



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI GENOVA
SCUOLA POLITECNICA

Modello asintotico per la descrizione
del moto di un film liquido capillare
su un piano inclinato

Daniele Alessandro Colletti

Tesi per il conseguimento della Laurea Triennale

in

INGEGNERIA MECCANICA

Anno accademico 2012/2013

Ottobre 2013

Relatore:

Chiar.mo Prof. Alessandro Bottaro

An asymptotic model to describe a flowing capillary film down an inclined plate

Abstract

We present a numerical model for describing a thin film flowing down an inclined plate. After a first chapter of introduction to the physical problem, we describe step by step the resolution of the model equations (issued from the Navier-Stokes problem) adopting proper boundaries conditions and a long-wave approximation. We consider two separate functions for film height and velocity. Then, we solve these equations transforming the Partial-Differential-Equations in a system of ordinary differential equations in space and time with a finite difference approximation. The model, developed in Matlab, allows us to study the behaviour of the film with changing surface stress, with a variation of the intensity of the velocity at the plate or in the presence of a precursor film. In particular, the angle between the surface and the plate is studied as direct consequence of these changes. Other considerations will be made about the velocity profile and other characteristic parameters, such as the presence or not of intermolecular forces and the physical properties of the fluid.

Indice

1	Introduzione	8
2	Trattazione Analitica	15
2.1	Equazioni Generali	15
2.2	Condizioni al Contorno	16
2.3	Risoluzione	19
2.3.1	Adimensionalizzazione	19
2.3.2	Sviluppo in serie	21
2.3.3	Validazione dalla letteratura	23
3	Stesura del codice in Matlab	24
3.1	Approssimazione alle differenze finite	24
3.2	Soluzione computazionale	25
4	Studio sul Modello	28
4.1	Geometria e condizioni al contorno	28
4.1.1	Definizione impostazioni iniziali	28
4.1.2	Raccolta dati	31
4.2	Analisi dei parametri caratteristici	32
4.2.1	Numero di capillarità	34
4.2.2	Slip Number	39
4.2.3	Spessore dello strato precursore	43
4.2.4	Altre osservazioni	46

<i>INDICE</i>	4
5 Conclusioni	53
5.1 Considerazioni sul lavoro svolto	53
5.2 Sviluppi futuri	54

Elenco delle figure

1.1	Fotografia delle formazioni che si creano sulla superficie di un film che scorre su un piano inclinato di 6.4° ; $Re=72$, perturbazione a 10Hz. (Liu et al. [1])	9
1.2	Strato di olio silconico su una base riscaldata non uniformemente; se il flusso termico è sotto un determinato valore, il film varia il proprio spessore, generando un avvallamento (Oron et al. [2]).	10
1.3	Il flusso su un piano inclinato di 60° evolve sviluppando le caratteristiche <i>fingers</i> (Kondic [4]).	11
1.4	Flusso di olio silconico su un piano inclinato di 12° ; esso mostra una forma periodica molto marcata (Huppert [5]).	11
1.5	Schema delle tensioni presenti all'interfaccia.	12
1.6	Goccia d'acqua su una foglia di loto, esempio di superficie superidrofobica.	12
1.7	Possibili configurazioni dell'angolo di contatto in una goccia.	13
2.1	Analisi schematica del problema.	15
2.2	Ordini di grandezza tenuti in considerazione.	19
4.1	Geometria iniziale del problema. $x=[0, 10]$, $\Delta x = 0.1$	29
4.2	Andamento nel tempo del film non considerando una portata di ingresso costante.	30
4.3	Definizione grafica dell'angolo di contatto [3]	32
4.4	Angolo di contatto in funzione del tempo (espresso in unità di tempo adimensionali)	33

4.5	Angolo di contatto in funzione del numero S	35
4.6	Angolo di contatto in funzione del numero di capillarità. Viene evidenziata la zona in cui si sono ottenuti i risultati dal modello.	35
4.7	Profilo di velocità per simulazione su film in silicone; il massimo dell'andamento coincide con il punto di contatto.	37
4.8	Risultati su modello con olio silconico al variare del numero di capillarità Ca	38
4.9	Differenti modelli in funzione dell'intensità del valore di slip.	39
4.10	Angoli di contatto in funzione dello slip number B	40
4.11	Grafico angolo di contatto-tempo (espresso in numero di passi temporali).	41
4.12	Differenza tra profili a scorrimento normale (in alto) e bloccato (in basso) a causa di una <i>no-slip condition</i> dopo $T = 35$ unità di tempo. In questo esempio, $B = 10$	42
4.13	Angolo di contatto in funzione di b	43
4.14	Confronto tra prove effettuate considerando (in rosso) o trascurando (in verde) le forze intermolecolari.	45
4.15	Differenza delle velocità in prossimità della linea di contatto (rilevato dopo 35 unità di tempo).	46
4.16	Velocità media in funzione dell'angolo di contatto.	47
4.17	Profilo di velocità sviluppato in una prova con $u_0 = 0.01$	48
4.18	Sviluppo nel tempo della velocità media in funzione del numero di capillarità; si sono considerati valori estremi come i più significativi.	49
4.19	Velocità media in funzione di capillarità e forze tra molecole.	50
4.20	"Roll cloud" generata da un'onda di pressione solitonica.	51
4.21	Rilevamenti sull'onda a vari istanti di tempo.	52

Elenco delle tabelle

3.1	Coefficienti per l'approssimazione alle differenze finite delle derivate di ordine superiore.	25
4.1	Parametri fisici della glicerina a $T = 25^{\circ}C$	31
4.2	Valori fisici per un generico olio siliconico riferiti a $40^{\circ}C$	36
4.3	Confronto sui valori dell'angolo di contatto tra film di glicerina e olio siliconico.	39
4.4	Tabella dei valori ottenuti sperimentalmente.	40
4.5	Valori ottenuti dalla prova (illustrati in figura 4.13).	43

Capitolo 1

Introduzione

Lo studio della formazione e del comportamento di sottili strati di fluido (*film*) è utile a descrivere svariate situazioni in molti campi di studio e se ne possono vedere esempi anche nella vita comune. Basti pensare allo scorrimento delle gocce di pioggia sui vetri o alle geometrie che formano i prodotti per la pulizia quando bagnano una superficie. In geologia si originano quando un flusso di lava si diffonde lungo il versante del vulcano; nell'ambito della biofisica possono essere osservati come pellicole che rivestono gli organi interni dei mammiferi, o in maniera più immediata ne è un esempio il film lacrimale. In ambito ingegneristico sono usati per il trasporto di massa e di calore, nelle verniciature, nell'incollaggio con adesivi o per preservare superfici di pezzi meccanici durante il funzionamento (lubrificazione fluida).

Quando una quantità di fluido viene a contatto con una superficie, la formazione del film avviene come risultato di interazione tra forze nella zona di interfaccia che separa le fasi di liquido, solido e gassoso coinvolte; tali forze sono dovute all'azione gravitazionale e di inerzia, alla tensione superficiale, alle relazioni intermolecolari nella zona di contatto.

Da questo deriva che il confine all'interfaccia è deformabile: è il motivo per cui nell'avanzamento dei film si riscontra un moto ondulatorio o si registrano altri interessanti fenomeni quali propagazione per onde, rottura dello strato superficiale o diffusione del fronte. Viste tutte queste possibilità, si deduce che l'analisi del problema è complessa e richiede per la sua soluzione numerose

ipotesi semplificative, anche per effettuare una elaborazione a calcolatore.

In letteratura si possono trovare molti esperimenti svolti al fine di analizzare queste instabilità: sono stati condotti studi in 3D su strato fluido che scorre su un piano inclinato ([1]), osservando la creazione di molteplici fronti d'onda, oppure prove che illustrano come le proprietà dipendano dalla temperatura.

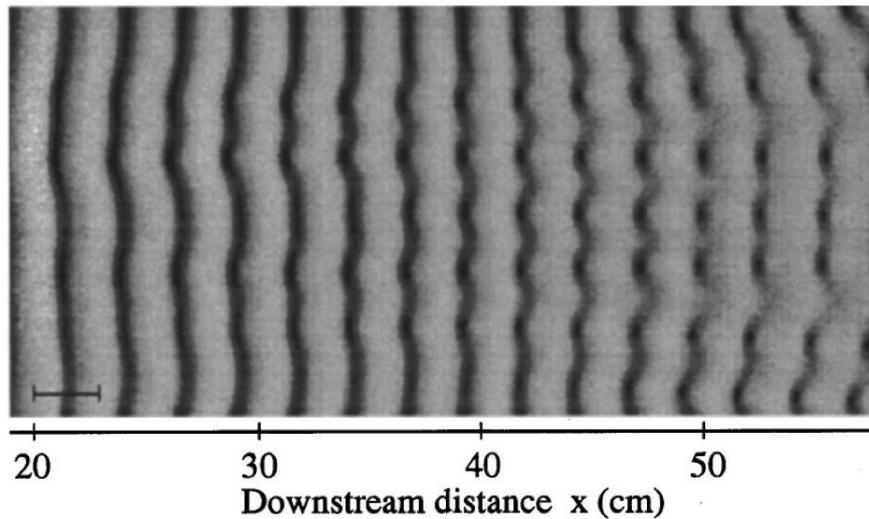


Figura 1.1: Fotografia delle formazioni che si creano sulla superficie di un film che scorre su un piano inclinato di 6.4° ; $Re=72$, perturbazione a 10Hz. (Liu et al. [1])

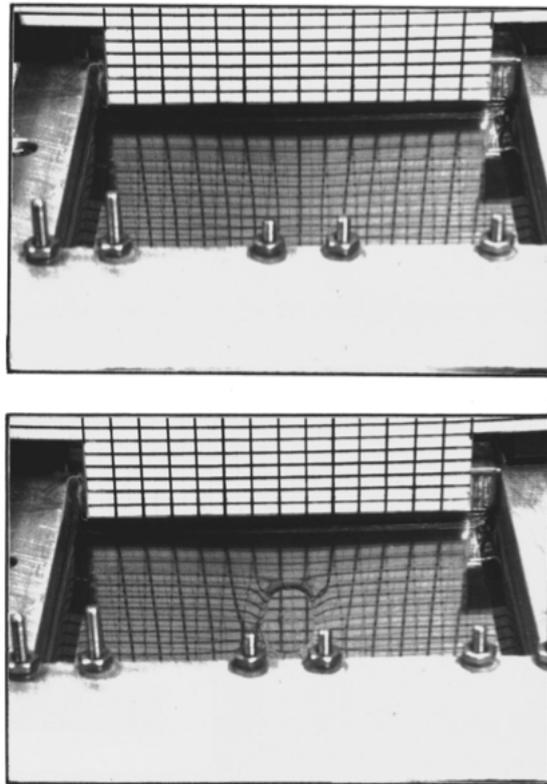


Figura 1.2: Strato di olio silconico su una base riscaldata non uniformemente; se il flusso termico è sotto un determinato valore, il film varia il proprio spessore, generando un avvallamento (Oron et al. [2]).

Soggetto di molteplici studi è anche la formazione delle cosiddette *fingers*, che si osservano quando un film scorre lungo un piano inclinato; questo fenomeno è rappresentativo della molteplicità di configurazioni che il fronte può assumere durante la propagazione [3]; a questo proposito è stato sviluppato un codice da Li et al. [3], proprio per poter osservare questa formazione, giungendo ad ottimi risultati.

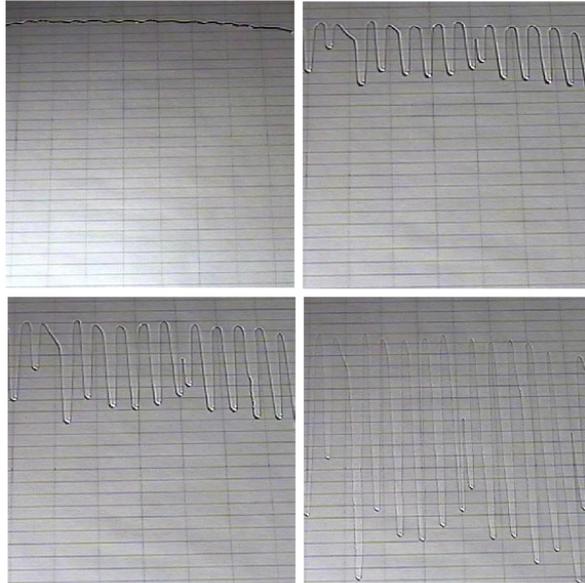


Figura 1.3: Il flusso su un piano inclinato di 60° evolve sviluppando le caratteristiche *fingers* (Kondic [4]).

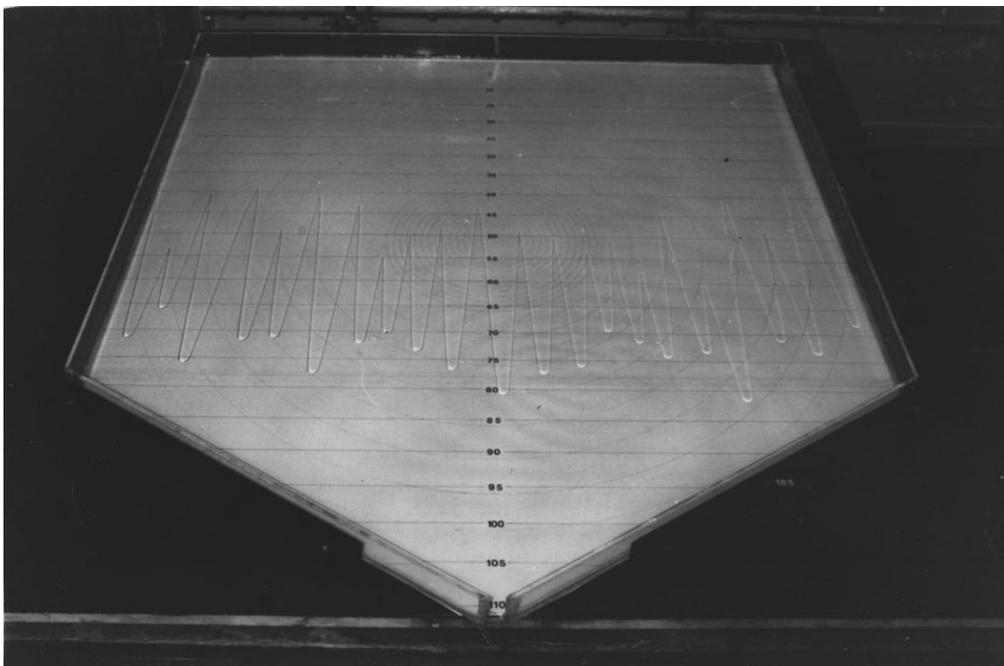


Figura 1.4: Flusso di olio silconico su un piano inclinato di 12° ; esso mostra una forma periodica molto marcata (Huppert [5]).

Il modo in cui il film si propaga sul substrato solido è sicuramente determinato dalle proprietà chimiche e fisiche della superficie (composizione, rugosità, presenza di detergenti) che influenzano lo scorrimento molecolare in corrispondenza della linea di contatto; questa dipendenza “microscopica” è un ulteriore elemento di complicazione nel determinare un modello valido ed accurato.

L’equilibrio che si cerca di raggiungere nel punto triplo è la causa di un caratteristico *angolo di contatto* che lo strato raggiunge sull’interfaccia. La tensione superficiale è il risultato dello sbilanciamento delle forze delle molecole sulla superficie del liquido che devono interagire (oltre che tra loro stesse) con il substrato solido e con il gas circostante; Thomas Young [6] fu il primo a definire l’angolo di contatto ϑ come espressione dell’equilibrio meccanico tra tutte le tensioni superficiali, coinvolte nella relazione a cui ci si riferisce come equazione di Young:

$$\gamma_{lv} \cos \vartheta_Y = \gamma_{sv} - \gamma_{sl}$$

dove i pedici della tensione superficiale si riferiscono alle interazioni liquido-vapore, solido-vapore, liquido-solido.



Figura 1.6: Goccia d’acqua su una foglia di loto, esempio di superficie superidrofobica.

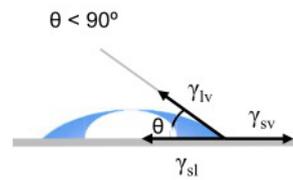


Figura 1.5: Schema delle tensioni presenti all’interfaccia.

L'angolo riflette quindi le tensioni all'interfaccia e può fornire indicazioni sulla *bagnabilità* della superficie: se l'angolo è minore di 90° la superficie è poco bagnabile, se invece è maggiore la superficie non è bagnabile ed aumenta la possibilità della formazione di una goccia. La tensione prevalente in gioco è quindi quella superficiale del liquido; ne è un esempio curioso una goccia d'acqua su una foglia di loto che rappresenta un esempio naturale di superficie superidrofobica (fig. 1.6).

Quando però un liquido bagna una superficie espandendosi non si può più fare riferimento ad una condizione statica: l'interfaccia formerà un angolo di contatto definito *dinamico*, che non sarà più un valore costante ma avrà un andamento dipendente dalla velocità di espansione, dallo spessore del film o dalla composizione del liquido stesso. Ad ora, non è stata sviluppata nessuna teoria che determini precisamente da cosa dipenda e come si sviluppi la dinamica del fenomeno relativo alla bagnabilità; la sua importanza però è nota, dato che l'altezza del menisco e la velocità di avanzamento di un fluido in un condotto capillare vengono direttamente influenzate dal moto.

Altra particolarità che è possibile osservare è la formazione di un film *precursore* durante l'avanzamento del fronte, ovvero un sottilissimo strato di fluido che precede il film sulla superficie formando un angolo di contatto microscopico ancora differente da quello dinamico o statico (che sono ambedue espressioni macroscopiche del fenomeno).

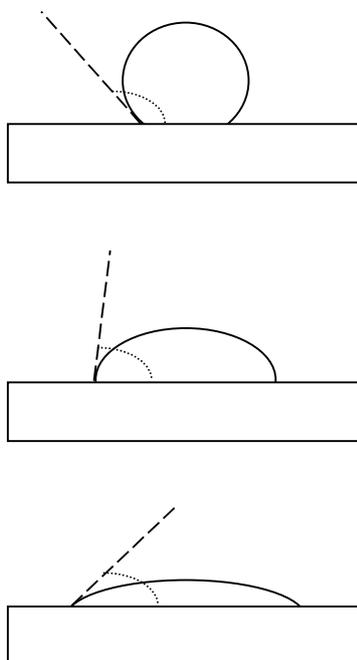


Figura 1.7: Possibili configurazioni dell'angolo di contatto in una goccia.

Lo scopo di questa tesi è di formulare delle equazioni caratteristiche ed elaborare un modello numerico per osservare la propagazione di uno strato fluido in due dimensioni, ricavando informazioni sulla velocità di propagazione e sull'angolo di contatto in funzione dei parametri adimensionali caratteristici del fenomeno.

Capitolo 2

Trattazione Analitica

2.1 Equazioni Generali

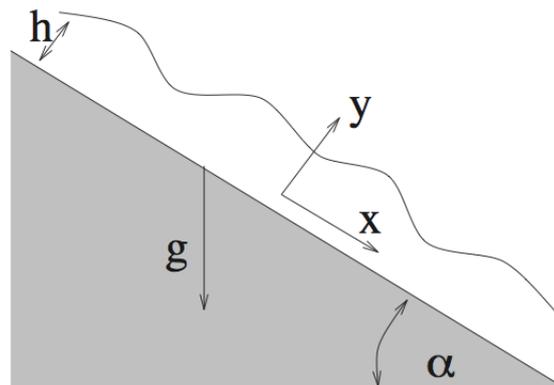


Figura 2.1: Analisi schematica del problema.

Nella definizione del problema si considerano: le due componenti di velocità secondo gli assi coordinati x ed y , rispettivamente siano esse u e v , funzioni del tempo e della coordinata spaziale x ; inoltre sono coinvolte l'altezza h del film, la pressione p , la viscosità dinamica μ , la densità ρ del fluido e la tensione di superficie σ_s . Gli assi sono orientati secondo l'angolo α di inclinazione del piano di scorrimento, quindi la componente della forza peso che influisce sul moto viene individuata da $g \sin \alpha$. Le equazioni di Navier-Stokes sono:

$$u_x + v_y = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho(u_t + uu_x + vv_y) = -(p + \phi)_x + \mu u_{xx} + \mu v_{yy} \quad (2.2)$$

$$\rho(v_t + uv_x + vv_y) = -(p + \phi)_y + \mu v_{xx} + \mu v_{yy} \quad (2.3)$$

Tali equazioni sono scritte per un fenomeno bidimensionale, ammettendo variazioni di pressione ed interazioni microscopiche; l'equazione 2.1 è espressione della continuità.

Il potenziale ϕ contiene il termine gravitazionale ed il potenziale di Van der Waals associato alle interazioni attrattive tra molecole. Esso ha la seguente forma[2]:

$$\phi = \rho g(y \cos \alpha - x \sin \alpha) + \frac{A'}{6\pi h^3}$$

dove A' è una costante introdotta da Hamaker; se A' è positiva, si ha una differenza di pressione negativa tra le interfacce (solido-liquido e liquido-gas) ed esse si attraggono, viceversa esse tenderanno a respingersi.

L'influenza di tale costante è rilevante in strati critici, estremamente sottili (poche centinaia di Armstrong), ma viene comunque lasciata indicata per non particolarizzare troppo il problema. Accade infatti che per strati sottili queste forze acquistano rilevanza e sono responsabili della rapida lacerazione dello strato in presenza di perturbazioni.

2.2 Condizioni al Contorno

Sulla superficie libera di interfaccia tra gas e liquido ho una forza $\vec{f} = \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$, con \vec{n} la normale alla superficie e $\vec{\sigma}$ è il tensore degli sforzi, che in componenti posso scrivere come

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} = \begin{pmatrix} -p + 2\mu u_x & \mu(u_x + v_y) \\ \mu(u_y + v_x) & -p + 2\mu v_y \end{pmatrix}$$

Tale forza dovrà avere una componente normale che bilancia la tensione superficiale lungo tutta l'interfaccia e, supponendo la viscosità del gas trascurabile rispetto a quella del liquido, una componente tangenziale nulla.

La parte tangenziale viene equilibrata dallo sforzo τ mentre quella normale è data dalla tensione superficiale e dalla curvatura dell'interfaccia; posso arrivare quindi a scrivere la condizione al contorno per la superficie come:

$$\begin{cases} \vec{n} \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) = -\frac{\sigma_s}{R} \\ \vec{t} \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

dove nella prima equazione è stato inserito il raggio di curvatura funzione

$$\text{di } h(x,t), \quad \kappa = \frac{1}{R} = \frac{h_{xx}}{(1+h_x^2)^{3/2}}.$$

Se la somma delle forze esterne è nulla, allora $\vec{n} \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) = -p$, e la prima equazione si riduce all'equazione di Laplace-Young ($p = -\sigma_s \kappa$) che descrive, ad esempio, l'aumento di pressione in una bolla d'aria rispetto alla pressione esterna oppure il raggio critico per il quale un film di soluzione acqua-sapone rimane intatto.

Si può riscrivere la funzione di interfaccia come $H(x, y, t) = y - h(x, t) = 0$; allora il versore normale in due dimensioni sarà dato da $\nabla H = (-h_x, 1) = \vec{n}$, e di conseguenza il tangente sarà $\vec{t} = (-1, -h_x)$ tale che $\vec{n} \cdot \vec{t} = 0$.

A queste due condizioni viene poi aggiunta la condizione cinematica di interfaccia (valida in assenza di trasferimento di massa)

$$v = \frac{Dh}{Dt} = \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x}$$

che bilancia la componente normale di velocità del liquido con una velocità dell'interfaccia stessa.

Risolvendo il sistema ed aggiungendo quest'ultima equazione si trovano le condizioni al contorno per $y = h(x, t)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} v = h_t + uh_x \\ (u_y + v_x)(1 - h_x^2) + 2h_x(v_y - u_x) = 0 \\ p + 2\mu \frac{1-h_x^2}{1+h_x^2} u_x + 2\mu \frac{h_x^2}{1+h_x^2} (u_y + v_x) = -\sigma_s \frac{h_{xx}}{(1+h_x^2)^{3/2}} \end{array} \right. \quad (2.5)$$

Sull'interfaccia tra il film e la superficie su cui il fluido scorre si applicherebbero le classiche condizioni di non penetrazione ($v = 0$) e di non scorrimento ($u = 0$); quest'ultima però sarebbe valida se si considerasse lo scorrimento di una lamina di liquido uniforme (ad esempio un moto di Couette). In presenza di un'interfaccia che avanza su un substrato solido, però, con tale condizione sarebbe necessario uno sforzo infinito per muovere la linea di contatto [7]; per ovviare a questo problema si permette uno *slip* con la legge

$$\left\{ \begin{array}{l} u = \beta u_y \\ v = 0 \end{array} \right. \quad (2.6)$$

dove il coefficiente β , coefficiente di slip, permette di modulare l'ampiezza della componente di velocità tangente alla lastra.

2.3 Risoluzione

2.3.1 Adimensionalizzazione

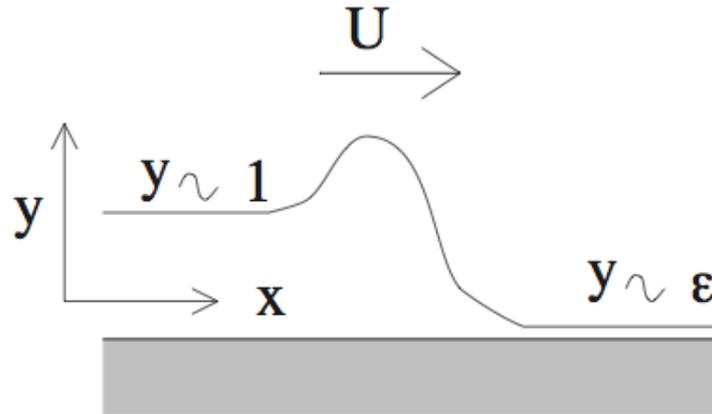


Figura 2.2: Ordini di grandezza tenuti in considerazione.

In tutte le analisi eseguite sui film è stato riscontrato che i fenomeni caratteristici sono di *lunga scala*, ossia le variazioni dalle condizioni iniziali si sviluppano in maniera graduale con cambiamenti molto lenti: per questa ragione si applica la *teoria della lubrificazione* o *long-wave-theory*. Questa teoria consente di ridursi ad un'equazione alle derivate parziali formulata in termini dell'altezza dello strato liquido, come dimostrato dall'equazione di lubrificazione di Reynolds [8] che per primo ha elaborato le basi di questa teoria.

La semplificazione consiste nel considerare la lunghezza caratteristica del substrato solido molto maggiore dell'altezza del film; detta quindi λ la lunghezza caratteristica lungo l'asse x , l'altezza dello strato fluido sarà adimensionalizzata con $h_0 = \epsilon\lambda$, essendo $\epsilon \ll 1$.

$$X = \frac{x}{\lambda} \quad Y = \frac{y}{\epsilon\lambda}$$

Una volta scalate le dimensioni principali, si procede con le altre variabili del problema, sempre riducendo di un fattore ϵ quando si analizza lungo la direzione y ; $u_0 = (\epsilon) \frac{\nu}{\lambda}$ viene utilizzata come velocità caratteristica, $p_0 = \rho \nu^2 \lambda^{-2}$ per la pressione ed anche per le forze molecolari, $t_0 = \lambda \nu^{-1}$ rappresenta il tempo caratteristico della lunghezza d'onda in x .

$$U = \frac{u}{\nu \lambda^{-1}} \quad V = \frac{v}{\epsilon \nu \lambda^{-1}}$$

$$T = \frac{t}{\lambda^2 \nu^{-1}} \quad H = \frac{h}{\epsilon \lambda} \quad (P, \Phi) = \frac{p, \phi}{\rho \nu^2 \lambda^{-2}}$$

Il coefficiente di slip viene scalato con h_0 , ottenendo il numero adimensionale $B = \frac{\beta}{\epsilon \lambda}$.

Sostituendo in tutte le equazioni di cui disponiamo si ottengono le seguenti relazioni adimensionali.

$$\frac{\nu}{\lambda^2}(U_x + V_y) = 0 \quad (2.7)$$

$$U_T + UU_X + VU_Y = -(P + \phi)_X + U_{XX} + \epsilon^{-2}U_{YY} \quad (2.8)$$

$$V_T + UV_X + VV_Y = -\epsilon^{-2}(P + \phi)_Y + V_{XX} + \epsilon^{-2}V_{YY} \quad (2.9)$$

Posso applicare l'adimensionalizzazione anche all'espressione del potenziale di Van der Waals:

$$\Phi = g \frac{\lambda^3}{\nu^2} (\epsilon Y \cos \alpha - X \sin \alpha) + \frac{A}{H^3}$$

dove $A = \frac{A'}{6\pi\rho\lambda\epsilon^3\nu^2}$ viene definita costante di Hamaker adimensionale.

Sostituendo ancora le espressioni di Φ_X e Φ_Y nelle equazioni appena scritte troviamo le relazioni:

$$[U_T + UU_x + VU_y] = -P_x + \frac{g\lambda^3}{\nu^2} \sin \alpha + \frac{3AH_x}{H^4} + U_{XX} + \epsilon^{-2}U_{YY} \quad (2.10)$$

$$[V_T + UV_x + VV_y] = -\epsilon^{-2}P_y + \epsilon^{-1} \frac{g\lambda^3}{\nu^2} \cos \alpha + V_{XX} + \epsilon^{-2}V_{YY} \quad (2.11)$$

Adimensionalizzando anche le condizioni al contorno si ottiene:

$$\begin{aligned} U &= B\epsilon^{-2}U_Y \\ V &= 0 \end{aligned}$$

in $Y = 0$, mentre invece sull'interfaccia si trova

$$\begin{aligned} V &= H_T + UH_X \\ (\epsilon^{-2}U_Y + V_x)(1 - \epsilon^2H_X^2) + 2H_X(V_Y - U_X) &= 0 \\ P + 2\frac{1 - \epsilon^2H_x^2}{1 + \epsilon^2H_x^2}U_X + 2\frac{\epsilon^2H_x}{1 + \epsilon^2H_x^2}(\epsilon^{-2}U_Y + V_x) &= -\frac{H_{xx}}{(1 + \epsilon^2H_x^2)^{3/2}}S \end{aligned}$$

Nel sistema è stato definito il coefficiente $S = \frac{\lambda\epsilon\sigma_s}{\rho\nu^2}$; esso può essere scritto in funzione del *numero di capillarità* definito da Bond come $Bo = \frac{\rho g \lambda^2}{\sigma_s}$, che esprime il rapporto tra le forze di gravità (agenti con la lunghezza caratteristica del sistema λ) e la tensione superficiale; la relazione è di proporzionalità inversa, si ricava infatti $S = \frac{g\lambda^3\epsilon}{\nu^2Bo}$. Da questo si deduce che se aumenta la curvatura della superficie a parità di sforzo normale (2.4) diminuisce la tensione superficiale per il raggiungimento di una condizione di maggiore stabilità.

La dipendenza dal numero di Reynolds può venire trascurata (come ammette la teoria della lubrificazione), poichè si dimostra che sviluppando le equazioni in funzione di Re , esso avrebbe coefficiente ϵ e quindi avrebbe intensità molto minore rispetto al numero di capillarità.

2.3.2 Sviluppo in serie

Il passo successivo è quello di sviluppare le equazioni trovate in serie di potenze in ϵ ottenendo espressioni del tipo:

$$(U, V, P, H) = (U_0, V_0, P_0, H_0) + \epsilon(U_1, V_1, P_1, H_1) + \epsilon^2(U_2, V_2, P_2, H_2) + o(\epsilon^3)$$

per poter considerare le relazioni che intercorrono ai vari ordini di grandezza e ricavare i parametri incogniti dalle condizioni al contorno.

Passando ai risultati, all'ordine ϵ^0 si ottiene:

$$U = U(x, t)$$

$$V = -UY$$

$$H_T + (HU)_x = 0$$

all'ordine ϵ^1 :

$$P = -g \frac{\lambda^3}{\nu^2} Y \cos\vartheta$$

ed infine all'ordine ϵ^2 :

$$U_T + UU_x - 4U_{xx} + \frac{U}{BH} - 4U_x \frac{H_x}{H} - 3 \frac{AH_x}{H^4} - g \frac{\lambda^3}{\nu^2} \sin\alpha - SH_{xxx} = 0$$

Da quest'ultima espressione viene ricavata la funzione velocità che si è dimostrato essere solo dipendente della dimensione principale e del tempo (ignorando la componente verticale per la disparità geometrica con cui si sono trattate le dimensioni caratteristiche nello sviluppo). Negli studi presenti in letteratura la velocità viene ricavata in funzione di h per poter ottenere un'unica equazione, ma in questa tesi è stato scelto di studiare l'equazione di velocità accoppiata a quella dell'altezza dello strato fluido, ricavando così un sistema di equazioni strettamente accoppiate che evolvono parallelamente nel tempo.

Tale sistema, esplicitando le derivate temporali, è dato dalle due relazioni finali:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(hu) \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} + 4 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{u}{Bh} + \frac{4}{h} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{3A}{h^4} \frac{\partial h}{\partial x} + g \frac{\lambda^3}{\nu^2} \sin\alpha + S \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \quad (2.13)$$

2.3.3 Validazione dalla letteratura

Le relazioni ricavate, se combinate, corrispondono alle espressioni proprie dei moti caratterizzati principalmente dalla tensione superficiale come sforzo principale [9], che sono del tipo:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ C \frac{h^3}{3} \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + f(h, h_x, h_{xx}) \right\} = 0$$

il problema è espresso da una equazione parabolica non lineare in cui compaiono derivate della funzione h fino al quarto ordine in x .

Vi sono una moltitudine di condizioni al contorno con cui può essere studiato il problema (per esempio substrato non uniforme, strato liquido delimitato anche superiormente o in moto con un oggetto che vi galleggia sulla superficie), ma per il caso esaminato le relazioni particolarizzate ricavate dagli articoli in bibliografia sono:

$$\begin{cases} h_t + (uh)_x = 0 \\ (4hu_x)_x + Chh_{xxx} + Bhsin\alpha = 0 \end{cases}$$

per Myers ([9]) , mentre per Oron ([2]):

$$\mu h_t + \tau h h_x + \frac{1}{3} \sigma (h^3 h_{xxx})_x = 0$$

che considera la tensione superficiale costante nel tempo.

Tali relazioni confermano la dipendenza da derivate di ordine superiore al primo della funzione h e fino al secondo ordine per la funzione velocità; sono inoltre presenti le proprietà fisiche del fluido, ovvero la viscosità e la tensione superficiale. Confermata la validità delle equazioni, si procederà alla preparazione di un codice per poter ottenere una soluzione numerica.

Capitolo 3

Stesura del codice in Matlab

3.1 Approssimazione alle differenze finite

Le equazioni ricavate nel capitolo precedente sono due equazioni alle derivate parziali in tempo e spazio, definite PDE (*Partial Differential Equations*).

Lo scopo è quello di creare un codice che individui l'andamento nel tempo e nello spazio delle variabili dipendenti, ovvero che risolva $\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}$ in un intervallo di tempo $[t_0, t_f]$ ed in un definito spazio computazionale $[x_0, x_f]$ sul quale viene studiata la soluzione.

Per poter inserire tali espressioni in un codice il primo passo è discretizzare il dominio della funzione continua $f(x, t)$, cioè suddividere l'intervallo $x = [a, b]$ in punti $x_0 = a$, $x_1 = a + \Delta x$, $x_2 = a + 2\Delta x, \dots, x_n = a + n\Delta x = b$, dove Δx rappresenta il valore di campionamento opportunamente scelto.

Per Δx sufficientemente piccoli, se $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ è continua e derivabile, posso approssimare la derivata di f in un punto \bar{x} con il suo rapporto incrementale definito come:

$$f'(\bar{x}) = \frac{f(\bar{x} + \Delta x) - f(\bar{x})}{\Delta x},$$

e tale rapporto prende il nome di *differenza finita in avanti* (poichè l'espressione coinvolge il punto successivo ad \bar{x}); possono essere anche definite

differenze finite *all'indietro* oppure *centrate*, rispettivamente:

$$f'(\bar{x}) = \frac{f(\bar{x}) - f(\bar{x} - \Delta x)}{\Delta x}, \quad f'(\bar{x}) = \frac{f(\bar{x} + \Delta x) - f(\bar{x} - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Più l'intervallo di campionamento è piccolo e più tali rapporti si avvicinano al valore effettivo della derivata prima della funzione.

Tale approssimazione è valida anche per derivate di ordine superiore, in particolare sono state utilizzate differenze fino al terzo ordine, centrate e decentrate, illustrate in tabella 3.1.

Differenza:	Secondo Ordine
In Avanti	$f''(\bar{x}) = \frac{f(x) - 2f(x+\Delta x) + f(x+2\Delta x)}{\Delta x^2}$
Centrata	$f''(\bar{x}) = \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2}$
All'indietro	$f''(\bar{x}) = \frac{f(x) - 2f(x-\Delta x) + f(x-2\Delta x)}{\Delta x^2}$
Differenza:	Terzo Ordine
In Avanti	$f'''(\bar{x}) = \frac{-f(x) + 3f(x+\Delta x) - 3f(x+2\Delta x) + f(x+3\Delta x)}{\Delta x^3}$
Centrata	$f'''(\bar{x}) = \frac{-\frac{1}{2}f(x-2\Delta x) + f(x-\Delta x) - f(x+\Delta x) + \frac{1}{2}f(x+2\Delta x)}{\Delta x^3}$
All'indietro	$f'''(\bar{x}) = \frac{f(x) - 3f(x-\Delta x) + 3f(x-2\Delta x) - f(x-3\Delta x)}{\Delta x^3}$

Tabella 3.1: Coefficienti per l'approssimazione alle differenze finite delle derivate di ordine superiore.

Questa approssimazione è necessaria anche per la derivata nel tempo del primo ordine, approssimata discretizzando con un passo Δt l'intervallo di tempo in cui si ha interesse far evolvere le espressioni, così come è stato fatto per l'intervallo in x .

3.2 Soluzione computazionale

Il dominio nello spazio della funzione dopo la discretizzazione è un insieme di n punti (nodi) che possono essere rappresentati da un vettore di dimensione $1 \times n$, così come si avranno m "istanti" di tempo in cui viene risolta l'equazione

differenziale (ossia gli elementi in cui viene campionato il vettore temporale $[t_0, t_f]$); la soluzione che si cerca di ottenere consiste quindi in due matrici $m \times n$ i cui elementi sono il valore delle funzioni $h(x, t)$ e $u(x, t)$ in un punto del dominio ad un tempo fissato.

Utilizzando la notazione matriciale di Matlab, il riferimento ad un elemento $h(i, j)$ (in notazione abbreviata $h_{i,j}$) riporta al valore della funzione h al tempo i –esimo nel punto j –esimo della griglia spaziale. In questo contesto, operare a $t + \Delta t$ e $x + \Delta x$ si traduce nel considerare l'elemento rispettivamente nella posizione $i + 1$ e $j + 1$ della matrice.

Scrivendo le equazioni 2.12 e 2.13 con tale notazione si ottiene:

$$\frac{h_{i+1,j} - h_{i,j}}{\Delta t} = -u_{i,j} \frac{h_{i,j+1} - h_{i,j}}{\Delta x} - h_{i,j} \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta x},$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta t} = & -u_{i,j} \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta x} + 4 \frac{u_{i,j-1} + u_{i,j} - u_{i,j+1}}{\Delta x^2} - \frac{u_{i,j}}{B h_{i,j}} + \\ & + \frac{4}{h_{i,j}} \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta x} \frac{h_{i,j+1} - h_{i,j}}{\Delta x} + \frac{3A}{h_{i,j}^4} \frac{h_{i,j+1} - h_{i,j}}{\Delta x} + \\ & + g \frac{\lambda^3}{\nu^2} \sin \alpha + S \frac{-\frac{1}{2} h_{i,j-2} + h_{i,j-1} - h_{i,j+1} + \frac{1}{2} h_{i,j+2}}{\Delta x^3}. \end{aligned}$$

Una volta impostata la geometria iniziale del problema, si conoscono i valori della funzione in ogni nodo del dominio al tempo $t = 0$. Grazie all'approssimazione delle derivate è possibile esplicitare i termini incogniti $h_{i+1,j}$ e $u_{i+1,j}$ in sola funzione delle derivate rispetto lo spazio: ci si è ricondotti ad una coppia di equazioni differenziali ordinarie (*Ordinary Differential Equations*).

Per poter sviluppare una soluzione di questo genere si deve fare fronte a due problemi principali: per prima cosa si può notare la mancanza di accuratezza nel tempo, dove si ha una approssimazione solo del primo ordine; inoltre uno schema di questo tipo (definito *esplicito*) per larghi passi temporali può diventare instabile fornendo soluzioni che divergono. Il software Matlab mette a disposizione funzioni predefinite richiamate con il coman-

do *ode* che risolvono automaticamente queste problematiche implementando metodi *predictor-corrector* o *Runge-Kutta* di ordine superiore; queste funzioni integrano le equazioni da un tempo zero ad un tempo finale inseriti in input (la condizione iniziale va fornita e corrisponde alla geometria iniziale del problema, ossia il valore delle funzioni in ogni nodo dello spazio) e restituiscono una matrice che fornisce la condizione delle equazioni ad ogni istante di tempo calcolato.

Per i solutori di Matlab, la discretizzazione del tempo è determinata dalla funzione stessa poichè dipende da quanto “finemente” si riesce a trovare una soluzione senza che la stessa diverga (ossia il programma cerca di mantenere uniformemente sotto controllo le perturbazioni della soluzione implementando un metodo definito *assolutamente stabile*).

Entrando nel particolare della funzione, dopo varie prove sui vari solutori messi a disposizione, nel codice impostato è stata preferita la funzione *ode113*. Questa calcola il risultato con metodo esplicito multistep del terzo ordine di Adam-Bashforth, esplicitato dalla formula $f_{t+1} = f_t + \frac{\Delta x}{12}(23p_n - 16p_{n-1} + 5p_{n-2})$ con p polinomio interpolatore della funzione calcolato nei punti n , $n-1$ ed $n-2$ (da qua l'importanza di utilizzare una funzione predefinita, che nei calcoli è certamente più accurata e rapida di un codice scritto dal programmatore). La proprietà di essere multipasso, ossia di coinvolgere punti successivi o precedenti a quello sul quale si sta calcolando la soluzione, garantisce una precisione tanto maggiore tanto più è fine la discretizzazione dello spazio.

In appendice viene presentato il listato del codice nella sua versione finale e funzionante. Esso si compone di due funzioni innestate: la prima serve a dichiarare la geometria iniziale ed a richiamare il comando *ode* solutore, nonchè a calcolare l'angolo di contatto una volta elaborata la soluzione; nella seconda funzione vengono esplicitate le equazioni e calcolate le varie derivate fornendo in ingresso il vettore di condizioni iniziali $[h_o, u_o]$. Il vettore in ingresso ha quindi dimensioni doppie rispetto al vettore che contiene i punti dello spazio; da qua deriva la necessità di trovare un intervallo di spazio che non destabilizzi la soluzione ma al contempo riesca a suddividere il dominio in un numero sufficiente di punti significativi.

Capitolo 4

Studio sul Modello

4.1 Geometria e condizioni al contorno

4.1.1 Definizione impostazioni iniziali

Fondamentale per il codice è la corretta definizione delle condizioni al contorno nelle situazioni limite del problema, dalle quali si deve partire per elaborare la soluzione al problema.

Come condizione al tempo $t = 0$, ossia come geometria base, è stata scelta una forma semiparabolica, con valori molto piccoli (a rappresentare il film precursore) in sostituzione dei valori negativi. La funzione rappresentativa è $h(x) = 1 - \frac{(x-1)^2}{4}$ in modo da avere valore unitario per $x = 0$, necessario dato che si lavora in un ambiente adimensionalizzato.

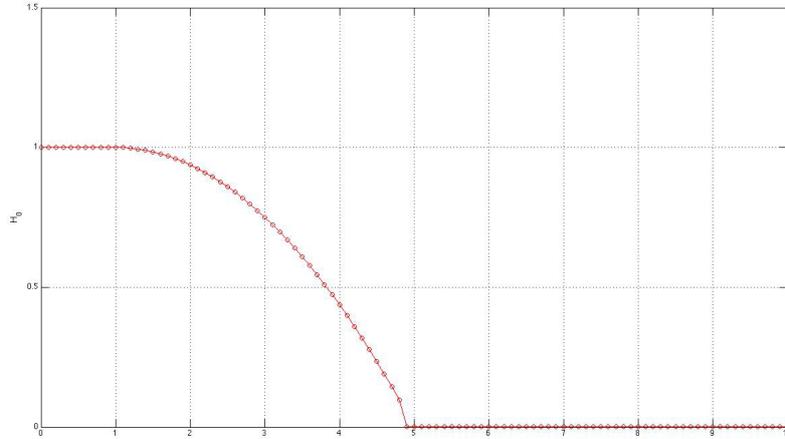


Figura 4.1: Geometria iniziale del problema. $x=[0, 10]$, $\Delta x = 0.1$

Per quanto riguarda le derivate $\frac{\partial}{\partial x}$ per semplicità si è scelto di porre $\frac{\partial^n h}{\partial x^n} = 0$ ad ogni grado di derivata, in $x = 0$ ed in $x = x_f$; anche come condizione per la derivata nel tempo, essenziale perchè il solutore possa elaborare le soluzioni, è stato scelto $\frac{\partial h}{\partial t} = 0$ per i punti ai margini della zona di controllo. In questo modo si ha che per ogni istante t $h(x = 0) = 1$; se allo stesso modo nel punto $x = 0$ si mantiene costante la velocità, questo equivale a fissare la portata $Q = h_0 u_0$ di fluido che entra nell'area di controllo per tutta la durata della simulazione.

Si riporta, a titolo di esempio, un andamento nel tempo del film fluido se non si imponesse portata costante in ingresso, evidenziando la formazione di una configurazione a goccia.

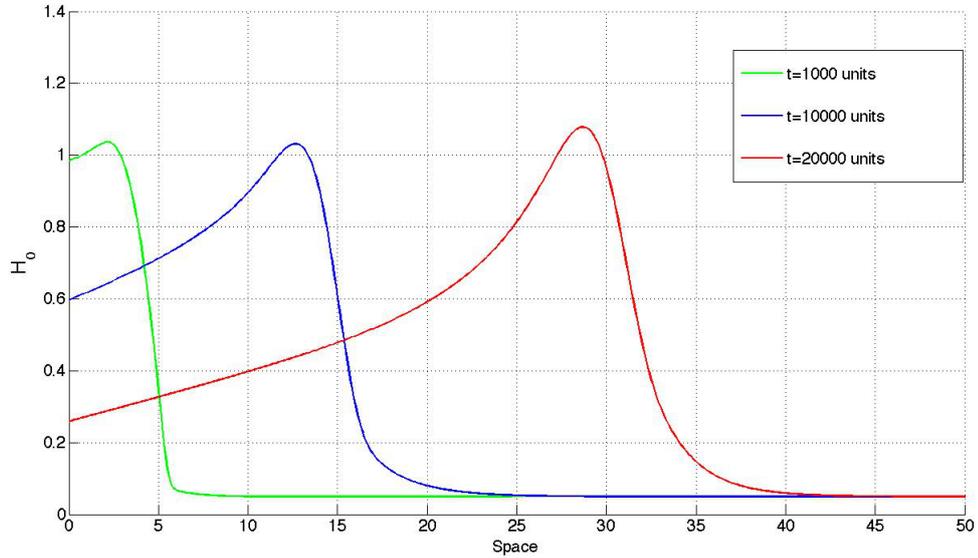


Figura 4.2: Andamento nel tempo del film non considerando una portata di ingresso costante.

Considerare anche i punti al di fuori della geometria iniziale fornendo un valore di spessore, come si trattasse di un film precursore, è una soluzione trovata in letteratura; in questo modo si evita di avere come punto finale proprio il punto di interfaccia, per il quale sarebbe difficoltoso inserire adeguate condizioni al contorno non essendo ancora state ben definite data la particolarità di tale punto. Questa scelta è anche una semplificazione dal punto di vista puramente computazionale: avere il punto di contatto come x_f significherebbe aggiungere punti allo spazio a mano a mano che il film avanza per seguirne l'evoluzione, ossia imporre una condizione al solutore (ad esempio una certa altezza di $h(x_f)$) che indichi quando aggiungere un punto alla griglia per calcolare l'istante successivo; questo introdurrebbe una eccessiva approssimazione nella soluzione, oltre che aumentare i tempi di elaborazione.

Per la velocità è stata scelta la stessa configurazione a parabola in modo da avere valori unitario per $x = 0$ e nulli per i punti del film precursore senza introdurre discontinuità particolari; nel corso della trattazione sarà poi verificato che la velocità tende naturalmente ad assumere questa geometria

durante la naturale evoluzione del film.

4.1.2 Raccolta dati

Come primo passo per il lavoro sul modello sono state effettuate varie prove per poter capire con quali valori limite dei vari parametri di influenza il codice riesce a fornire una soluzione che non diverga o restituisca errori computazionali evidenti. In questo senso è stato particolarmente rilevante il valore di λ , lunghezza caratteristica, che nell'equazione (2.13) interviene nel termine costante con esponente 3 e viene moltiplicato per il valore di ν^{-2} ; essendo le viscosità nell'ordine $10^{-3} \div 10^{-6} \frac{m^2}{s}$ si comprende come λ debba risultare tale da poter ridurre gli esponenti $10^6 \div 10^{12} \frac{s^2}{m^4}$ che ne risultano e che fornirebbero con questa intensità valori al di fuori della scala del modello. Con varie prove è stato trovato che il codice fornisce i risultati migliori utilizzando per il fluido i valori della glicerina (in tabella 4.1) in un ambiente scalato con lunghezza d'onda caratteristica $\lambda = 10^{-3} m$.

Questo sta a significare che, se si considera $\epsilon = 10^{-2}$, si ottiene come dimensione caratteristica per adimensionalizzare l'altezza del film $\lambda\epsilon = 10^{-5}m$; si stanno quindi considerando scale di ordine pari a $10^{-5}m$, ovvero la reale altezza del film è dell'ordine delle decine di μm (dimensione tipica ad esempio degli strati di lubrificante nei cuscinetti oppure in alcuni strati adesivi).

$\rho = 1.26 \cdot 10^{-3} \frac{Kg}{m^3}$	$\mu = 1490 MPa \cdot s$	$\nu = 1.18 \cdot 10^{-3} \frac{m^2}{s}$	$\sigma_s = 6.3 \cdot 10^{-3} \frac{N}{m}$
--	--------------------------	--	--

Tabella 4.1: Parametri fisici della glicerina a $T = 25^\circ C$

Una volta inseriti i valori fisici per ricavare le costanti, sono state effettuate prove per verificare l'influenza dei vari parametri sulle caratteristiche dell'evoluzione del film, variando un solo numero in esame mentre le altre condizioni si mantenevano invariate.

4.2 Analisi dei parametri caratteristici

La proprietà che viene misurata e che è maggiormente influenzata dai numeri fisici è l'angolo di contatto, definito geometricamente sul profilo in esame come l'angolo che la retta condotta dal punto di contatto e tangente al profilo geometrico forma con il piano solido inclinato (come illustrato in figura 4.3). Tale definizione è rigorosa nel caso di un modello con strato precursore infinitesimo, mentre invece è considerata approssimativa in una condizione di film precursore: infatti anch'esso, essendo sottoposto a tensione superficiale, tende a formare un angolo di contatto microscopico che influenza l'angolo vero e proprio.

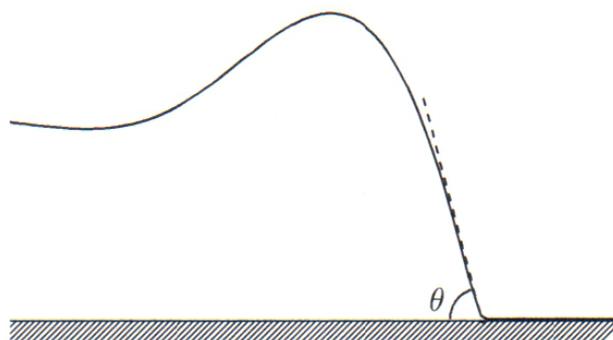


Figura 4.3: Definizione grafica dell'angolo di contatto [3]

Il valore dell'angolo di contatto viene calcolato dopo un periodo di transitorio necessario perchè si stabilizzi dal valore imposto dalla geometria iniziale fino a quello che è proprio del fluido. Un andamento tipico in funzione del tempo viene rappresentato nella figura 4.4, che è stata ottenuta nelle condizioni seguenti: $x = [0, 50]$ $t = [0, 40]$ $S = 3.59 \cdot 10^{-3}$ $B = 10^2$.

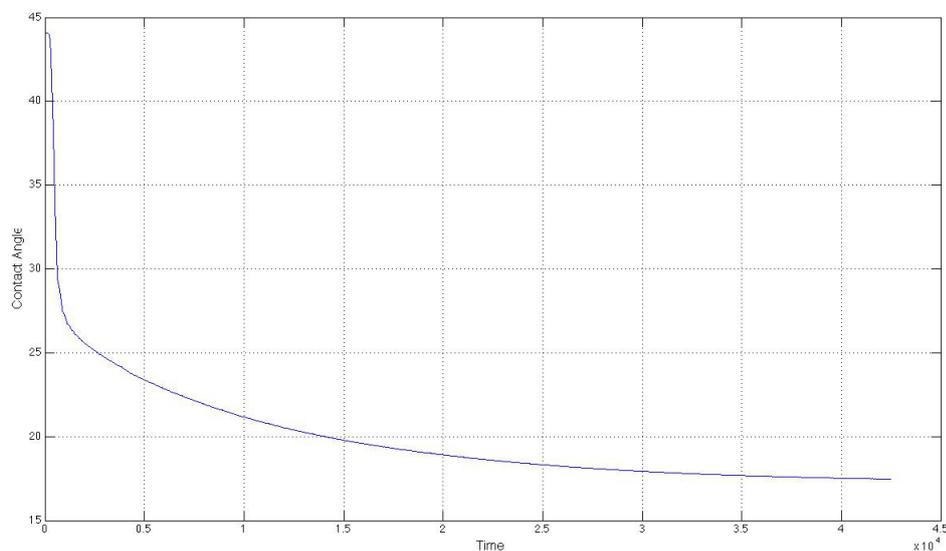


Figura 4.4: Angolo di contatto in funzione del tempo (espresso in unità di tempo adimensionali)

Oltre alle proprietà fisiche proprie del fluido considerato, per chiarezza verranno elencati i valori presi in esame e la loro definizione dalla trattazione analitica:

- numero di capillarità, $S = \frac{g\lambda^3\epsilon}{\nu^2Bo}$
- slip number $B = \frac{\beta}{\lambda\epsilon}$
- spessore strato precursore b

mentre la lunghezza d'onda caratteristica del fenomeno λ , come già trattato, viene considerata costante.

Nella trattazione è stata introdotta anche la costante di Hamaker (che rappresenta i legami microscopici intramolecolari); dato che in generale assume però valori molto piccoli, essa viene mantenuta uguale a zero in modo da escludere il termine che coinvolge i valori del profilo h a denominatore poichè, durante l'elaborazione, questo porterebbe ad esponenziali troppo elevati che bloccherebbero la soluzione. Tale approssimazione viene trattata al paragrafo 4.2.3.

A meno di differenti indicazioni, le prove sono svolte in un intervallo di tempo adimensionale $t = [0, 40]$ e di spazio adimensionale $x = [0, 50]$ suddiviso in 500 punti, ovvero $dx = 0.1$.

4.2.1 Numero di capillarità

Il numero di capillarità S , da come è stato definito, è il rapporto tra la tensione superficiale e le forze di volume nel liquido; ha una rilevante influenza sull'angolo di contatto poichè, essendo quest'ultimo il risultato dell'equilibrio tra le tensioni agenti all'interfaccia, è diretta espressione dello stato tensionale del punto triplo; in altre parole fornisce informazioni su come il film bagna la superficie.

Si considera che variare S sia come aggiungere al fluido un tensioattivo (ad esempio saponi, detergenti) che ne varii la tensione superficiale: all'aumentare di quest'ultima, la massa fluida tende ad assumere un'interfaccia sempre più sferica (la goccia è infatti la configurazione di minima energia per la superficie, quindi quella ricercata per l'equilibrio), incrementando il valore dell'angolo di contatto. Le variazioni che si otterranno dal modello saranno però relative alla scala di osservazione, come si nota dalla dipendenza di S da λ ed ϵ ; in altre parole, già differenze di decimi di grado saranno considerate rilevanti per la scala che si sta considerando.

Le prove sono state svolte nell'ambiente precedentemente introdotto, mantenendo costanti lo slip number $B = 10^2$ e lo spessore dello strato precursore $b = 10^{-5}$; per il numero di capillarità sono stati assunti quattro valori significativi: $S = 10^{-4}$, $5 \cdot 10^{-3}$, 10^{-3} e 10^{-2} .

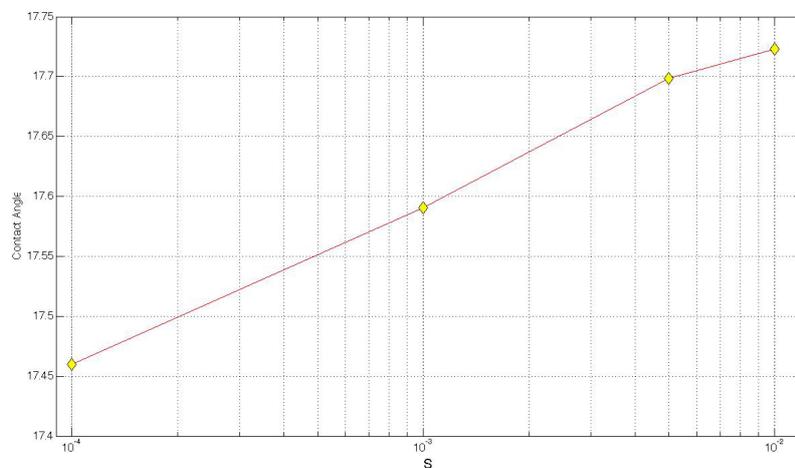


Figura 4.5: Angolo di contatto in funzione del numero S.

L'andamento mostrato in figura 4.5 è crescente, come ci si aspettava dalle considerazioni precedenti; per la validazione dalla letteratura sono stati presi come riferimento i valori riportati nel lavoro di Kondic[4], che espone i risultati rappresentati in figura 4.6.

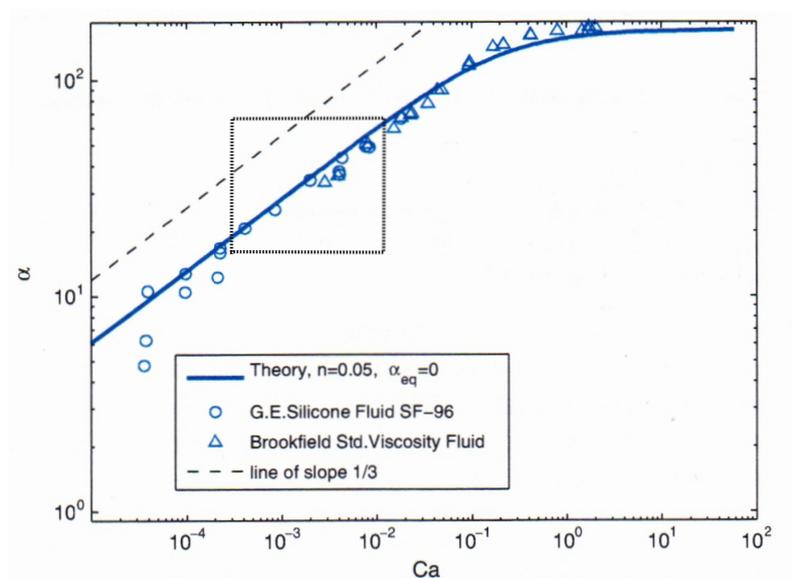


Figura 4.6: Angolo di contatto in funzione del numero di capillarità. Viene evidenziata la zona in cui si sono ottenuti i risultati dal modello.

Prima di poter assumere la validità del modello vi sono delle considerazioni da fare, nonostante la coincidenza dell'andamento della curva sia già un buon risultato.

Nella figura di riferimento il numero Ca non è il numero di capillarità definito da Bond, ma è espresso come $Ca = \frac{\mu V}{\sigma_s}$, dove V è la velocità del fronte in avanzamento; le considerazioni da fare non cambiano, in quanto la tensione superficiale è comunque a denominatore, quindi si tratta semplicemente di una formulazione differente. Inoltre il fluido usato per l'esperimento è un olio siliconico: è stato necessario ricavare dei parametri fisici di riferimento non essendo specificata la tipologia esatta dell'olio in esame. Sono stati scelti i dati seguenti per un olio siliconico da un listino di olii lubrificanti:

$\nu = 50cSt = 5 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s}$	$\sigma_s = 20.7 \frac{mN}{m}$	$\rho = 960 \frac{Kg}{m^3}$	$\mu = 0.048 MPa \cdot s$
---	--------------------------------	-----------------------------	---------------------------

Tabella 4.2: Valori fisici per un generico olio siliconico riferiti a $40^\circ C$.

Dalla definizione del numero S è stato possibile ricavare una relazione con Ca approssimando ai soli ordini di grandezza, valutando la velocità del fronte nell'ordine di 10^1 come dimostrano i risultati svolti sul modello con i valori del silicone.

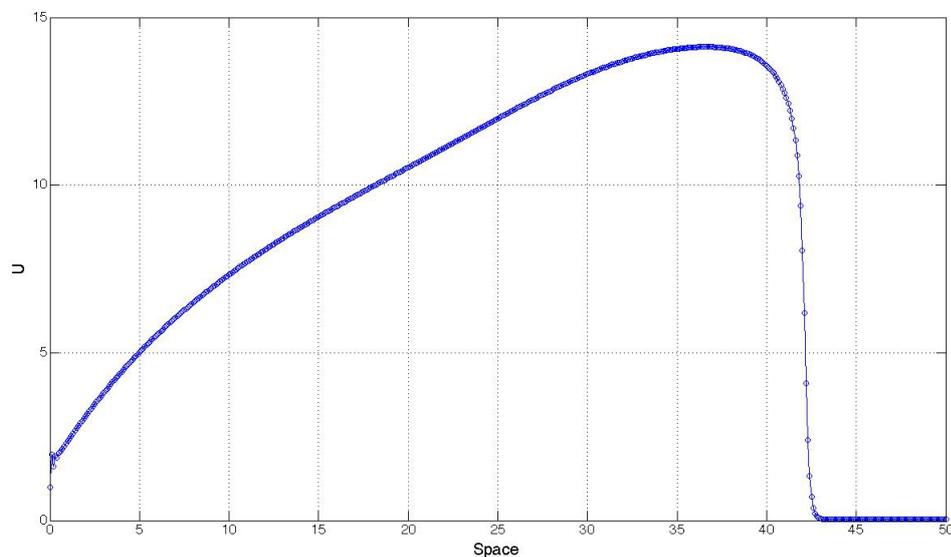


Figura 4.7: Profilo di velocità per simulazione su film in silicone; il massimo dell'andamento coincide con il punto di contatto.

Ricavando dalla definizione

$$Ca = \frac{\mu V}{\sigma_s} \longrightarrow \sigma_s = \frac{\mu V}{Ca}$$

e sostituendola nell'espressione di S , si ottiene la relazione:

$$S = \frac{\lambda \epsilon \sigma_s}{\rho \nu^2} = \frac{\lambda \epsilon \mu V}{\rho \nu^2 Ca}$$

con cui si può ricavare la relazione tra gli ordini di grandezza dei due numeri.

Nelle prove si sono ottenuti i risultati migliori nell'intervallo $10^{-3} \leq Ca \leq 10^{-2}$, già evidenziato nella figura 4.6; i risultati sono presentati nella figura 4.8.

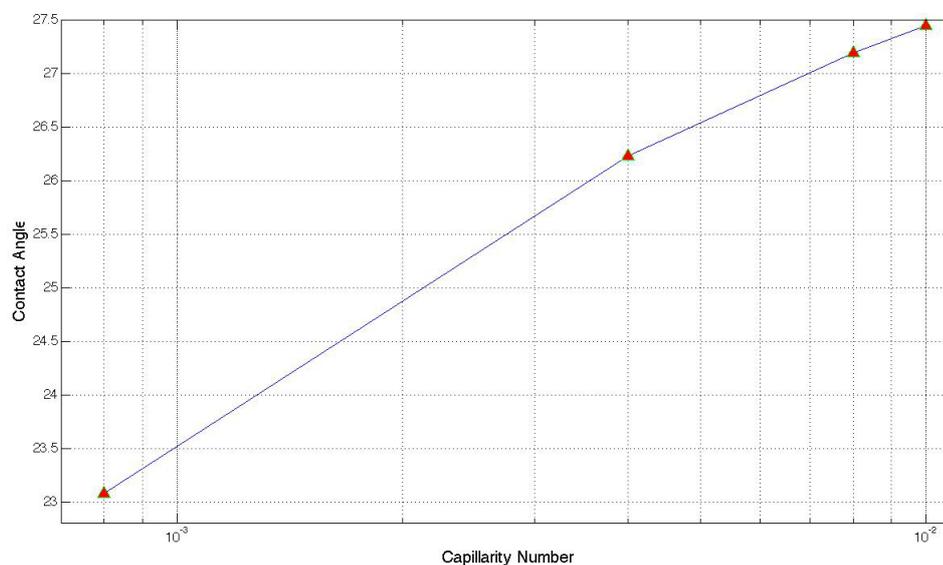


Figura 4.8: Risultati su modello con olio silconico al variare del numero di capillarità Ca .

I valori degli angoli sono molto simili per valori di Ca minori: si ottengono angoli di $23^\circ - 26^\circ$, come si può osservare in 4.8, mentre invece si differenziano al crescere di Ca . Tale differenza può essere attribuita ad un limite nel modello (legata alle approssimazioni nella non facile determinazione della velocità del fronte che avanza e anche alla differenza nelle equazioni ricavate) ma anche ad una sicura differenza tra l'olio preso come riferimento e quello del modello.

La corrispondenza nell'ordine di grandezza dell'angolo e dell'andamento al crescere del numero di capillarità viene considerata in ogni modo come una buona validazione del codice.

Come ulteriore verifica, sono state svolte prove utilizzando sia i parametri della glicerina che dell'olio silconico a parità di S , ottenendo i risultati in tabella 4.3.

S	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-3}$	10^{-2}
Silicone	27.54°	28.48°	28.51°	28.54°
Glicerina	16.58°	17.49°	17.58°	17.71°

Tabella 4.3: Confronto sui valori dell'angolo di contatto tra film di glicerina e olio siliconico.

4.2.2 Slip Number

Il numero B definito durante la parte analitica è l'adimensionalizzazione del coefficiente di slip β , il quale deriva dalla condizione iniziale imposta detta, appunto, di slip. Come già accennato, esso è un valore che serve a scalare l'intensità della velocità lungo y , come mostrato in figura 4.9.

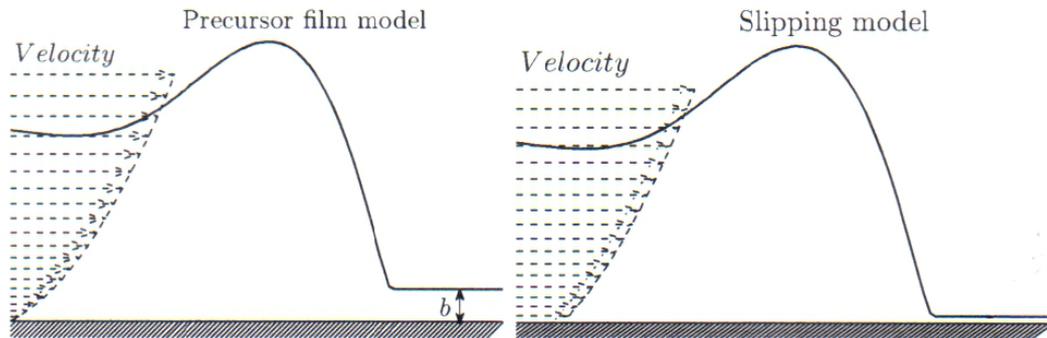


Figura 4.9: Differenti modelli in funzione dell'intensità del valore di slip.

L'immagine precedente mostra l'effetto dell'intensità del coefficiente di slip sul profilo di velocità.

Dalla letteratura [3] si ricava che le condizioni perchè avvenga effettivamente lo scivolamento del film sul substrato sono due:

- si assume un coefficiente di grandezza sufficiente affinchè l'intensità del vettore velocità a contatto con la parete sia rilevante e si trascura lo strato precursore.

- si considera $\beta \rightarrow 0$ (non nullo perchè nelle equazioni è presente in un denominatore) ma si ammette uno strato precursore di ordine di grandezza comparabile all'altezza del film; in questo modo si può trattare come se il film stesse scorrendo su lamine fluide già in moto nello strato precursore.

In questo paragrafo viene preso in esame il primo modello, concentrandosi quindi sull'importanza della condizione di slip.

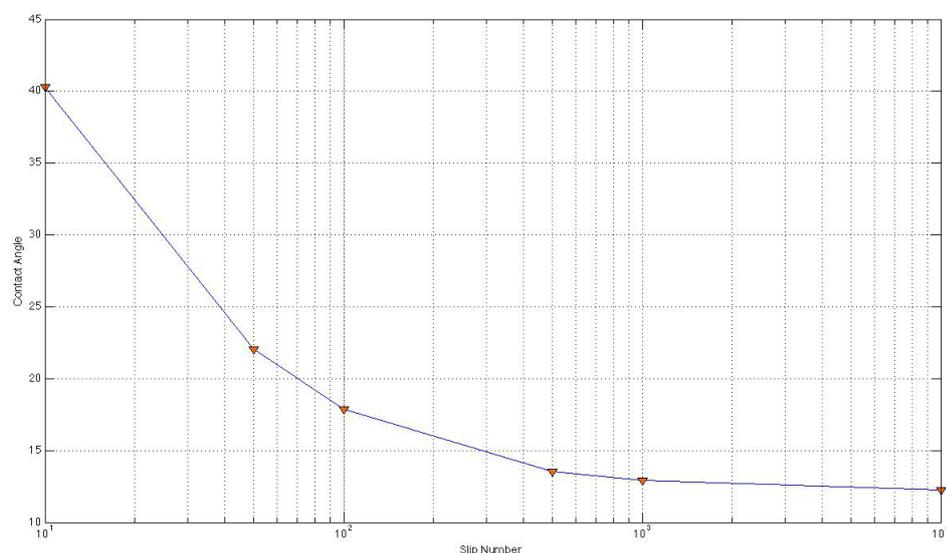


Figura 4.10: Angoli di contatto in funzione dello slip number B .

La figura precedente riporta graficamente i dati ricavati da prove sul modello:

B	10	$5 \cdot 10$	10^2	$5 \cdot 10^2$	10^3	10^4
Angolo di Contatto	40.29°	22.05°	17.85°	13.55°	12.90°	12.25°

Tabella 4.4: Tabella dei valori ottenuti sperimentalmente.

Come si può notare, al diminuire di B , ovvero di β (si ricorda che, per come è stato definito, $B = \frac{\beta}{\lambda \epsilon} \Rightarrow \beta = \lambda \epsilon B$), l'angolo di contatto tende ad

aumentare: quando si riduce l'intensità della velocità alla parete, il punto di interfaccia ha sempre più difficoltà ad avanzare; avendo impostato una portata di fluido costante con le condizioni iniziali, questo comporta un aumento della altezza del film, come se si stesse “gonfiando”.

Si può anche riportare l'andamento degli angoli in funzione del tempo: nella condizione “bloccata” si può osservare come, a mano a mano che si accumula fluido, il valore dell'angolo di contatto tende a risalire.

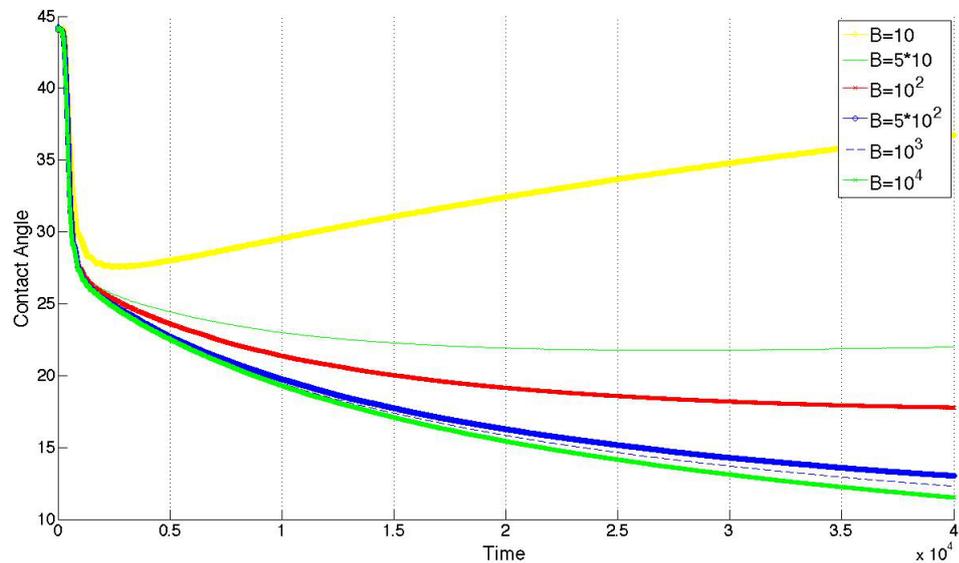


Figura 4.11: Grafico angolo di contatto-tempo (espresso in numero di passi temporali).

L'immagine successiva (fig. 4.12) è un confronto tra le due situazioni descritte; in verde viene riportato il profilo di velocità, per mostrare come ad un B basso diminuisca il valore della velocità stessa in corrispondenza della linea di contatto. Per tutte queste prove è stato necessario mantenere un valore di film precursore molto basso: è stato scelto $b = 10^{-5}$; dato che il valore non scalato dell'altezza del film è dell'ordine di $10^{-5}m$, nella realtà fisica lo spessore precursore è nell'ordine degli Armstrong ($10^{-10}m$), ossia è come considerare strati molecolari precursori. Si può quindi dedurre come

la necessità di mantenere b in questo modello non influisca sui risultati ottenuti.

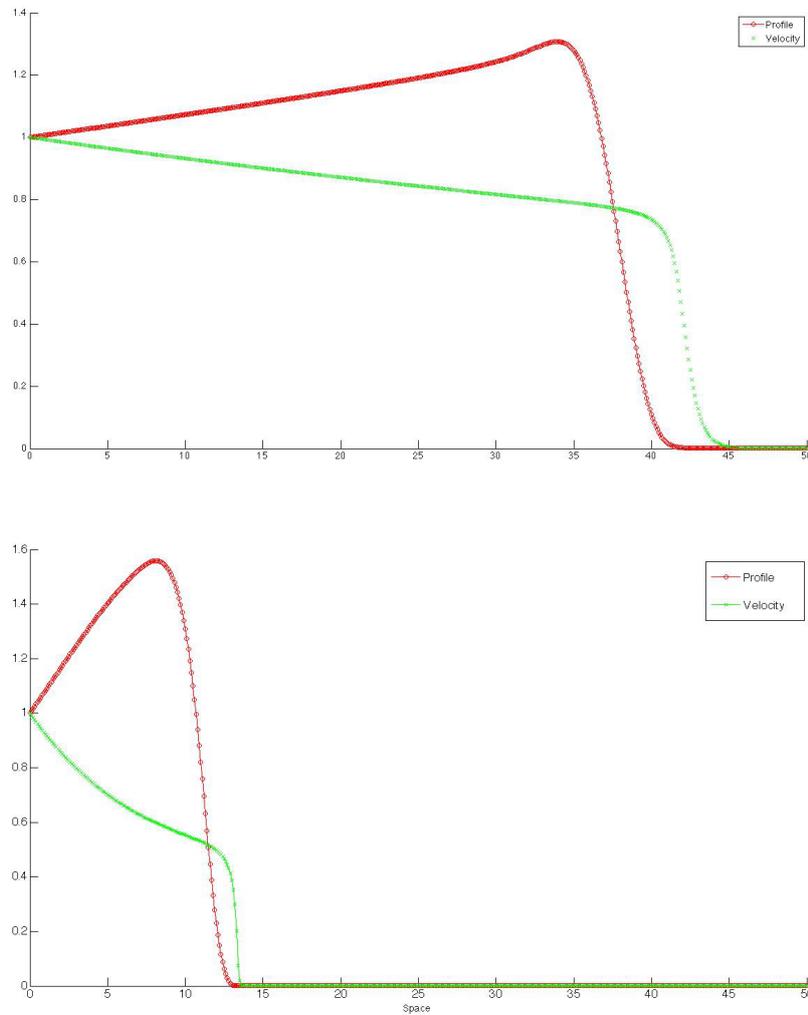


Figura 4.12: Differenza tra profili a scorrimento normale (in alto) e bloccato (in basso) a causa di una *no-slip condition* dopo $T = 35$ unità di tempo. In questo esempio, $B = 10$.

4.2.3 Spessore dello strato precursore

In questo paragrafo viene invece studiato il secondo modello descritto precedentemente: mantenendo un B basso, viene fatto variare lo spessore dello strato precursore per esaminarne l'effetto sull'angolo di contatto.

Dalla teoria e dalle considerazioni precedenti si può dedurre come aumentare lo spessore debba agevolare lo scorrimento del film che altrimenti, nelle condizioni già discusse di β basso, risulterebbe bloccato.

Le prove vengono svolte a $B = 10$ e gli angoli di contatto vengono rilevati dopo 35 unità di tempo.

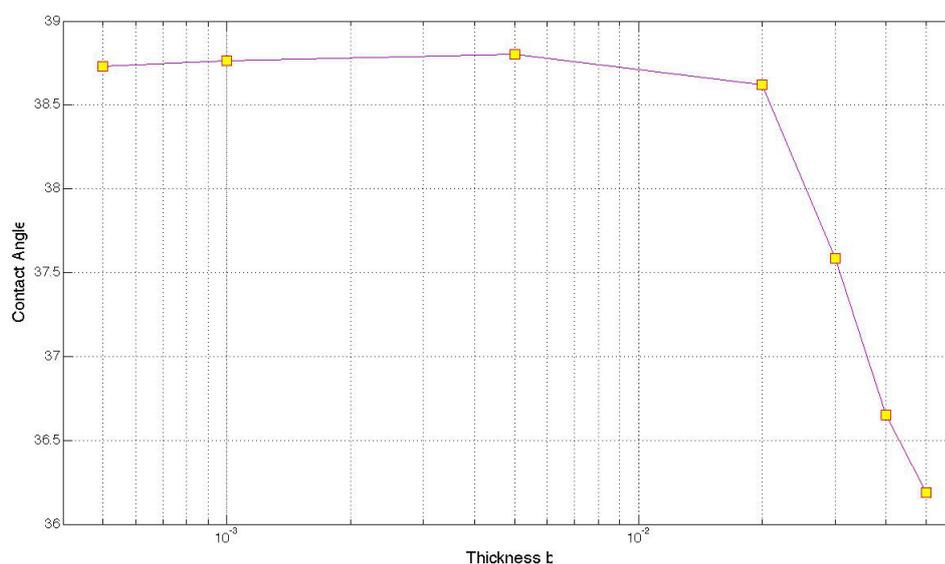


Figura 4.13: Angolo di contatto in funzione di b .

b	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$
Angolo	38.73°	38.76°	38.8°	38.61°	37.58°	36.65°	36.19°

Tabella 4.5: Valori ottenuti dalla prova (illustrati in figura 4.13).

Viene rilevato che l'angolo di contatto diminuisce al crescere di b ; questo sta a significare che effettivamente il film si muove più facilmente, come precedentemente ipotizzato.

Dall'andamento si può anche considerare come, dopo una certa diminuzione di b (sotto 10^{-3}) l'angolo di contatto non abbia grandi margini di variazione: tutti i valori maggiori sono intorno ai 38 gradi e, nelle prove del paragrafo precedente dove $b = 10^{-5}$ per $B = 10$, si era ottenuto un angolo di circa 40° . A fronte di questa variazione di 2° per tre ordini di grandezza di b si osserva invece una diminuzione di ben 1° passando da $b = 3 \cdot 10^{-2}$ a $b = 4 \cdot 10^{-2}$. Questo sta a significare che vi è una soglia sotto la quale lo spessore del film precursore non influisce sullo scorrimento, ossia non lo agevola. Certamente una delle spiegazioni può essere la dimensione fisica dello strato: uno spessore di $10^{-1} \mu m$ rispetto ad una altezza di film delle centinaia di μm avrà sicuramente una influenza maggiore rispetto alle centinaia di Armstrong, ovvero solo qualche strato molecolare.

Con questa osservazione è necessario introdurre considerazioni riguardo la semplificazione sul numero A di Hamaker trovato analiticamente (che tiene conto delle forze intermolecolari) e che per le prove precedenti è stato considerato nullo.

Una prima motivazione è ancora di tipo computazionale: nelle equazioni, il termine A moltiplica un fattore che vede l'altezza del film ad una quarta potenza espresso al denominatore; si comprende la difficoltà di trattare questo termine con il modello senza strato precursore dove, anche se non si mantengono valori nulli, la quarta potenza a denominatore fornisce esponenti anche dell'ordine di 10^{15-20} , chiaramente incompatibili con la soluzione. Nonostante questo si può considerare comunque lecito trascurare tale termine, in quanto l'ordine di grandezza tipicamente assunto da A è di 10^{-6} e con tale intensità il termine non influisce particolarmente sui calcoli della soluzione.

Quando però lo strato b viene portato a valori maggiori con l'intento di considerare possibili strati di molecole, allora è rigoroso tenerne conto; in questo senso risponde bene anche il modello nel codice, fornendo una soluzione in linea con le altre senza problematiche a livello di calcolo. Per confronto, è stata quindi eseguita una prova con valori $B = 10$, $b = 10^{-3}$ e $A = 10^{-6}$ fino ad un tempo $t = 35$, paragonata ad una stessa prova, ma con $A = 0$ come svolto fino ad ora. I risultati sono riportati in figura 4.14.

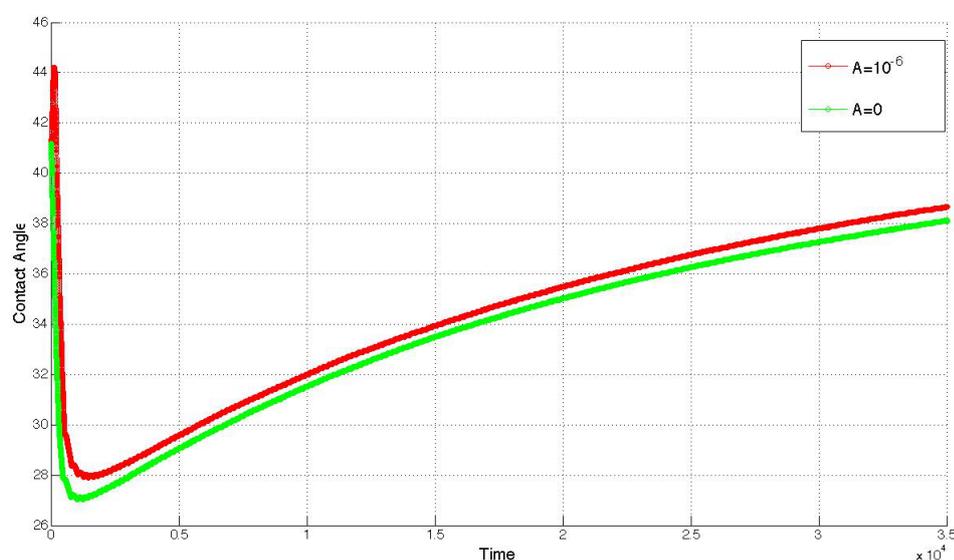


Figura 4.14: Confronto tra prove effettuate considerando (in rosso) o trascurando (in verde) le forze intermolecolari.

Dal confronto tra le curve di andamento dell'angolo di contatto nel tempo, si può notare da subito l'aumento evidente dell'angolo di contatto (circa 1° rispetto ai decimi di grado considerati nelle prove fino ad ora). Chiaramente considerare le forze tra le molecole significa inserire una maggiore inerzia del film allo scivolamento lungo la superficie, nonché un aumento delle forze interne che tendono a mantenere la “massa” più compatta durante il moto; per tutte queste considerazioni è spiegato l'effetto sull'angolo. Evidenza dell'effetto sull'opposizione al moto è data anche nel picco che si ha nei primi secondi della simulazione (curva rossa), indice di una certa opposizione allo scivolamento anche da parte dello strato precursore che subito non riesce a compensare il basso valore di β . Inoltre, all'avanzare del tempo, aumenta la pendenza del profilo di velocità in prossimità della linea di contatto, come mostrato nella figura 4.15.

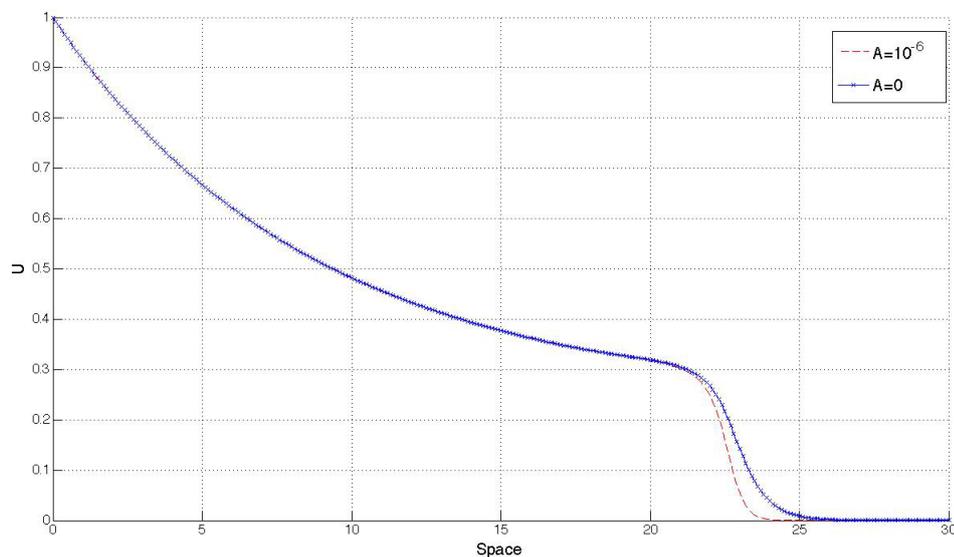


Figura 4.15: Differenza delle velocità in prossimità della linea di contatto (rilevato dopo 35 unità di tempo).

L'aumento della pendenza evidenzia come i punti dello strato precursore scorrano molto meno nel precedere il punto di contatto, a differenza del caso in cui le forze tra le molecole vengano trascurate (linea blu).

4.2.4 Altre osservazioni

Gli elementi considerati fino ad ora sono quelli che hanno fornito i dati maggiormente rilevanti durante le varie prove. È però possibile fare anche altre considerazioni, in particolare si può considerare la velocità del film e la sua distribuzione.

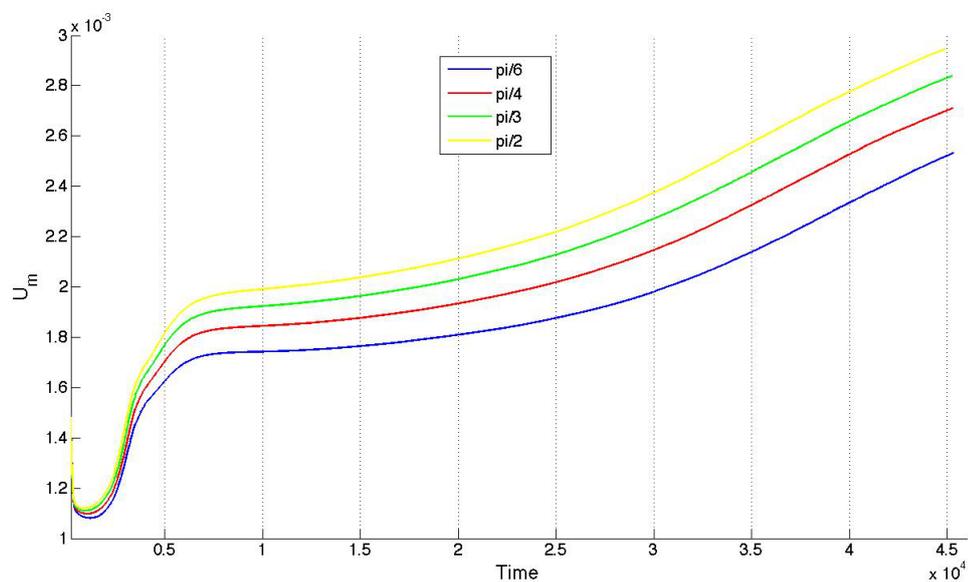


Figura 4.16: Velocità media in funzione dell'angolo di contatto.

Nella figura 4.16 viene illustrato l'andamento della velocità media in funzione del tempo (la velocità viene mediata considerando anche i punti fermi), per validare l'effettiva influenza che ha l'angolo di inclinazione della superficie, come poteva essere intuito dalla definizione del problema. È stata imposta una velocità iniziale di intensità 0.01 per garantire il movimento dello strato liquido e la continuità della portata.

Entrando nel merito del profilo assunto dalla velocità, da una prova effettuata in precedenza è stata rilevata l'immagine seguente (figura 4.17).

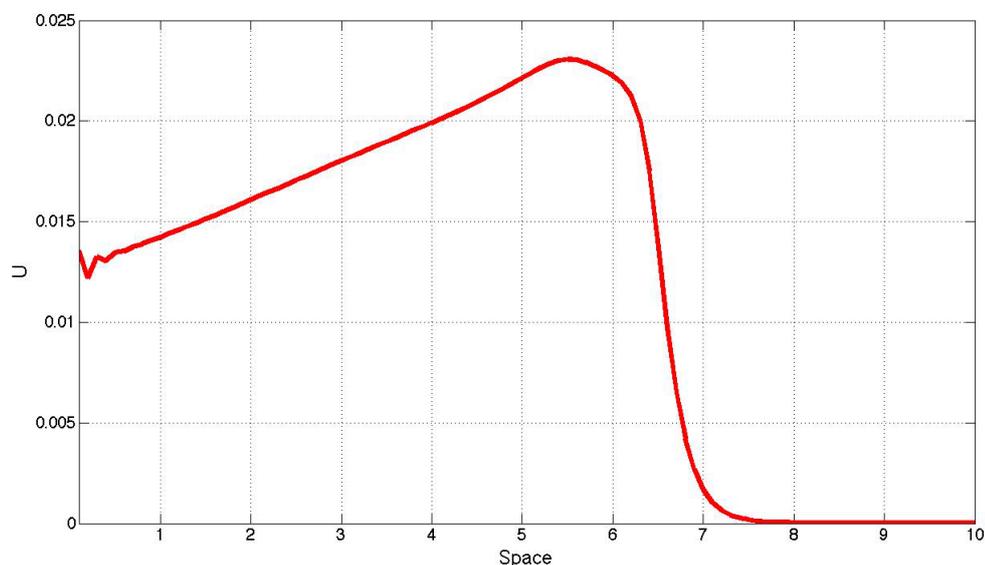


Figura 4.17: Profilo di velocità sviluppato in una prova con $u_0 = 0.01$.

Il picco della curva si rileva in prossimità della linea di contatto, proprio come nelle prove svolte precedentemente; questa volta però il profilo si è sviluppato “spontaneamente” da una condizione di velocità iniziale costante su tutti i punti. Con questa breve osservazione si è voluta evidenziare la validità di imporre alla velocità un profilo parabolico come condizione iniziale, poichè il codice sviluppa un profilo coerente con la realtà fisica indipendentemente dalla condizione iniziale di velocità.

Si può ancora considerare la velocità media del film in funzione del numero di capillarità S ; come detto precedentemente il diminuire del numero di capillarità indica un aumento della tensione superficiale, e ciò dovrebbe avere una ricaduta sulla velocità di avanzamento del liquido.

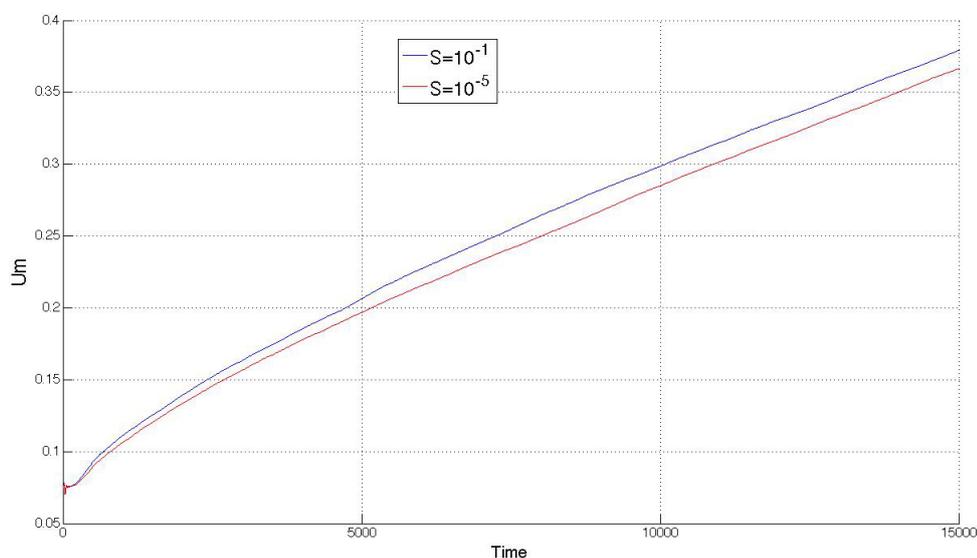


Figura 4.18: Sviluppo nel tempo della velocità media in funzione del numero di capillarità; si sono considerati valori estremi come i più significativi.

Come è possibile osservare, una diminuzione del numero di capillarità porta ad un aumento seppur minimo della velocità: effettivamente, una tensione superficiale maggiore tende ad aumentare la coesione tra le molecole e quindi nel complesso la superficie ha una maggiore inerzia verso i cambi di conformazione, e la massa fluida ne risulta rallentata. Si può pensare ad una similitudine con l'effetto riportato in seguito all'inserimento delle forze tra le molecole, quindi si dovrebbe avere una somma di questi effetti; effettuando una prova (figura 4.19) si può verificare che è quello che effettivamente avviene.

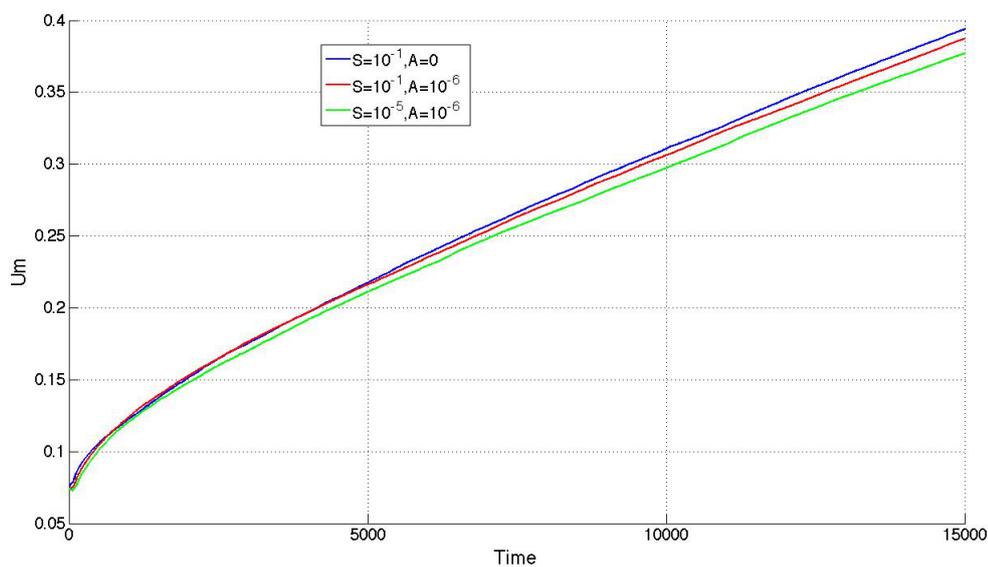


Figura 4.19: Velocità media in funzione di capillarità e forze tra molecole.

Quindi l'aumento della tensione congiunto alle forze tra le molecole, casistica che coincide maggiormente con la realtà, tende a diminuire complessivamente la velocità di scorrimento rispetto alle condizioni ideali. Anche in questo caso il modello computazionale risponde correttamente alle deduzioni dalla realtà fisica.

Durante le prove sul modello, per la combinazione di parametri $B = 10$, $b = 10^{-4}$, $S = 3.59 \cdot 10^{-3}$ (ossia il valore di S calcolato sostituendo i valori propri della glicerina) e $\lambda = 10^{-2}$, si è ottenuto un risultato particolare che sembra condurre alla formazione di un *solitone*. Il solitone è un'onda solitaria auto-rinforzante che analiticamente è causata da una concomitanza tra effetti non lineari e dispersivi in un mezzo, ed ha la caratteristica di propagarsi a velocità costante; questo tipo di onda si osserva ad esempio nelle onde formate dalla marea sul fiume Severn (Regno Unito) oppure in fenomeni atmosferici quali le *roll clouds* (in figura 4.20).

Un'espressione per quest'onda è data dall'equazione di Korteweg-de Vries [10] espressa come:

$$\partial_t \phi + \partial_x^3 \phi + 6\phi \partial_x \phi = 0$$

dove $\phi = f(x, t)$, $\partial_x^3 \phi$ rappresenta il termine dispersivo e $\phi \partial_x \phi$ il termine non lineare.



Figura 4.20: “Roll cloud” generata da un’onda di pressione solitonica.

Effettivamente si può riconoscere in ϕ la funzione di h o u , e nell'equazione del film si possono individuare sia i termini dispersivi ($S \frac{\partial^3 h}{\partial x^3}$) che non lineari ($-u \frac{\partial u}{\partial x}$); il risultato ottenuto è quindi teoricamente lecito.

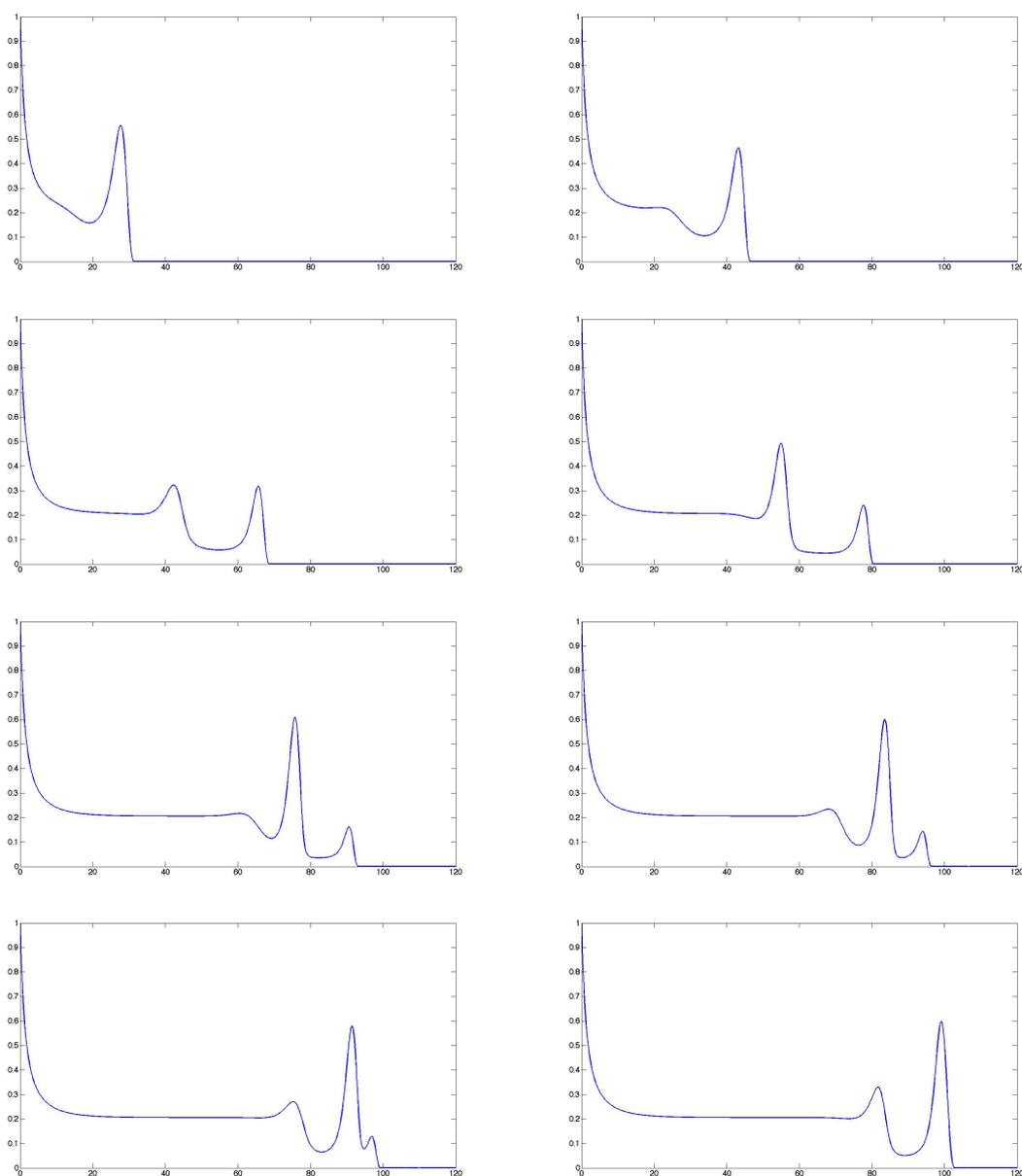


Figura 4.21: Rilevamenti sull'onda a vari istanti di tempo.

In fig. 4.21 si può osservare la generazione di fronti d'onda successivi durante la propagazione: il primo cresce mentre si forma un secondo fronte successivo che, avanzando, ingloba quello originario; l'onda si "autoalimenta" e si propaga mentre la velocità tende ad un valore costante.

Capitolo 5

Conclusioni

5.1 Considerazioni sul lavoro svolto

Al termine del lavoro svolto, si possono trarre conclusioni sul modello sia di natura fisica che puramente computazionale.

Dalle prove svolte sui vari parametri caratteristici si può concludere che:

- variando la tensione superficiale dello strato fluido con agenti quali additivi, catalizzatori, conservanti, agenti antischiuma (entrando nel merito delle lavorazioni industriali, ad esempio) varia la tendenza allo scorrimento sulla superficie ed il film aumenta l'angolo di contatto con la superficie su cui scorre e diminuisce la sua velocità; da questo si può dedurre che alzando particolarmente la tensione superficiale si avrà anche un maggior smorzamento nei confronti di disturbi esterni.
- con i due modelli di scorrimento definiti si può comprendere l'importanza del considerare tra le variabili anche la condizione della superficie: se alla superficie ho una velocità maggiore oppure uno strato già sviluppato di fluido, la massa in esame procederà più agevolmente sulla superficie stessa poichè nel complesso tali condizioni agevolano lo slip.
- considerando le interazioni a livello molecolare si ha, nel complesso, una maggiore inerzia allo scorrimento da parte del film.

È necessario anche indicare osservazioni riguardo la creazione del codice e informatiche in generale; il codice è stato scritto apposta per il lavoro di tesi, quindi può non essere particolarmente efficiente. Facendo un esempio, per una simulazione con $t = [0\ 40]$, $x = [0\ 50]$, $\Delta x = 0.1$ il risultato è una matrice con dimensione 1002×40000 (501 punti in cui calcolare la funzione h , 501 per u con una unità di tempo divisa in circa mille parti dal solutore) delle dimensioni dell'ordine di $1Gb$ nel Workspace di Matlab, fornita in 30 secondi circa. Diventa chiaro che per migliorare il codice, ossia raffinare l'approssimazione alle differenze finite delle derivate o considerare una serie di punti di calcolo più fitta o migliorare il solutore, è necessario avere un calcolatore di maggiori prestazioni.

5.2 Sviluppi futuri

Come prima cosa vanno ricordate le condizioni per cui è valido questo modello, ovvero le ipotesi da cui si è partiti per il calcolo analitico:

- superficie superiore del film libera.
- nessuno scambio di massa, calore o altre condizioni che possano variare le proprietà fisiche del film.
- portata massica in ingresso costante, per evitare la formazione di gocce.
- trattazione bidimensionale con approssimazione asintotica.

Si vuole inoltre sottolineare l'importanza di aver studiato le equazioni della velocità e dello spessore del film in maniera separata considerandone l'interdipendenza in ogni istante del tempo, a differenza delle equazioni trovate in letteratura che si soffermano sull'altezza del film assumendo il profilo di velocità costante nel tempo.

Ricavando informazioni dalla bibliografia si deduce che per una più specifica trattazione del problema è possibile:

- considerare con un modello più raffinato il parametro molecolare in ogni prova svolta.

- inserire nella trattazione l'analisi della funzione di pressione per ogni punto, ed in particolare verificarne l'andamento nella zona di contatto.
- assumere una portata finita, e quindi permettere una conformazione "a goccia" durante lo scivolamento, studiando anche l'angolo di recessione.
- studiare come si propaga un'onda di instabilità nel film imposta in ingresso al sistema, calcolando il tasso di crescita dello spessore in funzione della frequenza di disturbo.
- inserire la presenza di un oggetto galleggiante (si porta ad esempio una lente a contatto su un film lacrimale, che ha spessore medio di $7\mu m$).
- studiare scambi di calore superficiali.
- inserire una analisi più dettagliata delle forze tra le molecole considerando anche forze di adesione con il substrato o imperfezioni del substrato stesso (rugosità).
- considerare il fatto che l'aggiunta di additivi influenzino la viscosità cinematica del fluido.
- estendere l'analisi alle tre dimensioni per poter osservare la formazione delle caratteristiche *fingers*.

Tutti queste argomentazioni sono tutt'ora in fase di studio sia teorico che sperimentale, e dalla numerosità degli aspetti elencati si può capire l'importanza dello studio di questo fenomeno fisico per svariati campi di applicazione.

Appendice

CODICE IN LINGUAGGIO MATLAB

```
function [xx,T,h,tetamax,um,hm]=slippingfilm(t,x,dx)
g=9.81;
A=10(-6);
S=3.59*10(-4);
ni=1.8*10(-3); %glicerina
la=1*10(-3);
B=10(2);
teta=(pi/3);
C=(g*(la3)*sin(teta))/(ni2);
xx=(x(1):dx:x(2));
[c,nx]=size(xx);
dim=(1);
h00=dim*(1-((xx-1)/4).^2); %definita geometria del problema
for i=1:nx %assicurando solo valori positivi
    if h00(i)<0
        h00(i)=0;
    end
    if h00(i)==dim
        z=i;
    end
end
for i=1:z-1
    h00(i)=dim;
end
for i=1:nx %viene individuato il punto triplo
    if h00(i)==0
        k=i-1;
    break
```

```

    end
  end
  for i=k:nx          %definizione strato precursore
    h00(i)=10^(-4);
  end
dimu=dim;
u00=dimu*(1-((xx-1)/4).^2); %geometria della velocità
  for i=1:nx          %solo valori positivi
    if u00(i)<0
      u00(i)=0;
    end
    if u00(i)==dim
      z=i;
    end
  end
end
for i=1:z-1
  u00(i)=dimu;
end
h0=[h00 u00]; %creo condizioni iniziali miste

[T,h]=ode113(@eq,t,h0); %risolutore

[i,n]=size(h);
um=zeros(1,i);
hm=zeros(1,i);
  for v=1:i
    contatoreh=0; %calcolo altezza media
    for ss=1:nx
      contatoreh=contatoreh+h(v,ss);
    end
    hm(v)=contatoreh/nx;
  end
  for v=1:i
    contatoreu=0; %calcolo velocità media
    for ss=nx+1:n
      contatoreu=contatoreu+h(v,ss);
    end
    um(v)=contatoreu/nx;
  end
end

```

```

    conteta=zeros(1,nx);
tetamax=zeros(1,i);
    for m=1:i
        for j=1:nx-1
            conteta(j)=-atan((h(m,j+1)-h(m,j))/dx)*(180/pi);
        end
        tetamax(1,m)=max(conteta);
    end

function f=eq(t,y)           %%funzione che definisce le equazioni e
[n,m]=size(y);              %%le approssimazioni alle differenze finite
f=zeros(n,m);
for i=nx+1:n
    if y(i)<0
        y(i)=0;
    end
        if y(i-nx)<0
            y(i-nx)=0;
        end
end
    end
f(1)=0;                       %derivata hxx
der3hx=zeros(1,nx);
der3hx(1)=(-y(1)+3*y(2)-3*y(3)+y(4))/(dx*dx*dx);
der3hx(2)=(-y(2)+3*y(3)-3*y(4)+y(5))/(dx*dx*dx);
for i=3:nx-3
    der3hx(i)=(-(1/2)*y(i-2)+y(i-1)-y(i+1)+(1/2)*y(i+2))/(dx*dx*dx);
end
der3hx(nx-1)=(y(nx-1)-3*y(nx-2)+3*y(nx-3)-y(nx-4))/(dx*dx*dx);
der3hx(nx)=(y(nx)-3*y(nx-1)+3*y(nx-2)-y(nx-3))/(dx*dx*dx);
%derivata hx
derhx=zeros(1,nx);
derhx(1)=(y(2)-y(1))/dx;
for i=2:nx-1
    %derhx(i)=(y(i+1)-y(i-1))/(2*dx);
    derhx(i)=(y(i)-y(i-1))/dx;
end
derhx(nx)=(y(nx)-y(nx-1))/dx;
%derivata ux
derux=zeros(1,nx);

```

```

derux(1)=(y(nx+2)-y(nx+1))/dx;
for i=2:nx-1
derux(i)=(y(i+nx+1)-y(i+nx-1))/(2*dx);
    end
derux(nx)=(y(n-1)-y(n))/dx;
%derivata uxx
der2ux=zeros(1,nx);
der2ux(1)=(y(nx+3)-2*y(nx+2)+y(nx+1))/(dx*dx);
for i=nx+2:n-1
der2ux(i-nx)=(y(i-1)-2*y(i)+y(i+1))/(dx*dx);
    end
der2ux(nx)=(y(n)-2*y(n-1)+y(n-2))/(dx*dx);
f(1)=0;
    for i=2:nx-1
f(i)=-(y(i+nx)*derhx(i))-y(i)*derux(i);
    end
    f(nx)=0;
f(nx+1)=0;
for
i=nx+2:n-1
    f(i)=-(y(i)*derux(i-nx))+(4*der2ux(i-nx))-(y(i)/(B*y(i-nx)))+...
        ...((4*derux(i-nx)*derhx(i-nx))/y(i-nx))+...
        ...+((3*A*derhx(i-nx))/(y(i-nx).^4))+C+(S*der3hx(i-nx));
    end
f(n)=f(n-1);
end

end

```

Bibliografia

- [1] Liu, J., J. B. Schneider, and J. P. Gollub, 1995, "Three- dimensional instabilities of film flows", *Phys. Fluids* 7, 55-67
- [2] A. Oron, S. H. Davis, S. G. Bankoff, 1997, "Long Scale Evolution of Thin Liquid Films", *Rev. of Modern Phys.* 69, 931-976
- [3] Y. Li, D. Jeong, J. Kim, 2013, "Adaptative Mesh Refinement for Simulation of Thin Film Flows", *Meccanica*, in stampa
- [4] L. Kondic, 2003, "Instabilities in Gravity Driven Flow of Thin Fluid Films", *Siam Rev.* 45, 95-115
- [5] Huppert, H. E., 1982b, "Flow and Instability of a Viscous Gravity Current down a Slope," *Nature (London)* 300, 427-429
- [6] T. Young, "An essay on the Cohesion of Fluids", *Phil. Trans.*, 1805, 65
- [7] E. B. Dussan V. and S. H. Davis, 1974, "On the Motion of a fluid-fluid interface along a solid surface", *JFM*, 65,71-95
- [8] O. Reynolds, "On the Theory of Lubrication and Its Application to Mr. Beauchamp Tower's Experiments, Including an Experimental Determination of the Viscosity of Olive Oil", *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* 1886 177, pub. 1 January 1886
- [9] T. G. Myers, 1997, "Thin Fims With High Surface Tension", *Siam Rev.* 40, 441-462

- [10] Korteweg, D. J., de Vries, G. ,1895, "On the Change of Form of Long Waves advancing in a Rectangular Canal and on a New Type of Long Stationary Waves", *Philosophical Magazine* 39, 422–443
- [11] E. Kirkinis, S. H. Davis, 2013, "Hydrodynamic Theory of Liquid Slippage on a Solid Substrate Near a Moving Contact Line", *Phys. Rev. Letters* 110
- [12] Y. Yuan, T. R. Lee, "Contact Angle and Wetting Properties", *Surface Science Techniques*, Springer, 3-6
- [13] A. Quarteroni, F.Saleri, P. Gervasio, "Calcolo Scientifico, esercizi e problemi risolti con Matlab", Springer-Verlag Italia