(m} \cdot \text{s}^2)$. Η παράμετρος η οποία μεταβαλλόταν έτσι ώστε να εξεταστούν διάφορες περιπτώσεις ήταν η παράμετρος διαβροχής W_0 . Οι δοκιμές πραγματοποιήθηκαν για $W_0=0.25 \text{ N/m}$, $W_0=0.3 \text{ N/m}$ και $W_0=0.39 \text{ N/m}$. Επίσης πρέπει να αναφερθεί ότι στα γραφήματα τα οποία παρατίθενται

παρακάτω η ασυμπτωτική επίλυση πραγματοποιήθηκε για τρεις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου Z_T η οποία ορίζει μέχρι ποιο z φτάνει η περιοχή μετάβασης (transition region).

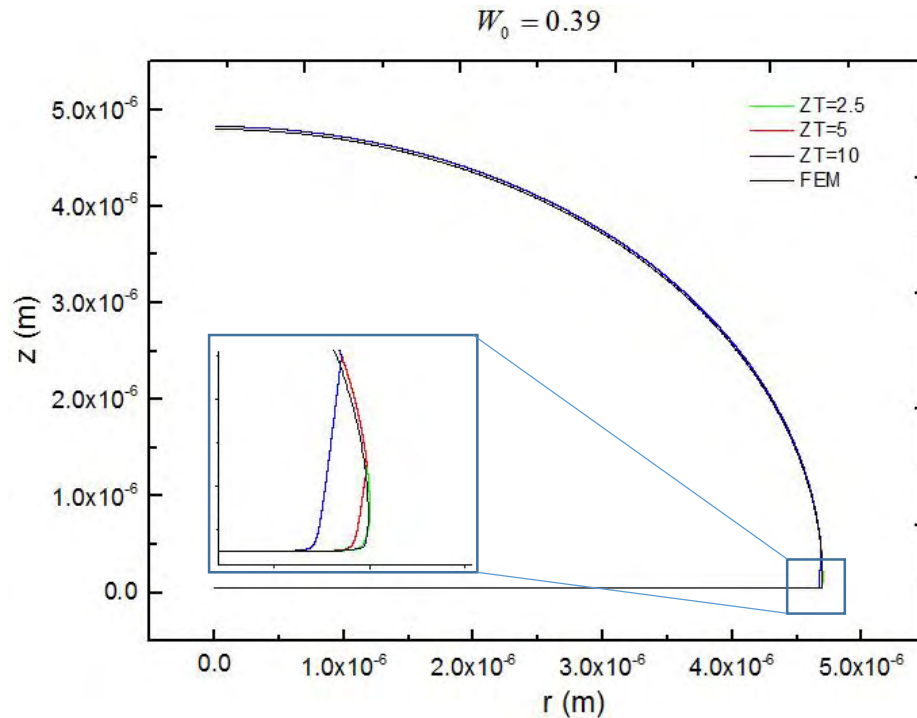
Τα αποτελέσματα από την παραπάνω σύγκριση παρατίθενται παρακάτω:



Σχήμα 3-3: Σύγκριση αριθμητικής και ασυμπτωτικής λύσης για $W_0=0.25$ N/m



Σχήμα 3-4: Σύγκριση αριθμητικής και ασυμπτωτικής λύσης για $W_0=0.30$ N/m

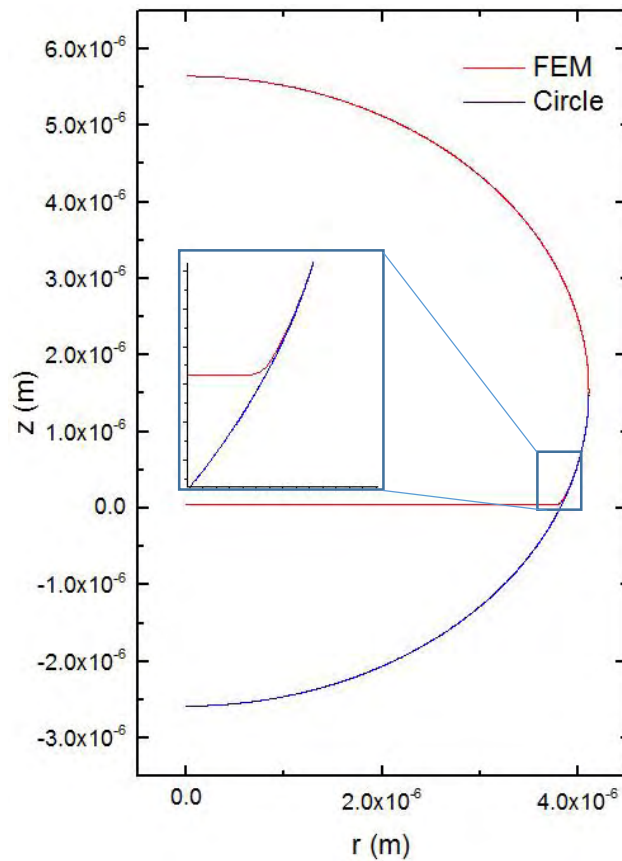


Σχήμα 3-5: Σύγκριση αριθμητικής και ασυμπτωτικής λύσης για $W_0=0.39$ N/m

Είναι εμφανές από τα γραφήματα πως οι δύο λύσεις μακροσκοπικά ταυτίζονται ενώ μικροσκοπικά παρατηρείται ότι στην περιοχή μετάβασης παρατηρείται μία μικρή διαφοροποίηση η οποία ωστόσο φαίνεται να οφείλεται στην τιμή της παραμέτρου Z_T η οποία επιλέγεται τυχαία. Συνεπώς ο κώδικας και το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση του προβλήματος αριθμητικά (Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων) φαίνεται να είναι έγκυρος συγκρινόμενος με την ασυμπτωτική λύση.

Το αποτέλεσμα αυτό ενισχύθηκε και από μία επιπλέον σύγκριση η οποία πραγματοποιήθηκε έτσι ώστε να εξακριβωθεί ότι η μακροσκοπική γωνία επαφής η οποία προκύπτει από την Μέθοδο Πεπερασμένων είναι πολύ κοντά με την γωνία επαφής που προκύπτει από την σχέση $\frac{W_0}{\sigma} = 1 + \cos\theta_c$. Προκυμμένου να βρεθεί η γωνία η οποία προκύπτει από την αριθμητική λύση, ένας κύκλος με ακτίνα όμοια της εξωτερικής περιοχής (outer region) εγγράφεται στο γράφημα της λύσης. Στην συνέχεια παρατηρείται ποιες είναι οι

συντεταγμένες του τελευταίου σημείου που ο κύκλος με την λύση βρισκόταν σε επαφή και η παραπληρωματική γωνία της γωνίας επαφής υπολογίζεται από τον τύπο της εφαπτομένης $\cos(180 - \theta_c) = \frac{r}{z}$ όπου r και z οι συντεταγμένες του τελευταίου σημείου επαφής. Παρακάτω δίνεται ένα παράδειγμα του πως υπολογίστηκε η γωνία επαφής για $W_0=0.25$ N/m και αναφέρονται τα αποτελέσματα για $W_0=0.3$ N/m, $W_0=0.35$ N/m και $W_0=0.39$ N/m. Το γράφημα της λύσης για $W_0=0.25$ N/m μαζί με τον εγγεγραμμένο κύκλο παρατίθεται παρακάτω:



Σχήμα 3-6: Παρουσίαση λύσης για $W_0=0.25$ και εγγεγραμμένος κύκλος

Το σημείο επαφής το οποίο φαίνεται στο παραπάνω γράφημα έχει συντεταγμένες $(r, z) = (3.8127 \times 10^{-6}, 6.4023 \times 10^{-8})$ και η γωνία που προκύπτει για αυτό το σχήμα είναι

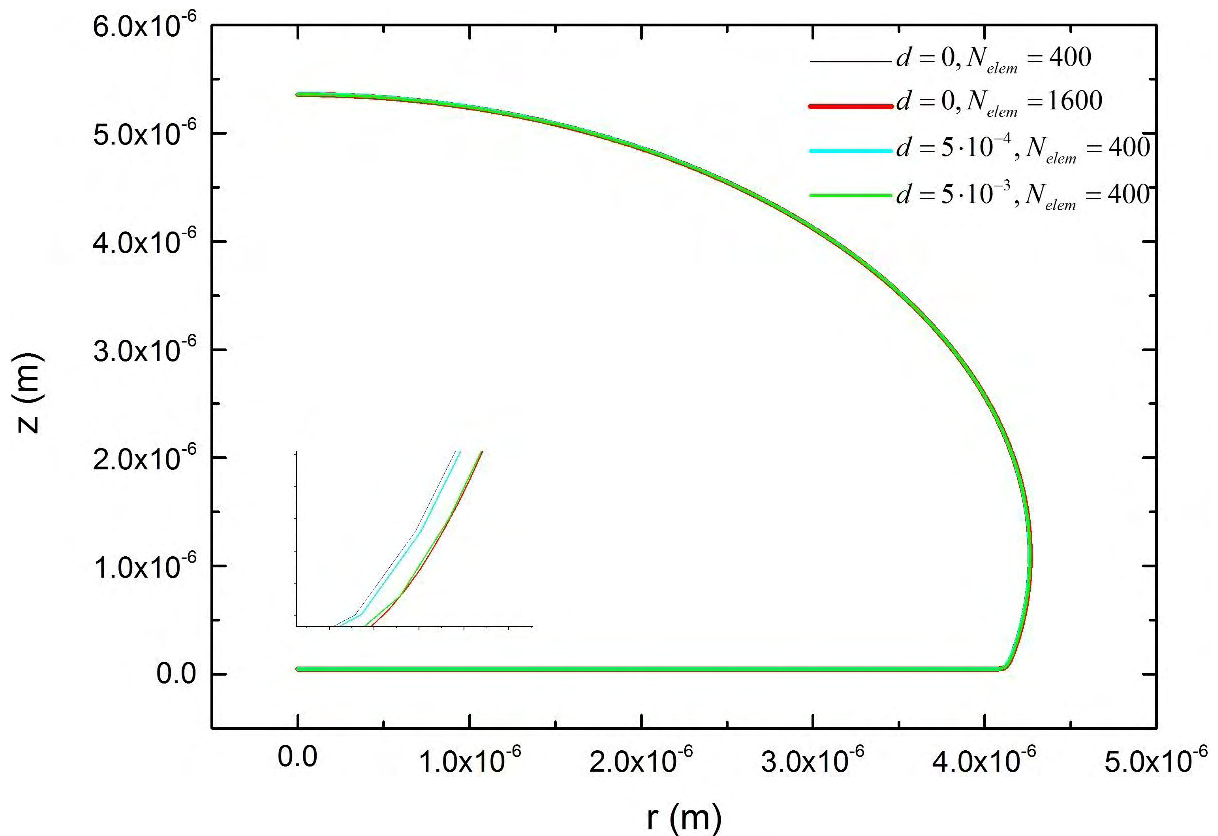
$\theta_c = 111.28^\circ$. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για διάφορες τιμές της παραμέτρου W_0 δίνονται στον παρακάτω πίνακα.

W_0	θ_c (FEM)	θ_c (3-34)
0.25	111.28	112.02
0.3	104.84	104.478
0.35	98.76	97.18
0.39	92.01	91.43

Πίνακας 3-1: Σύγκριση γωνίας επαφής από FEM και από σχέση (3-34)

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα η λύση η οποία δίνεται από τον κώδικα είναι πολύ κοντά στην πρόβλεψη η οποία βασίζεται στην θεωρία. Συνεπώς αποδεικνύεται και η εγκυρότητα του κώδικα.

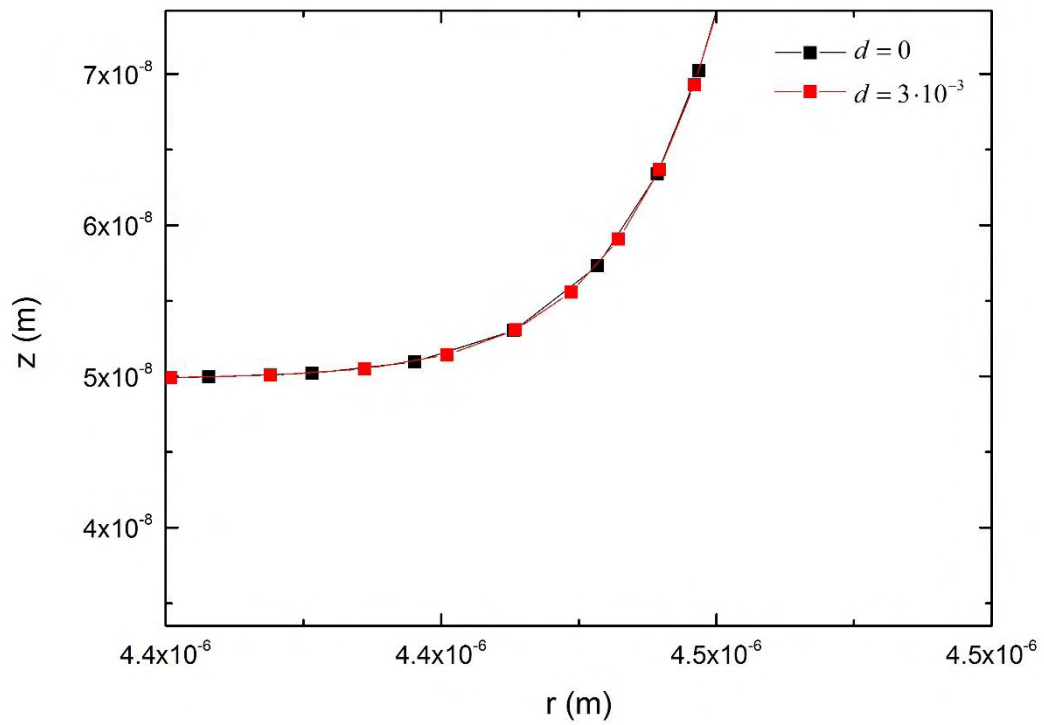
Τέλος προκυμμένου να εξασφαλιστεί ότι η εξίσωση (2-12) δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα αλλά συμβάλει θετικά στην διαδικασία της επίλυσης, πραγματοποιήθηκαν κάποιες δοκιμές. Αρχικά παρατηρήθηκε ότι ο κώδικας για τις παραπάνω παραμέτρους και 400 στοιχεία χωρίς την χρήση του d μπορούσε να συγκλίνει μέχρι την τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.2960$ N/m ενώ για $d=5 \cdot 10^{-4}$ ο κώδικας συνέκλινε ακόμη και για τιμές της παραμέτρου W_0 μεγαλύτερες από 0.4 N/m. Συνεπώς φαίνεται ότι η σύγκλιση βελτιώνεται σημαντικά. Ωστόσο είναι απαραίτητη η πραγματοποίηση κάποιων ελέγχων έτσι ώστε να εξασφαλιστεί ότι οι λύσεις που προκύπτουν με την χρήση του d είναι έγκυρες. Οι πρώτες δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν ήταν η εκτέλεση του κώδικα για 400 στοιχεία, με δύο διαφορετικές τιμές για την παράμετρο d και χωρίς d , καθώς και χωρίς d με 1600 στοιχεία για $W_0=0.2960$ N/m. Τα αποτελέσματα παρατίθενται στο παρακάτω γράφημα:



Σχήμα 3-7: Παρουσίαση αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d αλλά και για διαφορετικό αριθμό κόμβων

Από τα αποτελέσματα φαίνεται πως οι δύο λύσεις χωρίς d δεν ταυτίζονται όπως και οι δύο λύσεις με διαφορετικό d . Όπως όμως αποδεικνύεται με κατάλληλη επιλογή της παραμέτρου d επιτυγχάνεται η σωστή λύση για λίγα στοιχεία. Συνεπώς γίνεται αντιληπτό πως αν το d επιλεγθεί κατάλληλα οι λύσεις που προκύπτουν για λίγα στοιχεία ταυτίζονται με τις σωστές λύσεις.

Τέλος αποδεικνύεται ότι πολλές φορές τα αποτελέσματα τα οποία προκύπτουν με την χρήση του d είναι σημαντικά καλύτερα από αυτά στα οποία δεν χρησιμοποιείται καθώς η πύκνωση στα σημεία στα οποία χρειάζεται δίνει πιο ομαλές και καλοσχηματισμένες καμπύλες όπως φαίνεται και παρακάτω.



Σχήμα 3-8: Παρουσίαση αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d και αριθμό στοιχείων 1600

Συμπέρασμα όλων των παραπάνω είναι ότι ο κώδικας λειτουργεί ικανοποιητικά και τα αποτελέσματα τα οποία δίνει είναι έγκυρα.

Κεφάλαιο 4 Αποτελέσματα Επίλυσης Εξισώσεων

Στο τέταρτο κεφάλαιο της παρούσας διπλωματικής εργασία γίνεται η παρουσίαση και η ανάλυση των αποτελεσμάτων καθώς και μια παραμετρική μελέτη. Πιο συγκεκριμένα στο Υποκεφάλαιο 4.1 παρουσιάζονται ενδεικτικά μερικά αποτελέσματα και σχολιάζονται ως προς την φυσική τους σκοπιά. Στην συνέχεια στο Υποκεφάλαιο 4.2 ακολουθεί μία παραμετρική μελέτη δηλαδή αναλύονται τα αποτελέσματα για διάφορες παραμέτρους έτσι ώστε να γίνει κατανοητή η επίδραση και η σπουδαιότητα του κάθε όρου στο σχήμα το οποίο παίρνει το σταγονίδιο. Το Υποκεφάλαιο 4.2 χωρίζεται σε μερικά περαιτέρω κεφάλαια τα οποία αφορούν την παραμετρική μελέτη ως προς το πάχος του λεπτού αέριου υποστρώματος δ_α καθώς και το ειδικό βάρος γ .

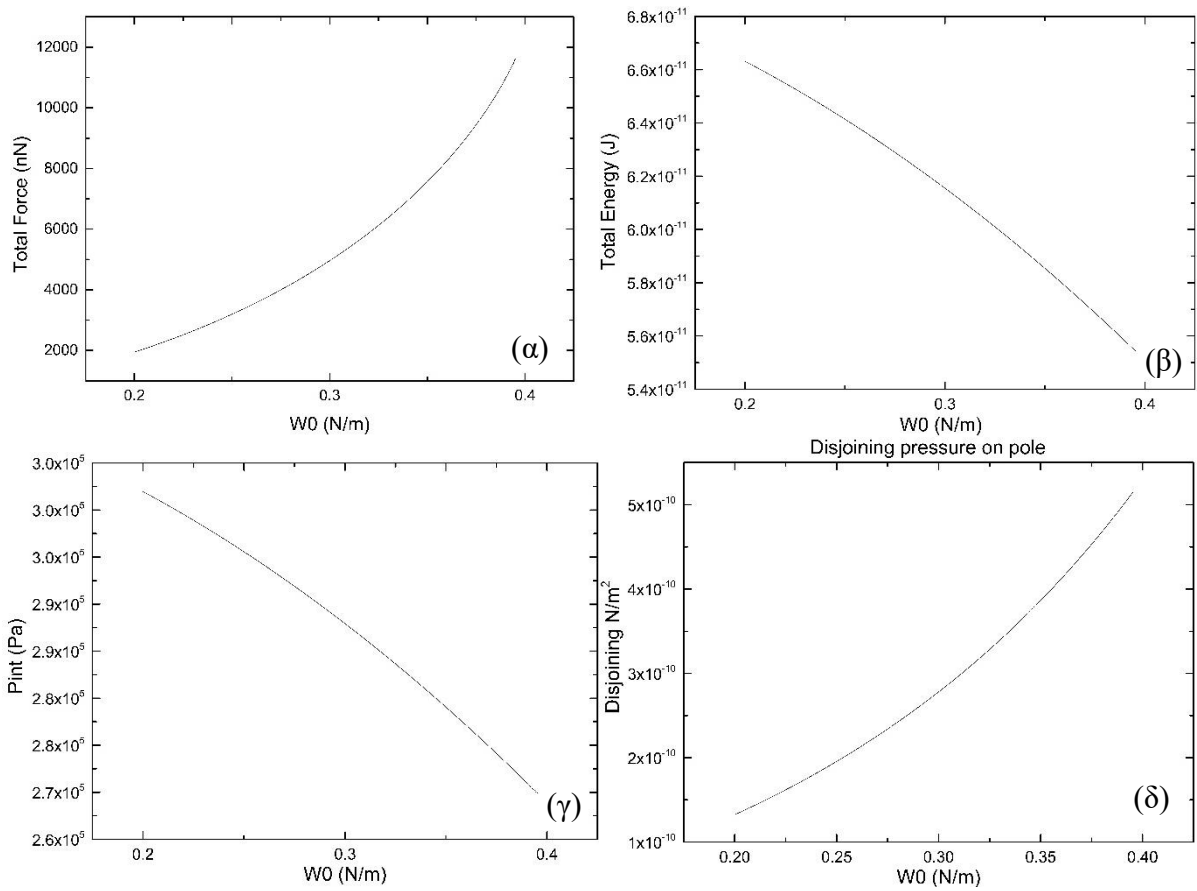
4.1 Παρουσίαση Αποτελεσμάτων

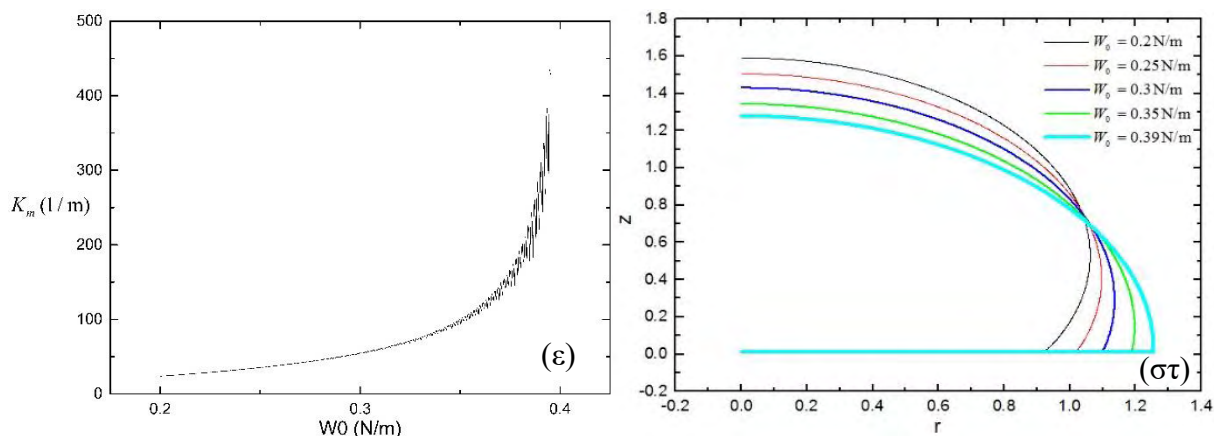
Στο κεφάλαιο 2 περιγράφεται ένα μοντέλο για την εκτίμηση του σχήματος ενός μικροσταγονιδίου το οποίο εκτός από την βαρύτητα, τις δυνάμεις που προέρχονται από την διαφορά πίεσης του εσωτερικού του σταγονιδίου με την εξωτερική πίεση και τις δυνάμεις οι οποίες προέρχονται από την επιφανειακή τάση δέχεται και τις διαμοριακές δυνάμεις. Προκειμένου να μπορεί να πραγματοποιηθεί μία παραμετρική μελέτη στην συνέχεια η παράμετρος με την οποία πραγματοποιήθηκε η αδιαστατοποίηση των όρων ήταν η επιφανειακή τάση σ . Συνεπώς οι τιμές των παραμέτρων δίνονται από τις σχέσεις (2-15).

Πάχος υποστρώματος: $\delta_\alpha = 50 \text{ nm}$	Επιφανειακή τάση: $\sigma = 0.4 \frac{\text{N}}{\text{m}}$
Εξωτερική πίεση: $P_{out} = 101 \text{ kPa}$	Ειδικό βάρος: $\rho g = 5000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{ s}^2}$
Παράμετρος πύκνωσης: $d = 5 \times 10^{-4}$	Αριθμός στοιχείων: $N_{elem} = 1600$

Πίνακας 4-1: Ενδεικτικές τιμές παραμέτρων για επίλυση των εξισώσεων

Η παράμετρος W_0 αρχικά έχει την τιμή 0.2 και στην συνέχεια μεταβάλλεται κατά την εκτέλεση του κώδικα αρχικά μέσω της απλής παραμετροποίησης κατά 1.0×10^{-3} ενώ για $W_0 \geq 0.36$ υπολογίζεται μέσω της μεθόδου παραμετροποίησης Arc-Length. Τα αποτελέσματα από την επίλυση του προβλήματος για τις παραπάνω τιμές των παραμέτρων παρατίθενται παρακάτω:





Σχήμα 4-1: (α) Διάγραμμα συνολικής δύναμης ως προς παράμετρο W_0 , (β) Διάγραμμα συνολικής ενέργειας ως προς παράμετρο W_0 , (γ) Διάγραμμα εσωτερικής πίεσης στον πόλο ως προς παράμετρο W_0 , (δ) Διάγραμμα διαμοριακών δυνάμεων στον πόλο ως προς παράμετρο W_0 , (ε) Διάγραμμα μέγιστης μέσης καμπυλότητας ως προς παράμετρο W_0 , (στ) Διαγράμματα σχημάτων σταγονιδίου για διάφορες τιμές της παραμέτρου W_0 .

Από τα παραπάνω αποτελέσματα γίνεται κατανοητό πως όσο η παράμετρος W_0 αυξάνεται τόσο αυξάνεται και η συνολική δύναμη η οποία οφείλεται στις διαμοριακές δυνάμεις, ενώ η συνολική ενέργεια η οποία οφείλεται στην επιφανειακή τάση αλλά και στο δυναμικό προσκόλλησης μειώνεται. Επίσης φαίνεται πως όσο η παράμετρος W_0 αυξάνεται, τόσο μειώνεται η εσωτερική πίεση. Αρχικά αυτό μπορεί να είναι ένα αποτέλεσμα το οποίο φαίνεται παράξενο ωστόσο είναι φυσιολογικό καθώς ο όγκος καθ' όλη την διάρκεια επίλυσης για όλες τις τιμές της παραμέτρου W_0 διατηρείται σταθερός αλλά οι διαμοριακές δυνάμεις αυξάνονται με την αύξηση του W_0 . Αυτό επιβεβαιώνεται και από το Σχήμα 4-1 (δ). Κοιτώντας πιο προσεκτικά την μορφή της εξίσωσης (2-10) στον πόλο φαίνεται ότι ο όρος της βαρύτητας είναι μηδέν καθώς στον πόλο ισχύει $z = z_p$, αλλά και η καμπυλότητα είναι μηδέν καθώς ο πόλος βρίσκεται στην περιοχή επαφής. Συνεπώς στην εξίσωση συμβάλουν μόνο η εξωτερική πίεση η οποία είναι σταθερή καθώς και η εσωτερικής πίεση και οι διαμοριακές

δυνάμεις (disjoining pressure). Συνεπώς είναι λογικό όπως φαίνεται η αύξηση των διαμοριακών δυνάμεων να οδηγούν σε μείωση της εσωτερικής πίεσης. Επίσης, στα παραπάνω αποτελέσματα παρατηρείται ότι η μέγιστη μέση καμπυλότητα αυξάνεται σημαντικά όσο αυξάνει η παράμετρος W_0 και μάλιστα όχι γραμμικά. Η μέση καμπυλότητα κατά μήκος της γενέτειρας καμπύλης μεγιστοποιείται στην περιοχή της ζώνης μετάβασης από την περιοχή επαφής στην σχεδόν σφαιρική και καθορίζεται άμεσα από την γωνία επαφής. Για τιμές του W_0 κοντά στο 0.4 είναι προφανές ότι η καμπυλότητα αυξάνεται πολύ γρήγορα. Αυτό το αποτέλεσμα επιβεβαιώνεται και από το τελευταίο γράφημα όπου φαίνεται πως η γωνία επαφής μειώνεται σημαντικά όσο η παράμετρος W_0 αυξάνεται. Παραπάνω αποδείχθηκε ότι η ασυμπτωτική λύση αδυνατεί να δώσει οξείες γωνίες επαφής κάτι το οποίο παρατηρείται και στην επίλυση με χρήση πεπερασμένων στοιχείων.

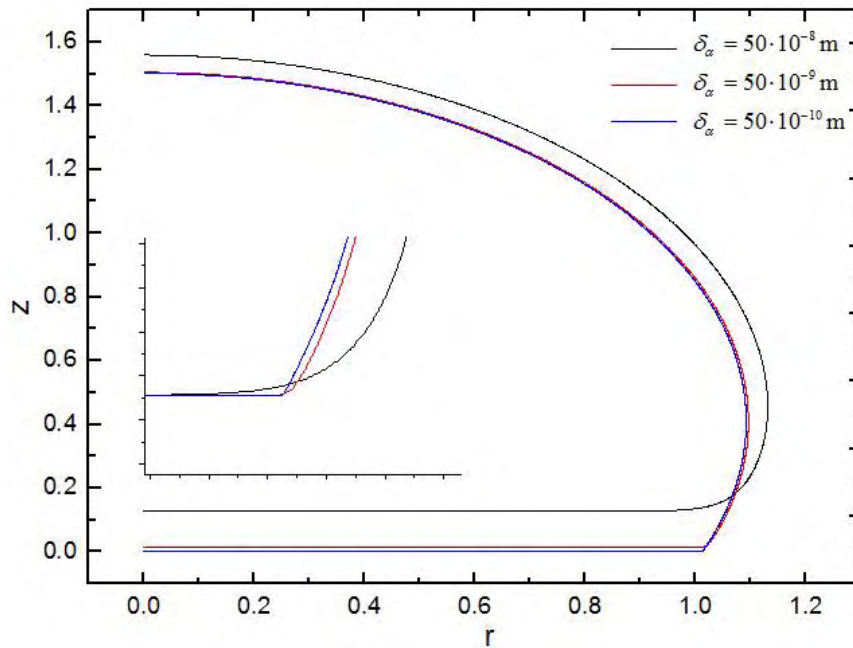
4.2 Παραμετρική Μελέτη Αποτελεσμάτων

4.2.1 Παραμετρική μελέτη ως προς το πάχος του υποστρώματος

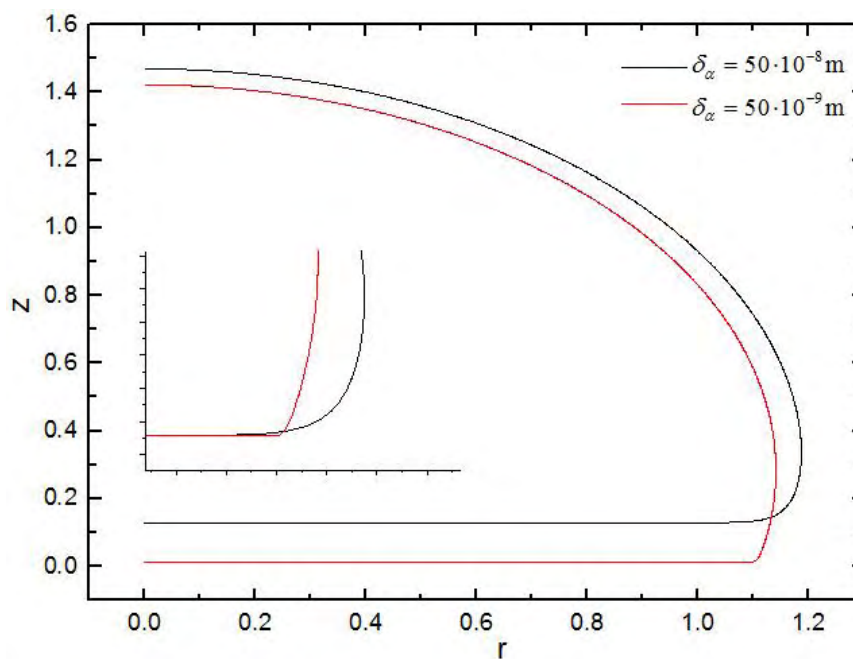
Όπως ήδη αναφέρθηκε, στο υποκεφάλαιο αυτό θα γίνει μία παρουσίαση των αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου δ_α , δηλαδή του πάχους του υποστρώματος. Στις έως τώρα δοκιμές το πάχος που χρησιμοποιούνταν ήταν 50 nm. Αυτή είναι μία συνηθισμένη τιμή ωστόσο θα είχε ιδιαίτερο ενδιαφέρον η επίδραση του πάχους του φιλμ στην μορφή του σταγονιδίου.

Προκείμενου να εξαχθούν κάποια συμπεράσματα σχετικά με την επίδραση που έχει το πάχος του φιλμ στο σχήμα του σταγονιδίου εκτελέστηκε ο κώδικας για διάφορες τιμές της παραμέτρου δ_α . Πιο συγκεκριμένα εκτελέστηκαν τρεις περιπτώσεις. Η πρώτη περίπτωση ήταν για $\delta_\alpha = 50 \times 10^{-8}$ m, η δεύτερη για την κλασική τιμή $\delta_\alpha = 50 \times 10^{-9}$ m και η τρίτη για

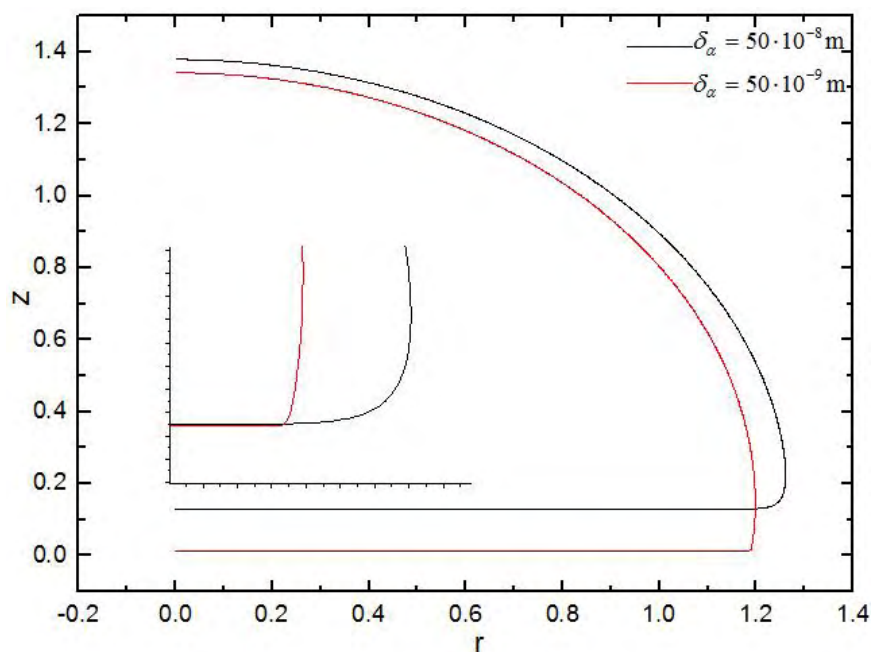
$\delta_\alpha = 50 \times 10^{-10}$ m. Το πρώτο συμπέρασμα το οποίο εξήλθε από τις παραπάνω δοκιμές ήταν ότι το πάχος του φιλμ επηρεάζει σημαντικά την σύγκλιση του κώδικα και δυσχεραίνει την επίλυση. Αυτό το συμπέρασμα προήλθε από το γεγονός ότι για $\delta_\alpha = 50 \times 10^{-8}$ m ο κώδικας δεν μπόρεσε να συγκλίνει για $W_0=0.3758$ N/m. Επίσης για $\delta_\alpha = 50 \times 10^{-10}$ m η εκτέλεση του κώδικα τερματίστηκε για $W_0=0.2812$ N/m ενώ για την τιμή αναφοράς $\delta_\alpha = 50 \times 10^{-9}$ m ο κώδικας μπορούσε να δώσει λύση ακόμη και για $W_0 \geq 0.4$, αλλά μάλλον πρόκειται περί αριθμητικού λάθους καθώς αυτή η λύση δεν μπορεί να αναπαραχθεί πυκνώνοντας το πλέγμα. Παρακάτω παρατίθενται τα γραφήματα στα οποία συγκρίνονται οι λύσεις για διάφορες τιμές της παραμέτρου διαβροχής (στην μεγεθυμένη περιοχή οι λύσεις έχουν μετατοπιστεί έτσι ώστε η περιοχή επαφής να έχει το ίδιο z για λόγους ευκρίνειας).



Σχήμα 4-2: Σύγκριση της λύσης για διαφορετικό πάχος φιλμ για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.25$ N/m.



Σχήμα 4-3: Σύγκριση της λύσης για διαφορετικό πάχος φιλμ για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.30$ N/m.



Σχήμα 4-4: Σύγκριση της λύσης για διαφορετικό πάχος φιλμ για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.39$ N/m.

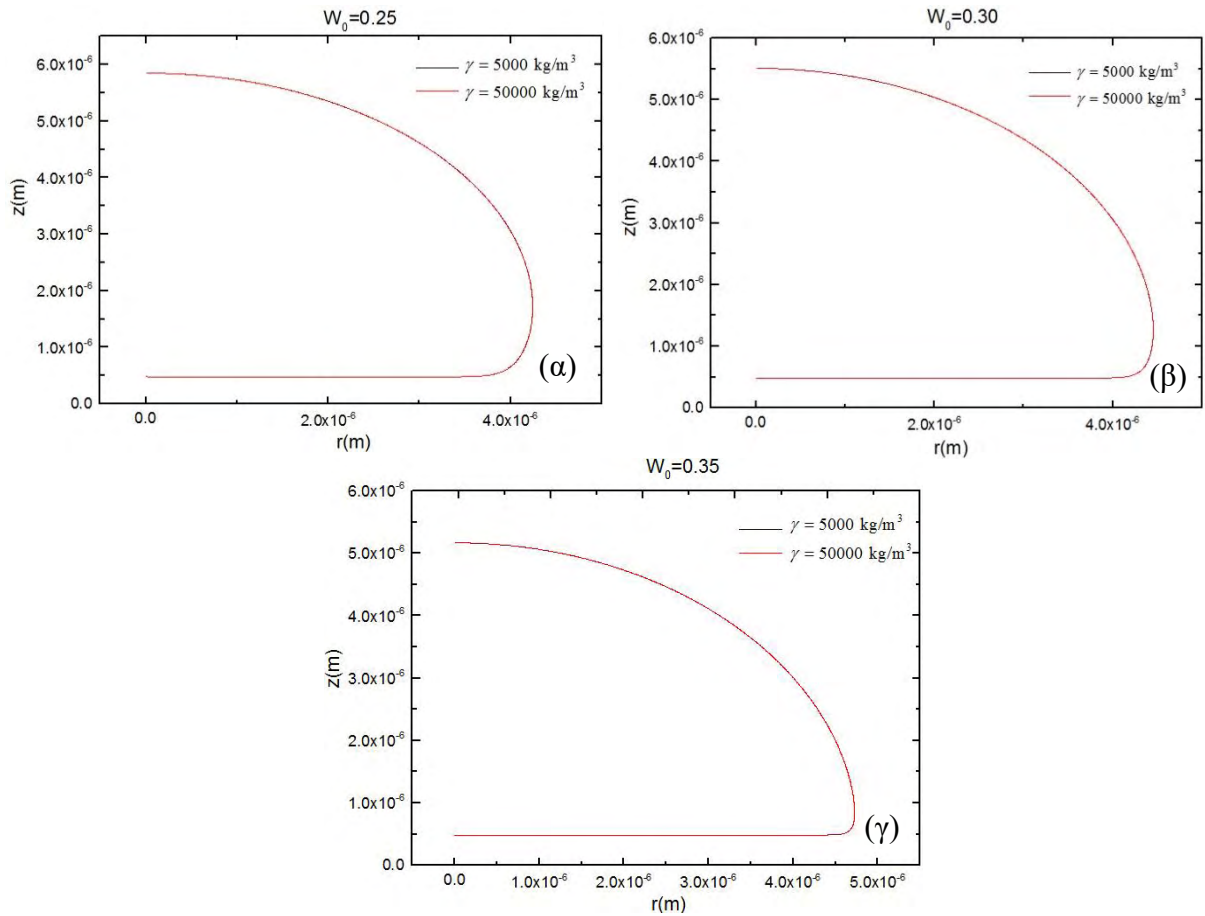
Από τα παραπάνω αποτελέσματα γίνεται εμφανές ότι το πάχος του αέριου φιλμ επηρεάζει σημαντικά το σχήμα και την μορφή της λύσης στην περιοχή της επαφής και της μετάβασης, ενώ στην εξωτερική περιοχή η λύση είναι σχεδόν αμετάβλητη. Πιο συγκεκριμένα

η πρώτη διαφορά η οποία εντοπίζεται είναι ότι η απόσταση της περιοχής επαφής από την στερεή επιφάνεια μετατοπίζεται σημαντικά, κάτι το οποίο είναι προφανές από την στιγμή που μεταβάλλεται το πάχος του φιλμ. Η δεύτερη και σημαντικότερη διαφορά που παρατηρείται είναι ότι μεταβάλλεται σημαντικά η έκταση της περιοχής μετάβασης. Γίνεται σαφές πως όσο πιο μεγάλο είναι το πάχος του φιλμ τόσο πιο μεγάλη είναι η έκταση της περιοχής μετάβασης. Επίσης επηρεάζεται σημαντικά η μικροσκοπική γωνία στην περιοχή μετάβασης. Για το μικρότερο πάχος του φιλμ φαίνεται πως η μεταβολή της μικροσκοπικής γωνίας είναι πολύ απότομη και αυτή ίσως να είναι η αιτία όπου ο κώδικας δεν μπορεί να επιλύσει το συγκεκριμένο πρόβλημα για μεγαλύτερες τιμές της παραμέτρου διαβροχής W_0 . Για τα άλλα δύο πάχη των δοκιμών ο κώδικας καταφέρνει να επιλύσει το πρόβλημα αλλά και πάλι επιβεβαιώνεται πως όσο πιο μεγάλο είναι το πάχος του φιλμ τόσο πιο αργή είναι η μεταβολή της μικροσκοπικής γωνίας επαφής.

4.2.2 Παραμετρική μελέτη ως προς το ειδικό βάρος

Στο υποκεφάλαιο αυτό ακολουθεί μία σύγκριση των αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές του ειδικού βάρους έτσι ώστε να διαπιστωθεί η επίδραση αυτού του όρου στην επίλυση.

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η παραπάνω σύγκριση, ο κώδικας εκτελέστηκε για διάφορες τιμές της παραμέτρου γ . Λεπτομερέστερα πραγματοποιήθηκαν δύο εκτελέσεις του κώδικα, μία με τιμή $\gamma=5000 \text{ kg/m}^3$ και μία με τιμή $\gamma=50000 \text{ kg/m}^3$. Τα αποτελέσματα για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διαβροχής W_0 παρατίθενται παρακάτω.



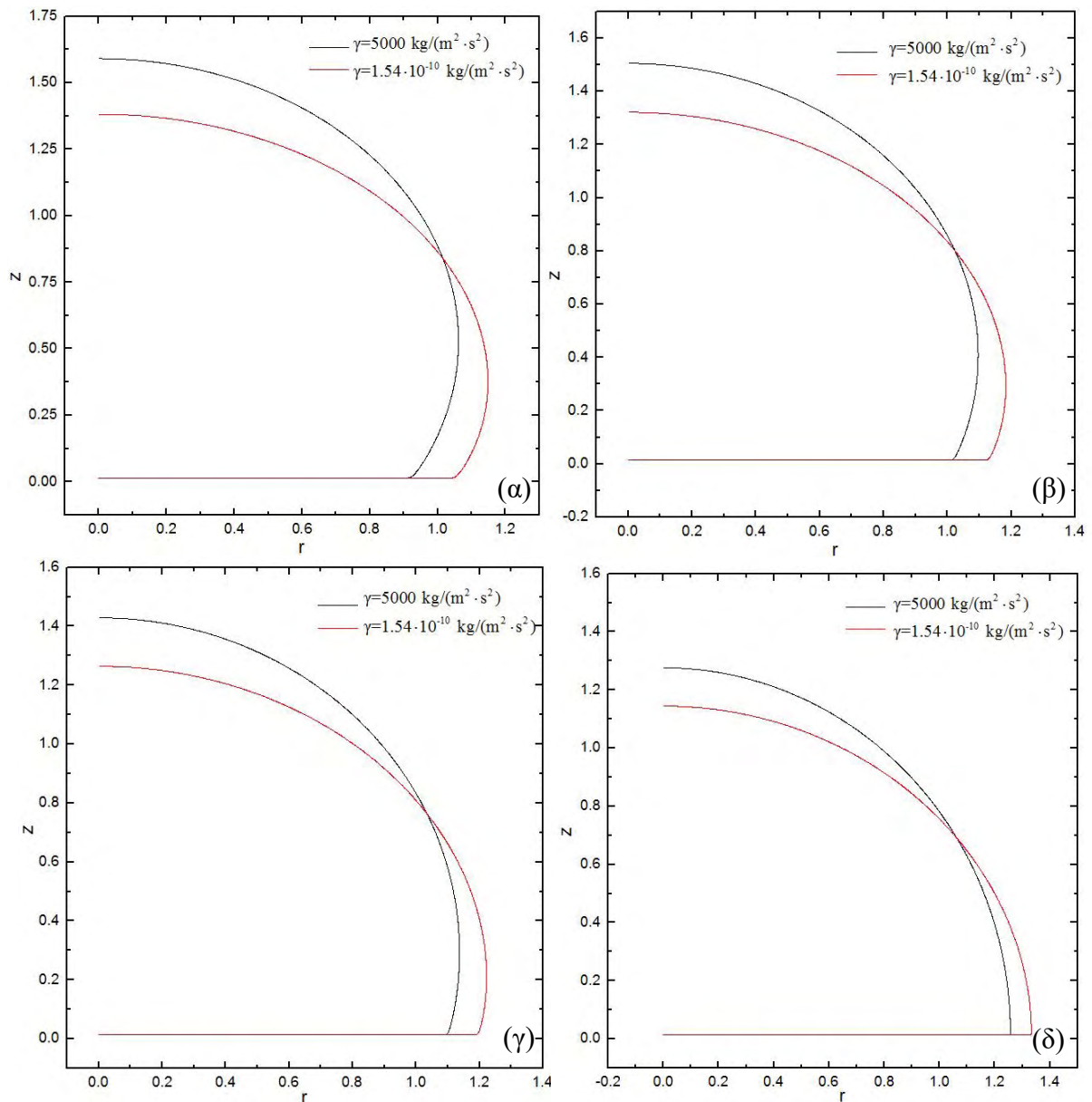
Σχήμα 4-5: (α) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.25 \text{ N/m}$, (β) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.30 \text{ N/m}$, (γ) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.35 \text{ N/m}$.

Από τα παραπάνω αποτελέσματα μπορεί να εξαχθεί το συμπέρασμα ότι η επίδραση της βαρύτητας είναι αμελητέα στα μικροσταγονίδια εφόσον όπως φαίνεται και από τα σχήματα οι δύο λύσεις ταυτίζονται μεταξύ τους. Αυτό το συμπέρασμα είναι λογικό και αναμενόμενο επειδή όπως έχει αναφερθεί στο Κεφάλαιο 2 το αδιάστατο ειδικό βάρος είναι της τάξεως 10^{-8} και είναι πολύ μικρό συγκρινόμενο με τους υπόλοιπους όρους οι οποίοι λαμβάνονται υπόψιν στο ισοζύγιο δυνάμεων (2-10).

Σύμφωνα με τον de Gennes [17] υπάρχει ένα χαρακτηριστικό μήκος το οποίο καθορίζει το ελάχιστο μήκος (ακτίνα σταγονιδίου) για το οποίο η επίδραση της βαρύτητας είναι σημαντική. Αυτό το μήκος ονομάζεται “Capillary Length” και συμβολίζεται με κ^{-1} . Ο τύπος ο οποίος δίνει αυτό το μήκος είναι ο εξής:

$$\kappa^{-1} = \sqrt{\sigma / \rho g} \quad (4-1)$$

Από αυτόν τον τύπο προκύπτει ότι ακόμη και για τον υδράργυρο ο οποίος έχει ιδιαίτερα υψηλές τιμές επιφανειακής τάσης αλλά και πυκνότητας το χαρακτηριστικό αυτό μήκος προκύπτει να είναι μερικά χιλιοστά. Πιο συγκεκριμένα για τον υδράργυρο για τον οποίο ισχύει ότι $\sigma=0.425$ N/m και $\rho=13590$ kg/m³ το χαρακτηριστικό μήκος προκύπτει 0.001768 m. Άρα όπως φαίνεται στα μικροσωματίδια η επίδραση της βαρύτητας είναι αμελητέα. Αν ωστόσο ο τύπος χρησιμοποιούνταν με στόχο τον υπολογισμό της τιμής της πυκνότητας έτσι ώστε η επίδραση της βαρύτητας να ήταν σημαντική, θα ήταν εφικτό να γίνουν τα αποτελέσματα της εμφανή. Για $\sigma=0.4$ N/m και $\kappa^{-1}=3.9674 \times 10^{-6}$ m προκύπτει ότι $\gamma=2.5413 \times 10^{10}$ kg/(m² · s²). Τα αποτελέσματα που προκύπτουν για $\gamma=1.54 \times 10^{10}$ kg/(m² · s²) (επιλέχτηκε μία τιμή ελαφρώς μικρότερη από αυτήν που προβλέπει η σχέση (4-1) λόγω του ότι για $\gamma=2.5413 \times 10^{10}$ kg/(m² · s²) η αρχική πρόβλεψη της λύσης απέχει σημαντικά από την λύση και έτσι η σύγκλιση του προγράμματος δεν είναι εφικτή) παρατίθενται παρακάτω:



Σχήμα 4-6: (α) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.20$ N/m, (β) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.25$ N/m, (γ) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.30$ N/m, (δ) Σχήμα σταγονιδίου για διάφορες τιμές της πυκνότητας για τιμή της παραμέτρου διαβροχής $W_0=0.39$ N/m.

Από τα αποτελέσματα επιβεβαιώνεται ότι για σημαντικά μεγαλύτερες τιμές του ειδικού βάρους το σχήμα του σταγονιδίου μεταβάλλεται σημαντικά και αναμενόμενα.

Λεπτομερέστερα είναι εμφανές πως λόγω της αυξημένης βαρύτητας παρατηρείται ότι το σταγονίδιο προσκολλάτε σε μεγαλύτερο βαθμό, δηλαδή αυξάνεται σημαντικά το μήκος επαφής. Αποτέλεσμα αυτού είναι η σημαντική μείωση του ύψους του σταγονιδίου έτσι ώστε να επιτευχθεί η διατήρηση του όγκου. Όποτε η θεωρία του de Gennes είναι βάσιμη και προκύπτει ασφαλώς το συμπέρασμα ότι στα μικροσταγονίδια η πυκνότητα είναι ασήμαντη.

Κεφάλαιο 5 Συμπεράσματα

Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η μελέτη του σχήματος ενός μικροσταγονιδίου το οποίο προσκολλάται σε μία στερεή επιφάνεια με τριχοειδής και διαμοριακές δυνάμεις. Για την επίλυση του προβλήματος χρησιμοποιήθηκε μια επαυξημένη εξίσωση με όρους για τις τριχοειδής και τις διαμοριακές δυνάμεις η οποία είχε ως βάση την Young-Laplace. Οι άγνωστοι οι οποίοι προσδιορίζονται από την επίλυση του μοντέλου είναι το σχήμα του σταγονιδίου (r, z) καθώς και η εσωτερική πίεση στο σταγονίδιο. Από την συγκεκριμένη επίλυση η μακροσκοπική θ_c αλλά και μικροσκοπική γωνία επαφής είναι μέρος της λύσης και δεν δίνεται ως συνοριακή συνθήκη όπως σε πολλές υπάρχουσες μελέτες. Η γωνία αυτή εξαρτάται άμεσα από τις ιδιότητες της στέρεης και επίπεδης επιφανείας και πιο συγκεκριμένα από την παράμετρο διαβροχής W_0 και την επιφανειακή τάση σ . Από την μελέτη η οποία πραγματοποιήθηκε εξήχθη το συμπέρασμα ότι η επίδραση της βαρύτητας σε σταγονίδια αυτού του μεγέθους (1-100 μm) είναι ασήμαντη.

Ο έλεγχος εγκυρότητας του αριθμητικού μοντέλου πραγματοποιείται συγκρίνοντας τα αποτελέσματα που προήλθαν από την επίλυση του αριθμητικού μοντέλου με αποτελέσματα τα οποία προήλθαν από την ασυμπτωτική λύση του προβλήματος. Η ασυμπτωτική λύση του προβλήματος βασίζεται σε κάποιες λογικές παραδοχές οι οποίες επιτρέπουν την επίλυση του προβλήματος αναλυτικά. Πιο συγκεκριμένα με τις παραδοχές ότι η βαρύτητα είναι αμελητέα, η καμπυλότητα στην επίπεδη περιοχή είναι μηδενική και ότι οι διαμοριακές δυνάμεις είναι μέγιστες στην επίπεδη περιοχή και αμελητέες μακριά από αυτήν η επίλυση του προβλήματος γίνεται σημαντικά ευκολότερη. Από την σύγκριση των αποτελεσμάτων επιβεβαιώνεται ότι ο κώδικας ο οποίος επιλύει το αριθμητικό πρόβλημα είναι έγκυρος. Επίσης η αδυναμία της

ασυμπτωτικής λύσης να επιλύσει το πρόβλημα για τιμές της παραμέτρου διαβροχής μεγαλύτερες από την επιφανειακή τάση επιβεβαιώνεται και από το αριθμητικό μοντέλο.

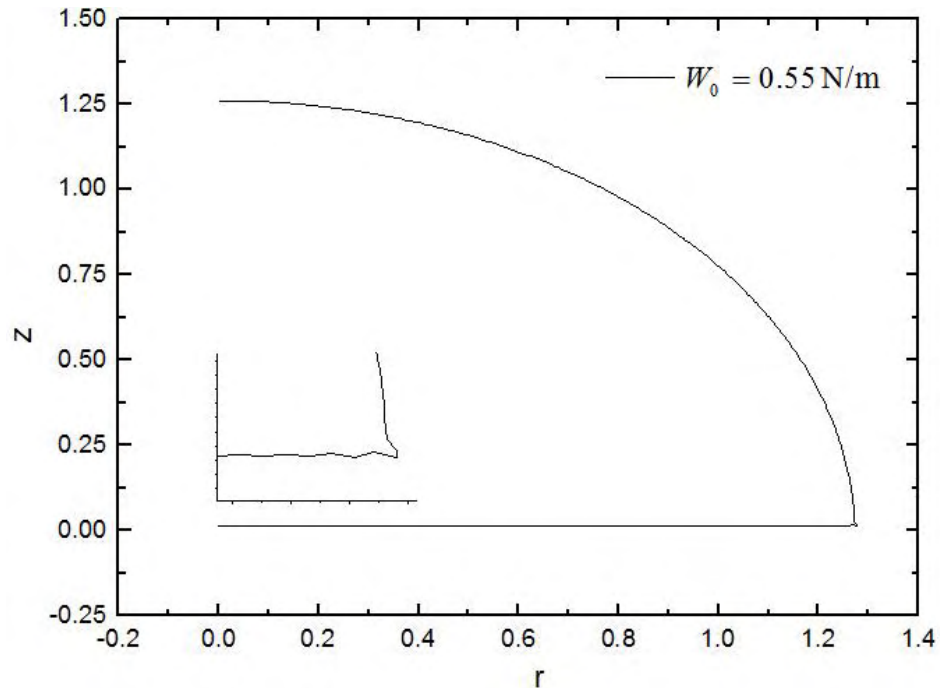
Στην συγκεκριμένη εργασία η κατασκευή του πλέγματος πραγματοποιείται από τον κώδικα. Όπως φάνηκε από τα αποτελέσματα το πλέγμα επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα και είναι σημαντική η κατάλληλη κατασκευή του πλέγματος. Το προσαρμοζόμενο πλέγμα (Adaptive Mesh Generation) με βάση την καμπυλότητα φαίνεται πως επιτρέπει την επίλυση του προβλήματος με σημαντικά λιγότερα στοιχεία με την προϋπόθεση όμως ότι επιλέγεται σωστά η τιμή της παραμέτρου d . Με την χρήση του συγκεκριμένου πλέγματος εκτός από σημαντικά καλύτερους χρόνους επίλυσης επιτυγχάνονται και πιο καλοσχηματισμένα σχήματα. Τέλος η μορφή της εξίσωσης δίνει την δυνατότητα να προσαρμοστεί εύκολα έτσι ώστε το πλέγμα να πυκνώνει ανάλογα με την τιμή όποιου παραμέτρου κρίνεται ως σημαντική για την επίλυση του προβλήματος.

Η παραμετροποίηση Arc-Length δίνει την δυνατότητα στον κώδικα να ψάξει για διάφορους κλάδους λύσης. Συνεπώς με την χρήση της παραμετροποίησης Arc-Length παίρνονται ελαφρώς διαφορετικές λύσεις για ίδιες τιμές της παραμέτρου W_0 . Αυτές οι λύσεις κατόπιν μίας ανάλυσης ιδιοτιμών φαίνεται πως δεν ανήκουν στον ίδιο κλάδο λύσης. Ωστόσο η ανάλυση ευστάθειας δεν είναι τόσο εύκολη καθώς μέσα στις εξισώσεις που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του φυσικού προβλήματος περιλαμβάνονται και εξισώσεις οι οποίες αφορούν την κατασκευή του πλέγματος. Η ανάλυση ευστάθειας μπορεί να αποτελέσει μία συνέχεια της παρούσας εργασίας.

Τέλος μερικά ερωτήματα τα οποία μείναν αναπάντητα και θα μπορούσαν να αποτελέσουν αντικείμενα περαιτέρω μελέτης δίνονται παρακάτω. Αρχικά είναι αλήθεια πως ο όρος $\frac{\partial z}{\partial \vec{n}}$ ο οποίος χρησιμοποιείται στην εξίσωση (3-5) αλλάζει πρόσημο όταν αλλάζει η

τιμή της παραγώγου του r ως προς ξ . Συνεπώς αυτή η αλλαγή επηρεάζει την φορά των διαμοριακών δυνάμεων οι οποίες ασκούνται στο σταγονίδιο. Στην παρούσα εργασία αυτές οι δυνάμεις θεωρούνται αμελητέες οπότε δεν πραγματοποιείται κάποια αλλαγή έτσι ώστε οι δυνάμεις να έχουν το κατάλληλο πρόσημο μακριά από την επιφάνεια. Με αντίστοιχο τρόπο λαμβάνονται υπόψιν οι δυνάμεις και στο μεγαλύτερο μέρος την βιβλιογραφίας. Ωστόσο θα είχε ενδιαφέρον ο έλεγχος της επίδρασης αυτών των δυνάμεων στο σχήμα του σταγονιδίου.

Ένα ακόμη αναπάντητο ερώτημα είναι το γιατί ο κώδικας δεν μπορεί να δώσει λύσεις για τιμές της παραμέτρου διαβροχής W_0 μεγαλύτερες της επιφανειακής τάσης σ . Από τα αποτελέσματα που προέκυψαν κατά την επίλυση του προβλήματος σχηματίστηκε η άποψη πως ίσως να μην υπάρχει φυσικό νόημα στην θεώρηση του «αερίου υποστρώματος» πάχους δ όταν η γωνία επαφής είναι μικρότερη από 90° , και πως ίσως για $W_0 > \sigma$ οι μόνες εφικτές λύσεις να είναι λύσεις στις οποίες εμφανίζεται πλήρης διαβροχή και σχηματίζεται ένα υγρό φιλμ από το ρευστό (precursor layer). Ο υπάρχων κώδικας, ο οποίος επιλύει μια σταγόνα που μπορεί να διαχωριστεί σε τρεις περιοχές: την περιοχή επαφής, την περιοχή μετάβασης και την εξωτερική περιοχή, όπως αυτές ορίστηκαν στην ασυμπτωτική λύση, δεν υποστηρίζει την προσέγγιση τέτοιων λύσεων και θα είχε ενδιαφέρον η τροποποίηση του έτσι ώστε για μεγάλες τιμές της παραμέτρου διαβροχής W_0 να αναζητούνται λύσεις στις οποίες υπάρχει ένα υγρό φιλμ ρευστού γύρω από το σταγονίδιο απορροφημένο από το στερεό υπόστρωμα (precursor layer). Μία αρχική ένδειξη αυτής της υπόθεσης παρατηρήθηκε με την υπάρχουσα μοντελοποίηση αλλά δεν κατέστη δυνατό να αναπαραχθεί για μεγάλο εύρος παραμέτρων, βλέπε Σχήμα 5-1. Πιο συγκεκριμένα πρόκειται για λύση με $W_0=0.55$ N/m που αντιστοιχεί σε οξεία γωνία επαφής (partial wetting) και αποτελεί αντικείμενο μελλοντικής έρευνας.



Σχήμα 5-1: Μορφή σχήματος σταγονιδίου για παράμετρο διαβροχής $W_0=0.55$ N/m

Τέλος κατά την διάρκεια εκπόνησης της παρούσας εργασίας και σε συνδυασμό με την έως τώρα γνωστή βιβλιογραφία υπήρξε μία ένδειξη ότι στην περίπτωση μερικής διαβροχής για πεπερασμένο όγκο δεν θα σχηματιστεί υγρό φιλμ κάτω από το σταγονίδιο αλλά το σταγονίδιο θα έρθει σε πλήρη επαφή με την στερεή επιφάνεια και θα σχηματίσει οξεία γωνία επαφής. Αντιθέτως, αν αντί για πεπερασμένο όγκο ήταν γνωστή η πίεση σε κάποιο σημείο του ρευστού, τότε το αναμενόμενο αποτέλεσμα θα ήταν η δημιουργία ενός υγρού φιλμ. Το φιλμ αυτό αποτελεί αποτέλεσμα απορρόφησης του ρευστού από την στερεή επιφάνεια. Συνεπώς το σταγονίδιο θα καθόταν πάνω σε αυτό το φιλμ σχηματίζοντας οξεία γωνία επαφής. Θα είχε λοιπόν ιδιαίτερο ενδιαφέρον μια έρευνα η οποία θα εξέταζε κατά πόσο η παραπάνω πρόταση είναι αληθής.

Βιβλιογραφία

1. N. Verplanck, Y.C., V. Thomy and R. Boukherroub, *Nanoscale Res. Lett.* 2007. **2**: p. 577-596.
2. Hirooka, Y., et al., *A Review of the Present Status and Future Prospects of the Application of Liquid Metals for Plasma-Facing Components in Magnetic Fusion Devices.* Fusion Science and Technology, 2015. **68**(3): p. 477-483.
3. Pelekasis, N. and L. Benos, *Static arrangement of a capillary porous system (CPS): Modelling.* Fusion Engineering and Design, 2017. **117**: p. 180-187.
4. Ferrara, K., R. Pollard, and M. Borden, *Ultrasound Microbubble Contrast Agents: Fundamentals and Application to Gene and Drug Delivery.* Annual Review of Biomedical Engineering, 2007. **9**(1): p. 415-447.
5. Liu, Y., H. Miyoshi, and M. Nakamura, *Encapsulated ultrasound microbubbles: Therapeutic application in drug/gene delivery.* Journal of Controlled Release, 2006. **114**(1): p. 89-99.
6. Kaufmann, B.A., K. Wei, and J.R. Lindner, *Contrast Echocardiography.* Current Problems in Cardiology, 2007. **32**(2): p. 51-96.
7. Stanziola, A., et al., *Ultrasound Imaging with Microbubbles [Life Sciences].* IEEE Signal Processing Magazine, 2016. **33**(2): p. 111-117.
8. Buchner Santos, E., et al., *Nanomechanical Properties of Phospholipid Microbubbles.* Langmuir, 2012. **28**(13): p. 5753-5760.
9. Glynos, E., et al., *Nanomechanics of Biocompatible Hollow Thin-Shell Polymer Microspheres.* Langmuir, 2009. **25**(13): p. 7514-7522.
10. Lytra, A., et al., *Static Response of Coated Microbubbles: Modeling Simulations and Parameter Estimation.* Procedia IUTAM, 2015. **16**: p. 123-133.
11. Lytra, A., *Numerical & theoretical study of the static response of coated microbubbles subject to uniform and distributed load application on the estimation of the shell elastic properties, (PhD Thesis),* in *Department of Mechanical Engineering.* 2016, University of Thessaly: Volos.
12. Sun, T., et al., *Reversible switching between superhydrophilicity and superhydrophobicity.* Angew Chem Int Ed Engl, 2004. **43**(3): p. 357-60.
13. F. Zhou and W. T. S. Huck, C.C., *Chem. Commun.*, 2005: p. 5999.
14. X. Hong, X.G.a.L.J., *J. Am. Chem. Soc.*, 2007. **129**: p. 1478-1479.
15. F. Mugele, A.K., J. Buehrle, D. Steinhauser and S. Herminghaus, *J. Phys.: Condens Matter*, 2005. **17**: p. S559-S576.
16. Young, T., *An Essay on the Cohesion of Fluids.* Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 1805. **95**: p. 65-87.
17. de Gennes, P.G., *Wetting: statics and dynamics.* Reviews of Modern Physics, 1985. **57**(3): p. 827-863.

18. Merchant, G.J. and J.B. Keller, *Contact angles*. Physics of Fluids A: Fluid Dynamics, 1992. **4**(3): p. 477-485.
19. Chaudhury, M.K. and G.M. Whitesides, *Direct measurement of interfacial interactions between semispherical lenses and flat sheets of poly(dimethylsiloxane) and their chemical derivatives*. Langmuir, 1991. **7**(5): p. 1013-1025.
20. Getta, T. and S. Dietrich, *Line tension between fluid phases and a substrate*. Physical Review E, 1998. **57**(1): p. 655-671.
21. Herminghaus, S., T. Pompe, and A. Fery, *Scanning force microscopy investigation of liquid structures and its application to fundamental wetting research*. Journal of Adhesion Science and Technology, 2000. **14**(14): p. 1767-1782.
22. Pompe, T. and S. Herminghaus, *Three-phase contact line energetics from nanoscale liquid surface topographies*. Phys Rev Lett, 2000. **85**(9): p. 1930-3.
23. Beysens, V.S.N.a.D.A., *Equation of motion of the triple contact line along an inhomogeneous surface*. Europhys. Lett., 2003. **64**(763768).
24. Schwartz, L.W. and S. Garoff, *Contact angle hysteresis and the shape of the three-phase line*. Journal of Colloid and Interface Science, 1985. **106**(2): p. 422-437.
25. Gennes, P.G.D., X. Hua, and P. Levinson, *Dynamics of wetting: local contact angles*. Journal of Fluid Mechanics, 2006. **212**: p. 55-63.
26. Israelachvili, J.N., *Intermolecular and Surface Forces*. 2010: Elsevier Science.
27. Derjaguin, B., *Untersuchungen über die Reibung und Adhäsion, IV*. Kolloid-Zeitschrift, 1934. **69**(2): p. 155-164.
28. Starov, V.M. and M.G. Velarde, *Surface forces and wetting phenomena*. J Phys Condens Matter, 2009. **21**(46): p. 464121.
29. Chamakos, N.T., M.E. Kavousanakis, and A.G. Papathanasiou, *Enabling efficient energy barrier computations of wetting transitions on geometrically patterned surfaces*. Soft Matter, 2013. **9**(40): p. 9624-32.
30. Kavousanakis, M.E., N.T. Chamakos, and A.G. Papathanasiou, *Connection of Intrinsic Wettability and Surface Topography with the Apparent Wetting Behavior and Adhesion Properties*. The Journal of Physical Chemistry C, 2015. **119**(27): p. 15056-15066.
31. Ruckenstein, E. and G.O. Berim, *Microscopic description of a drop on a solid surface*. Advances in Colloid and Interface Science, 2010. **157**(1): p. 1-33.
32. Diaz, M.E., M.D. Savage, and R.L. Cerro, *Prediction of static contact angles on the basis of molecular forces and adsorption data*. Phys Rev E, 2016. **94**(2-1): p. 022801.
33. Starov, V.M., *Surface forces action in a vicinity of three phase contact line and other current problems in kinetics of wetting and spreading*. Advances in Colloid and Interface Science, 2010. **161**(1): p. 139-152.
34. Zdražil, A., F. Stepanek, and O.K. Matar, *Droplet spreading, imbibition and solidification on porous media*. Journal of Fluid Mechanics, 2006. **562**: p. 1-33.

35. Sibley, D.N., et al., *A comparison of slip, disjoining pressure, and interface formation models for contact line motion through asymptotic analysis of thin two-dimensional droplet spreading*. Journal of Engineering Mathematics, 2015. **94**(1): p. 19-41.
36. Pismen, L.M. and Y. Pomeau, *Disjoining potential and spreading of thin liquid layers in the diffuse-interface model coupled to hydrodynamics*. Phys Rev E Stat Phys Plasmas Fluids Relat Interdiscip Topics, 2000. **62**(2 Pt B): p. 2480-92.
37. Yatsyshin, P., A.O. Parry, and S. Kalliadasis, *Complete prewetting*. Journal of Physics: Condensed Matter, 2016. **28**(27): p. 275001.
38. Zhao, Y. and J.S. Marshall, *Dynamics of driven liquid films on heterogeneous surfaces*. Journal of Fluid Mechanics, 2006. **559**: p. 355-378.
39. Dietrich, C.B.a.S., *Quantitative study of laterally inhomogeneous wetting films*. Eur Phys J B, 1999. **10**(767).
40. Schwartz, L.W., *Hysteretic Effects in Droplet Motions on Heterogeneous Substrates: Direct Numerical Simulation*. Langmuir, 1998. **14**(12): p. 3440-3453.
41. Sefiane, K., *On the role of structural disjoining pressure and contact line pinning in critical heat flux enhancement during boiling of nanofluids*. Applied Physics Letters, 2006. **89**(4): p. 044106.
42. Ajaev, V.S., *Spreading of thin volatile liquid droplets on uniformly heated surfaces*. Journal of Fluid Mechanics, 2005. **528**: p. 279-296.
43. Karapetsas, G., et al., *Thermocapillary-Driven Motion of a Sessile Drop: Effect of Non-Monotonic Dependence of Surface Tension on Temperature*. Langmuir, 2014. **30**(15): p. 4310-4321.
44. Seric, I., S. Afkhami, and L. Kondic, *Interfacial instability of thin ferrofluid films under a magnetic field*. Journal of Fluid Mechanics, 2014. **755**.
45. ElSherbini, A.I. and A.M. Jacobi, *Liquid drops on vertical and inclined surfaces*. Journal of Colloid and Interface Science, 2004. **273**(2): p. 556-565.
46. Bourges-Monnier, C. and M.E.R. Shanahan, *Influence of Evaporation on Contact Angle*. Langmuir, 1995. **11**(7): p. 2820-2829.
47. Li, D. and A.W. Neumann, *Determination of line tension from the drop size dependence of contact angles*. Colloids and Surfaces, 1990. **43**(2): p. 195-206.
48. Stalder, A.F., et al., *Low-bond axisymmetric drop shape analysis for surface tension and contact angle measurements of sessile drops*. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2010. **364**(1): p. 72-81.
49. Blount, M.J., M.J. Miksis, and S.H. Davis, *The equilibria of vesicles adhered to substrates by short-ranged potentials*. Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2013. **469**(2153).
50. Cantat, I., K. Kassner, and C. Misbah, *Vesicles in haptotaxis with hydrodynamical dissipation*. Eur Phys J E Soft Matter, 2003. **10**(2): p. 175-89.
51. Kokhuis, T.J.A., et al., *Secondary Bjerknes Forces Deform Targeted Microbubbles*. Ultrasound in Medicine & Biology, 2013. **39**(3): p. 490-506.

52. Lajoinie G., L.Y., Gelderblom E., Dollet B., Lentacker I., Dewitte H., de Jong N. & Versluis M., *On the controlled and directed local release from drugloaded microbubbles for sonothrombolytic therapy*, in *20th European Symposium on Ultrasound Contrast Imaging*. 2015: Rotterdam, Netherlands.
53. Marmottant, P., et al., *Buckling resistance of solid shell bubbles under ultrasound*. The Journal of the Acoustical Society of America, 2011. **129**(3): p. 1231-1239.
54. Zhao, S., K.W. Ferrara, and P.A. Dayton, *Asymmetric oscillation of adherent targeted ultrasound contrast agents*. Applied Physics Letters, 2005. **87**(13): p. 134103.
55. Vlachomitrou, M. and N. Pelekasis, *Dynamic simulation of a coated microbubble in an unbounded flow: response to a step change in pressure*. Journal of Fluid Mechanics, 2017. **822**: p. 717-761.
56. Efthymiou, K., *Numerical study of the interaction of a microbubble with a wall, (PhD Thesis)*, in *Department of Mechanical Engineering*. 2015, University of Thessaly: Volos, (in Greek).
57. Weatherburn, C.E., *Differential geometry of three dimensions*. 1961: The University Press.
58. Middleman, S., *Modeling axisymmetric flows : dynamics of films, jets, and drops*. 1995: San Diego : Academic Press, [1995] ©1995.
59. Pelekasis, N., *A study on drop and bubble dynamics via a hybrid boundary - element-finite element methodology, PhD Thesis*, in *State University of New York at Buffalo* 1991.
60. Pelekasis, N.A., J.A. Tsamopoulos, and G.D. Manolis, *Equilibrium shapes and stability of charged and conducting drops*. Physics of Fluids A: Fluid Dynamics (1989-1993), 1990. **2**(8): p. 1328-1340.
61. Prenter, P.M., *Splines and Variational Methods*. 1975: Wiley.
62. Stroud, A.H. and D.U. Secrest, *Gaussian quadrature formulas*. 1966: Prentice-Hall.
63. Vrahatis, M., *Numerical Analysis*. 2002: Ελληνικά γράμματα, (in Greek).
64. Binous, H. and A.A. Shaikh, *Introduction of the arc-length continuation technique in the chemical engineering graduate program at KFUPM*. Computer Applications in Engineering Education, 2015. **23**(3): p. 344-351.