



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Τομέας Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης
Διεργασιών και Συστημάτων

Μέτρηση γωνίας επαφής και επιφανειακής τάσης με κινητό τηλέφωνο

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Χρυσολωράς Θεόδωρος

Επιβλέπων Καθηγητής: Παπαθανασίου Αθανάσιος,

Αναπληρωτής Καθηγητής Ε.Μ.Π.

ΑΘΗΝΑ, 2019

Ευχαριστίες

Για τη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία, πρωτίστως θα επιθυμούσα να ευχαριστήσω θερμά τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Αθανάσιο Παπαθανασίου, τόσο για την ανάθεση της εργασίας, όσο και τη στήριξη και συνεχή βοήθειά του κατά τη διάρκεια της εκπόνησής της.

Επίσης, ευχαριστώ τόσο το Διδάκτορα Νικόλαο Χαμάκο, όσο και το μέλος Ε.Τ.Ε.Π. κ. Ιωάννη Τζιγκουνάκη, των οποίων οι προγραμματιστικές γνώσεις και η βοήθεια ήταν μεγάλης σημασίας στην ανάπτυξη και σωστή λειτουργία της εφαρμογής για το κινητό τηλέφωνο.

Θα ήταν παράλειψη, βεβαίως, να μην ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της ερευνητικής ομάδας του Αναπληρωτή Καθηγητή Αθανασίου Παπαθανασίου, για την παροχή όλων των απαραίτητων μέσων για την πραγματοποίηση της διπλωματικής μου εργασίας.

Τέλος, αισθάνομαι τη βαθύτατη ανάγκη να εκφράσω ένα μεγάλο «Ευχαριστώ» και προς τους γονείς μου, οι οποίοι, παρά τις όποιες δυσκολίες και αντιξοότητες έχουν σταθεί δίπλα μου, καθ' όλην τη μέχρι τώρα πορεία μου, πάντοτε ενθαρρύνοντάς με όταν το έχω ανάγκη και στηρίζοντάς με, τόσο οικονομικά, όσο και συναισθηματικά.

Περίληψη

Τα τριχοειδή φαινόμενα είναι σημαντικά τόσο στη μικρο – όσο και τη νάνο – κλίμακα και η κατάλληλη διαχείριση τους μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικές εφαρμογές, όπως πρώτη η ίδια η φύση έχει δείξει. Τα πιο σημαντικά φυσικά μεγέθη που χαρακτηρίζουν τα τριχοειδή φαινόμενα είναι:

- Η γωνία επαφής. Αυτή ποσοτικοποιεί τη *διαβρεκτικότητα* στερεών από υγρά.
- Η επιφανειακή τάση υγρών. Αυτή ποσοτικοποιεί το ενεργειακό κόστος για την αύξηση του εμβαδού της ελεύθερης επιφάνειας υγρών.

Η μέτρηση των παραπάνω μεγεθών είναι σημαντική σε πολλές καθιερωμένες (απορρυπαντικά, βαφές, εκτυπώσεις, καλλυντικά, λίπανση) αλλά και νέες εφαρμογές (ιατρική προσθετική, μικρο – αναλυτική χημεία).

Τα διαθέσιμα όργανα μέτρησης των μεγεθών αυτών χαρακτηρίζονται από μέγεθος ενός επιτραπέζιου υπολογιστή και έχουν κόστος που κυμαίνεται από 20 έως 30 χιλιάδες ευρώ.

Στην προσπάθεια δημιουργίας ενός εναλλακτικού τρόπου μέτρησης των συγκεκριμένων μεγεθών, αναπτύχθηκε από την ερευνητική ομάδα του *Αθανασίου Παπαθανασίου*, ένα υπολογιστικό λογισμικό, γραμμένο σε γλώσσα προγραμματισμού *Python*, με σκοπό την ανάλυση σχήματος σταγόνων, υπό την ονομασία *DropToolKit*.

Σκοπός, λοιπόν, της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας, είναι η προσπάθεια συνδυασμού του συγκεκριμένου λογισμικού με κινητό τηλέφωνο, μέσω κατάλληλης εφαρμογής. Αυτός ο τρόπος μέτρησης γωνίας επαφής και επιφανειακής τάσης σταγόνων, επιδιώκεται να αποδίδει αποτελέσματα ακριβείας αντίστοιχης με αυτήν των ήδη υπαρχόντων εμπορικών πακέτων, ενώ ταυτόχρονα να παρουσιάζει αισθητά χαμηλότερο κόστος.

Abstract

Capillary phenomena are important both in the micro – and the nano – scale and their proper management can lead to important applications, as nature itself has already shown. The most important physical quantities which characterize capillary phenomena are:

- The contact angle, which quantifies the wettability of solids from liquids.
- The surface tension of liquids, which quantifies the energy cost which is required, in order to increase the area of the free surface of liquids.

The measurement of the aforementioned quantities is important in many established (detergents, dyes, printing, cosmetics, lubrication) as well as many new applications (medical prosthetics, micro – analytical chemistry).

The instruments available to measure those quantities are characterized by a size similar to that of a desktop computer and have a cost between 20 and 30 thousand euros.

In an effort to create an alternative way of measuring these particular quantities, a computer software coded in *Python* programming language was developed by the research team of *Athanasios Papathanasiou*, in order to analyze the shape of droplets, under the name *DropToolKit*.

Thus, the purpose of this diploma thesis is the to combine this program with a mobile phone, by using an appropriate mobile application. This way of measuring the contact angle and surface tension of droplets is intended to yield results of similar accuracy to that of the existing commercial packages, while maintaining a considerably lower cost at the same time.

Πίνακας Περιεχομένων

| | |
|--|----|
| Περίληψη..... | 3 |
| Abstract..... | 4 |
| Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή..... | 13 |
| Κεφάλαιο 2: Προσπάθειες βελτίωσης των ήδη υπάρχουσών μεθοδολογιών..... | 15 |
| Κεφάλαιο 2.1: Η μέθοδος των Malcolm – Paynter..... | 15 |
| Κεφάλαιο 2.2: Η μέθοδος των Maze – Burnet..... | 15 |
| Κεφάλαιο 3: Σύγχρονες μέθοδοι μέτρησης επιφανειακής τάσης και γωνίας επαφής..... | 17 |
| Κεφάλαιο 3.1: Μέτρηση Σχήματος Αξονοσυμμετρικής Σταγόνας (Axisymmetric Drop Shape Analysis – ADSA) | 17 |
| Κεφάλαιο 3.1.1: Γενικά Στοιχεία – Εξίσωση Young – Laplace..... | 17 |
| Κεφάλαιο 3.1.2: Χαρακτηριστικά της μεθόδου ADSA – διαφοροποιήσεις από παλαιότερες μεθόδους..... | 18 |
| Κεφάλαιο 3.1.3: Αριθμητική ολοκλήρωση της εξίσωσης Young – Laplace..... | 19 |
| Κεφάλαιο 3.1.4: Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της μεθόδου ADSA..... | 20 |
| Κεφάλαιο 3.2: Παραλλαγές της μεθόδου ADSA..... | 21 |
| Κεφάλαιο 3.2.1: Ανάλυση Προσαρμογής Θεωρητικού Σχήματος (Theoretical Image Fitting Analysis – TIFA) | 21 |
| Κεφάλαιο 3.2.2: Μέτρηση Σχήματος Αξονοσυμμετρικών Σταγόνων Χαμηλού Αριθμού Bond (Low – Bond Axisymmetric Drop Shape Analysis – LBADSA) | 21 |
| Κεφάλαιο 3.3: Άλλες διαθέσιμες τεχνικές..... | 22 |
| Κεφάλαιο 3.3.1: Μέθοδοι μέτρησης γωνίας επαφής..... | 22 |
| Κεφάλαιο 3.3.1.1: Μέτρηση μέσω γωνιομέτρου..... | 23 |
| Κεφάλαιο 3.3.1.2: Προσαρμογή μέσω πολωνύμου..... | 24 |
| Κεφάλαιο 3.3.1.3: Προσέγγιση ενεργού περιγράμματος (φιδιού) | 24 |
| Κεφάλαιο 3.3.1.4: Προσέγγιση μέσω σφαίρας..... | 25 |
| Κεφάλαιο 3.3.1.5: Επίλυση μέσω αναλυτικής προσέγγισης. ... | 25 |

| | |
|---|----|
| Κεφάλαιο 3.3.2: Μέθοδοι μέτρησης επιφανειακής τάσης..... | 26 |
| Κεφάλαιο 3.3.2.1: Μέθοδος του δακτυλίου Du Noüy..... | 26 |
| Κεφάλαιο 3.3.2.2: Μέθοδος της πλάκας Wilhelmy..... | 27 |
| Κεφάλαιο 3.3.2.3: Μέθοδος τριχοειδούς ανύψωσης..... | 27 |
| Κεφάλαιο 4: Παρουσίαση του εξεταζομένου λογισμικού μέτρησης..... | 29 |
| Κεφάλαιο 4.1: Γενικά στοιχεία για το λογισμικό..... | 29 |
| Κεφάλαιο 4.2: Θεωρία..... | 29 |
| Κεφάλαιο 4.3: Περιγραφή της χρησιμοποιούμενης μεθόδου..... | 31 |
| Κεφάλαιο 4.3.1: Εξαγωγή του πειραματικού σχήματος της σταγόνας, μέσω της διαδικασίας ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας..... | 31 |
| Κεφάλαιο 4.3.2: Παραμετροποίηση του προφίλ της σταγόνας σε πολικές συντεταγμένες..... | 36 |
| Κεφάλαιο 4.3.3: Εξαγωγή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας, μέσω της εξίσωσης Young – Laplace..... | 38 |
| Κεφάλαιο 4.3.4: Προσαρμογή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας στο πειραματικό της προφίλ..... | 42 |
| Κεφάλαιο 4.4: Σύγκριση του λογισμικού DropToolKit με άλλα υπολογιστικά πακέτα μέτρησης σχήματος σταγόνων..... | 45 |
| Κεφάλαιο 4.4.1: Συνθήκες πραγματοποίησης των δοκιμών..... | 45 |
| Κεφάλαιο 4.4.2: Σύγκριση των προκύπτοντων αποτελεσμάτων.. | 47 |
| Κεφάλαιο 4.4.3: Συμπεράσματα..... | 50 |
| Κεφάλαιο 4.5: Εκτέλεση του προγράμματος σε μικρο – υπολογιστή (single – board computer) | 51 |
| Κεφάλαιο 4.6: Επίλογος..... | 53 |
| Προοπτικές για μελλοντική έρευνα..... | 55 |
| Παράρτημα..... | 57 |
| Μέρος Α: Οδηγός και παραδείγματα χρήσης του λογισμικού DropToolKit (Έκδοση 1.6) | 57 |
| Μέρος Β: Οδηγός και παράδειγμα χρήσης της ανεπτυγμένης εφαρμογής για το κινητό τηλέφωνο..... | 68 |
| Βιβλιογραφία..... | 77 |

Λίστα Πινάκων

Πίνακας 1: Σύγκριση των τιμών επιφανειακής τάσης (σε mN/m) διαφόρων υγρών, όπως αυτές μετρήθηκαν από τα λογισμικά DropToolKit, DROPIimage Advanced και το plugin Pendent_Drop (sic) του προγράμματος επεξεργασίας εικόνων ImageJ^[33].....49

Πίνακας 2: Σύγκριση των τιμών γωνίας επαφής (σε μοίρες) σταγόνων νερού πάνω σε διάφορες στερεές επιφάνειες, όπως αυτές μετρήθηκαν από τα λογισμικά DropToolKit, DROPIimage Advanced και το plugin DropAnalysis του προγράμματος επεξεργασίας εικόνων ImageJ^[32], το οποίο χρησιμοποιεί μία τεχνική μέτρησης σχήματος αξονοσυμμετρικής σταγόνας για χαμηλούς αριθμούς Bond (LBADSA)^[32]. Οι επιφάνειες από PMMA (Plexiglas), αλουμίνιο, χαλκό και PTFE (Teflon) είναι επίπεδες και λείες, ενώ η δομημένη πυριτική επιφάνεια αποτελείται από μικροπόρους, κεκαλυμμένους από ένα λεπτό υμένιο Teflon^[34] 50

Λίστα Εικόνων

Εικόνα 1: Γραφική αναπαράσταση μίας επικαθήμενης (αριστερά) και μίας κρεμάμενης (δεξιά) σταγόνας.....13

Εικόνα 2: Απεικόνιση της γωνίας επαφής, θ_Y , μίας σταγόνας που επικάθεται σε στερεή επιφάνεια.....15

Εικόνα 3: Ένα χαρακτηριστικό γωνιόμετρο, για επί τόπου μέτρηση της γωνίας επαφής..... 23

Εικόνα 4: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου του δακτυλίου Du Noüy.....26

Εικόνα 5: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου της πλάκας Wilhelmy.....27

Εικόνα 6: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου τριχοειδούς ανύψωσης..... 28

Εικόνα 7: Σχηματική αναπαράσταση της διάταξης ενός συνήθους γωνιομέτρου/τασιμέτρου.....30

Εικόνα 8: Σχηματική αναπαράσταση της εξαγωγής του σχήματος μίας σταγόνας, με τη μέθοδο κατωφλίου.....33

Εικόνα 9: Παράδειγμα εφαρμογής της μεθόδου κατωφλίου, για την ανίχνευση του σχήματος μίας επικαθήμενης σταγόνας νερού, όγκου ίσου με 10 μL , η οποία βρίσκεται πάνω σε στερεή επιφάνεια αργιλίου. Το τμήμα α) απεικονίζει την αρχική, ανεπεξέργαστη εικόνα, ενώ το τμήμα β) το προκύπτον σχήμα της σταγόνας..... 34

Εικόνα 10: α) Η μπλε γραμμή απεικονίζει το αρχικά εξαγόμενο σχήμα της σταγόνας, ενώ η πράσινη γραμμή αποτελεί ένα κάθετο διάνυσμα επί της επιφανείας της. β) Κατανομή της (κανονικοποιημένης) φωτεινότητας κατά μήκος ενός κάθετου διανύσματος της επιφανείας. Το κυκλωμένο σημείο επιλέγεται ως σημείο της επιφανείας της σταγόνας, αφού βρίσκεται πιο κοντά στην τιμή $\frac{1}{2}$35

Εικόνα 11: Σχηματική απεικόνιση σταγόνας, επικαθήμενης πάνω σε επίπεδη και ομαλή στερεή επιφάνεια, με γωνία επαφής θ_Y . Το σχήμα της σταγόνας έχει μετατραπεί σε σύστημα πολικών συντεταγμένων..... 38

Εικόνα 12: Το φύλλο του λωτού αποτελεί την πλέον χαρακτηριστική υπερυδρόφοβη επιφάνεια.....47

Εικόνα 13: Κρεμάμενες σταγόνες α) δωδεκανίου (όγκου 5 μL) και β) νερού (όγκου 8 μL), με διαφορετικές τιμές επιφανειακής τάσης ($25,43 \frac{\text{mN}}{\text{m}}$ και $71,13 \frac{\text{mN}}{\text{m}}$, αντιστοίχως, όπως προκύπτουν από τον Πίνακα 1). Αμέσως γίνεται φανερή η σημαντική επίδραση της τιμής της επιφανειακής τάσης στο σχήμα των σταγόνων, σε κατάσταση ισορροπίας.....48

Εικόνα 14: Σταγόνες νερού, όγκου ίσου με 7,5 μL , που ισορροπούν πάνω σε διαφορετικές στερεές επιφάνειες, συγκεκριμένα σε α) λείο PMMA (Plexiglas), β) λείο αλουμίνιο, γ) λείο χαλκό, δ) λείο PTFE (Teflon) και ε) μικροδομημένη επιφάνεια, αποτελούμενη από μικροπόρους πυριτίου και επικεκαλυμμένη με λεπτό στρώμα Teflon..... 49

Εικόνα 15: Το ολοκληρωμένο γωνιόμετρο/τασίμετρο που έχει κατασκευασθεί. Η βιβλιοθήκη ανοικτού κώδικα Aravis εκτελείται στο μικρο - υπολογιστή Raspberry Pi 3, προκειμένου να ληφθεί η εικόνα του προφίλ της σταγόνας. Εν συνεχεία, τα άκρα της σταγόνας εντοπίζονται με τη μέθοδο ADSA μέσω του προγράμματος DropToolKit και, ακολούθως, δημιουργείται το σχήμα της σταγόνας..... 52

Εικόνα 16: Απεικόνιση των δύο εικόνων (Image_Water_Pendant.bmp - υπάρχει ήδη στο φάκελο εγκατάστασης του DropToolKit και Imported_Image.bmp - δημιουργείται μετά την εκτέλεση του κώδικα LoadShape.py) του προφίλ της κρεμάμενης σταγόνας.....64

Εικόνα 17: Η συνολική εκτέλεση του προγράμματος DropToolKit, μέσω της γραμμής εντολών, και η εμφάνιση των αποτελεσμάτων, για την περίπτωση της κρεμάμενης σταγόνας.....65

Εικόνα 18: Απεικόνιση των δύο εικόνων (Image_Water_Sessile.bmp - υπάρχει ήδη στο φάκελο εγκατάστασης του DropToolKit και Imported_Image.bmp - δημιουργείται μετά την εκτέλεση του κώδικα LoadShape.py) του προφίλ της επικαθήμενης σταγόνας.....66

Εικόνα 19: Η συνολική εκτέλεση του προγράμματος DropToolKit, μέσω της γραμμής εντολών, και η εμφάνιση των αποτελεσμάτων, για την περίπτωση της επικαθήμενης σταγόνας.....66

Εικόνα 20: Αναπαράσταση της εξέλιξης της προσαρμογής του θεωρητικού σχήματος κρεμάμενης σταγόνας στο πειραματικό.....67

Εικόνα 21: Αναπαράσταση της εξέλιξης της προσαρμογής του θεωρητικού σχήματος επικαθήμενης σταγόνας στο πειραματικό.....67

Εικόνα 22: Απεικόνιση της διεπαφής χρήστη της εφαρμογής..... 69

Εικόνα 23: Αίτηση πρόσβασης στη Συλλογή του κινητού από την εφαρμογή....72

Εικόνα 24: Διαδικασία επιλογής της επιθυμητής φωτογραφίας από τη Συλλογή του κινητού.....72

Εικόνα 25: Ενημέρωση της εφαρμογής προς το χρήστη, για επιτυχή αποστολή της εικόνας στο διακομιστή.....73

Εικόνα 26: Προεπισκόπηση της εικόνας που επιλέχθηκε στο κυρίως μενού της εφαρμογής.....73

Εικόνα 27: Ορισμός του όγκου της σταγόνας..... 73

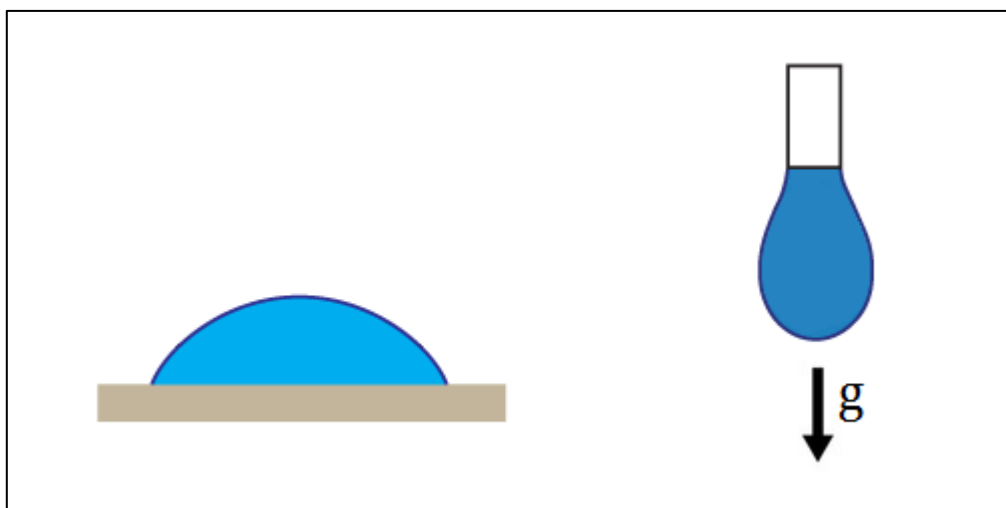
Εικόνα 28: Η ιστοσελίδα, στην οποία οδηγείται ο χρήστης, αφού πατήσει το πλήκτρο «Open DropToolKit (Version 1.6)», που βρίσκεται στο τέλος της εφαρμογής. Η σελίδα αυτή περιλαμβάνει μία σύντομη εισαγωγή στο πρόγραμμα DropToolKit, ενώ, αν πατηθεί το πλήκτρο “Execute DropToolKit (Version 1.6)” που υπάρχει στην κάτω πλευρά, αυτομάτως θα εκτελεσθούν οι αλγόριθμοι που

δίνουν τα επιθυμητά αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα αυτά, για το συγκεκριμένο παράδειγμα, απεικονίζονται στην Εικόνα 29.....74

Εικόνα 29: Τα συνολικά αποτελέσματα που δίνει το πρόγραμμα DropToolKit, μέσω της εφαρμογής, για το συγκεκριμένο παράδειγμα.....75

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

Τα τριχοειδή φαινόμενα και τα φαινόμενα διαβροχής έχουν εξέχουσα θέση σε πλήθος βιομηχανικών διεργασιών, όπως είναι η βιομηχανία κλωστοϋφαντουργίας^[21] και η επεξεργασία ορυκτών^[22] και η μέτρηση της επιφανειακής τάσης υγρών, καθώς και της γωνίας επαφής μεταξύ αυτών και των επιφανειών πάνω στις οποίες βρίσκονται, είναι μεγάλης σημασίας σε πολλές άλλες βιομηχανικές εφαρμογές και παρουσιάζει υψηλό επιστημονικό ενδιαφέρον. Για το σκοπό αυτόν, έχουν αναπτυχθεί αρκετές μέθοδοι, από τις οποίες η βασικότερη είναι η ανάλυση σχήματος σταγόνας (*Drop Shape Analysis*) και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των μεγεθών αυτών για τις δύο περιπτώσεις της επικαθήμενης και της κρεμάμενης σταγόνας (Εικόνα 1). Οι μέθοδοι αυτές είναι κατάλληλες για μετρήσεις σε πολυάριθμες περιπτώσεις, όπως είναι τα πειράματα σε βιολογικά συστήματα, οι εφαρμογές σε συστήματα, οι οποίες αναδεικνύουν φαινόμενα γήρανσης που προκαλούνται από την επιφανειακή τάση και ο προσδιορισμός της διεπιφανειακής τάσης μεταξύ δύο ρευστών.



Εικόνα 1: Γραφική αναπαράσταση μίας επικαθήμενης (αριστερά) και μίας κρεμάμενης (δεξιά) σταγόνας.

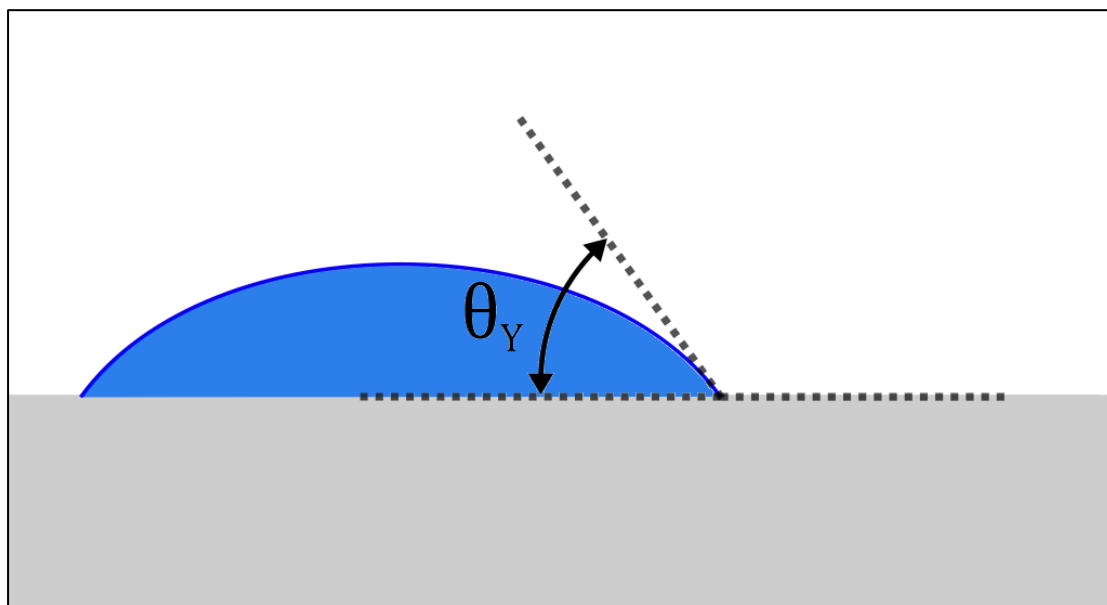
Παρ' όλη την απλότητα στη χρήση επικαθήμενων και κρεμάμενων σταγόνων, για τον πειραματικό προσδιορισμό της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής, αυτές αφήνουν αμφιβολίες σε περιπτώσεις, όπου απαιτείται υψηλή ακρίβεια. Μέχρι πρότινος, δεν υπήρχε ελεύθερα διαθέσιμο λογισμικό, το οποίο να καθιστούσε δυνατή την ανάλυση τόσο επικαθήμενων, όσο και κρεμάμενων σταγόνων. Οι δύο προαναφερθείσες δυνατές περιπτώσεις, λοιπόν, αντιμετωπίζονταν χωριστά και τα πειραματικά αποτελέσματα ερμηνεύονταν με βάση ένα σύνολο πινάκων, διαφορετικό για κάθε είδος σταγόνας. Χαρακτηριστικά παραδείγματα τέτοιων πινάκων αποτελούν οι πίνακες των Bashforth και Adams^[1] για επικαθήμενες σταγόνες, του Fordham^[2] για κρεμάμενες σταγόνες, όπως και άλλοι πίνακες^[3]. Οι πίνακες

αυτοί αφορούν σε σταγόνες συγκεκριμένου εύρους μεγέθους και σχήματος^[3, 4].

Η σημαντικότερη, ίσως, πηγή σφαλμάτων στις δύο παραπάνω μεθόδους, σχετίζεται με την ανάκτηση δεδομένων. Η περιγραφή ολόκληρης της επιφάνειας της σταγόνας ανάγεται στη μέτρηση ενός αριθμού σημείων, τα οποία έχουν προεπιλεγεί κατά τέτοιον τρόπο, ώστε να είναι συμβατά με τη χρήση των πινάκων. Τα σημεία αυτά χαρακτηρίζονται ως *κρίσιμα*, καθώς αντιστοιχούν σε ειδικά χαρακτηριστικά, όπως είναι η αλλαγή καμπυλότητας στη διεπιφάνεια, και είναι αναγκαίο να προσδιορισθούν με μεγάλη ακρίβεια. Επιπροσθέτως, σε περίπτωση που επιδιώκεται και ο υπολογισμός της τιμής της γωνίας επαφής, πρέπει να είναι με ακρίβεια γνωστή και η θέση του σημείου επαφής, δηλαδή του σημείου όπου έρχονται σε επαφή και οι τρεις διαφορετικές φάσεις (υγρό, στερεό υπόστρωμα και περιβάλλον αέρας). Ωστόσο, οι απαιτούμενες, αυτές, μετρήσεις, είναι αρκετά δύσκολο να πραγματοποιηθούν.

Κεφάλαιο 2: Προσπάθειες βελτίωσης των ήδη υπάρχουσών μεθοδολογιών

Στην προσπάθεια υπολογισμού των μεγεθών της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής (*Εικόνα 2*) με ταυτόχρονη εξάλειψη των δυσκολιών που αναφέρθηκαν, έχουν γίνει αρκετές προσπάθειες ανάπτυξης τέτοιων υπολογιστικών μεθόδων.



Εικόνα 2: Απεικόνιση της γωνίας επαφής, θ_Y , μίας σταγόνας που επικάθεται σε στερεή επιφάνεια.

Κεφάλαιο 2.1: Η μέθοδος των Malcolm – Paynter

Μία από αυτές ήταν η αναλυτική μέθοδος υπολογισμού που προτάθηκε από τους Malcolm και Paynter, σε μία δημοσίευσή τους το 1981^[5]. Ωστόσο, όπως συνέβαινε και σε προηγούμενες προσεγγίσεις, η εφαρμογή της μεθόδου αυτής περιοριζόταν σε επικαθήμενες σταγόνες, των οποίων οι γωνίες επαφής είναι μεγαλύτερες των 90°.

Κεφάλαιο 2.2: Η μέθοδος των Maze – Burnet

Οι Maze και Burnet^[6] το 1969 ξεκίνησαν την ανάπτυξη μίας πιο ικανοποιητικής μεθοδολογίας για τον προσδιορισμό της επιφανειακής τάσης, μέσω του σχήματος επικαθήμενων σταγόνων. Δημιούργησαν έναν αριθμητικό αλγόριθμο, αποτελούμενο από μία διαδικασία μη – γραμμικής παλινδρόμησης, στην οποία το – θεωρητικά – υπολογισμένο σχήμα μίας σταγόνας προσαρμόζεται σε ένα σύνολο αυθαίρετα επιλεγμένων και πειραματικά

μετρημένων σημείων στο προφίλ της σταγόνας αυτής, μεταβάλλοντας δύο παραμέτρους, μέχρις ότου να επιτευχθεί η βέλτιστη προσαρμογή. Δηλαδή, το πειραματικώς προσδιορισμένο σχήμα της σταγόνας περιγράφεται από ένα σύνολο σημείων συντεταγμένων, χωρίς να αποδίδεται ιδιαίτερη σημασία σε κάποιο από αυτά. Προκειμένου να ξεκινήσει ο υπολογισμός, πρέπει να τεθούν λογικές αρχικές εκτιμήσεις του σχήματος της σταγόνας και των παραμέτρων μεγέθους^[6], διαφορετικά, η υπολογισμένη καμπύλη δε θα συγκλίνει προς την πειραματικά προσδιορισμένη. Αυτές προκύπτουν, εμμέσως, από τους πίνακες των Bashforth και Adams^[1].

Ο αλγόριθμος αυτός αποτέλεσε μεγάλη πρόοδο στον υπολογισμό των επιθυμητών μεγεθών σταγόνων. Παρ' όλα αυτά, έχει και αρκετές ελλείψεις – ατέλειες, οι οποίες συνοψίζονται ως ακολούθως.

- Αρχικά, η συνάρτηση σφάλματος υπολογίζεται, αθροίζοντας τα τετράγωνα των οριζοντίων αποστάσεων μεταξύ των πειραματικά προσδιορισμένων σημείων και των σημείων της υπολογισμένης καμπύλης. Αυτός ο τρόπος έχει πολλά περιθώρια βελτίωσης, ιδίως στην περίπτωση των επικαθήμενων σταγόνων, των οποίων το σχήμα επηρεάζεται σε μεγάλο βαθμό από τις βαρυτικές δυνάμεις και τείνει να γίνεται επίπεδο κοντά στην κορυφή της σταγόνας. Ως αποτέλεσμα, οποιοδήποτε σημείο βρίσκεται σε αυτήν την περιοχή, είναι πιθανό να επιφέρει μεγάλο σφάλμα, ακόμη και όταν βρίσκεται πολύ κοντά στη βέλτιστη καμπύλη.
- Μεγάλης σημασίας είναι και η θέση της κορυφής της σταγόνας, η οποία καθορίζει την αρχή των αξόνων, από την οποία μετρούνται τα σημεία της υπολογιζόμενης καμπύλης. Οι Maze και Burnet^[7] το 1971 επιχείρησαν την τροποποίηση του αρχικού αλγορίθμου τους, αλλά το έπραξαν προσαρμόζοντας μόνον την κάθετη θέση της αρχής των αξόνων, και όχι την οριζόντια.

Κεφάλαιο 3: Σύγχρονες μέθοδοι μέτρησης επιφανειακής τάσης και γωνίας επαφής

Κεφάλαιο 3.1: Μέτρηση Σχήματος Αξονοσυμμετρικής Σταγόνας (Axisymmetric Drop Shape Analysis – ADSA)

Κεφάλαιο 3.1.1: Γενικά Στοιχεία – Εξίσωση Young – Laplace

Σε πολλές περιπτώσεις, η θεώρηση της βαρύτητας ως αμελητέου μεγέθους και η χρήση της προσέγγισης μέσω τμήματος σφαίρας δεν είναι ρεαλιστική, ενώ η μέθοδος της επικαθήμενης σταγόνας χρησιμοποιείται εάν η βαρύτητα είναι η επικρατούσα ασκούμενη δύναμη επί της σταγόνας. Υπό τις συνθήκες αυτές και, εάν θεωρηθεί η ύπαρξη ενός οριζοντίου και ομογενούς στερεού υποστρώματος, η σταγόνα μπορεί να υποτεθεί ότι είναι *αξονοσυμμετρική*. Σε περίπτωση που δεν ασκούνται άλλες δυνάμεις, εκτός της βαρυτικής, τότε η διαφορά πίεσης μεταβάλλεται γραμμικά με το ύψος:

$$\Delta P = \Delta P_0 + \Delta \rho \cdot g \cdot h$$

όπου ΔP_0 είναι η βαθμίδα πίεσης σε ένα επίπεδο αναφοράς, h είναι η υψομετρική διαφορά μεταξύ του εξεταζόμενου σημείου και του επιπέδου αυτού, $\Delta \rho$ η διαφορά μεταξύ των πυκνοτήτων των φάσεων που υπάρχουν και g η βαρυτική σταθερά.

Για τις αξονοσυμμετρικές σταγόνες, οι δύο βασικές ακτίνες καμπυλότητας έχουν την ίδια τιμή στην κορυφή της σταγόνας. Τοποθετώντας το επίπεδο αναφοράς σε αυτό ακριβώς το σημείο, λοιπόν, από την προηγούμενη εξίσωση προκύπτει η:

$$\Delta P_0 = \frac{2 \cdot \gamma}{b}$$

όπου b είναι η ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή της σταγόνας και γ η επιφανειακή τάση.

Έτσι, λοιπόν, το προφίλ μίας επικαθήμενης αξονοσυμμετρικής σταγόνας περιγράφεται από τη γνωστή διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης των *Young* και *Laplace*:

$$\Delta P = \gamma \cdot \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \Rightarrow \gamma \cdot \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \Delta P_0 + \Delta \rho \cdot g \cdot h \Rightarrow \gamma \cdot \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \Delta \rho \cdot g \cdot h + \frac{2 \cdot \gamma}{b}$$

όπου R_1 και R_2 είναι οι βασικές ακτίνες καμπυλότητας.

Ή, διαφορετικά, εάν χρησιμοποιηθεί η σταθερά τριχοειδών δυνάμεων ($c = \frac{\Delta \rho \cdot g}{\gamma}$):

$$\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = c \cdot h + \frac{2}{b}$$

Κεφάλαιο 3.1.2: Χαρακτηριστικά της μεθόδου ADSA – διαφοροποιήσεις από παλαιότερες μεθόδους

Η συγκεκριμένη μέθοδος (*Μέτρησης Σχήματος Αξονοσυμμετρικής Σταγόνας – Axisymmetric Drop Shape Analysis/ADSA*, όπως ονομάζεται), αποτέλεσε μεγάλη πρόοδο στην εξέλιξη της μελέτης των φαινομένων διαβροχής και διαφοροποιήθηκε από τις μέχρι πρότινος ισχύουσες μεθόδους κυρίως ως προς τα δύο παρακάτω σημεία.

- Η αντικειμενική συνάρτηση της διαδικασίας βελτιστοποίησης σε αυτήν τη μέθοδο είναι μέτρο της διαφοράς μεταξύ της θεωρητικά υπολογισμένης *Λαπλασιανής* καμπύλης και αυτής που έχει προσδιορισθεί πειραματικά και, συγκεκριμένα, αποτελεί το άθροισμα των «κανονικών» αποστάσεων ανάμεσα στα πειραματικά σημεία και τη θεωρητική καμπύλη.
- Η ακριβής θέση της κορυφής της σταγόνας θεωρείται ως άγνωστη παράμετρος και οι συντεταγμένες της αρχής των αξόνων ως ανεξάρτητες μεταβλητές της αντικειμενικής συνάρτησης. Επομένως, το σχήμα της σταγόνας είναι δυνατόν να εξαχθεί από οποιοδήποτε σχήμα αναφοράς και όλα τα μετρημένα σημεία της επιφανείας είναι εξ' ίσου

σημαντικά.

Για την εφαρμογή της μεθόδου αυτής, δεν απαιτείται ο ορισμός συγκεκριμένων τιμών για οποιαδήποτε από τις παραμέτρους, δηλαδή την επιφανειακή τάση, την ακτίνα καμπυλότητας στην κορυφή της σταγόνας και τις συντεταγμένες της θεωρούμενης αρχής των αξόνων, καθώς αυτές δημιουργούνται από το ίδιο το πρόγραμμα, εάν ο χρήστης το επιλέξει.

Η ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης πραγματοποιείται με την αριθμητική επίλυση ενός συστήματος μη γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων. Για την επίλυση αυτήν χρησιμοποιείται μία μέθοδος που αποτελεί συνδυασμό μίας αυξητικής μεθόδου επίλυσης και της επαναληπτικής μεθόδου Newton – Raphson^[8]. Η συνάρτηση και οι παράγωγοι πρώτης και δεύτερης τάξης της υπολογίζονται με αριθμητική ολοκλήρωση. Όλα τα ολοκληρώματα ορίζονται αναλυτικά και, συνεπώς, δεν υπάρχει μειωμένη ακρίβεια σε κάποια από τις παραγώγους.

Κεφάλαιο 3.1.3: Αριθμητική ολοκλήρωση της εξίσωσης Young – Laplace

Η μορφή της *εξίσωσης Young - Laplace* για αξονοσυμμετρικές σταγόνες επιλύθηκε αριθμητικά για πρώτη φορά το 1883, από τους Bashforth και Adams^[1], οι οποίοι συγκέντρωσαν σε πίνακες τις λύσεις της εξίσωσης για διαφορετικές τιμές του αδιάστατου *αριθμού Bond* ($N_g = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot b^2}{\gamma} = c \cdot b^2$), ο οποίος αντανακλά την απόκλιση του σχήματος της σταγόνας από αυτό μίας σφαίρας. Οι πίνακες αυτοί μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την αναγνώριση του προφίλ μίας σταγόνας, καθώς και την απόκτηση ακριβών τιμών επιφανειακής τάσης και γωνίας επαφής. Η εφαρμογή της προσέγγισης αυτής, ωστόσο, είναι περιορισμένη σε ένα αρκετά μικρό εύρος τιμών του *αριθμού Bond*.

Χάρη στην ύπαρξη καταλλήλων υπολογιστικών αλγορίθμων, η τεχνική της *μέτρησης σχήματος αξονοσυμμετρικής σταγόνας* πραγματοποιεί

αυτομάτως την αριθμητική ολοκλήρωση για κάθε τιμή του *αριθμού Bond*^[9]. Κατόπιν της ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας σε μία ληφθείσα εικόνα του προφίλ της, γίνεται αναζήτηση για την πιο κατάλληλη λύση της *εξίσωσης Young - Laplace*, κάτι που έχει ως αποτέλεσμα τον υπολογισμό μίας ακριβούς τιμής για τα μεγέθη της γωνίας επαφής και του *αριθμού Bond*. Γνώση και της πυκνότητας του υπό εξέταση υγρού, οδηγεί στη δυνατότητα υπολογισμού και της τιμής της επιφανειακής τάσης.

Τα περιγράμματα των σταγόνων που αναλύονται με την τεχνική *ADSA*, αρχικά εντοπίζονταν, κάνοντας χρήση απλών ανιχνευτών άκρων, όπως αυτός του *Sobel* (ή των *Sobel - Feldman*, όπως αλλιώς ονομάζεται)^[10] ή περισσότερο προχωρημένων τεχνικών, όπως οι μέθοδοι απόκλισης *Jensen - Shannon*^[11]. Αναλόγως με τα χαρακτηριστικά της εικόνας και τη διαδικασία κατάτμησης της εικόνας, τα όρια του σχήματος της σταγόνας είναι δυνατόν να ανιχνευθούν με μεγαλύτερη ή μικρότερη ακρίβεια. Σε πολλές περιπτώσεις, και ιδιαιτέρως σε αυτές στις οποίες η ληφθείσα εικόνα είναι θολή, αυτού του είδους οι προσεγγίσεις είναι εύκολο να οδηγήσουν σε λανθασμένα αποτελέσματα^[12].

Κεφάλαιο 3.1.4: Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της μεθόδου ADSA

Χαρακτηριστικό γνώρισμα της αναλυθείσας αριθμητικής διαδικασίας, που συνέβαλε στην εκτενή χρήση της στα φαινόμενα διαβροχής είναι το ότι συνδυάζει και τις δύο μεθόδους επικαθήμενης και κρεμάμενης σταγόνας, ενώ, η εφαρμογή της καθιστά μη απαραίτητη τη χρήση κάποιου πίνακα και είναι καθολική.

Ωστόσο, παρ' όλο που η μέθοδος *ADSA* είναι ευρέως διαδεδομένη στη σύγχρονη εποχή, η μελέτη της έχει αποδείξει ότι παρουσιάζει και ορισμένες αδυναμίες. Αυτές έγκεινται κατά κύριο λόγο στον υπολογισμό τιμών επιφανειακής τάσης σταγόνων με σχεδόν σφαιρικό σχήμα^[13]. Αυτό συμβαίνει, διότι, όταν εξετάζονται τέτοια σχήματα, σημαντικά διαφορετικές τιμές επιφανειακής τάσης οδηγούν σε μικρές διαφορές στο σχήμα των σταγόνων. Επίσης, καθώς η μέθοδος αυτή καθιστά αναγκαία την αριθμητική ολοκλήρωση της εξίσωσης *Young - Laplace*, παρουσιάζει αυξημένο υπολογιστικό κόστος.

Κεφάλαιο 3.2: Παραλλαγές της μεθόδου ADSA

Κεφάλαιο 3.2.1: Ανάλυση Προσαρμογής Θεωρητικού Σχήματος (*Theoretical Image Fitting Analysis – TIFA*)

Η συγκεκριμένη παραλλαγή χρησιμοποιείται για την ανάλυση συνεχώς ορισμένων περιγραμμάτων σταγόνας. Αυτή χρησιμοποιεί μία συνάρτηση σφάλματος, βασισμένη στη σύγκλιση με μείωση της κλίσης και μπορεί να επεξεργασθεί με μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα θολές εικόνες, όπως είναι αυτές των αιωρούμενων φυσαλίδων, σε σχέση με την καθιερωμένη μέθοδο ADSA^[12]. Κατά την εφαρμογή της μεθόδου αυτής, αρχικά, δημιουργείται μία θεωρητική εικόνα του σχήματος (*gradient image*), χρησιμοποιώντας μία λύση της *εξίσωσης Young - Laplace*. Εν συνεχεία, η συνάρτηση σφάλματος ορίζεται ως το άθροισμα των διαφορών μεταξύ ενός πειραματικού σχήματος (*gradient image*) και του θεωρητικού, υψωμένων εις το τετράγωνο. Στην παραλλαγή αυτήν, δεν πραγματοποιείται διακριτοποίηση του περιγράμματος της σταγόνας και η διαδικασία βελτιστοποίησης λαμβάνει υπ' όψιν συνεχώς ορισμένες τιμές κλίσης. Σε μία διαφορετική παραλλαγή^[14], χρησιμοποιείται μία μέθοδος *blob extraction/component labeling*, η οποία επιτρέπει την κατηγοριοποίηση των εικονοστοιχείων μίας ψηφιακής εικόνας σε ξεχωριστές ομάδες, προκειμένου να βελτιωθεί η ακρίβεια της ανίχνευσης του περιγράμματος σε εικόνες που είναι πολύ θολές.

Οι παραπάνω τεχνικές έχουν τη δυνατότητα να διευρύνουν την ανάλυση σχήματος σταγόνων σε τομείς, όπου η ανίχνευση του σχήματος της σταγόνας δε δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα, λόγω της αυξημένης θολότητας/τραχύτητας των εικόνων.

Κεφάλαιο 3.2.2: Μέτρηση Σχήματος Αξονοσυμμετρικών Σταγόνων Χαμηλού Αριθμού Bond (*Low - Bond Axisymmetric Drop Shape Analysis - LBADSA*)

Κατά τη μέθοδο LBADSA, μέσω της μεθόδου μικρών διαταραχών, βρίσκεται μία λύση, βασισμένη στην *εξίσωση Young - Laplace*, για το περίγραμμα μίας επικαθήμενης σταγόνας, χρησιμοποιώντας θεμελιώδη ανάλυση. Κατά παρόμοιο τρόπο με την απλή μέθοδο ADSA, ένα θεωρητικό προφίλ, το οποίο προκύπτει από τη λύση αυτήν, προσαρμόζεται στο

περίγραμμα της σταγόνας.

Ωστόσο, στη μέθοδο *LBADSA*, το θεωρητικό σχήμα της σταγόνας δεν προσαρμόζεται σε ένα διακριτοποιημένο περίγραμμα, αλλά βελτιστοποιείται, με βάση μία προσέγγιση «ενέργειας εικόνας», όπως αυτή ονομάζεται. Κατά την προσέγγιση αυτήν, χρησιμοποιείται μία αντικειμενική συνάρτηση για την εύρεση της επιθυμητής λύσης για το περίγραμμα της σταγόνας και, κατόπιν, πραγματοποιείται βελτιστοποίηση μέσω μείωσης της κλίσης, προκειμένου να υπολογισθεί η ελάχιστη τιμή της και να προκύψει η λύση για την κατάτμηση της εικόνας. Ουσιαστικά, ο διαχωρισμός της εικόνας σε τμήματα και η προσαρμογή πραγματοποιούνται συνδυαστικά και όλες οι πληροφορίες που αφορούν στα εικονοστοιχεία που αποτελούν την εικόνα χρησιμοποιούνται κατά τη διαδικασία προσαρμογής. Η προσέγγιση αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη σε περιπτώσεις, κατά τις οποίες ο ακριβής εντοπισμός του περιγράμματος της σταγόνας είναι δυσχερής, λόγω της ύπαρξης θολών ή δυσδιάκριτων ορίων.

Κεφάλαιο 3.3: Άλλες διαθέσιμες τεχνικές

Εκτός των μεθόδων που έχουν ήδη αναφερθεί, έχουν δημιουργηθεί και εφαρμοσθεί πολυάριθμες άλλες μέθοδοι για τη μέτρηση της γωνίας επαφής και της επιφανειακής τάσης σταγόνων που επικάθονται σε επιφάνειες.

Κεφάλαιο 3.3.1: Μέθοδοι μέτρησης γωνίας επαφής

Οι γωνίες επαφής είναι δυνατόν να μετρηθούν άμεσα, χρησιμοποιώντας ένα γωνιόμετρο. Διαφορετικά, μπορεί να γίνει χρήση μίας μεθόδου προσαρμογής μέσω πολυωνύμου, μίας προσέγγισης ενεργού περιγράμματος (ή «φιδιού», όπως ονομάζεται) ή μίας προσέγγισης μέσω σφαίρας.

Παρακάτω, θα γίνει μία περισσότερο εκτενής περιγραφή κάθε μίας από τις μεθόδους που αναφέρθηκαν.

Κεφάλαιο 3.3.1.1: Μέτρηση μέσω γωνιομέτρου

Η μέθοδος της επικαθήμενης σταγόνας είναι η πλέον διαδεδομένη μέθοδος που υπάρχει για τη μέτρηση γωνιών επαφής, λόγω της απλότητας και ευκολίας εφαρμογής της. Αυτή επιτρέπει τον άμεσο προσδιορισμό της τιμής του μεγέθους, χρησιμοποιώντας είτε ένα γωνιόμετρο σε συνδυασμό με ένα τηλεσκόπιο για επί τόπου μέτρηση, όπως φαίνεται στην *Εικόνα 3*, είτε ένα μοιρογνώνιο (ή κάποιο ψηφιακό υποκατάστατό του), για μέτρηση της γωνίας επί της ληφθείσας εικόνας^[16]. Οι μέθοδοι αυτές, παρά την απλότητά τους, παρουσιάζουν ένα σημαντικό μειονέκτημα, το οποίο είναι η αυξημένη εξάρτηση από τις πράξεις του χειριστή.



Εικόνα 3: Ένα χαρακτηριστικό γωνιόμετρο, για επί τόπου μέτρηση της γωνίας επαφής.

Κεφάλαιο 3.3.1.2: Προσαρμογή μέσω πολυωνύμου

Κατά τη χρήση της συγκεκριμένης μεθόδου, επιλέγεται ένας αριθμός σημείων του περιγράμματος της σταγόνας, τα οποία βρίσκονται κοντά στα σημεία επαφής της σταγόνας με το στερεό υπόστρωμα και χρησιμοποιείται ένα πολυώνυμο για την προσαρμογή τους. Ο βαθμός του πολυωνύμου και ο αριθμός των σημείων που επιλέγονται αποτελούν παραμέτρους, οι οποίες πρέπει να προσαρμόζονται ανάλογα με την περίπτωση. Αυτό συμβαίνει διότι η τιμή της γωνίας επαφής υπολογίζεται, χρησιμοποιώντας την παράγωγο του πολυωνύμου, συνεπώς η ορθότητά της μπορεί να εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τις παραμέτρους αυτές.

Κεφάλαιο 3.3.1.3: Προσέγγιση ενεργού περιγράμματος (φιδιού)

Η, πιο πρόσφατη, προσέγγιση του σχήματος της σταγόνας μέσω ενεργού περιγράμματος (μέθοδος DropSnake^[17]) αποτελεί ένα είδος αλγορίθμου τμηματοποίησης, που σκοπό έχει να εντοπίσει το περίγραμμα της σταγόνας, ενοποιώντας το συνολικό σχήμα της εξεταζόμενης σταγόνας και την τοποθεσία της γωνίας επαφής με την επιφάνεια, επί της οποίας αυτή βρίσκεται. Κατά την προσέγγιση αυτήν, χρησιμοποιείται μία συνάρτηση ελαχιστοποίησης ενέργειας, η επονομαζόμενη συνάρτηση «snake», η οποία ουσιαστικά είναι μία συνάρτηση, οριζόμενη κατά τμήματα από πολυώνυμο. Η συνάρτηση αυτή προσπαθεί να καταγράψει το περίγραμμα του αντικειμένου που εξετάζεται κάθε φορά, επηρεαζόμενη από δυνάμεις της εικόνας, οι οποίες την ωθούν προς το περίγραμμα, καθώς και εσωτερικές δυνάμεις, οι οποίες ανθίστανται στην παραμόρφωση του σχήματος.

Η μέθοδος αυτή δε χρησιμοποιείται για την εξ' ολοκλήρου ανίχνευση του επιθυμητού περιγράμματος σε εικόνες, καθώς απαιτεί γνώση του περιγράμματος εξ' αρχής. Αντιθέτως, για τη λειτουργία τους, συνήθως χρησιμοποιείται κάποιος μηχανισμός, όπως η διεπαφή με κάποιον χρήστη ή κάποια διαδικασία επεξεργασίας εικόνας υψηλότερου επιπέδου ή πληροφορίες δεδομένων της εικόνας από παρελθόντα χρόνο.

Η προσέγγιση ενεργού περιγράμματος, έχει την ικανότητα να «αποκαλύψει» τοπικά φαινόμενα στη σταγόνα, όπως είναι οι γωνίες επαφής, ενώ την ίδια στιγμή καταγράφει το συνολικό της σχήμα. Εκτός αυτού, επιτρέπει τον εντοπισμό συμμετρίας στην εικόνα, κάτι που μπορεί να οδηγήσει στην αποτελεσματικότερη ανίχνευση της γραμμής βάσης και της γωνίας κλίσης της σταγόνας.

Κεφάλαιο 3.3.1.4: Προσέγγιση μέσω σφαίρας

Η μέθοδος αυτή βασίζεται σε μία προφανή απλοποίηση της *εξίσωσης Young - Laplace*, δηλαδή την προσέγγιση της λύσης του προβλήματος με μία σφαίρα. Συγκεκριμένα, θεωρώντας ότι οι επικαθήμενες σταγόνες έχουν συνήθως μικρό όγκο, η επίδραση δυνάμεων, όπως η βαρύτητα, μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα, ως προς την επίδραση που έχει η επιφανειακή τάση. Η θεώρηση αυτή έχει ως αποτέλεσμα η διαφορά πίεσης, ΔP , να καταστεί σταθερά στην *εξίσωση Young - Laplace*, κάτι που οδηγεί σε μία επιφάνεια με σταθερή τιμή καμπυλότητας, δηλαδή μία σφαίρα. Αντιμετωπίζοντας το περίγραμμα της σταγόνας σαν τμήμα σφαίρας, προκύπτει εύκολα και η τιμή της γωνίας επαφής, μέσω ενός μικρού αριθμού σημείων από τα όρια της σταγόνας. Μέσω της θεώρησης αυτής, λοιπόν, και χρησιμοποιώντας μία μέθοδο που είναι γνωστή ως *μέθοδος $\theta/2$* , ο υπολογισμός της γωνίας επαφής γίνεται μόνον με γνώση της διαμέτρου της επικαθήμενης σταγόνας στη βάση της και του ύψους της. Εφ' όσον η υπόθεση σφαιρικότητας είναι έγκυρη και δικαιολογημένη, η μέθοδος αυτή αποφέρει λογικά αποτελέσματα^[18].

Κεφάλαιο 3.3.1.5: Επίλυση μέσω αναλυτικής προσέγγισης

Προκειμένου να βρεθεί μία απλούστερη λύση για την *εξίσωση Young - Laplace*, είναι δυνατόν να γίνει χρήση της *θεωρίας διαταραχών*, η οποία χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά στο πλαίσιο αυτό από τον R. Ehrlich^[19], ενώ αργότερα ο M.E.R. Shanahan κατάφερε να βρει μία λύση πρώτης τάξης για το προφίλ μίας αξονοσυμμετρικής σταγόνας, χρησιμοποιώντας μία διαδικασία ελαχιστοποίησης της επιφανειακής ενέργειας^[20]. Αυτή η λύση κατέστησε δυνατόν τον υπολογισμό των γωνιών επαφής της σταγόνας, μέσω του ύψους της, της μέγιστης ακτίνας της και της ακτίνας επαφής της σταγόνας.

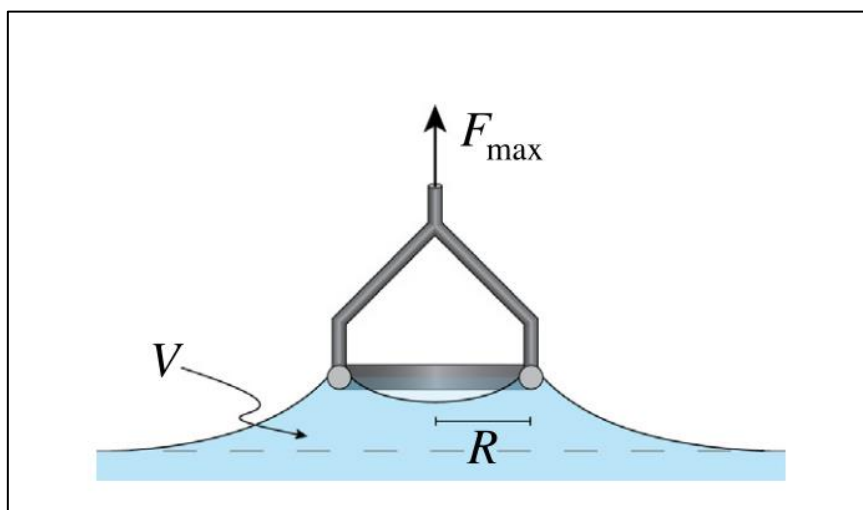
Κεφάλαιο 3.3.2: Μέθοδοι μέτρησης επιφανειακής τάσης

Η τιμή της επιφανειακής τάσης, μπορεί να μετρηθεί με τη μέθοδο του δακτυλίου Du Noüy, τη μέθοδο της πλάκας Wilhelmy, καθώς και αυτήν της τριχοειδούς ανύψωσης^[39, 40].

Κεφάλαιο 3.3.2.1: Μέθοδος του δακτυλίου Du Noüy

Κατά τη μέθοδο αυτήν, βυθίζεται ένας δακτύλιος στο υγρό που εξετάζεται και μετρείται η δύναμη, η οποία απαιτείται για την απόσπαση του δακτυλίου. Στη συνέχεια, η δύναμη αυτή πολλαπλασιάζεται με έναν συντελεστή διόρθωσης, β , ο οποίος εξαρτάται από την πυκνότητα του υγρού και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του δακτυλίου, προκειμένου να υπολογισθεί τελικά, η επιφανειακή τάση του υγρού από τη σχέση:

$$\gamma = \beta \cdot \frac{F_{\max}}{4 \cdot \pi \cdot R}$$

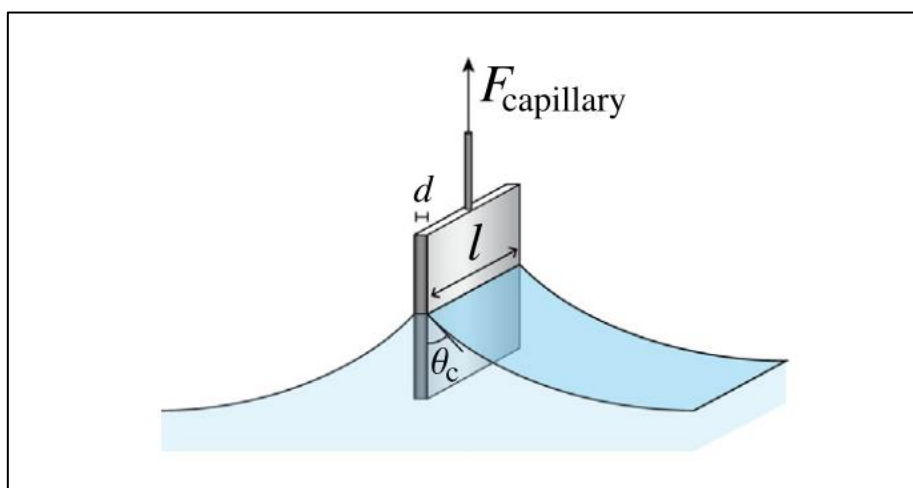


Εικόνα 4: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου του δακτυλίου Du Noüy.

Κεφάλαιο 3.3.2.2: Μέθοδος της πλάκας Wilhelmy

Στη μέθοδο αυτήν, τοποθετείται μία πλάκα σε κάθετη θέση ως προς τη διεπιφάνεια υγρού – αέρα και μετρείται η τριχοειδής δύναμη που ασκείται πάνω της. Στη συνέχεια, η επιφανειακή τάση υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\gamma = \frac{F_{capillary}}{l \cdot \cos \theta_c}$$



Εικόνα 5: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου της πλάκας Wilhelmy.

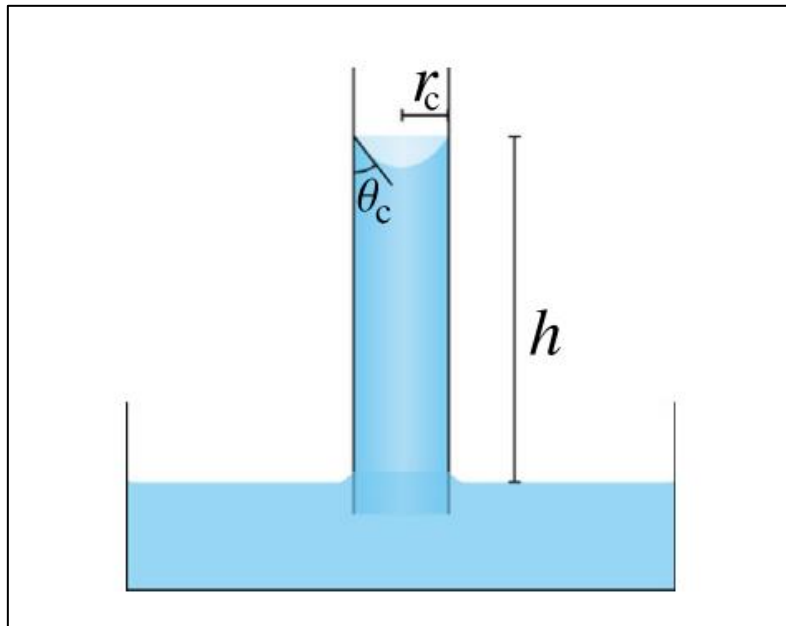
Στην περίπτωση αυτήν, δεν απαιτείται η χρήση κάποιου διορθωτικού παράγοντα στην εξίσωση.

Κεφάλαιο 3.3.2.3: Μέθοδος τριχοειδούς ανύψωσης

Για να πραγματοποιηθεί η μέτρηση της επιφανειακής τάσης, μέσω της μεθόδου αυτής, βυθίζεται στο υγρό ένας τριχοειδής σωλήνας (σωλήνας με διάμετρο της τάξης 1 mm), δημιουργώντας έτσι υποπίεση στο εσωτερικό του υγρού. Έτσι, το υγρό, θα ανυψωθεί μέσα στο σωλήνα, μέχρις ότου η υποπίεση αυτή να αντισταθμισθεί από την υδροστατική πίεση, έστω σε ύψος h από την επιφάνειά του.

Έτσι, μετρώντας το ύψος h , μέχρι το οποίο ανυψώνεται η στάθμη του υγρού μέσα στο σωλήνα, και γνωρίζοντας την πυκνότητα του υγρού, ρ , την ακτίνα του σωλήνα, r_c , καθώς και τη γωνία συνεπαφής του υγρού με το υλικό κατασκευής του σωλήνα, θ_c , ο υπολογισμός της επιφανειακής τάσης πραγματοποιείται εύκολα, μέσω της εξίσωσης:

$$\gamma = \frac{\rho \cdot g \cdot h \cdot r_c}{2 \cdot \cos \theta_c}$$



Εικόνα 6: Σχηματική αναπαράσταση της μεθόδου τριχοειδούς ανύψωσης.

Κεφάλαιο 4: Παρουσίαση του εξεταζομένου λογισμικού μέτρησης

Κεφάλαιο 4.1: Γενικά στοιχεία για το λογισμικό

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, ο προσδιορισμός της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής Young μίας σταγόνας παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον και έχει αυξημένη σημασία για πληθώρα βιομηχανικών εφαρμογών. Λαμβάνοντας υπ' όψιν το συνεχώς αυξανόμενο ενδιαφέρον για μικρές και φθηνές πειραματικές συσκευές, οι οποίες όμως δε στερούνται ακριβείας στις μετρήσεις, κατασκευάστηκε ένα όργανο μέτρησης γωνίας επαφής/επιφανειακής τάσης (*γωνιόμετρο/τασίμετρο*), το οποίο είναι βασισμένο σε έναν μικρο - υπολογιστή, και συγκεκριμένα το *Raspberry Pi 3*, το οποίο αποτελεί έναν ολοκληρωμένο υπολογιστή με λειτουργικό σύστημα *Linux*. Το όργανο εκτελεί έναν αλγόριθμο Μέτρησης Σχήματος Αξονοσυμμετρικής Σταγόνας (*Axisymmetric Drop Shape Analysis/ADSA*), ο οποίος έχει συνταχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού *Python* και του έχει δοθεί η ονομασία *DropToolKit*. Το λογισμικό αυτό διατίθεται δωρεάν μέσω της άδειας χρήσης *Creative Commons/Non Commercial/No Derivative License (CC BY - NC - ND)*.

Κεφάλαιο 4.2: Θεωρία

Στη μελέτη των φαινομένων διαβροχής, σημαντικά είναι και τα σημεία εκείνα, στα οποία οι τρεις διαφορετικές φάσεις (δηλαδή, το στερεό, το υγρό και ο περιβάλλον αέρας) έρχονται σε επαφή. Συγκεκριμένα, η γωνία, την οποία σχηματίζει η υγρή επιφάνεια με το στερεό υπόστρωμα, ονομάζεται *γωνία επαφής Young*, συμβολίζεται ως θ_Y και είναι μεγάλης σημασίας για τα φαινόμενα διαβροχής. Η γωνία αυτή, σε κατάσταση ισορροπίας, δίδεται από την *εξίσωση Young*^[15]:

$$\gamma_{SA} = \gamma_{LS} + \gamma_{LA} \cdot \cos \theta_Y, \text{ όπου}$$

γ_{SA} : η διεπιφανειακή τάση μεταξύ στερεού υποστρώματος και περιβάλλοντος αέρα

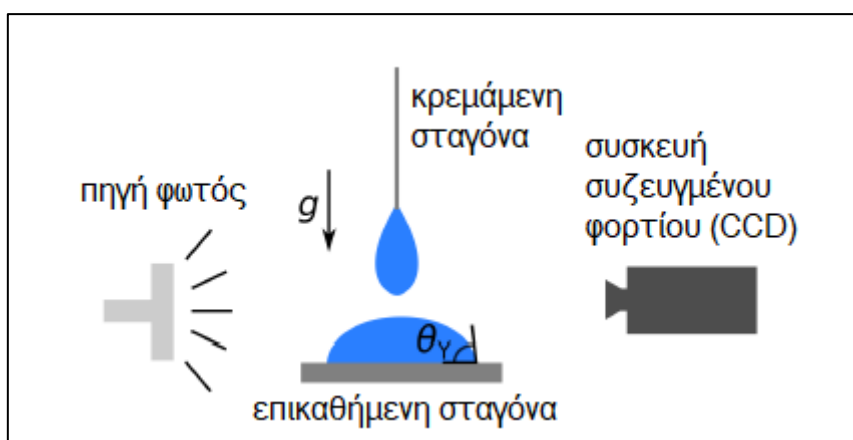
γ_{LS} : η διεπιφανειακή τάση μεταξύ υγρού και στερεού υποστρώματος

γ_{LA} : η διεπιφανειακή τάση μεταξύ υγρού και περιβάλλοντος αέρα

Για τη μέτρηση της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής έχουν αναπτυχθεί αρκετές μέθοδοι^[15], μεταξύ των οποίων και τεχνικές μέτρησης σχήματος σταγόνας, όπως είναι και η εξεταζόμενη, δηλαδή η *Μέτρηση Σχήματος Αξονοσυμμετρικής Σταγόνας - ADSA*, οι οποίες έχουν αποδειχθεί

εξαιρετικά ακριβείς και αξιόπιστες^[9, 10, 23]. Στις μεθόδους αυτές, το προφίλ της σταγόνας εξάγεται μέσω μίας διαδικασίας ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας (*edge detection*), η οποία εφαρμόζεται σε μία εικόνα της σταγόνας, η οποία έχει ληφθεί μέσω κάμερας, από το πλάι της. Εν συνεχεία, η επιφανειακή τάση (διεπιφανειακή τάση, για τη διεπιφάνεια υγρού – περιβάλλοντος αερίου) και η γωνία επαφής *Young* υπολογίζονται, προσαρμόζοντας το θεωρητικό προφίλ της σταγόνας, δηλαδή τη λύση των ισχυουσών εξισώσεων, στο πειραματικά προσδιορισμένο. Τεχνικές τέτοιου είδους είναι ενσωματωμένες σε, εμπορικά διαθέσιμες, συσκευές (*γωνιόμετρα/τασίμετρα*), οι οποίες, ωστόσο, συχνά είναι υψηλού κόστους και επομένως, δυσπρόσιτες. Αυτός είναι και ο λόγος που οδηγεί στη στροφή προς εναλλακτικά πειραματικά όργανα, τα οποία χρησιμεύουν στις ίδιες μετρήσεις, αλλά ταυτόχρονα έχουν και πολύ μικρότερο κόστος.

Ένα τυπικό *γωνιόμετρο/τασίμετρο* αποτελείται από μία συσκευή συζευγμένου φορτίου (*charge – coupled device/CCD*), η οποία χρησιμεύει για την καταγραφή της εικόνας της σταγόνας και είναι τοποθετημένη πάνω σε ένα μακροφακό, μία πηγή φωτός και ένα στερεό υπόστρωμα, πάνω στο οποίο είναι τοποθετημένη η σταγόνα (ή μία βελόνα, από την οποία κρέμεται η σταγόνα) μεταξύ τους. Η μορφή ενός συνηθισμένου *γωνιομέτρου/τασιμέτρου* απεικονίζεται καλύτερα στην Εικόνα 7.



Εικόνα 7: Σχηματική αναπαράσταση της διάταξης ενός συνήθους γωνιομέτρου/τασιμέτρου.

Κεφάλαιο 4.3: Περιγραφή της χρησιμοποιούμενης μεθόδου

Η μέθοδος που αναπτύχθηκε αποτελείται από τέσσερα διαφορετικά στάδια:

- 1) Εξαγωγή του πραγματικού/πειραματικού σχήματος της σταγόνας, μέσω της *διαδικασίας ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας*
- 2) Παραμετροποίηση του προφίλ της σταγόνας σε πολικές συντεταγμένες
- 3) Εξαγωγή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας, μέσω της *εξίσωσης Young – Laplace*
- 4) Προσαρμογή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας στο πειραματικό προφίλ

Στη συνέχεια, θα αναλυθεί λεπτομερέστερα το καθένα από τα στάδια αυτά.

Κεφάλαιο 4.3.1: Εξαγωγή του πραγματικού/πειραματικού σχήματος της σταγόνας, μέσω της διαδικασίας ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας

Αρχικά, λαμβάνεται μία εικόνα του προφίλ της σταγόνας και, στη συνέχεια, αυτή υφίσταται επεξεργασία, χρησιμοποιώντας την τεχνική της *μέτρησης σχήματος αξονοσυμμετρικής σταγόνας*, στην οποία η εξαγωγή του (πειραματικού) σχήματος της σταγόνας είναι κρίσιμο βήμα. Υπάρχουν δύο βασικές μέθοδοι εύρεσης των συντεταγμένων του σχήματος μέσω της ψηφιοποιημένης εικόνας και αυτές είναι η *μέθοδος κατωφλίου* και η *μέθοδος βαθμίδας* (*threshold method* και *gradient method*, αντιστοίχως)^[24].

Μία αυτοματοποιημένη, υποβοηθούμενη από υπολογιστή, μορφή της *μεθόδου κατωφλίου* αρχικά δημιουργήθηκε από τους H.H. Girault, D.J. Schiffrin και B.D.V. Smith^[25]. Στη *μέθοδο κατωφλίου*, κάθε εικονοστοιχείο (pixel) μίας εικόνας του προφίλ της σταγόνας, η οποία έχει μετατραπεί σε κλίμακα του γκρι, χαρακτηρίζεται μόνον από την τιμή του επιπέδου φωτεινότητάς του και απαιτείται ο ορισμός, από το χρήστη, ενός «κατωφλίου» φωτεινότητας, κάτω από το οποίο τα εικονοστοιχεία θεωρείται ότι έχουν μαύρο χρώμα και πάνω άσπρο χρώμα. Τα όρια που καθορίζουν το σχήμα της σταγόνας, τελικά καθορίζονται με την εκτέλεση μίας *ανάλυσης*

πλησιέστερου γείτονα (nearest neighbor analysis) για κάθε εικονοστοιχείο^[25]. Σε πραγματικά πειράματα, ωστόσο, οι άκρες του προφίλ της σταγόνας συνήθως είναι μη ευκρινείς. Αυτό συμβαίνει συχνά, όταν ο φωτισμός της σταγόνας δεν είναι ομοιόμορφος, κάτι που έχει ως αποτέλεσμα την παραμόρφωση του ληφθέντος σχήματος, λόγω ψευδών αντανακλάσεων.

Εναλλακτικά, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η *μέθοδος βαθμίδας*^[26, 27] για την ανίχνευση των ορίων του σχήματος της σταγόνας. Σε αυτήν τη μέθοδο, υπολογίζεται η βαθμίδα του επιπέδου φωτεινότητας σε κάθε σημείο της εικόνας και ως όριο του σχήματος της σταγόνας ορίζεται το σύνολο των σημείων εκείνων, στα οποία το μέγεθος της βαθμίδας αυτής μεγιστοποιείται.

Η μέθοδος που χρησιμοποιείται στο σύστημα *Raspberry Pi 3* είναι μία τροποποιημένη μορφή της *μεθόδου κατωφλίου*. Η τροποποίηση συνίσταται στην προσθήκη ενός επιπλέον διορθωτικού βήματος, προκειμένου να εξαλειφθεί το πρόβλημα των μη ευκρινών άκρων, ενώ ταυτόχρονα διατηρείται η προγραμματιστική απλότητα της αρχικής μεθόδου.

Η ανίχνευση του σχήματος της σταγόνας, μέσω της μεθόδου αυτής, επιτυγχάνεται ως εξής:

Αρχικά, η ανεπεξέργαστη εικόνα της σταγόνας που έχει ληφθεί, μετατρέπεται σε κλίμακα του γκρι, ούτως ώστε κάθε εικονοστοιχείο της να μεταφέρει μόνον πληροφορίες έντασης φωτός (φωτεινότητας).

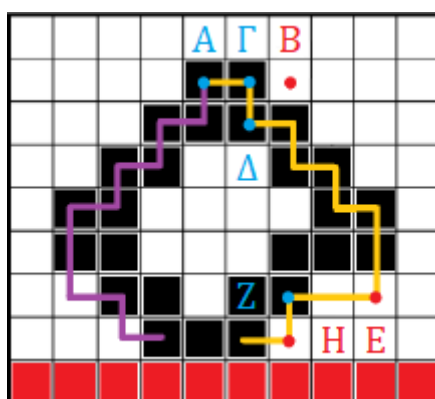
Στη συνέχεια, πραγματοποιείται μία πρώτη προσέγγιση του σχήματος της σταγόνας, χρησιμοποιώντας τη *μέθοδο κατωφλίου*. Ζητείται από το χρήστη να καθορίσει την τιμή φωτεινότητας που θα αποτελέσει το «κατώφλι» για τον ορισμό του σχήματος της σταγόνας, καθώς και τις συντεταγμένες της βάσης της σταγόνας, δηλαδή της θέσεως του στερεού υποστρώματος. Εάν κριθεί αναγκαίο, οι παράμετροι αυτές είναι δυνατόν να μη δοθούν από το χρήστη, αλλά να υπολογισθούν από το ίδιο το λογισμικό. Κατόπιν, η κορυφή της σταγόνας βρίσκεται, σαρώνοντας την εικόνα από πάνω προς τα κάτω και αναζητώντας το πρώτο εικονοστοιχείο, του οποίου η φωτεινότητα βρίσκεται χαμηλότερα του ορίου που έχει τεθεί. Ξεκινώντας από το εικονοστοιχείο αυτό, τα σχήματα των τμημάτων της σταγόνας που βρίσκονται αριστερά και δεξιά από αυτό ανιχνεύονται, με τη χρήση ενός επαναληπτικού αλγορίθμου. Συγκεκριμένα, ένας εικονικός δρομέας αρχικά τοποθετείται στην κορυφή της σταγόνας και ύστερα, εφαρμόζεται μία υπορουτίνα, ανάλογα με το αν ο δρομέας είναι τοποθετημένος πάνω σε εικονοστοιχείο με μαύρο (υπορουτίνα A) ή άσπρο χρώμα (υπορουτίνα B). Η διαδικασία αυτή συνεχίζεται, μέχρις ότου ο δρομέας να φθάσει στη βάση της σταγόνας, ενώ οι δύο

προαναφερθείσες υπορουτίνες αναλύονται με μεγαλύτερη λεπτομέρεια παρακάτω.

Υπορουτίνα Α: Ξεκινώντας από ένα εικονοστοιχείο με μαύρο χρώμα, ο δρομέας κινείται οριζόντια προς τα δεξιά ή τα αριστερά (δεξιά, όταν εντοπίζεται το δεξιό τμήμα της σταγόνας, αριστερά όταν εντοπίζεται το αριστερό τμήμα της), μέχρι να συναντήσει ένα εικονοστοιχείο λευκού χρώματος ή την άκρη της εικόνας. Κάθε εικονοστοιχείο μαύρου χρώματος, το οποίο συναντά ο δρομέας πριν συναντήσει το εικονοστοιχείο λευκού χρώματος, προστίθεται στο σχήμα της σταγόνας. Στη συνέχεια, ξεκινώντας από το τελευταίο εικονοστοιχείο, με το οποίο ήρθε σε επαφή, πριν συναντήσει το εικονοστοιχείο λευκού χρώματος, ο δρομέας μετακινείται καθέτως και προς τα κάτω, κατά ένα εικονοστοιχείο. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται.

Υπορουτίνα Β: Ξεκινώντας από ένα εικονοστοιχείο λευκού χρώματος, ο δρομέας μετακινείται οριζόντια προς τα αριστερά ή τα δεξιά (αριστερά, όταν εντοπίζεται το δεξιό τμήμα της σταγόνας και δεξιά, όταν εντοπίζεται το αριστερό), μέχρι να βρει ένα εικονοστοιχείο μαύρου χρώματος, ή την x – συντεταγμένη (τετμημένη) της κορυφής της σταγόνας. Κάθε εικονοστοιχείο, από το οποίο πέρασε ο δρομέας, προστίθεται στο σχήμα της σταγόνας. Μετά, ο δρομέας κινείται καθέτως και προς τα κάτω, κατά ένα εικονοστοιχείο και η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται.

Προκειμένου να γίνει ευκολότερα κατανοητή η πορεία που ακολουθείται σε καθεμία υπορουτίνα, στην Εικόνα 8, παρατίθεται μία σχηματική αναπαράσταση της εξαγωγής του σχήματος μίας επικαθήμενης σταγόνας.



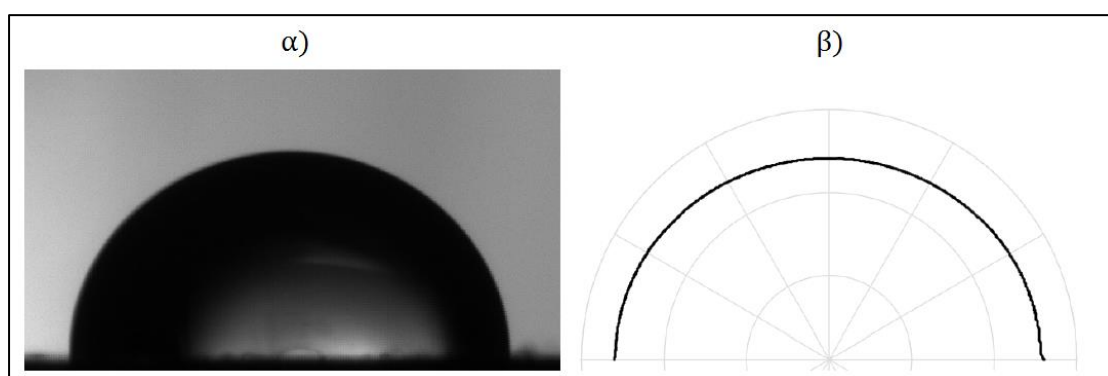
Εικόνα 8: Σχηματική αναπαράσταση της εξαγωγής του σχήματος μίας σταγόνας, με τη μέθοδο κατωφλίου.

Έστω ότι ο δρομέας αρχικά είναι τοποθετημένος στο εικονοστοιχείο Α. Αφού το εικονοστοιχείο αυτό είναι μαύρου χρώματος, θα εκτελεσθεί η υπορουτίνα Α, δηλαδή ο δρομέας θα αρχίσει να κινείται οριζόντια προς τα δεξιά (αφού πραγματοποιείται ανίχνευση του δεξιού τμήματος της σταγόνας), ώσπου να συναντήσει ένα λευκό εικονοστοιχείο, δηλαδή το εικονοστοιχείο Β της εικόνας. Στη συνέχεια, ο δρομέας θα κινηθεί κάθετα προς τα κάτω, ξεκινώντας από το τελευταίο μαύρο εικονοστοιχείο, από το οποίο πέρασε, πριν συναντήσει το εικονοστοιχείο Β, δηλαδή από το εικονοστοιχείο Γ, καταλήγοντας τελικά στο εικονοστοιχείο Δ.

Αντιθέτως, εάν ο δρομέας αρχικά είναι τοποθετημένος σε ένα λευκό εικονοστοιχείο, όπως είναι το Ε, τότε θα κινηθεί οριζόντια προς τα αριστερά (αφού ανιχνεύεται το δεξιό τμήμα της σταγόνας), μέχρι να συναντήσει ένα εικονοστοιχείο μαύρου χρώματος. Το πρώτο εικονοστοιχείο στην πορεία του, που έχει αυτήν την ιδιότητα, είναι το εικονοστοιχείο Ζ. Μόλις συναντήσει αυτό το εικονοστοιχείο, ο δρομέας συνεχίζει την πορεία του κάθετα και προς τα κάτω, φθάνοντας στο εικονοστοιχείο Η.

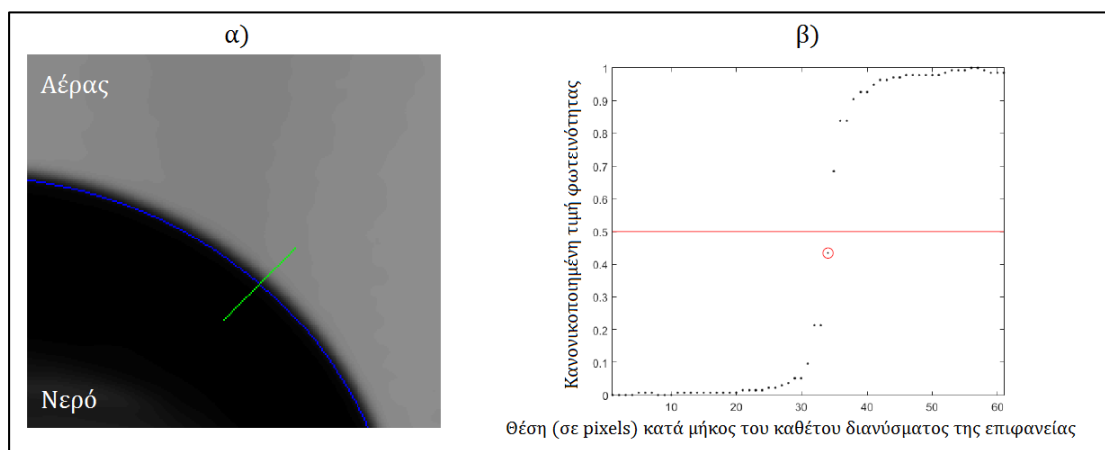
Τελικά, το δεξιό (κίτρινη γραμμή) και το αριστερό (μωβ γραμμή) τμήμα της σταγόνας συνδέονται, δημιουργώντας το ενιαίο σχήμα της σταγόνας.

Στην Εικόνα 9, φαίνεται ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα ανίχνευσης του σχήματος μίας σταγόνας, με τη μέθοδο κατωφλίου.



Εικόνα 9: Παράδειγμα εφαρμογής της μεθόδου κατωφλίου, για την ανίχνευση του σχήματος μίας επικαθήμενης σταγόνας νερού, όγκου ίσου με 10 μL , η οποία βρίσκεται πάνω σε στερεή επιφάνεια αργιλίου. Το τμήμα α) απεικονίζει την αρχική, ανεπεξέργαστη εικόνα, ενώ το τμήμα β) το προκύπτον σχήμα της σταγόνας.

Μετά την ολοκλήρωση των δύο βημάτων που προηγήθηκαν, γίνεται διόρθωση του προβλήματος των μη ευκρινών άκρων και ανακατασκευή του σχήματος της σταγόνας. Κάνοντας χρήση του αρχικού σχήματος της σταγόνας, το οποίο έχει προκύψει με τη μέθοδο κατωφλίου, μπορεί να δημιουργηθεί ένα κάθετο διάνυσμα προς την επιφάνεια της υγρής σταγόνας, για κάθε σημείο του σχήματος. Η φωτεινότητα του κάθε εικονοστοιχείου κατά μήκος του αντιστοίχου διανύσματος, ακολούθως κανονικοποιείται, κατά τρόπο, ώστε η προκύπτουσα – κανονικοποιημένη – φωτεινότητα να παίρνει τιμές μεταξύ του 0 και του 1. Το επίπεδο φωτεινότητας, κατά μήκος του καθέτου διανύσματος της επιφανείας της σταγόνας, προσομοιάζει σε μεγάλο βαθμό τη μορφή μίας συνάρτησης σφάλματος Gauss^[28]. Η καμπύλη έχει δύο περιοχές, όπου η τιμή της φωτεινότητας διατηρείται σταθερή, από τις οποίες η μία βρίσκεται στο ελάχιστο της συνάρτησης και αντιστοιχεί στα εικονοστοιχεία που βρίσκονται εντός του σχήματος της σταγόνας και η άλλη βρίσκεται στο μέγιστο της συνάρτησης και αντιστοιχεί στα εικονοστοιχεία που βρίσκονται εκτός του σχήματος της σταγόνας. Η θέση της διεπιφάνειας θεωρείται ότι είναι αυτή, στην οποίαν η κανονικοποιημένη φωτεινότητα είναι πιο κοντά στην τιμή $\frac{1}{2}$. Έτσι, λαμβάνεται μία διορθωμένη θέση για κάθε σημείο του αρχικά εντοπισμένου σχήματος. Οι παρατηρήσεις αυτές απεικονίζονται πιο παραστατικά στην Εικόνα 10.



Εικόνα 10: α) Η μπλε γραμμή απεικονίζει το αρχικά εξαγόμενο σχήμα της σταγόνας, ενώ η πράσινη γραμμή αποτελεί ένα κάθετο διάνυσμα επί της επιφανείας της. β) Κατανομή της (κανονικοποιημένης) φωτεινότητας κατά μήκος ενός καθέτου διανύσματος της επιφανείας. Το κυκλωμένο σημείο επιλέγεται ως σημείο της επιφανείας της σταγόνας, αφού βρίσκεται πιο κοντά στην τιμή $\frac{1}{2}$.

Κεφάλαιο 4.3.2: Παραμετροποίηση του προφίλ της σταγόνας σε πολικές συντεταγμένες

Το σχήμα της σταγόνας που προέκυψε από την παραπάνω διαδικασία ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας είναι εκπνερασμένο σε Καρτεσιανές συντεταγμένες και μπορεί εύκολα να μετατραπεί σε σύστημα πολικών συντεταγμένων (r, θ) , με βάση τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$r = \sqrt{x^2 + z^2},$$

$$\theta = \tan^{-1}\left(\frac{z}{x}\right), \text{ με } \theta = 0 \text{ στην κορυφή της σταγόνας.}$$

Η αρχή των αξόνων σε αυτό το σύστημα συντεταγμένων ορίζεται στο σημείο, στο οποίο ισχύει ότι $z = z_0$ και $x = \frac{x_{min} + x_{max}}{2}$, όπου z_0 είναι η κάθετη θέση της βάσης της σταγόνας και x_{min}, x_{max} είναι η ελάχιστη και μέγιστη x – συντεταγμένη του προφίλ της σταγόνας, αντιστοίχως. Ο μετασχηματισμός αυτός οδηγεί στη δημιουργία ενός πολικού σχήματος σταγόνας, στο οποίο η απόσταση μεταξύ της αρχής των αξόνων και της επιφάνειας της σταγόνας είναι εκπνερασμένη σε εικονοστοιχεία.

Το σχήμα αυτό της σταγόνας είναι δυνατόν να κανονικοποιηθεί, κάνοντας χρήση της ονομαστικής ακτίνας (εδώ, συμβολίζεται με R_n) μίας σφαίρας με όγκο ίσο με τον όγκο της εξεταζόμενης σταγόνας, εκπνερασμένης σε εικονοστοιχεία. Ο υπολογισμός της ακτίνας αυτής πραγματοποιείται, μέσω της έκφρασης του όγκου μίας αξονοσυμμετρικής σταγόνας, σε σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων (ρ, θ, φ) , το οποίο έχει την ίδια αρχή αξόνων και γωνιακή συντεταγμένη, θ , με το σύστημα πολικών συντεταγμένων:

$$\int_{\varphi=0}^{\pi} \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_{\rho=0}^{r(\theta)} \rho^2 \sin \theta \, d\rho \, d\theta \, d\varphi = \frac{4}{3} \pi R_n^3$$

Στην εξίσωση αυτήν, ως ρ συμβολίζεται η ακτινική απόσταση από την αρχή των αξόνων και ως φ η αζιμουθιακή γωνία.

Το παραπάνω ολοκλήρωμα μπορεί να απλουστευθεί, θεωρώντας αξονική συμμετρία. Εκτός αυτού, στην περίπτωση που το στερεό υπόστρωμα

είναι επίπεδο και ομαλό, η πολική γωνία, θ , περιορίζεται μεταξύ των τιμών $\frac{\pi}{2}$ και $-\frac{\pi}{2}$. Με βάση αυτές τις απλοποιήσεις, η εξίσωση μπορεί να γραφεί και ως εξής:

$$\pi \int_{\theta=-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_{\rho=0}^{r(\theta)} \rho^2 \sin \theta \, d\rho \, d\theta = \frac{4}{3} \pi R_n^3$$

Η εξίσωση μπορεί να απλουστευθεί ακόμη περισσότερο, θεωρώντας συμμετρία καθρέπτη (δηλαδή, συμμετρία ως προς ένα επίπεδο) στον άξονα z .

$$\int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} r(\theta)^3 \sin \theta \, d\theta = 2 R_n^3$$

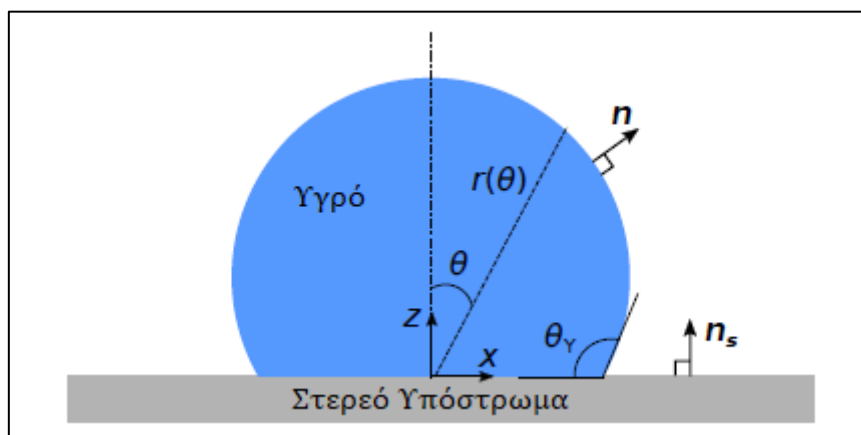
Τελικά, το χαρακτηριστικό μέγεθος R_n , εκπεφρασμένο σε μονάδες εικονοστοιχείων, υπολογίζεται, μέσω της διακριτοποίησης του τελευταίου ολοκληρώματος στα (έστω M το πλήθος) πειραματικά σημεία του σχήματος της σταγόνας:

$$R_n = \left(\frac{\sum_{i=1}^{M-1} r(\theta_j)^3 \sin \theta_j \, \delta\theta_j}{2} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Στην εξίσωση αυτήν, θ_j είναι η γωνιακή συντεταγμένη του j - οστού σημείου του προφίλ της σταγόνας (τα πειραματικά σημεία ταξινομούνται κατ' αύξουσα σειρά πολικών γωνιών, θ_j). Ως $\delta\theta_j$ συμβολίζεται η διαφορά μεταξύ των πολικών γωνιών του j - οστού και $j + 1$ - οστού πειραματικού σημείου.

Από τη διαδικασία που αναλύθηκε προηγουμένως, προκύπτει ένα αδιάστατο σύνολο πολικών συντεταγμένων $((\hat{r}(\theta_j), \theta_j)$, όπου $\hat{r}(\theta_j) = \frac{r(\theta_j)}{R_n}$, το οποίο είναι ιδιαιτέρως «βολικό» για την προσαρμογή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας, το οποίο δίνεται από την αδιάστατη μορφή της *εξίσωσης Young - Laplace*, στα πειραματικά σημεία.

Στην Εικόνα 11, απεικονίζεται παραστατικότερα η έκφραση του σχήματος μίας επικαθήμενης σταγόνας σε πολικές συντεταγμένες, με βάση τα όσα αναφέρθηκαν ανωτέρω.



Εικόνα 11: Σχηματική απεικόνιση σταγόνας, επικαθήμενης πάνω σε επίπεδη και ομαλή στερεή επιφάνεια, με γωνία επαφής θ_Y . Το σχήμα της σταγόνας έχει μετατραπεί σε σύστημα πολικών συντεταγμένων.

Κεφάλαιο 4.3.3: Εξαγωγή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας, μέσω της εξίσωσης Young – Laplace

Το ισοζύγιο δυνάμεων μεταξύ της επιφανειακής τάσης, της τριχοειδούς πίεσης και της βαρύτητας, κατά μήκος της επιφάνειας μίας σταγόνας εκφράζεται μέσω της *εξίσωσης Young – Laplace*^[15]:

$$\gamma_{LA} C + \Delta p g z = \Delta p \Rightarrow \gamma_{LA} \frac{\hat{C}}{R_0} + \Delta p g \hat{z} R_0 = \Delta p \Rightarrow \hat{C} + N_g \hat{z} = K,$$

όπου:

C : η μέση τοπική καμπυλότητα της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας ($C = \nabla_s \cdot n$, με ∇_s τον τελεστή ανάδελτα της επιφάνειας και n το κάθετο διάνυσμα προς την επιφάνεια της σταγόνας)

\hat{C} : η αδιάστατη μορφή του μεγέθους C

Δp : η διαφορά πίεσης κατά μήκος της ελεύθερης επιφάνειας

R_0 : η χαρακτηριστική ακτίνα της σταγόνας

$K = \frac{R_0 \Delta p}{\gamma_{LA}}$: μία πίεση αναφοράς, η οποία διατηρείται σταθερή, κατά μήκος της διεπιφάνειας

Η επίδραση της βαρύτητας λαμβάνεται υπ' όψιν στην *εξίσωση Young – Laplace*, μέσω του *συντελεστή υδροστατικής πίεσης*, $N_g \hat{z}$, όπου $N_g = \frac{\Delta \rho g R_0^2}{\gamma_{LA}}$ είναι ο *βαρυτικός αριθμός Bond*, με $\Delta \rho$ τη διαφορά πυκνότητας μεταξύ του υγρού και του περιβάλλοντος και g τη βαρυτική σταθερά.

Υποθέτοντας αξονική συμμετρία, ως προς τον άξονα z (με βάση το σχήμα της *Εικόνας 5*), το σχήμα της σταγόνας μπορεί ευκόλως να εκφρασθεί σε πολικές συντεταγμένες (r, θ) . Έτσι, παραμετροποιώντας το προφίλ της σταγόνας με χρήση της γωνιακής συντεταγμένης, θ , το πρόβλημα ανάγεται σε μία διάσταση. Στην περίπτωση αυτήν, ως $r(\theta)$ ορίζεται η απόσταση από το κέντρο του στερεού υποστρώματος, όπου ισχύει ότι $(x, z) = (0, 0)$. Τότε, η μέση τοπική καμπυλότητα της επιφάνειας της σταγόνας δίνεται από τη σχέση:

$$C = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\frac{2r^2 \sin^2 \theta + r_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (r^2 + r_\theta^2)}} - \frac{d}{d\theta} \frac{r r_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (r^2 + r_\theta^2)}} \right],$$

όπου $r_\theta = \frac{dr}{d\theta}$.

Στην παραπάνω εξίσωση, η ακτίνα της σταγόνας, r , είναι συνάρτηση της γωνιακής συντεταγμένης, θ , δηλαδή ισχύει ότι $r = r(\theta)$.

Στη συνέχεια, η *εξίσωση Young – Laplace* επιλύεται, στην αδιάστατη μορφή της, χρησιμοποιώντας τις ακόλουθες οριακές συνθήκες:

$$\frac{1}{R_0} \frac{dr(\theta)}{d\theta} = 0, \text{ για } \theta = 0$$

$$n(\theta) \cdot n_s - \cos \theta_Y = 0, \text{ για } \theta = \theta_{max}$$

Στις συνθήκες αυτές, ως θ_{max} νοείται η μέγιστη τιμή της γωνιακής συντεταγμένης.

Η πρώτη οριακή συνθήκη είναι *τύπου Neumann* και ορίζει την αξονική συμμετρία ως προς τον άξονα z , ενώ η δεύτερη οριακή συνθήκη ορίζει τη *γωνία επαφής Young*, θ_Y , στο σημείο επαφής των τριών φάσεων (υγρό, στερεό υπόστρωμα και περιβάλλον), όπου $n(\theta)$ και n_s είναι τα κάθετα διανύσματα ως προς την επιφάνεια της σταγόνας και του στερεού υποστρώματος, αντιστοίχως, όπως φαίνεται και στην *Εικόνα 11*. Στην περίπτωση που απεικονίζεται στην εικόνα αυτή, το στερεό υπόστρωμα είναι επίπεδο και ομαλό και η τιμή της γωνιακής συντεταγμένης, θ , περιορίζεται στο διάστημα $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$, με το θ_{max} να είναι ίσο προς $\frac{\pi}{2}$. Επίσης, το διάνυσμα n_s είναι ίσο με το μοναδιαίο διάνυσμα προς τη διεύθυνση z και το εσωτερικό γινόμενο $n(\theta) \cdot n_s$ μπορεί, στο σημείο όπου $\theta = \frac{\pi}{2}$, να εκφρασθεί ως $n(\theta) \cdot n_s = \frac{\frac{dr(\theta)}{d\theta}}{\sqrt{r(\theta)^2 + \left(\frac{dr(\theta)}{d\theta}\right)^2}}$.

Τέλος, η λύση της *εξίσωσης Young - Laplace* διαχωρίζεται, χρησιμοποιώντας έναν περιορισμό, ο οποίος αφορά στον όγκο της σταγόνας. Συγκεκριμένα, θεωρώντας ότι ο όγκος της σταγόνας ισοδυναμεί με αυτόν μίας σφαίρας, ακτίνας ίσης με τη χαρακτηριστική ακτίνα R_0 , ο περιορισμός του όγκου της σταγόνας σε αδιάστατη μορφή, έχει ως εξής:

$$\int_0^{\theta_{max}} \left(\frac{r(\theta)}{R_0} \right)^3 \sin \theta d\theta = 2,$$

με $\theta_{max} = \frac{\pi}{2}$, για ομαλό υπόστρωμα.

Οι παραπάνω εξισώσεις διακριτοποιούνται, κάνοντας χρήση της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών^[29]. Πιο συγκεκριμένα, για την προσέγγιση των παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης, της *εξίσωσης Young - Laplace*, χρησιμοποιείται μία διαδικασία κεντρικών διαφορών:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{r}}{d\theta}(\theta) &= \frac{\hat{r}(\theta + \delta\theta) - \hat{r}(\theta - \delta\theta)}{2 \delta\theta}, \\ \frac{d^2\hat{r}}{d\theta^2} &= \frac{\hat{r}(\theta + \delta\theta) - 2\hat{r}(\theta) + \hat{r}(\theta - \delta\theta)}{\delta\theta^2}, \end{aligned}$$

όπου $\delta\theta$ είναι η αύξηση της γωνίας που συμβαίνει μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο και $\hat{r}(\theta)$ είναι η αδιάστατη ακτίνα ($\hat{r}(\theta) = \frac{r(\theta)}{R_0}$).

Οι παράγωγοι των δύο οριακών συνθηκών που προαναφέρθηκαν διακριτοποιούνται με μία διαδικασία προς τα εμπρός/προς τα πίσω διαφορών, αντιστοίχως.

Η παράγωγος της οριακής συνθήκης συμμετρίας (πρώτη οριακή συνθήκη) εκφράζεται ως:

$$\frac{d\hat{r}}{d\theta}(\theta) = \frac{\hat{r}(\theta + \delta\theta) - \hat{r}(\theta)}{\delta\theta}$$

Η παράγωγος της οριακής συνθήκης γωνίας επαφής (δεύτερη οριακή συνθήκη), προσεγγίζεται ως εξής:

$$\frac{d\hat{r}}{d\theta}(\theta) = \frac{\hat{r}(\theta) - \hat{r}(\theta - \delta\theta)}{\delta\theta}$$

Τέλος, το ολοκλήρωμα που αφορά στον περιορισμό ως προς τον όγκο της σταγόνας, κατόπιν της διακριτοποίησης, γράφεται ως:

$$\sum_{i=0}^{N-1} \hat{r}(\theta_i)^3 \sin \theta_i \delta\theta,$$

όπου N είναι ο αριθμός των χρησιμοποιούμενων σημείων για τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών και $\theta_i = i \delta\theta$ η γωνία του i - οστού σημείου.

Μετά από τη διαδικασία αυτήν, το προκύπτον σύνολο μη - γραμμικών, αδιάστατων εξισώσεων, επιλύεται επαναληπτικά, ενώ η θεωρητική λύση

προσαρμόζεται στο πειραματικό προφίλ της σταγόνας. Αυτή η διαδικασία περιγράφεται στην επόμενη παράγραφο.

Κεφάλαιο 4.3.4: Προσαρμογή του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας στο πειραματικό της προφίλ

Προκειμένου να υπολογισθεί η *γωνία επαφής Young*, θ_Y , και η επιφανειακή τάση μίας υγρής σταγόνας, το θεωρητικό σχήμα της πρέπει να προσαρμοσθεί στο πειραματικά προσδιορισμένο. Για το σκοπό αυτόν, χρησιμοποιείται μία διαδικασία βελτιστοποίησης ελαχίστων τετραγώνων^[30], ώστε να βρεθεί το ζεύγος (N_g, θ_Y) , το οποίο ανταποκρίνεται καλύτερα στο πειραματικό σχήμα.

Ακριβέστερα, το σύστημα των $N - 1$ σε πλήθος μη - γραμμικών εξισώσεων που προκύπτουν από τη διαδικασία εξαγωγής του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας, επιλύεται επαναληπτικά ως προς την αδιάστατη ακτίνα, $\hat{r}(\theta)$, και την πίεση αναφοράς, K . Στην περίπτωση, στην οποία το σύστημα επιλύεται για πρώτη φορά, για τα μεγέθη $\hat{r}(\theta)$ και K τίθενται οι αρχικές τιμές $\hat{r} = 2^{\frac{1}{3}}$ (η αδιάστατη ακτίνα ενός σφαιρικού τμήματος, με $\theta_Y = 90^\circ$, θεωρώντας αδιάστατο όγκο σταγόνας, ίσο με $\frac{4}{3}\pi$) και $K = 1$. Σε διαφορετική περίπτωση, ως αρχικές τιμές χρησιμοποιούνται οι αντίστοιχες τιμές, οι οποίες προέκυψαν από την προηγούμενη επανάληψη. Εκτός αυτών, απαιτείται ο ορισμός από το χρήστη, της αρχικής τιμής του *βαρυτικού αριθμού Bond*, N_g , και της *γωνίας επαφής Young*, θ_Y .

Η *συνάρτηση κόστους*, F , η οποία ελαχιστοποιείται κατά τη διαδικασία, είναι το άθροισμα των διαφορών μεταξύ των αδιάστατων ακτίνων, $\hat{r}(\theta)$, των N σε πλήθος σημείων, τα οποία προκύπτουν από την *εξίσωση Young - Laplace* και των M σε πλήθος σημείων, τα οποία προκύπτουν από το πειραματικά προσδιορισμένο σχήμα της σταγόνας, υψωμένων εις το τετράγωνο. Δεδομένου ότι οι πολικές γωνίες, θ , των N υπολογισμένων σημείων δε συμπίπτουν απαραίτητα με αυτές των M πειραματικών σημείων, οι τιμές των πρώτων υπολογίζονται μέσω μίας διαδικασίας γραμμικής παρεμβολής στις θέσεις των πειραματικών σημείων:

$$\hat{r}(\theta) = \hat{r}(\theta_{down}) + \frac{\hat{r}(\theta_{up}) - \hat{r}(\theta_{down})}{\theta_{up} - \theta_{down}}(\theta - \theta_{down}),$$

όπου:

$\hat{r}(\theta)$ είναι η αδιάστατη ακτίνα, η οποία παρεμβάλλεται στο σημείο όπου η γωνιακή συντεταγμένη έχει την τιμή θ

θ_{down} είναι η τιμή της γωνιακής συντεταγμένης, η οποία βρίσκεται κοντύτερα στην τιμή θ , με $\theta_{down} \leq \theta$

θ_{up} είναι η τιμή της γωνιακής συντεταγμένης, η οποία βρίσκεται κοντύτερα στην τιμή θ και $\theta_{up} > \theta$

$\hat{r}(\theta_{down})$ και $\hat{r}(\theta_{up})$ είναι οι αδιάστατες ακτίνες του θεωρητικού σχήματος της σταγόνας, για τιμές πολικών γωνιών θ_{down} και θ_{up} , αντιστοίχως

Κατόπιν, η *συνάρτηση κόστους*, $F(N_g, \theta_Y)$, ελαχιστοποιείται, ακολουθώντας μία μη γραμμική διαδικασία προσαρμογής ελαχίστων τετραγώνων. Η διαδικασία αυτή αποτελείται από τέσσερα βασικά βήματα, τα οποία έχουν ως εξής:

i) Αρχικά, δημιουργείται το θεωρητικό σχήμα της σταγόνας, για τις δεδομένες αρχικές τιμές των μεγεθών N_g και θ_Y .

ii) Οι αδιάστατες ακτίνες, $\hat{r}(\theta)$, υφίστανται γραμμική παρεμβολή σε σημεία που αντιστοιχούν στις πειραματικές γωνιακές συντεταγμένες, θ (M σε πλήθος σημεία)

iii) Η *συνάρτηση κόστους*, υπολογίζεται, στη συνέχεια, ως:

$$F = \sum_{i=1}^M (\hat{r}_{theoretical}(\theta_i) - \hat{r}_{experimental}(\theta_i))^2,$$

όπου $\hat{r}_{theoretical}$ είναι οι (αδιάστατες) ακτίνες, οι οποίες προκύπτουν από την *εξίσωση Young – Laplace* και $\hat{r}_{experimental}$ αυτές που αφορούν στο πειραματικό σχήμα, για την ίδια τιμή γωνιακής συντεταγμένης

iv) Τέλος, υπολογίζονται οι νέες τιμές των μεγεθών N_g και θ_Y , επιλύοντας το σύστημα $\nabla F(N_g, \theta_Y) = \mathbf{0}$.

Μετά από τα τέσσερα αυτά βήματα, η διαδικασία/αλγόριθμος επαναλαμβάνεται, ξεκινώντας εκ νέου από το 1^ο βήμα, μέχρις ότου να ικανοποιηθεί ένα κριτήριο σύγκλισης, δηλαδή μέχρις ότου να επιτευχθεί το ελάχιστο μέγεθος βήματος των παραμέτρων (για υψηλότερη ακρίβεια), ή ο μέγιστος αριθμός επαναλήψεων.

Αφού ελαχιστοποιηθεί η *συνάρτηση κόστους*, μέσω της προαναφερθείσας διαδικασίας βελτιστοποίησης, πραγματοποιείται και ο υπολογισμός της επιφανειακής τάσης, γ_{LA} , και της χαρακτηριστικής ακτίνας, R_0 .

Συγκεκριμένα, η επιφανειακή τάση υπολογίζεται μέσω της σχέσης $\gamma_{LA} = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot R_0^2}{N_g}$, δεδομένης και της τιμής του *βαρυτικού αριθμού Bond*, N_g . Η τιμή της χαρακτηριστικής ακτίνας εκτιμάται, μέσω του ορισμού του όγκου της σταγόνας, V :

$$V = \frac{4}{3}\pi R_0^3 \Rightarrow R_0 = \left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Ο όγκος της σταγόνας, συνήθως αποτελεί γνωστό μέγεθος σε τέτοιου τύπου πειράματα, αφού στις περισσότερες περιπτώσεις χρησιμοποιείται βαθμονομημένο όργανο (μικροσύριγγα) για την απόθεση της σταγόνας. Εναλλακτικά, εάν επιθυμείται να ληφθεί υπ' όψιν και το φαινόμενο της εξάτμισης που πιθανώς να έχει λάβει χώρα, η τιμή του όγκου μπορεί να υπολογισθεί, κάνοντας χρήση της μεθόδου των δίσκων^[31]. Κατά τη μέθοδο αυτήν, η σταγόνα αντιμετωπίζεται ως ένα σύνολο «δίσκων», οι οποίοι προκύπτουν από την περιστροφή στοιχειωδών τμημάτων, πάχους έστω dx και ύψους ίσου με την ακτίνα της εκάστοτε θεωρούμενης βάσης, γύρω από τον άξονα συμμετρίας της σταγόνας. Κατόπιν, ο όγκος της σταγόνας προκύπτει, προσθέτοντας τους όγκους των επιμέρους «δίσκων». Η μέθοδος αυτή είναι περισσότερο ακριβής, ενώ η εφαρμογή της απαιτεί τη γνώση μόνον της κλίμακας της εικόνας (σε όρους εικονοστοιχείων ή χιλιοστομέτρων).

Συμπερασματικά, με τον τρόπο που περιγράφηκε στις προηγούμενες σελίδες, πραγματοποιείται η μέτρηση της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής σταγόνων, μέσω της εφαρμογής της μεθόδου ADSA από το λογισμικό *DropToolKit*. Στη συνέχεια, θα ακολουθήσει σύγκριση των αποτελεσμάτων που αυτό δίνει, με τα αποτελέσματα που δίνουν άλλα υπολογιστικά πακέτα, όπως είναι το εμπορικά διαθέσιμο *DROPImage Advanced* της εταιρείας *Ramé – Hart Instrument Co.* ή οι κώδικες *DropAnalysis*^[32] και *Pendent_Drop*^[33] (sic), οι οποίοι περιλαμβάνονται ως *plugins* στο πρόγραμμα επεξεργασίας εικόνων *ImageJ*.

Κεφάλαιο 4.4: Σύγκριση του λογισμικού *DropToolKit* με άλλα υπολογιστικά πακέτα μέτρησης σχήματος σταγόνων

Το λογισμικό *DropToolKit* έχει αναπτυχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού *Python*, κάνοντας χρήση και του πακέτου αλγορίθμων βελτιστοποίησης από τη βιβλιοθήκη *SciPy*. Μάλιστα, χάρη στην ικανότητα της *Python* να «τρέξει» σε πολλές πλατφόρμες, το λογισμικό αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε λειτουργικά συστήματα τόσο *Microsoft Windows* όσο και *Linux*.

Σε σχέση με άλλα υπολογιστικά πακέτα που χρησιμοποιούνται για τον ίδιο σκοπό, δηλαδή τη μέτρηση σχήματος σταγόνων, το *DropToolKit* παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα ως προς τη χρήση του, με τα πλέον χαρακτηριστικά να είναι το μηδενικό κόστος (σε αντίθεση με το εμπορικά διαθέσιμο *Ramé – Hart DROPimage Advanced*) και η μη αναγκαιότητα αρχικοποίησης των παραμέτρων του σχήματος της σταγόνας (σε αντίθεση με τα *plugins*, τα οποία περιλαμβάνονται στο πρόγραμμα επεξεργασίας εικόνων *ImageJ*).

Κεφάλαιο 4.4.1: Συνθήκες πραγματοποίησης των δοκιμών

Ως προς την εξέταση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων που παρέχει το *DropToolKit*, θεωρήθηκαν διάφοροι συνδυασμοί υγρών και στερεών υποστρωμάτων και μετρήθηκαν η *επιφανειακή τάση*, γ_{LA} , και η *γωνία επαφής* *Young*, θ_Y , της σταγόνας, σε κάθε περίπτωση. Στη συνέχεια, τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με αυτά που προέκυψαν από τη μέτρηση των ίδιων μεγεθών με καθένα από τα προαναφερθέντα προγράμματα.

Πιο συγκεκριμένα, οι εικόνες των προφίλ των σταγόνων λήφθηκαν με ένα *γωνιόμετρο/τασίμετρο* της εταιρείας *Ramé – Hart Instrument Co.* (μοντέλο 590) και η ανάλυσή τους πραγματοποιήθηκε με το λογισμικό *DROPimage Advanced* (Έκδοση 2.8) της ίδιας εταιρείας, το οποίο αποστέλλεται μαζί με τη συσκευή, καθώς και με το πρόγραμμα *ImageJ*, μέσω των *plugins Pendent_Drop*^[33] (sic) και *DropAnalysis*^[32]. Στα προγράμματα αυτά, ο υπολογισμός των επιθυμητών μεγεθών γίνεται μέσω της

προσαρμογής ενός θεωρητικού προφίλ της σταγόνας, το οποίο προκύπτει από την επίλυση της *εξίσωσης Young – Laplace*, στα πειραματικά σημεία, κάτι που προσομοιάζει σε μεγάλο βαθμό τη μέθοδο που χρησιμοποιείται από το πρόγραμμα *DropToolKit*. Συνεπώς, αναμένεται ότι τα αποτελέσματά του θα συμφωνούν με αυτά των, ευρέως διαδεδομένων, προγραμμάτων που αναφέρθηκαν.

Για τη μέτρηση της επιφανειακής τάσης, χρησιμοποιήθηκαν κρεμάμενες σταγόνες πεντανίου (98 %), δωδεκανίου (99 %), σογιελαίου, γλυκερίνης (99,5 %) και νερού. Οι κρεμάμενες σταγόνες είναι καταλληλότερες από τις επικαθήμενες για τη συγκεκριμένη μέτρηση, διότι η επίδραση της βαρύτητας στο σχήμα της σταγόνας είναι περισσότερο εμφανής στην περίπτωση τους.

Όσον αφορά στις μετρήσεις της γωνίας επαφής, αναλύθηκε το σχήμα σταγόνων που επικάθονται σε στερεές επιφάνειες. Ως υποστρώματα χρησιμοποιήθηκαν λείος μεθακρυλικός πολυμεθυλεστέρας (PMMA – Plexiglas), αλουμίνιο, χαλκός και πολυτετραφθοροαιθυλένιο (PTFE – Teflon), καθώς και μία δομημένη, με μικροπόρους, πυριτική επιφάνεια, επικεκαλυμμένη με ένα φθοροπολυμερές.

Η τελευταία επιφάνεια έχει κατασκευασθεί με τη μέθοδο της οξυγραφίας (δημιουργίας κυλινδρικών μικροπόρων) σε λεπτή πλάκα πυριτίου^[34], η οποία, στη συνέχεια καλύπτεται από ένα προστατευτικό στρώμα Teflon. Καθένας από τους δημιουργούμενους πόρους έχει διάμετρο και ύψος της τάξης των 10 μm , ενώ η απόστασή μεταξύ των πόρων είναι ίση με 30 μm . Οι επιφάνειες σαν και αυτήν είναι ευρέως γνωστές ως *υπερυδρόφοβες επιφάνειες*, έχουν την ιδιότητα να απωθούν τις σταγόνες του νερού που πέφτουν πάνω τους και η δομή τους είναι εμπνευσμένη από την τραχύτητα των φύλλων του λωτού, τα οποία παρουσιάζουν την ίδια, «υπερυδρόφοβη», συμπεριφορά^[35]. Η γωνία που μετριέται στην περίπτωση αυτών των επιφανειών δεν είναι η πραγματική *γωνία επαφής Young*, αλλά η *φαινόμενη (ή μακροσκοπικά παρατηρούμενη) γωνία επαφής* και σε πολλές περιπτώσεις έχει τιμή μεγαλύτερη από 150°.

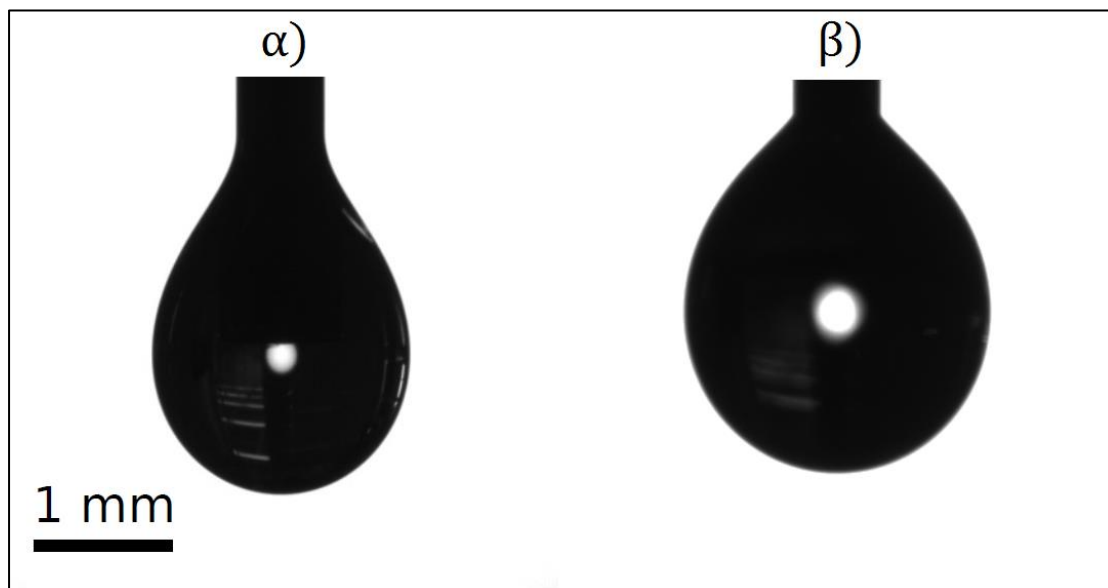


Εικόνα 12: Το φύλλο του λωτού αποτελεί την πλέον χαρακτηριστική υπερυδροφοβή επιφάνεια.

Κεφάλαιο 4.4.2: Σύγκριση των προκυπτόντων αποτελεσμάτων

Τα αποτελέσματα των μετρήσεων έδειξαν και στις δύο περιπτώσεις, δηλαδή, τόσο ως προς τη μέτρηση της επιφανειακής τάσης, όσο και ως προς τη μέτρηση της γωνίας επαφής, μεγάλη συμφωνία μεταξύ του *DropToolKit* και των άλλων δύο υπολογιστικών πακέτων που χρησιμοποιήθηκαν για τη σύγκριση.

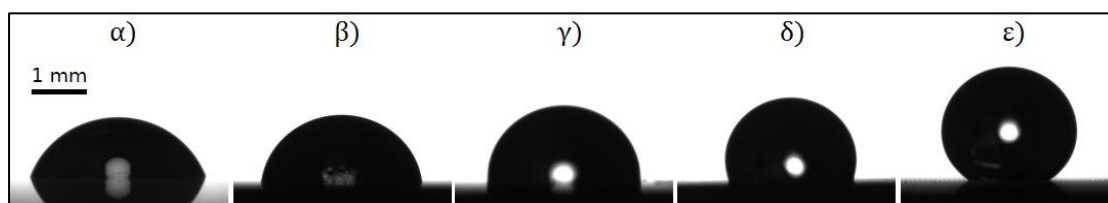
Συγκεκριμένα, ως προς τη μέτρηση της επιφανειακής τάσης, συγκρίθηκε το *DropToolKit* με το εμπορικά διαθέσιμο *DROPImage Advanced* και το *plugin Pendent_Drop* (sic) του δωρεάν διαθέσιμου λογισμικού *ImageJ*. Τα δείγματα που αναλύθηκαν κάλυψαν μεγάλο εύρος τιμών επιφανειακής τάσης και, για σε όλες τις περιπτώσεις, η μέγιστη απόκλιση ανάμεσα στα αποτελέσματα που έδωσε το *DropToolKit* και αυτά που έδωσαν τα άλλα προγράμματα ήταν μικρότερη από 5 %. Αυτής της τάξης η αβεβαιότητα είναι κοινώς αποδεκτή σε εφαρμογές μέτρησης επιφανειακής τάσης^[33]. Η ευρύτητα των τιμών της επιφανειακής τάσης που μετρήθηκαν, καθώς και η επίδραση που αυτές έχουν στη μορφή του σχήματος της σταγόνας, γίνεται φανερή στην *Εικόνα 13*, όπου παρατίθενται οι φωτογραφίες των προφίλ δύο κρεμάμενων σταγόνων, προερχομένων από διαφορετικά υγρά.



Εικόνα 13: Κρεμάμενες σταγόνες α) δωδεκανίου (όγκου 5 μL) και β) νερού (όγκου 8 μL), με διαφορετικές τιμές επιφανειακής τάσης ($25,43 \frac{\text{mN}}{\text{m}}$ και $71,13 \frac{\text{mN}}{\text{m}}$, αντιστοίχως, όπως προκύπτουν από τον Πίνακα 1). Αμέσως γίνεται φανερή η σημαντική επίδραση της τιμής της επιφανειακής τάσης στο σχήμα των σταγόνων, σε κατάσταση ισορροπίας.

Όσον αφορά στη μέτρηση της γωνίας επαφής, το λογισμικό *DropToolKit* συγκρίθηκε ξανά με το *DROPimage Advanced*. Τα αποτελέσματα επιβεβαιώνουν αυτό που έδειξαν και τα αποτελέσματα της μέτρησης της επιφανειακής τάσης, δηλαδή, ότι το *DropToolKit* δεν υστερεί σε σχέση με τα καθιερωμένα προγράμματα ανάλυσης σχήματος σταγόνων. Η μέγιστη διαφορά μεταξύ αυτού και του *DROPimage Advanced* είναι και πάλι χαμηλότερη του 5 % (περίπου 5°), που είναι γενικά αποδεκτή στις τεχνικές μέτρησης σχήματος σταγόνων. Αυτήν τη φορά, όμως, οι γωνίες επαφής μετρήθηκαν χρησιμοποιώντας και την τεχνική μέτρησης σχήματος αξονοσυμμετρικών σταγόνων χαμηλού αριθμού Bond (*Low - Bond Axisymmetric Drop Shape Analysis (LBADSA)*), η οποία περιλαμβάνεται ως *plugin* με όνομα *DropAnalysis* στο πρόγραμμα επεξεργασίας εικόνων *ImageJ*^[32]. Στη συγκεκριμένη μέθοδο, η εξίσωση *Young - Laplace* επιλύεται αναλυτικά, χρησιμοποιώντας μία τεχνική διαταραχών πρώτης τάξεως και επιτρέποντας έτσι μόνον μικρές αποκλίσεις του σχήματος της σταγόνας από το προφίλ ενός τμήματος μίας σφαίρας. Και σε αυτήν την περίπτωση, τα αποτελέσματα του *DropToolKit* συμφωνούν σε μεγάλο βαθμό με αυτά του *DropAnalysis*. Προκύπτει, λοιπόν, ότι το λογισμικό *DropToolKit* μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μέτρηση μεγάλου εύρους τιμών γωνίας επαφής. Η

ευρύτητα των τιμών της *διαβρεκτικότητας* παρατηρείται και σε φωτογραφίες από προφίλ σταγόνων νερού που ισορροπούν σε διαφορετικά στερεά υποστρώματα, όπως αυτές φαίνονται συγκεντρωτικά στην Εικόνα 14.



Εικόνα 14: Σταγόνες νερού, όγκου ίσου με 7,5 μL , που ισορροπούν πάνω σε διαφορετικές στερεές επιφάνειες, συγκεκριμένα σε α) λείο PMMA (Plexiglas), β) λείο αλουμίνιο, γ) λείο χαλκό, δ) λείο PTFE (Teflon) και ε) μικροδομημένη επιφάνεια, αποτελούμενη από μικροπόρους πυριτίου και επικεκαλυμμένη με λεπτό στρώμα Teflon.

Τα αποτελέσματα αυτά αναλύονται και στους Πίνακες 1 και 2.

| | <i>Πεντάνιο</i> | <i>Δωδεκάνιο</i> | <i>Σογιέλαιο</i> | <i>Γλυκερίνη</i> | <i>Νερό</i> |
|------------------------------|-----------------|------------------|------------------|------------------|-------------|
| <i>DropToolKit</i> | 15,22 | 25,43 | 32,07 | 63,18 | 71,13 |
| <i>DROPimage Advanced</i> | 15,76 | 25,42 | 32,16 | 62,14 | 71,80 |
| <i>ImageJ (Pendent_Drop)</i> | 15,87 | 25,04 | 31,63 | 62,02 | 70,07 |

Πίνακας 1: Σύγκριση των τιμών επιφανειακής τάσης (σε mN/m) διαφόρων υγρών, όπως αυτές μετρήθηκαν από τα λογισμικά *DropToolKit*, *DROPimage Advanced* και το plugin *Pendent_Drop (sic)* του προγράμματος επεξεργασίας εικόνων *ImageJ*^[33].

| | <i>PMMA</i> | <i>Αλουμίνιο</i> | <i>Χαλκός</i> | <i>PTFE</i> | <i>Δομημένη μικροπορώδης πυριτική επιφάνεια</i> |
|----------------------------------|-------------|------------------|---------------|-------------|---|
| <i>DropToolKit</i> | 70,47 | 84,04 | 96,34 | 110,52 | 149,79 |
| <i>DROPimage Advanced</i> | 68,01 | 86,35 | 91,75 | 107,36 | 147,50 |
| <i>ImageJ (Pendent_Drop)</i> | 69,14 | 81,09 | 92,58 | 109,36 | 151,60 |

Πίνακας 2: Σύγκριση των τιμών γωνίας επαφής (σε μοίρες) σταγόνων νερού πάνω σε διάφορες στερεές επιφάνειες, όπως αυτές μετρήθηκαν από τα λογισμικά *DropToolKit*, *DROPimage Advanced* και το plugin *DropAnalysis* του προγράμματος επεξεργασίας εικόνων *ImageJ*^[32], το οποίο χρησιμοποιεί μία τεχνική μέτρησης σχήματος αξονοσυμμετρικής σταγόνας για χαμηλούς αριθμούς *Bond (LBADSA)*^[32]. Οι επιφάνειες από *PMMA (Plexiglas)*, αλουμίνιο, χαλκό και *PTFE (Teflon)* είναι επίπεδες και λείες, ενώ η δομημένη πυριτική επιφάνεια αποτελείται από μικροπόρους, κεκαλυμμένους από ένα λεπτό υμένιο *Teflon*^[34].

Κεφάλαιο 4.4.3: Συμπεράσματα

Από όσα αναφέρθηκαν, γίνεται αμέσως φανερό ότι το, εσωτερικά ανεπτυγμένο, λογισμικό *DropToolKit* παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα έναντι των δύο εξεταζομένων εναλλακτικών επιλογών, ενώ τα αποτελέσματα των μετρήσεών του είναι ικανοποιητικής ακριβείας.

Απέναντι στο εμπορικά διαθέσιμο *DROPimage Advanced*, υπερέχει, λόγω του ότι διανέμεται χωρίς χρέωση, ενώ, αντιθέτως, η απόκτηση του προγράμματος *DROPimage Advanced* της *Ramé – Hart Instrument Co.* προϋποθέτει την αγορά του *γωνιομέτρου/τασιμέτρου* της ίδιας εταιρείας, καθώς αποστέλλεται μαζί με αυτό στον αγοραστή.

Το *DropToolKit* όμως, υπερέχει και του, ελευθέρου χρεώσεως, προγράμματος επεξεργασίας εικόνων *ImageJ*, αφού μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση τόσο κρεμάμενων όσο και επικαθήμενων σταγόνων, για τον υπολογισμό της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής, τη στιγμή που το πρόγραμμα *ImageJ* χρησιμοποιεί δύο διαφορετικά υποπρογράμματα για τον ίδιο σκοπό (*Pendent_Drop* (sic) για κρεμάμενες και *DropAnalysis* για

επικαθήμενες σταγόνες). Εκτός αυτού, κατά τη χρήση του, δεν είναι απαραίτητο να τεθούν από το χρήστη οι αρχικές τιμές των παραμέτρων του σχήματος της σταγόνας, όπως συμβαίνει με τα *plugins* του *ImageJ*.

Κεφάλαιο 4.5: Εκτέλεση του προγράμματος σε μικρο – υπολογιστή (*single – board computer*)

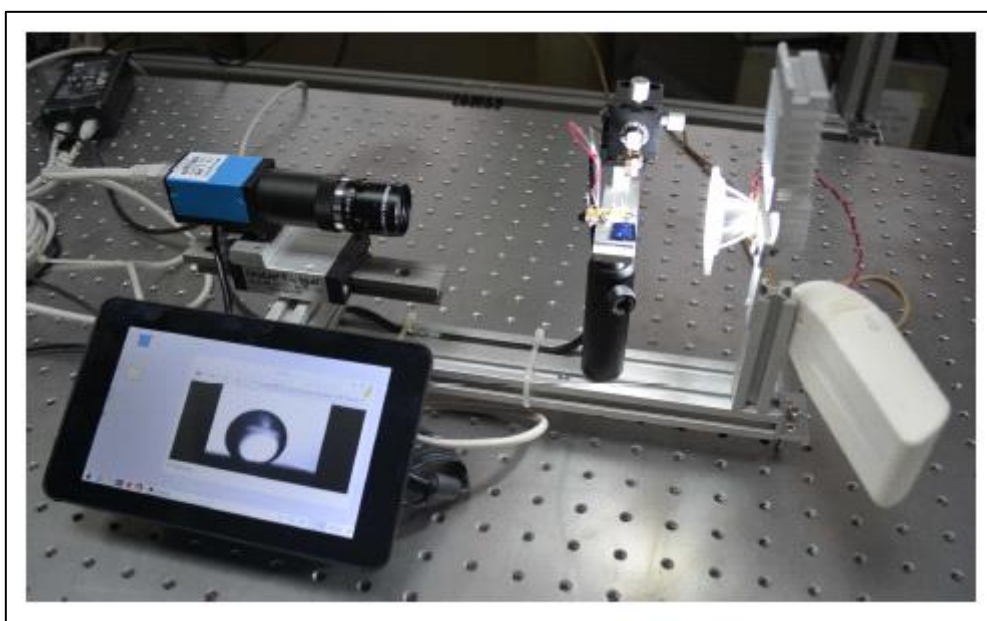
Μέχρι στιγμής, έχει γίνει κατανοητό ότι το πρόγραμμα *DropToolKit*, όντας ανεπτυγμένο σε γλώσσα προγραμματισμού *Python*, είναι δυνατόν να εκτελεσθεί σε αμφότερα τα λειτουργικά συστήματα *Microsoft Windows* και *Linux*. Έτσι, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ένας απλός και φθηνός μικρο – υπολογιστής με λειτουργικό σύστημα *Linux*, προκειμένου να γίνει η ανάλυση του σχήματος μίας σταγόνας με το πρόγραμμα αυτό.

Το ενδιαφέρον για τους μικρο – υπολογιστές έχει παρουσιάσει ανοδική τάση τα τελευταία χρόνια και οι ίδιοι έχουν χρησιμοποιηθεί σε πολυάριθμες επιστημονικές αναλύσεις, λόγω του χαμηλού κόστους και βάρους τους και της ευελιξίας και δυνατότητας προσαρμογής τους σε πληθώρα διαφορετικών απαιτήσεων^[36, 37, 38]. Ο υπολογιστής που χρησιμοποιείται στη συγκεκριμένη εφαρμογή, όπως αναφέρθηκε και νωρίτερα, ονομάζεται *Raspberry Pi 3* και διαθέτει έναν τετραπύρηνο επεξεργαστή 64 – bit *ARM Cortex – A53* 1,2 GHz και 1 GB μνήμης RAM. Το λειτουργικό του σύστημα ονομάζεται *Raspbian* και αποτελεί μία τροποποιημένη έκδοση του *Debian*, το οποίο, με τη σειρά του, είναι βασισμένο στο λειτουργικό σύστημα *Linux*.

Ο *Raspberry Pi 3* έχει ενσωματωθεί σε ένα πρωτότυπο συσκευής γωνιομέτρου/τασιμέτρου, το οποίο έχει κατασκευασθεί από προφίλ αλουμινίου (στην προκειμένη περίπτωση αγορασμένα από την εταιρεία *RK Rose + Krieger GmbH*). Η χρησιμοποιούμενη κάμερα είναι μία *DFK 23G618 (CCD)* από την εταιρεία *The Imaging Source*, συνδέεται με τον υπολογιστή, μέσω ενός μεταγωγέα δικτύου και τροφοδοτείται από έναν μετασχηματιστή *Power over Ethernet (PoE)*, από την εταιρεία *Phihong USA*. Ως πηγή φωτισμού χρησιμοποιείται ένας φακός *LED* υψηλής ισχύος *OSTAR* από την εταιρεία *OSRAM Light AG*. Η λήψη της εικόνας πραγματοποιείται με τη βιβλιοθήκη ανοιχτού κώδικα *Aravis* (<https://github.com/AravisProject/aravis>), η οποία

μπορεί να εγκατασταθεί στο *Raspberry Pi 3*. Τέλος, τη συσκευή ολοκληρώνει μία οθόνη αφής 7 ιντσών, η οποία συνδέεται στον υπολογιστή, μέσω των ακροδεκτών *GPIO* (*General Purpose Input/Output*) και *DSI* (*Display Serial Interface*) που αυτός διαθέτει.

Η συσκευή αυτή είναι ένα *γωνιόμετρο/τασίμετρο* χαμηλού κόστους, το οποίο έχει τη δυνατότητα πραγματοποίησης υπολογισμών υψηλής ακριβείας, ενώ το μικρό του βάρος καθιστά εύκολη και τη μεταφορά του, με αποτέλεσμα τη δυνατότητα χρήσης του ακόμη και για *επί τόπου* (*in situ*) πειράματα. Η τελική, ολοκληρωμένη συσκευή φαίνεται στην Εικόνα 15.



Εικόνα 15: Το ολοκληρωμένο γωνιόμετρο/τασίμετρο που έχει κατασκευασθεί. Η βιβλιοθήκη ανοικτού κώδικα *Aravis* εκτελείται στο μικρο - υπολογιστή *Raspberry Pi 3*, προκειμένου να ληφθεί η εικόνα του προφίλ της σταγόνας. Εν συνεχεία, τα άκρα της σταγόνας εντοπίζονται με τη μέθοδο *ADSA* μέσω του προγράμματος *DropToolKit* και, ακολούθως, δημιουργείται το σχήμα της σταγόνας.

Κεφάλαιο 4.6: Επίλογος

Εν κατακλείδι, το *DropToolKit* αποτελεί ένα λογισμικό, βασισμένο στη γλώσσα προγραμματισμού *Python*, το οποίο είναι συμβατό με τα λειτουργικά συστήματα *Microsoft Windows* και *Linux*. Η μόνη απαίτηση, για την εκτέλεση του προγράμματος είναι η διανομή *Anaconda* της γλώσσας *Python*, η οποία μπορεί να ληφθεί δωρεάν στην ιστοσελίδα <https://www.continuum.io/anaconda>. Το πρόγραμμα χρησιμοποιεί, μεταξύ άλλων, τις βιβλιοθήκες *SciPy* και *Matplotlib* που εμπεριέχονται στη διανομή αυτήν, για τη μαθηματική επεξεργασία και την οπτικοποίηση του προφίλ της σταγόνας, αντιστοίχως και δεν απαιτεί, όπως έχει ήδη αναφερθεί, την αρχικοποίηση των παραμέτρων του σχήματος της σταγόνας από το χρήστη. Αντιθέτως, η θέση (συντεταγμένες) της βάσης της σταγόνας, καθώς και το «κατώφλι» φωτεινότητας μπορούν να προβλεφθούν από το ίδιο το πρόγραμμα, όμως δίνεται η δυνατότητα στο χρήστη να ορίσει ο ίδιος τις παραμέτρους αυτές, εάν το επιθυμεί.

Το λογισμικό *DropToolKit* διατίθεται δωρεάν μέσω της άδειας χρήσης *Creative Commons/Non Commercial/No Derivative License (CC BY – NC – ND)*, ενώ η λήψη του μπορεί να πραγματοποιηθεί στην ιστοσελίδα <http://www.chemeng.ntua.gr/people/pathan/software.php>.

Προοπτικές για μελλοντική έρευνα

Η ανάλυση του σχήματος σταγόνων και η μέτρηση των επιθυμητών μεγεθών, με βάση τη μέθοδο της *Μέτρησης Σχήματος Αξονοσυμμετρικής Σταγόνας*, η οποία χρησιμοποιείται από το εξεταζόμενο λογισμικό, είναι δυνατόν να γίνει πιο εύκολη και άμεση, απλουστεύοντας ακόμη περισσότερο τη διάταξη που χρησιμοποιείται, μέχρι στιγμής, για τη μέτρηση και αναλύθηκε στο Κεφάλαιο 4.5.

Συγκεκριμένα, η εφαρμογή για το κινητό τηλέφωνο που δημιουργήθηκε στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, ενοποιεί όλα τα απαιτούμενα στάδια για τη μέτρηση, τα οποία είναι η λήψη της φωτογραφίας του προφίλ της σταγόνας, η συνολική επεξεργασία της μέσω του προγράμματος *DropToolKit* και τέλος, η εμφάνιση των υπολογισμένων μεγεθών. Συνεπώς, εάν γίνουν οι κατάλληλες τροποποιήσεις στη διάταξη, το κινητό τηλέφωνο μπορεί να αντικαταστήσει την κάμερα που χρησιμοποιείται για τη λήψη της εικόνας, καθώς επίσης και τον υπολογιστή και την οθόνη αφής, στοιχεία τα οποία χρησιμοποιούνται για την επεξεργασία της εικόνας και την εκτέλεση του προγράμματος. Με τον τρόπο αυτόν, είναι δυνατόν το βάρος και μέγεθος του χρησιμοποιούμενου *γωνιομέτρου/τασιμέτρου* να ελαττωθούν ακόμη περισσότερο, έτσι ώστε αυτό να μπορεί να μετακινηθεί ευκολότερα και, παράλληλα, η δομή του να γίνει πιο απλή, προκειμένου να μην απαιτούνται προχωρημένες γνώσεις, ώστε να το χειρισθεί κάποιος.

Αμέσως, λοιπόν, γίνεται φανερό το γεγονός ότι η δυνατότητα χρήσης του κινητού τηλεφώνου, την οποία συνεπάγεται η εφαρμογή, αποτελεί ένα σημαντικό πλεονέκτημα, το οποίο, στο μέλλον, θα μπορούσε να επιφέρει ριζικές αλλαγές στον τρόπο με τον οποίον γίνονται οι υπολογισμοί που αφορούν σε σταγόνες, μέσω της μεθόδου *ADSA* και να καταστήσει ευκολότερη και λιγότερο περίπλοκη τη διαδικασία πραγματοποίησης των υπολογισμών αυτών.

Παράρτημα

Μέρος Α: Οδηγός και παραδείγματα χρήσης του λογισμικού *DropToolKit* (Έκδοση 1.6)

1) Οδηγός Χρήσης του λογισμικού *DropToolKit*

Αρχικά – Βασικά προγράμματα και αρχεία του λογισμικού

Στον κυρίως φάκελο όπου έχει εγκατασταθεί το *DropToolKit*, μετά τη λήψη του, υπάρχουν δύο βασικά προγράμματα, γραμμένα σε γλώσσα προγραμματισμού *Python*, με ονομασίες *LoadShape.py* και *ProcessShape.py*. Επίσης, υπάρχουν και άλλα δύο αρχεία κειμένου, μέσω των οποίων γίνεται η επιλογή των τιμών των απαραίτητων παραμέτρων. Τα αρχεία αυτά ονομάζονται *LoadShape_Settings.txt* και *ProcessShape_Settings.txt*.

Εξαγωγή του σχήματος της σταγόνας από μία εικόνα του προφίλ της

Η εξαγωγή του σχήματος της σταγόνας πραγματοποιείται από τον κώδικα *LoadShape.py*. Οι παράμετροι της διαδικασίας αυτής μπορούν να τροποποιηθούν από το αρχείο κειμένου *LoadShape_Settings.txt*, το οποίο, ακόμη και σε περίπτωση που έχει διαγραφεί από το φάκελο εγκατάστασης του λογισμικού, θα δημιουργηθεί αυτομάτως μόλις εκτελεσθεί ο κώδικας.

Ο κώδικας εκτελείται, «ανοίγοντας» τη γραμμή εντολών (στο φάκελο, όπου είναι εγκατεστημένο το λογισμικό *DropToolKit*, διαφορετικά δε θα υπάρξει αποτέλεσμα) και γράφοντας την εντολή «*python LoadShape.py*». Μετά από μία επιτυχή εκτέλεση του κώδικα, δημιουργούνται τρία καινούρια

αρχεία κειμένου στον ίδιο φάκελο, τα *LeftShape.txt*, *RightShape.txt* και *ShapeInfo.txt*. Τα δύο πρώτα περιέχουν τις πολικές συντεταγμένες (πολικές γωνίες σε ακτίνια και κανονικοποιημένες ακτίνες - διαιρεμένες με την ακτίνα μίας σφαίρας που καταλαμβάνει τον ίδιο όγκο με την εξεταζόμενη σταγόνα) και περιγράφουν το σχήμα του αριστερού και δεξιού τμήματος, αντιστοίχως. Το τρίτο περιέχει πληροφορίες, σχετικές με το είδος της σταγόνας (επικαθήμενη ή κρεμάμενη) και τη θέση της βάσης της σταγόνας, για επικαθήμενες σταγόνες (ή τη θέση όπου η σταγόνα έρχεται σε επαφή με το σημείο απ' όπου κρέμεται, για κρεμάμενες σταγόνες). Τέλος, δημιουργείται και μία εικόνα, η οποία αποτελεί μορφοποιημένη έκδοση της αρχικής εικόνας του προφίλ της σταγόνας, με όνομα *Imported_Image.bmp*, όπου το προσδιορισμένο σχήμα της σταγόνας αναπαρίσταται με μία συνεχή πράσινη γραμμή, ενώ η βάση της ή το σημείο απ' όπου κρέμεται (για επικαθήμενες/κρεμάμενες σταγόνες, αντιστοίχως) αναπαρίσταται με μία οριζόντια συνεχή κόκκινη γραμμή.

Επιλογές - παράμετροι της διαδικασίας εξαγωγής της εικόνας

Οι απαιτούμενες παράμετροι που πρέπει να τεθούν ή να υποστούν επεξεργασία κατά το στάδιο της εξαγωγής του σχήματος της σταγόνας βρίσκονται εντός του αρχείου *LoadShape_Settings.txt* και είναι οι ακόλουθες.

PicturePath: Αποτελεί την πλήρη διαδρομή, όπου βρίσκεται αποθηκευμένη η εικόνα του προφίλ της σταγόνας, από την οποία θα προκύψει το σχήμα της, μέσω της διαδικασίας ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας.

Threshold: Το «κατώφλι» φωτεινότητας που χρησιμοποιείται από τη διαδικασία ανίχνευσης του περιγράμματος της σταγόνας. Δέχεται τιμές από 0 έως και 255. Τα εικονοστοιχεία που έχουν τιμή φωτεινότητας κάτω από την οριζόμενη τιμή θεωρείται ότι ανήκουν στη σταγόνα. Σε περίπτωση που στην παράμετρο αυτήν δοθεί η τιμή «None», το πρόγραμμα επιλέγει αυτομάτως την τιμή της.

BottomOfDroplet: Η απόσταση (σε όρους εικονοστοιχείων) μεταξύ του άκρου

της σταγόνας (δηλαδή της βάσης της ή του σημείου απ' όπου κρέμεται, αναλόγως με το είδος της) από την κορυφή της εικόνας. Και σε αυτήν την περίπτωση, εάν δοθεί η τιμή «None», το λογισμικό επιλέγει αυτομάτως την τιμή.

DropType: Υπάρχουν τρεις δυνατές τιμές για τη συγκεκριμένη παράμετρο, οι «Pendant drop», «Sessile drop» και «None». Στην τελευταία περίπτωση, η τιμή της παραμέτρου επιλέγεται και πάλι αυτομάτως από το πρόγραμμα.

FilterFactor: Η παράμετρος αυτή καθορίζει τη θολότητα της εικόνας. Εάν έχει την τιμή 0, τότε η εικόνα θα είναι πλήρως ευδιάκριτη. Όσο μεγαλώνει η τιμή της, τόσο πιο θολή γίνεται η προκύπτουσα εικόνα.

Enhance: Είναι μία λογική παράμετρος και δέχεται μόνο δύο τιμές, το 0 και το 1. Στην πρώτη περίπτωση, παραμένει απενεργοποιημένος ο αλγόριθμος βελτίωσης σχήματος, ενώ στη δεύτερη ενεργοποιείται. Όταν εξετάζεται μία επικαθήμενη σταγόνα, είναι προτιμότερο η παράμετρος αυτή να τίθεται ίση με 0, διαφορετικά μπορεί να καταστεί δύσκολος ο οπτικός διαχωρισμός του στερεού υποστρώματος από τη σταγόνα.

Έλεγχος των αποτελεσμάτων της εξαγωγής της εικόνας

«Ανοίγοντας» το αρχείο *Imported_Image.bmp*, ο χρήστης μπορεί να ελέγξει οπτικά το σχήμα της σταγόνας (πράσινη γραμμή) και τη θέση της βάσης ή του σημείου απ' όπου κρέμεται η σταγόνα (κόκκινη οριζόντια γραμμή), όπως αυτά προέκυψαν από την προηγούμενη διαδικασία. Εάν η θέση της γραμμής βάσης δεν είναι ικανοποιητική, ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να ορίσει μία καινούρια θέση στο αρχείο *LoadShape_Settings.txt* και να επανεκτελέσει τον κώδικα. Η αρχική θέση της γραμμής βάσης, η οποία έχει επιλεγεί από το λογισμικό, βρίσκεται στο αρχείο *ShapeInfo.txt*, υπό την ονομασία *BottomOfDroplet*.

Εναλλακτικά, μπορεί να χρησιμοποιηθεί κάποιο πρόγραμμα επεξεργασίας εικόνων, όπως η ενσωματωμένη «Ζωγραφική» στα *Microsoft Windows*, ή το πρόγραμμα *GIMP*, το οποίο μπορεί να ληφθεί από το σύνδεσμο <https://www.gimp.org/>, προκειμένου να αφαιρεθεί το τμήμα που αντιπροσωπεύει το στερεό υπόστρωμα (για επικαθήμενες σταγόνες) ή τη βελόνα (για κρεμάμενες σταγόνες).

Μαθηματική επεξεργασία του προσδιορισμένου σχήματος της σταγόνας - μέτρηση της επιφανειακής τάσης και της γωνίας επαφής

Η μαθηματική επεξεργασία του σχήματος της σταγόνας πραγματοποιείται με το δεύτερο βασικό κώδικα που βρίσκεται στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit*, δηλαδή τον *ProcessShape.py*. Ο κώδικας εκτελείται με τον ίδιον τρόπο που εκτελείται και ο *LoadShape.py*, δηλαδή «ανοίγοντας» τη γραμμή εντολών και πάλι στο φάκελο εγκατάστασης και γράφοντας την εντολή «*python ProcessShape.py*». Κατά την εκτέλεση του κώδικα, προσαρμόζεται το θεωρητικό σχήμα της σταγόνας (συγκεκριμένα, αυτό που προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης *Young - Laplace*) στα πειραματικά προσδιορισμένα σημεία. και, κατόπιν, υπολογίζεται και εμφανίζεται στη γραμμή εντολών η τιμή του αδιάστατου αριθμού *Bond*, N_g , ο οποίος αντανακλά την επίδραση της βαρύτητας στην εξίσωση *Young - Laplace*. Υπενθυμίζεται ότι $N_g = \frac{\Delta\rho g R_0^2}{\gamma_{LA}}$, όπου $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ είναι η βαρυτική σταθερά, $\Delta\rho$ είναι η διαφορά πυκνότητας (σε kg/m^3) μεταξύ του υγρού και του αέρα, R_0 είναι η ακτίνα (σε m) μίας σφαίρας με όγκο ίσο με αυτόν της σταγόνας και γ_{LA} είναι η επιφανειακή τάση του υγρού (σε N/m).

Οι συντεταγμένες του τελικού σχήματος της σταγόνας αποθηκεύονται στο αρχείο κειμένου *ShapeResult.txt*, το οποίο επίσης δημιουργείται κατά την εκτέλεση του κώδικα.

Παράμετροι της μαθηματικής επεξεργασίας του σχήματος της σταγόνας

Οι παράμετροι της μαθηματικής επεξεργασίας μπορούν να τροποποιηθούν από το αρχείο κειμένου με όνομα *ProcessShape_Settings.txt*, το οποίο βρίσκεται στον ίδιο φάκελο. Σε περίπτωση που το αρχείο αυτό έχει διαγραφεί με οποιονδήποτε τρόπο, δημιουργείται εκ νέου κατά την εκτέλεση του κώδικα *ProcessShape.py*.

Οι παράμετροι που περιλαμβάνονται στο αρχείο αυτό, καθώς και η χρησιμότητά τους αναλύονται παρακάτω.

ShapePath: Αποτελεί την ακριβή θέση του αρχείου κειμένου, το οποίο περιλαμβάνει τις συντεταγμένες των πειραματικά προσδιορισμένων σημείων του σχήματος της σταγόνας.

DropletVolume: Ο όγκος της σταγόνας (σε m^3). Μπορεί να της δοθεί και η τιμή «None», εάν ο όγκος της σταγόνας δεν είναι γνωστός. Σε αυτήν την περίπτωση, όμως, η επιφανειακή τάση δε θα υπολογισθεί.

DeltaRho: Η διαφορά πυκνότητας (σε kg/m^3) μεταξύ του υγρού και του περιβάλλοντος αέρα. Η τιμή αυτή χρησιμοποιείται στον υπολογισμό της επιφανειακής τάσης.

NPoints: Ο αριθμός των σημείων που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών. Συνιστάται η χρήση τουλάχιστον 100 σημείων, προκειμένου να είναι αρκετά ακριβή τα αποτελέσματα. Όσο αυξάνεται η τιμή της παραμέτρου αυτής, τόσο αυξάνεται η *ακρίβεια*, αλλά και ο απαιτούμενος *χρόνος εκτέλεσης*.

NgIni: Η αρχική τιμή του *βαρυτικού αριθμού Bond* (N_g), η οποία χρησιμοποιείται για την προσαρμογή του θεωρητικού σχήματος στα πειραματικά σημεία. Προτιμάται η χρήση της τιμής 0, ως αρχικής τιμής.

SecondParam: Είναι η αρχική τιμή της γωνίας επαφής (σε ακτίνια), για επικαθήμενες σταγόνες, ή της κανονικοποιημένης ακτίνας στη βάση της σταγόνας, για κρεμάμενες σταγόνες. Εάν της δοθεί η τιμή «None», το *DropToolKit* θα επιλέξει αυτομάτως την αρχική τιμή.

DisplayProgress: Αποτελεί μία λογική παράμετρο, με πιθανές τιμές «True» (Αληθής) ή «False» (Ψευδής). Εάν είναι αληθής, δεδομένου ότι έχει εγκατασταθεί και η βιβλιοθήκη *Matplotlib*, κατά την εκτέλεση του προγράμματος αναπαρίσταται και η πρόοδος - εξέλιξη της διαδικασίας προσαρμογής. Συγκεκριμένα, σχεδιάζεται μία κόκκινη γραμμή, η οποία αντιπροσωπεύει το προσαρμοσμένο θεωρητικό σχήμα και μία μπλε γραμμή, η οποία αντιπροσωπεύει το πειραματικό σχήμα, όπως προέκυψε από την εικόνα του προφίλ της σταγόνας.

FittingTol: Η τιμή του μέγιστου αποδεκτού σφάλματος για τον αλγόριθμο προσαρμογής. Η υπολογισμένη τιμή του αριθμού *Bond, N_g*, είναι ακριβέστερη, για μικρότερες τιμές αυτής της παραμέτρου.

MaxGeneratedShape: Ο μέγιστος επιτρεπτός αριθμός των διαφορετικών σχημάτων που δημιουργούνται από τον αλγόριθμο προσαρμογής, προκειμένου να αποφευχθεί η ύπαρξη πιθανού ατέρμονος βρόχου, εάν η τιμή του μέγιστου αποδεκτού σφάλματος είναι υπερβολικά χαμηλή.


SolverTol: Η τιμή του μέγιστου αποδεκτού σφάλματος για τον *solver* που δημιουργεί τα σχήματα. Όσο μειώνεται η τιμή αυτή, τόσο αυξάνεται η ακρίβεια του δημιουργούμενου σχήματος, αλλά και ο απαιτούμενος χρόνος εκτέλεσης.

MaxFunEval: Αποτελεί το μέγιστο αριθμό επαναλήψεων για την αντικειμενική συνάρτηση. Όταν ο αριθμός των επαναλήψεων υπερβεί τον αριθμό αυτόν, τότε διακόπτεται και η λειτουργία του *solver*.

Μαθηματική επεξεργασία του πειραματικού σχήματος μίας σταγόνας που έχει ληφθεί από διαφορετικό λογισμικό

Ο κώδικας *ProcessShape.py* μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για τη μαθηματική επεξεργασία ενός σχήματος σταγόνας, το οποίο έχει προκύψει από τη χρήση λογισμικού, διαφορετικού του *DropToolKit*, ακολουθώντας μία απλή διαδικασία.

Αρχικά, απαιτείται η μετατροπή, από το χρήστη, του σχήματος της σταγόνας σε *σύστημα πολικών συντεταγμένων*, με τη *γωνιακή συντεταγμένη* στο *όριο της σταγόνας* να είναι μηδέν. Υπενθυμίζεται ότι ως *όριο μίας σταγόνας* ορίζεται το ανώτερο σημείο - κορυφή της, εάν είναι επικαθήμενη, και το κατώτερο σημείο της, εάν είναι κρεμάμενη. Οι *γωνιακές συντεταγμένες* πρέπει να είναι εκπεφρασμένες σε ακτίνια και οι ακτίνες πρέπει να είναι κανονικοποιημένες, δηλαδή, διαιρεμένες με την ακτίνα μίας σφαίρας με όγκο ίσο με αυτόν της σταγόνας.

Τα δεδομένα αυτά, στη συνέχεια, πρέπει να αποθηκευθούν σε δύο αρχεία κειμένου, τα *RightShape.txt* και *LeftShape.txt*, για το δεξιό και αριστερό τμήμα της σταγόνας, αντιστοίχως, στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit*. Στα αρχεία αυτά, σε κάθε γραμμή, πρέπει να αναγράφονται οι πολικές συντεταγμένες (γωνιακή συντεταγμένη και κανονικοποιημένη ακτίνα) ενός σημείου, παρεμβάλλοντας ένα κενό (μέσω του πλήκτρου ) του πληκτρολογίου) μεταξύ τους. Τέλος, απαιτείται και η δημιουργία ενός ακόμη αρχείου κειμένου στον ίδιο φάκελο, του *ShapeInfo.txt*, όπου θα υπάρχει γραμμένη η λέξη «DropType=», ακολουθούμενη από τη φράση «Pendant drop» ή «Sessile Drop», αναλόγως με τον τύπο της εξεταζόμενης σταγόνας.

Μετά από τα προαναφερθέντα βήματα, η μαθηματική επεξεργασία του σχήματος της σταγόνας μπορεί να συνεχισθεί κανονικά, όπως αναλύθηκε προηγουμένως.

2) Παραδείγματα χρήσης του λογισμικού *DropToolKit*

Στην ενότητα αυτήν, θα αναφερθούν τα δύο πλέον χαρακτηριστικά παραδείγματα της χρήσης του λογισμικού *DropToolKit*, προκειμένου να γίνει περισσότερο κατανοητή από τον αναγνώστη η λειτουργία του.

Παράδειγμα 1^ο – Μέτρηση επιφανειακής τάσης κρεμάμενης σταγόνας

Στο φάκελο εγκατάστασης του προγράμματος υπάρχουν δύο εικόνες, προοριζόμενες για εξέταση της ορθής λειτουργίας του. Η μία εξ αυτών, υπό την ονομασία *Image_Water_Pendant.bmp*, απεικονίζει μία κρεμάμενη σταγόνα νερού, η οποία έχει όγκο 12,5 μL .

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί επεξεργασία της συγκεκριμένης εικόνας, πρέπει να δοθεί η τιμή «*Image_Water_Pendant.bmp*» στην παράμετρο *PicturePath* του αρχείου *LoadShape_Settings.txt*. Στη συνέχεια, εκτελείται ο κώδικας *LoadShape.py*, με τον τρόπο που αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα, δημιουργώντας τα αντίστοιχα αρχεία. Κατά την εκτέλεση, η θέση της γραμμής βάσης της σταγόνας, καθώς και το είδος της, επιλέγονται αυτομάτως από το πρόγραμμα. Τα δύο αρχεία, *Image_Water_Pendant.bmp* (αρχικά ληφθείσα εικόνα του προφίλ της σταγόνας) και *Imported_Image.bmp* (προσδιορισμένο σχήμα της σταγόνας), φαίνονται στην Εικόνα 16.



Εικόνα 16: Απεικόνιση των δύο εικόνων (*Image_Water_Pendant.bmp* - υπάρχει ήδη στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit* και *Imported_Image.bmp* - δημιουργείται μετά την εκτέλεση του κώδικα *LoadShape.py*) του προφίλ της κρεμάμενης σταγόνας.

Το επόμενο βήμα, στην περίπτωση ανάλυσης μίας κρεμάμενης

σταγόνας είναι ο ορισμός του όγκου της, ώστε να υπολογισθεί η επιφανειακή της τάση. Αυτός συντελείται, μεταβάλλοντας την τιμή της παραμέτρου *DropletVolume* στο αρχείο *ProcessShape_Settings.txt*. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η τιμή που δίδεται στην παράμετρο αυτήν είναι 12.5×10^{-9} , καθώς απαιτείται ο ορισμός της τιμής της σε κυβικά μέτρα. Κατόπιν, εκτελείται και ο κώδικας *ProcessShape.py* και, μόλις ολοκληρωθεί η διαδικασία της προσαρμογής του σχήματος, εμφανίζεται και η τιμή της επιφανειακής τάσης του υγρού στη γραμμή εντολών, η οποία, εν προκειμένω, είναι ίση με 0,07107 N/m. Στην Εικόνα 17, απεικονίζεται η συνολική εκτέλεση του προγράμματος μέσω της γραμμής εντολών, με σαφή διάκριση των επιμέρους βημάτων.

```

Microsoft Windows [Version 10.0.17134.112]
(c) 2018 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Users\theodore>cd C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit
C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit>python LoadShape.py
C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit>python ProcessShape.py
Success : The shape was fitted correctly

The least square fitting algorithm terminated with status :
Both actual and predicted relative reductions in the sum of squares
are at most 0.000000 and the relative error between two consecutive iterates is at
most 0.000000

Ng = 0.2861
Surface tension (N/m) = 0.07107

C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit>

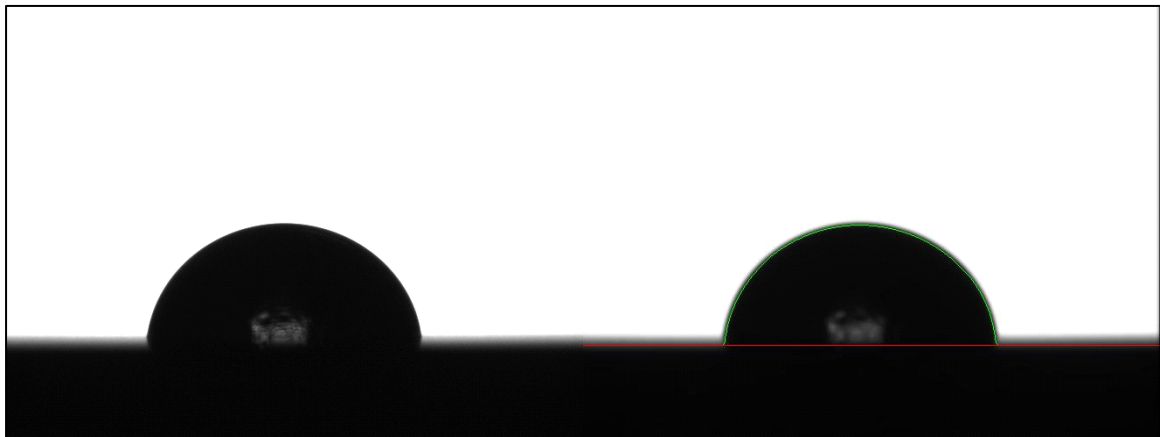
```

Εικόνα 17: Η συνολική εκτέλεση του προγράμματος *DropToolKit*, μέσω της γραμμής εντολών, και η εμφάνιση των αποτελεσμάτων, για την περίπτωση της κρεμάμενης σταγόνας.

Παράδειγμα 2^ο – Μέτρηση γωνίας επαφής επικαθήμενης σταγόνας

Η δεύτερη εικόνα που υπάρχει ήδη στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit* ονομάζεται «*Image_Water_Sessile.bmp*» και απεικονίζει μία σταγόνα νερού, η οποία βρίσκεται πάνω σε στερεό υπόστρωμα αλουμινίου.

Αυτή τη φορά, λοιπόν, η παράμετρος *PicturePath* του αρχείου *LoadShape_Settings.txt* λαμβάνει την τιμή *Image_Water_Sessile.bmp* και, κατόπιν, εκτελείται εκ νέου ο κώδικας *LoadShape.py*, με το γνωστό, πλέον, τρόπο, μέσω της γραμμής εντολών. Το προκύπτον σχήμα της σταγόνας αποθηκεύεται και πάλι στο αρχείο *Imported_Image.bmp* και, μαζί με την αρχική εικόνα, φαίνεται στην Εικόνα 18.



Εικόνα 18: Απεικόνιση των δύο εικόνων (Image_Water_Sessile.bmp - υπάρχει ήδη στο φάκελο εγκατάστασης του DropToolKit και Imported_Image.bmp - δημιουργείται μετά την εκτέλεση του κώδικα LoadShape.py) του προφίλ της επικαθήμενης σταγόνας.

Ακολουθεί η μαθηματική επεξεργασία του σχήματος της σταγόνας, μέσω της εκτέλεσης του κώδικα *ProcessShape.py*. Μετά την εκτέλεση του κώδικα αυτού και την επιτυχή προσαρμογή του σχήματος της σταγόνας, υπολογίζεται και εμφανίζεται στη γραμμή εντολών η *γωνία επαφής Young*, η οποία, για τη σταγόνα της δοκιμής είναι ίση με 85,734 μοίρες, όπως γίνεται φανερό στην *Εικόνα 19*. Σημειώνεται ότι, λόγω του ότι ο όγκος της σταγόνας δεν είναι γνωστός, στη συγκεκριμένη περίπτωση, δεν είναι δυνατός ο υπολογισμός της επιφανειακής της τάσης.

```

Microsoft Windows [Version 10.0.17134.112]
(c) 2018 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Users\theodore>cd C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit
C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit>python LoadShape.py
C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit>python ProcessShape.py
Success : The shape was fitted correctly

The least square fitting algorithm terminated with status :
Both actual and predicted relative reductions in the sum of squares
are at most 0.000000

Ng = 0.1844
Contact angle (Degrees) = 85.734
C:\Users\theodore\Desktop\DropToolKit>

```

ορισμός του φακέλου εγκατάστασης του DropToolKit

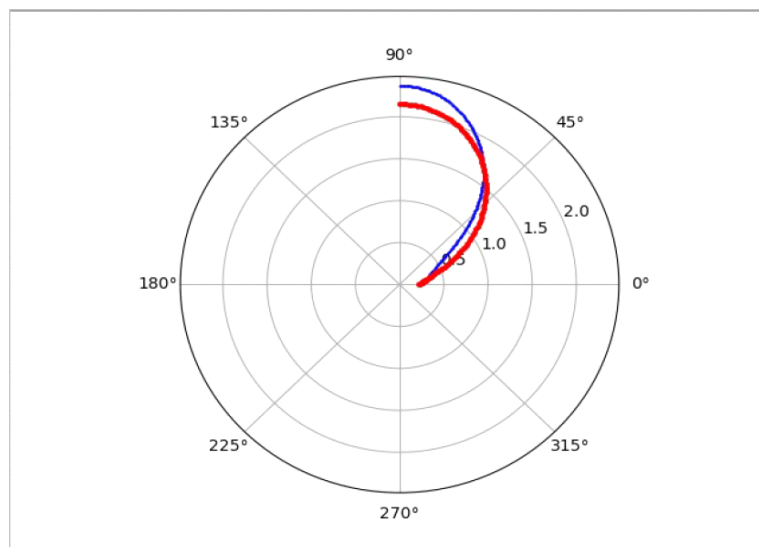
εκτέλεση του κώδικα LoadShape.py

εκτέλεση του κώδικα ProcessShape.py

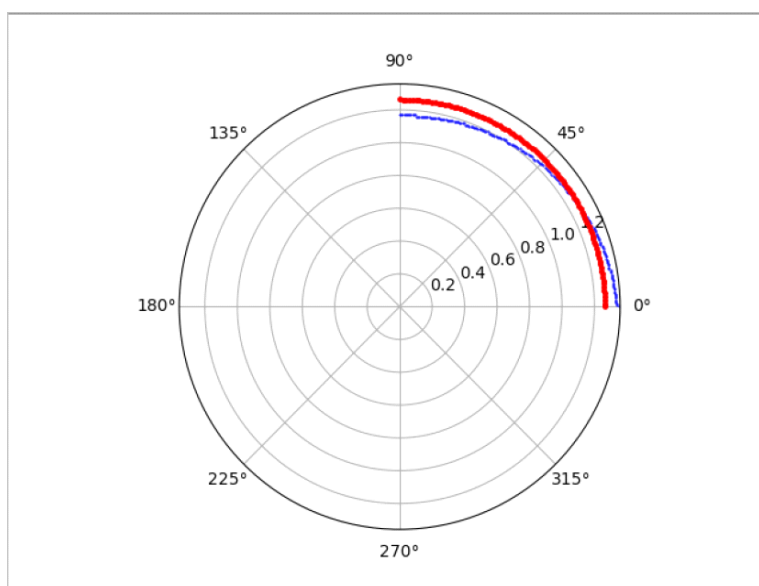
εμφάνιση αποτελεσμάτων

Εικόνα 19: Η συνολική εκτέλεση του προγράμματος DropToolKit, μέσω της γραμμής εντολών, και η εμφάνιση των αποτελεσμάτων, για την περίπτωση της επικαθήμενης σταγόνας.

Τέλος, στις Εικόνες 20 και 21 απεικονίζεται η πρόοδος της προσαρμογής του θεωρητικού σχήματος (λύσης της εξίσωσης *Young - Laplace*) στο πειραματικό σχήμα της σταγόνας και για τις δύο περιπτώσεις σταγόνων (κρεμάμενη και επικαθήμενη σταγόνα, αντιστοίχως), όταν η παράμετρος *DisplayProgress* του αρχείου *ProcessShape_Settings.txt* είναι ενεργοποιημένη, δηλαδή έχει λάβει την τιμή *True* και έχει εγκατασταθεί η βιβλιοθήκη *Matplotlib*. Στις εικόνες αυτές, η κόκκινη γραμμή αναπαριστά το θεωρητικό προφίλ της σταγόνας, ενώ η μπλε το πειραματικά προσδιορισμένο.



Εικόνα 20: Αναπαράσταση της εξέλιξης της προσαρμογής του θεωρητικού σχήματος κρεμάμενης σταγόνας στο πειραματικό.



Εικόνα 21: Αναπαράσταση της εξέλιξης της προσαρμογής του θεωρητικού σχήματος επικαθήμενης σταγόνας στο πειραματικό.

Μέρος Β: Οδηγός και παράδειγμα χρήσης της ανεπτυγμένης εφαρμογής για το κινητό τηλέφωνο

1) Οδηγός χρήσης

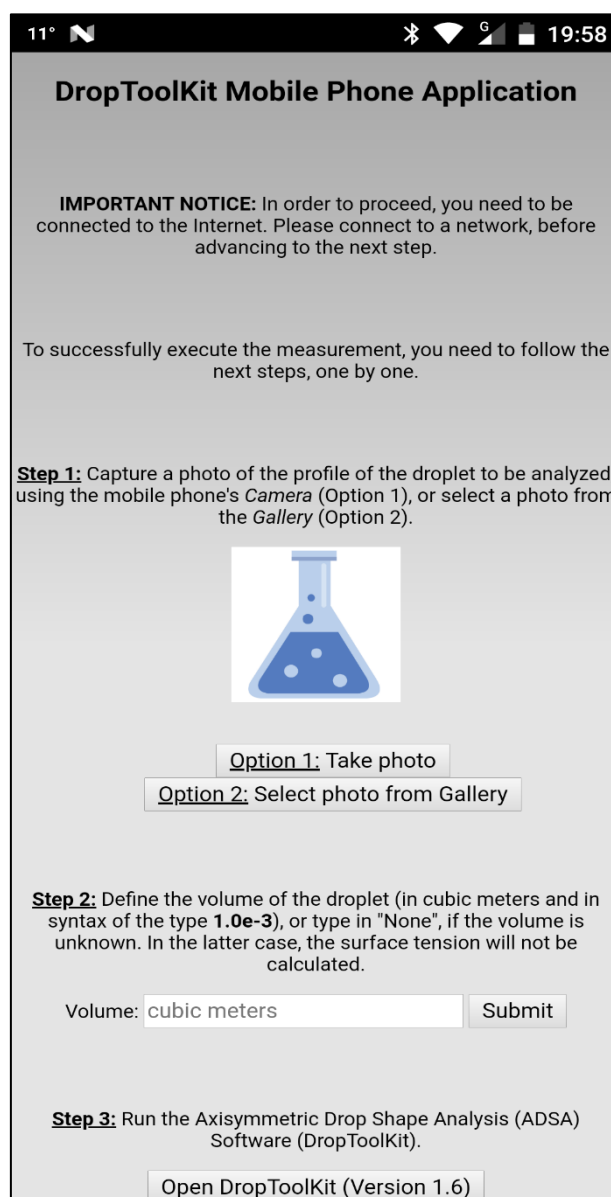
Γενικά Στοιχεία

Όπως αναφέρθηκε νωρίτερα, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, αναπτύχθηκε μία εφαρμογή, υπό την ονομασία *DropApp*, η οποία προορίζεται για χρήση του λογισμικού *DropToolKit*, μέσω κινητού τηλεφώνου. Στόχος είναι, μέσω της εφαρμογής αυτής, να συνδυασθεί η αποτελεσματικότητα και ακρίβεια υπολογισμών του *DropToolKit* με το πλεονέκτημα της φορητότητας ενός κινητού τηλεφώνου.

Κατ' αυτόν τον τρόπο, ο χρήστης θα μπορεί να κάνει επιτόπου τους υπολογισμούς της γωνίας επαφής, του *αριθμού Bond* και της επιφανειακής τάσης, λαμβάνοντας μία φωτογραφία με την κάμερα του κινητού τηλεφώνου του, ή επιλέγοντας μία ήδη ληφθείσα από τη συλλογή του. Η εφαρμογή διατίθεται (μέχρι στιγμής) για το λειτουργικό σύστημα *Android*, καθώς αυτό αποτελεί το πιο διαδεδομένο λειτουργικό σύστημα για κινητά τηλέφωνα, ενώ στο μέλλον θα γίνει προσπάθεια διάθεσής της και για τα λειτουργικά συστήματα *iOS* και *Windows Phone*.

Μία πρώτη ματιά στην εφαρμογή – Οδηγίες χρήσης

Η διεπαφή χρήστη της εφαρμογής φαίνεται στην Εικόνα 22.




11° 19:58

DropToolKit Mobile Phone Application

IMPORTANT NOTICE: In order to proceed, you need to be connected to the Internet. Please connect to a network, before advancing to the next step.

To successfully execute the measurement, you need to follow the next steps, one by one.

Step 1: Capture a photo of the profile of the droplet to be analyzed, using the mobile phone's *Camera* (Option 1), or select a photo from the *Gallery* (Option 2).



Option 1: Take photo

Option 2: Select photo from Gallery

Step 2: Define the volume of the droplet (in cubic meters and in syntax of the type **1.0e-3**), or type in "None", if the volume is unknown. In the latter case, the surface tension will not be calculated.

Volume:

Step 3: Run the Axisymmetric Drop Shape Analysis (ADSA) Software (DropToolKit).

Εικόνα 22: Απεικόνιση της διεπαφής χρήστη της εφαρμογής.

Η πρώτη γραμμή είναι ο τίτλος της εφαρμογής και οι δύο παράγραφοι που ακολουθούν ενημερώνουν το χρήστη σχετικά με την ορθή χρήση της.

Πιο συγκεκριμένα, είναι απαραίτητη η σύνδεση στο Διαδίκτυο, καθώς η επεξεργασία της εικόνας πραγματοποιείται μέσω ενός διακομιστή, συγκεκριμένα, μέσω του <http://meton.chemeng.ntua.gr/>, όπου υπάρχει και φάκελος, που περιέχει το λογισμικό *DropToolKit* και τα προγράμματα και

αρχεία που το συνοδεύουν.

Επίσης, τα βήματα πρέπει να ακολουθηθούν πιστά και με τη δοθείσα σειρά, διαφορετικά δε θα υπάρξει το επιθυμητό αποτέλεσμα. Τα βήματα αυτά είναι:

Βήμα 1: Λήψη φωτογραφίας με την Κάμερα/Επιλογή φωτογραφίας από τη Συλλογή. Ο χρήστης, πατώντας το κατάλληλο κουμπί, θα πρέπει είτε να «τραβήξει» μία φωτογραφία της εξεταζόμενης σταγόνας, είτε να επιλέξει μία παλαιότερη ληφθείσα φωτογραφία, η οποία έχει αποθηκευθεί στο κινητό. Πατώντας το αριστερό κουμπί, η εφαρμογή λαμβάνει πρόσβαση στην κάμερα του κινητού, ενώ πατώντας το δεξιό κουμπί, η εφαρμογή «ανοίγει» τη Συλλογή του κινητού, όπου είναι αποθηκευμένες οι φωτογραφίες. Σε αυτήν την περίπτωση, δίδεται η δυνατότητα στο χρήστη να προχωρήσει σε περικοπή της επιλεγείσας εικόνας, εάν το επιθυμεί.

Και στις δύο περιπτώσεις, θα ακολουθήσει αποστολή της εικόνας στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit* που υπάρχει στο διακομιστή και αντίστοιχη ενημέρωση της εφαρμογής προς το χρήστη, σχετικά με την επιτυχή ή ανεπιτυχή αποστολή της. Εάν η αποστολή είναι επιτυχής, η εικόνα που θα προκύψει (είτε αυτή λήφθηκε από την Κάμερα, είτε επιλέχθηκε από τη Συλλογή), θα αντικαταστήσει την εικόνα της κωνικής φιάλης, η οποία υπάρχει κάτω από την περιγραφή του βήματος. Σε διαφορετική περίπτωση, θα πρέπει να επαναληφθεί η λήψη ή επιλογή της εικόνας.

Εκτός αυτού, όταν η αποστολή της εικόνας στο διακομιστή είναι επιτυχής, η εικόνα που αποστέλλεται σε αυτόν, αποθηκεύεται με μία συγκεκριμένη ονομασία, η οποία ορίζεται κάθε φορά από την εφαρμογή. Κατόπιν, η εφαρμογή αυτομάτως τροποποιεί το αρχείο παραμέτρων *LoadShape_Settings.txt*, το οποίο βρίσκεται στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit* στο διακομιστή, θέτοντας την παράμετρο *PicturePath* ίση με την ονομασία αυτήν, έτσι ώστε να πραγματοποιείται ανάλυση της σωστής εικόνας κάθε φορά.

Βήμα 2: Ορισμός του όγκου της σταγόνας. Στο βήμα αυτό, ο χρήστης καλείται να εισαγάγει την τιμή του όγκου της σταγόνας, σε μορφή του τύπου $1.0e-3$, καθώς απαιτείται ο ορισμός του όγκου σε κυβικά μέτρα. Εάν ο όγκος της σταγόνας είναι άγνωστος, ο χρήστης θα πρέπει να εισαγάγει την τιμή «None», ωστόσο, σε αυτήν την περίπτωση δε θα είναι δυνατός ο υπολογισμός της επιφανειακής τάσης.

Μετά την καταχώρηση της τιμής, ο χρήστης θα πρέπει να πατήσει το κουμπί «*Submit*». Μόλις γίνει αυτό, η εφαρμογή «διαβάζει» την τιμή που δόθηκε και τροποποιεί αυτομάτως το αρχείο παραμέτρων *ProcessShape_Settings.txt*, το οποίο βρίσκεται στο φάκελο εγκατάστασης του *DropToolKit* στο διακομιστή, αλλάζοντας την τιμή της παραμέτρου *DropletVolume* και θέτοντάς την ίση με την τιμή αυτήν.

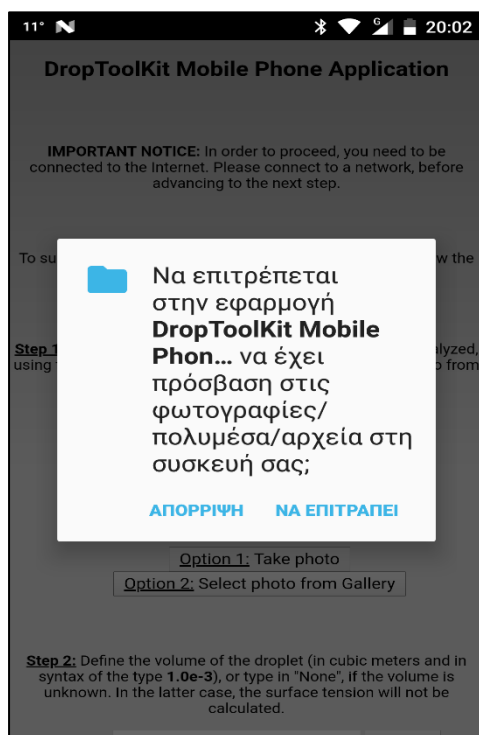
Βήμα 3: Εκτέλεση του λογισμικού *DropToolKit*. Στο βήμα αυτό, ο χρήστης, πατώντας το κουμπί «*Open DropToolKit (Version 1.6)*», ανοίγει μία καινούρια σελίδα, όπου υπάρχει μία υποτυπώδης εισαγωγή στη λειτουργία και τις βασικές αρχές του λογισμικού. Στη σελίδα αυτήν, ο χρήστης θα πρέπει να πατήσει εκ νέου το κουμπί «*Execute DropToolKit (Version 1.6)*», προκειμένου να «τρέξει» το πρόγραμμα.

Πατώντας το κουμπί αυτό, ο χρήστης οδηγείται σε μία νέα σελίδα, οπού, αφού παρέλθει κάποιο χρονικό διάστημα, θα εμφανισθούν τελικά, τα αποτελέσματα της επεξεργασίας της εικόνας, δηλαδή το σχήμα που ανιχνεύθηκε, ο *αριθμός Bond*, η γωνία επαφής (εάν πρόκειται για επικαθήμενη σταγόνα) και η επιφανειακή τάση (εάν έχει ορισθεί τιμή όγκου από το χρήστη).

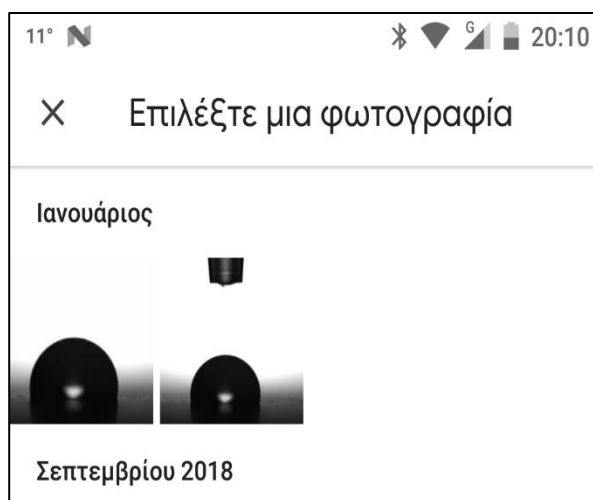
Στο σημείο αυτό, πρέπει να αναφερθεί ότι ο αυθεντικός κώδικας *ProcessShape.py* έχει υποστεί επεξεργασία, προκειμένου να μην τυπώνει τα αποτελέσματα σε γραμμή εντολών (όπως συνέβαινε στην αρχή), αλλά να τα καταχωρεί σε ένα αρχείο κειμένου, το οποίο στη συνέχεια, χρησιμοποιείται από την εφαρμογή, προκειμένου να τα «διαβάσει» και να τα παρουσιάσει στο χρήστη. Ο τροποποιημένος κώδικας που υπάρχει ήδη στο φάκελο εγκατάστασης του προγράμματος στο διακομιστή και χρησιμοποιείται από την εφαρμογή έχει την ονομασία *ProcessShape_To_Output.py*.

2) Παράδειγμα χρήσης της εφαρμογής

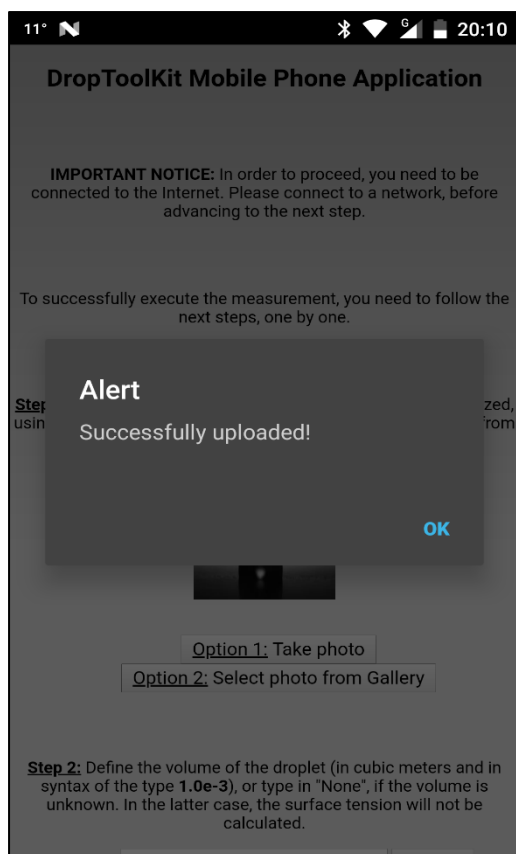
Ακολουθεί ένα παράδειγμα χρήσης της εφαρμογής. Το παράδειγμα αυτό αφορά σε περίπτωση επικαθήμενης σταγόνας, καθώς αυτή περιλαμβάνει και τα τρία ζητούμενα μεγέθη (*αριθμός Bond*, γωνία επαφής, επιφανειακή τάση). Η όλη διαδικασία χρήσης της εφαρμογής, σύμφωνα με όσα αναφέρθηκαν στην προηγούμενη ενότητα, γίνεται σαφής στις επόμενες εικόνες (*Εικόνες 23 – 29*).



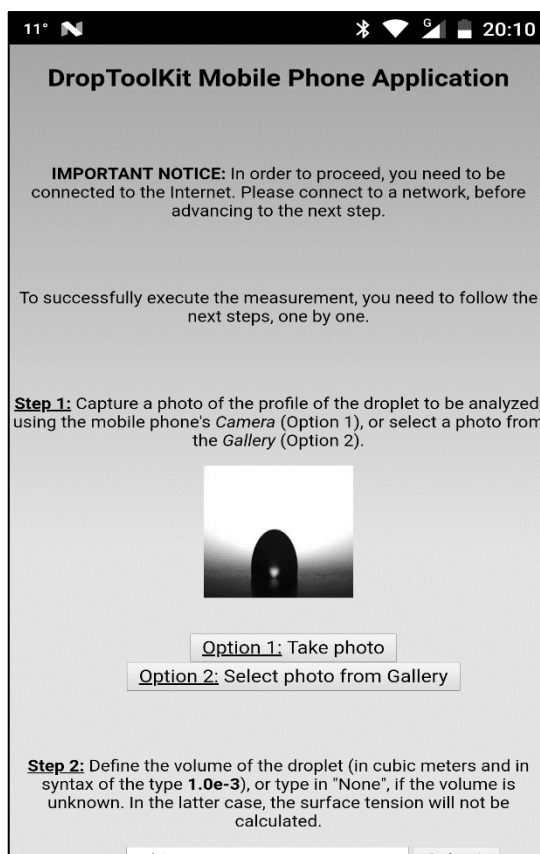
Εικόνα 23: Αίτηση πρόσβασης στη Συλλογή του κινητού από την εφαρμογή.



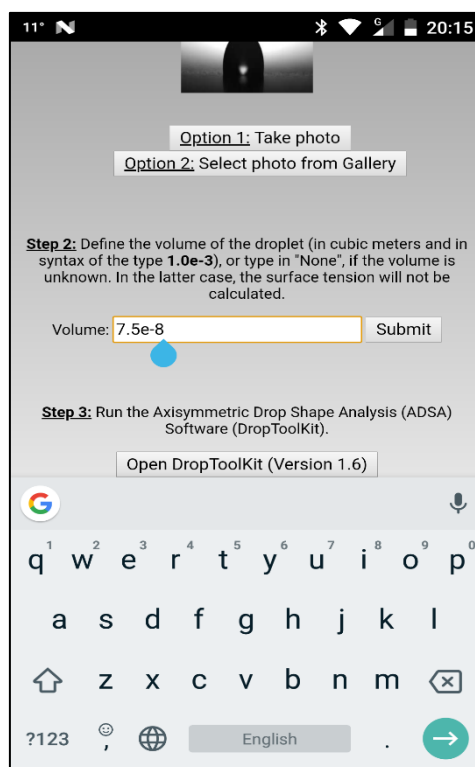
Εικόνα 24: Διαδικασία επιλογής της επιθυμητής φωτογραφίας από τη Συλλογή του κινητού.



Εικόνα 25: Ενημέρωση της εφαρμογής προς το χρήστη, για επιτυχή αποστολή της εικόνας στο διακομιστή.



Εικόνα 26: Προεπισκόπηση της εικόνας που επιλέχθηκε στο κυρίως μενού της εφαρμογής.



Εικόνα 27: Ορισμός του όγκου της σταγόνας.

Axisymmetric Drop Shape Analysis Software - A Brief Introduction

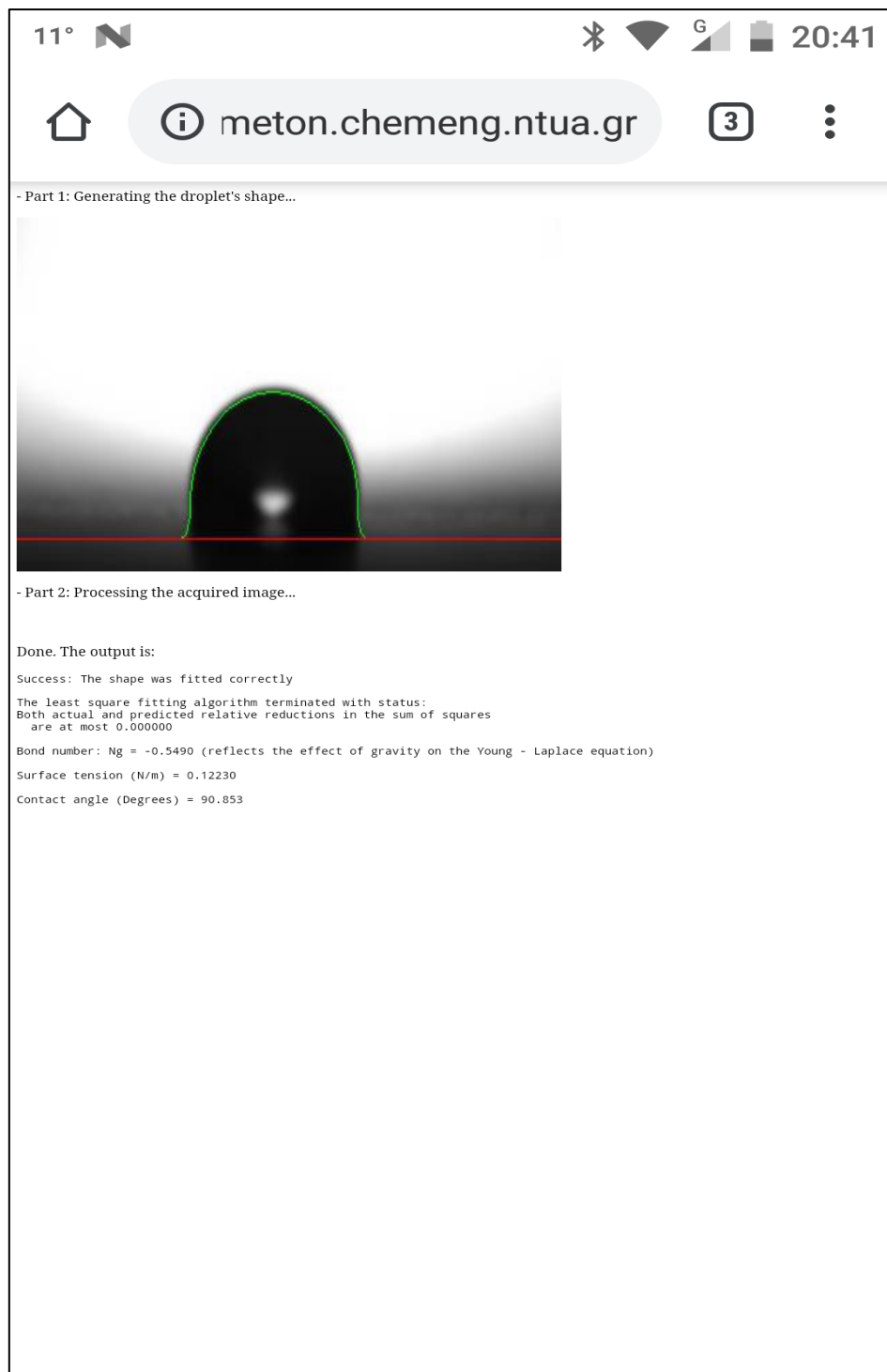
The software analyzed, DropToolKit, has been developed, in order to measure the Bond number and the surface tension of a droplet of known volume and density, using the Axisymmetric Drop Shape Analysis (ADSA) method. In case the droplet is sessile, the Young's contact angle is also calculated and displayed.

This happens, by initially acquiring the experimental shape of a (sessile or pendant) droplet from a side - view image.

Consequently, the edge of the droplet's shape is detected, via a modified version of the threshold method, and, finally, the extracted experimental shape is processed mathematically, in order to calculate the desired quantities.

Execute DropToolKit (Version 1.6)

Εικόνα 28: Η ιστοσελίδα, στην οποία οδηγείται ο χρήστης, αφού πατήσει το πλήκτρο «Open DropToolKit (Version 1.6)», που βρίσκεται στο τέλος της εφαρμογής. Η σελίδα αυτή περιλαμβάνει μία σύντομη εισαγωγή στο πρόγραμμα DropToolKit, ενώ, αν πατηθεί το πλήκτρο “Execute DropToolKit (Version 1.6)” που υπάρχει στην κάτω πλευρά, αυτομάτως θα εκτελεσθούν οι αλγόριθμοι που δίνουν τα επιθυμητά αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα αυτά, για το συγκεκριμένο παράδειγμα, απεικονίζονται στην Εικόνα 29.



Εικόνα 29: Τα συνολικά αποτελέσματα που δίνει το πρόγραμμα DropToolKit, μέσω της εφαρμογής, για το συγκεκριμένο παράδειγμα.

Βιβλιογραφία

- [1] Bashforth, F., and Adams, J. C. (1892). *An Attempt to Test the Theory of Capillary Action*. Cambridge: Cambridge University Press and Deighton Bell & Co.
- [2] Fordham, S. (1948). On the calculation of surface tension from measurements of pendant drops. *Proceedings of the Royal Society of London A* (Vol. 194, pp. 1 – 16). Royal Society.
- [3] Padday, J. F., Matijevic, E., and Eirich, F. R. (1969). *Journal of Colloid and Interface Science* (Vol. 1, pp. 39 – 251). New York: Wiley – Interscience.
- [4] Stauffer, C. E. (1965). The Measurement of Surface Tension by the Pendant Drop Technique. *The Journal of Physical Chemistry* (vol. 69, pp. 1933 – 1938). ACS Publications.
- [5] Malcolm, J. D., and Paynter (1981). Simultaneous determination of contact angle and interfacial tension from sessile drop measurements. *Journal of Colloid and Interface Science* (Vol. 82, pp. 269 – 275). Elsevier.
- [6] Maze, C., and Burnet, G. (1969). A non – linear regression method for calculating surface tension and contact angle from the shape of a sessile drop. *Surface Science* (Vol. 13, pp. 451 – 470).
- [7] Maze, C., and Burnet, G. (1971). Modifications of a non – linear regression technique used to calculate surface tension from sessile drops. *Surface Science* (Vol. 24, pp. 335 – 342). North Holland Publishing Company.
- [8] Ortega, J. M., and Rheinboldt, W. C. (1970). *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. New York: Academic Press.
- [9] Rotenberg, Y., Boruvka, L., and Neumann, A. W. (1983). Determination of surface tension and contact angle from the shapes of axisymmetric fluid interfaces. *Journal of Colloid and Interface Science* (Vol. 93, pp. 169 – 183). Elsevier.
- [10] Cheng, P., Li, D., Boruvka, L., Rotenberg, Y., and Neumann, A. W. (1990). Automation of axisymmetric drop shape analysis for measurements of interfacial tensions and contact angles. *Colloids and Surfaces* (Vol. 43, pp. 151 – 167). Elsevier.

- [11] Atae – Allah, C., Cabrerizo – Vílchez, M., Gómez – Lopera, J. F., Holgado – Terriza, J. A., Román – Roldán, R., and Luque – Escamilla, P. L. (2001). Measurement of surface tension and contact angle using entropic edge detection. *Measurement Science and Technology* (Vol. 12, pp. 288 – 298). IOP Publishing Ltd.
- [12] Cabezas, M. G., Bateni, A., Montanero, J. M., and Neumann, A. W. (2004). A new drop – shape methodology for surface tension measurement. *Applied Surface Science* (Vol. 238, pp. 480 – 484). Elsevier.
- [13] Hoorfar, M., and Neumann, A. W. (2004). Axisymmetric drop shape analysis (ADSA) for the determination of surface tension and contact angle. *The Journal of Adhesion* (Vol. 80, pp. 727 – 743). Taylor & Francis.
- [14] Zuo, Y. Y., Do, C., and Neumann, A. W. (2007). Automatic measurement of surface tension from noisy images using a component labeling method. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (Vol. 299, pp. 109 – 116). Elsevier.
- [15] Adamson, A. W., and Gast, A. P. (1997). *Physical Chemistry of Surfaces*. New York: Wiley.
- [16] Neumann, A. W., and Spelt, J. K. (1996). *Applied Surface Thermodynamics*. New York: Marcel Dekker Inc.
- [17] Stalder, A. F., Kulik, G., Sage, D., Barbieri, L., and Hoffmann, P. (2006). A snake-based approach to accurate determination of both contact points and contact angles. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (Vol. 286, pp. 92 – 103). Elsevier.
- [18] Yang, M. – W., and Lin, S. – Y. (2003). A method for correcting the contact angle from the $\theta/2$ method. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (Vol. 220, pp. 199 – 210). Elsevier.
- [19] Ehrlich, R. (1968). An alternative method for computing contact angle from the dimensions of a small sessile drop. *Journal of Colloid and Interface Science* (Vol. 28, pp. 5 – 9). Elsevier.
- [20] Shanahan, M. E. R. (1984). Profile and contact angle of small sessile drops. A more general approximate solution. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1: Physical Chemistry in Condensed Phases* (Vol. 80, pp. 37 – 45).
- [21] Kissa, E. (1996). Wetting and Wicking. *Textile Research Journal* (Vol. 66, pp. 660 – 668). SAGE Publications.
- [22] Fuerstenau, D. W., and Diao, J. (1992). Characterization of coal oxidation and coal wetting behavior by film flotation. *Coal Preparation* (Vol. 10, pp. 1 – 17).

- [23] Kalantarian, A., Saad, S. M. I., and Neumann, A. W. (2013). Accuracy of surface tension measurement from drop shapes: The role of image analysis. *Advances in Colloid and Interface Science* (Vol. 199, pp. 15 – 22). Elsevier.
- [24] Song, B., and Springer, J. (1996). Determination of interfacial tension from the profile of a pendant drop using computer – aided image processing: 2. Experimental. *Journal of Colloid and Interface Science* (Vol. 184, pp. 77 – 91). Elsevier.
- [25] Girault, H. H., Schiffrin, D. J., and Smith, B. D. V. (1982). Drop image processing for surface and interfacial tension measurements. *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry* (Vol. 137, pp. 207 – 217). Elsevier.
- [26] Prewitt, J. M. S. (1970). Object enhancement and extraction. *Picture Processing and Psychopictorics* (Vol. 10, pp. 15 – 19). Elsevier.
- [27] Duda, R. O., and Hart, P. E. (1973). *Pattern Classification and Scene Analysis*. Wiley.
- [28] Abramowitz, M., and Stegun, I. A. (1966). Handbook of mathematical functions. *Applied Mathematics Series* (Vol. 55, p. 84).
- [29] Smith, G. D. (1985). *Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods*. Oxford University Press.
- [30] Levenberg, K. (1944). A method for the solution of certain non – linear problems in least squares. *Quarterly of Applied Mathematics* (Vol 2, pp. 164 – 168). Brown University Publications.
- [31] Stöcker, H., and Harris, J. W. (1998). *Handbook of mathematics and computational science*. New York: Springer Verlag.
- [32] Stalder, A. F., Melchior, T., Müller, M., Sage, D., Blu, T., and Unser, M. (2010). Low – bond axisymmetric drop shape analysis for surface tension and contact angle measurements of sessile drops. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* (Vol. 364, pp. 72 – 81). Elsevier.
- [33] Daerr, A., and Mogne, A. (2016). An ImageJ plugin to measure the surface tension from an image of a pendent drop. *Journal of Open Research Software* (Vol. 4). Ubiquity Press.
- [34] McAuley, S. A., Ashraf, H., Atabo, L., Chambers, A., Hall, S., Hopkins, J., and Nicholls, G. (2001). Silicon micromachining using a high – density plasma source. *Journal of Physics D: Applied Physics* (Vol. 34, pp. 2769 – 2774). IOP Publishing Ltd.
- [35] Barthlott, W., and Neinhuis, C. (1997). Purity of the sacred lotus, or escape from contamination in biological surfaces. *Planta* (Vol. 202, pp. 1 – 8). Springer Verlag.

- [36] Fedrizzi, M., and Soria, J. (2015). Application of a single – board computer as a low – cost pulse generator. *Measurement Science and Technology* (Vol. 26). IOP Publishing Ltd.
- [37] Greenville, A. C., and Emery, N. J. (2016). Gathering lots of data on a small budget. *Science* (Vol. 353, pp. 1360 – 1361).
- [38] Kuziek, J. W. P., Shienh, A., and Mathewson, K. E. (2017). Transitioning EEG experiments away from the laboratory using a Raspberry Pi 2. *Journal of Neuroscience Methods* (Vol. 277, pp. 75 – 82). Elsevier.
- [39] Berry, J. D., Neeson, M. J., Dagastine, R. R., Chan, D. Y. C., and Tabor, R. F. (2015). Measurement of surface and interfacial tension using pendant drop tensiometry. *Journal of Colloid and Interface Science* (Vol. 454, pp. 226 – 237). Elsevier.
- [40] Drelich, J., Fang, C., and White, C. L. (2002). Measurement of interfacial tension in fluid – fluid systems. *Encyclopedia of Surface and Colloid Science* (Vol. 4, pp. 3152 – 3166). Marcel Dekker Inc.
- [41] Favier, B., Chamakos, N. T., and Papathanasiou, A. G. (2017). A precise goniometer/tensiometer using a low cost single – board computer. *Measurement Science and Technology* (Vol. 28). IOP Publishing Ltd.