



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ II : ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ & ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ
ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ & ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
ΤΟΥ ΝΙΚΟΛΑΟΥ Θ. ΧΑΜΑΚΟΥ

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ ΣΤΕΡΕΩΝ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ ΑΠΟ ΣΤΑΓΟΝΕΣ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ
ΑΝΔΡΕΑΣ Γ. ΜΠΟΥΝΤΟΥΒΗΣ

ΑΘΗΝΑ
ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2011

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή – επιβλέποντα της εργασίας αυτής – που μου έδωσε την ευκαιρία να ασχοληθώ με ένα τόσο ενδιαφέρον θέμα. Με τις εύστοχες παρατηρήσεις του και τις οδηγίες του διαμόρφωσε τις συνθήκες ώστε αυτή η εργασία να ολοκληρωθεί.

Θερμές ευχαριστίες θα ήθελα να απευθύνω επίσης στον Δρα Θανάση Παπαθανασίου για την πολύτιμη βοήθεια του και αμέριστη υποστήριξη του όλο αυτό το διάστημα.

Ιδιαίτερος ευχαριστώ τον Δρα Γιώργο Κόκκορη. Οι συζητήσεις και η συνεργασία που αναπτύχθηκε μαζί του ήταν καθοριστικής σημασίας για την ολοκλήρωση αυτής της εργασίας.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τα μέλη της ερευνητικής ομάδας του Καθ. Α. Μπουντουβή για τη βοήθεια τους και το κλίμα συνεργασίας και ιδιαίτερος τον Δρα Μιχάλη Καβουσανάκη που με καθοδήγησε στους υπολογισμούς.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	7
ABSTRACT.....	8
ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	9
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1:	
ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗ ΦΥΣΙΚΗ ΤΩΝ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ.....	10
1.1. Διεπιφάνειες.....	10
1.2. Διεπιφανειακή τάση.....	11
1.3. Επαφή μεταξύ τριών φάσεων	12
1.3.1. Ολική – Μερική διαβροχή.....	12
1.3.2. Εξίσωση Young.....	13
1.4. Εξίσωση Young-Laplace.....	16
1.5. Αναλυτική λύση του προβλήματος ισορροπίας σταγόνας πάνω σε οριζόντιο επίπεδο.....	17
1.6. Ισορροπία σταγόνας σε στερεή επιφάνεια με τραχύτητα.....	20
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2:	
ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ.....	21
2.1. Βασική θεωρία αριθμητικής ανάλυσης.....	21
2.1.1. Προβλήματα συνοριακών τιμών.....	21
2.1.2. Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων.....	22
2.1.2.1. Διακριτοποίηση προβλήματος συνοριακών τιμών.....	22
2.1.2.2. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	23
2.1.2.3. Συνοριακές συνθήκες.....	24
2.1.2.4. Ολική – τοπική “θεώρηση” των παραμέτρων της διακριτοποίησης.....	24
2.1.2.5. Συναρτήσεις βάσης σε μονοδιάστατα χωρία.....	25
2.1.2.6. Ισοπαραμετρική απεικόνιση.....	26
2.1.2.7. Υπολογισμός εξισώσεων διακριτοποίησης.....	27
2.1.2.7.1. Υπολογισμός ολοκληρωμάτων στα υπόλοιπα Galerkin.....	27
2.1.2.7.2. Αριθμητική ολοκλήρωση.....	28
2.1.3. Επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson.....	28
2.1.4. Ευστάθεια λύσεων μόνιμης κατάστασης.....	29
2.1.5. Παραμετρική ανάλυση.....	30
2.1.5.1. Μέθοδος μήκους-τόξου Keller.....	31

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3:

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΕ ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ.....	34
3.1. Κυλινδρική παραμετροποίηση.....	34
3.2. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 1 (ΠΣΤ-1) – Ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο.....	36
3.2.1. Εξίσωση Young-Laplace.....	37
3.2.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας.....	39
3.2.3. Εξίσωση κατακόρυφου επιπέδου.....	40
3.2.4. Συνοριακές συνθήκες.....	40
3.2.5. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	41
3.2.5.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace.....	41
3.2.5.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου.....	46
3.2.5.3. Υπόλοιπα εξίσωσης κατακόρυφου επιπέδου.....	46
3.2.6. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-1.....	47
3.2.7. Αξιολόγηση αποτελεσμάτων.....	47

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4:

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΕ ΣΦΑΙΡΙΚΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ.....	48
4.1. Σφαιρική παραμετροποίηση.....	48
4.2. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 2 (ΠΣΤ-2) – Ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο.....	50
4.2.1. Εξίσωση Young-Laplace.....	51
4.2.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας.....	52
4.2.3. Συνοριακές συνθήκες.....	53
4.2.4. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	54
4.2.4.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace.....	54
4.2.4.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου.....	56
4.2.5. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-2.....	56
4.3. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 3 (ΠΣΤ - 3) – Ισορροπία σταγόνας σε επίπεδο υπό κλίση.....	57
4.3.1. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας.....	58
4.3.2. Εξίσωση επιπέδου υπό κλίση.....	59
4.3.3. Συνοριακές συνθήκες.....	59
4.3.4. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	60
4.3.4.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace.....	60
4.3.4.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου.....	63
4.3.4.3. Υπόλοιπο εξίσωσης κεκλιμένου επιπέδου.....	63
4.3.5. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-3.....	63

4.4. Αξιολόγηση και σύγκριση αποτελεσμάτων σε σφαιρική και κυλινδρική παραμετροποίηση....
64

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5:

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΕ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΚΟΥΣ-ΤΟΞΟΥ.....	67
5.1. Παραμετροποίηση μήκους-τόξου.....	67
5.2. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 4 (ΠΣΤ-4) – Ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο.....	67
5.2.1. Εξίσωση Young-Laplace.....	69
5.2.2. Εξίσωση μήκους-τόξου.....	70
5.2.3. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας.....	70
5.2.4. Εξίσωση οριζόντιου επιπέδου.....	71
5.2.5. Συνοριακές συνθήκες.....	71
5.2.6. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	71
5.2.6.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace.....	71
5.2.6.2. Υπόλοιπα εξίσωσης μήκους-τόξου.....	76
5.2.6.3. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου.....	76
5.2.6.4. Υπόλοιπα εξίσωσης οριζόντιου επιπέδου.....	76
5.2.7. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-4.....	76
5.3. Σύγκριση ρυθμού σύγκλισης για σφαιρική, κυλινδρική και παραμετροποίηση μήκους-τόξου	77
5.4. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 5 (ΠΣΤ-5) – Ισορροπία σταγόνας σε επιφάνεια που περιλαμβάνει ένα μικροστύλο.....	80
5.4.1. Εξίσωση επιφάνειας που περιλαμβάνει ένα μικροστύλο.....	80
5.4.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου.....	81
5.4.3. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	84
5.4.3.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace.....	84
5.4.3.3. Υπόλοιπα εξίσωσης επιφάνειας.....	90
5.4.4. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-5.....	91
5.4.5. Ενεργειακή ανάλυση – Ευστάθεια των λύσεων.....	95
5.5. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 6 (ΠΣΤ-6) – Ισορροπία σταγόνας σε τραχύ οριζόντιο επίπεδο.. 99	
5.5.1. Εξίσωση επιπέδου με τραχύτητα.....	99
5.5.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου.....	99
5.5.3. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin.....	100
5.5.3.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace.....	100

5.5.3.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου και εξίσωσης του επιπέδου με τραχύτητα.....	100
5.5.4. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-6.....	101
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6:	
ΤΡΕΧΟΥΣΑ ΕΡΕΥΝΑ – ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ.....	103
6.1. Τροποποιημένη εξίσωση Young-Laplace.....	103
6.1.1. Μικροσκοπική γωνία επαφής.....	104
6.1.2. Επίλυση ΠΣΤ με τροποποιημένη εξίσωση Young-Laplace.....	105
6.1.3. Αποτελέσματα.....	107
6.2. Επίλυση ΠΣΤ σε διδιάστατο χωρίο.....	110
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7:	
ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	112
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α:	
ΚΑΜΠΥΛΟΤΗΤΑ.....	115
A.1. Γενικά Στοιχεία.....	115
A.2. Υπολογισμοί καμπυλότητας.....	116
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β:	
ΕΜΒΑΔΟΝ ΚΑΙ ΠΡΟΒΟΛΗ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ.....	118
B.1. Επιφάνεια σε κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων.....	118
B.2. Επιφάνεια σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων.....	119
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	121
Ξενόγλωσση.....	121
Ελληνόγλωσση.....	122

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην εργασία αυτή γίνεται υπολογιστική επίλυση προβλημάτων διαβροχής στερεών επιφανειών από αξονοσυμμετρικές σταγόνες. Οι εξισώσεις που διέπουν την διαβροχή των στερεών από ρευστά συνθέτουν μη-γραμμικά, πολλές φορές και ελεύθερου συνόρου προβλήματα. Η βασική εξίσωση που χρησιμοποιείται σε όλα τα προβλήματα που επιλύονται είναι η διαφορική εξίσωση Young-Laplace της μηχανικής ισορροπίας της σταγόνας. Για την προσεγγιστική επίλυση των εξισώσεων επιλέγεται η μέθοδος Galerkin/πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με την επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson.

Οι υπολογισμοί εκτελούνται με τρεις διαφορετικούς τρόπους παραμετροποίησης της γεωμετρίας του προβλήματος – κυλινδρική παραμετροποίηση, σφαιρική παραμετροποίηση και μήκους-τόξου παραμετροποίηση. Η διαφορά μεταξύ των παραμετροποιήσεων έγκειται στο σύστημα συντεταγμένων και στις ανεξάρτητες μεταβλητές που χρησιμοποιούνται. Ακόμα, γίνεται χρήση πολλών μορφών στερεών επιφανειών όπως οριζόντιο επίπεδο, επίπεδο υπό κλίση, τραχύ επίπεδο, καθώς επίσης και επίπεδο που περιλαμβάνει ένα μικροστυλό (micro-pillar).

Τα αποτελέσματα περιλαμβάνουν διαμορφώσεις της διεπιφάνειας της σταγόνας όπως διαβρέχει τις στερεές επιφάνειες και διαγράμματα παραμετρικής ανάλυσης με βηματισμό μήκους-τόξου για την διέλευση από ιδιάζοντα σημεία (όπως σημεία στροφής) σε κλάδους λύσεων. Ακόμα, γίνεται σύγκριση του ρυθμού σύγκλισης προς την ακριβή λύση, καθώς πυκνώνει το πλέγμα διακριτοποίησης, για τις διάφορες παραμετροποιήσεις και αναδεικνύεται η υπολογιστικά αποδοτικότερη παραμετροποίηση, που είναι η σφαιρική. Τέλος πραγματοποιείται ανάλυση ευστάθειας των λύσεων, στην παραμετροποίηση μήκος-τόξου, χρησιμοποιώντας ενεργειακή προσέγγιση και εντοπίζονται ασταθείς λύσεις.

Στο τελευταίο κεφάλαιο γίνεται μια ανασκόπηση της τρέχουσας έρευνας σχετικά με την τροποποίηση της εξίσωσης Young-Laplace, με την επιφανειακή τάση να είναι μεταβαλλόμενο μέγεθος.

DIPLOMA THESIS
By N. T. CHAMAKOS

Computational analysis of solid surfaces wetting by droplets

ABSTRACT

This thesis deals with solving computational problems of wetting of solid surfaces by axisymmetric droplets. The equations governing the wetting of solid surfaces from liquids compose non-linear, often free boundary problems. The basic equation used in all the problems solved is the differential equation of Young-Laplace of drop mechanical equilibrium. The method of Galerkin/finite elements has been chosen for the approximate solution of the equations combined with the Newton-Raphson iteration.

The calculations are performed with three different geometry parametrizations - cylindrical, spherical and arc-length parametrization - the difference between them being in the choice of the coordinate system and the independent variables. Furthermore, many types of solid surfaces have been used, such as horizontal, inclined, rough and surface with a micro-pillar.

The results include the shape of the free surface of the droplet as it wets solid surfaces and parametric analysis employing the arc-length continuation method to circumvent turning point singularities on solution branches. Furthermore, after comparing the rate of convergence to the exact solution of the different parametrizations, against mesh refinement, we conclude that the spherical parametrization is the most cost effective one. Finally we examine the stability of the computed solutions using the energy approach and we locate unstable ones.

The last chapter is an overview of the current research in modifying Young-Laplace equation. In the modified equation, the surface tension is no longer treated as a constant quantity.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η θεωρητική ανάλυση της διαβροχής μιας στερεής επιφάνειας από σταγόνα έχει μακρά ιστορία. Ξεκίνησε πριν από περισσότερα από διακόσια χρόνια με την έρευνα του Young (βλ Κεφάλαιο 1, παράγραφο 1.3.2.). Η μελέτη του συγκεκριμένου προβλήματος είναι πολύ σημαντική για πλήθος εφαρμογών. Ενδεικτικά αναφέρονται:

- βαφή υφασμάτων,
- απορρυπαντικές ιδιότητες ουσιών,
- κατασκευή παμπρίζ,
- κατασκευή ηλιακών συλλεκτών,
- αυτοκαθαριζόμενες βαφές.

Σήμερα η θεωρητική μελέτη της διαβροχής χρησιμοποιείται επίσης σε καινοτόμες εφαρμογές του φαινομένου της ηλεκτροδιαβροχής – δηλαδή της δυνατότητας ελέγχου των διαβρεκτικών ιδιοτήτων αγωγίμων υγρών. Σε αυτές τις εφαρμογές περιλαμβάνονται οι:

- φακοί μεταβλητής εστίασης,
- ηλεκτρονικό χαρτί,
- μικρο-εργαστηριακές μονάδες (lab-on-a-chip).

Το πρόβλημα που γεννάται είναι να βρεθεί ένας υπολογιστικά γρήγορος τρόπος για την προσομοίωση διαβροχής στερεών από σταγόνες. Σε αυτόν τον τομέα φιλοδοξεί να συνεισφέρει αυτή η εργασία, καθώς οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται έχουν κατά το δυνατόν μικρό υπολογιστικό κόστος. Ακόμα, η χρήση μιας τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace (βλ. Κεφάλαιο 6, παράγραφο 6.1.) θα μπορούσε να μας δώσει λύση σε προβλήματα διαβροχής όπου υπάρχουν παγιδευμένες “τσέπες” αέρα ανάμεσα στην σταγόνα και στο στερεό (σχήμα 6.1). Με τον τρόπο αυτό θα μπορούσαμε να αποφύγουμε υπολογιστικά χρονοβόρες αριθμητικές μεθόδους όπως η μέθοδος level-set. Στην εργασία αυτή επιλύονται, σαν αυτοτελή θέματα, έξι προβλήματα συνοριακών τιμών. Κάθε ένα από αυτά αναφέρεται σε συγκεκριμένη μέθοδο παραμετροποίησης και συγκεκριμένη γεωμετρία στερεής επιφάνειας.

Πρέπει να σημειώσουμε ότι τα μεγέθη με φυσικές διαστάσεις συμβολίζονται με $\hat{}$ για να ξεχωρίζουν από τα αντίστοιχα αδιάστατα. Η σύμβαση αυτή δεν ισχύει, λόγω απλοποίησης των σχέσεων στο κεφάλαιο 1. Στο κεφάλαιο αυτό όλα τα μεγέθη έχουν φυσικές διαστάσεις.

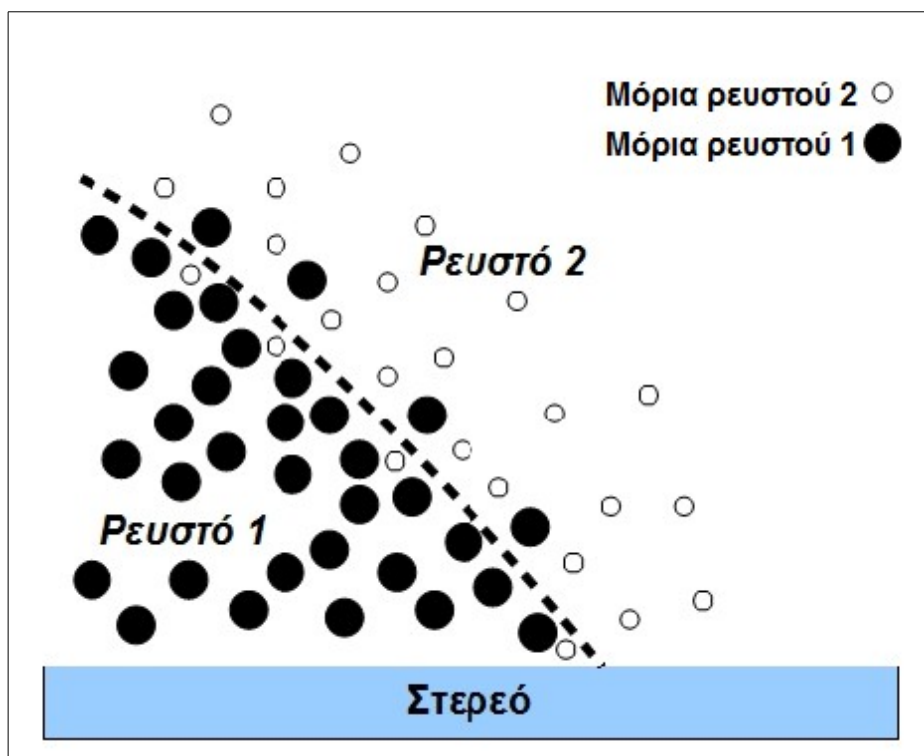
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1:

ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗ ΦΥΣΙΚΗ ΤΩΝ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται οι βασικές αρχές της φυσικής των διεπιφανειών. Συγκεκριμένα γίνεται περιγραφή της δομής μιας διεπιφάνειας, της διεπιφανειακής τάσης και δίνονται παραδείγματα περιπτώσεων διαβροχής στερεών επιφανειών από ρευστά. Ακόμα, παρουσιάζεται η εξίσωση Young-Laplace, που διέπει την ισορροπία υγρών διεπιφανειών και γίνεται αναφορά στην αναλυτική επίλυση προβλημάτων διαβροχής μια επίπεδης επιφάνειας.

1.1. Διεπιφάνειες

Διεπιφάνεια είναι η γεωμετρική επιφάνεια που διαχωρίζει δύο διαφορετικές φάσεις. Αυτός ο ορισμός υποδηλώνει ότι μια διεπιφάνεια δεν έχει πάχος. Στην πραγματικότητα όμως, ο ορισμός της διεπιφάνειας είναι πιο πολύπλοκος και ο διαχωρισμός δύο ρευστών σε επαφή εξαρτάται κυρίως από τις μοριακές αλληλεπιδράσεις των μορίων του κάθε ρευστού. Σε μικροσκοπική κλίμακα μια σχηματική απεικόνιση της διεπιφάνειας μεταξύ των δύο ρευστών είναι όπως φαίνεται στο σχήμα (1.1). [Butt et al. 2003]



Σχήμα 1.1 – Η διεπιφάνεια μεταξύ δύο ρευστών σε μικροσκοπική κλίμακα

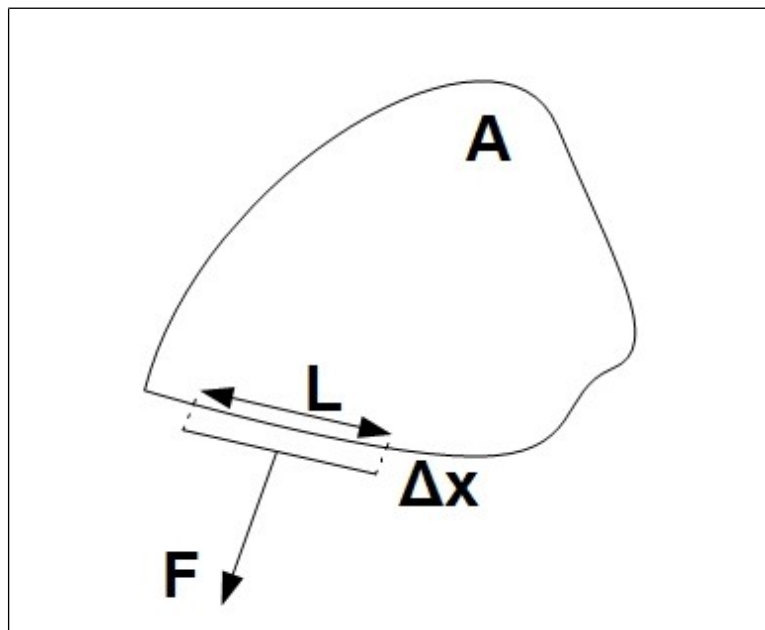
Σε αντίθεση με τη μικροσκοπική κλίμακα, σε μακροσκοπική κλίμακα η διεπιφάνεια είναι μια μαθηματική επιφάνεια χωρίς πάχος. Θα μπορούσαμε να τη φανταστούμε σαν μια τεντωμένη

μεμβράνη, στην οποία επιβάλλεται μια τάση, που αντιτίθεται στην παραμόρφωσή της. Η τάση αυτή λέγεται διεπιφανειακή τάση.

1.2. Διεπιφανειακή τάση

Έστω μια διεπιφάνεια A (σχήμα 1.2) και ένα τμήμα στην περιφέρειά της μήκους L . Για τη μετατόπιση του τμήματος αυτού κατά Δx , δηλαδή για την αύξηση του εμβαδού της διεπιφάνειας κατά $\Delta A = L\Delta x$ απαιτείται δύναμη \vec{F} . Η δύναμη αυτή είναι αντίθετη της δύναμης που ασκείται στο τμήμα L , από την ίδια τη διεπιφάνεια, για την επαναφορά της στην αρχική της κατάσταση. Η δύναμη F είναι ανάλογη του L και ισχύει $\vec{F} = \gamma L$ ή:

$$\gamma = \frac{\vec{F}}{L}. \quad (1-1)$$



Σχήμα 1.2 – Η δύναμη F είναι ανάλογη του μήκους L με συντελεστή αναλογίας την διεπιφανειακή τάση

Η εξίσωση (1-1) ορίζει την διεπιφανειακή τάση, γ , ως δύναμη ανά μονάδα μήκους. Στο διεθνές σύστημα (SI) εκφράζεται σε μονάδες N/m . Από τα παραπάνω προκύπτει ότι το έργο για την αύξηση του εμβαδού της διεπιφάνειας είναι:

$$\delta W = \int \gamma L dx = \int \gamma dA, \quad (1-2)$$

το οποίο στην περίπτωση που η διεπιφανειακή τάση, γ , είναι ανεξάρτητη από τη θέση πάνω στην διεπιφάνεια μπορεί να γραφεί: $\delta W = \gamma \Delta A$. Έτσι η διεπιφανειακή τάση ορίζεται ως η ενέργεια που απαιτείται έτσι ώστε να επιτευχθεί αντιστρεπτή αύξηση του εμβαδού της διεπιφάνειας, κατά μια μονάδα. Εξορισμού οι διεπιφάνειες υγρών είναι ιστροπικές (στατιστικά ίδιος αριθμός μορίων και αλληλεπιδράσεων προς όλες τις κατευθύνσεις). Η τιμή της διεπιφανειακή τάσης είναι ανεξάρτητη

από τη διεύθυνση κατά την οποία ασκείται η δύναμη. Επομένως η διεπιφανειακή τάση είναι βαθμωτό μέγεθος.

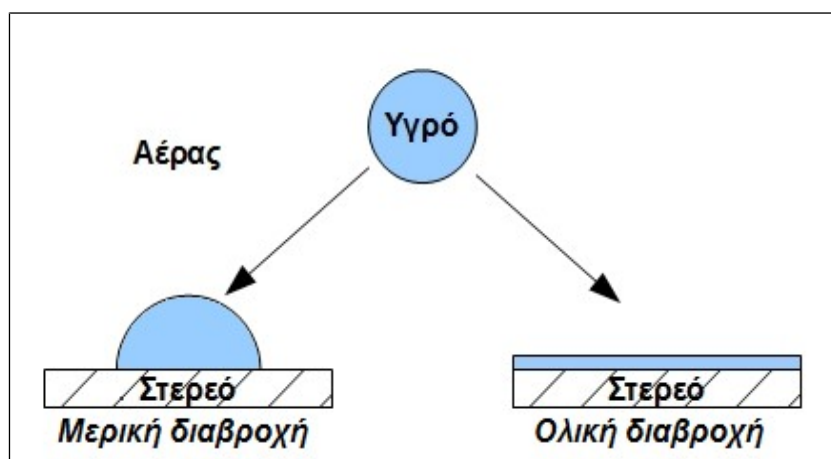
Σε μικροσκοπική κλίμακα, η διεπιφανειακή τάση γίνεται αισθητή ως εξής: Στο εσωτερικό μιας ισοτροπικής φάσης, ένα μόριο έλκεται ισοδύναμα από τα γειτονικά μόρια προς όλες τις διευθύνσεις, έτσι ώστε η συνολική δύναμη που δρα στο κεντρικό μόριο να είναι μηδέν. Στη διεπιφάνεια τα μόρια βρίσκονται υπό την επίδραση ενός μη συμμετρικού πεδίου δυνάμεων. Έλκονται περισσότερο από τη φάση εκείνη η οποία ασκεί υψηλότερη ελκτική δύναμη. Σαν αποτέλεσμα τα μόρια τείνουν να εγκαταλείψουν τη διεπιφάνεια, και για το λόγο αυτό μειώνεται το εμβαδόν της. Έτσι προκύπτει ότι η διεπιφανειακή τάση είναι μεγαλύτερη όσο περισσότερο διαφέρουν οι δυνάμεις συνοχής μεταξύ δύο γειτονικών φάσεων. [de Gennes et al. 2004] [Δρυγιαννάκης 2009]

1.3. Επαφή μεταξύ τριών φάσεων

1.3.1. Ολική – Μερική διαβροχή

Μέχρι τώρα αναφερθήκαμε σε διεπιφάνειες μεταξύ δύο ρευστών. Από την τομή τριών διεπιφανειών μεταξύ τριών διαφορετικών υλικών σχηματίζονται τριπλές γραμμές επαφής. Για παράδειγμα, μια σταγόνα νερού, που περιβάλλεται από αέρα, σε ένα επίπεδο στερεό υπόστρωμα δημιουργεί μια τριπλή γραμμή επαφής. Οι τρεις διεπιφάνειες που δημιουργούνται είναι: νερού / αέρα, στερεού / ρευστού και νερού / στερεού.

Το σχήμα που παίρνει μία σταγόνα όταν ισορροπεί σε μια οριζόντια στερεή επιφάνεια, εξαρτάται από τη φύση της στερεάς επιφάνειας, του υγρού καθώς και από το τρίτο μέσο που περιβάλλει τη σταγόνα και μπορεί να είναι αέρας ή υγρό. Στην περίπτωση μιας σταγόνας σε επαφή με μια στερεή επιφάνεια δύο διαφορετικές καταστάσεις είναι δυνατές: είτε αποκτά σχήμα τμήματος σφαίρας και η διαβροχή χαρακτηρίζεται σαν μερική, είτε σχηματίζει ένα λεπτό φιλμ διαβρέχοντας τη στερεά επιφάνεια και η διαβροχή χαρακτηρίζεται σαν ολική (σχήμα 1.3). Για παράδειγμα σε κανονικές συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας, μια μικροποσότητα νερού απλώνεται σαν ένα λεπτό υμένιο σε ένα πολύ καθαρό και λείο υπόστρωμα γυαλιού, ενώ σχηματίζει σταγόνα σε ένα πλαστικό υπόστρωμα.



Σχήμα 1.3 – Καταστάσεις μερικής και ολικής διαβροχής

Ένα υγρό σχηματίζει λεπτό υμένιο όταν βρίσκεται σε επαφή με ένα στερεό υπόστρωμα αν ευνοείται η μείωση της ενέργειας του συστήματος από την παρουσία του υγρού φιλμ. Η επιφανειακή ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας του στερεού είναι: γ_{SV} . Η επιφανειακή ενέργεια του διαβρεγμένου στερεού είναι: $\gamma_{SL} + \gamma_{LV}$. Η παράμετρος διαβροχής, S , καθορίζει τον τύπο της διαβροχής (ολική ή μερική) [de Gennes et al. 2004]:

$$S = \gamma_{SV} - (\gamma_{SL} + \gamma_{LV}) . \quad (1-3)$$

Αν το S είναι θετικό, το υγρό διαβρέχει πλήρως τη στερεή επιφάνεια. Αν το S είναι αρνητικό, το υγρό σχηματίζει σταγόνες. Σε περίπτωση μερικής διαβροχής, αν η γωνία επαφής με το στερεό είναι μικρότερη από 90 μοίρες, τότε η στερεή επιφάνεια χαρακτηρίζεται ως υδρόφιλη ενώ στην αντίθετη περίπτωση χαρακτηρίζεται ως υδρόφοβη (σχήμα 1.4). Η γωνία επαφής μεταξύ στερεού και υγρού υπολογίζεται από τις διεπιφανειακές τάσεις μέσω της εξίσωσης Young.

1.3.2. Εξίσωση Young

Όταν μια σταγόνα περιβάλλεται από ένα ρευστό (π.χ. αέρας) τότε η συνολική επιφανειακή ενέργεια δίνεται από τη σχέση:

$$E = \int_A \gamma_{LV} dA' , \quad (1-4)$$

όπου: dA' το στοιχειώδες εμβαδόν της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (βλ. παράγραφο 1.2).

Όταν μια σταγόνα επικάθεται σε μια στερεή επιφάνεια τότε σχηματίζει μια τριπλή γραμμή επαφής στην περιοχή όπου η υγρή, η στερεά και η αέρια φάση συναντώνται. Η αλληλεπίδραση των διεπιφανειακών τάσεων στερεού / υγρού, υγρού / αέρα και στερεού / αέρα, καθορίζει το σχήμα της σταγόνας. Η γωνία επαφής (θ_y ή γωνία-Young) που σχηματίζει το υγρό με το στερεό υπόστρωμα

μπορεί να υπολογιστεί με τη βοήθεια της αρχής της εικονικής μετατόπισης (principle of virtual displacement) (σχήμα 1.5). Μια οποιαδήποτε απειροστή μεταβολή Δx της γραμμής επαφής, προκαλεί μεταβολή στην ελεύθερη ενέργεια του συστήματος. Η μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας υπολογίζεται από το ισοζύγιο διεπιφανειακών τάσεων στη γραμμή επαφής και σε διαφορική μορφή δίνεται από τη σχέση:

$$dE = \gamma_{SL,0} dA - \gamma_{SV,0} dA + \gamma_{LV,0} \cos \theta_y dA , \quad (1-5)$$

όπου: $\gamma_{SL,0}$, $\gamma_{SV,0}$, $\gamma_{LV,0}$ είναι οι διεπιφανειακές τάσεις στερεού / υγρού, στερεού / αέρα και υγρού / αέρα αντίστοιχα, και

$$dA = 2 \pi r dx , \quad (1-6)$$

όπου, r , είναι η ακτίνα της γραμμής επαφής. Με αναδιάταξη των όρων της σχέσης (1-5) προκύπτει:

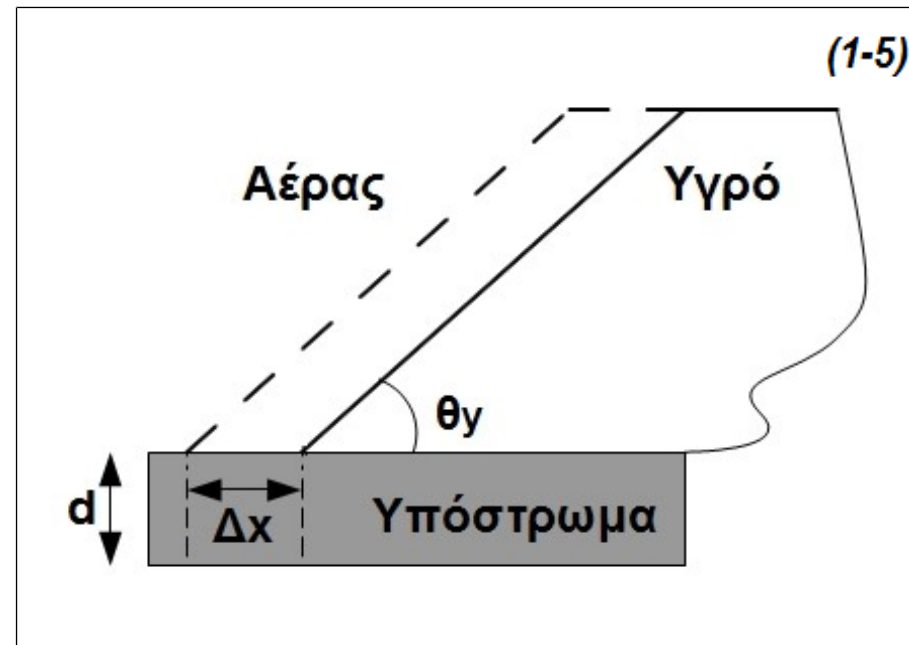
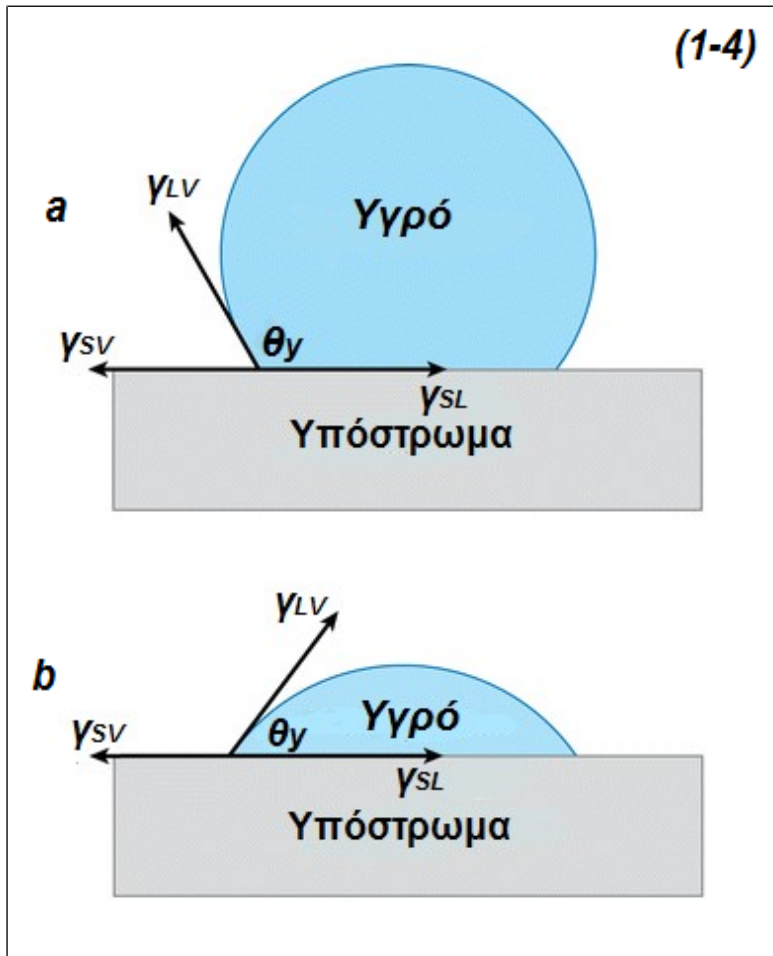
$$\frac{dE}{dA} = \gamma_{SL,0} - \gamma_{SV,0} + \gamma_{LV,0} \cos \theta_y . \quad (1-7)$$

Η ισορροπία και άρα η ελάχιστη ενέργεια προκύπτει όταν $\frac{dE}{dA} = 0$. Άρα από την σχέση (1-7) προκύπτει:

$$\cos \theta_y = \frac{\gamma_{SV,0} - \gamma_{SL,0}}{\gamma_{LV,0}} . \quad (1-8)$$

Η εξίσωση (1-8) είναι γνωστή ως εξίσωση Young και συνδέει τη γωνία επαφής με τις διεπιφανειακές τάσεις στερεού / υγρού, υγρού / αέρα και στερεού / αέρα. [Adamson & Gast 1997] [Δρυγιαννάκης 2009]

Πρέπει να σημειωθεί ότι η εξίσωση Young ισχύει μόνο όταν η στερεή επιφάνεια που επικάθεται η σταγόνα είναι ιδανική (χωρίς ατέλειες). Ακόμα, η γωνία επαφής που περιγράφεται είναι μακροσκοπικό (παρατηρήσιμο) μέγεθος, το οποίο παύει να έχει νόημα σε μικρές κλίμακες (βλ. Κεφάλαιο 6, παράγραφο 6.1.).



Σχήμα 1.4 – Σταγόνα σε επαφή με στερεή επιφάνεια – a) Υδρόφοβη συμπεριφορά, b) Υδρόφιλη συμπεριφορά

Σχήμα 1.5 – Σχηματική αναπαράσταση εικονικής μετατόπισης της γραμμής επαφής

1.4. Εξίσωση Young-Laplace

Έστω σφαιρική σταγόνα υγρού που περιβάλλεται από ένα ρευστό. Το έργο που απαιτείται για την αύξηση του όγκου της σταγόνας (δηλαδή για την αύξηση της ακτίνας της σταγόνας από R σε $R+dR$) δίνεται από τη σχέση:

$$\delta W_i = -P_0 d\Omega_0, \quad (1-9)$$

όπου, P_0 είναι η αρχική πίεση στη σταγόνα και $d\Omega_0$ είναι η αύξηση του όγκου της σταγόνας:

$$d\Omega_0 = 4\pi R^2 dR. \quad (1-10)$$

Το έργο για τη μείωση του εξωτερικού όγκου είναι:

$$\delta W_e = -P_1 d\Omega_1, \quad (1-11)$$

όπου, P_1 είναι η εξωτερική πίεση από το ρευστό στη σταγόνα σε ακτίνα: $R+dR$, και $d\Omega_1$ είναι η μείωση του εξωτερικού όγκου ίση με $-d\Omega_0$. Το έργο που αντιστοιχεί στην αύξηση του εμβαδού της διεπιφάνειας είναι:

$$\delta W_s = \gamma dA, \quad (1-12)$$

όπου dA είναι η αύξηση του εμβαδού της διεπιφάνειας και δίνεται από τη σχέση: $dA = 8\pi R dR$

Η Συνθήκη μηχανικής ισορροπίας είναι:

$$\delta W = \delta W_i + \delta W_e + \delta W_s = 0. \quad (1-13)$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση (1-13) τις σχέσεις (1-9), (1-11), (1-12) προκύπτει:

$$\Delta P = P_0 - P_1 = \frac{2\gamma}{R}. \quad (1-14)$$

Η σχέση (1-14) είναι η εξίσωση Young-Laplace για σφαίρα. Η ανάλυση που χρησιμοποιήσαμε για την εξαγωγή της (1-14) μπορεί να γενικευτεί στη μορφή:

$$dP = \gamma \frac{dA}{d\Omega}. \quad (1-15)$$

Δηλαδή, η εξίσωση (1-15) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μια οποιαδήποτε διεπιφάνεια τοπικά ορισμένη από δύο κύριες ακτίνες καμπυλότητας (βλ. Κεφάλαιο 2, παράγραφος 2.2.1.) R_1 και R_2 .

Στην περίπτωση αυτή:

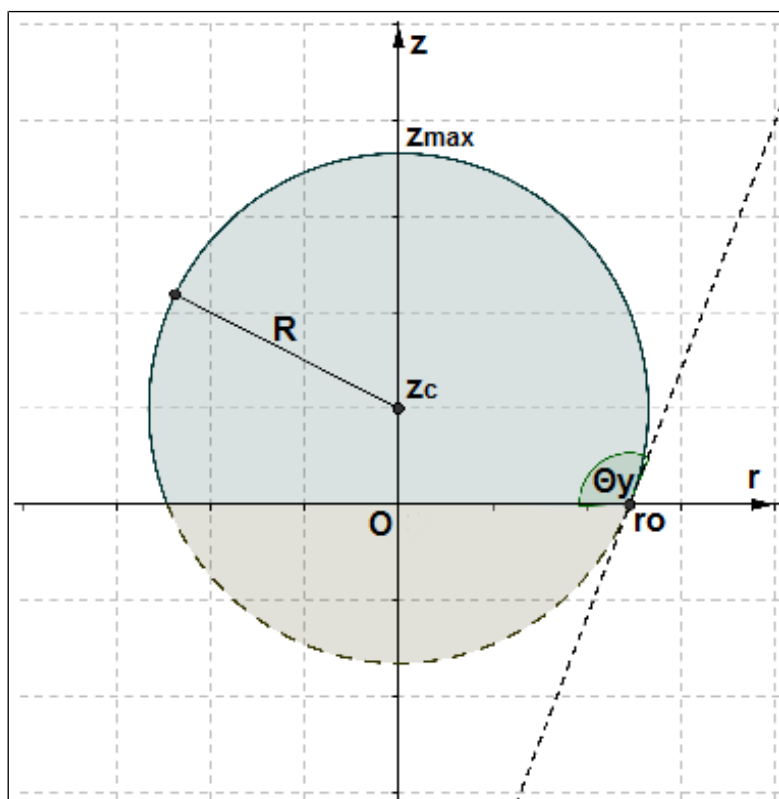
$$\Delta P = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = 2\gamma H, \quad (1-16)$$

όπου: H είναι η μέση τοπική καμπυλότητα της διεπιφάνειας. [Adamson & Gast 1997]

Η επίλυση της εξίσωσης Young-Laplace (1-16) μπορεί να υπολογίσει το σχήμα και την πίεση στο εσωτερικό μια σταγόνας σε καταστάσεις ισορροπίας, δεν περιγράφει όμως τη χρονική εξέλιξη τους. Λόγω της πολυπλοκότητας της συγκεκριμένης εξίσωσης κρίνεται σκόπιμη η χρήση αριθμητικών μεθόδων για την επίλυσή της, όπως θα περιγραφούν στο επόμενο κεφάλαιο. Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με προβλήματα ισορροπίας σταγόνας πάνω σε στερεή επιφάνεια. Σε κάποιες περιπτώσεις η λύση μπορεί να βρεθεί με γεωμετρικό τρόπο, αντί να χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση Young-Laplace.

1.5. Αναλυτική λύση του προβλήματος ισορροπίας σταγόνας πάνω σε οριζόντιο επίπεδο

Στο πρόβλημα της ισορροπίας σταγόνας πάνω σε λείο οριζόντιο επίπεδο, χωρίς την επίδραση της βαρύτητας, η λύση (δηλαδή το σχήμα της καμπύλης που είναι η τομή της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας με στο επίπεδο rz) μπορεί να δοθεί με αναλυτικό τρόπο. Διαπιστώνουμε ότι κάθε τέτοια καμπύλη είναι ένα τμήμα κύκλου με κέντρο z_c και ακτίνα R όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 1.6).



Σχήμα 1.6 – Αναλυτική λύση του σχήματος της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας σε κυλινδρικές συντεταγμένες

Για να υπολογιστεί η αναλυτική λύση, χρησιμοποιούνται ως δεδομένα η γωνία επαφής της σταγόνας με το επίπεδο (γωνία-Young ή θ_y) καθώς και ο όγκος της σταγόνας ($V_{droplet}$). Τελικά επιλύεται ένα σύστημα με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$\frac{dz}{dr} \Big|_{z=0} = \tan(\pi - \theta_y), \quad (1-17a)$$

που προκύπτει από την κλίση της εφαπτομένης του κύκλου στο σημείο $z = 0$.

$$V_{droplet} = \int_0^{z_{max}} \pi [r(z)]^2 dz, \quad (1-17b)$$

που προκύπτει από τον όγκο τμήματος σφαίρας, ως άθροισμα όγκων στοιχειωδών κυλίνδρων με ακτίνα r και ύψος dz .

$$(z - z_c)^2 + r^2 = R^2, \quad (1-17c)$$

όπου: $z_{max} = z_c + R$ (βλ. Σχήμα 6.1).

Από τις εξισώσεις (1-17a) και (1-17c) προκύπτει:

$$\tan(\pi - \theta_y) = \frac{dr}{dz} \Big|_{r_0} = \frac{-r_0}{\sqrt{R^2 - r_0^2}}, 0 \geq z_c, \quad (1-18a)$$

$$\tan(\pi - \theta_y) = \frac{dr}{dz} \Big|_{r_0} = \frac{r_0}{\sqrt{R^2 - r_0^2}}, 0 < z_c. \quad (1-18b)$$

Όπου: $r = r_0$ στο σημείο $z = 0$ (βλ. Σχήμα 6.1).

Από την εξίσωση (1-17c) για $z=0$ ισχύει:

$$z_c = -\sqrt{R^2 - r_0^2}, 0 \geq z_c, \quad (1-19a)$$

$$z_c = \sqrt{R^2 - r_0^2}, 0 < z_c. \quad (1-19b)$$

Από τις εξισώσεις (1-18a), (1-18b), (1-19a), (1-19b) προκύπτει:

$$z_c = \frac{r_0}{\tan(\pi - \theta_y)}. \quad (1-20)$$

Επίσης, από τις εξισώσεις (1-17b) και (1-17c) ισχύει:

$$V_{droplet} = \int_0^{z_{max}} \pi [R^2 - (z - z_c)^2] dz \Leftrightarrow$$

$$V_{droplet} = \pi R^2 z_c + \frac{2\pi R^3}{3} - \frac{\pi z_c^3}{3}. \quad (1-21)$$

Ακόμα, από το ορθογώνιο τρίγωνο $\overline{z_c O r_0}$ (βλ. Σχήμα 1.6) ισχύει:

$$R^2 = z_c^2 + r_0^2 \quad (1-22)$$

$$\text{και } R = \sqrt{z_c^2 + r_0^2}. \quad (1-23)$$

Τέλος, από τις εξισώσεις (1-20), (1-21), (1-22), (1-23) καταλήγουμε:

$$V_{droplet} = \left[\frac{r_0}{\tan(\pi - \theta_y)} \right]^3 \frac{2\pi}{3} + \pi r_0^2 \frac{r_0}{\tan(\pi - \theta_y)} + 2\pi \frac{\left[\sqrt{\left(\frac{r_0}{\tan(\pi - \theta_y)} \right)^2 + r_0^2} \right]^3}{3} \Leftrightarrow$$

$$r_0 = \sqrt[3]{\frac{V_{droplet}}{\frac{2\pi}{3 \tan^3(\pi - \theta_y)} + \frac{\pi}{\tan(\pi - \theta_y)} + 2\pi \frac{\left[\sqrt{\frac{1}{\tan^2(\pi - \theta_y)} + 1} \right]^3}{3}}}. \quad (1-24)$$

Με βάση όλα τα παραπάνω, για να υπολογιστεί με αναλυτικό τρόπο το σχήμα της ελεύθερης επιφάνειας μιας σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο, χωρίς την επίδραση της βαρύτητας, αν είναι γνωστή η γωνία επαφής της με το επίπεδο (θ_y) και ο όγκος της ($V_{droplet}$) ακολουθείται η εξής μεθοδολογία:

1. Υπολογίζουμε το r_0 συναρτήσει του όγκου της σταγόνας ($V_{droplet}$) και της γωνίας θ_y από τη σχέση (1-24).
2. Υπολογίζουμε το κέντρο του κύκλου z_c συναρτήσει του r_0 και της γωνίας θ_y από τη σχέση (1-20).
3. Υπολογίζουμε την ακτίνα του κύκλου (R) συναρτήσει του r_0 και του κέντρου του κύκλου (z_c) από τη σχέση (1-23).

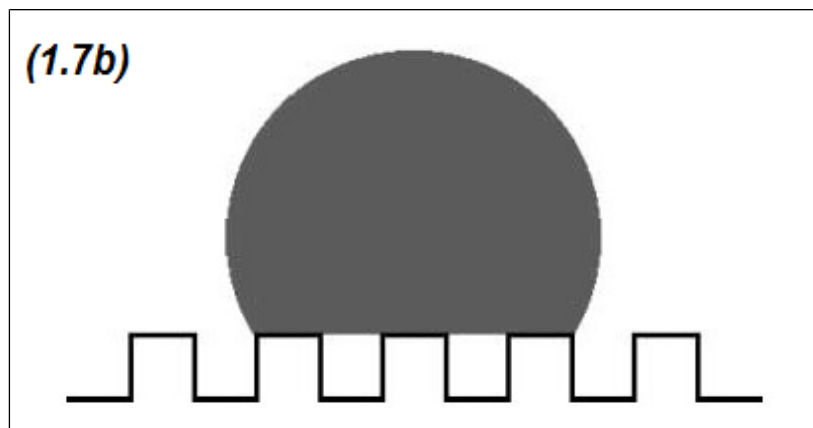
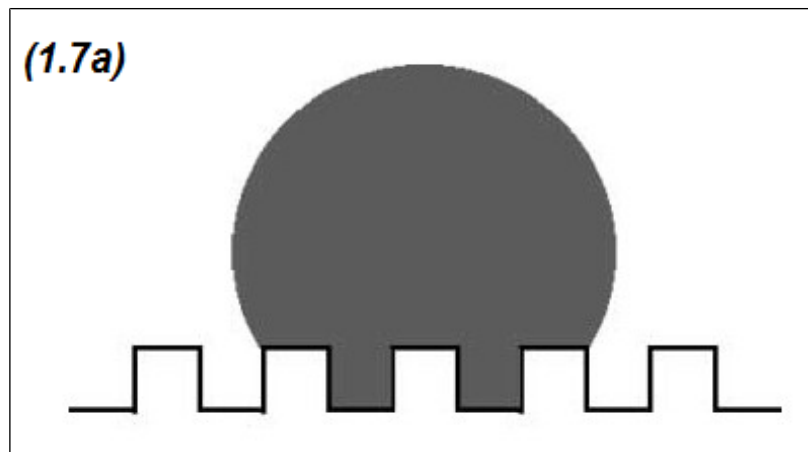
Η παραπάνω αναλυτική λύση χρησιμοποιείται για σύγκριση και πιστοποίηση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν με αριθμητικές μεθόδους επίλυσης για την περίπτωση ισορροπίας σταγόνας σε λεία οριζόντια επιφάνεια.

Σε περισσότερο πολύπλοκες γεωμετρικές επιφάνειας, όπως στερεή επιφάνεια με τραχύτητα, το σχήμα της σταγόνας εξακολουθεί να είναι τμήμα κύκλου, αλλά είναι αδύνατος ο υπολογισμός του με αναλυτικό τρόπο.

1.6. Ισορροπία σταγόνας σε στερεή επιφάνεια με τραχύτητα

Στην παρούσα εργασία θα μελετήσουμε επίσης την διαβροχή μια στερεής επιφάνειας με τραχύτητα. Η ανάλυση αυτή έχει πολύ ενδιαφέρον διότι η τραχύτητα ενισχύει τη διαβρεκτικότητα, δηλαδή μια υδρόφοβη επιφάνεια γίνεται περισσότερο υδρόφοβη ενώ μια υδρόφιλη περισσότερο υδρόφιλη. Όταν μια σταγόνα έρχεται σε επαφή με μία τέτοια στερεή επιφάνεια υπάρχουν δύο βασικές καταστάσεις ισορροπίας:

Η πρώτη κατάσταση ονομάζεται κατάσταση ισορροπίας *Wenzel* (σχήμα 1.7a). Στην περίπτωση αυτή η σταγόνα διεισδύει και ακολουθεί τη μικροδομή της επιφάνειας. Η δεύτερη κατάσταση ονομάζεται κατάσταση ισορροπίας *Cassie* (σχήμα 1.7b). Στη περίπτωση αυτή η σταγόνα επικάθεται πάνω στην μικροδομή της επιφάνειας, ενώ εγκλωβίζεται αέρας ανάμεσα στην σταγόνα και τη στερεή επιφάνεια. [Quééré & Reyssat 2008]



Σχήματα 1.7 – Δύο πιθανές καταστάσεις ισορροπίας μια σταγόνας σε στερεή επιφάνεια με τραχύτητα. Το σχήμα 1.7a αντιστοιχεί σε κατάσταση ισορροπίας *Wenzel* ενώ το σχήμα 1.7b αντιστοιχεί σε κατάσταση ισορροπίας *Cassie*.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2:

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια συνοπτική παρουσίαση των βασικότερων στοιχείων της αριθμητικής ανάλυσης που θα χρησιμοποιήσουμε στην παρούσα εργασία. Συγκεκριμένα παρουσιάζεται η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων, η επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson για την επίλυση μη-γραμμικών προβλημάτων και ο αλγόριθμος παραμετρικού βηματισμού μήκους-τόξου για την παραμετρική ανάλυση των λύσεων.

2.1. Βασική θεωρία αριθμητικής ανάλυσης

2.1.1. Προβλήματα συνοριακών τιμών

Σε πολλά φυσικά προβλήματα ζητούνται λύσεις διαφορικών εξισώσεων οι οποίες να ικανοποιούν προκαθορισμένες συνθήκες σε περισσότερα του ενός σημεία. Τα προβλήματα αυτού του είδους ονομάζονται προβλήματα συνοριακών τιμών (ΠΣΤ). Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό των μη-γραμμικών προβλημάτων συνοριακών τιμών είναι ότι η λύσεις τους (αν υπάρχουν) δεν είναι απαραίτητως μοναδικές. Οι γενικές λύσεις τέτοιων διαφορικών εξισώσεων σπανίως μπορούν να γραφούν με αναλυτική μορφή, και είμαστε υποχρεωμένοι να αναζητήσουμε λύσεις με αριθμητικές μεθόδους.

Η τυπική διατύπωση ενός προβλήματος συνοριακών τιμών είναι η εξής:

Να βρεθεί η λύση (ή οι λύσεις) u των εξισώσεων

$$Lu = f \text{ στο } D, \quad (2-1a)$$

$$Bu = g \text{ στο } \partial D. \quad (2-1b)$$

Η λύση u είναι συνάρτηση της θέσης \underline{x} στο χωρίο D που είναι (υπο)περιοχή ενός μονο-, δι- ή τριδιάστατου Ευκλείδειου χώρου. Το διάνυσμα θέσης \underline{x} ορίζεται από τις συντεταγμένες x_i κάθε σημείου στο D :

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^n x_i \underline{e}_i, \quad (2-2)$$

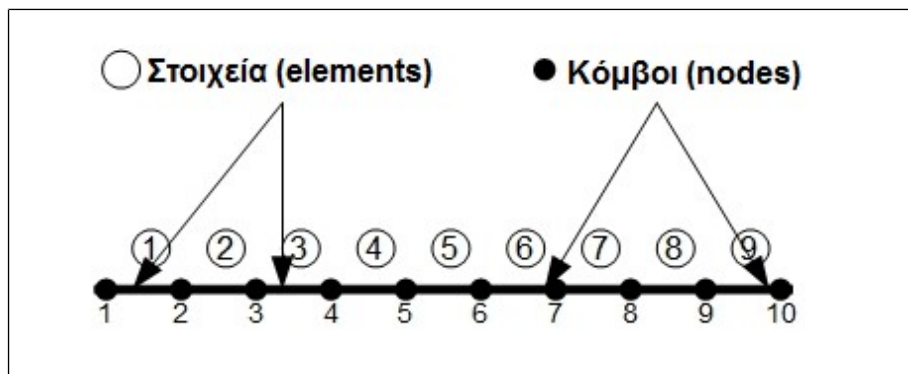
όπου \underline{e}_i είναι τα μοναδιαία κάθετα διανύσματα στους άξονες συντεταγμένων και n η διάσταση του Ευκλείδειου χώρου. Με L συμβολίζεται ένας διαφορικός τελεστής, που δρα στη συνάρτηση u και με B ένας συνοριακός τελεστής ορισμένος στο σύνορο, ∂D , του χωρίου D . Οι συναρτήσεις f και g

είναι γνωστές συναρτήσεις θέσης, ορισμένες στα D και ∂D , αντίστοιχα. Γενικά, η (2-1a) είναι μια διαφορική εξίσωση (ΔΕ), συνήθως ή με μερικές παραγώγους, και η (2-1b) είναι οι συνοριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί η λύση της διαφορικής εξίσωσης. [Sokolnikoff & Redheffer 2001] [Finlayson & Scriven 1966]

2.1.2. Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων

2.1.2.1. Διακριτοποίηση προβλήματος συνοριακών τιμών

Όταν το ΠΣΤ (2-1) είναι δυνατόν να λυθεί με αναλυτικές μεθόδους τότε η λύση του είναι γνωστή σε κάθε σημείο του χωρίου D και του συνόρου ∂D . Σε αντίθεση με την αναλυτική λύση, η προσεγγιστική λύση (που προκύπτει από αριθμητικές μεθόδους) δεν είναι γνωστή σε κάθε σημείο του χωρίου D και του ∂D αλλά σε πεπερασμένο πλήθος σημείων και με πεπερασμένη ακρίβεια. Λόγω της διακριτότητας των πεπερασμένου πλήθους σημείων, η προσεγγιστική επίλυση ΠΣΤ προϋποθέτει τη διακριτοποίηση (discretization) του υπολογιστικού χωρίου. Μια από τις μεθόδους διακριτοποίησης ΠΣΤ είναι η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. [Strang & Fix 1973] [Μπουντουβής 1992] Στη μέθοδο αυτή το χωρίο D και το σύνορο ∂D υποδιαιρούνται σε επάλληλα υποχωρία (sub-domains) πεπερασμένου πλήθους με το “άπλωμα” ενός πλέγματος (mesh). Καθένα από τα υποχωρία ονομάζεται στοιχείο (element). Στα όρια των επάλληλων στοιχείων αλλά και στο εσωτερικό των στοιχείων ορίζονται οι κόμβοι (nodes) του πλέγματος (σχήμα 2.1).



Σχήμα 2.1 – Πλέγμα σε μονοδιάστατο χωρίο με αρίθμηση στοιχείων και κόμβων

Κατά την αριθμητική επίλυση του προβλήματος (2-1) η αναλυτική λύση u προσεγγίζεται από μια πεπερασμένη σειρά συναρτήσεων:

$$u(\underline{x}) = \sum_{j=1}^N u_j \varphi^j(\underline{x}). \quad (2-3)$$

Οι συναρτήσεις φ^j ονομάζονται συναρτήσεις βάσης (basis functions) και είναι συνήθως πολυώνυμα

μικρού βαθμού. Το πλήθος N των συναρτήσεων βάσης είναι ίσο με το πλήθος των κόμβων του πλέγματος.

Οι συντελεστές u_j είναι οι τιμές της προσεγγιστικής λύσης στους κόμβους γι' αυτό ονομάζονται κομβικοί άγνωστοι (nodal unknowns). Επομένως για να βρεθεί η προσεγγιστική λύση αρκεί να προσδιοριστούν οι κομβικοί άγνωστοι (όταν είναι δεδομένες οι συναρτήσεις βάσης).

2.1.2.2. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

Η μέθοδος Galerkin αναζητεί λύση του (2-1) που μηδενίζει καθένα από τα σταθμισμένα υπόλοιπα:

$$R_i = \int_D (Lu - f) \varphi^i dS \quad (2-4)$$

Οι παράγοντες στάθμισης είναι οι ίδιες συναρτήσεις βάσης φ^j που χρησιμοποιούνται στην κατασκευή της προσεγγιστικής λύσης u . Το πλήθος των υπολοίπων είναι ίσο με το πλήθος των συναρτήσεων βάσης και κατά συνέπεια ίσο με το πλήθος των κόμβων του πλέγματος. Με αντικατάσταση της u από την (2-3) στις (2-4) προκύπτει:

$$R_i = \int_D \varphi^i (L(\sum_{j=1}^N u_j \varphi^j)) dS - \int_D f \varphi^i dS \quad (2-5)$$

Τα ολοκληρώματα στα υπόλοιπα (2-5) είναι συναρτήσεις μόνο των κομβικών αγνώστων u_j (αφού πρώτα εκτελεστούν οι παραγωγίσεις και οι ολοκληρώσεις στο χωρίο D). Επομένως, οι εξισώσεις (2-5) μπορούν να γραφτούν:

$$R_i(u_1, u_2, \dots, u_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2-6)$$

Στην περίπτωση που ο διαφορικός τελεστής L είναι γραμμικός, το σύστημα των αλγεβρικών εξισώσεων που προκύπτει είναι επίσης γραμμικό, καθώς ισχύει:

$$L(\sum_{j=1}^N u_j \varphi^j) = \sum_{j=1}^N u_j L \varphi^j, \quad (2-7)$$

και η εξίσωση (2-5) γράφεται:

$$R_i = \int_D \varphi^i (L(\sum_{j=1}^N u_j \varphi^j)) dS - \int_D f \varphi^i dS = \sum_{j=1}^N u_j \int_D \varphi^i L \varphi^j dS - \int_D f \varphi^i dS \quad (2-8)$$

Επομένως ο μηδενισμός των υπολοίπων ισοδυναμεί με το ακόλουθο σύστημα N γραμμικών εξισώσεων σε N αγνώστους:

$$R_i = \sum_{j=1}^N u_j a_{ij} - b_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2-9)$$

Το γραμμικό σύστημα (2-9) επιλύεται με τη μέθοδο απαλοιφής Gauss. Για μεγάλου μεγέθους προβλήματα μπορούν να εφαρμοστούν και άλλες μέθοδοι επίλυσης (Frontal [Hood 1976], GMRES [Pashos et al. 2009]).

Στην περίπτωση που ο διαφορικός τελεστής είναι μη γραμμικός, το σύστημα (2-5) μπορεί να λυθεί με την επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson. Σε κάθε επανάληψη της μεθόδου Newton-Raphson επιλύεται ένα γραμμικό σύστημα τύπου (2-9) (βλ. παράγραφο 2.1.3.).

2.1.2.3. Συνοριακές συνθήκες

Οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στα ΠΣΤ που εφαρμόζονται είναι είτε του τύπου Dirichlet (ή essential), Neumann (ή natural) ή Robin. Οι συνθήκες Dirichlet ορίζουν την τιμή της λύσης u σε τμήμα του ∂D . Αντικαθιστούν τα υπόλοιπα Galerkin σε εκείνους τους κόμβους του πλέγματος που ανήκουν στο τμήμα του συνόρου στο οποίο ορίζεται η τιμή της λύσης. Οι συνθήκες Neumann αφορούν την τιμή παραγώγων της λύσης u στο τμήμα του ∂D . Αυτές οι τιμές εισάγονται στα υπόλοιπα Galerkin. Οι συνθήκες Robin είναι μικτού τύπου, όπου δίνεται ένας γραμμικός συνδυασμός των τιμών της λύσης και των παραγώγων της στο σύνορο ∂D . Οι συνθήκες Robin εισάγονται στα υπόλοιπα με κατάλληλο τρόπο. [Παπαγεωργίου & Τσίτουρας 2001]

2.1.2.4. Ολική – τοπική “θεώρηση” των παραμέτρων της διακριτοποίησης

Η αρίθμηση των στοιχείων και η αρίθμηση των κόμβων ενός πλέγματος επιλέγονται αυθαίρετα. Οι κόμβοι αριθμούνται “ολικά” (global numbering, $i = 1, 2, \dots, N$) και η αρίθμηση τους είναι ανεξάρτητη από την αρίθμηση των στοιχείων. Είναι, όμως, απαραίτητο για την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, να είναι γνωστός ο “συσχετισμός” κόμβων και στοιχείων του πλέγματος, δηλαδή ποιοι κόμβοι ανήκουν σε ποια στοιχεία. Ο συσχετισμός κόμβων και στοιχείων αποτυπώνεται στην “τοπική” αρίθμηση (local numbering) των κόμβων: Για κάθε στοιχείο, έστω k , καταγράφονται οι, έστω n_k σε πλήθος, κόμβοι του πλέγματος που ανήκουν σε αυτό και αριθμούνται από το 1 έως n_k . Η καταγραφή γίνεται σε έναν πίνακα – τον πίνακα NOP (NOP array). Το στοιχείο NOP(k, n) του πίνακα είναι ο αριθμός στην ολική αρίθμηση του τοπικού κόμβου n στο στοιχείο k .

Η αντιστοίχιση της τοπικής και ολικής αρίθμησης των κόμβων του υπολογιστικού χωρίου εφαρμόζεται και στις συναρτήσεις βάσης. Η εφαρμογή αυτή βασίζεται στο γεγονός ότι οι συναρτήσεις βάσης εξ ορισμού είναι μη μηδενικές μόνο στα στοιχεία τα οποία μοιράζονται τον κόμβο στον οποίο αντιστοιχούν. Συνεπώς, αρκεί ο τοπικός ορισμός τους, δηλαδή στα στοιχεία όπου είναι μη μηδενικές. Στη συνέχεια, και κατά σύμβαση, η τοπική αρίθμηση μιας συνάρτησης βάσης θα συμβολίζεται με κάτω δείκτη, δηλαδή για το k στοιχείο η i συνάρτηση βάσης θα συμβολίζεται

με:

$$\varphi_i^k = \varphi_i . \quad (2-10)$$

Σύμφωνα λοιπόν με την παραπάνω θεώρηση, η προσεγγιστική λύση u (εξίσωση 2-3) μπορεί να εκφραστεί σε κάθε στοιχείο μέσω των τοπικών συναρτήσεων βάσης:

$$u(E_k) = \sum_{i=1}^{n_k} u_{NOP(k,i)} \varphi_i , \quad (2-11)$$

όπου n_k είναι το πλήθος των κόμβων στο στοιχείο E_k .

2.1.2.5. Συναρτήσεις βάσης σε μονοδιάστατα χωρία

Στην περίπτωση μονοδιάστατων προβλημάτων (όπως όλα τα ΠΣΤ της παρούσας εργασίας), τα στοιχεία στα οποία διακριτοποιείται το υπολογιστικό χωρίο είναι ευθύγραμμα τμήματα. Σαν στοιχείο αναφοράς θεωρείται το διάστημα $[0,1]$. Η χωρική μεταβλητή συμβολίζεται με ξ , $0 \leq \xi \leq 1$, για να διακρίνεται από τη χωρική μεταβλητή στο χωρίο D .

Στην περίπτωση που χρησιμοποιούνται γραμμικές συναρτήσεις βάσης τότε το στοιχείο αναφοράς έχει δύο κόμβους και οι αντίστοιχες συναρτήσεις βάσης είναι (σχήμα 2.2):

$$\varphi_1 = 1 - \xi , \quad (2-12a)$$

$$\varphi_2 = \xi . \quad (2-12b)$$

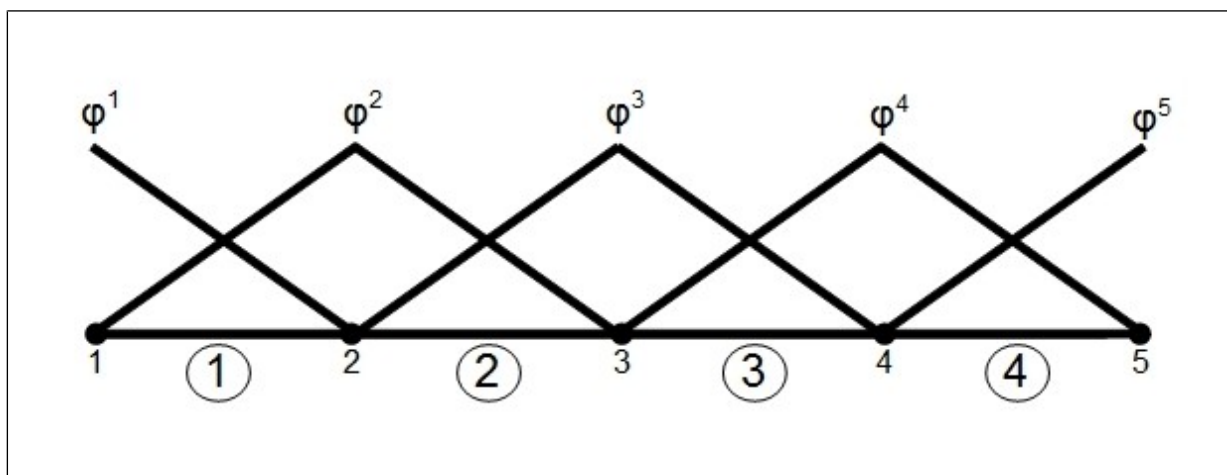
Στην περίπτωση που χρησιμοποιούνται διωνυμικές συναρτήσεις βάσης τότε το στοιχείο αναφοράς έχει τρεις κόμβους, έναν στο κάθε άκρο του και έναν στο μέσον του, και οι αντίστοιχες συναρτήσεις βάσης είναι:

$$\varphi_1 = 1 - 3\xi + 2\xi^2 , \quad (2-13a)$$

$$\varphi_2 = 4\xi - 4\xi^2 , \quad (2-13b)$$

$$\varphi_3 = -\xi + 2\xi^2 . \quad (2-13c)$$

Στην εργασία αυτή θα χρησιμοποιήσουμε γραμμικές συναρτήσεις βάσης.



Σχήμα 2.2 – Γραμμικές συναρτήσεις βάσης σε μονοδιάστατο χωρίο

2.1.2.6. Ισοπαραμετρική απεικόνιση

Οι συναρτήσεις βάσης ορίστηκαν, παραπάνω, σε στοιχεία αναφοράς: Στο μοναδιαίο διάστημα, $0 \leq \xi \leq 1$ σε μία διάσταση. Οι συναρτήσεις βάσης, όμως, πρέπει να μπορούν να υπολογιστούν στα στοιχεία του πλέγματος στο αρχικό χωρίο D διότι η λύση u προσεγγίζεται από συναρτήσεις βάσης ορισμένες στο πεδίο D . Επειδή τα στοιχεία ενός τυχαίου πλέγματος στο αρχικό πεδίο D δεν είναι κατ' ανάγκη μοναδιαία, είναι απαραίτητο να κατασκευαστεί ένας αμφίδρομος μετασχηματισμός (απεικόνιση) από το στοιχείο αναφοράς στο καθένα από τα στοιχεία του πλέγματος, μέσω του οποίου θα εκφράζονται οι συναρτήσεις βάσης στο D . Ένας πολύ ευέλικτος υπολογιστικά μετασχηματισμός είναι η ισοπαραμετρική απεικόνιση:

$$x = \sum_{i=1}^{n_k} \underline{x}_i \varphi_i(\underline{\xi}), \quad (2-14)$$

όπου:

\underline{x} είναι το διάνυσμα θέσης στο στοιχείο του πλέγματος,

\underline{x}_i είναι το διάνυσμα θέσης του κόμβου i , σε τοπική αρίθμηση, του στοιχείου του πλέγματος,

$\underline{\xi}$ είναι το διάνυσμα θέσης στο στοιχείο αναφοράς,

n_k είναι το πλήθος των κόμβων στο στοιχείο αναφοράς.

Η ισοπαραμετρική απεικόνιση (2-14) δεν είναι, σε κάθε περίπτωση, μια ακριβής απεικόνιση, διότι το στοιχείο αναφοράς δεν απεικονίζεται σημείο προς σημείο σε κάθε στοιχείο του πλέγματος (εκτός από τους κόμβους).

2.1.2.7. Υπολογισμός εξισώσεων διακριτοποίησης

2.1.2.7.1. Υπολογισμός ολοκληρωμάτων στα υπόλοιπα Galerkin

Τα υπόλοιπα Galerkin στις εξισώσεις διακριτοποίησης περιέχουν ολοκληρώσεις, πάνω σε ολόκληρο το χωρίο D και στο σύνορο ∂D , γινομένων των συναρτήσεων βάσης και των παραγώγων τους και γνωστών συναρτήσεων. Ένα τυπικό ολοκλήρωμα το οποίο προκύπτει κατά τη διακριτοποίηση με εφαρμογή πεπερασμένων στοιχείων είναι το:

$$a_{ij} = \int_D \varphi^i L \varphi^j dx = I_{ij} . \quad (2-15)$$

Εάν το πλέγμα που καλύπτει το D αποτελείται από NE , σε πλήθος, πεπερασμένα στοιχεία E_k ($k = 1, 2, \dots, NE$), το ολοκλήρωμα I_{ij} στην (2-15) είναι το άθροισμα NE επί μέρους ολοκληρωμάτων:

$$I_{ij} = \sum_{k=1}^{NE} I_{ij}^k , \quad (2-16)$$

$$\text{όπου: } I_{ij}^k = \int_{E_k} \varphi^i L \varphi^j dx . \quad (2-17)$$

Οι συναρτήσεις βάσης, όμως, είναι ορισμένες σε ένα στοιχείο αναφοράς, έστω E_0 με σύστημα συντεταγμένων ξ . Επομένως, καθένα από τα ολοκληρώματα I_{ij}^k υπολογίζεται μέσω της ισοπαραμετρικής απεικόνισης με εφαρμογή του μετασχηματισμού ολοκληρώματος σε αλλαγή συστήματος συντεταγμένων.

$$I_{ij} = \int_{E_0} \varphi^i(\xi) L_\xi \varphi^j(\xi) \det \underline{\underline{J_0}} d\xi , \quad (2-18)$$

όπου:

E_0 είναι το στοιχείο αναφοράς.

L_ξ είναι ο διαφορικός τελεστής εκφρασμένος στο ξ -σύστημα συντεταγμένων.

$\det \underline{\underline{J_0}}$ είναι η ορίζουσα της Ιακωβιανής της ισοπαραμετρικής απεικόνισης του E_0 στο E_k .

Στα μονοδιάστατα πλέγματα η ιακωβιανή του μετασχηματισμού είναι:

$$J_0 = \frac{dx}{d\xi} = x_{,\xi} , \quad (2-19)$$

η μερική παράγωγος των συναρτήσεων βάσης ως προς τη χωρική μεταβλητή x δίνεται από την:

$$\frac{d\varphi^i}{dx} = \frac{d\varphi^i}{d\xi} \frac{1}{x_{,\xi}} \quad (2-20)$$

και

$$x_\xi = \sum_{i=1}^{n_k} x_i \frac{d\varphi^i(\xi)}{d\xi}. \quad (2-21)$$

2.1.2.7.2. Αριθμητική ολοκλήρωση

Τα ολοκληρώματα στις εξισώσεις διακριτοποίησης υπολογίζονται αριθμητικά στο στοιχείο αναφοράς. Η μέθοδος που επιλέγεται για την αριθμητική ολοκλήρωση είναι η μέθοδος Gauss (Gauss quadrature):

$$\int_{E_0} f(\xi) d\xi \approx \sum_{k=1}^{NGP} w_k f(\xi_{gk}), \quad (2-22)$$

όπου:

w_k είναι συντελεστής βάρους, τα λεγόμενα Gauss weights.

ξ_{gk} είναι τα σημεία μέσα στο στοιχείο αναφοράς στα οποία υπολογίζεται η προς ολοκλήρωση συνάρτηση, τα λεγόμενα σημεία Gauss (Gauss points).

NGP είναι το πλήθος των σημείων Gauss στο στοιχείο αναφοράς.

2.1.3. Επαναληπτική μέθοδος Newton-Raphson

Από τη διακριτοποίηση του προβλήματος (2-1) με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων προκύπτει ένα σύστημα εξισώσεων που έχει τη γενική μορφή:

$$\underline{R}(\underline{u}) = \underline{0}, \quad (2-23)$$

όπου:

$\underline{R} = [R_1, R_2, \dots, R_N]^T$ το N -διάστατο διάνυσμα υπολοίπων.

$\underline{u} = [u_1, u_2, \dots, u_N]^T$ το επίσης N -διάστατο διάνυσμα της λύσης του διακριτοποιημένου συστήματος.

Όταν ο διαφορικός τελεστής του συστήματος (2-1) είναι μη γραμμικός το σύστημα εξισώσεων (2-23) είναι επίσης μη γραμμικό και απαιτείται η εφαρμογή επαναληπτικών αλγορίθμων για την επίλυσή του. Η επαναληπτική μέθοδος που εφαρμόζεται σε αυτή την εργασία είναι η μέθοδος Newton-Raphson. [Ben-Israel 1966]

Στη μέθοδο αυτή, με δεδομένη μια αρχική προσέγγιση $\underline{u}^{(0)}$ της λύσης \underline{u} , η $(k+1)$ προσέγγιση, $\underline{u}^{(k+1)}$, προκύπτει από την k -προσέγγιση, $\underline{u}^{(k)}$, με επίλυση του συστήματος:

$$\underline{J}^{(k)} \underline{\delta}^{(k)} = -\underline{R}^{(k)}, \quad (2-24)$$

όπου:

$$\underline{u}^{(k+1)} = \underline{u}^{(k)} + \underline{\delta}^{(k+1)}. \quad (2-25)$$

Ο πίνακας \underline{J} ονομάζεται Ιακωβιανή (Jacobian) του συστήματος (2-23) και τα στοιχεία του είναι οι μερικές παράγωγοι των υπολοίπων Galerkin ως προς τους κομβικούς αγνώστους, δηλαδή:

$$J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial u_j}. \quad (2-26)$$

Το σύστημα (2-24) είναι σε κάθε επανάληψη ένα γραμμικό σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων – γι' αυτό ονομάζεται γραμμικοποίηση (linearization) του (2-23) – και η επίλυσή του επαναλαμβάνεται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση των προσεγγίσεων, $\underline{u}^{(k)}$, στη λύση του συστήματος (2-23). Κριτήριο σύγκλισης είναι ο κατά προσέγγιση μηδενισμός της διαφοράς $\underline{\delta}^{(k+1)} = \underline{u}^{(k+1)} - \underline{u}^{(k)}$ δύο διαφορετικών προσεγγίσεων, δηλαδή:

$$\|\underline{\delta}^{(k+1)}\| = \left\{ \sum_{i=1}^N (\underline{u}_i^{(k+1)} - \underline{u}_i^{(k)})^2 \right\}^{1/2} < \varepsilon, \quad (2-27)$$

όπου ε είναι προκαθορισμένος μικρός θετικός αριθμός (π.χ. $\varepsilon = 10^{-6}$). Το μεγάλο πλεονέκτημα της μεθόδου Newton-Raphson είναι η ταχύτητα σύγκλισης, η οποία είναι τετραγωνική. Στην πράξη η τετραγωνική σύγκλιση παρατηρείται ασυμπτωτικά, δηλαδή όταν η προσέγγιση της λύσης είναι ήδη "κοντά" στη λύση. Για τη λύση του μη γραμμικού προβλήματος απαιτείται μια καλή αρχική προσέγγιση, καθώς στην περίπτωση στην οποία βρίσκεται μακριά από την αναζητούμενη λύση είναι πιθανό να οδηγήσει σε αποτυχία σύγκλισης της μεθόδου.

2.1.4. Ευστάθεια λύσεων μόνιμης κατάστασης

Η ευστάθεια των καταστάσεων ισορροπίας μη γραμμικών συστημάτων μπορεί να προσδιοριστεί με τον εξής τρόπο: Αρχικά, στο σύστημα το οποίο βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας, εφαρμόζεται μια επιτρεπτή απειροστή διαταραχή και στην συνέχεια παρατηρείται η απόκρισή του. Στη περίπτωση που η κατάσταση ισορροπίας είναι ευσταθής τότε οι διαταραχές αποσβένονται εκθετικά με τον χρόνο. Όταν η κατάσταση ισορροπίας είναι ασταθής τότε η αντίστοιχη διαταραχή ενισχύεται. Τέλος όταν η διαταραχή δεν αποσβένεται ούτε ενισχύεται με το χρόνο, τότε η κατάσταση ισορροπίας χαρακτηρίζεται ως οριακής ή ουδέτερης ευστάθειας. Η εξίσωση Young-Laplace όμως δεν περιέχει χρονικό όρο, άρα δεν είναι δυνατόν να γίνει η παραπάνω ανάλυση ευστάθειας, παρά μόνο χρησιμοποιώντας ενεργειακή προσέγγιση, δηλαδή υπολογίζοντας την

ενέργεια των καταστάσεων ισορροπίας (βλ. Κεφάλαιο 5, παράγραφο 5.4.5.).

2.1.5. Παραμετρική ανάλυση

Η λύση u ενός ΠΣΤ εξαρτάται από τις παραμέτρους που εμφανίζονται στη ΔΕ και στις συνοριακές συνθήκες. Για παράδειγμα το σχήμα της ελεύθερης επιφάνειας μιας σταγόνας που ισορροπεί πάνω σε ένα επίπεδο, εξαρτάται από την γωνία επαφής που σχηματίζει η σταγόνα με το επίπεδο. Η ευαισθησία λοιπόν της λύσης ως προς αυτήν την παράμετρο έχει μεγάλο ενδιαφέρον. Αυτό διότι είναι δυνατό να παρατηρηθεί περιοχή τιμών παραμέτρου όπου η λύση του προβλήματος εμφανίζει ευστάθεια, ενώ σε μία κρίσιμη τιμή παραμέτρου, η συμπεριφορά να μεταβάλλεται και οι λύσεις να γίνονται ασταθείς.

Έστω λοιπόν ότι εφαρμόζουμε τη μέθοδο Newton-Raphson για την επίλυση ενός μη γραμμικού συστήματος που περιέχει μια παράμετρο p . Για δύο τιμές της παραμέτρου p_0 και p_{-1} οι λύσεις που έχουν υπολογιστεί είναι οι u_0 και u_{-1} αντίστοιχα, και ζητείται μία αρχική εκτίμηση $u^{(0)}$ της λύσης σε μια γειτονική τιμή της παραμέτρου, $p_0 + \delta p$. Η αρχική αυτή εκτίμηση μπορεί να είναι η λύση u_0 , είτε να υπολογιστεί από μία σχέση της μορφής:

$$u^{(0)}(p_0 + \delta p) = u_0 + \left. \frac{\partial u}{\partial p} \right|_{p_0} \delta p, \quad (2-28)$$

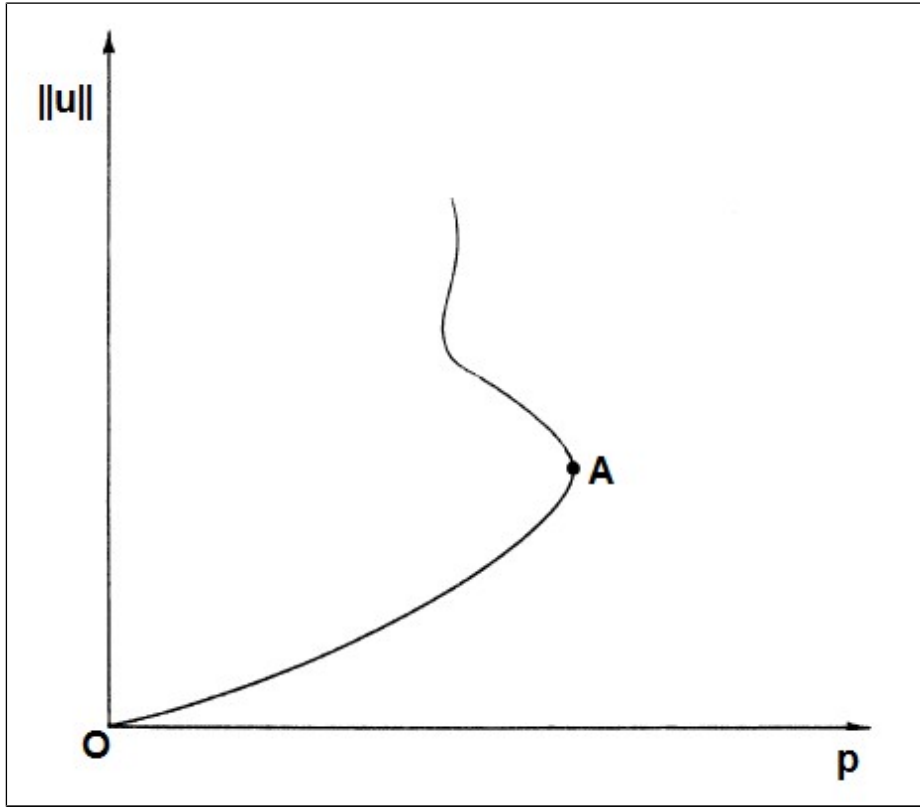
όπου: $\frac{\partial u}{\partial p}$ είναι το εφαπτόμενο διάνυσμα στην καμπύλη που παριστά τη μεταβολή της λύσης ως προς την παράμετρο p και υπολογίζεται ως:

$$\frac{\partial u}{\partial p} = \frac{u_0 - u_{-1}}{p_0 - p_{-1}}. \quad (2-29)$$

Το παραμετρικό βήμα δp επιλέγεται έτσι ώστε η αρχική εκτίμηση να βρίσκεται στην περιοχή σύγκλισης της μεθόδου Newton-Raphson.

Αυτή η μέθοδος όμως δεν είναι επαρκής στην περίπτωση όπου η λύση δεν είναι μονοσήμαντη. Αυτές οι περιπτώσεις συνήθως εμφανίζονται σε κρίσιμα σημεία μεταβολής της συμπεριφοράς της λύσης (δηλαδή μεταβολής ευστάθειας της κατάστασης ισορροπίας) όπου η Ιακωβιανή του συστήματος γίνεται ιδιάζουσα (singular) με μηδενική ορίζουσα. Τέτοια σημεία [όπως το σημείο A στο σχήμα (2.3)] ονομάζονται και σημεία στροφής (turning points). Όταν στη διαδικασία παραμετρικού βηματισμού προσεγγίζεται σημείο στροφής, παρατηρείται απώλεια της τετραγωνικής σύγκλισης στην επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson και απόκλιση. Για την αποφυγή της δυσκολίας αυτής εφαρμόζονται μέθοδοι παραμετρικού βηματισμού στις οποίες

χρησιμοποιείται μία νέα παράμετρος, το μήκος-τόξο στο διάγραμμα $\|u\| - p$ (σχήμα 2.3), καθώς το μήκος-τόξο έχει την ιδιότητα της μονότονης αύξησης. Η μέθοδος Keller [Keller 1977] είναι χαρακτηριστική της κατηγορίας τέτοιων αλγορίθμων παραμετρικού βηματισμού μήκους-τόξου (arc-length continuation).



Σχήμα 2.3 – Εμφάνιση σημείου στροφής στο διάγραμμα παραμετρικού βηματισμού. Μετά το σημείο στροφής παρατηρείται αλλαγή της ευστάθειας της κατάστασης ισορροπίας

2.1.5.1. Μέθοδος μήκους-τόξου Keller

Σύμφωνα με τη μέθοδο Keller η λύση u αλλά και η παράμετρος p παραμετροποιούνται από μία νέα παράμετρο, το μήκος-τόξο s_{con} :

$$\underline{u} = \underline{u}(s_{con}) \text{ και } p = p(s_{con}).$$

Η εξίσωση που ορίζει το μήκος-τόξο κατά μήκος του κλάδου λύσεων είναι η:

$$\|\underline{u} - \underline{u}_0\|^2 + (p - p_0)^2 = ds_{con}^2 \quad (2-30)$$

$$\Rightarrow \left\| \frac{\partial \underline{u}}{\partial s_{con}} \Big|_{(u_0, p_0)} \right\|^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial s_{con}} \Big|_{p_0} \right)^2 - 1 = 0. \quad (2-31)$$

Η σχέση (2-31) γραμμικοποιείται γύρω από τη λύση \underline{u}_0, p_0 και προκύπτει η τελική σχέση μήκους-τόξου:

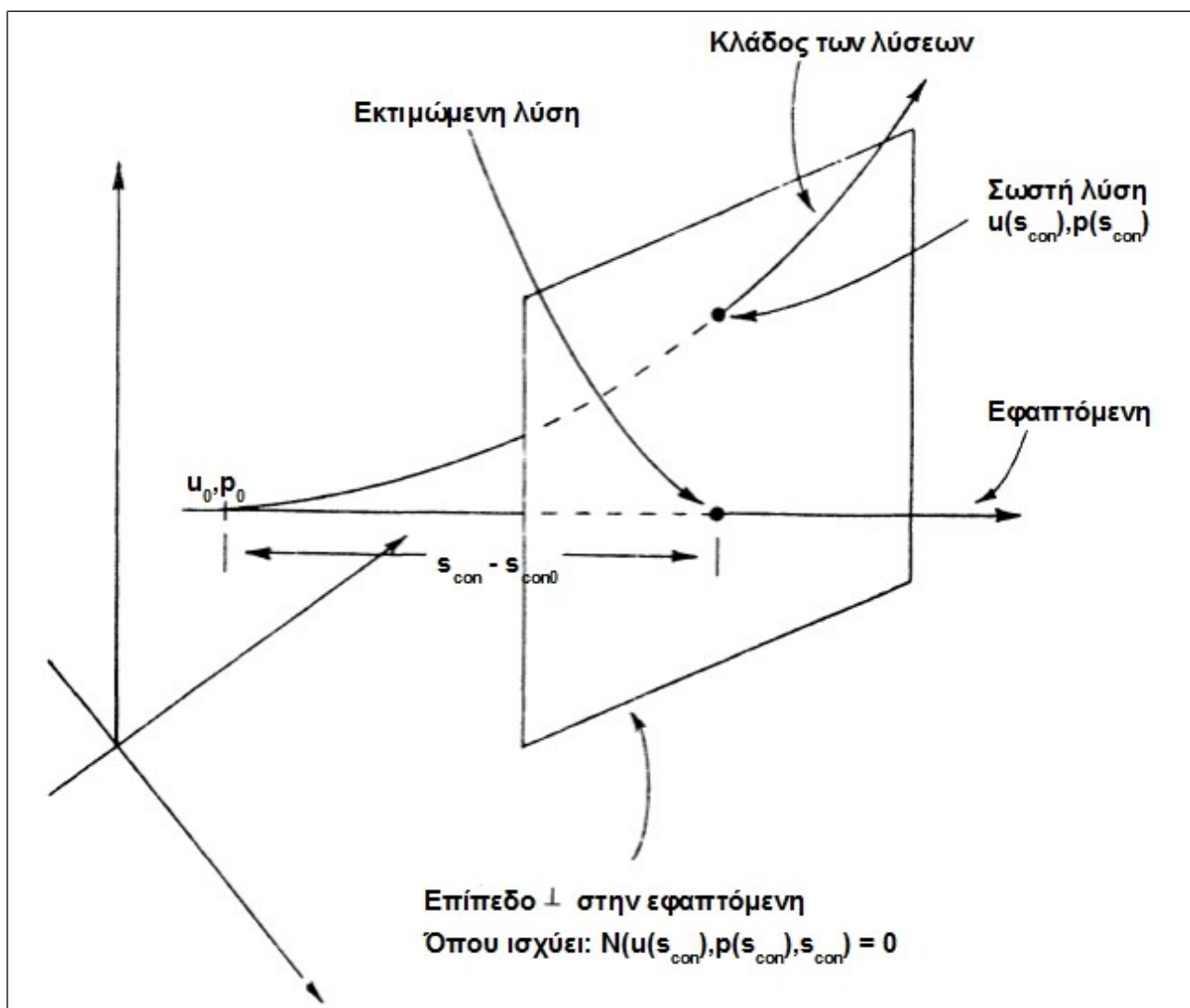
$$N(\underline{u}(s_{con}), p(s_{con}), s_{con}) := \left\langle \frac{\partial \underline{u}(s_{con})}{\partial s_{con}} \Big|_{(u_0, p_0)}, \underline{u} - \underline{u}_0 \right\rangle + \frac{\partial p}{\partial s_{con}} \Big|_{p_0} (p - p_0) - ds_{con} = 0, \quad (2-32)$$

όπου:

$\langle a, b \rangle$ είναι το εσωτερικό γινόμενο μεταξύ των διανυσμάτων \underline{a} και \underline{b} .

Ουσιαστικά η (2-32) εξαναγκάζει την αναζήτηση της νέας λύσης σε ένα επίπεδο το οποίο είναι κάθετο στο εφαπτόμενο διάνυσμα στον κλάδο των λύσεων στο σημείο $s_{con} = s_{con0}$ και σε απόσταση:

$|\delta s| = |s_{con} - s_{con0}|$ από αυτό (σχήμα 2.4).



Σχήμα 2.4 – Αναζήτηση νέας λύσης με τη μέθοδο μήκους-τόξου Keller

Με τη νέα παραμετροποίηση διαμορφώνεται ένα επαυξημένο σύστημα στο οποίο άγνωστοι είναι η λύση \underline{u} και η παράμετρος p και διατυπώνεται ως εξής:

$$\underline{R}(\underline{u}, p) = \underline{0}, \quad (2-33a)$$

$$N(\underline{u}, p, s_{con}) = 0. \quad (2-33b)$$

Το σύστημα (2-33) επιλύεται με την επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson και σε κάθε βήμα της

επιλύεται το γραμμικό σύστημα:

$$\underline{J}_{augm} \begin{vmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta p \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \underline{J} & \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial p} \\ \frac{\partial N}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial N}{\partial p} \end{vmatrix} \Big|_{(u,p)} \begin{vmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta p \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} \mathbf{R} \\ N \end{vmatrix} \Big|_{(u,p)} . \quad (2-34)$$

Ο επαυξημένος Ιακωβιανός πίνακας \underline{J}_{augm} είναι μη ιδιάζων στα κρίσιμα σημεία και εξασφαλίζεται η διατήρηση της τετραγωνικής σύγκλισης της μεθόδου Newton-Raphson ακόμα και σε αυτά τα σημεία. Τα στοιχεία της τελευταίας γραμμής του \underline{J}_{augm} είναι τα:

$$\frac{\partial N}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial s_{con}} \Big|_{(u_0, p_0)} , \quad (2-35)$$

$$\frac{\partial N}{\partial p} = \frac{\partial p}{\partial s_{con}} \Big|_{p_0} . \quad (2-36)$$

Οι παραπάνω εκφράσεις μπορούν να υπολογιστούν από τις παρακάτω σχέσεις, αφού θεωρούμε ότι γνωρίζουμε τις λύσεις (\mathbf{u}_0, p_0) και $(\mathbf{u}_{-1}, p_{-1})$:

$$\frac{\partial N}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial s_{con}} \Big|_{(u_0, p_0)} = \frac{\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_{-1}}{s_{con0} - s_{con-1}} , \quad (2-37)$$

$$\frac{\partial N}{\partial p} = \frac{\partial p}{\partial s_{con}} \Big|_{p_0} = \frac{p_0 - p_{-1}}{s_{con0} - s_{con-1}} . \quad (2-38)$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3:

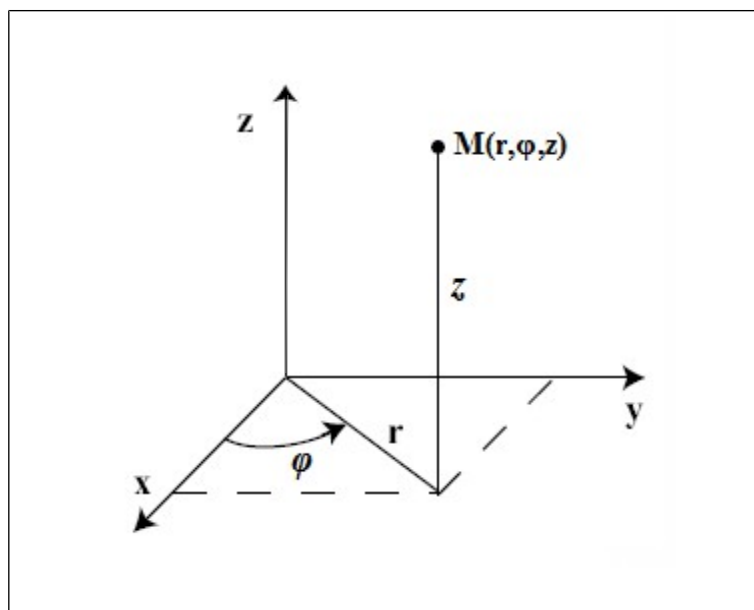
ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΕ ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ

Στο κεφάλαιο αυτό διατυπώνονται οι εξισώσεις καθώς και τα αντίστοιχα υπόλοιπα Galerkin που θα χρησιμοποιηθούν για την επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών που αφορά την ισορροπία σταγόνας σε λείο οριζόντιο επίπεδο. Για την επίλυση χρησιμοποιείται κυλινδρική παραμετροποίηση. Τέλος γίνεται παρουσίαση των σχετικών αποτελεσμάτων καθώς και συζήτηση πάνω στα μειονεκτήματα της συγκεκριμένης μεθόδου.

3.1. Κυλινδρική παραμετροποίηση

Στο σύστημα των κυλινδρικών συντεταγμένων (σχήμα 3.1), η θέση ενός σημείου M στον τριδιάστατο χώρο καθορίζεται από μια διατεταγμένη τριάδα (r, φ, z) πραγματικών αριθμών που ονομάζονται κυλινδρικές συντεταγμένες. Τα r και φ είναι οι πολικές συντεταγμένες της προβολής του σημείου M στο καρτεσιανό xy - επίπεδο και το z είναι η κατακόρυφη ορθογώνια συντεταγμένη του.

Λόγω της αξονικής συμμετρίας που υπάρχει στο συγκεκριμένο πρόβλημα (ο z -άξονας είναι άξονας συμμετρίας), θεωρούμε ότι η φ συντεταγμένη είναι σταθερή καθ' όλη τη διαδικασία της επίλυσης (έστω $\varphi=0$). Αυτό διότι η λύση του προβλήματος θα είναι ακριβώς η ίδια για κάθε τιμή της συντεταγμένης φ .



Σχήμα 3.1 – Σύστημα κυλινδρικών συντεταγμένων

Η μετατροπή από τις κυλινδρικές στις αντίστοιχες καρτεσιανές συντεταγμένες γίνεται ως εξής:

$$x = r \cos \varphi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \varphi = 0) \quad x = r, \quad (3-1)$$

$$y = r \sin \varphi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \varphi = 0) \quad y = 0, \quad (3-2)$$

$$z = z. \quad (3-3)$$

Με τη χρήση της συμμετρίας αυτής το τριδιάστατο κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων “εκφυλίζεται” σε μια διδιάστατη προβολή του πάνω στο επίπεδο xz .

Τα κυλινδρικά διανύσματα βάσης παριστάνονται με τα σύμβολα $(\vec{e}_r, \vec{e}_\varphi, \vec{k})$ και δείχνουν τις κατευθύνσεις κατά τις οποίες αυξάνονται οι τιμές των κυλινδρικών συντεταγμένων: (r, φ, z) αντίστοιχα (σχήμα 3.2). Οι εξισώσεις μετατροπής των μοναδιαίων διανυσμάτων βάσης από το κυλινδρικό στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων είναι οι ακόλουθες

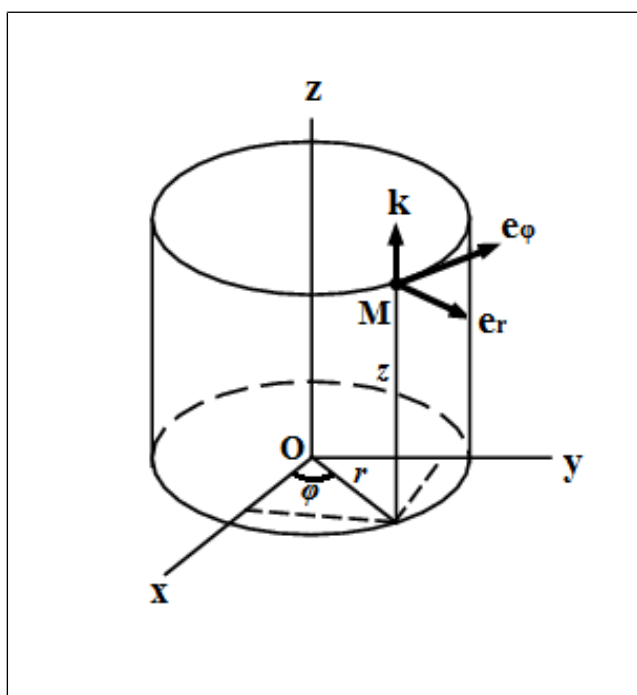
$$\vec{i} = \cos \varphi \vec{e}_r - \sin \varphi \vec{e}_\varphi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \varphi = 0) \quad \vec{i} = \vec{e}_r, \quad (3-4)$$

$$\vec{j} = \sin \varphi \vec{e}_r + \cos \varphi \vec{e}_\varphi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \varphi = 0) \quad \vec{j} = \vec{e}_\varphi, \quad (3-5)$$

$$\vec{k} = \vec{k}, \quad (3-6)$$

όπου $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ τα καρτεσιανά διανύσματα βάσης στη x , y και z διεύθυνση αντίστοιχα.

[Παπαϊωάννου 2003]



Σχήμα 3.2 – Μοναδιαία διανύσματα $(\vec{e}_r, \vec{e}_\varphi, \vec{k})$ κυλινδρικών συντεταγμένων

Σημειώνεται ότι η ανεξάρτητη μεταβλητή που θα χρησιμοποιήσουμε σε αυτό το πρόβλημα θα είναι η κάθετη απόσταση z του κυλινδρικού συστήματος συντεταγμένων.

3.2. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 1 (ΠΣΤ-1) – Ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο

Το πρόβλημα συνοριακών τιμών-1 (ΠΣΤ-1) που επιλύεται σε κυλινδρική παραμετροποίηση αφορά την ισορροπία αξονοσυμμετρικής σταγόνας πάνω σε λείο οριζόντιο επίπεδο και διατυπώνεται ως εξής:

Θα πρέπει να βρεθούν οι τιμές των μεταβλητών: $(\delta(z), K, z_{max})$, επιλύοντας ταυτόχρονα:

1. την αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (σχέση 3-11),
2. την αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου της σταγόνας (σχέση 3-18),
3. την αδιάστατη μορφή της εξίσωσης του κατακόρυφου επιπέδου, δηλαδή του άξονα z (σχέση 3-20).

Όπου:

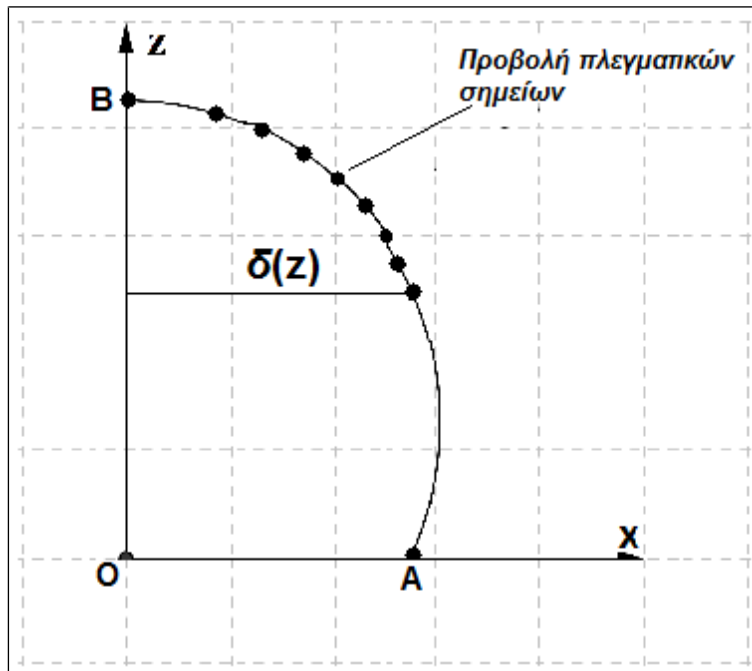
$\delta(z)$ = Αδιάστατη απόσταση του άξονα συμμετρίας (z) από την ελεύθερη επιφάνεια την σταγόνας (σχήμα 3.3). Η λύση δ είναι συνάρτηση της απόστασης z των κυλινδρικών συντεταγμένων.

K = Πίεση αναφοράς, που είναι μια αδιάστατη ποσότητα και έχει σταθερή κατά μήκος της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας.

z_{max} = Μέγιστο ύψος της σταγόνας, που ισούται με τη μέγιστη απόσταση z των κυλινδρικών συντεταγμένων.

Η επίλυση του ΠΣΤ-1, όπως και όλων των άλλων ΠΣΤ που θα αντιμετωπιστούν, γίνεται με την υπολογιστική μέθοδο Galerkin με πεπερασμένα στοιχεία. Για τις δύο πρώτες εξισώσεις η επίλυση γίνεται σε ένα χωρίο αναφοράς D , χρησιμοποιώντας συνοριακές συνθήκες στο σύνορο του D (∂D). Το χωρίο D είναι ένα ευθύγραμμο τμήμα που εκτείνεται από το $z=0$ έως το $z=z_{max}$ το οποίο απεικονίζεται στο πραγματικό χωρίο AB (σχήμα 3.3) μέσω της ισοπαραμετρικής απεικόνισης. Η τρίτη εξίσωση ισχύει στο άνω όριο του χωρίου D ($z=z_{max}$). Άξονας συμμετρίας της σταγόνας θεωρείται ο z -άξονας. Παρατηρούμε ότι πρόκειται για ένα πρόβλημα “ελεύθερου συνόρου” καθώς το άνω όριο του χωρίου D είναι ένας από τους αγνώστους (z_{max}). Σημειώνεται ότι κατά την διακριτοποίηση του προβλήματος, οι κόμβοι στο χωρίο επίλυσης απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση z_i .

Παρακάτω διατυπώνονται οι εξισώσεις που θα επιλυθούν καθώς και οι συνοριακές συνθήκες που θα εφαρμοστούν στο ∂D :



Σχήμα 3.3 – Το χωρίο D, όπου γίνεται η επίλυση του ΠΣΤ-1, απεικονίζεται στο πραγματικό χωρίο το οποίο εκτείνεται από το σημείο A έως το B. Στο σχήμα φαίνονται οι προβολές των πλεγματικών σημείων όπως απεικονίζονται στο πραγματικό χωρίο AB

3.2.1. Εξίσωση Young-Laplace

Η εξίσωση Young-Laplace διατυπώνει τη μηχανική ισορροπία της σταγόνας και συσχετίζει τη διαφορά πίεσης μεταξύ δύο φάσεων με την τιμή της καμπυλότητας της διεπιφάνειας. Για τη διεπιφάνεια υγρού-αέρα είναι η εξίσωση Young-Laplace είναι (σε μονάδες πίεσης): [Drygiannakis et al. 2008]

$$\hat{\Delta}p = \gamma_{LV} \hat{C} + \hat{g} \hat{\Delta}\rho \hat{z} \Leftrightarrow \frac{\hat{\Delta}p}{\gamma_{LV}} = \hat{C} + \frac{\hat{g} \hat{\Delta}\rho \hat{z}}{\gamma_{LV}} \quad (3-7)$$

Ο όρος $\hat{g} \hat{\Delta}\rho \hat{z}$ που έχει προστεθεί στην αρχική μορφή της εξίσωσης Young-Laplace, είναι η επίδραση του βαρυτικού πεδίου της Γης στη σταγόνα.

όπου:

$\hat{\Delta}p$ = Η διαφορά πίεσης μεταξύ των δύο φάσεων (υγρής και αέριας).

γ_{LV} = Διεπιφανειακή τάση των δύο ρευστών (υγρού-αέρα).

\hat{g} = Επιτάχυνση της βαρύτητας.

$\hat{\Delta}\rho$ = Διαφορά πυκνότητας μεταξύ των δύο ρευστών (υγρού-αέρα).

$\hat{C} = 2 \hat{H}$ = Το διπλάσιο της μέσης τοπικής καμπυλότητας της ελεύθερης επιφάνειας του υγρού.

\hat{z} = Κατακόρυφη απόσταση των κόμβων από το επίπεδο αναφοράς ($z = 0$).

Τα παραπάνω μεγέθη δεν είναι αδιάστατα (το σύμβολο $\hat{\cdot}$ συμβολίζει μεγέθη με φυσικές διαστάσεις). Για να αδιαστατοποιηθεί η εξίσωση Young-Laplace (3-7), η οποία τώρα είναι σε μονάδες αντίστροφου μήκους, πολλαπλασιάζεται με ένα χαρακτηριστικό μέγεθος \hat{R}_o (όπου \hat{R}_o ισούται με την ακτίνα μιας σφαίρας με όγκο ίσο με αυτόν της σταγόνας) και προκύπτει:

$$\frac{\hat{\Delta p} \hat{R}_o}{\hat{\gamma}_{LV}} = \hat{C} \hat{R}_o + \frac{\hat{g} \hat{\Delta \rho} \hat{z}}{\hat{\gamma}_{LV}} \hat{R}_o, \quad (3-8)$$

εν συνεχεία, για να αδιαστατοποιηθεί το \hat{z} αντικαθίσταται από την εξίσωση:

$$\hat{z} = z \hat{R}_o, \quad (3-9)$$

όπου z = αδιάστατη κατακόρυφη απόσταση.

Έτσι προκύπτει:

$$\frac{\hat{\Delta p} \hat{R}_o}{\hat{\gamma}_{LV}} = C + \frac{\hat{g} \hat{\Delta \rho} \hat{R}_o^2}{\hat{\gamma}_{LV}} z, \quad (3-10)$$

όπου C = η αδιάστατη μορφή του \hat{C} .

Ο όρος $\frac{\hat{g} \hat{\Delta \rho} \hat{R}_o^2}{\hat{\gamma}_{LV}}$ αντιστοιχεί στην επίδραση της βαρυτικής δύναμης και συμβολίζεται με τον αδιάστατο αριθμό Bond, N_g .

Αντίστοιχα ο όρος $\frac{\hat{\Delta p} \hat{R}_o}{\hat{\gamma}_{LV}}$ αντιστοιχεί σε μια πίεση αναφοράς, σταθερή κατά μήκος της διεπιφάνειας των δύο ρευστών, και συμβολίζεται με τον αδιάστατο αριθμό K (πίεση αναφοράς).

Έτσι, αν αντικαταστήσουμε στην εξίσωση Young-Laplace (σχέση 3-10) την έκφραση της μέσης τοπικής καμπυλότητας της σταγόνας ($C = 2H$) σε κυλινδρική παραμετροποίηση, (βλ. Παράρτημα Α, παράγραφο Α.2.) προκύπτει:

$$K = C + N_g z \Leftrightarrow K = -\frac{1}{\delta(1+\delta_z^2)^{1/2}} + \frac{\delta_{zz}}{(1+\delta_z^2)^{3/2}} + N_g z, \quad (3-11)$$

για $z \in [0, z_{max}]$,

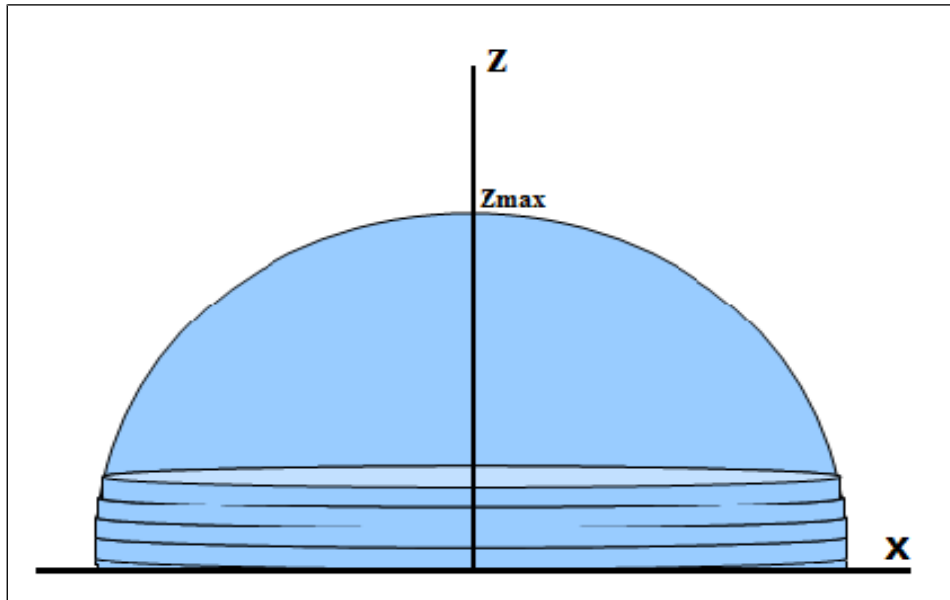
όπου: $\delta_z = \frac{d\delta}{dz}$ και $\delta_{zz} = \frac{d^2\delta}{dz^2}$.

3.2.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας

Για να υπολογιστεί ο όγκος της σταγόνας σε κυλινδρική παραμετροποίηση, χωρίζεται σε λεπτούς δίσκους με στοιχειώδες όγκο:

$$dV = \pi \hat{\delta}^2 d\hat{z}, \quad (3-12)$$

όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 3.4):



Σχήμα 3.4 – Υπολογισμός όγκου σταγόνας σε κυλινδρική παραμετροποίηση

Έτσι ο συνολικός όγκος της σταγόνας υπολογίζεται αθροίζοντας τους στοιχειώδεις όγκους (dV) με το παρακάτω ολοκλήρωμα:

$$V_{droplet}^{\hat{}} = \int_0^{z_{max}} \pi \hat{\delta}^2 d\hat{z}, \quad (3-13)$$

Επίσης, αντικαθιστούμε το $\hat{\delta}$ από τη σχέση:

$$\hat{\delta} = \delta \hat{R}_o \quad (3-14)$$

και το \hat{z} από την σχέση:

$$\hat{z} = z \hat{R}_o. \quad (3-15)$$

Άρα προκύπτει:

$$V_{droplet}^{\hat{}} = \hat{R}_o^3 \int_0^{z_{max}} \pi \delta^2 dz. \quad (3-16)$$

Για να αδιαστατοποιηθεί η εξίσωση (3-16), που είναι σε μονάδες όγκου, διαιρείται με τον όγκο ενός

κυλίνδρου με ακτίνα \hat{R}_o και ύψος \hat{R}_o . Έτσι προκύπτει:

$$\frac{V_{\text{droplet}}}{\pi \hat{R}_o^3} = \frac{\pi \hat{R}_o^3 \int_0^{z_{\max}} \delta^2 dz}{\pi R_o^3} \Leftrightarrow \frac{V_{\text{droplet}}}{\pi \hat{R}_o^3} = \int_0^{z_{\max}} \pi \delta^2 dz. \quad (3-17)$$

Τελικά αν θεωρήσουμε ότι ο όγκος της σταγόνας ισούται με όγκο μιας σφαίρας με ακτίνα R_o (ο όγκος αυτός θα είναι σταθερός σε όλα τα ΠΣΤ που θα λύσουμε) καταλήγουμε στην αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου (3-18).

$$\frac{\frac{4}{3} \pi \hat{R}_o^3}{\pi \hat{R}_o^3} = \int_0^{z_{\max}} \pi \delta^2 dz \Leftrightarrow \int_0^{z_{\max}} \pi \delta^2 dz = \frac{4}{3}. \quad (3-18)$$

3.2.3. Εξίσωση κατακόρυφου επιπέδου

Η εξίσωση κατακόρυφου επιπέδου που θα χρησιμοποιήσουμε είναι της μορφής (σε καρτεσιανές συντεταγμένες): $x=0$. (3-19)

Η παραπάνω εξίσωση αναφέρεται στον z -άξονα και όχι στο επίπεδο xz , καθώς λόγω της αξονικής συμμετρίας το πρόβλημα επιλύεται σε μονοδιάστατο χωρίο. Μετατρέποντας τη σχέση 3-19 σε κυλινδρικές συντεταγμένες [από σχέση (3-1)] προκύπτει: $r=0$. (2-20)

3.2.4. Συνοριακές συνθήκες

Οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στο σύνορο ∂D είναι οι εξής:

- $\vec{n} = \vec{k}$, (3-21)
στο $z = z_{\max}$.

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_y$, (3-22)
στο $z = 0$.

Όπου:

\vec{n} = μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας.

Το \vec{n} υπολογίζεται σε κυλινδρικές συντεταγμένες:

$$\vec{n} = \frac{1}{(1 + \delta_z^2)^{1/2}} \vec{e}_r + \frac{-\delta_z}{(1 + \delta_z^2)^{1/2}} \vec{k}. \quad (3-23)$$

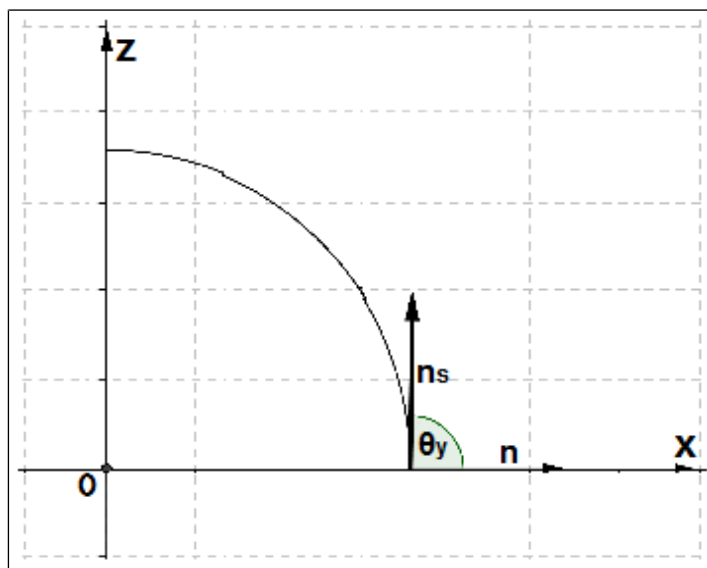
Ακόμα, \vec{n}_s = μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στο επίπεδο (εδώ το οριζόντιο επίπεδο) που ισορροπεί η

σταγόνα. Το \vec{n}_s υπολογίζεται σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$\vec{n}_s = \left(-\frac{f_x}{|\vec{n}_s|}, \frac{1}{|\vec{n}_s|} \right), \quad (3-24)$$

όπου: $f_x = \frac{df}{dx}$ = η παράγωγος της συνάρτησης του επιπέδου που ισορροπεί η σταγόνα ($f(x)$) ως προς το x .

Η συνθήκη (3-22) εκφράζει ότι το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας (\vec{n}) και μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στο επίπεδο (εδώ το οριζόντιο επίπεδο) που ισορροπεί η σταγόνα (\vec{n}_s), σχηματίζουν γωνία θ_y (γωνία-Young) στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 3.5)



Σχήμα 3.5 – Προσδιορισμός γωνίας θ_y (γωνία-Young)

Η γωνία θ_y (γωνία-Young) είναι μια ανεξάρτητη παράμετρος που προβλήματος. Προσδιορίζει την γωνία επαφής της σταγόνας με το επίπεδο, ορίζεται από μηδέν έως το π σε ακτίνια (ή από μηδεν έως 180° σε μοίρες) και εισάγει τις διαβρεκτικές ιδιότητες των υγρών στα στερεά τοιχώματα.

3.2.5. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

3.2.5.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace

Τα σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin, που επιδιώκεται να μηδενιστούν, προκύπτουν πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση Young-Laplace με καθεμία από τις συναρτήσεις βάσης φ^k και στη συνέχεια ολοκληρώνοντας στην ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας. Άρα για την εξίσωση Young-Laplace προκύπτει:

$$R_{YL} = \int_D \varphi^k (C - K + N_g z) dS_{pc}, \quad (3-25)$$

όπου το dS_{pc} υπολογίζεται ως η προβολή ενός στοιχειώδους χωρίου της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας, σε κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων, πάνω σε ένα κύλινδρο με ακτίνα ίση με το δ στο σημείο αυτό (βλ. Παράρτημα Β, παράγραφο Β.1.).

$$dS_{pc} = \delta \sqrt{1 + \delta_z^2} dz d\varphi, \quad (3-26)$$

$$R_{YL}^k = \int_0^{2\pi} \int_0^{z_{max}} \varphi^k \left[\frac{-1}{\delta(1 + \delta_z^2)^{1/2}} + \frac{\delta_{zz}}{(1 + \delta_z^2)^{3/2}} - K + N_g z \right] \delta \sqrt{1 + \delta_z^2} dz d\varphi,$$

και αφού θεωρούμε αξονική συμμετρία ως προς τον άξονα z προκύπτει:

$$R_{YL}^k = 2\pi \left[- \int_0^{z_{max}} \varphi^k dz + \int_0^{z_{max}} \varphi^k \frac{\delta_{zz} \delta \sqrt{1 + \delta_z^2}}{(1 + \delta_z^2)^{3/2}} dz - \int_0^{z_{max}} \varphi^k K \delta \sqrt{1 + \delta_z^2} dz + \int_0^{z_{max}} \varphi^k N_g z \delta \sqrt{1 + \delta_z^2} dz \right] \quad (3-27)$$

Σημειώνεται ότι το 2π μπορεί να παραλειφθεί παρακάτω αφού πολλαπλασιάζει όλα τα υπόλοιπα της Young-Laplace.

Για το δεύτερο ολοκλήρωμα της σχέσης (3-27) ισχύει:

$$\int_0^{z_{max}} \varphi^k \frac{\delta_{zz} \delta \sqrt{1 + \delta_z^2}}{(1 + \delta_z^2)^{3/2}} dz = \int_0^{z_{max}} \varphi^k \frac{\delta_{zz} \delta}{1 + \delta_z^2} dz = \int_0^{z_{max}} \varphi^k \delta \frac{d[\arctan \delta_z]}{dz} dz.$$

Στη συνέχεια εφαρμόζεται η μέθοδος παραγοντικής ολοκλήρωσης στο παραπάνω ολοκλήρωμα:

$$\int_0^{z_{max}} \varphi^k \delta \frac{d[\arctan \delta_z]}{dz} dz = \left[\varphi^k \delta \arctan \delta_z \right]_0^{z_{max}} - \int_0^{z_{max}} \arctan \delta_z \left[\delta_z \varphi^k + \delta \frac{d\varphi^k}{dz} \right] dz. \quad (3-28)$$

Αναπτύσσοντας τον δεύτερο όρο της παραπάνω εξίσωσης προκύπτει:

$$\left[\varphi^k \delta \arctan \delta_z \right]_0^{z_{max}} = \left[\varphi^k \delta \arctan \delta_z \right]_{z_{max}} - \left[\varphi^k \delta \arctan \delta_z \right]_0. \quad (3-29)$$

Στην εξίσωση (3-29) θα πρέπει να εισαχθούν τώρα οι συνοριακές συνθήκες. Στο σημείο $z = z_{max}$ από τη σχέση (3-21) ισχύει:

$$\vec{n} |_{z=z_{max}} = \vec{k} |_{z=z_{max}} \Leftrightarrow \vec{n} \cdot \vec{k} |_{z=z_{max}} = \cos 0. \quad (3-30)$$

Έτσι από τις σχέσεις (3-23), (3-30) προκύπτει:

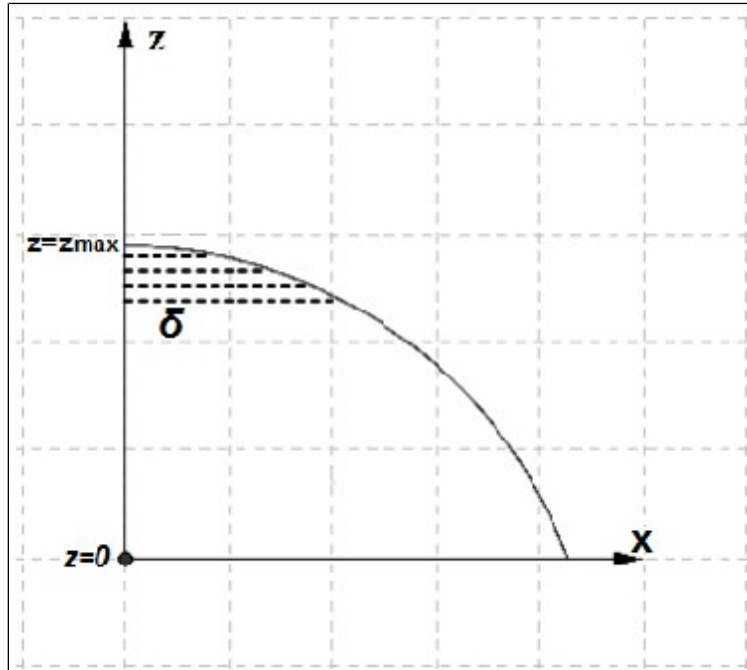
$$\frac{-\delta_z}{(1 + \delta_z^2)^{1/2}} |_{z=z_{max}} = \cos 0 \Leftrightarrow$$

$$\delta_z |_{z=z_{max}} = \pm \cot 0. \quad (3-31a)$$

Από τις δύο λύσεις της εξίσωσης (3-31a) επιλέγεται η εξής:

$$\delta_z \Big|_{z=z_{max}} = -\cot \theta . \quad (3-31b)$$

Αυτό διότι κοντά στο $z = z_{max}$ η παράγωγος δ_z έχει αρνητικό πρόσημο. Δηλαδή κοντά στο σημείο αυτό όταν η κάθετη απόσταση z μεταβάλλεται, η απόσταση δ μειώνεται, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (3.6).



Σχήμα 3.6 - Η παράγωγος δ_z είναι αρνητική κοντά στο $z = z_{max}$

Στο σημείο $z = 0$, από τη σχέση (3-22) ισχύει:

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_s \Big|_{z=0} = \cos \theta_y \Big|_{z=0} .$$

Ακόμα, αναπτύσσοντας την σχέση (3-24) στο καρτεσιανό σύστημα προκύπτει:

$$\vec{n}_s = -\frac{f_x}{\sqrt{f_x^2+1}} \vec{i} + \frac{1}{\sqrt{f_x^2+1}} \vec{k} . \quad (3-32a)$$

Για να μετατρέψουμε την εξίσωση (3-32a) από καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων σε κυλινδρικό χρησιμοποιούμε τις σχέσεις (3-4) και (3-6). Έτσι προκύπτει:

$$\vec{n}_s = -\frac{f_x}{\sqrt{f_x^2+1}} \vec{e}_r + \frac{1}{\sqrt{f_x^2+1}} \vec{k} . \quad (3-32b)$$

Για το οριζόντιο επίπεδο, που χρησιμοποιείται στο συγκεκριμένο πρόβλημα, ισχύει: $f_x = 0, \forall x \in D$ έτσι από την προηγούμενη σχέση (3-32b) υπολογίζεται:

$$\vec{n}_s = \vec{k} . \quad (3-33)$$

Τελικά, η σχέση (3-22) γίνεται:

$$\vec{n} \cdot \vec{k}|_{z=0} = \cos \theta_y|_{z=0} \quad (3-34)$$

και χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3-23), (3-34) καταλήγουμε:

$$\frac{-\delta_z}{(1+\delta_z^2)^{1/2}}|_{z=0} = \cos \theta_y \Leftrightarrow$$

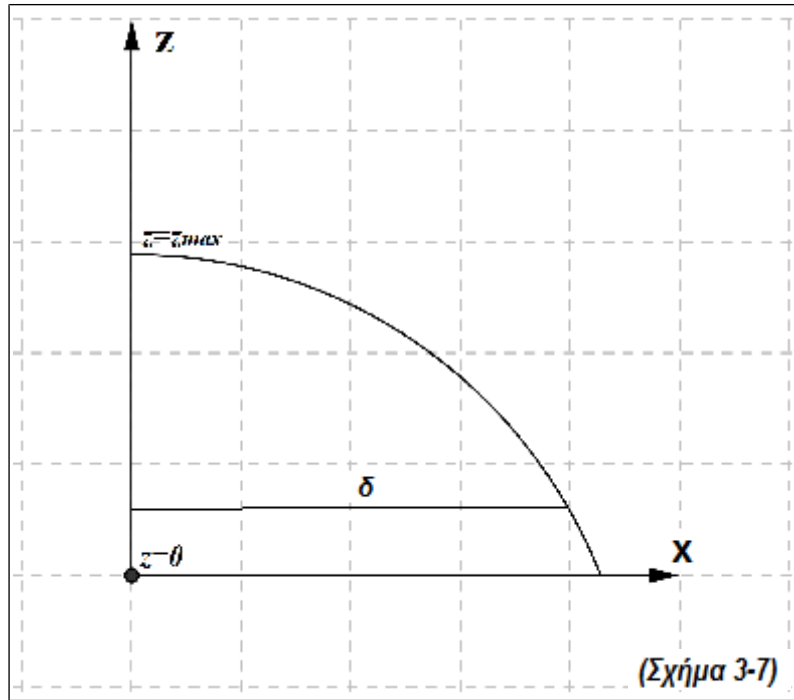
$$\delta_z|_{z=0} = \pm \cot \theta_y. \quad (3-35a)$$

Από τις δύο λύσεις της εξίσωσης (3-35a) επιλέγουμε την εξής:

$$\delta_z|_{z=0} = -\cot \theta_y. \quad (3-35b)$$

Αυτό διότι:

- Για για την περίπτωση που η σταγόνα διαβρέχει την στερεή επιφάνεια, δηλαδή: $\theta_y \in [0, \frac{\pi}{2}]$ ισχύει $\cot \theta_y \geq 0$ και η παράγωγος $\delta_z < 0$, αφού καθώς η απόσταση (z) μεταβάλλεται το δ μειώνεται, κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο (σχήμα 3.7).
- Για για την περίπτωση που η σταγόνα δεν διαβρέχει την στερεή επιφάνεια, δηλαδή: $\theta_y \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$ ισχύει $\cot \theta_y \leq 0$ και η παράγωγος $\delta_z > 0$, αφού καθώς η απόσταση (z) μεταβάλλεται το δ αυξάνεται, κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο (σχήμα 3.8).

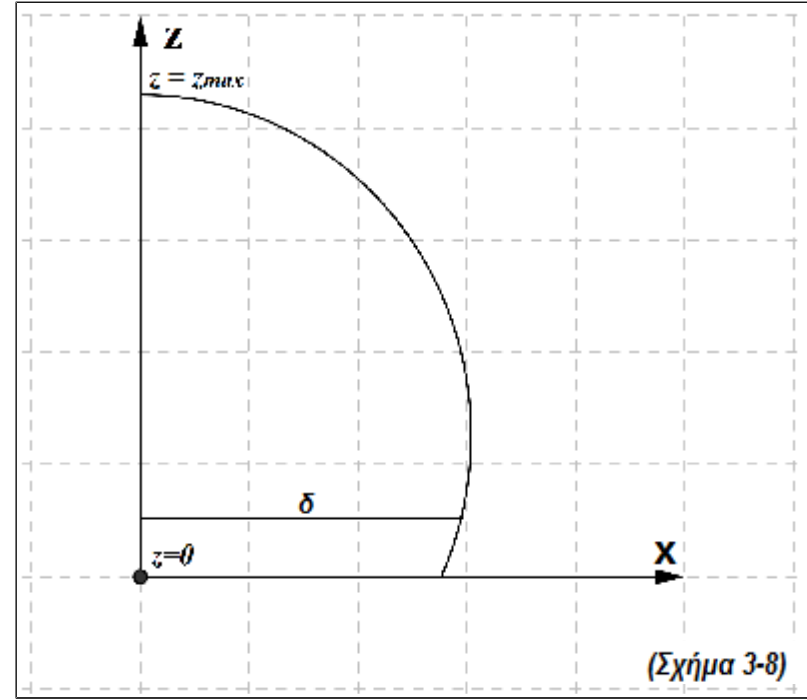


Σχήμα 3.7 – Η παράγωγος $\delta_z = \frac{d\delta}{dz}$ είναι αρνητική κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο, για την περίπτωση που η σταγόνα διαβρέχει την στερεή

$$\text{επιφάνεια: } \theta_y \in [0, \frac{\pi}{2}]$$

Σχήμα 3.8 – Η παράγωγος $\delta_z = \frac{d\delta}{dz}$ είναι θετική κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο, για την περίπτωση που η σταγόνα δεν διαβρέχει την στερεή

$$\text{επιφάνεια: } \theta_y \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$$



Άρα από τις σχέσεις (3-31b), (3-35b), η σχέση (3-29) παίρνει τη μορφή:

$$\left[\varphi^k \delta \arctan \delta_z \right]_0^{z_{max}} = \delta \arctan [\cot 0] - \delta \arctan [-\cot \theta_y]. \quad (3-36)$$

Τελικά, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (3-27), (3-28), (3-36) βλέπουμε ότι τα σταθμισμένα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace είναι:

$$\begin{aligned} R_{YL}^k &= - \int_0^{z_{max}} \varphi^k dz - \int_0^{z_{max}} \arctan \delta_z \left[\delta_z \varphi^k + \delta \frac{d\varphi^k}{dz} \right] dz - \int_0^{z_{max}} \varphi^k K \delta \sqrt{1 + \delta_z^2} dz + \int_0^{z_{max}} \varphi^k N_g z \delta \sqrt{1 + \delta_z^2} dz \\ &\equiv R_{cylindrical 1}, \end{aligned} \quad (3-37a)$$

για $2 \leq k \leq N-1$,

όπου $N =$ πλήθος των κόμβων του πλέγματος.

Τα σταθμισμένα υπόλοιπα του πρώτου και του τελευταίου (N) κόμβου του πλέγματος, θα είναι αντίστοιχα:

$$R_{YL}^1 = R_{cylindrical 1} - \delta \Big|_{z=0} \arctan [-\cot \theta_y], \quad (3-37b)$$

$$R_{YL}^N = R_{cylindrical 1} - \delta \Big|_{z=z_{max}} \arctan [\cot 0] = -\delta \Big|_{z=z_{max}} \frac{\pi}{2}. \quad (3-37c)$$

3.2.5.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου

Η εξίσωση διατήρησης του όγκου είναι ήδη σε ολοκληρωτική μορφή, άρα τα αντίστοιχα υπόλοιπα είναι:

$$R_V = \int_0^{z_{max}} \pi \delta^2 dz - \frac{4}{3}. \quad (3-38)$$

3.2.5.3. Υπόλοιπα εξίσωσης κατακόρυφου επιπέδου

Το υπόλοιπο Galerkin της εξίσωσης του κατακόρυφου επιπέδου έχει τη μορφή, σύμφωνα με τη σχέση (3-20):

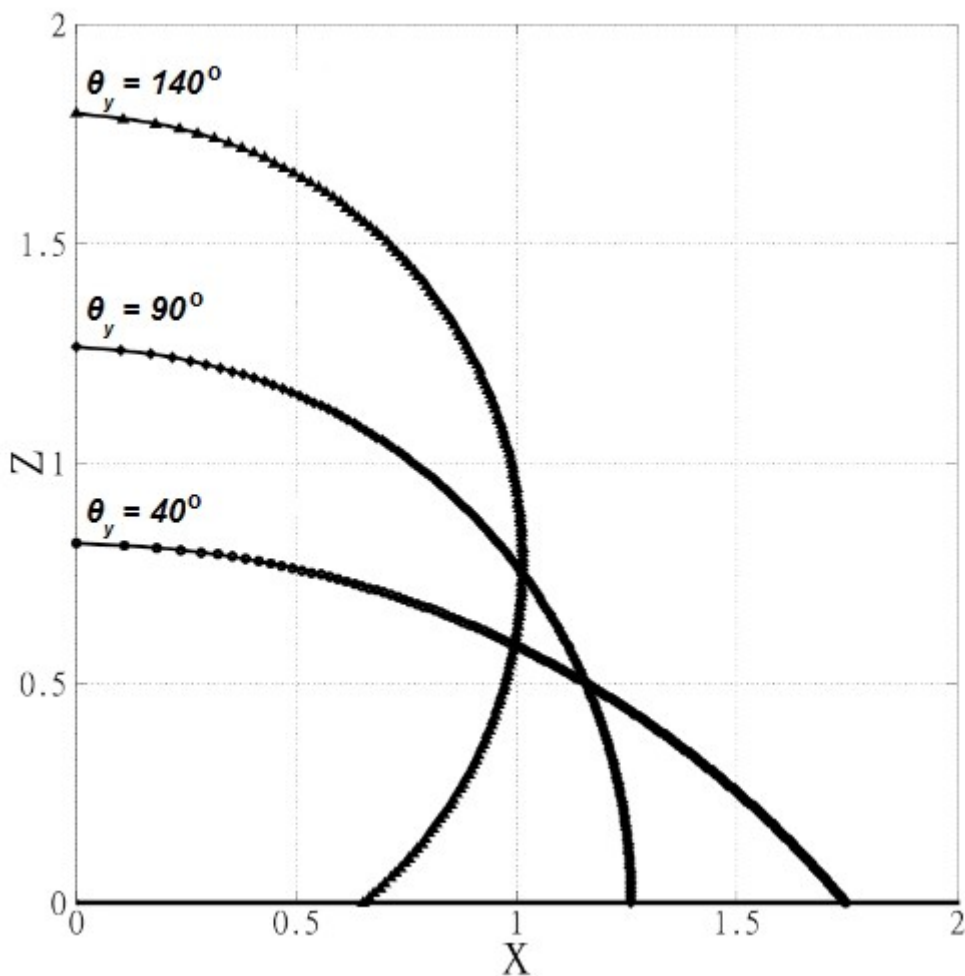
$$R_{VE} = \delta \Big|_{z=z_{max}}. \quad (3-39)$$

Για να λυθεί το πρόβλημα (ΠΣΤ-1), όπως και όλα τα υπόλοιπα ΠΣΤ που θα αντιμετωπίσουμε, χρειάζεται επίσης να προσδιορίσουμε την παράμετρο θ_y στα υπόλοιπα Galerkin.

Το μη-γραμμικό σύστημα εξισώσεων που προκύπτει επιλύεται στη συνέχεια με την επαναληπτική μέθοδο Newton–Raphson.

3.2.6. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-1

Στο παρακάτω σχήμα (3.9) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το ΠΣΤ-1 για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y) της σταγόνας με το οριζόντιο επίπεδο, χωρίς την επίδραση της βαρύτητας. Συγκεκριμένα είναι για γωνίες 40, 90, και 140 μοίρες αντίστοιχα. Το πλέγμα του χωρίου D αποτελείται από 160 στοιχεία (elements).



Σχήμα 3.9 – Αποτελέσματα υπολογισμών για το ΠΣΤ-1 (ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο με κυλινδρική παραμετροποίηση) για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y). Το οριζόντιο επίπεδο είναι στο $z=0$.

3.2.7. Αξιολόγηση αποτελεσμάτων

Από τα παραπάνω αποτελέσματα παρατηρούμε ότι υπάρχει μείωση στην πυκνότητα των πλεγματικών σημείων που προβάλλονται στην καμπύλη της λύσης. Αυτό οφείλεται στο ότι οι διαδοχικοί κόμβοι διακριτοποίησης, στο χωρίο επίλυσης, απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση z_i . Αυτή η μεταβολή της πυκνότητας του πλέγματος γίνεται αισθητή στο ανώτερο σημείο της σταγόνας για διάφορες γωνίες επαφής (όπως φαίνεται στο σχήμα 3.9) και μπορεί να προκαλέσει προβλήματα στην ακρίβεια της τελικής λύσης μας σε αυτά τα σημεία.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4:

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΕ ΣΦΑΙΡΙΚΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ

Στο κεφάλαιο αυτό διατυπώνονται, σε σφαιρική παραμετροποίηση, οι εξισώσεις καθώς και τα αντίστοιχα υπόλοιπα Galerkin που θα χρησιμοποιηθούν για την επίλυση των προβλημάτων συνοριακών τιμών που αφορούν την ισορροπία σταγόνας σε λείο οριζόντιο αλλά και σε επίπεδο υπό κλίση. Τέλος γίνεται μια παρουσίαση των σχετικών αποτελεσμάτων καθώς και αξιολόγησή τους σε σχέση με τα αντίστοιχα της κυλινδρικής παραμετροποίησης.

4.1. Σφαιρική παραμετροποίηση

Στο σύστημα των σφαιρικών συντεταγμένων (σχήμα 4.1), η θέση ενός σημείου M στον τριδιάστατο χώρο καθορίζεται από μια διατεταγμένη τριάδα (r, θ, φ) πραγματικών αριθμών που ονομάζονται σφαιρικές συντεταγμένες. Η r -συντεταγμένη είναι η απόσταση του σημείου M από την αρχή O , η θ -συντεταγμένη είναι η γωνία μεταξύ του θετικού z -άξονα και του ευθύγραμμου τμήματος OM . Η φ -συντεταγμένη είναι η γωνία μεταξύ του θετικού x -άξονα και του ευθύγραμμου τμήματος OM' , όπου M' είναι η προβολή του σημείου M πάνω στο καρτεσιανό xy επίπεδο.

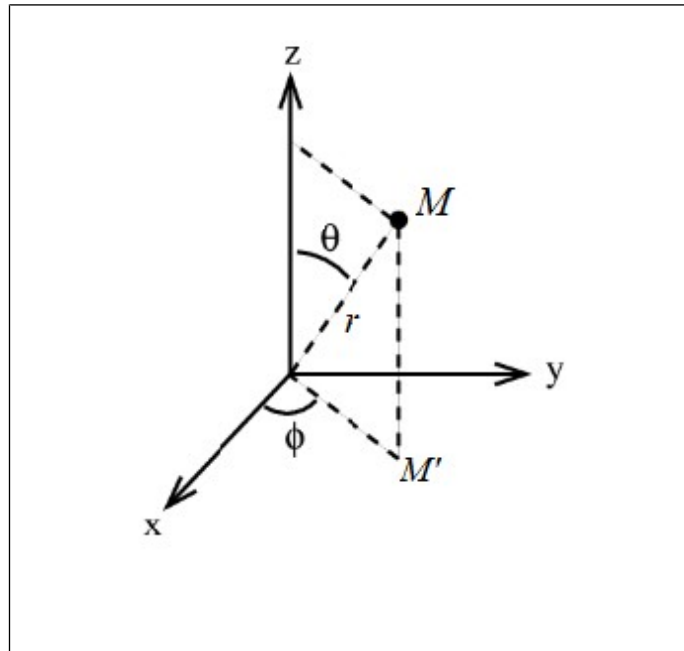
Λόγω της αξονικής συμμετρίας που υπάρχει στο συγκεκριμένο πρόβλημα (αφού ο z -άξονας είναι άξονας συμμετρίας της σταγόνας), θεωρούμε ότι η φ συντεταγμένη είναι σταθερή καθ' όλη τη διαδικασία της επίλυσης (έστω $\varphi=0$). Αυτό διότι η λύση του προβλήματος θα είναι ακριβώς η ίδια για κάθε τιμή της συντεταγμένης φ .

Έτσι μετατροπή από τις σφαιρικές στις αντίστοιχες καρτεσιανές συντεταγμένες γίνεται ως εξής:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \varphi = 0) \quad x = r \sin \theta, \quad (4-1)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \varphi = 0) \quad y = 0, \quad (4-2)$$

$$z = r \cos \theta. \quad (4-3)$$



Σχήμα 4.1 – Σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων

Με τη χρήση της συμμετρίας αυτής το τριδιάστατο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων “εκφυλίζεται” σε μια διδιάστατη προβολή του πάνω στο επίπεδο xz .

Τα σφαιρικά διανύσματα βάσης παριστάνονται με τα σύμβολα $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi)$ και δείχνουν τις κατευθύνσεις κατά τις οποίες αυξάνονται οι τιμές των σφαιρικών συντεταγμένων: (r, θ, ϕ) αντίστοιχα (σχήμα 4.2). Οι εξισώσεις μετατροπής των μοναδιαίων διανυσμάτων βάσης από το σφαιρικό στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων είναι οι ακόλουθες:

$$\vec{i} = \sin \theta \cos \phi \vec{e}_r + \cos \theta \cos \phi \vec{e}_\theta - \sin \phi \vec{e}_\phi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \phi = 0)$$

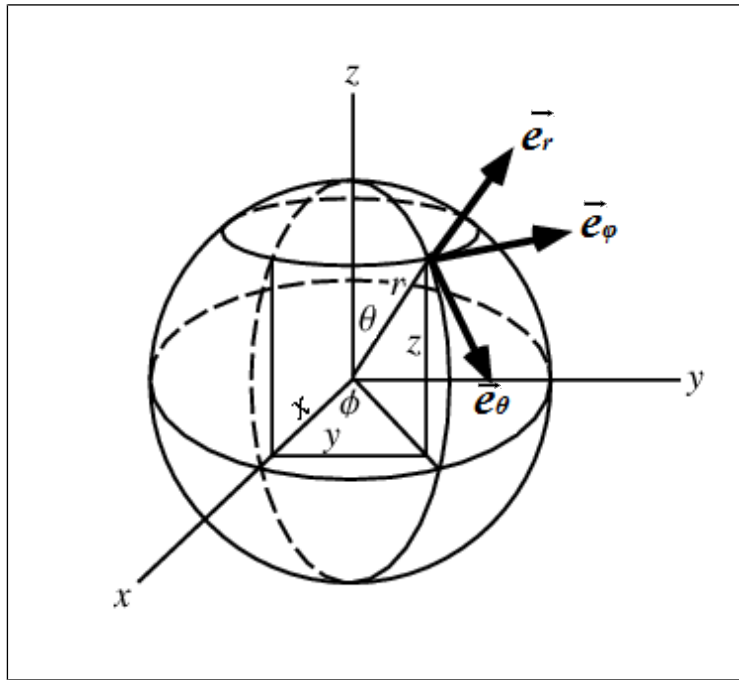
$$\vec{i} = \sin \theta \vec{e}_r + \cos \theta \vec{e}_\theta, \tag{4-4}$$

$$\vec{j} = \sin \theta \sin \phi \vec{e}_r + \cos \theta \sin \phi \vec{e}_\theta + \cos \phi \vec{e}_\phi \Leftrightarrow (\text{για σταθερό } \phi = 0)$$

$$\vec{j} = \vec{e}_\phi, \tag{4-5}$$

$$\vec{k} = \cos \theta \vec{e}_r - \sin \theta \vec{e}_\theta, \tag{4-6}$$

όπου $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ τα καρτεσιανά διανύσματα βάσης στη x , y και z διεύθυνση αντίστοιχα [Παπαϊωάννου 2003]



Σχήμα 4.2 – Μοναδιαία διανύσματα ($\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$) σφαιρικών συντεταγμένων

Σημειώνεται ότι η ανεξάρτητη μεταβλητή που θα χρησιμοποιήσουμε σε αυτό το πρόβλημα θα είναι η γωνία θ του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων.

4.2. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 2 (ΠΣΤ-2) – Ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο

Το πρόβλημα συνοριακών τιμών-2 (ΠΣΤ-2) που επιλύεται σε σφαιρική παραμετροποίηση αφορά την ισορροπία αξονοσυμμετρικής σταγόνας πάνω σε λείο οριζόντιο επίπεδο και διατυπώνεται ως εξής:

Θα πρέπει να βρεθούν οι τιμές των μεταβλητών: $(u(\theta), K)$, επιλύοντας ταυτόχρονα:

1. την αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (σχέση 4-8),
2. την αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου της σταγόνας (σχέση 4-15).

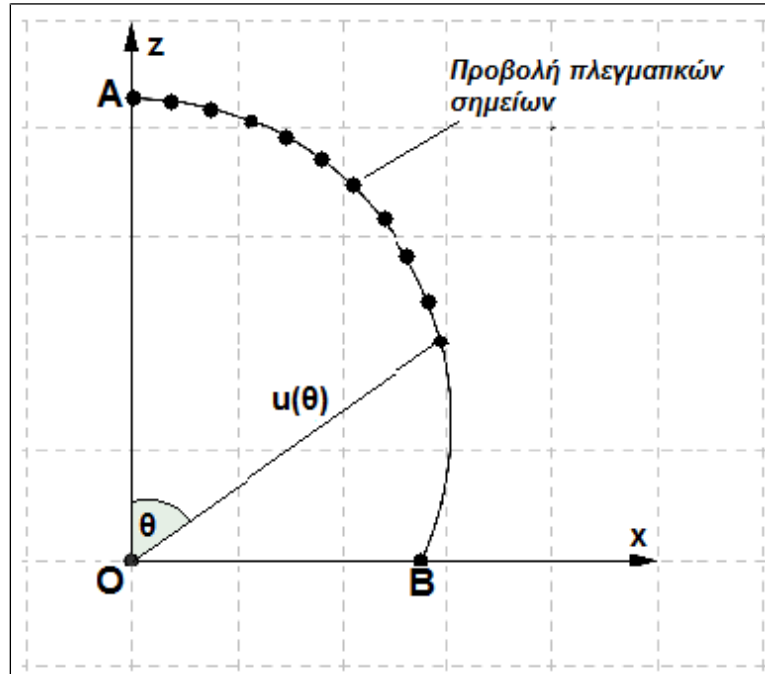
Όπου:

$u(\theta)$ = αδιάστατη απόσταση του κέντρου του συστήματος συντεταγμένων από την ελεύθερη επιφάνεια την σταγόνας (σχήμα 4.3). Η λύση u είναι συνάρτηση της γωνίας θ των των σφαιρικών συντεταγμένων. Για τη μεταβλητή (K) βλ. Κεφάλαιο 3.

Η επίλυση γίνεται στο χωρίο αναφοράς D χρησιμοποιώντας συνοριακές συνθήκες στο σύνορο του D (∂D). Το χωρίο D εκτείνεται από το $\theta = 0$ έως το $\theta = \pi/2$, δηλαδή ως το σημείο επαφής της

σταγόνας με το επίπεδο. Σημειώνεται ότι κατά τη διακριτοποίηση του προβλήματος, οι κόμβοι στο χωρίο επίλυσης απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση θ_i .

Παρακάτω διατυπώνονται οι εξισώσεις που επιλύονται καθώς και οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στο ∂D :



Σχήμα 4.3 – Το χωρίο D , όπου γίνεται η επίλυση του ΠΣΤ-1, απεικονίζεται στο πραγματικό χωρίο το οποίο εκτείνεται από το σημείο A έως το B

4.2.1. Εξίσωση Young-Laplace

Η εξίσωση Young-Laplace διατυπώνεται όπως και στη κυλινδρική παραμετροποίηση:

$$\frac{\Delta p \hat{R}_o}{\gamma_{LV}} = \hat{C} + \frac{g \Delta p \hat{R}_o^2}{\gamma_{LV}} \hat{z}. \quad (4-7)$$

Έτσι, αν αντικαταστήσουμε στην εξίσωση Young-Laplace τις αντίστοιχες εκφράσεις με τους αδιάστατους αριθμούς N_g και K , την έκφραση της μέσης τοπικής καμπυλότητας της σταγόνας ($C=2H$) (βλ. Παράρτημα Α, παράγραφο Α.2.) σε σφαιρική παραμετροποίηση, καθώς και την κάθετη απόσταση z προκύπτει:

$$K = \frac{1}{u^2 \sin \theta} \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + u_\theta^2 \sin^2(\theta)}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} - \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right] + N_g r \cos \theta, \quad (4-8)$$

για $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$,

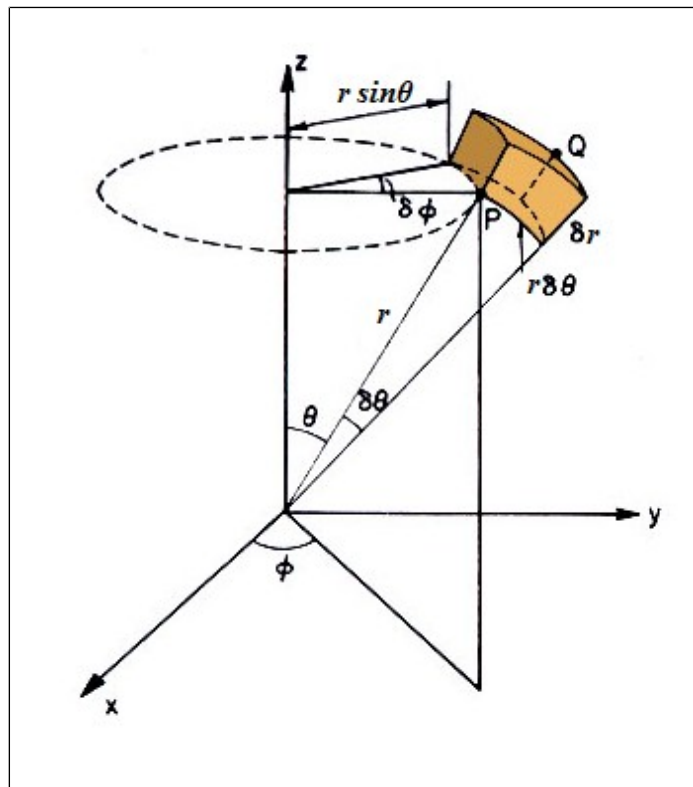
$$\text{όπου: } u_\theta = \frac{du}{d\theta}.$$

4.2.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας

Για να υπολογιστεί ο συνολικός όγκος της σταγόνας του (ΠΣΤ-2) σε σφαιρική παραμετροποίηση, χωρίζεται σε μικρά ορθογώνια όπου το καθένα θα έχει στοιχειώδη όγκο:

$$d\hat{V} = \hat{r}^2 \sin \theta d\hat{r} d\phi d\theta, \quad (4-9)$$

όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 4.4):



Σχήμα 4.4 – Υπολογισμός στοιχειώδους όγκου (dV) σε σφαιρικές συντεταγμένες

Έτσι ο συνολικός όγκος της σταγόνας υπολογίζεται αθροίζοντας τους στοιχειώδεις όγκους (dV) με το παρακάτω τριπλό ολοκλήρωμα:

$$\hat{V}_{droplet} = \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \int_0^u \hat{r}^2 \sin \theta d\hat{r} d\phi d\theta, \quad (4-10)$$

$$\Leftrightarrow \hat{V}_{droplet} = \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \frac{\hat{u}^3}{3} \sin \theta d\phi d\theta$$

$$\Leftrightarrow \hat{V}_{droplet} = \int_0^{\pi/2} \frac{2}{3} \pi \hat{u}^3 \sin \theta d\theta. \quad (4-11)$$

$$\text{Το } \hat{u} \text{ αντικαθίσταται από την εξίσωση: } \hat{u} = u R_o, \quad (4-12)$$

όπου: $u =$ αδιάστατη απόσταση του πόλου (σημείο $(0,0,0)$) από την ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας. Άρα προκύπτει:

$$\hat{V}_{droplet} = \frac{2}{3} \pi \hat{R}_o^3 \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta d\theta. \quad (4-13)$$

Για να αδιαστατοποιηθεί η εξίσωση (4-13), που είναι σε μονάδες όγκου, διαιρείται με τον όγκο μιας σφαίρας με ακτίνα \hat{R}_o . Έτσι προκύπτει:

$$\frac{\hat{V}_{droplet}}{\frac{4}{3} \pi \hat{R}_o^3} = \frac{\frac{2}{3} \pi \hat{R}_o^3 \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta d\theta}{\frac{4}{3} \pi \hat{R}_o^3} \Leftrightarrow 2 \left(\frac{\hat{V}_{droplet}}{\frac{4}{3} \pi \hat{R}_o^3} \right) = \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta d\theta. \quad (4-14)$$

Τελικά, αν θεωρήσουμε ότι ο όγκος της σταγόνας ισούται με όγκο μιας σφαίρας με ακτίνα \hat{R}_o καταλήγουμε στην αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου (4-15):

$$\int_0^{\pi/2} u^3 \sin(\theta) d\theta = 2. \quad (4-15)$$

4.2.3. Συνοριακές συνθήκες

Οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στο σύνορο ∂D είναι οι εξής:

- $\frac{du}{d\theta} = 0,$ (4-16)
στο $\theta = 0.$

Δηλαδή η κλίση της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας είναι μηδενική στο σημείο $\theta = 0$. Αυτή η συνθήκη δηλώνει την αξονική συμμετρία του συγκεκριμένου προβλήματος (ο άξονας συμμετρίας είναι ο z-άξονας).

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_y,$ (4-17)
στο $\theta = \frac{\pi}{2}.$

Η παραπάνω συνοριακή συνθήκη (που υποδηλώνει την εφαρμογή της γωνίας επαφή (θ_y) , εφαρμόζεται αυτούσια και στο ΠΣΤ-1 (βλ. Κεφάλαιο 3, παράγραφο 3.2.4.)

4.2.4. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

4.2.4.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace

Από την εξίσωση Young-Laplace προκύπτει:

$$R_{YL}^k = \int_D \varphi^k (C - K + N_g z) dS_{ps} . \quad (4-18)$$

Όπου το dS_{ps} υπολογίζεται ως η προβολή ενός στοιχειώδους χωρίου της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας, σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων, πάνω σε μία σφαίρα με ακτίνα ίση με το u στο σημείο αυτό (βλ. Παράρτημα Β, παράγραφο Β.2.).

$$dS_{ps} = u^2 \sin \theta d\theta d\varphi . \quad (4-19)$$

$$R_{YL}^k = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \varphi^k (C - K + N_g h) u^2 \sin \theta d\theta d\varphi \Leftrightarrow$$

$$R_{YL}^k = 2\pi \left[\int_0^{\pi/2} \varphi^k C u^2 \sin \theta d\theta - \int_0^{\pi/2} \varphi^k K u^2 \sin \theta d\theta + \int_0^{\pi/2} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta d\theta \right] . \quad (4-20)$$

Σημειώνεται ότι το 2π μπορεί να παραλειφθεί παρακάτω αφού πολλαπλασιάζει όλα τα υπόλοιπα της Young-Laplace.

Για το πρώτο ολοκλήρωμα της σχέσης (4-20) ισχύει:

$$\int_0^{\pi/2} \varphi^k C u^2 \sin \theta d\theta = \int_0^{\pi/2} \frac{\varphi^k u^2 \sin \theta}{u^2 \sin \theta} \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} - \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right] d\theta =$$

$$\int_0^{\pi/2} \varphi^k \frac{2u^2 \sin \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta - \int_0^{\pi/2} \varphi^k \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta = I_1 + I_2 .$$

Δηλαδή έστω I_1 το πρώτο ολοκλήρωμα της παραπάνω σχέσης και I_2 το δεύτερο ολοκλήρωμα. Στη συνέχεια εφαρμόζεται η μέθοδος παραγοντικής ολοκλήρωσης στο ολοκλήρωμα I_2 .

Άρα:

$$I_2 = - \int_0^{\pi/2} \varphi^k \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_0^{\pi/2} + \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi^k}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta =$$

$$I_3 + I_4 .$$

Αναπτύσσοντας το I_3 προκύπτει:

$$I_3 = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_0^{\pi/2} = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_{\theta=\pi/2} + \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_{\theta=0} .$$

Από την πρώτη συνοριακή συνθήκη (σχέση 4-16) ισχύει: $u_\theta|_{\theta=\pi/2} = \frac{du}{d\theta}|_{\theta=\pi/2} = 0$. Άρα τελικά:

$$I_3 = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_{\theta=\pi/2} \Leftrightarrow I_3 = - \frac{u u_\theta}{\sqrt{(u^2 + u_\theta^2)}} \Big|_{\theta=\pi/2} . \quad (4-21)$$

Η δεύτερη συνοριακή συνθήκη (σχέση 4-17) θα πρέπει να εισαχθεί στο I_3 (σχέση 4-21), αυτό γίνεται ως εξής:

Υπολογίζεται, σε σφαιρικές συντεταγμένες, το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας:

$$\vec{n} = \frac{u}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} \vec{e}_r - \frac{u_\theta}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} \vec{e}_\theta . \quad (4-22)$$

Ακόμα, θα πρέπει να υπολογιστεί το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα (\vec{n}_s) στο επίπεδο που ισορροπεί η σταγόνα. Το κάθετο διάνυσμα (\vec{n}_s) σε ένα επίπεδο (με εξίσωση $f(x)$ σε καρτεσιανές συντεταγμένες) δίνεται από την παρακάτω σχέση (βλ. Κεφάλαιο 3, παράγραφο 3.2.4.):

$$\vec{n}_s = - \frac{f_x}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \vec{i} + \frac{1}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \vec{k} . \quad (4-23)$$

Για το οριζόντιο επίπεδο, που χρησιμοποιείται στο συγκεκριμένο πρόβλημα, ισχύει: $f_x = 0, \forall x \in D$, έτσι από την προηγούμενη σχέση (4-24) ισχύει:

$$\vec{n}_s = \vec{k} , \quad (4-24)$$

και από την σχέση (4-6) για $\theta = \pi/2$ ισχύει:

$$\vec{n}_s = - \vec{e}_\theta . \quad (4-25)$$

Ακόμα, από τις σχέσεις (4-17), (4-25) προκύπτει:

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_s \Big|_{\theta=\pi/2} = \cos \theta_y \Leftrightarrow \vec{n} \cdot \vec{e}_\theta \Big|_{\theta=\pi/2} = - \cos \theta_y \text{ και χρησιμοποιώντας τη σχέση (4-22):}$$

$$\frac{u_\theta}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} \Big|_{\theta=\pi/2} = \cos \theta_y . \quad (4-26)$$

Άρα από τις σχέσεις (4-21), (4-26) προκύπτει:

$$I_3 = - u \Big|_{\theta=\pi/2} \cos \theta_y . \quad (4-27)$$

Τελικά χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (4-20), (4-21), (4-27) καταλήγουμε ότι τα σταθμισμένα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace είναι:

$$R_{YL}^k = \int_0^{\pi/2} \varphi^k \frac{2u^2 \sin \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta + \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi^k}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta - \int_0^{\pi/2} \varphi^k K u^2 \sin \theta d\theta + \int_0^{\pi/2} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta d\theta \equiv R_{spherical 1}, \quad (4-28a)$$

για $1 \leq k \leq N-1$.

Το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος, θα είναι:

$$R_{YL}^N = R_{spherical 1} - u \Big|_{\theta=\pi/2} \cos \theta_y. \quad (4-28b)$$

4.2.4.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου

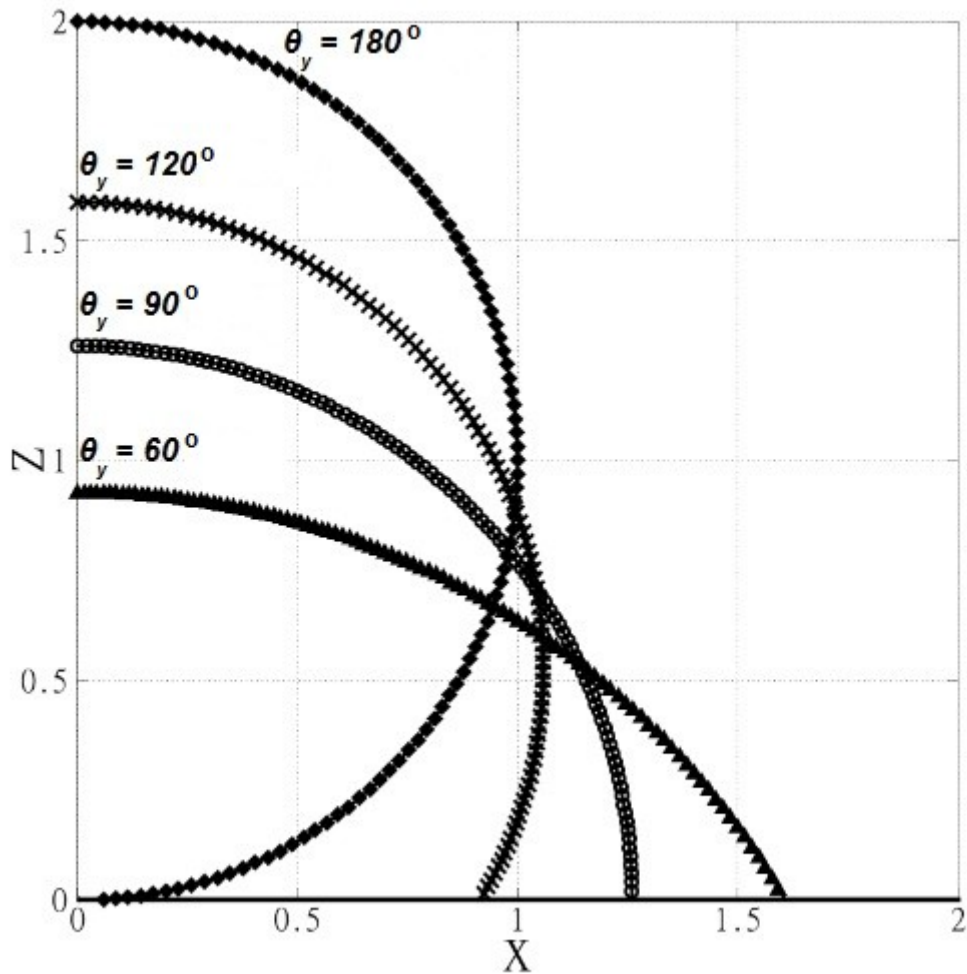
Η εξίσωση διατήρησης του όγκου είναι ήδη σε ολοκληρωτική μορφή, άρα τα αντίστοιχα υπόλοιπα είναι:

$$R_V = \int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta d\theta - 2. \quad (4-29)$$

4.2.5. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-2

Στο παρακάτω σχήμα (4.5) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το ΠΣΤ-2 για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y) της σταγόνας με το οριζόντιο επίπεδο, χωρίς την επίδραση της βαρύτητας. Συγκεκριμένα είναι για γωνίες 90, 60, 120 και 180 μοίρες αντίστοιχα. Το πλέγμα του χωρίου D αποτελείται από 100 στοιχεία (elements).

Και στη σφαιρική παραμετροποίηση όμως παρατηρούμε ξανά το πρόβλημα της μείωσης στην πυκνότητα των πλεγματικών σημείων που προβάλλονται στην καμπύλη της λύσης. Αυτό οφείλεται στο ότι οι κόμβοι διακριτοποίησης, στο χωρίο επίλυσης, απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση θ_i . Αυτή η τοπική αραιότητα του πλέγματος παρατηρείται ξεκάθαρα στο σχήμα (4.5) στο γράφημα που αφορά γωνία επαφής 60 μοίρες. Εκεί το πλέγμα εμφανίζεται πιο αραιό στο κατώτερο τμήμα της σταγόνας. Αυτό μπορεί να δημιουργήσει πρόβλημα στην ακρίβεια την λύσης μας καθώς η περιοχή αυτή έχει μεγάλο υπολογιστικό ενδιαφέρον διότι εκεί εφαρμόζεται η γωνία επαφής.



Σχήμα 4.5 – Αποτελέσματα υπολογισμών για το ΠΣΤ-2 (ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο με σφαιρική παραμετροποίηση) για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y). Το οριζόντιο επίπεδο είναι στο $z=0$.

4.3. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 3 (ΠΣΤ - 3) – Ισορροπία σταγόνας σε επίπεδο υπό κλίση

Το πρόβλημα συνοριακών τιμών-3 (ΠΣΤ-3) που επιλύεται σε σε σφαιρική παραμετροποίηση αφορά την ισορροπία αξονοσυμμετρικής σταγόνας πάνω σε λείο επίπεδο υπό κλίση και διατυπώνεται ως εξής:

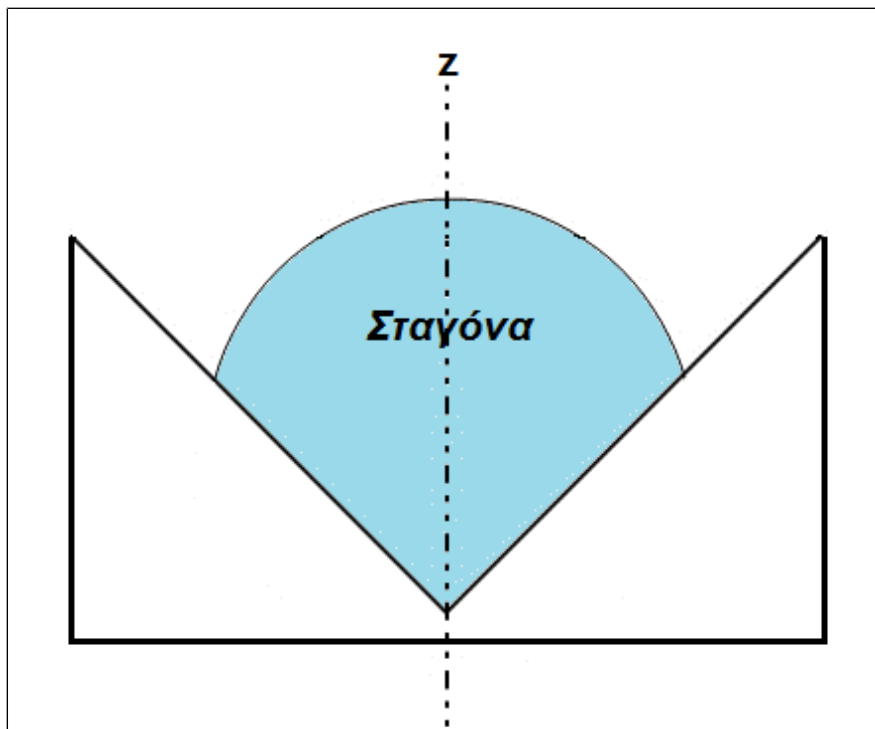
Θα πρέπει να βρεθούν οι τιμές των μεταβλητών: $(u(\theta), K, \theta_{max})$, επιλύοντας ταυτόχρονα:

1. την αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (σχέση 4-8),
2. την αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου της σταγόνας (σχέση 4-30),
3. την αδιάστατη μορφή της εξίσωσης του κεκλιμένου επιπέδου (σχέση 4-32).

Όπου: θ_{max} = τελευταία τιμή της θ -συντεταγμένης (το άνω όριο του χωρίου D).

(Για τις υπόλοιπες μεταβλητές βλ. ΠΣΤ-1)

Για τις δύο πρώτες εξισώσεις (4-8), (4-30), η επίλυση θα γίνει στο χωρίο D που εκτείνεται από το $\theta=0$ έως το $\theta=\theta_{max}$, χρησιμοποιώντας συνοριακές συνθήκες στο σύνορο του D (∂D). Για την τρίτη εξίσωση (4-32), η επίλυση θα γίνει μόνο στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο (άνω όριο του χωρίου D). Παρατηρούμε ότι το πρόκειται για ένα πρόβλημα “ελεύθερου συνόρου” καθώς το άνω όριο του χωρίου D , όπου θα γίνει η επίλυση του προβλήματος, είναι ένας από τους αγνώστους (θ_{max}). Πρέπει να σημειωθεί ότι λόγω της αξονικής συμμετρίας του προβλήματος γύρω από τον z-άξονα, το πραγματικό σχήμα της στερεής επιφάνειας είναι μία σφήνα μέσα στην οποία ισορροπεί η σταγόνα (σχήμα 4.6). Παρακάτω διατυπώνονται οι νέες εξισώσεις που επιλύονται καθώς και οι συνοριακές συνθήκες:



Σχήμα 4.6 – Η στερεή επιφάνεια που ισορροπεί η σταγόνα έχει, λόγω της αξονικής συμμετρίας, σχήμα σφήνας.

4.3.1. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας

Η εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας διαφέρει με αυτή του (ΠΣΤ-2) στο ότι το άνω όριο του ολοκληρώματος του όγκου θα είναι πλέον ένας από τους αγνώστους (θ_{max}). Τελικά η εξίσωση διατήρησης του όγκου στο (ΠΣΤ-3) θα έχει τη μορφή:

$$\int_0^{\theta_{max}} u^3 \sin(\theta) d\theta = 2. \quad (4-30)$$

4.3.2. Εξίσωση επιπέδου υπό κλίση

Η εξίσωση του επιπέδου υπό κλίση που χρησιμοποιείται είναι της μορφής (σε καρτεσιανές συντεταγμένες): $z = a x$.

(4-31)

Μετατρέποντας σε σφαιρικές συντεταγμένες [από σχέσεις (4-1), (4-3)] προκύπτει:

$$r \cos \theta = a r \sin \theta ,$$

(4-32)

όπου η παράμετρος (a) προσδιορίζει την κλίση του επιπέδου.

4.3.3. Συνοριακές συνθήκες

Οι συνοριακές συνθήκες διαφέρουν με αυτές του (ΠΣΤ-2) στο ότι η δεύτερη (σχέση 4-17) εφαρμόζεται στο σημείο όπου $\theta = \theta_{max}$, το οποίο είναι άγνωστο. Συνεπώς, οι συνοριακές συνθήκες του (ΠΣΤ-3) διατυπώνονται ως εξής:

- $\frac{d u}{d \theta} = 0 ,$

(4-16)

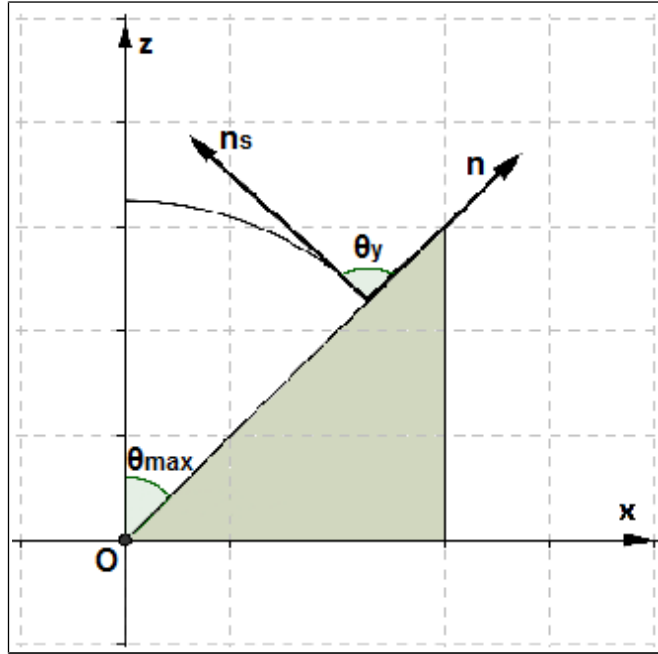
στο $\theta = 0$ (όπως και στο ΠΣΤ-1).

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_y ,$

(4-33)

στο $\theta = \theta_{max}$.

Δηλαδή το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας (\vec{n}) και μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στο κεκλιμένο επίπεδο που ισορροπεί η σταγόνα (\vec{n}_s) , σχηματίζουν γωνία θ_y (γωνία-Young) στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο (δηλαδή στο σημείο όπου $\theta = \theta_{max}$). Αυτό φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 4.7) για το κεκλιμένο επίπεδο με εξίσωση: $z = x$, σε καρτεσιανές ή $r \cos \theta = r \sin \theta$, σε σφαιρικές συντεταγμένες.



Σχήμα 4.7 – Προσδιορισμός γωνίας θ_y (γωνία-Young) σε επίπεδο υπό κλίση ($z = x$)

4.3.4. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

4.3.4.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace

Στην περίπτωση αυτή παρατηρείται ότι το άνω όριο του χωρίου D , όπου θα γίνει η ολοκλήρωση, είναι ένας από τους αγνώστους. Άρα για την Young-Laplace, από τις ήδη γνωστές σχέσεις:

$$R_{YL}^k = \int_D \varphi^k (C - K + N_g h) dS_{ps}, \quad (4-18)$$

$$R_{YL}^k = \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_{max}} \varphi^k (C - K + N_g h) u^2 \sin \theta d\theta d\varphi \Leftrightarrow$$

$$R_{YL}^k = 2\pi \left[\int_0^{\theta_{max}} \varphi^k C u^2 \sin \theta d\theta - \int_0^{\theta_{max}} \varphi^k K u^2 \sin \theta d\theta + \int_0^{\theta_{max}} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta d\theta \right]. \quad (4-34)$$

Σημειώνεται ότι το 2π μπορεί να παραλειφθεί παρακάτω αφού πολλαπλασιάζει όλα τα υπόλοιπα της Young-Laplace.

Για το πρώτο ολοκλήρωμα της σχέσης (4-34) ισχύει:

$$\int_0^{\theta_{max}} \varphi^k C u^2 \sin \theta d\theta = \int_0^{\theta_{max}} \frac{\varphi^k u^2 \sin \theta}{\hat{u}^2 \sin \theta} \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} - \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right] d\theta =$$

$$\int_0^{\theta_{max}} \varphi^k \frac{2u^2 \sin \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta - \int_0^{\theta_{max}} \varphi^k \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta = I_5 + I_6 .$$

Στη συνέχεια εφαρμόζεται η μέθοδος της παραγοντικής ολοκλήρωσης στο ολοκλήρωμα I_6 .

Άρα:

$$I_6 = - \int_0^{\theta_{max}} \varphi^k \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_0^{\theta_{max}} + \int_0^{\theta_{max}} \frac{d\varphi^k}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta =$$

$$I_7 + I_8 .$$

Αναπτύσσοντας το I_7 προκύπτει:

$$I_7 = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_0^{\theta_{max}} = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_{\theta=\theta_{max}} + \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_{\theta=0} .$$

Από την πρώτη οριακή συνθήκη (σχέση 4-16) ισχύει: $u_\theta |_{\theta=\theta_{max}} = \frac{du}{d\theta} |_{\theta=\theta_{max}} = 0$. Άρα τελικά:

$$I_7 = - \left[\varphi^k \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right]_{\theta=\theta_{max}} \Leftrightarrow$$

$$I_7 = - \frac{u u_\theta \sin \theta}{\sqrt{(u^2 + u_\theta^2)}} \Big|_{\theta=\theta_{max}} . \quad (4-35)$$

αφού $\sin(\theta) \geq 0$ για $\theta \in [0, \pi]$ (δηλαδή για όλες τις πιθανές τιμές που μπορεί να πάρει το θ_{max}).

Η δεύτερη οριακή συνθήκη (σχέση 4-34) θα πρέπει να εισαχθεί στο I_7 (σχέση 4-35). Αρχικά θα πρέπει να υπολογίσουμε το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα (\vec{n}_s) στο επίπεδο που ισορροπεί η σταγόνα (εδώ το κεκλιμένο επίπεδο). Από τη σχέση (4-24) ισχύει:

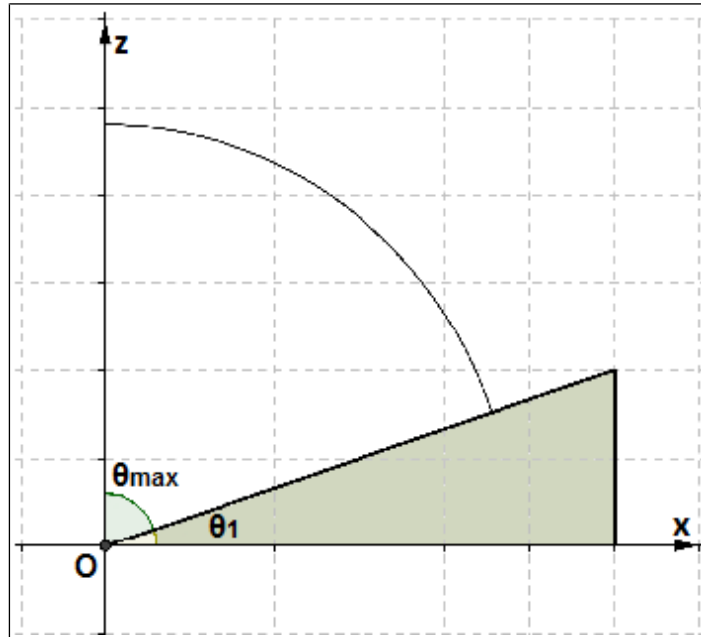
$$\vec{n}_s = - \frac{f_x}{\sqrt{f_x^2 + 1}} (\sin \theta \vec{e}_r + \cos \theta \vec{e}_\theta) + \frac{1}{\sqrt{f_x^2 + 1}} (\cos \theta \vec{e}_r - \sin \theta \vec{e}_\theta) .$$

Για το κεκλιμένο επίπεδο (με εξίσωση: $f(x) = ax$), που χρησιμοποιείται στο συγκεκριμένο πρόβλημα, ισχύει: $f_x = a, \forall x \in D$, έτσι από την παραπάνω σχέση (στο $\theta = \theta_{max}$) προκύπτει:

$$\vec{n}_s = \frac{1}{\sqrt{a^2 + 1}} [(-a \sin \theta_{max} + \cos \theta_{max}) \vec{e}_r + (-a \cos \theta_{max} - \sin \theta_{max}) \vec{e}_\theta] . \quad (4-36)$$

Από το σχήμα (4.8) βλέπουμε ότι για το κεκλιμένο επίπεδο κλίσης (α) ισχύει επίσης η σχέση:

$$\alpha = \tan(\theta_1) = \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_{max}\right) = \cot \theta_{max} = \frac{\cos \theta_{max}}{\sin \theta_{max}} . \quad (4-37)$$



Σχήμα 4.8 – Υπολογισμός της κλίσης (α) του κεκλιμένου επιπέδου

Τελικά από τις σχέσεις (4-36), (4-37) ισχύει:

$$\hat{n}_s = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\cos \theta_{max}}{\sin \theta_{max}}\right)^2 + 1}} \left[\left(-\frac{\cos \theta_{max}}{\sin \theta_{max}} \sin \theta_{max} + \cos \theta_{max} \right) \vec{e}_r + \left(-\frac{\cos \theta_{max}}{\sin \theta_{max}} \cos \theta_{max} - \sin \theta_{max} \right) \vec{e}_\theta \right]$$

$$\Leftrightarrow \vec{n}_s = -\vec{e}_\theta . \quad (4-38)$$

Δηλαδή καταλήξαμε σε μια σχέση ίδια με τη σχέση (4-25). Ακόμα, από τις σχέσεις (4-33), (4-48) προκύπτει:

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_y \Leftrightarrow \vec{n} \cdot \vec{e}_\theta = -\cos \theta_y \text{ και χρησιμοποιώντας τη σχέση (4-22):}$$

$$\frac{u_\theta}{\sqrt{u^2 + u_\theta^2}} \Big|_{\theta=\theta_{max}} = \cos \theta_y . \quad (4-39)$$

Άρα από τις σχέσεις (4-35), (4-38) ισχύει:

$$I_7 = -u \Big|_{\theta=\pi/2} \cos \theta_y \sin \theta_{max} . \quad (4-40)$$

Τελικά χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (4-34), (4-35), (4-40) βλέπουμε ότι τα σταθμισμένα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace είναι:

$$R_{YL}^k = \int_0^{\theta_{max}} \phi^k \frac{2u^2 \sin \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta + \int_0^{\theta_{max}} \frac{d\phi^k}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2(\theta)}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} d\theta -$$

$$\int_0^{\theta_{max}} \varphi^k K u^2 \sin \theta d\theta + \int_0^{\theta_{max}} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta d\theta \equiv R_{spherical 2}, \quad (4-41a)$$

για $1 \leq k \leq N-1$.

Το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου του πλέγματος (N), είναι:

$$R_{YL}^N = R_{spherical 2} - u \Big|_{\theta=\pi/2} \cos \theta_y \sin \theta_{max}. \quad (4-42b)$$

4.3.4.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου

Η εξίσωση διατήρησης του όγκου είναι ήδη σε ολοκληρωτική μορφή, άρα τα αντίστοιχα υπόλοιπα είναι παρόμοια με αυτά του (ΠΣΤ-2) με τη διαφορά το άνω όριο του χωρίου D είναι ένας από τους αγνώστους:

$$R_V = \int_0^{\theta_{max}} u^3 \sin(\theta) d\theta - 2. \quad (4-43)$$

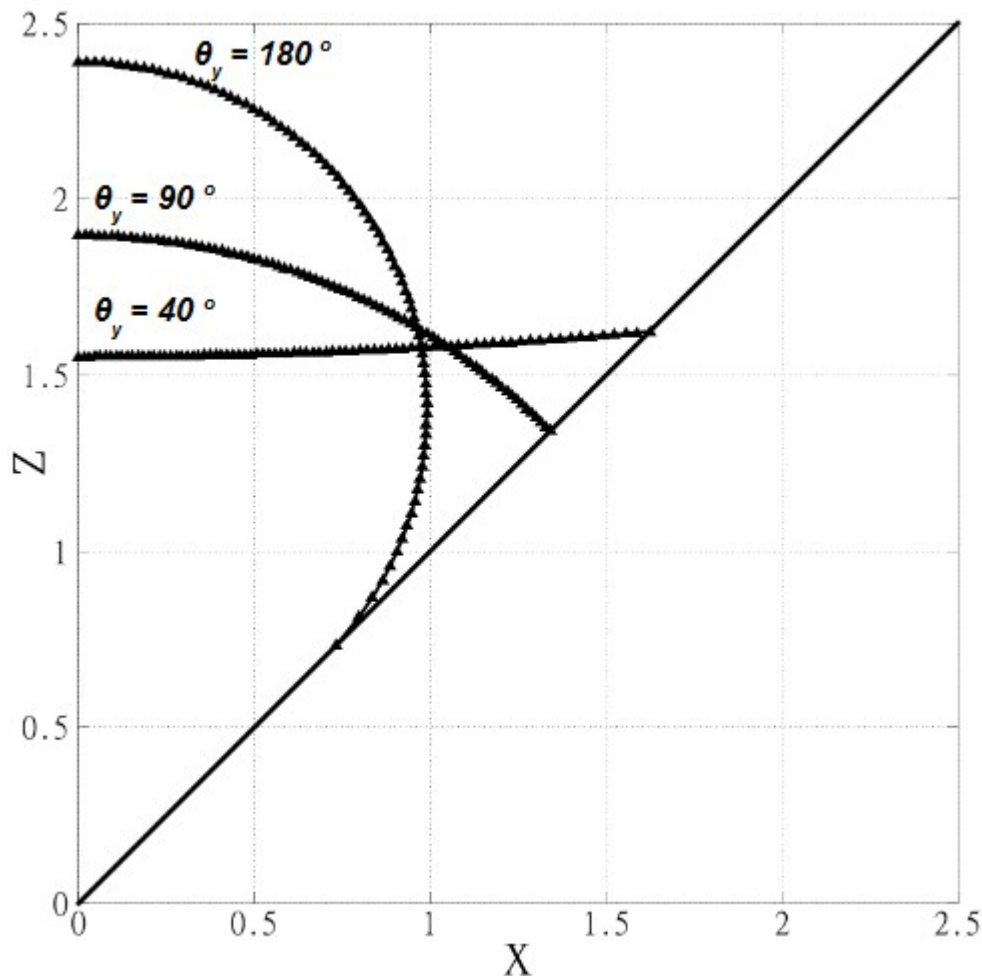
4.3.4.3. Υπόλοιπο εξίσωσης κεκλιμένου επιπέδου

Το υπόλοιπο Galerkin της εξίσωσης του επιπέδου υπό κλίση έχει τη μορφή αλγεβρικής εξίσωσης. Έτσι σύμφωνα με τη σχέση (4-32) ισχύει:

$$R_s = u \Big|_{\theta=\theta_{max}} \cos \theta_{max} - u \Big|_{\theta=\theta_{max}} \sin \theta_{max}. \quad (4-44)$$

4.3.5. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-3

Στο παρακάτω σχήμα (4.9) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το ΠΣΤ-3 για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y) της σταγόνας με το επίπεδο υπό κλίση, χωρίς την επίδραση της βαρύτητας. Συγκεκριμένα είναι για γωνίες 40, 90 και 180 μοίρες αντίστοιχα. Το πλέγμα του χωρίου D αποτελείται από 80 στοιχεία (elements). Το κεκλιμένο επίπεδο που χρησιμοποιείται σε αυτό το παράδειγμα είναι το $y=x$. Στη λύση για τις 180 μοίρες παρατηρείται έντονα η αραιώση στην πυκνότητα των πλεγματικών σημείων κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο – το οποίο όπως αναφέρθηκε είναι ένα από τα μειονεκτήματα της συγκεκριμένης παραμετροποίησης.



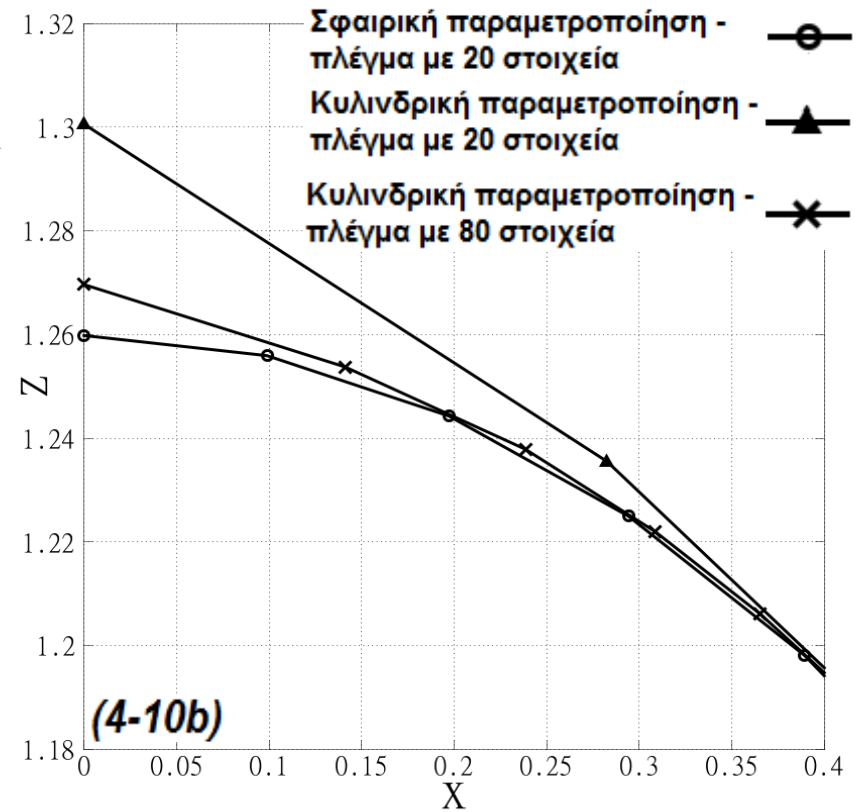
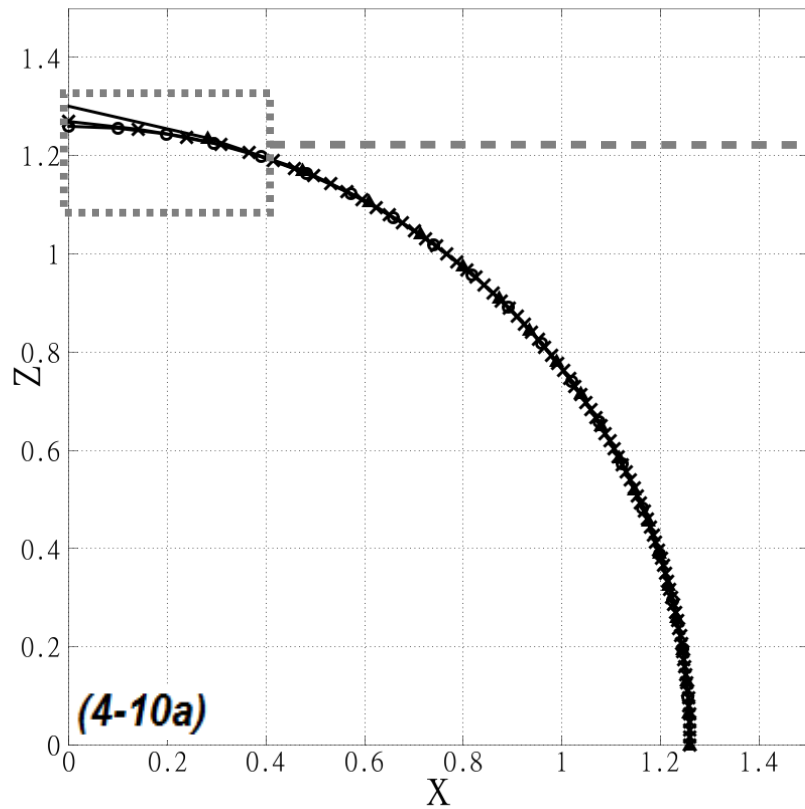
Σχήμα 4.9 – Αποτελέσματα υπολογισμών για το ΠΣΤ-3 που αναφέρεται σε ισορροπία σταγόνας σε επίπεδο υπό κλίση (εδώ για το $y=x$), με σφαιρική παραμετροποίηση, για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y)

4.4. Αξιολόγηση και σύγκριση αποτελεσμάτων σε σφαιρική και κυλινδρική παραμετροποίηση

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν από τα παραπάνω προβλήματα με σφαιρική παραμετροποίηση σε σύγκριση με τα αντίστοιχα της κυλινδρικής παραμετροποίησης μας οδηγούν στα εξής συμπεράσματα:

1. Το πρόβλημα της μείωσης της πυκνότητας των πλεγματικών σημείων στην καμπύλη της λύσης εξακολουθεί να παραμένει και σε αυτήν την παραμετροποίηση. Αυτό οφείλεται στο ότι οι διαδοχικοί κόμβοι διακριτοποίησης απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση θ_i στο χωρίο επίλυσης. Το πρόβλημα αυτό γίνεται αισθητό στο σχήμα (4.9) για γωνία επαφής 180 μοίρες. Εκεί παρατηρείται μια μείωση της πυκνότητας του πλέγματος κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το κεκλιμένο επίπεδο.

2. Φαίνεται όμως, από τα σχήματα 4.10 ότι στο πρόβλημα της ισορροπίας σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο, η σφαιρική παραμετροποίηση εμφανίζει περισσότερο ακριβή αποτελέσματα με μικρότερο πλήθος στοιχείων. Στο σχήμα 4.10b αναπαριστάται μέρος της λύσης του σχήματος της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (συγκεκριμένα το ανώτερο τμήμα της σταγόνας), για γωνία επαφής 90 μοίρες, για την κυλινδρική και τη σφαιρική παραμετροποίηση για διάφορες πυκνότητες πλέγματος. Παρατηρείται ότι η σφαιρική παραμετροποίηση δίνει καλύτερα αποτελέσματα με μικρότερο αριθμό στοιχείων. Επίσης, η λύση που παίρνουμε από την κυλινδρική παραμετροποίηση τείνει να ταυτιστεί με αυτή της σφαιρικής καθώς ο αριθμός των στοιχείων αυξάνεται. Παρόμοια αποτελέσματα λαμβάνονται και για άλλες γωνίες επαφής, μικρότερες ή μεγαλύτερες από 90 μοίρες.
3. Ένα άλλο μειονέκτημα της σφαιρικής παραμετροποίησης είναι ότι ο ορισμός της γωνίας θ ως ανεξάρτητη μεταβλητή μας απαγορεύει να πάρουμε λύσεις όπου υπάρχουν δύο διαφορετικές τιμές της απόστασης u για την ίδια γωνία θ , δηλαδή το θ να μην αυξάνει μονότονα κατά μήκος της λύσης. Δεν έχει αντιμετωπιστεί τέτοιο πρόβλημα ως τώρα, αλλά σε περισσότερο περίπλοκες γεωμετρικές επιφανειών είναι πιθανό να συμβεί. Πρέπει να σημειωθεί ότι το ίδιο πρόβλημα παρουσιάζεται, σε συγκεκριμένες γεωμετρικές επιφανειών, και στην κυλινδρική παραμετροποίηση. Για να αντιμετωπιστεί αυτό το μειονέκτημα θα εισάγουμε παρακάτω την παραμετροποίηση μήκους τόξου, όπου η ανεξάρτητη μεταβλητή θα είναι το μήκος τόξου της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας.



Σχήματα 4.10a, 4.10b – Σύγκριση ακρίβειας της λύσης για κυλινδρική και σφαιρική παραμετροποίηση σε σχέση με το πλήθος των στοιχείων του πλέγματος – το σχήμα (4.10b) αναπαριστά ένα μέρος της λύσης του σχήματος της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (το ανώτερο τμήμα). Οι λύσεις προέρχονται από το ΠΣΤ-1 (για τη κυλινδρική παραμετροποίηση) και από το ΠΣΤ-2 (για τη σφαιρική παραμετροποίηση) με γωνία επαφής 90 μοίρες

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5:

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΕ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΚΟΥΣ-ΤΟΞΟΥ

Στο κεφάλαιο αυτό διατυπώνονται οι εξισώσεις καθώς και τα αντίστοιχα υπόλοιπα Galerkin που θα χρησιμοποιηθούν για την επίλυση προβλημάτων συνοριακών τιμών που αφορούν την ισορροπία σταγόνας σε λείο και τραχύ οριζόντιο επίπεδο καθώς και σε επιφάνεια με μικροστόλο. Για την επίλυση των προβλημάτων αυτών χρησιμοποιείται η παραμετροποίηση μήκους-τόξου. Τέλος, γίνεται παρουσίαση των αποτελεσμάτων, ανάλυση της ευστάθειας τους ενεργειακή προσέγγιση και σύγκριση των ρυθμών σύγκλισης των τριών παραμετροποιήσεων.

5.1. Παραμετροποίηση μήκους-τόξου

Στην παραμετροποίηση αυτή θα χρησιμοποιήσουμε ως ανεξάρτητη μεταβλητή το αδιάστατο μήκος-τόξου (s), το οποίο μετράται κατά μήκος της καμπύλης της λύσης. Η περιστροφή αυτής της καμπύλης γύρω από τον z -άξονα δίνει το σχήμα της σταγόνας. Το σημείο όπου ξεκινάει να μετράται το μήκος-τόξου αναφέρεται ως αρχικό σημείο της καμπύλης ($s=0$). (σχήμα 5.1)

Τα πλεονεκτήματα της χρησιμοποίησης του μήκους-τόξου ως ανεξάρτητης μεταβλητής είναι ότι αυτό σχετίζεται άμεσα με την μορφή της καμπύλης της σταγόνας και ορίζεται μονότονα κατά μήκος της λύσης. [Παπαϊωάννου 2003]

5.2. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 4 (ΠΣΤ-4) – Ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο

Το πρόβλημα συνοριακών τιμών-4 (ΠΣΤ-4) που επιλύεται σε παραμετροποίηση μήκους-τόξου αφορά, όπως και τα ΠΣΤ-1 και ΠΣΤ-2, την ισορροπία αξονοσυμμετρικής σταγόνας πάνω σε λείο οριζόντιο επίπεδο και διατυπώνεται ως εξής:

Θα πρέπει να βρεθούν οι τιμές των μεταβλητών: $(u(s), \theta(s), K, s_{max})$, επιλύοντας ταυτόχρονα:

1. την αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (σχέσεις 5-4),
2. την αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης μήκους-τόξου της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (σχέση 5-5),
3. την αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου της σταγόνας (σχέση 5-6),
4. την αδιάστατη μορφή της εξίσωσης του οριζόντιου επιπέδου που ισορροπεί η σταγόνα

(σχέση 5-8).

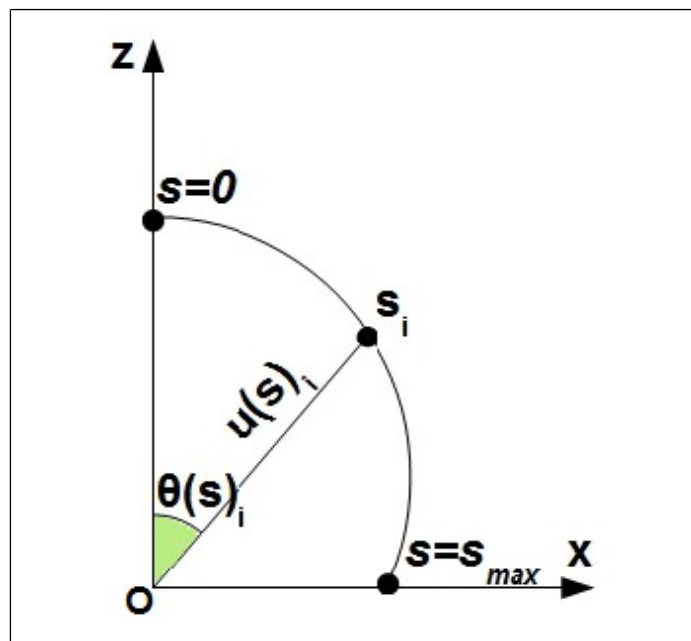
Όπου:

$u(s)$ = αδιάστατη απόσταση του κέντρου του συστήματος συντεταγμένων από την ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας

$\theta(s)$ = γωνία θ του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων για κάθε σημείο που βρίσκεται στην ελεύθερη επιφάνεια την σταγόνας.

s_{max} = αδιάστατη μέγιστη τιμή του μήκους-τόξου της καμπύλης της λύσης (σχήμα 5.1).

Για τη μεταβλητή (K) βλ. Κεφάλαιο 3. Σε αυτήν την παραμετροποίηση βλέπουμε ότι η λύση u καθώς και η γωνία θ των σφαιρικών συντεταγμένων, εκφράζονται συναρτήσει του μήκους-τόξου (s).



Σχήμα 5.1 – Παραμετροποίηση της λύσης με ανεξάρτητη μεταβλητή το μήκος-τόξου

Για τις τρεις πρώτες εξισώσεις η επίλυση γίνεται στο χωρίο αναφοράς D χρησιμοποιώντας συνοριακές συνθήκες στο σύνορο του D (∂D). Για την τέταρτη εξίσωση η επίλυση θα γίνει μόνο στο σημείο επαφής της σταγόνας με το οριζόντιο επίπεδο. Το χωρίο D εκτείνεται από το $s=0$ έως το $s=s_{max}$, δηλαδή ως το σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο. Παρατηρούμε ότι πρόκειται για ένα πρόβλημα “ελεύθερου συνόρου” καθώς το άνω όριο του χωρίου D είναι ένας από του αγνώστους (s_{max}). Σημειώνεται ότι κατά την διακριτοποίηση το προβλήματος οι κόμβοι στο χωρίο επίλυσης απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση s_i .

Παρακάτω διατυπώνονται οι εξισώσεις που επιλύονται καθώς και οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στο ∂D :

5.2.1. Εξίσωση Young-Laplace

Μπορούν να χρησιμοποιηθούν δύο τρόποι για να εξαχθεί η εξίσωση Young-Laplace για την παραμετροποίηση μήκους-τόξου:

1. Στον πρώτο τρόπο χρησιμοποιείται η έκφραση της μέσης τοπικής καμπυλότητας (C) των σφαιρικών συντεταγμένων και ύστερα εφαρμόζεται αλλαγή μεταβλητής από θ σε s στην εξίσωση Young Laplace (4-8). Δηλαδή προκύπτει:

$$K = \frac{1}{u^2 \sin \theta} \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + u_\theta^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} - \frac{d}{d\theta} \frac{u u_\theta \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta (u^2 + u_\theta^2)}} \right] + N_g z, \quad (4-8)$$

όπου τώρα θα ισχύει:

$$u_\theta = \frac{du}{d\theta} = \frac{du}{ds} \frac{ds}{d\theta} = \frac{u_s}{\theta_s} \quad (5-1)$$

και:

$$u_s = \frac{du}{ds}, \quad (5-2)$$

$$\theta_s = \frac{d\theta}{ds}. \quad (5-3)$$

Τελικά, εφαρμόζοντας την αλλαγή μεταβλητής στην παραπάνω σχέση (4-7) προκύπτει η εξίσωση Young-Laplace για την παραμετροποίηση μήκους-τόξου:

$$K = \frac{1}{u^2 \sin \theta} \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2\right]}} - \frac{d}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2\right]}} \left(\frac{d\theta}{ds}\right)^{-1} \right] + N_g z. \quad (5-4a)$$

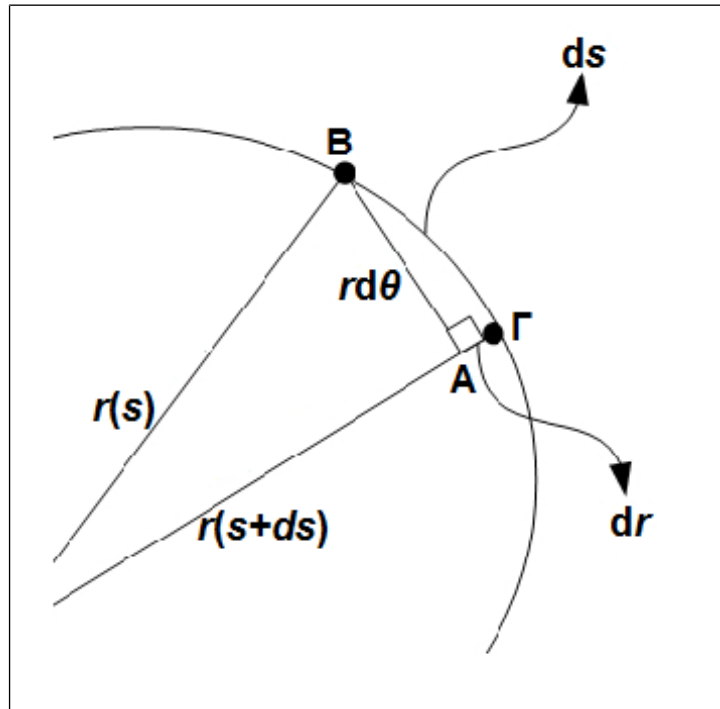
2. Στον δεύτερο τρόπο υπολογίζεται εξ' αρχής η έκφραση της μέσης τοπικής καμπυλότητας της σταγόνας για την παραμετροποίηση μήκους-τόξου (βλ. Παράρτημα Α, παράγραφο Α.2.), και αντικαθίσταται στην εξίσωση Young-Laplace (σχέση 4-11b). Η εξίσωση που προκύπτει είναι η εξής:

$$K = \frac{1}{u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2}} \left[2u \theta_s \sin \theta - u_s \cos \theta + u \sin \theta \frac{d}{ds} \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \right] + N_g z. \quad (5-4b)$$

5.2.2. Εξίσωση μήκους-τόξου

Η εισαγωγή μια επιπλέον εξίσωσης σε αυτήν την παραμετροποίηση κρίνεται απαραίτητη καθώς ο αριθμός των αγνώστων έχει τώρα διπλασιαστεί. Η εξίσωση αυτή είναι η διαφορική εξίσωση μήκους-τόξου. Η εξίσωση αυτή προκύπτει από την εφαρμογή πυθαγορείου θεωρήματος, όπως φαίνεται και από το παρακάτω σχήμα (5.2):

$$d u^2 + u^2 d \theta^2 = d s^2 \Leftrightarrow \left(\frac{d u}{d s} \right)^2 + u^2 \left(\frac{d \theta}{d s} \right)^2 = 1 \cdot \quad (5-5)$$



Σχήμα 5.2 – Εξαγωγή εξίσωσης μήκους-τόξου με εφαρμογή πυθαγορείου θεωρήματος στο τρίγωνο ABΓ

5.2.3. Εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας

Για να εξαχθεί η εξίσωση διατήρησης του όγκου της σταγόνας σε παραμετροποίηση μήκος-τόξου χρησιμοποιείται η αντίστοιχη ολοκληρωτική εξίσωση για σφαιρική παραμετροποίηση (σχέση 4-15) και στη συνέχεια εφαρμόζεται αλλαγή μεταβλητής στο ολοκλήρωμα από θ σε s . Έτσι προκύπτει:

$$\int_0^{\pi/2} u^3 \sin \theta d\theta = 2 \quad (4-15)$$

$$\Leftrightarrow \int_0^{s \max} u^3 \sin \theta \frac{d\theta}{d s} d s = 2 \cdot \quad (5-6)$$

5.2.4. Εξίσωση οριζόντιου επιπέδου

Η εξίσωση οριζόντιου επιπέδου που θα χρησιμοποιηθεί είναι της μορφής (σε καρτεσιανές συντεταγμένες):

$$z=0 . \quad (5-7)$$

Για να εισαχθεί η παραπάνω εξίσωση στη παραμετροποίηση μήκους-τόξου, την μετατρέπουμε αρχικά σε σφαιρικές συντεταγμένες (από τη σχέση 4-3):

$$r \cos \theta=0 . \quad (5-8)$$

5.2.5. Συνοριακές συνθήκες

Οι δύο πρώτες συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στο σύνορο ∂D είναι ίδιες με τις αντίστοιχες της σφαιρικής παραμετροποίησης (βλ. Κεφάλαιο 4, παράγραφο 4.2.3.), δηλαδή:

- $\frac{d u}{d \theta}=0 , \quad (5-9)$

στο $s=0$.

- $\vec{n} \cdot \vec{n}_s = \cos \theta_y , \quad (5-10)$

στο $s=s_{max}$.

Επειδή όμως, στο πρόβλημα αυτό έχει εισαχθεί μια νέα διαφορική εξίσωση (εξίσωση μήκους-τόξου) θα πρέπει να εισαχθεί αντίστοιχα και μια νέα συνοριακή συνθήκη. Αυτή θα είναι μια συνθήκη dirichlet που θα έχει τη μορφή:

- $\theta(s)=0 , \quad (5-11)$

στο $s=0$.

5.2.6. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

5.2.6.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace

Ως στοιχείο ολοκλήρωσης της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε το dS_{ps} είτε το dS_{LVs} .

όπου:

dS_{LVs} = στοιχειώδες χωρίο της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων.

Τα χωρία αυτά υπολογίζονται ως εξής (βλ. Παράρτημα Β, παράγραφο Β.2.):

$$dS_{LVs} = u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds d\varphi, \quad (5-12)$$

$$dS_{ps} = u^2 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds d\varphi. \quad (5-13)$$

Η ανεξάρτητη παράμετρος που χρησιμοποιείται στην παραμετροποίηση της ελεύθερης επιφάνειας κατά τον υπολογισμό του dS_{LVs} και dS_{ps} είναι το μήκος-τόξου (s).

Το χωρίο dS_{ps} θα χρησιμοποιηθεί για την ολοκλήρωση της εξίσωσης Young-Laplace από τη σχέση (5-4a) ενώ αντίστοιχα το το χωρίο dS_{LVs} θα χρησιμοποιηθεί για την ολοκλήρωση της εξίσωσης Young-Laplace από τη σχέση (5-4b). Η επιλογή αυτή έγινε με σκοπό την καλύτερη απλοποίηση της αντίστοιχης εξίσωσης.

- Για την περίπτωση που χρησιμοποιείται ως στοιχείο ολοκλήρωσης το dS_{ps} τα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace υπολογίζονται ως εξής:

$$R_{YL}^k = \int_0^{2\pi} \int_0^{smax} \varphi^k (C - K + N_g z) u^2 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds d\varphi \Leftrightarrow$$

$$R_{YL}^k = 2\pi \left[\int_0^{smax} \varphi^k C u^2 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds - \int_0^{smax} \varphi^k K u^2 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds + \int_0^{smax} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds \right] \quad (5-14)$$

Σημειώνεται ότι το 2π μπορεί να παραλειφθεί παρακάτω αφού πολλαπλασιάζει όλα τα υπόλοιπα της Young-Laplace.

Το πρώτο ολοκλήρωμα της σχέσης (5-14) υπολογίζεται ως:

$$\int_0^{smax} \varphi^k \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \right]}} \right] \frac{d\theta}{ds} ds - \int_0^{smax} \varphi^k \left[\frac{d}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \right]}} \right] ds$$

$$= I_1 + I_2. \quad (5-15)$$

Στο ολοκλήρωμα I_2 εφαρμόζεται παραγοντική ολοκλήρωση και ύστερα από αντίστοιχες πράξεις που παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 4 (παράγραφο 4.2.4.1.) καταλήγουμε στην εξής μορφή:

$$I_2 = \int_0^{s \max} \frac{d\varphi^k}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} ds - u \Big|_{s=s \max} \cos \theta_y . \quad (5-16)$$

Από τις σχέσεις (5-14), (5-15), (5-16) καταλήγουμε ότι τα σταθμισμένα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace είναι:

$$R_{YL}^k = \int_0^{s \max} \varphi^k \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} \right] \frac{d\theta}{ds} ds + \int_0^{s \max} \frac{d\varphi^k}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} ds - \int_0^{s \max} \varphi^k K u^2 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds + \int_0^{s \max} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds \equiv R_{arclength1} , \quad (5-17a)$$

για $1 \leq k \leq N-1$.

Ακόμα, το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος, είναι:

$$R_{YL}^N = R_{arclength1} - u \Big|_{s=s \max} \cos \theta_y . \quad (5-17b)$$

- Για την περίπτωση που χρησιμοποιείται ως στοιχείο ολοκλήρωσης το dS_{LVs} τα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace υπολογίζονται ως εξής:

$$R_{YL}^k = \int_0^{2\pi} \int_0^{s \max} \varphi^k (C - K + N_g z) u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds d\varphi \Leftrightarrow$$

$$R_{YL}^k = 2\pi \int_0^{s \max} \varphi^k C u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds - 2\pi \int_0^{s \max} \varphi^k K u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds +$$

$$2\pi \int_0^{s \max} \varphi^k N_g u^2 \cos \theta \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds . \quad (5-18)$$

Σημειώνεται ότι το 2π μπορεί να παραλειφθεί παρακάτω αφού πολλαπλασιάζει όλα τα υπόλοιπα της Young-Laplace.

Το πρώτο ολοκλήρωμα της σχέσης (5-18) υπολογίζεται ως:

$$\int_0^{s \max} \varphi^k C u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds = \int_0^{s \max} \varphi^k 2u \theta_s \sin \theta ds - \int_0^{s \max} \varphi^k u_s \cos \theta ds +$$

$$\int_0^{s \max} \varphi^k u \sin \theta \frac{d}{ds} \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds$$

$$= I_3 + I_4 + I_5. \quad (5-19)$$

Στη συνέχεια θα εφαρμόσουμε τη μέθοδο παραγοντικής ολοκλήρωσης στο ολοκλήρωμα I_5 :

$$I_5 = \left[\varphi^k u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \right]_0^{s \max} - \int_0^{s \max} \frac{d \varphi^k}{ds} u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds -$$

$$\int_0^{s \max} \varphi^k u_s \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds - \int_0^{s \max} \varphi^k u \cos \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds. \quad (5-20)$$

Στον πρώτο όρο της παραπάνω σχέσης θα εισαχθούν οι δύο πρώτες συνοριακές συνθήκες (5-9), (5-10). Δηλαδή προκύπτει:

$$\left[\varphi^k u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \right]_0^{s \max} = u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \Big|_{s=s \max} - u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \Big|_{s=0}$$

$$= u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \Big|_{s=s \max} - u \sin \theta \frac{\pi}{2} \Big|_{s=0}, \quad (5-21)$$

αφού από την πρώτη συνοριακή συνθήκη (5-9) στο ($s = 0$) ισχύει: $u_\theta = \frac{u_s}{\theta_s} = 0$.

Για να εισαχθεί και η δεύτερη συνοριακή συνθήκη (5-10) στο πρώτο όρο της σχέσης (5-21) εργαζόμαστε ως εξής:

$$\text{Από τη σχέση (5-10) ισχύει: } \vec{n} \cdot \vec{n}_s \Big|_{s=s \max} = \cos \theta_y, \quad (5-22)$$

όπου το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην ελεύθερη επιφάνεια της σταγόνας σε συντεταγμένες μήκους τόξου είναι:

$$\vec{n} = \frac{u \theta_s}{\sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2}} \vec{e}_r - \frac{u_s}{\sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2}} \vec{e}_\theta \quad (5-23)$$

και το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα (\vec{n}_s) στο επίπεδο που ισορροπεί η σταγόνα (βλ. Κεφάλαιο 4, παράγραφο 4.2.4.1.):

$$\vec{n}_s = -\vec{e}_\theta. \quad (5-24)$$

Άρα αναπτύσσοντας την σχέση (5-22):

$$\frac{u_s}{\sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2}} = \cos \theta_y \Leftrightarrow \frac{u \theta_s}{u_s} = \pm \tan \theta_y. \quad (5-25a)$$

Από τις δύο λύσεις της εξίσωσης (5-25a) επιλέγουμε την εξής:

$$\frac{u \theta_s}{u_s} = + \tan \theta_y. \quad (5-25b)$$

Αυτό διότι:

- Για την περίπτωση που η σταγόνα διαβρέχει την στερεή επιφάνεια, δηλαδή $\theta_y \in [0, \frac{\pi}{2}]$ τότε ισχύει $\cot \theta_y \geq 0$ και η έκφραση $\frac{u_s}{\theta_s} > 0$ κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο.
- Για την περίπτωση που η σταγόνα δεν διαβρέχει την στερεή επιφάνεια, δηλαδή $\theta_y \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$ τότε ισχύει $\cot \theta_y \leq 0$ και η έκφραση $\frac{u_s}{\theta_s} < 0$ κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο.

(βλ. Κεφάλαιο 3 σχήματα (3.7), (3.8))

Τελικά η σχέση (5-21) γίνεται:

$$\left[\varphi^k u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) \right]_0^{smax} = u \sin \theta \theta_y |_{s=smax} - u \sin \theta \frac{\pi}{2} |_{s=0}. \quad (5-26)$$

Από τις σχέσεις (5-18), (5-19), (5-20), (5-26) καταλήγουμε ότι τα σταθμισμένα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace είναι:

$$\begin{aligned} R_{YL}^k = & \int_0^{smax} \varphi^k 2u \theta_s \sin \theta ds - \int_0^{smax} \varphi^k u_s \cos \theta ds - \int_0^{smax} \frac{d\varphi^k}{ds} u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds - \\ & \int_0^{smax} \varphi^k u_s \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds - \int_0^{smax} \varphi^k u \cos \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds - \\ & \int_0^{smax} \varphi^k K u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds + \int_0^{smax} \varphi^k N_g u^2 \cos \theta \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds \equiv R_{arclength 2}, \end{aligned} \quad (5-27a)$$

για $2 \leq k \leq N-1$.

Το υπόλοιπο του πρώτου και του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος, είναι αντίστοιχα:

$$R_{YL}^1 = R_{arclength 2} - u \sin \theta \frac{\pi}{2} \Big|_{s=0}, \quad (5-27b)$$

$$R_{YL}^N = R_{arclength 2} + u \sin \theta \theta_y \Big|_{s=smax}. \quad (5-27c)$$

Σημειώνεται ότι οποιαδήποτε από τις δύο εξισώσεις Young-Laplace χρησιμοποιήσουμε (5-4a ή 5-4b) και εν συνεχεία τα αντίστοιχα υπόλοιπα (5-17 ή 5-27), το αποτέλεσμα της λύσης του προβλήματος της ισορροπίας σε οριζόντιο επίπεδο θα είναι ακριβώς το ίδιο. Παρακάτω θα δούμε ότι σε περισσότερο πολύπλοκες γεωμετρίες επιφανειών, η επιλογή ανάμεσα στις δύο εξισώσεις Young-Laplace αποτελεί μια πολύ σημαντική παράμετρο.

5.2.6.2. Υπόλοιπα εξίσωσης μήκους-τόξου

Τα σταθμισμένα υπόλοιπα της εξίσωσης μήκους-τόξου είναι τα εξής:

$$R_{AL}^k = \int_0^{smax} \varphi^k \left[\left(\frac{du}{ds} \right)^2 + u^2 \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 - 1 \right] ds. \quad (5-28)$$

5.2.6.3. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου

Η εξίσωση διατήρησης του όγκου είναι ήδη σε ολοκληρωτική μορφή, άρα τα αντίστοιχα υπόλοιπα είναι:

$$R_V = \int_0^{smax} u^3 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds - 2. \quad (5-29)$$

5.2.6.4. Υπόλοιπα εξίσωσης οριζόντιου επιπέδου

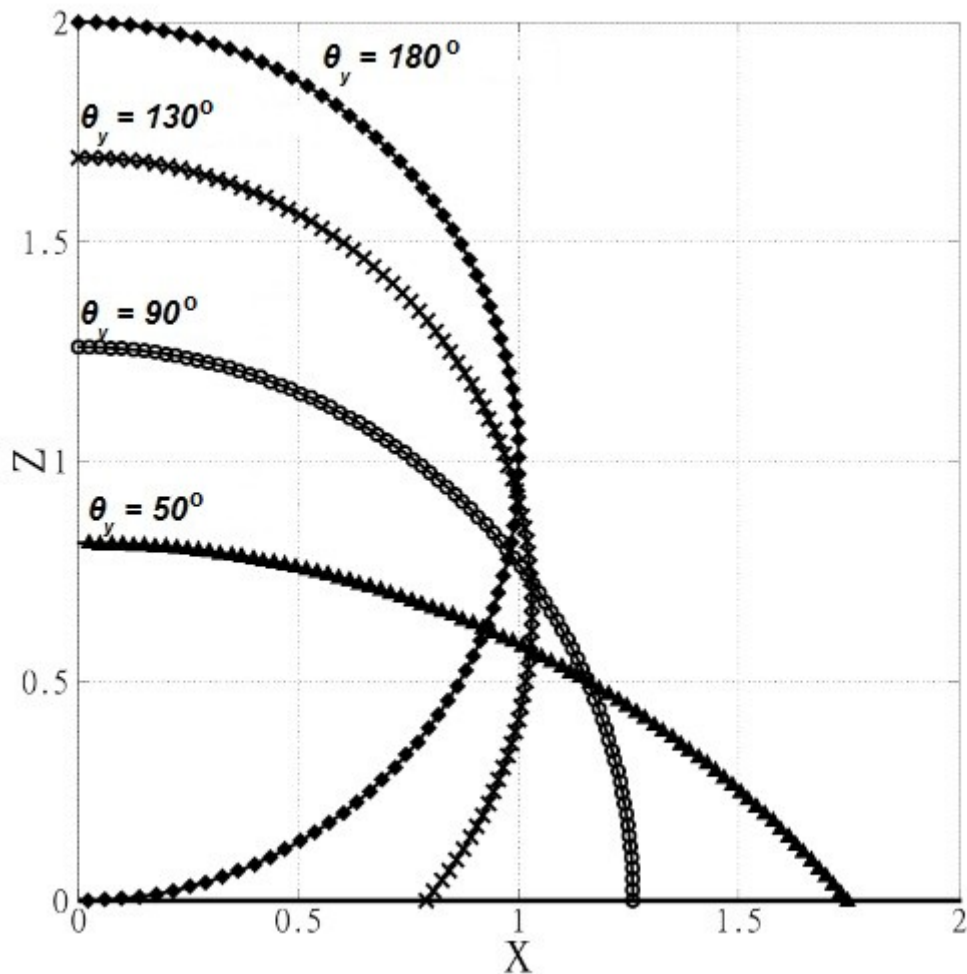
Το υπόλοιπο Galerkin της εξίσωσης του οριζόντιου επιπέδου έχει τη μορφή αλγεβρικής εξίσωσης:

$$R_s = u \Big|_{s=smax} \cos \theta \Big|_{s=smax}. \quad (5-30)$$

5.2.7. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-4

Στο παρακάτω σχήμα (5.3) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το ΠΣΤ-4 για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y) της σταγόνας με το οριζόντιο επίπεδο, χωρίς την επίδραση της βαρύτητας. Συγκεκριμένα είναι για γωνίες 90, 50, 130 και 180 μοίρες αντίστοιχα. Το πλέγμα του χωρίου D αποτελείται από 80 στοιχεία (elements).

Παρατηρούμε ότι με την παραμετροποίηση αυτή έχει αντιμετωπιστεί το πρόβλημα της μείωσης της πυκνότητας των πλεγματικών σημείων που συναντάμε στα προηγούμενα κεφάλαια. Αυτό μας δίνει το πλεονέκτημα καλύτερης ακρίβειας στη λύση, ακόμα και με μικρό αριθμό κόμβων.



Σχήμα 5.3 – Αποτελέσματα υπολογισμών για το ΠΣΤ-4 (ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο με παραμετροποίηση μήκους-τόξου) για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y). Το οριζόντιο επίπεδο είναι στο $z=0$.

5.3. Σύγκριση ρυθμού σύγκλισης για σφαιρική, κυλινδρική και παραμετροποίηση μήκους-τόξου

Στην παρακάτω ανάλυση εξετάζεται ποια από τις τρεις παραμετροποιήσεις είναι αποδοτικότερη όσον αφορά τις υπολογιστικές απαιτήσεις, δηλαδή ποια χρειάζεται το μικρότερο πλήθος στοιχείων για να παράγει το καλύτερο δυνατό αποτέλεσμα όσον αφορά την ακρίβεια της λύσης. Θα συγκρίνουμε τα προβλήματα συννοριακών τιμών 1, 2 και 4 για κυλινδρική, σφαιρική και παραμετροποίηση μήκους-τόξου αντίστοιχα. Τα προβλήματα αυτά αφορούν την ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο. Η σύγκριση γίνεται ως εξής:

Αρχικά επιλύονται τα ΠΣΤ για τις ίδιες τιμές γωνίας επαφής αλλά μεταβαλλόμενο πλήθος στοιχείων του πλέγματος. Ύστερα, πραγματοποιείται κάθε φορά σύγκριση της λύσης που παίρνουμε με μια ακριβή λύση. Η ακριβή λύση θεωρείται αυτή που παίρνουμε για ένα πολύ πυκνό πλέγμα (εδώ χρησιμοποιούμε 1280 στοιχεία πλέγματος). Η σύγκριση γίνεται στους αντίστοιχους

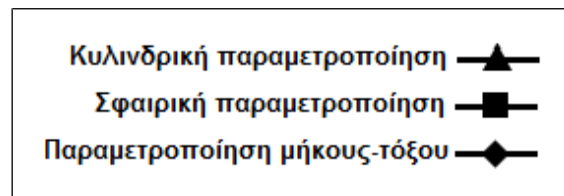
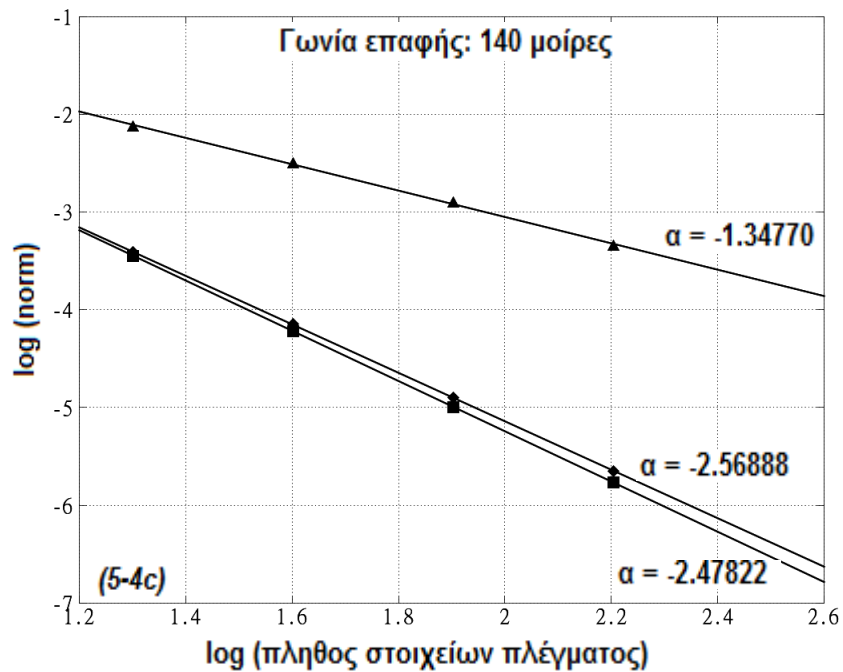
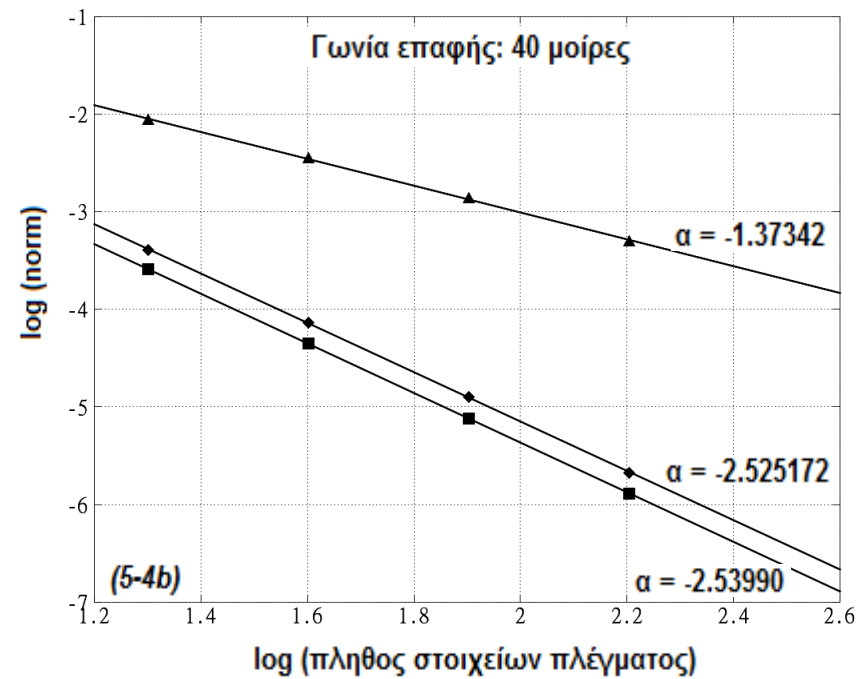
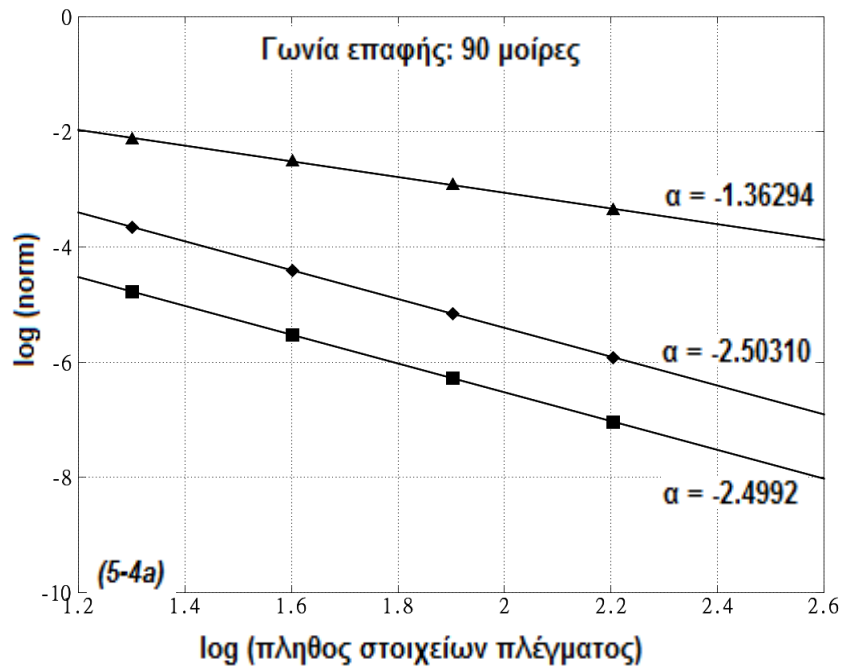
κόμβους των δύο λύσεων, υπολογίζοντας την παρακάτω νόρμα:

$$norm = \frac{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^N (z_{\text{λύση με αραιό πλέγμα}}^i - z_{\text{ακριβής λύση}}^i)^2 \right)}{N}, \quad (5-31)$$

όπου: N = πλήθος των στοιχείων του πλέγματος

Στη συνέχεια κατασκευάζεται το διάγραμμα $[\log(norm)-\log(\text{πλήθος στοιχείων πλέγματος})]$ (σχήματα 5.4) και εφαρμόζοντας την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων υπολογίζεται ο ρυθμός που η κάθε παραμετροποίηση προσεγγίζει την ακριβή της λύση καθώς αυξάνεται το πλήθος των στοιχείων του πλέγματος.

Παρατηρείται ότι η κυλινδρική παραμετροποίηση έχει τον μικρότερο ρυθμό σύγκλισης, στο συγκεκριμένο πρόβλημα, σε σχέση με τις άλλες δύο παραμετροποιήσεις. Αυτό συμβαίνει λόγω της αραιώσης των πλεγματικών σημείων κυρίως στο ανώτερο σημείο της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (βλ. Κεφάλαιο 4, παράγραφο 4.4.). Η σφαιρική και η μήκος-τόξου παραμετροποίηση παρουσιάζουν ανάλογη συμπεριφορά όσον αφορά τον ρυθμό σύγκλισης. Στην διαδικασία επιλογής όμως μιας εκ των δύο θα πρέπει να λάβουμε υπόψιν ότι ο αριθμός των αγνώστων στην παραμετροποίηση μήκους-τόξου είναι διπλάσιος από αυτόν στην σφαιρική. Άρα η σφαιρική παραμετροποίηση φαίνεται ότι είναι αποδοτικότερη, στο πρόβλημα ισορροπίας σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο, όσον αφορά τις υπολογιστικές απαιτήσεις.



Σχήματα 5.4 – Διαγράμματα ρυθμού σύγκλισης για τα τρία είδη παραμετροποιήσεων σε διάφορες γωνίες επαφής. Παρατηρούμε ότι η κυλινδρική παραμετροποίηση έχει τον μικρότερο ρυθμό σύγκλισης σε αντίθεση με τις άλλες δύο παραμετροποιήσεις.

5.4. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 5 (ΠΣΤ-5) – Ισορροπία σταγόνας σε επιφάνεια που περιλαμβάνει ένα μικροστούλο

Οι άγνωστες μεταβλητές, οι συνοριακές συνθήκες καθώς και το χωρίο επίλυσης του ΠΣΤ-5 παραμένουν ίδια με αυτά του ΠΣΤ-4. Η αλλαγή παρουσιάζεται μόνο στο ότι η εξίσωση του οριζόντιο επιπέδου θα μετατραπεί σε εξίσωση επιπέδου που περιλαμβάνει ένα μικροστούλο. Αυτό θα επιφέρει επίσης, όπως θα δούμε παρακάτω, τροποποιήσεις στον τρόπο εισαγωγής της γωνίας επαφής της σταγόνας με το επίπεδο, στα αντίστοιχα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace.

Έτσι λοιπόν θα πρέπει να επιλυθούν ταυτόχρονα:

1. Η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης Young-Laplace (σχέσεις 5-4),
2. η αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης μήκους-τόξου της ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας (σχέση 5-5),
3. η αδιάστατη μορφή της ολοκληρωτικής εξίσωσης διατήρησης του όγκου της σταγόνας (σχέση 5-37 ή 5-40).
4. η αδιάστατη μορφή της εξίσωσης της επιφάνειας που ισορροπεί η σταγόνα (σχέση 5-32).

Παρακάτω διατυπώνονται οι νέες εξισώσεις που θα επιλύσουμε:

5.4.1. Εξίσωση επιφάνειας που περιλαμβάνει ένα μικροστούλο

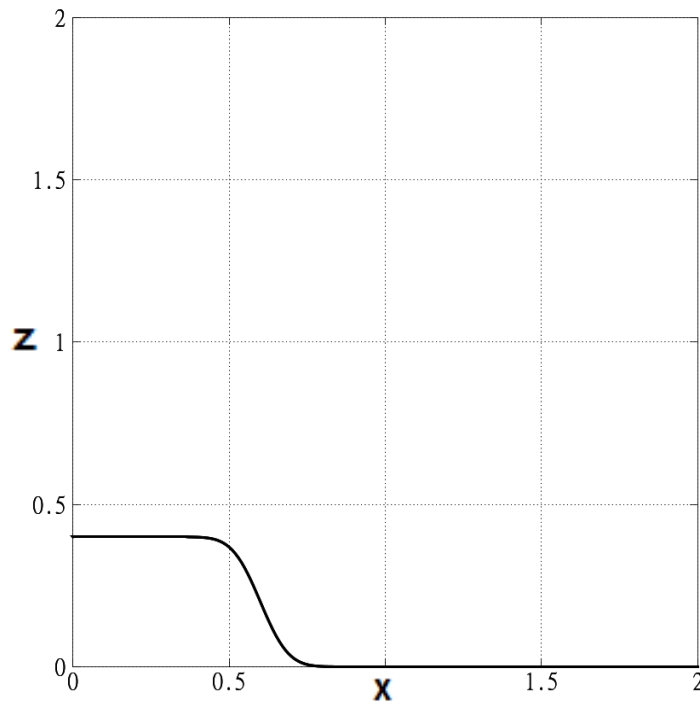
Το σχήμα του μικροστούλου δίνεται από την εξίσωση (σε καρτεσιανές συντεταγμένες):

$$z = \frac{1 - \operatorname{erf}[(x - P_1)P_2]}{P_3}, \quad (5-32)$$

όπου:

P_1 , P_2 , P_3 είναι σταθερές που καθορίζουν την μορφή και το μέγεθος του μικροστούλου. Στη συγκεκριμένη περίπτωση επιλέγεται: $P_1=0.6$, $P_2=10$ και $P_3=5$.

Στο παρακάτω σχήμα (5.5) παρουσιάζεται η μορφή που θα έχει αυτή η εξίσωση επιφάνειας. Παρατηρείται ότι το σχήμα του μικροστούλου έχει αξονική συμμετρία, ως προς τον άξονα z , όπως και το πρόβλημα που επιλύουμε.



Σχήμα 5.5 – Μορφή της στερεής επιφάνειας που περιλαμβάνει ένα μικροστόλο

5.4.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου

Η εξίσωση του όγκου της σταγόνας διατυπώνεται για δύο περιπτώσεις:

- Στην περίπτωση όπου το η αρχή του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων τοποθετείται στο σημείο Γ (βλ. σχήμα 5.6a) ισχύει:

$$\hat{V}_{droplet} = \hat{V}_{droplet\ augmented\ 1} + \hat{V}_{triangle} - \hat{V}_{pillar} \ , \quad (5-33)$$

όπου:

$$\hat{V}_{droplet\ augmented\ 1} = \text{Ο όγκος εκ περιστροφής του χωρίου } A\Gamma\Delta$$

$\hat{V}_{triangle} = \text{Ο όγκος εκ περιστροφής του τριγώνου } \Gamma\Delta E$, υπολογίζεται με τη μέθοδο των κυλινδρικών φλοιών: [Finney, Giordano 2005]

$$\hat{V}_{triangle} = \int_0^{x_{max}} 2\pi \frac{\cos\theta_{max}}{\sin\theta_{max}} \hat{x}^2 d\hat{x} \ , \quad (5-34)$$

$\hat{V}_{pillar} = \text{Ο όγκος εκ περιστροφής του χωρίου κάτω από την επιφάνεια του επιπέδου:}$

$$\hat{V}_{pillar} = \int_0^{x_{max}} 2\pi \hat{x} \frac{1 - erf[(\hat{x} - P_1)P_2]}{P_3} d\hat{x} \ . \quad (5-35)$$

Σύμφωνα με τη σχέσεις (4-13) (βλ. Κεφάλαιο 4, παράγραφο 4.2.2.), (5-34), (5-35) και

θεωρώντας ότι ο όγκος της σταγόνας ισούται με όγκο μιας σφαίρας με ακτίνα \hat{R}_o , η σχέση (5-33) γίνεται:

$$\frac{4}{3}\pi\hat{R}_o^3 = \frac{2}{3}\pi\hat{R}_o^3 \int_0^{s_{max}} u^3 \sin\theta \frac{d\theta}{ds} ds + \frac{2}{3}\pi\hat{R}_o^3 \cos\theta_{max} u^3 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2\theta_{max} - 2\pi\hat{R}_o^3 \int_0^{x_{max}} x \frac{1 - \text{erf}[(x - P_1)P_2]}{P_3} dx, \quad (5-36)$$

όπου όλες οι μεταβλητές έχουν αντικατασταθεί από τις αντίστοιχες αδιάστατες. Ακόμη, για να αδιαστατοποιηθεί η εξίσωση (5-36), που είναι σε μονάδες όγκου, διαιρείται με τον όγκο μιας σφαίρας με ακτίνα \hat{R}_o . Έτσι καταλήγουμε στην αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου:

$$\int_0^{s_{max}} u^3 \sin\theta \frac{d\theta}{ds} ds + \cos\theta_{max} u^3 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2\theta_{max} - 3 \int_0^{x_{max}} x \frac{1 - \text{erf}[(x - P_1)P_2]}{P_3} dx = 2. \quad (5-37)$$

- Στην περίπτωση όπου το η αρχή του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων τοποθετείται στο σημείο B (βλ. σχήμα 5.6b) δηλαδή πάνω στο μικροστύλο, προκύπτει:

$$V_{\hat{droplet}} = V_{\hat{droplet\ augmented\ 2}} + V_{\hat{trapezoid}} - V_{\hat{pillar}}, \quad (5-38)$$

όπου:

$V_{\hat{droplet\ augmented\ 2}}$ = Ο όγκος εκ περιστροφής του χωρίου $AB\Delta$

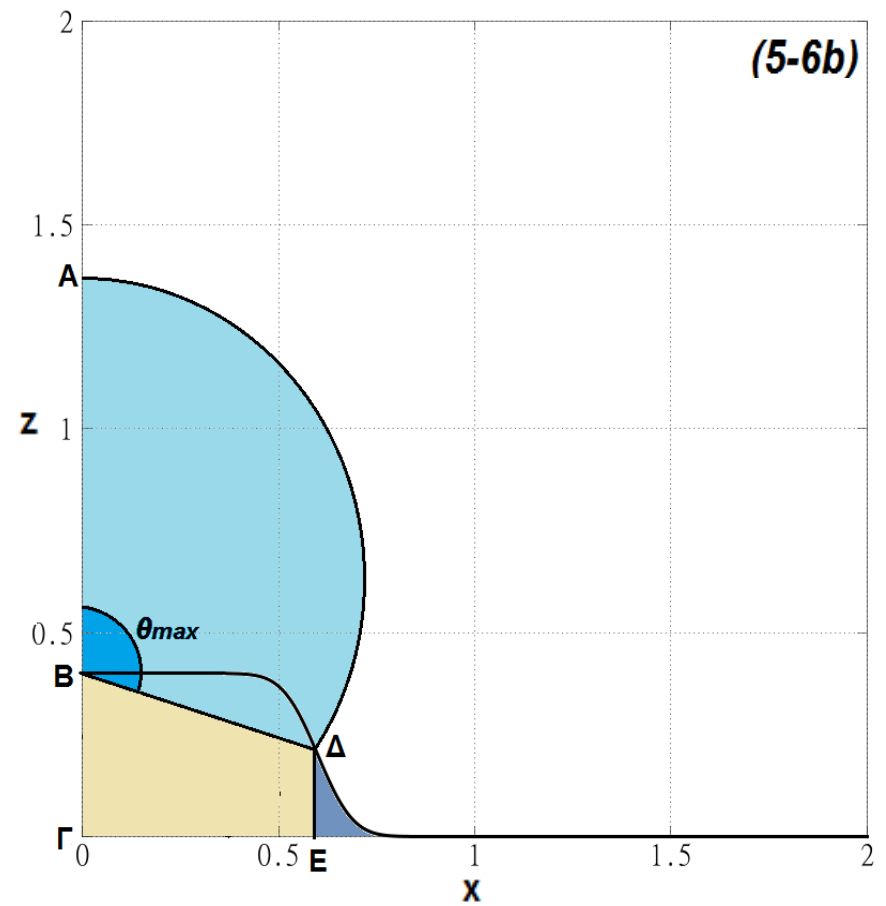
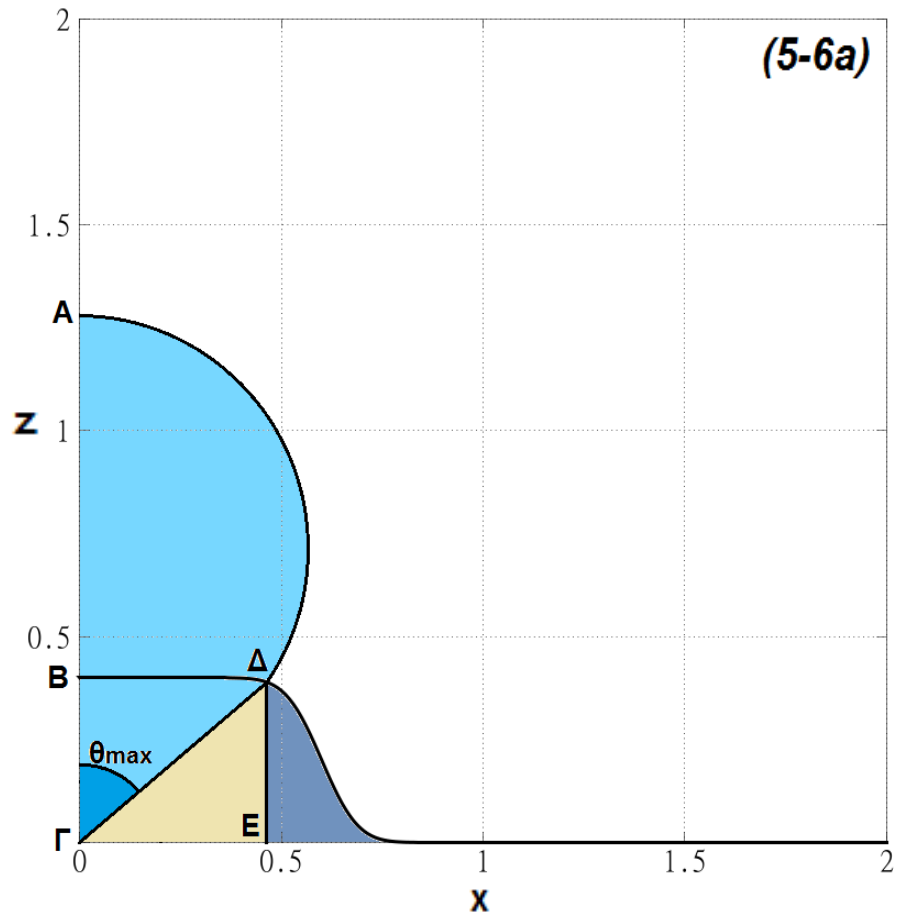
$V_{\hat{trapezoid}}$ = Ο όγκος εκ περιστροφής του τραπεζίου $\Gamma B\Delta E$

$$V_{\hat{trapezoid}} = \int_0^{x_{max}} 2\pi \left[\frac{\cos\theta_{max}}{\sin\theta_{max}} \hat{x} + (\Gamma B) \right] \hat{x} d\hat{x}. \quad (5-39)$$

Κάνοντας αντίστοιχες πράξεις με την πρώτη περίπτωση, καταλήγουμε στην αντίστοιχη αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου:

$$\int_0^{s_{max}} u^3 \sin\theta \frac{d\theta}{ds} ds + \cos\theta_{max} u^3 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2\theta_{max} + \frac{3}{2}(\Gamma B) u^2 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2\theta_{max} - 3 \int_0^{x_{max}} x \frac{1 - \text{erf}[(x - P_1)P_2]}{P_3} dx = 2. \quad (5-40)$$

Αν και οι δύο εξισώσεις διατήρησης του όγκου που υπολογίστηκαν είναι ισοδύναμες, παρακάτω θα δούμε περιπτώσεις όπου αναγκαστικά επιλέγεται μία εκ των δύο.



Σχήμα 5.6a – Υπολογισμός του όγκου της σταγόνας πάνω στην επιφάνεια του μικροστύλου με αρχή του συστήματος συντεταγμένων το σημείο Γ

Σχήμα 5.6b – Υπολογισμός του όγκου της σταγόνας πάνω στην επιφάνεια του μικροστύλου με αρχή του συστήματος συντεταγμένων το σημείο B

5.4.3. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

5.4.3.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace

- Στην περίπτωση που χρησιμοποιείται η εξίσωση Young-Laplace (5-4a) όπου το στοιχείο ολοκλήρωσης είναι το dS_{ps} ισχύει:

Η μετατροπή που θα γίνει στα υπόλοιπα Galerkin σε σχέση με τα αντίστοιχα του ΠΣΤ-4, ώστε να ληφθεί υπόψιν ο νέος τρόπος εισαγωγής της γωνίας επαφής, θα είναι μόνο στο ολοκλήρωμα I_2 στη σχέση (5-15). Έτσι εφαρμόζοντας παραγοντική ολοκλήρωση το I_2 προκύπτει:

$$I_2 = - \int_0^{s \max} \varphi^k \left[\frac{d}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} \right] ds =$$

$$\int_0^{s \max} \frac{d\varphi^k}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} ds - \left[\varphi^k \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} \right]_0^{s \max} = I_6 + I_7, \quad (5-40)$$

όπου τώρα η σχέση (5-40) δεν ισούται με την αντίστοιχη (5-16) καθώς ισχύει: $\vec{n}_s \neq -\vec{e}_\theta$.

Αναπτύσσοντας τώρα το I_7 θα προκύπτει:

$$I_7 = - \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right) \sin \theta}{\sqrt{\left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right]}} \Big|_{s=s \max} = u (\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta) \sin \theta \Big|_{s=s \max}, \quad (5-41)$$

όπου το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην σταγόνα (\vec{n}) υπολογίζεται από τη σχέση (4-22):

$$\vec{n} = \frac{u}{\sqrt{u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2}} \vec{e}_r - \frac{\left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)}{\sqrt{u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2}} \vec{e}_\theta. \quad (5-42)$$

Αρκεί λοιπόν να υπολογίσουμε το εσωτερικό γινόμενο $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ σαν συνάρτηση της γωνίας

επαφής (θ_y) ώστε να εισάγουμε στη σχέση (5-41) τη συνοριακή συνθήκη (5-10). Έτσι από την συνθήκη (5-10) ισχύει:

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_s |_{s=s \max} = \cos \theta_y \Leftrightarrow \frac{u \cos(\theta) - u f_x \sin \theta}{\sqrt{(f_x^2 + 1) \left(u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right)}} \Big|_{s=s \max} - \frac{\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta [f_x \cos \theta + \sin \theta]}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \Big|_{s=s \max} = \cos \theta_y, \quad (5-43)$$

όπου:

το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στο επίπεδο (\vec{n}_s) υπολογίστηκε από τη σχέση (3-24) (βλ. Κεφάλαιο 3, παράγραφο 3.2.4.)

f_x = η παράγωγος της συνάρτησης του επιπέδου (5-32) ως προς το x :

$$f_x = -\frac{2 P_2 \exp(-(P_1 - x)^2 P_2^2)}{\sqrt{\pi} P_3}. \quad (5-44)$$

Επίσης, λαμβάνοντας υπόψιν μας τον περιορισμό:

$$\frac{f_x \cos \theta + \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \Big|_{s=s \max} \neq 0, \quad (5-45)$$

μπορούμε να επιλύσουμε την εξίσωση (5-43) ως προς $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$:

$$\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta |_{s=s \max} = \frac{u \cos \theta - u f_x \sin \theta}{(f_x \cos \theta + \sin \theta) \sqrt{\left(u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s} \right)^2 \right)}} \Big|_{s=s \max} - \frac{\cos \theta_y \sqrt{f_x^2 + 1}}{f_x \cos \theta + \sin \theta} \Big|_{s=s \max}. \quad (5-46)$$

Οπότε, η σχέση (5-46) που περιέχει τον αναλυτικό υπολογισμό του εσωτερικού γινομένου $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ θα εισαχθεί στην (5-41). Ο υπολογισμός όμως του $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ μπορεί να γίνει, εκτός του αναλυτικού τρόπου, και γεωμετρικά:

Όπως βλέπουμε από το παρακάτω σχήμα (5.7) η γωνία που σχηματίζουν τα διανύσματα \vec{n} και \vec{e}_θ μπορεί να υπολογιστεί ως η διαφορά: $\theta_r - \theta_y$

Άρα το εσωτερικό γινόμενο $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ υπολογίζεται ως:

$$\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta |_{s=s \max} = \cos(\theta_r - \theta_y), \quad (5-47)$$

όπου θ_r είναι η γωνία που σχηματίζουν τα διανύσματα \vec{n}_s και \vec{e}_θ . Υπολογίζουμε:

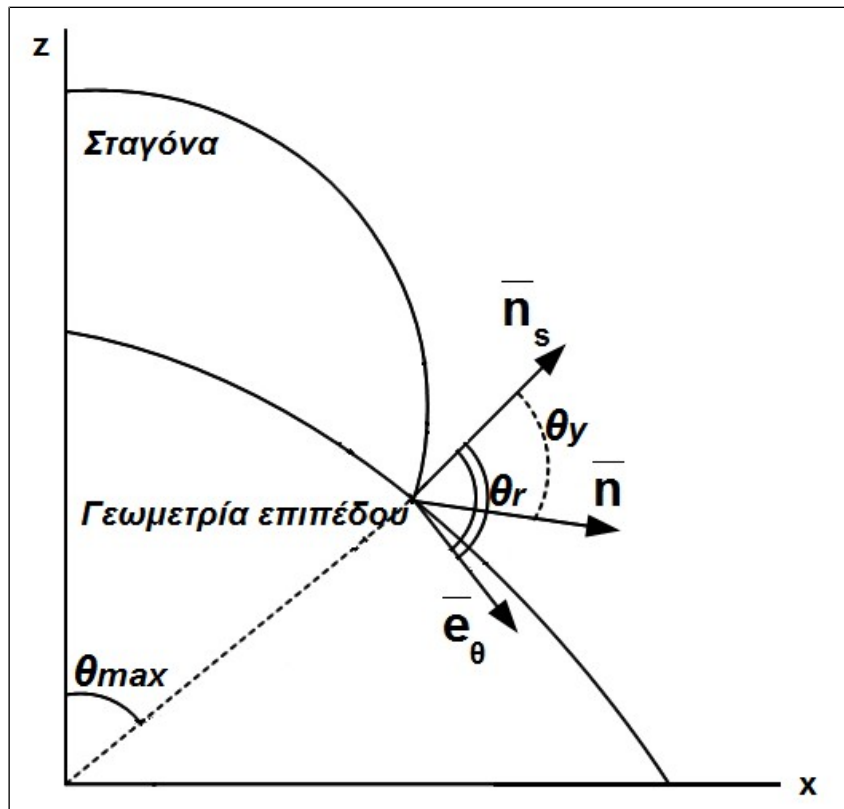
$$\theta_r = \pm \text{acos}(\vec{n}_s \cdot \vec{e}_\theta) \Big|_{s=s_{max}} \Leftrightarrow \theta_r = \pm \text{acos} \left[-\frac{f_x \cos \theta + \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \right] \Big|_{s=s_{max}} \quad (5-48a)$$

Από τις δύο λύσεις της εξίσωσης (5-48a) επιλέγεται η:

$$\theta_r = \text{acos} \left[-\frac{f_x \cos \theta + \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \right] \Big|_{s=s_{max}} \quad (5-48b)$$

καθώς όπως φαίνεται από το σχήμα (5.7) πρέπει: $\theta_r \leq \pi$.

Η σχετική θέση των τριών διανυσμάτων στο σχήμα (5.7) (δηλαδή το διάνυσμα \vec{n} να βρίσκεται πάντα ενδιάμεσα από τα \vec{n}_s και \vec{e}_θ) μπορούμε να πούμε ότι δεν αλλάζει στην συγκεκριμένη γεωμετρία επιφάνειας (δηλαδή σε αυτή που περιλαμβάνει ένα μικροστύλο) αφού παρατηρούμε, κάνοντας υπολογισμούς για διάφορες γωνίες επαφής, ότι ισχύει γενικά $\theta_r \geq \theta_y$. Μια μεταβολή όμως στην σχετική θέση αυτών των διανυσμάτων θα οδηγούσε πιθανώς σε αλλαγή του τρόπου που το $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ υπολογίζεται γεωμετρικά (σχέση 5-47). Αντίθετα η αναλυτική σχέση του (5-46) θα παρέμενε ανεπηρέαστη. Μια τέτοια μεταβολή θα μπορούσε να προκύψει είτε από αλλαγή της μορφής της στερεής επιφάνειας είτε από μεταφορά της αρχής του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων σε κάποιο άλλο σημείο.



Σχήμα 5.7 – Γεωμετρικός υπολογισμός του εσωτερικού γινομένου $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$

Τελικά τα υπόλοιπα Galerkin, σύμφωνα με τις σχέσεις (5-17a), (5-41), (5-46), (5-47), θα έχουν την μορφή:

$$R_{YL}^k = \int_0^{s \max} \varphi^k \left[\frac{2u^2 \sin^2 \theta + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \right]}} \frac{d\theta}{ds} ds + \int_0^{s \max} \frac{d\varphi^k}{ds} \frac{u \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right) \sin^2 \theta}{\sqrt{\sin^2 \theta \left[u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \right]}} ds - \right. \\ \left. \int_0^{s \max} \varphi^k K u^2 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds + \int_0^{s \max} \varphi^k N_g u^3 \cos \theta \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds \equiv R_{arclength 3} \right. \quad (5-49a)$$

για $1 \leq k \leq N-1$.

Αν ο υπολογισμός του $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ γίνεται αναλυτικά με τη σχέση (5-46), τότε το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος είναι:

$$R_{YL}^N = R_{arclength 3} + \\ u \left[\frac{u \cos \theta - u f_x \sin \theta}{(f_x \cos \theta + \sin \theta) \sqrt{\left(u^2 + \left(\frac{u_s}{\theta_s}\right)^2 \right)}} - \frac{\cos \theta_y \sqrt{f_x^2 + 1}}{f_x \cos \theta + \sin \theta} \right] \sin \theta \Big|_{s=s \max} \quad (5-49b)$$

Ενώ αν χρησιμοποιήσουμε τη σχέση (5-47) για τον υπολογισμό του $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ γεωμετρικά τότε το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος είναι:

$$R_{YL}^N = R_{arclength 3} + u \cos \left[a \cos \left[-\frac{f_x \cos \theta_{\max} + \sin \theta_{\max}}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \right] \Big|_{s=s \max} - \theta_y \right] \sin \theta \Big|_{s=s \max} . \quad (5-49c)$$

Η χρήση του υπολοίπου (4-49b) προϋποθέτει την τήρηση ενός περιορισμού (σχέση 5-45). Ο περιορισμός αυτός παραβιάζεται μόνο στη λύση όπου η σταγόνα είναι πάνω στο μικροστύλο με γωνία επαφής 180 μοίρες. Η παραβίαση αυτή όμως είναι άνευ σημασίας καθώς όπως θα δούμε παρακάτω, η εξίσωση Young-Laplace (5-4a) όπου το στοιχείο ολοκλήρωσης είναι το dS_{ps} , δεν μας επιτρέπει εξ' αρχής να πάρουμε τέτοιες λύσεις χωρίς να μεταφέρουμε την αρχή του συστήματος συντεταγμένων πάνω στο μικροστύλο.

- Στην περίπτωση που χρησιμοποιούμε την εξίσωση Young-Laplace (5-4b) όπου το στοιχείο

ολοκλήρωσης είναι το dS_{LVs} :

Η μετατροπή που θα γίνει στα υπόλοιπα Galerkin σε σχέση με τα αντίστοιχα του ΠΣΤ-4, θα είναι στην εξίσωση (5-21). Έτσι για να εισαχθεί η γωνία επαφής στο πρώτο όρο της σχέσης (5-21) χρησιμοποιείται η συνθήκη (5-10) και εργαζόμαστε ως εξής:

$$\vec{n} \cdot \vec{n}_s \Big|_{s=s_{max}} = \cos \theta_y \Leftrightarrow \frac{u \theta_s}{u_s} \Big|_{s=s_{max}} = \frac{\cos \theta_y \sqrt{f_x^2 + 1} \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} - u_s f_x \cos \theta - u_s \sin \theta}{u_s (\cos \theta - f_x \sin \theta)} \Big|_{s=s_{max}} , \quad (5-50)$$

όπου το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην σταγόνα (\vec{n}) υπολογίζεται από τη σχέση (5-23)

Για να εξαχθεί η εξίσωση (5-50) όμως θα πρέπει να λάβουμε υπόψιν μας δύο περιορισμούς:

$$1. \quad u_s \Big|_{s=s_{max}} \neq 0 , \quad (5-51a)$$

$$2. \quad \frac{\cos \theta - f_x \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1} \sqrt{u^2 \theta_s^2}} \Big|_{s=s_{max}} \neq 0 . \quad (5-51b)$$

Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η εισαγωγή του όρου $\frac{u \theta_s}{u_s}$ στη σχέση (5-21) θα γίνει κατά περίπτωση ελέγχοντας κάθε φορά αν τηρούνται οι περιορισμοί. Έτσι στην περίπτωση που τηρούνται οι περιορισμοί, ο όρος $\frac{u \theta_s}{u_s}$ δίνεται από σχέση (5-50) ενώ όταν παραβιάζονται οι περιορισμοί (αυτό συμβαίνει στις λύσεις όπου $y \Big|_{s=s_{max}} = 0$ δηλαδή όταν το σημείο επαφής της σταγόνας βρίσκεται στο οριζόντιο τμήμα του επιπέδου) ο προηγούμενος όρος θα δίνεται από τη σχέση (5-25b) καθώς εκεί ανάγεται η σχέση (5-50).

Ο υπολογισμός του παραπάνω όρου όμως μπορεί να γίνει, εκτός από αναλυτικά, και γεωμετρικά. Αυτό απλοποιεί την μορφή των υπολοίπων. Έτσι από τη σχέση (5-47) προκύπτει:

$$\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta \Big|_{s=s_{max}} = \cos(\theta_r - \theta_y) \Leftrightarrow \frac{u \theta_s}{u_s} \Big|_{s=s_{max}} = \pm \tan(\theta_r - \theta_y) . \quad (5-52a)$$

Από τις δύο λύσεις της σχέσης (5-52a) επιλέγεται η εξής (βλ. παράγραφο 5.2.6.1.):

$$\frac{u \theta_s}{u_s} \Big|_{s=s_{max}} = + \tan(\theta_r - \theta_y) . \quad (5-52b)$$

Τελικά, τα υπόλοιπα Galerkin, σύμφωνα με τις σχέσεις (5-21), (5-27), (5-50), (5-25b), (5-52a) θα έχουν την μορφή:

$$\begin{aligned}
R_{YL}^k = & \int_0^{s \max} \varphi^k [2 u \theta_s \sin \theta] ds - \int_0^{s \max} \varphi^k [u_s \cos \theta] ds - \int_0^{s \max} \frac{d\varphi^k}{ds} u \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds - \\
& \int_0^{s \max} \varphi^k u_s \sin \theta \arctan \left(\frac{u \theta_s}{u_s} \right) ds - \int_0^{s \max} \varphi^k u \cos \theta \arctan \left(\frac{u}{\theta_s} \right) ds - \\
& \int_0^{s \max} \varphi^k K u \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds + \int_0^{s \max} \varphi^k N_g u^2 \cos \theta \sin \theta \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} ds \equiv R_{arclength4} , \quad (5-53a)
\end{aligned}$$

για $2 \leq k \leq N-1$.

Ακόμη, το υπόλοιπο του πρώτου όρου του πλέγματος είναι:

$$R_{YL}^1 = R_{arclength4} - u \sin \theta \frac{\pi}{2} \Big|_{s=0} . \quad (5-53b)$$

Επίσης, αν ο υπολογισμός του $\frac{u \theta_s}{u_s}$ γίνεται αναλυτικά με τις σχέσεις (5-50), (5-25b), τότε το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος είναι:

$$\begin{aligned}
R_{YL}^N = & R_{arclength4} + \\
& u \sin(\theta) \arctan \left[\frac{\cos \theta_y \sqrt{f_x^2 + 1} \sqrt{u^2 \theta_s^2 + u_s^2} - u_s f_x \cos \theta - u_s \sin \theta}{u_s (\cos \theta - f_x \sin \theta)} \right] \Big|_{s=s \max} \quad (5-54c)
\end{aligned}$$

όταν: $u_s \Big|_{s=s \max} \neq 0$ και $\frac{\cos \theta - f_x \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1} \sqrt{u^2 \theta_s^2}} \Big|_{s=s \max} \neq 0$,

$$\text{ή θα είναι: } R_{YL}^N = R_{arclength4} + u \sin \theta \theta_y \Big|_{s=s \max} \quad (5-53d)$$

όταν: $u_s \Big|_{s=s \max} = 0$ ή $\frac{\cos \theta - f_x \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1} \sqrt{u^2 \theta_s^2}} \Big|_{s=s \max} = 0$.

Εναλλακτικά, αν ο υπολογισμός του $\frac{u \theta_s}{u_s}$ γίνεται γεωμετρικά με τη σχέση (5-52b), τότε το υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου (N) του πλέγματος είναι:

$$R_{YL}^N = R_{arclength4} + u \sin \theta \arctan \left[a \cos \left[-\frac{f_x \cos \theta + \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \right] - \theta_y \right] \Big|_{s=s \max} . \quad (5-53e)$$

5.4.3.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου

Η εξίσωση διατήρησης του όγκου είναι ήδη σε ολοκληρωτική μορφή, άρα τα αντίστοιχα υπόλοιπα είναι:

- Για την εξίσωση (5-37) όπου η αρχή του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων τοποθετείται στο σημείο Γ (βλ. σχήμα 5.6a) προκύπτει:

$$R_V = \int_0^{s_{max}} u^3 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds + \cos \theta_{max} u^3 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2 \theta_{max} - 3 \int_0^{x_{max}} x \frac{1 - \operatorname{erf}[(x - P_1)P_2]}{P_3} dx - 2 \quad (5-54a)$$

- Για την εξίσωση (5-40) όπου η αρχή του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων μεταφέρεται στο σημείο Β (βλ. σχήμα 5.6b) προκύπτει:

$$R_{V \text{ displaced}} = \int_0^{s_{max}} u^3 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds + \cos \theta_{max} u^3 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2 \theta_{max} + \frac{3}{2} (\Gamma B) u^2 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2 \theta_{max} - 3 \int_0^{x_{max}} x \frac{1 - \operatorname{erf}[(x - P_1)P_2]}{P_3} dx - 2 . \quad (5-54b)$$

5.4.3.3. Υπόλοιπα εξίσωσης επιφάνειας

Το υπόλοιπο Galerkin της εξίσωσης της επιφάνειας που περιλαμβάνει ένα μικροστύλο έχει τη μορφή αλγεβρικής εξίσωσης:

$$R_s = u \cos \theta \Big|_{s=s_{max}} - \frac{1 - \operatorname{erf}[(u \sin \theta - P_1)P_2]}{P_3} \Big|_{s=s_{max}} . \quad (5-55a)$$

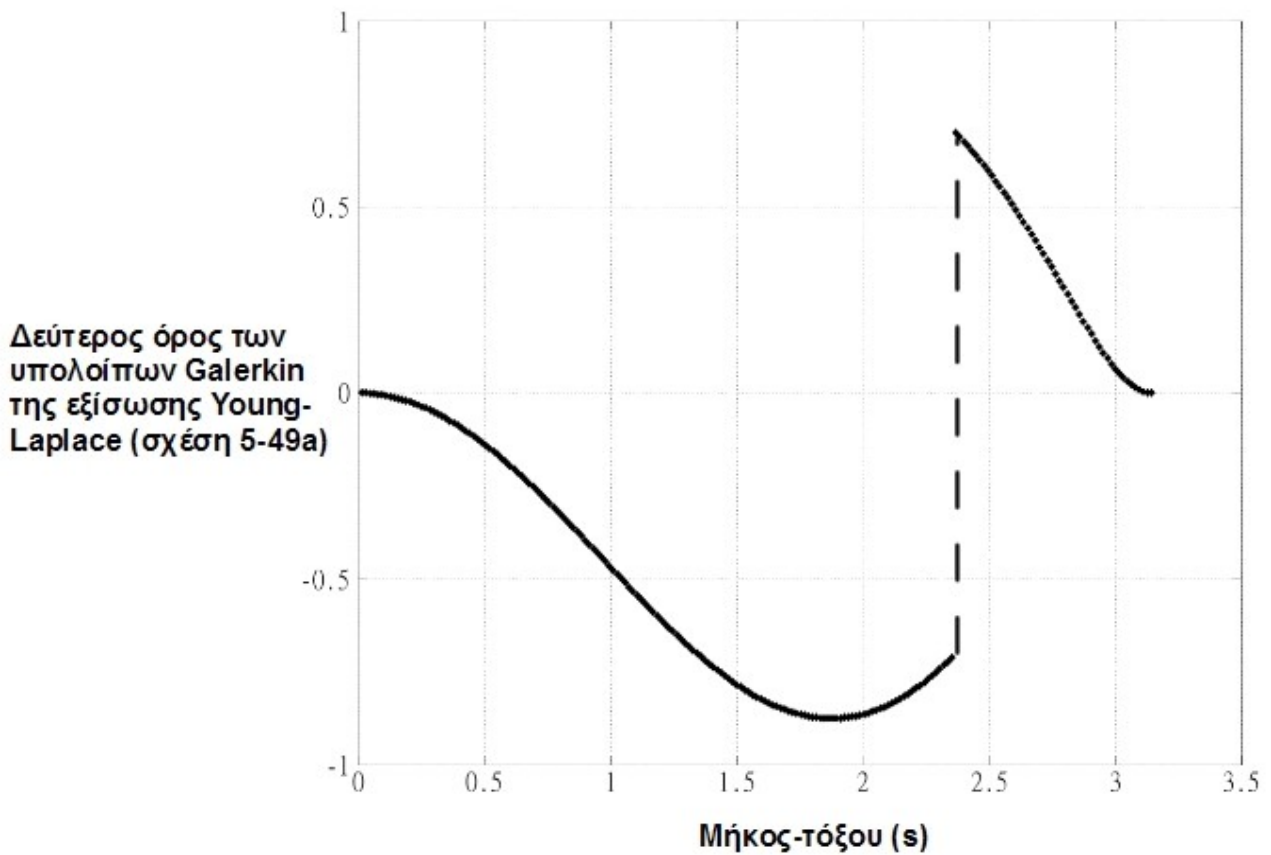
Στην περίπτωση που η αρχή του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων έχει μεταφερθεί στο σημείο Β (βλ. σχήμα 5.6b) πάνω στον μικροστύλο τότε αντίστοιχο υπόλοιπο της επιφάνειας είναι:

$$R_{s \text{ displaced}} = (B\Gamma) + u \cos \theta \Big|_{s=s_{max}} - \frac{1 - \operatorname{erf}[(u \sin \theta - P_1)P_2]}{P_3} \Big|_{s=s_{max}} . \quad (5-55b)$$

5.4.4. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-5

Κάνοντας κάποιους υπολογισμούς για αυτό το ΠΣΤ παρατηρούμε ότι και στις δύο μορφές των υπολοίπων της Young-Laplace (5-49 και 5-53), εμφανίζεται ασυνέχεια στις τιμές τους όταν το $\theta_s = 0$. Το θ_s μηδενίζεται σε περιπτώσεις όπου η μεταβλητή θ δεν αυξάνει μονότονα κατά μήκος της λύσης αλλά φτάνει σε μια μέγιστη τιμή και ύστερα μειώνεται. Η ασυνέχεια γίνεται αισθητή καθώς σε αυτές τις περιπτώσεις, η μέθοδος Newton-Raphson δεν συγκλίνει. Για να αντιμετωπίσουμε αυτό το πρόβλημα εργαζόμαστε διαφορετικά για κάθε εξίσωση Young-Laplace καθώς οι αιτίες της εμφάνισης ασυνέχειας είναι διαφορετικές σε κάθε περίπτωση:

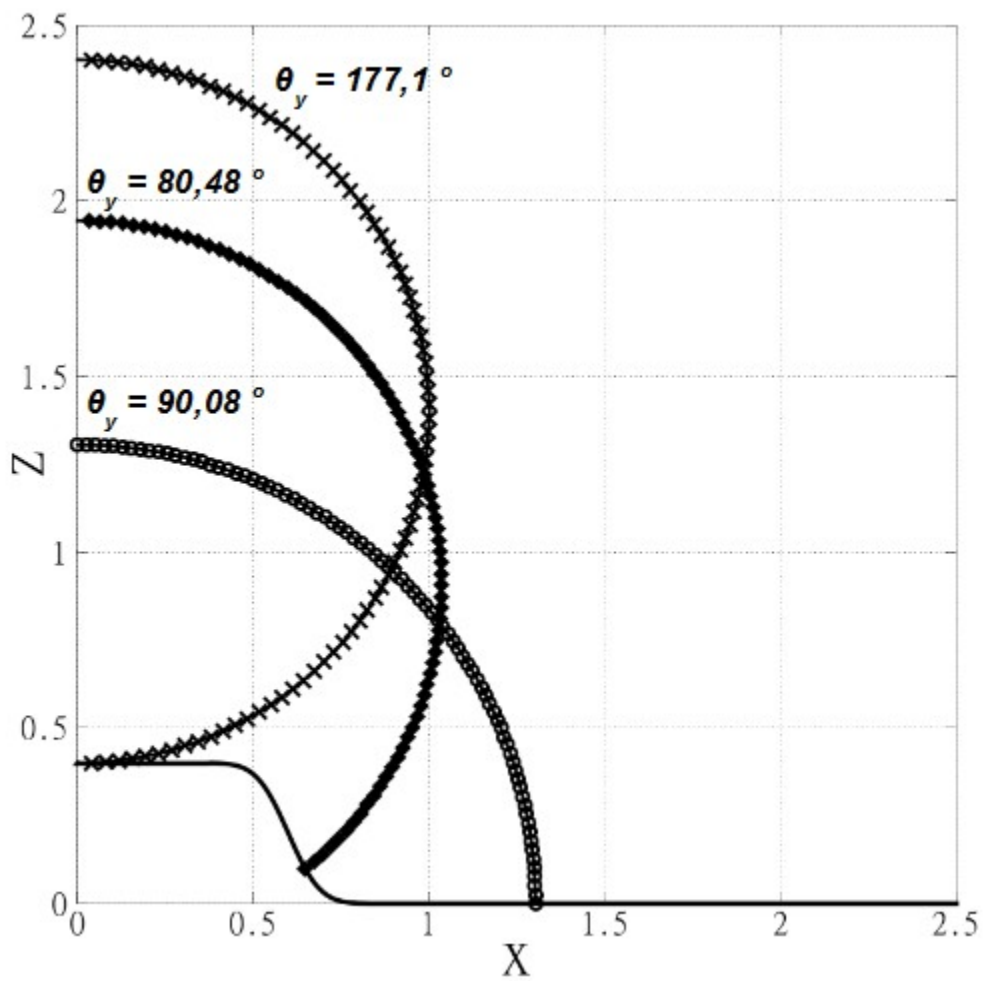
- Στην περίπτωση που χρησιμοποιούνται τα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace (5-49), τα οποία έχουν προκύψει από ολοκλήρωση στο στοιχειώδες χωρίο dS_{ps} , παρατηρείται ότι το πρόβλημα της ασυνέχειας δημιουργείται από τον δεύτερο όρο των υπολοίπων Galerkin της εξίσωσης Young-Laplace (σχέση 5-49a). Στο σχήμα 5.8 παρουσιάζει η τιμή του όρου αυτού (υπολογίζεται μόνο το εσωτερικό του ολοκληρώματος). Αυτό που δοκιμάστηκε είναι να αλλάξουμε το πρόσημο του όρου αυτού από το σημείο της ασυνέχειας και μετά, ώστε η συνάρτηση να γίνει συνεχής, το οποίο όμως μας οδήγησε στο να λύσουμε ένα τελείως διαφορετικό πρόβλημα, δηλαδή οι λύσεις που παίρναμε ήταν λανθασμένες. Άρα ο μόνος τρόπος για να χρησιμοποιήσουμε αυτά τα συγκεκριμένα υπόλοιπα είναι να μεταφέρουμε την αρχή του συστήματος των σφαιρικών συντεταγμένων πάνω στο επίπεδο του μικροστύλου (βλ. σχήμα 5.6b). Με τον τρόπο αυτό καταφέρνουμε η μεταβλητή θ να ορίζεται μονότονα κατά μήκος της λύσης και το θ_s να είναι πάντα διάφορο του μηδενός. Για να επιτευχθεί η μεταφορά του άξονα συντεταγμένων θα πρέπει στο ΠΣΤ να χρησιμοποιήσουμε τα υπόλοιπα (5-54b) για την εξίσωση διατήρησης του όγκου καθώς και το υπόλοιπο (5-55b) για την εξίσωση του επιπέδου. Ακόμα στο υπόλοιπο του τελευταίου κόμβου της Young-Laplace θα πρέπει να προστεθεί το υπόλοιπο (5-49b) και όχι το (5-49c) καθώς ο γεωμετρικός υπολογισμός του εσωτερικού γινομένου $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ χρήζει αναθεώρησης μετά την μεταφορά του συστήματος συντεταγμένων. Αυτή η μέθοδος της μεταφοράς της αρχής των συντεταγμένων ανοίγει το δρόμο στο να χρησιμοποιηθεί η, υπολογιστικά φθηνότερη, σφαιρική παραμετροποίηση (βλ. κεφάλαιο 4) για να επιλύσουμε προβλήματα με πολύπλοκες γεωμετρίες επιπέδου (π.χ. το μικροστύλο).



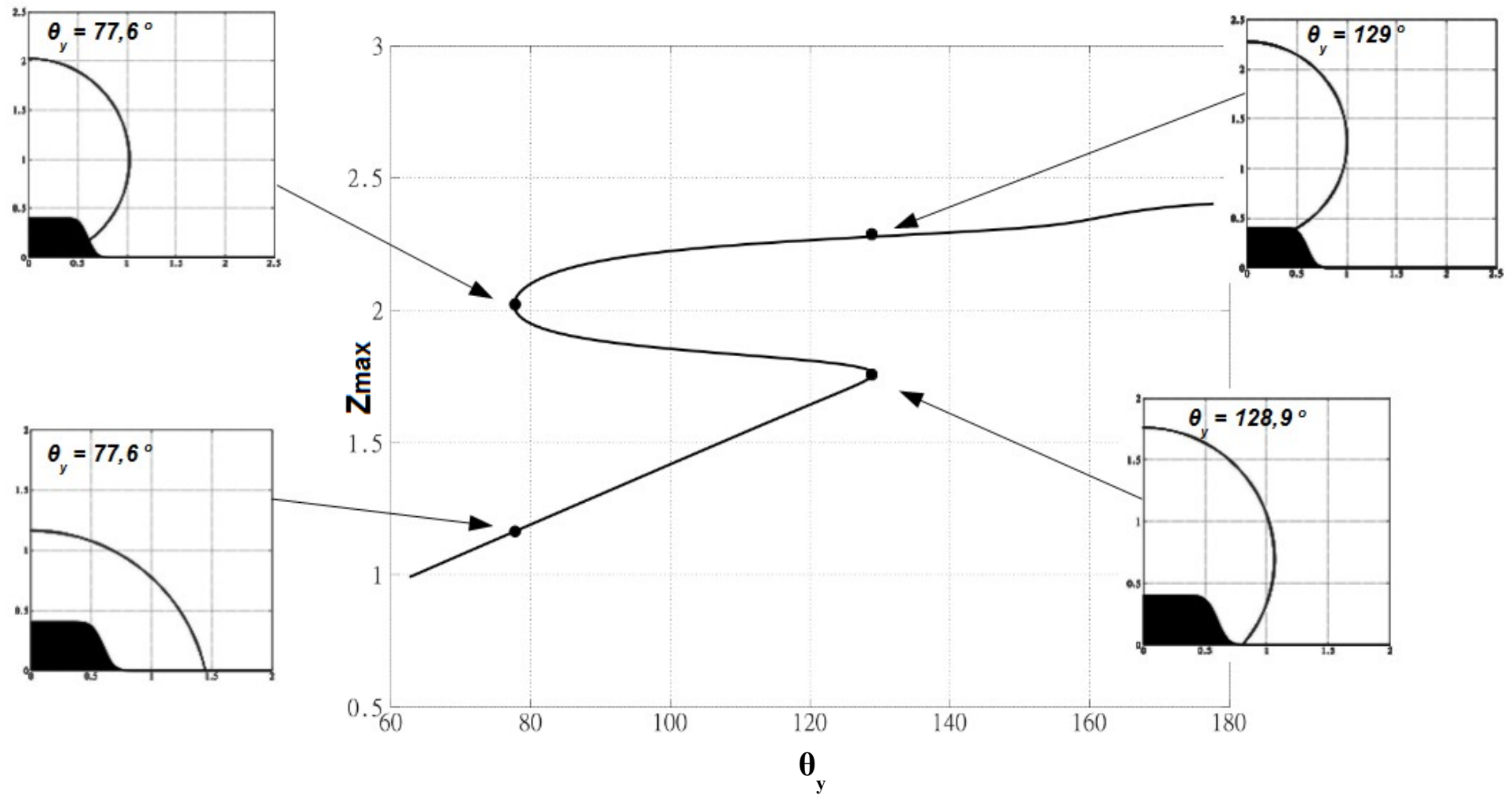
Σχήμα 5.8 – Εμφάνιση ασυνέχειας στα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace (5-49) τα οποία έχουν προκύψει από ολοκλήρωση στο στοιχειώδες χωρίο dS_{ps} . Η ασυνέχεια δημιουργείται όταν $\theta_s=0$.

- Στην περίπτωση που χρησιμοποιούνται τα υπόλοιπα της εξίσωσης Young-Laplace (5-53), τα οποία έχουν προκύψει από ολοκλήρωση στο στοιχειώδες χωρίο dS_{LVs} , βλέπουμε ότι το πρόβλημα ασυνέχειας οφείλεται στο ότι υπερβαίνουμε το σύνολο τιμών της συνάρτησης $arctan$. Στον κώδικα του προβλήματος χρησιμοποιείται η συνάρτηση $atan2$ όπου το σύνολο τιμών της είναι: $(-\pi, \pi]$. Έτσι όταν το αποτέλεσμα της $atan2$ ξεπεράσει την τιμή π , τότε παίρνει “απότομα” αρνητικές τιμές. Το σύνολο τιμών μπορεί να απεικονισθεί στο $[0, 2\pi)$ προσθέτοντας το 2π στις αρνητικές τιμές. Με τον τρόπο αυτό αντιμετωπίζουμε το πρόβλημα της ασυνέχειας χωρίς να χρειαστεί να μεταφέρουμε την αρχή του συστήματος συντεταγμένων.

Στο παρακάτω σχήματα (5.9), (5.10) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το ΠΣΤ-5 για διάφορες γωνίες επαφής (θ_s) της σταγόνας με το οριζόντιο επίπεδο, καθώς και τα αποτελέσματα που παραμετρικού βηματισμού με την μέθοδο Keller, με παράμετρο τη γωνία επαφής. Στα αποτελέσματα αυτά δεν έχει ληφθεί υπόψιν η επίδραση της βαρύτητας. Το πλέγμα του χωρίου D αποτελείται από 80 στοιχεία.



Σχήμα 5.9 – Αποτελέσματα υπολογισμών για το ΠΣΤ-5 (ισορροπία σταγόνας σε επιφάνεια που περιλαμβάνει ένα μικροστόλο με παραμετροποίηση μήκους-τόξου) για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y)



Σχήμα 5.10 – Αποτελέσματα παραμετρικού βηματισμού ως προς το μέγιστο ύψος της σταγόνας (z_{max}). Παρουσιάζεται επίσης το σχήμα της σταγόνας για κάποιες γωνίες επαφής. Παρατηρείται ότι για κάποιες γωνίες επαφής υπάρχουν παραπάνω από μία καταστάσεις ισορροπίας

5.4.5. Ενεργειακή ανάλυση – Ευστάθεια των λύσεων

Για να αποδειχθεί ότι η κατάσταση ισορροπίας των παραπάνω λύσεων (ΠΣΤ-5) μετατρέπεται σε ασταθείς μετά το σημείο στροφής στα διαγράμματα παραμετρικού βηματισμού (σχήματα 5.10), θα χρησιμοποιήσουμε υπολογισμούς ενέργειας στο σύστημα της σταγόνας.

Η ενέργεια του συστήματος της σταγόνας που διαβρέχει μια στερεή επιφάνεια υπολογίζεται ως εξής:

$$\hat{E}_{SYS} = \hat{\gamma}_{SL} \hat{A}_{SL} + \hat{\gamma}_{LV} \hat{A}_{LV} + \hat{\gamma}_{SV} \hat{A}_{SV}, \quad (5-56)$$

όπου:

\hat{A}_{LV} = εμβαδόν της διεπιφάνειας υγρού / αερίου = εμβαδόν ελεύθερης επιφάνειας της σταγόνας,

\hat{A}_{SL} = εμβαδόν της διεπιφάνειας στερεού / υγρού,

\hat{A}_{SV} = εμβαδόν της διεπιφάνειας στερεού / αερίου = $\hat{A}_{total} - \hat{A}_{SL}$,

με \hat{A}_{total} = ολικό εμβαδόν της στερεής επιφάνειας.

Τελικά, με διαίρεση της σχέσης (5-56) με το $\hat{\gamma}_{LV}$ και αδιαστατοποίηση καταλήγουμε σε:

$$\frac{\hat{E}_{SYS}}{\hat{\gamma}_{LV} \hat{R}_o^2} = A_{SL} \left(\frac{\hat{\gamma}_{SL} - \hat{\gamma}_{SV}}{\hat{\gamma}_{LV}} \right) + A_{LV} + \frac{\hat{\gamma}_{SV}}{\hat{\gamma}_{LV}} A_{total} \Leftrightarrow (\text{από τη σχέση 1-8})$$

$$\frac{\hat{E}_{SYS}}{\hat{\gamma}_{LV} \hat{R}_o^2} = -A_{SL} \cos(\theta_y) + A_{LV} + \frac{\hat{\gamma}_{SV}}{\hat{\gamma}_{LV}} A_{total}. \quad (5-57)$$

Από το διάγραμμα παραμετρικού βηματισμού του ΠΣΤ-5 (σχήμα 5.10) παρατηρούμε ότι για την ίδια γωνία επαφής μπορούν να υπάρχουν παραπάνω από μία καταστάσεις ισορροπίας της σταγόνας. Αυτές μπορεί να είναι τύπου *Wenzel*, τύπου *Cassie* ή *Ενδιάμεση* κατάσταση (βλ. Κεφάλαιο 1, παράγραφο 1.6.). Συγκεκριμένα:

Κατάσταση τύπου *Wenzel* παρουσιάζεται όταν η σταγόνα περικλείει ολόκληρο το μικροστόλο (βλ. σχήμα 5.9, για γωνία επαφής 90,8 μοίρες).

Κατάσταση τύπου *Cassie* παρουσιάζεται όταν το σημείο επαφής της σταγόνας με την στερεή επιφάνεια βρίσκεται στην κορυφή του μικροστόλου ή στο άνω τμήμα του κεκλιμένου επιπέδου της. (βλ. σχήμα 5.9, για γωνία επαφής 177,1 μοίρες).

Οι καταστάσεις αυτές αναφέρονται τύπου *Cassie* ή *Wenzel* διότι η στερεή επιφάνεια που χρησιμοποιείται περιλαμβάνει μόνο ένα μικροστόλο και δεν είναι μια τυπική τραχεία επιφάνεια με

επαναλαμβανόμενη μικροδομή, όπως προϋποθέτει ο κλασικός ορισμός τους.

Μεταξύ αυτών των δύο καταστάσεων παρουσιάζεται η *Ενδιάμεση* κατάσταση, όπου το σημείο επαφής της σταγόνας με την στερεή επιφάνεια βρίσκεται στο κάτω τμήμα του κεκλιμένου επιπέδου του μικροστύλου. (βλ. σχήμα 5.9, για γωνία επαφής 80,48 μοίρες). Το σημείο όπου η κλίση του κεκλιμένου επιπέδου γίνεται μέγιστη αποτελεί το διαχωριστικό όριο μεταξύ του άνω και κάτω τμήματος του.

Παρακάτω θα υπολογίσουμε τις διαφορές του όρου της ενέργειας προς την επιφανειακή τάση, μεταξύ των διαφορετικών αυτών καταστάσεων ισορροπίας:

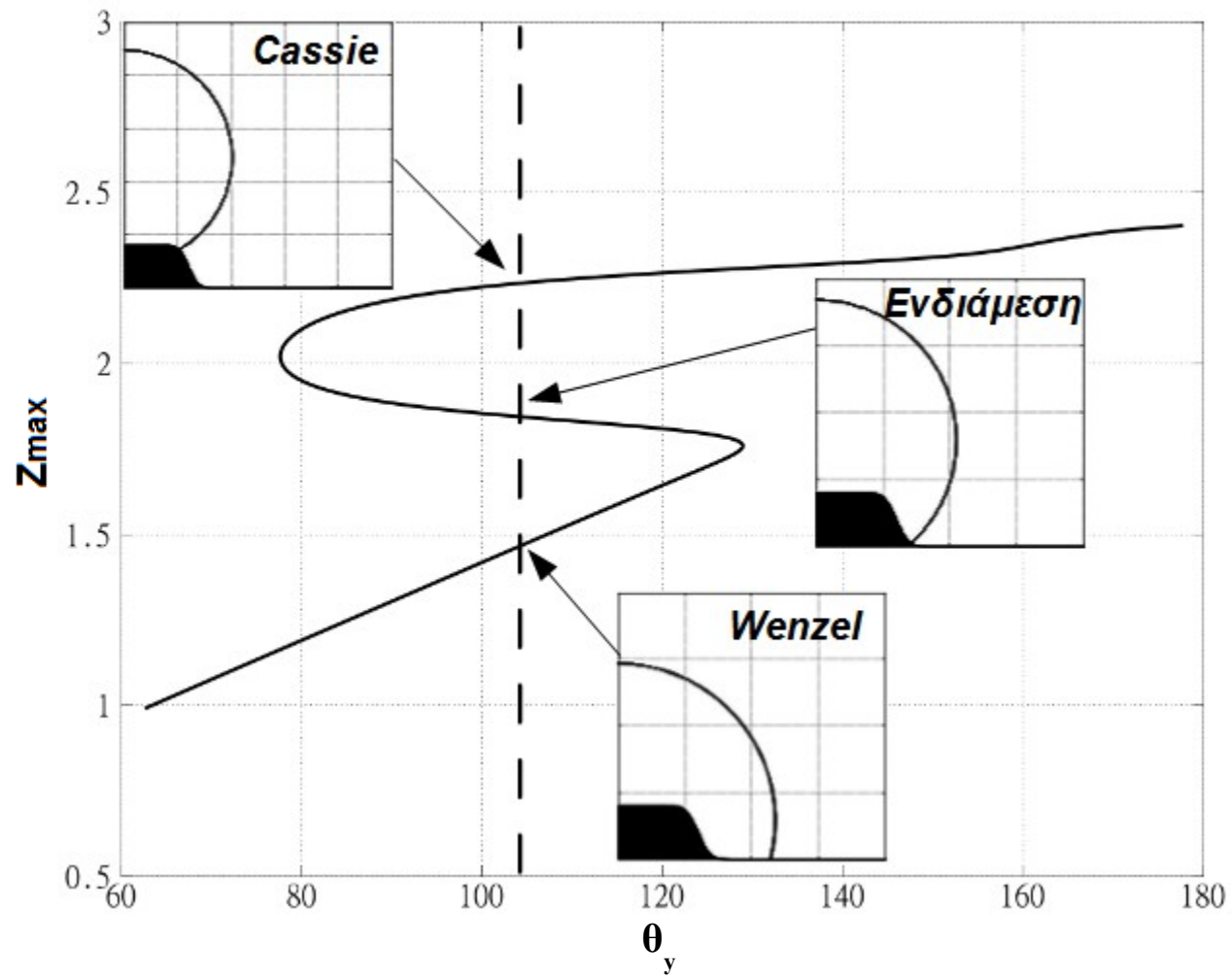
$$\left[\left(\frac{\hat{E}_{SYS}}{\hat{\gamma}_{LV} \hat{R}_o^2} \right)_{\text{Ενδιάμεση}} - \left(\frac{\hat{E}_{SYS}}{\hat{\gamma}_{LV} \hat{R}_o^2} \right)_{\text{Cassie}} \right]_{\theta_y}, \quad (5-58a)$$

$$\left[\left(\frac{\hat{E}_{SYS}}{\hat{\gamma}_{LV} \hat{R}_o^2} \right)_{\text{Ενδιάμεση}} - \left(\frac{\hat{E}_{SYS}}{\hat{\gamma}_{LV} \hat{R}_o^2} \right)_{\text{Wenzel}} \right]_{\theta_y}. \quad (5-58b)$$

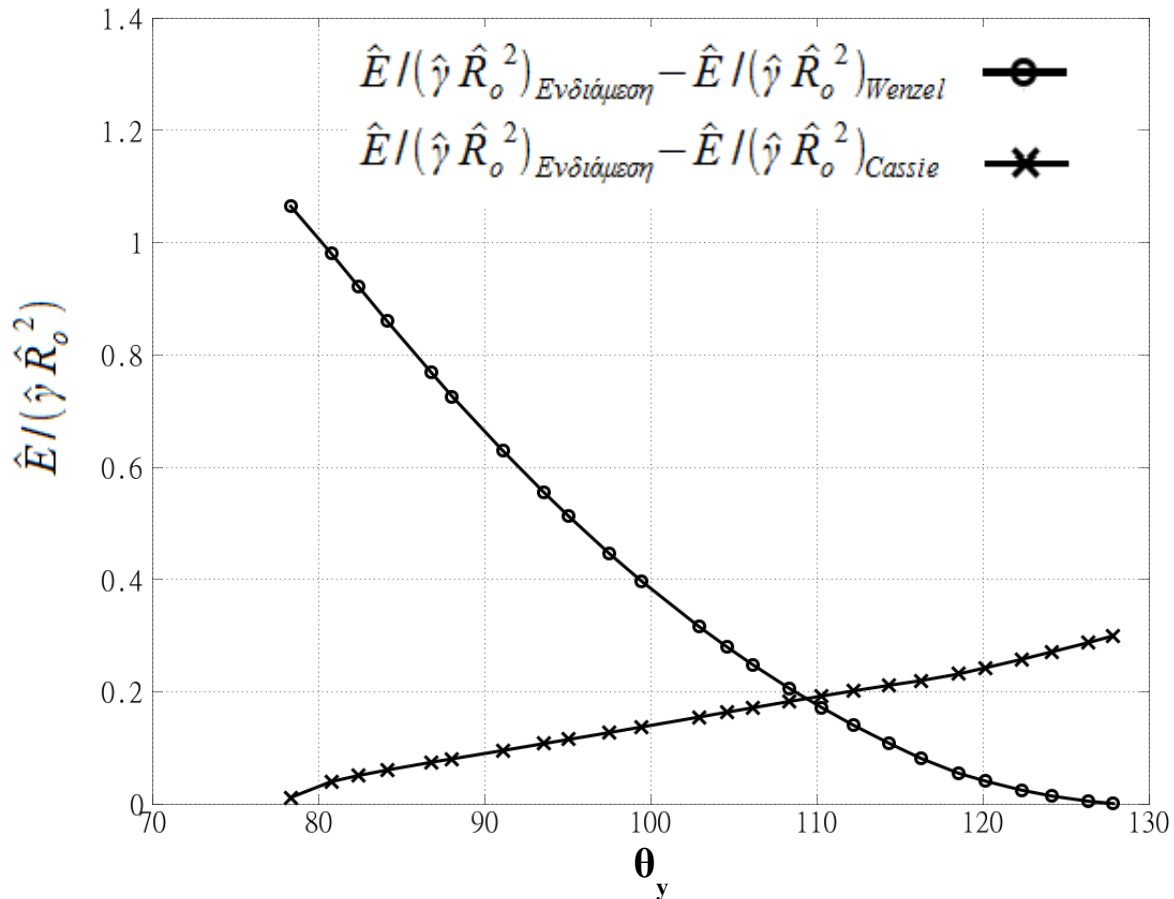
Με τον τρόπο αυτό Θέλουμε να δείξουμε ότι η ενέργεια των *Ενδιάμεσων* καταστάσεων είναι μεγαλύτερη από την αντίστοιχη των καταστάσεων τύπου *Cassie* και τύπου *Wenzel* για την ίδια γωνία επαφής. Η *Ενδιάμεση* κατάσταση δηλαδή να αποτελεί μια κατάσταση ασταθούς ισορροπίας, που δεν είναι παρατηρήσιμη στα πειράματα.

Για τον υπολογισμό του εμβαδού A_{LV} βλ. Παράρτημα Β, παράγραφο Β.2. Ο υπολογισμός του εμβαδού A_{SL} γίνεται χωρίζοντας το μικροστύλο σε τρία τμήματα. Δύο που περιέχουν τα οριζόντια επίπεδα πάνω και κάτω, και ένα που περιέχει το κεκλιμένο κομμάτι. Για τα δύο πρώτα τμήματα το εμβαδόν υπολογίζεται αθροίζοντας στοιχειώδεις κυκλικούς δακτυλίους ενώ για το κεκλιμένο τμήμα ο υπολογισμός γίνεται με τη μέθοδο των εμβαδών εκ περιστροφής. [Finney, Giordano 2005] Ο όρος $(\hat{\gamma}_{SV}/\hat{\gamma}_{LV}) A_{total}$ απαλείφεται στις διαφορές 5-58, άρα δεν χρειάζεται να υπολογιστεί το ολικό εμβαδόν.

Στο παρακάτω σχήμα (5.11) παρουσιάζεται η θέση και η μορφή των τριών καταστάσεων ισορροπίας για την ίδια γωνία επαφής πάνω στο διάγραμμα παραμετρικού βηματισμού. Η περιοχή των *Ενδιάμεσων* καταστάσεων των λύσεων εκτείνεται από το σημείο *A* έως το *B*. Ακόμα στο σχήμα 5.12 παρουσιάζεται οι αδιάστατες ενεργειακές διαφορές των καταστάσεων ισορροπίας (σχέσεις 5-58) σε συνάρτηση με την γωνία επαφής.



Σχήμα 5.11 – Τρεις καταστάσεις ισορροπίας για την ίδια γωνία επαφής (104,5 μοίρες) στο διάγραμμα παραμετρικού βηματισμού.



Σχήμα 5.12 – Ενεργειακές διαφορές μεταξύ των τριών διαφορετικών καταστάσεων ισορροπίας

Από τους υπολογισμούς που παρουσιάζονται στο σχήμα 5.12 συμπεραίνουμε ότι η *Ενδιάμεση* κατάσταση ισορροπίας έχει τη μέγιστη ενέργεια μεταξύ των άλλων καταστάσεων. Αυτό αποδεικνύει ότι η *Ενδιάμεση* κατάσταση είναι μια κατάσταση ασταθούς ισορροπίας όπου η ενέργεια παρουσιάζει τοπικό μέγιστο. Επίσης από το παραπάνω διάγραμμα βλέπουμε ότι σε μικρές γωνίες επαφής περισσότερο ευσταθής, μεταξύ *Wenzel* και *Cassie*, είναι η *Wenzel* διότι το σύστημα χρειάζεται περισσότερη ενέργεια για να “ξεφύγει” από την κατάσταση *Wenzel* και να μεταβεί στην αντίστοιχη κατάσταση *Cassie* ξεπερνώντας το ενεργειακό φράγμα της ασταθούς κατάστασης. Όμοια, σε μεγάλες γωνίες επαφής, περισσότερο ευσταθής είναι η κατάσταση *Cassie*. Ακόμα παρατηρείται ότι υπάρχει μια γωνία επαφής (≈ 109 μοίρες) όπου οι δύο καταστάσεις, *Wenzel* και *Cassie* είναι το ίδιο ευσταθείς, καθώς οι δύο καμπύλες τέμνονται, και η ενέργεια για να μεταβεί το σύστημα από την μια κατάσταση ισορροπίας στην άλλη είναι ίδια.

5.5. Πρόβλημα συνοριακών τιμών 6 (ΠΣΤ-6) – Ισορροπία σταγόνας σε τραχύ οριζόντιο επίπεδο

Το ΠΣΤ-6 επιλύεται παρόμοια με το ΠΣΤ-5 με τη μόνη διαφορά ότι η εξίσωση του επιπέδου που περιλαμβάνει ένα μικροστύλο αντικατασταθεί από την εξίσωση επιπέδου με τραχύτητα. Παρακάτω διατυπώνονται οι νέες εξισώσεις που επιλύονται:

5.5.1. Εξίσωση επιπέδου με τραχύτητα

Η εξίσωση που θα χρησιμοποιηθεί για να αναπαρασταθεί το τραχύ επίπεδο θα είναι η εξής:

$$z = \left[\frac{\sin(P_4 x)}{P_5} \right]^2, \quad (5-59)$$

όπου επιλέγονται οι σταθερές: $P_4=4$, $P_5=3$

Ουσιαστικά η επιφάνεια με τραχύτητα αναπαρίσταται από μια επιφάνεια με ομόκεντρους δακτυλίους.

5.5.2. Εξίσωση διατήρησης του όγκου

Από τη σχέση (5-33) προκύπτει:

$$\hat{V}_{droplet} = \hat{V}_{droplet\ augmented\ 1} + \hat{V}_{triangle} - \hat{V}_{surface}, \quad (5-60)$$

όπου:

$\hat{V}_{surface}$ = Ο όγκος εκ περιστροφής του χωρίου κάτω από την επιφάνεια του επιπέδου με τραχύτητα.

Από τη σχέση (5-60) με αδιαστατοποίηση (βλ. παράγραφο 5.4.2.) καταλήγουμε:

$$\int_0^{s\ max} u^3 \sin \theta \frac{d\theta}{ds} ds + \cos \theta_{max} u^3 |_{s=s\ max} \sin^2 \theta_{max} - 3 \int_0^{x\ max} x \left[\frac{\sin(P_4 x)}{P_5} \right]^2 dx = 2. \quad (5-61)$$

Η παραπάνω εξίσωση αποτελεί την αδιάστατη εξίσωση διατήρησης του όγκου για την περίπτωση που η αρχή του συστήματος συντεταγμένων βρίσκεται στο σημείο (0,0,0), δηλαδή δεν έχει μετατοπιστεί.

5.5.3. Σταθμισμένα υπόλοιπα Galerkin

5.5.3.1. Υπόλοιπα εξίσωσης Young-Laplace

Ως στοιχείο ολοκλήρωσης της εξίσωσης Young-Laplace θα χρησιμοποιηθεί το dS_{LVs} , ώστε να αποφευχθεί οποιοδήποτε πιθανό πρόβλημα ασυνέχειας. Τελικά, τα υπόλοιπα θα διαφέρουν από τα αντίστοιχα των σχέσεων (5-53) μόνο στον γεωμετρικό τρόπο υπολογισμού του όρου: $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$, δηλαδή στη σχέση (5-53e). Σημειώνεται ότι ο αναλυτικός τρόπος υπολογισμού του όρου $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ δεν επηρεάζεται από την αλλαγή του επιπέδου, όμως είναι απαραίτητος ο υπολογισμός της εκάστοτε παραγώγου f_x του επιπέδου.

Ο υπολογισμός του όρου $\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta$ με τον γεωμετρικό τρόπο γίνεται τώρα ως εξής:

Η γωνία που σχηματίζουν τώρα τα διανύσματα \vec{n} και \vec{e}_θ μπορεί να υπολογιστεί είτε ως: $\theta_r - \theta_y$, στην περίπτωση που $\theta_r > \theta_y$, είτε ως: $\theta_y - \theta_r$, στην περίπτωση που $\theta_r < \theta_y$. Αυτό διότι στη συγκεκριμένη γεωμετρία (με επίπεδο που περιέχει τριγωνομετρική συνάρτηση) μπορούν να εμφανιστούν περιπτώσεις όπου $\theta_r < \theta_y$, οι οποίες δεν ήταν εφικτές στην περίπτωση του συμμετρικού μικροστύλου. Άρα:

$$\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta \Big|_{s=s \max} = \cos(\theta_r - \theta_y), \quad (5-47)$$

για $\theta_r > \theta_y$ (βλ. παράγραφο 5.4.3.1.) και

$$\vec{n} \cdot \vec{e}_\theta \Big|_{s=s \max} = \cos(\theta_y - \theta_r), \quad (5-62)$$

για $\theta_r < \theta_y$.

Τελικά η σχέση (5-53e) από τα υπόλοιπα Galerkin παραμένει ίδια για $\theta_r > \theta_y$ ενώ για $\theta_r < \theta_y$ γίνεται:

$$R_{YL}^N = R_{arclength4} + u \sin \theta \arctan \left[\theta_y - a \cos \left[-\frac{f_x \cos \theta + \sin \theta}{\sqrt{f_x^2 + 1}} \right] \right] \Big|_{s=s \max}. \quad (5-63)$$

5.5.3.2. Υπόλοιπα εξίσωσης διατήρησης του όγκου και εξίσωσης του επιπέδου με τραχύτητα

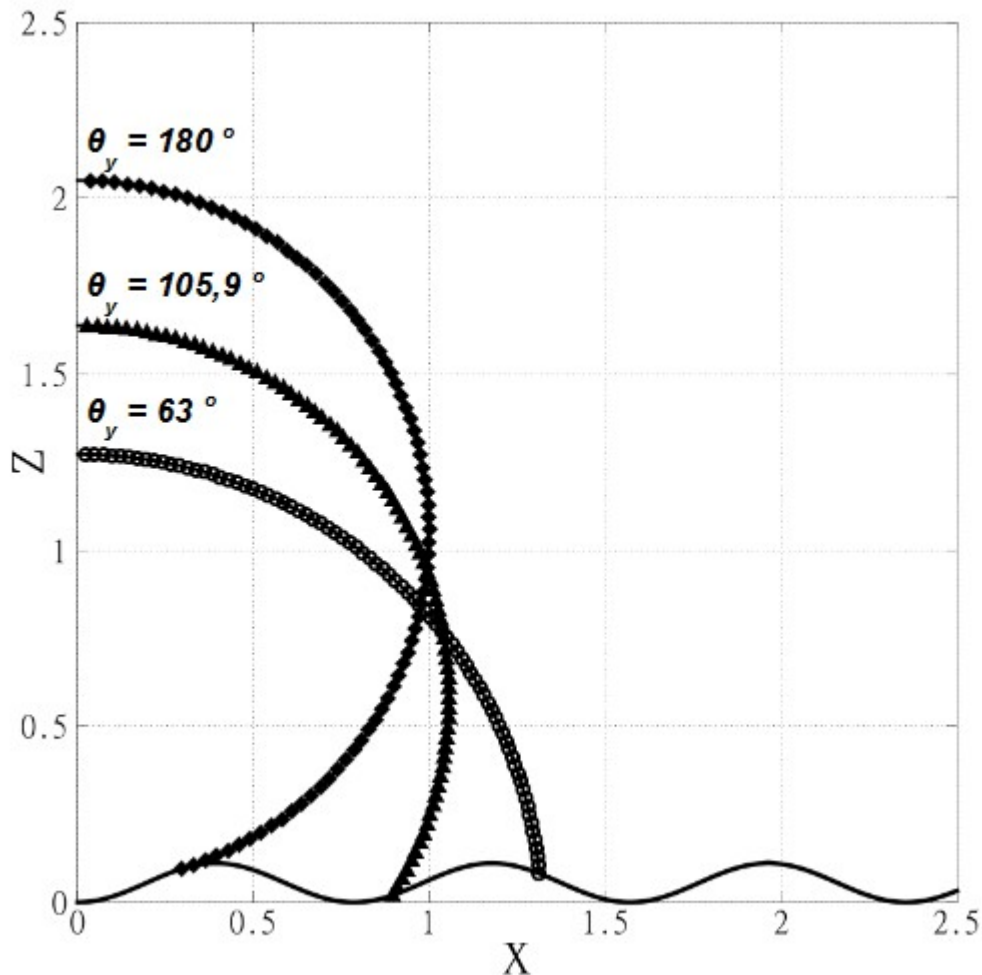
Τα υπόλοιπα της εξίσωσης διατήρησης του όγκου και της εξίσωσης του επιπέδου με τραχύτητα προκύπτουν από τις εξισώσεις (5-61) και (5-59) εφαρμόζοντας αντίστοιχες πράξεις (βλ. παραγράφους 5.4.3.2. και 5.4.3.1.):

$$R_v = \int_0^{s_{max}} u^3 \sin(\theta) \frac{d\theta}{ds} ds + \cos \theta_{max} u^3 \Big|_{s=s_{max}} \sin^2 \theta_{max} - 3 \int_0^{x_{max}} x \left[\frac{\sin(P_4 x)}{P_5} \right]^2 dx - 2, \quad (5-64)$$

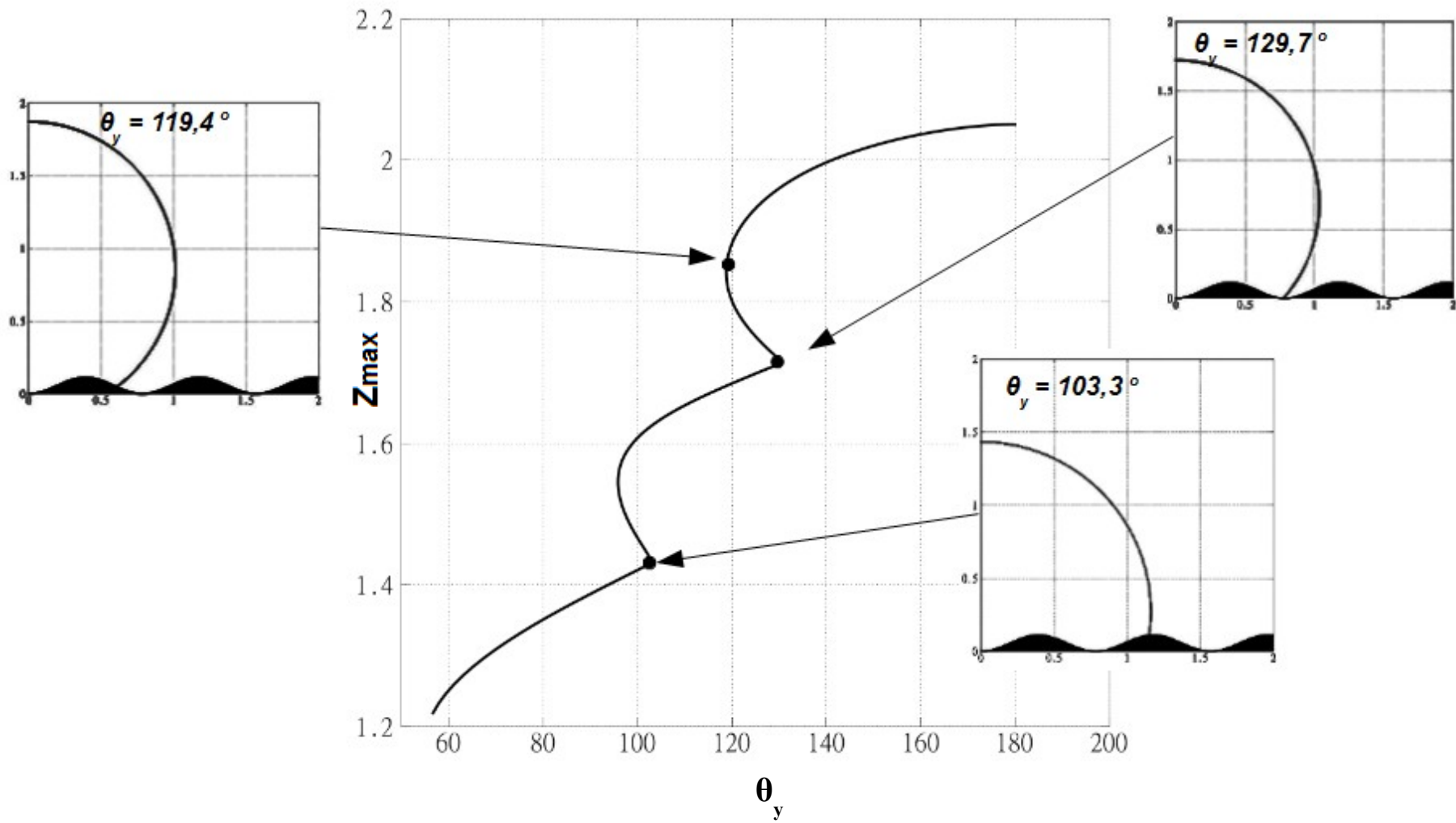
$$R_s = u \cos \theta \Big|_{s=s_{max}} - \left[\frac{\sin(P_4 u \sin \theta)}{P_5} \right]^2 \Big|_{s=s_{max}}. \quad (5-65)$$

5.5.4. Αποτελέσματα υπολογισμών ΠΣΤ-6

Στο παρακάτω σχήματα (5.13), (5.14) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των υπολογισμών για το ΠΣΤ-6 για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y) της σταγόνας με το οριζόντιο επίπεδο, καθώς και τα αποτελέσματα που παραμετρικού βηματισμού με την μέθοδο Keller, με παράμετρο τη γωνία επαφής (θ_y). Στα αποτελέσματα αυτά δεν έχει ληφθεί υπόψιν η επίδραση της βαρύτητας. Το πλέγμα του χωρίου D αποτελείται από 80 στοιχεία.



Σχήμα 5.13 – Αποτελέσματα υπολογισμών για το ΠΣΤ-6 (ισορροπία σταγόνας σε τραχύ επίπεδο με παραμετροποίηση μήκους-τόξου) για διάφορες γωνίες επαφής (θ_y)



Σχήμα 5.14– Αποτελέσματα παραμετρικού βηματισμού ως προς το μέγιστο ύψος της σταγόνας (z_{max})

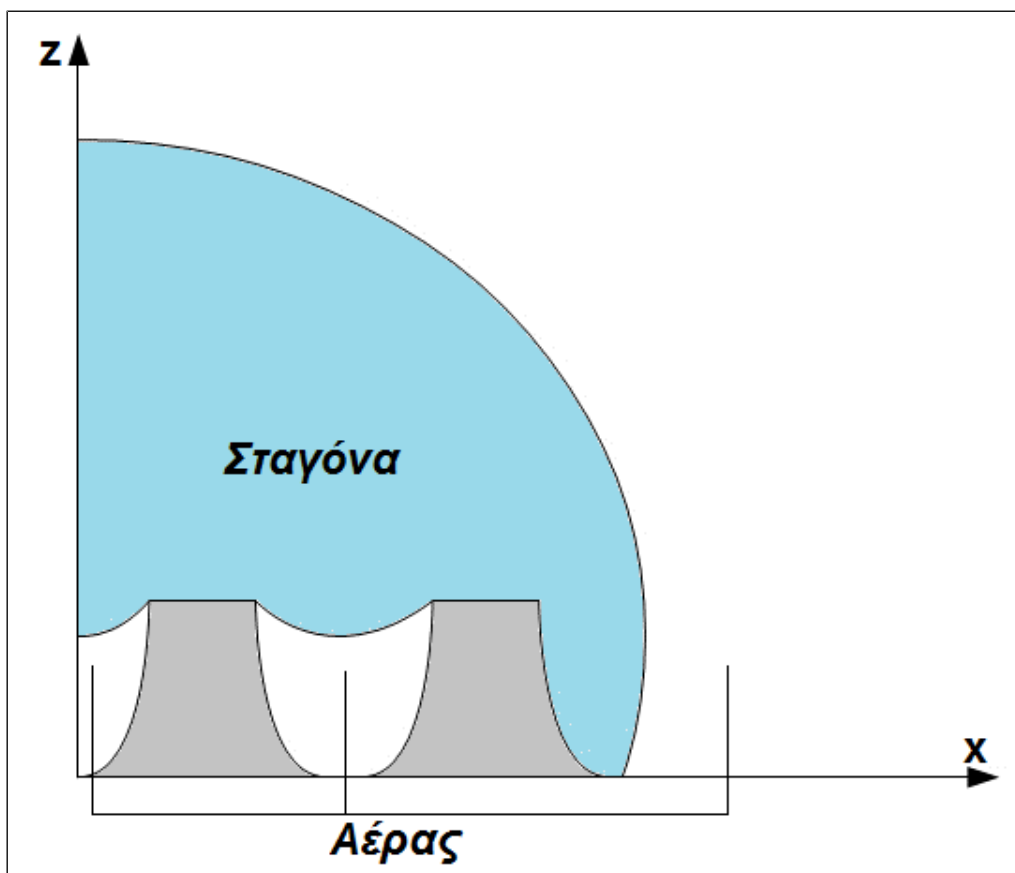
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6:

ΤΡΕΧΟΥΣΑ ΕΡΕΥΝΑ – ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η χρήση μιας τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace όπου θα διέπει την ισορροπία τόσο της διεπιφάνειας υγρού / αέρα όσο και της διεπιφάνειας στερεού / υγρού. Ακόμα αναφέρονται οι προοπτικές επίλυσης του προβλήματος σε διδιάστο χωρίο, καθώς επίσης τα πλεονεκτήματα, και τις δυσκολίες που μπορούν να εμφανιστούν.

6.1. Τροποποιημένη εξίσωση Young-Laplace

Στην ανάλυση που προηγήθηκε, το πρόβλημα της ισορροπίας σταγόνας πάνω σε στερεή επιφάνεια αντιμετωπίστηκε λύνοντας την εξίσωση Young-Laplace για τη διεπιφάνεια υγρού / αέρα μέχρι και το σημείο όπου συναντιούνται η αέρια, η υγρή και η στερεή φάση. Στο σημείο αυτό εφαρμόζονταν η συνοριακή συνθήκη της γωνίας επαφής (θ_y). Αυτή η προσέγγιση είναι προβληματική στις περιπτώσεις όπου υπάρχουν περισσότερα από ένα σημεία που συναντώνται η στερεή, η υγρή και η αέρια φάση (σχήμα 6.1).

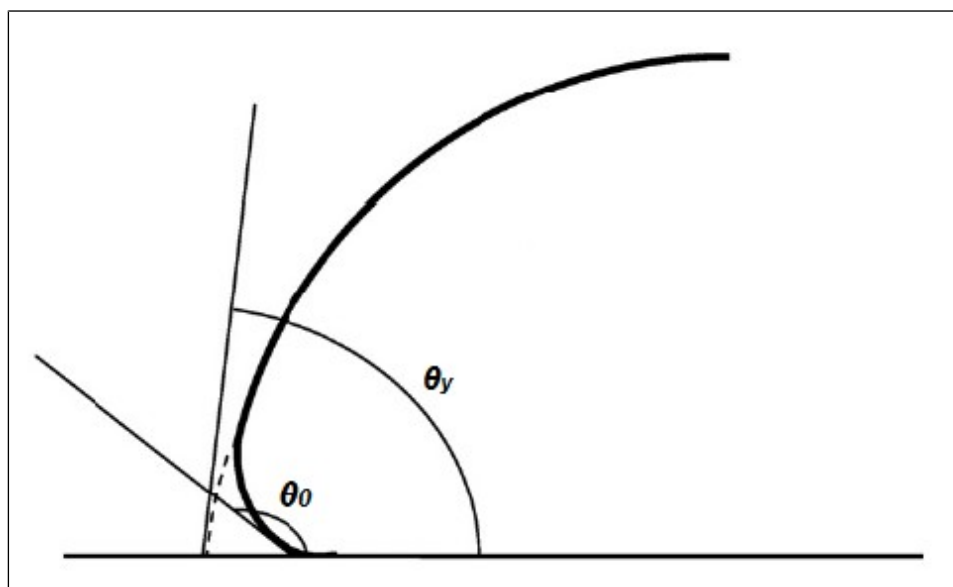


Σχήμα 6.1 – Κατάσταση όπου υπάρχουν περισσότερα από ένα σημεία που συναντώνται η στερεή, η υγρή και η αέρια φάση

Πρέπει λοιπόν να αναζητηθεί μια μέθοδος όπου η εξίσωση Young-Laplace θα επιλύεται και στις δύο περιοχές διεπιφανειών: υγρού / αέρα, υγρού / στερεού, καθώς και στα σημεία όπου συναντώνται η στερεή, η υγρή και η αέρια φάση, χωρίς να επιβάλλεται εκεί η γωνία επαφής ως τελική συνοριακή συνθήκη. Η επιβολή άλλωστε μιας γωνίας επαφής αποτελεί μια τεχνητή μακροσκοπική συνθήκη η οποία, όπως θα δούμε παρακάτω, παύει να ισχύει σε μικρές κλίμακες.

6.1.1. Μικροσκοπική γωνία επαφής

Η γωνία επαφής (θ_y) όπως αναφέρθηκε σε κεφάλαιο 1 (βλ. παράγραφο 1.3.2.) αποτελεί μια παρατηρήσιμη ποσότητα και μπορεί να αναφερθεί ως μακροσκοπική ή φαινόμενη γωνία επαφής. Στην περιοχή όμως πολύ κοντά στην στερεή επιφάνεια (σε απόσταση 10-30 Å), παρουσιάζεται μια μεγάλη μεταβολή στην καμπυλότητα της διεπιφάνειας της σταγόνας. Αυτή η μεταβολή οφείλεται στην απότομη διαφοροποίηση των διαμοριακών δυνάμεων μεταξύ υγρού / στερεού, έχοντας ως αποτέλεσμα το σχήμα της σταγόνας να μην είναι πλέον σφαιρικό σε αυτήν την περιοχή. Αυτό συνεπάγεται την ύπαρξη μια μικροσκοπικής γωνίας (θ_0), η οποία λόγω του μικρού μεγέθους της εξεταζόμενης περιοχής είναι πρακτικά μη ανιχνεύσιμη σε μακροσκοπικά πειράματα (σχήμα 6.2). [Ruckenstein & Berim 2010]. Παρακάτω θα δούμε ότι χρησιμοποιώντας μια τροποποιημένη μορφή της εξίσωσης Young-Laplace και επιλύοντας της και στην διεπιφάνεια στερεού / υγρού, εμφανίζεται η μικροσκοπική γωνία επαφής και παράλληλα αποφεύγεται η εφαρμογή της συνοριακής συνθήκης της μακροσκοπικής γωνίας επαφής.



Σχήμα 6.2 – Μακροσκοπική (φαινόμενη) γωνία επαφής (θ_y) και μικροσκοπική γωνία επαφής (θ_0)

6.1.2. Επίλυση ΠΣΤ με τροποποιημένη εξίσωση Young-Laplace

Στη βιβλιογραφία υπάρχουν αρκετές αναφορές για χρήση επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace. [DasGurta et al. 1993] Στη δική μας περίπτωση θα χρησιμοποιήσουμε την εξής μορφή:

$$\hat{\Delta}p = \hat{\gamma}(z_v)\hat{C} + \hat{g}\hat{\Delta}\rho\hat{z}. \quad (6-1)$$

Η διαφορά με την αρχική εξίσωση (βλ. Κεφάλαιο 3, παράγραφο 3.2.1.) βρίσκεται στον όρο της διεπιφανειακής τάσης γ , όπου τώρα είναι μια συνάρτηση που εξαρτάται από της κατακόρυφη απόσταση από τη στερεή επιφάνεια (z_v). Όταν χρησιμοποιείται ως στερεή επιφάνεια το οριζόντιο επίπεδο τότε: $z_v = z$. Από την εξίσωση (6-1) με αδιαστατοποίηση προκύπτει:

$$\frac{(\Delta p / \hat{p}_c)\hat{R}_0}{\gamma(z_v)/\hat{\gamma}_{LV}} = C + \frac{(g \Delta p / \hat{g}_c \hat{p}_c)z \hat{R}_0^2}{\gamma(z_v)/\hat{\gamma}_{LV}} \text{ και ορίζοντας:}$$

$$\hat{\gamma}_{LV} = \hat{p}_c \hat{R}_0, \quad (6-2)$$

$$\hat{p}_c = \frac{\hat{p}_c}{\hat{g}_c \hat{R}_0}, \quad (6-3)$$

όπου: \hat{p}_c, \hat{g}_c = σταθερές αδιαστατοποίησης για την πίεση και την επιτάχυνση της βαρύτητας αντίστοιχα.

Τελικά καταλήγουμε στην αδιάστατη μορφή της τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace:

$$\frac{\Delta p}{\gamma(z_v)} = C + \frac{g \Delta p z}{\gamma(z_v)}. \quad (6-4)$$

Η μορφή που έχει η συνάρτηση της επιφανειακής τάσης είναι:

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}(z_v) &= \hat{\gamma}_{LV} + LJ(z_v)(\hat{\gamma}_{LV} - \hat{\gamma}_{LVS}) \Leftrightarrow \\ \gamma(z_v) &= 1 + LJ(z_v)\left(1 - \frac{\hat{\gamma}_{LVS}}{\hat{\gamma}_{LV}}\right), \end{aligned} \quad (6-5)$$

όπου: LJ = μια τροποποιημένη συνάρτηση δυναμικού Lennard-Jones:

$$LJ(z_v) = 4 e \left[\left(\frac{\sigma}{z_v} \right)^4 - \left(\frac{\sigma}{z_v} \right)^2 \right]. \quad (6-6)$$

Οι παράμετροι e, σ έχουν οριστεί ώστε $\gamma(z_v) \geq 0$ για $0 \leq \frac{\hat{\gamma}_{LVS}}{\hat{\gamma}_{LV}} \leq 1$. Επίσης, ο όρος $\hat{\gamma}_{LVS}$ αντιστοιχίζεται στην τιμή της διεπιφανειακής τάσης στο τριπλό σημείο όπου συναντώνται η υγρή, η

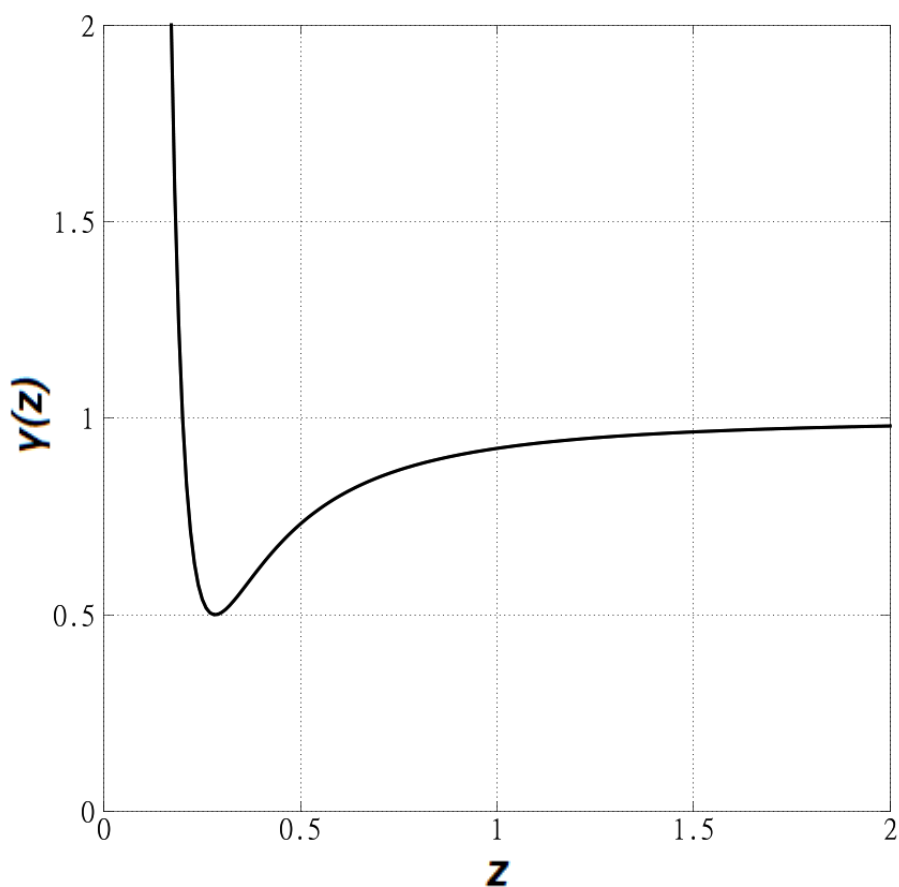
αέρια και η στερεή φάση. Το γεγονός ότι ο λόγος $\frac{\hat{\gamma}_{LVS}}{\hat{\gamma}_{LV}}$ παίρνει τιμές μεταξύ του μηδέν και του ένα, είναι αυθαίρετα ορισμένο. Η χρήση της συνάρτησης Lennard-Jones δικαιολογείται διότι κοντά στο σημείο επαφής της σταγόνας με το επίπεδο, θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση των μορίων του υγρού με αυτά του στερεού έχει τη μορφή μοριακού δυναμικού. Τελικά, αναλύοντας τη συνάρτηση του γ (σχέση 6-5) βλέπουμε ότι:

$\gamma = 1$ στα σχετικά σημεία μακριά από τη στερεή επιφάνεια,

$\gamma = \hat{\gamma}_{LVS} / \hat{\gamma}_{LV}$ στα σημεία σχετικά κοντά στην στερεή επιφάνεια και

$\gamma = \infty$ στα σημεία πάνω στην στερεή επιφάνεια.

Το πόσο κοντά στην στερεή επιφάνεια παρατηρείται η μεταβολή του γ , εξαρτάται από τη σταθερά σ της συνάρτησης Lennard-Jones (σχέση 6-6). Η μορφή αυτής της συνάρτησης της επιφανειακής τάσης ($\gamma(z)$), σε συνάρτηση με την κατακόρυφη απόσταση z , φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 6.3) για $e = 1$, $\sigma = 0,2$ και $\hat{\gamma}_{LVS} / \hat{\gamma}_{LV} = 0,5$.



Σχήμα 6.3 – σχηματική αναπαράσταση της συνάρτησης επιφανειακής τάσης $\gamma(z)$ για: $\hat{\gamma}_{LVS} / \hat{\gamma}_{LV} = 0,5$

Το παραπάνω πρόβλημα επιλύεται χρησιμοποιώντας τα υπόλοιπα της εξίσωσης διατήρησης του

όγκου (σχέση 5-29), της εξίσωσης μήκους-τόξου (σχέση 5-28), της εξίσωσης οριζόντιου επιπέδου (σχέση 5-29) και της τροποποιημένης εξίσωσης Young-Laplace (σχέση 6-4) ολοκληρώνοντας την στο dS_{LVs} , σε παραμετροποίηση μήκους-τόξου (βλ. Κεφάλαιο 5). Όσον αφορά τις συνοριακές συνθήκες, χρησιμοποιείται η συνθήκη Neumann για τη Young-Laplace (σχέση 5-9) αλλά αποφεύγεται να εφαρμοστεί η συνθήκη Robin, όπου υποδηλώνεται η γωνία επαφής. Τη θέση της παίρνει άλλη μια συνθήκη Neumann που εκφράζει την αξονική συμμετρία στο κατώτερο σημείο της σταγόνας:

$$\frac{du}{d\theta} = 0, \quad (6-7)$$

στο $s = s_{max}$.

Το γεγονός όμως ότι η εξίσωση Young-Laplace υπόκειται μόνο σε περιορισμούς από συνθήκες Neumann (σχέσεις 5-9 και 6-7) κάνει πιθανή την εμφάνιση πολλαπλών λύσεων. Για το λόγο αυτό εισάγουμε επιπλέον την εξής συνθήκη dirichlet:

$$u(s) = 0, \quad (6-8)$$

στο $s = s_{max}$.

Ακόμα, για την επίλυση του προβλήματος εφαρμόζεται κανονικά και η συνθήκη dirichlet για την εξίσωση μήκους-τόξου (σχέση 5-11). Οι άγνωστες μεταβλητές του συγκεκριμένου προβλήματος είναι τώρα οι: $\Delta p, u(s), \theta(s), s_{max}$.

6.1.3. Αποτελέσματα

Η παράμετρος που θα χρησιμοποιηθεί για να ρυθμιστεί η μακροσκοπική γωνία επαφής είναι τώρα ο όρος γ_{LVs}/γ_{LV} . Βλέπουμε όμως ότι η μέθοδος Newton-Raphson αποκλίνει για $\gamma_{LVs}/\gamma_{LV} \neq 1$. Δηλαδή μπορεί να επιτευχθεί μόνο τη λύση για γωνία επαφής 180 μοίρες. Για να αντιμετωπιστεί αυτό το πρόβλημα χρησιμοποιείται ένας επιπλέον όρος στην εξίσωση Young-Laplace που θα βοηθήσει στην σύγκλιση. Αυτός ο όρος θα έχει τη μορφή τοπικής “ψεύδο-βαρύτητας”, δηλαδή θα είναι ένας αδιάστατος όρος βαρύτητας που θα ενεργοποιείται μόνο σε μια συγκεκριμένη περιοχή της σταγόνας – κοντά στα σημεία επαφής της με το στερεό. Ο βοηθητικός αυτός όρος της “ψεύδο-βαρύτητας” (Ps_g) έχει τη μορφή:

$$Ps_g(z_v) = [1 - cum(z_v)] Ps_{con} z_v, \quad (6-9)$$

όπου:

Ps_{con} = αδιάστατη σταθερά – υποδηλώνει την ένταση του όρου της “ψεύδο-βαρύτητας”,

$cum(z_v)$ = αθροιστική συνάρτηση κανονικής κατανομής,

$$cum(z_v) = \frac{1}{2} \left[1 + erf \left(\frac{z_v - \mu}{\sqrt{2\sigma_c^2}} \right) \right], \quad (6-10)$$

μ, σ_c = σταθερές που καθορίζουν την μορφή της αθροιστικής συνάρτησης κανονικής κατανομής.

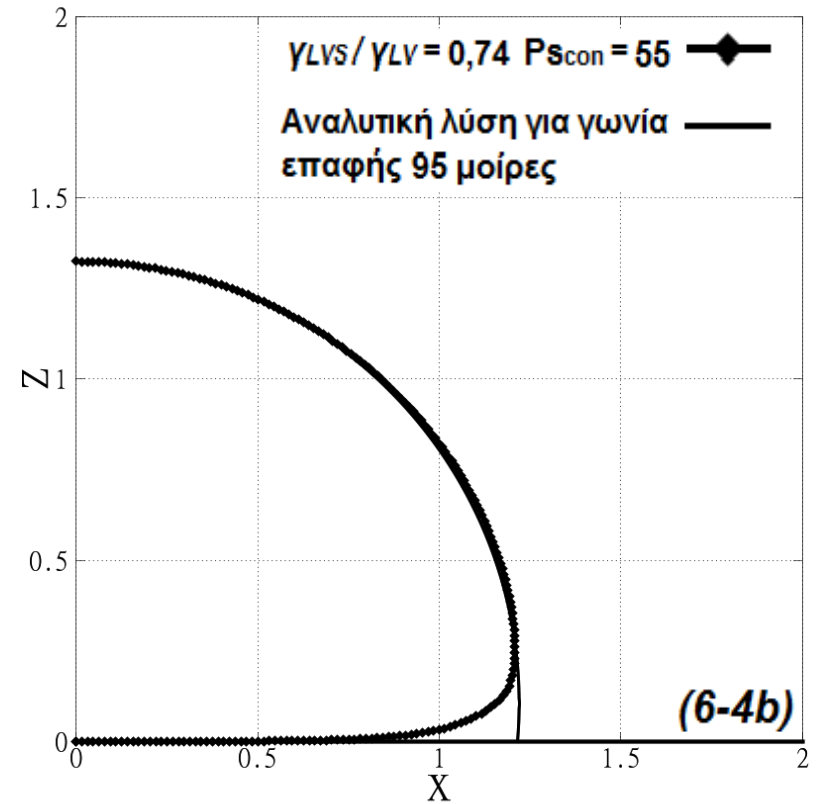
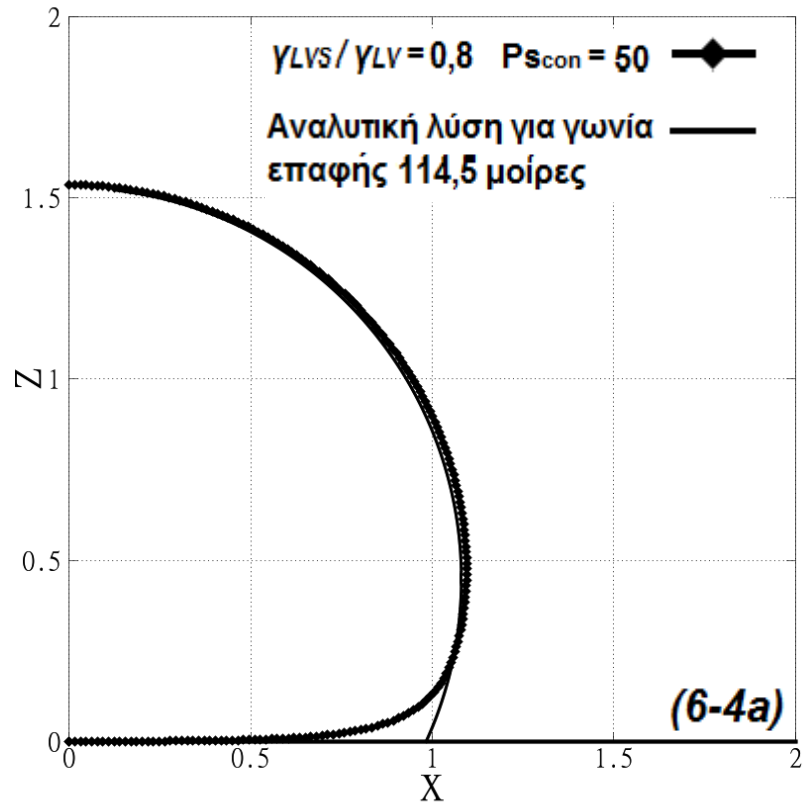
Η αθροιστική συνάρτηση κανονικής κατανομής χρησιμοποιείται διότι έχει την ιδιότητα να μεταβάλλει την τιμή της από μηδέν σε ένα με ομαλό τρόπο – έτσι ο βοηθητικός όρος (σχέση 6-9) ενεργοποιείται μόνο σε ορισμένο σημείο του χωρίου. Οι σταθερές της αθροιστικής συνάρτησης κανονικής κατανομής επιλέγονται: $\mu=0,1, \sigma_c=0,03$.

Τελικά η εξίσωση Young-Laplace που επιλύεται έχει την εξής επαυξημένη μορφή (σχέση 6-11). Ακόμα στους υπολογισμούς που κάνουμε δεν λαμβάνουμε υπόψιν μας την επίδραση της κανονικής βαρύτητας:

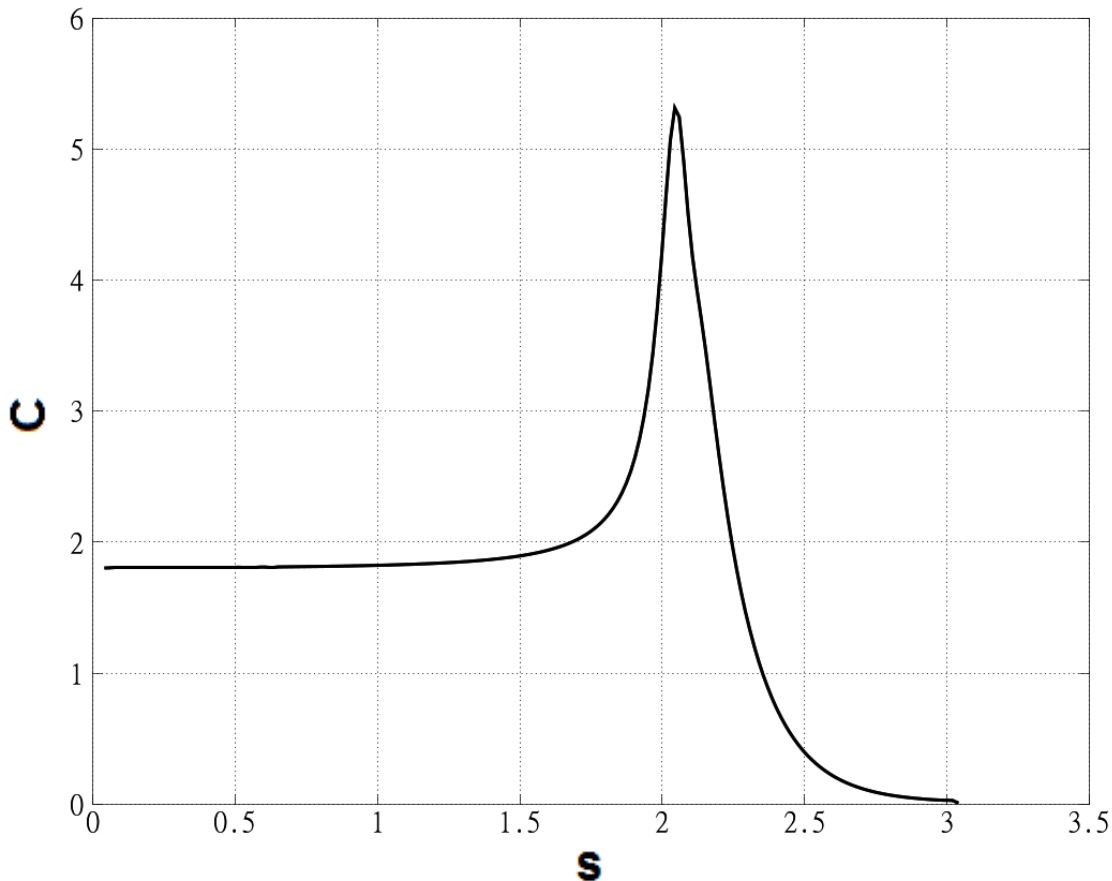
$$\frac{\Delta p}{\gamma(z_v)} = C + \frac{g \Delta \rho z}{\gamma(z_v)} + cum(z_v) Ps_{con} z_v. \quad (6-11)$$

Από τη σχέση αυτή συμπεραίνουμε ότι τώρα οι παράμετροι που χρησιμοποιούνται για να ρυθμιστεί η μακροσκοπική γωνία επαφής είναι, εκτός από τον όρο γ_{LVs}/γ_{LV} , και ο όρος Ps_{con} . Όπως θα δούμε ο κάθε ένας από τους δύο αυτούς όρους εκφράζει μια αντίθετη δράση – η σχετική αναλογία μεταξύ τους ρυθμίζει τελικά την μακροσκοπική γωνία επαφής της σταγόνας (θ_y).

Παρακάτω, στα σχήματα 6.4, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του προβλήματος ισορροπίας της σταγόνας σε λείο οριζόντιο επίπεδο, με τη χρήση της τροποποιημένης-επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace (σχέση 6-11), χωρίς την επίδραση της βαρύτητας. Στα ίδια διαγράμματα αναπαρίστανται και οι αναλυτικές λύσεις του προβλήματος (βλ. Κεφάλαιο 1, παράγραφο 1.5.) που “ταιριάζουν” καλύτερα με τα υπολογιστικά αποτελέσματα. Ακόμα στο σχήμα 6.5 παρουσιάζεται και η μεταβολή της καμπυλότητας (C) της διεπιφάνειας της σταγόνας σε συνάρτηση με το μήκος-τόξου (s) της διεπιφάνειας για την περίπτωση της λύσης (6-4a). Σημειώνεται ότι η μέτρηση του μήκος-τόξου της διεπιφάνειας ξεκινάει από την κορυφή της σταγόνας (βλ. Κεφάλαιο 5, σχήμα 5.1). Για την επίλυση αυτών των προβλημάτων χρησιμοποιείται πλέγμα με 200 στοιχεία. Παρατηρούμε ότι ο βοηθητικός όρος της “ψεύδο-βαρύτητας” θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί στην αρχή, βοηθώντας στη σύγκλιση, και ύστερα να απαλειφθεί σταδιακά από την εξίσωση Young-Laplace. Αυτό δεν ήταν δυνατόν να γίνει χωρίς να πάρουμε “αφύσικες”-λανθασμένες λύσεις. Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ίσως η τροποποιημένη εξίσωση Young-Laplace να χρειάζεται αναθεώρηση.



Σχήματα 6.4 - αποτελέσματα του προβλήματος ισορροπίας της σταγόνας σε λείο οριζόντιο επίπεδο, με τη χρήση της τροποποιημένης-επαυξημένης εξίσωσης Young-Laplace. Αναλυτικά στο σχήμα 6.4a χρησιμοποιούνται ως τιμές παραμέτρων: $\hat{\gamma}_{LVS}/\hat{\gamma}_{LV} = 0,8$, $Ps_{con} = 50$. Η λύση αυτή “ταιριάζει” αρκετά καλά με την αναλυτική λύση του προβλήματος για γωνία επαφής 114,5 μοίρες. Ακόμα στο σχήμα 6.4b χρησιμοποιούνται ως τιμές παραμέτρων: $\hat{\gamma}_{LVS}/\hat{\gamma}_{LV} = 0,74$, $Ps_{con} = 55$. Η λύση τώρα “ταιριάζει” αρκετά καλά με την αναλυτική λύση του προβλήματος για γωνία επαφής 95 μοίρες.



Σχήμα 6.5 – μεταβολή της καμπυλότητας (C) της διεπιφάνειας της σταγόνας σε συνάρτηση με το μήκος-τόξου (s) της διεπιφάνειας για την περίπτωση της λύσης (6-4a)

Από το σχήμα 6.5 παρατηρούμε ότι η καμπυλότητα της σταγόνας μεταβάλλεται απότομα και φθάνει σε ένα μέγιστο κοντά στη σημείο επαφής της σταγόνας με την στερεή επιφάνεια. Ύστερα, καταλήγει στο μηδέν, στα σημεία πάνω στην στερεή επιφάνεια. Η μέγιστη τιμή που εμφανίζει η καμπυλότητα μπορούμε να πούμε ότι είναι αντιστρόφως ανάλογη της τιμής της παραμέτρου $\hat{\gamma}_{LVs}/\hat{\gamma}_{LV}$. Τελικά, μείωση του λόγου $\hat{\gamma}_{LVs}/\hat{\gamma}_{LV}$, και συνεπώς η αύξηση της μέγιστης τιμής της καμπυλότητας, βλέπουμε ότι έχει ως αποτέλεσμα την μείωση της μακροσκοπικής γωνίας επαφής (θ_y) της σταγόνας με την στερεή επιφάνεια.

6.2. Επίλυση ΠΣΤ σε διδιάστατο χωρίο

Η υπόθεση της αξονικής συμμετρίας, γύρω από τον άξονα z , που χρησιμοποιήθηκε σε όλες τις προηγούμενες περιπτώσεις μας δίνει το πλεονέκτημα του υπολογιστικά “φθηνότερου προβλήματος”, αλλά αποκλείει την ύπαρξη ασύμμετρων λύσεων, οι οποίες είναι και πιο κοντά στην

πραγματικότητα. Κατά την επίλυση ενός ΠΣΤ σε διδιάστατο χωρίο, θα χρειαστούμε δύο ανεξάρτητες μεταβλητές:

- Στην περίπτωση της κυλινδρικής παραμετροποίησης θα είναι οι z, φ του κυλινδρικού συστήματος συντεταγμένων.
- Στην περίπτωση της σφαιρικής παραμετροποίησης θα είναι οι θ, φ του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων.
- Στην περίπτωση της παραμετροποίησης μήκους-τόξου θα είναι το μήκος-τόξου s και η γωνία φ των σφαιρικών συντεταγμένων.

Η χρήση δύο ανεξάρτητων μεταβλητών θα επιφέρει αλλαγή στην εξίσωση Young-Laplace καθώς θα αλλάξει η μορφή της καμπυλότητας της διεπιφάνειας. Ακόμα, λόγω του πολλαπλάσιου αριθμού αγνώστων της νέας εξίσωσης, θα χρειαστεί η υιοθέτηση μιας πιο γρήγορης μεθόδου επίλυσης από την μέθοδο απαλοιφής Gauss, όπως Frontal ή GMRES. [Barrett et al. 1994]

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7:

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Από τους υπολογισμούς διαβροχής στερεής οριζόντιας επιφάνειας από σταγόνα σε κυλινδρική παραμετροποίηση (ΠΣΤ-1), προκύπτει το εξής συμπέρασμα:

- Η μείωση της πυκνότητας των πλεγματικών σημείων που προβάλλονται στην καμπύλη της λύσης αποτελεί μειονέκτημα στην ακρίβεια της λύσης. Η αραίωση αυτή οφείλεται στο ότι οι κόμβοι διακριτοποίησης στο χωρίο επίλυσης του ΠΣΤ απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση z_i . Για μικρό πλήθος κόμβων η διαφορά με την αναλυτική λύση είναι μεγάλη, ενώ ακόμα και με μεγάλο πλήθος κόμβων το πρόβλημα δεν εξαλείφεται.

Στην συνέχεια από τα υπολογιστικά παραδείγματα που έγιναν σε σφαιρική παραμετροποίηση (ΠΣΤ 2 και 3) προκύπτουν τα εξής:

- Το πρόβλημα της μείωσης της πυκνότητας των πλεγματικών σημείων παραμένει και σε αυτήν την παραμετροποίηση. Αυτό τώρα οφείλεται στο ότι οι κόμβοι διακριτοποίησης στο χωρίο επίλυσης του ΠΣΤ απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση θ_i . Παρατηρείται όμως ότι η σφαιρική παραμετροποίηση εμφανίζει περισσότερο ακριβή αποτελέσματα σε σχέση με την κυλινδρική, καθώς αραίωση των πλεγματικών σημείων δεν είναι τόσο έντονη. Ακόμα καθώς ο αριθμός των κόμβων αυξάνεται, η ακρίβεια των λύσεων βελτιώνεται αισθητά.
- Μια ανεξάρτητη μεταβλητή η οποία δεν ορίζεται μονότονα κατά μήκος της λύσης σε κάποιες γεωμετρίες στερεών επιφανειών, εμποδίζει τη σύγκλιση του προβλήματος. Τέτοια παραδείγματα είναι ο ορισμός της γωνίας θ ως ανεξάρτητη μεταβλητή στη σφαιρική παραμετροποίηση και ο ορισμός της κατακόρυφης απόστασης z ως ανεξάρτητη μεταβλητή στη κυλινδρική παραμετροποίηση. Έτσι, σε συγκεκριμένες γεωμετρίες, μπορεί να εμφανιστούν δύο διαφορετικές τιμές των εξαρτημένων μεταβλητών για την ίδια τιμή των ανεξάρτητων μεταβλητών. Για να αποφευχθεί αυτό θα πρέπει είτε να χρησιμοποιηθεί ως ανεξάρτητη μεταβλητή το μήκος-τόξου (s) της διεπιφάνειας της σταγόνας, δηλαδή να προσφύγουμε στην παραμετροποίηση μήκους-τόξου, είτε να μεταφερθεί η αρχή του συστήματος συντεταγμένων κατάλληλα ώστε να αποφύγουμε το πρόβλημα.

Ακόμη, από τα υπολογιστικά παραδείγματα σε παραμετροποίηση μήκους-τόξου (ΠΣΤ 4, 5, 6) παρατηρούμε τα εξής:

- Η παραμετροποίηση μήκους-τόξου αντιμετωπίζει το πρόβλημα της μείωσης της πυκνότητας

των πλεγματικών σημείων καθώς τώρα πλέον η προβολές των πλεγματικών σημείων ισαπέχουν πάνω στην καμπύλη της διεπιφάνειας της σταγόνας. Ακόμα, με αυτήν την παραμετροποίηση αντιμετωπίζεται, με τη χρήση του μήκους-τόξου, και το ζήτημα της μονότονης αύξησης της ανεξάρτητης μεταβλητής κατά μήκος της λύσης. Για να επιτευχθεί όμως αυτό, ο αριθμός των αγνώστων έχει διπλασιαστεί. Έτσι χρειάζεται περισσότερος υπολογιστικός χρόνος, σε σχέση με τις άλλες παραμετροποιήσεις, για να λυθεί ένα πρόβλημα με ίσο πλήθος κόμβων.

- Ύστερα από σύγκριση που έγινε στους ρυθμούς σύγκλισης και των τριών παραμετροποιήσεων, φαίνεται ότι η κυλινδρική παραμετροποίηση έχει τον μικρότερο ρυθμό σύγκλισης ενώ η σφαιρική και η μήκους-τόξου παραμετροποίηση παρουσιάζουν καλύτερη συμπεριφορά με σχεδόν ίσους μεταξύ τους ρυθμούς. Αυτό σημαίνει ότι παρά τη φαινομενική απώλεια ακρίβειας που εμφανίζει η σφαιρική παραμετροποίηση, λόγω της μείωσης της πυκνότητας των πλεγματικών σημείων, τελικά πλησιάζει με τον ίδιο ρυθμό στην αναλυτική λύση, όπως και η παραμετροποίηση μήκους-τόξου. Ακόμα, λαμβάνοντας υπόψιν ότι ο αριθμός των αγνώστων στην παραμετροποίηση μήκους-τόξου είναι διπλάσιος από αυτόν στην σφαιρική καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η σφαιρική παραμετροποίηση είναι αποδοτικότερη όσον αφορά τις υπολογιστικές απαιτήσεις. Πρέπει επίσης να σημειώσουμε ότι το πρόβλημα, το οποίο συγκρίναμε τους ρυθμούς, αφορά την ισορροπία σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο, τα αποτελέσματα όμως μπορούν να γενικευτούν και σε πιο πολύπλοκες γεωμετρικές επιφανειών.
- Επιπλέον, από τους υπολογισμούς ενέργειας που έγιναν στο ΠΣΤ-5 αποδείχθηκε μετά το σημείο στροφής στο διάγραμμα παραμετρικού βηματισμού η ευστάθεια των λύσεων μεταβάλλεται. Έτσι, για ένα εύρος γωνιών επαφής (μέχρι το επόμενο σημείο στροφής στο διάγραμμα παραμετρικού βηματισμού) υφίστανται τρεις καταστάσεις ισορροπίας (τύπου *Wenzel*, τύπου *Cassie* και ασταθής κατάσταση) για κάθε γωνία, η μία εκ των οποίων (η ασταθής) παρουσιάζει τη μέγιστη ενέργεια. Οι ασταθείς καταστάσεις ισορροπίας δεν είναι παρατηρήσιμες σε μακροσκοπικά πειράματα καθώς μεταβαίνουν ταχύτητα στις αντίστοιχες ευσταθείς καταστάσεις ισορροπίας. Επίσης παρατηρούμε ότι οι καταστάσεις *Wenzel* είναι περισσότερο ευσταθείς από τις *Cassie* σε μικρές γωνίες επαφής, ενώ συμβαίνει το αντίθετο σε μεγάλες γωνίες. Το αν μία από τις δύο καταστάσεις ισορροπίας (*Wenzel* ή *Cassie*) είναι περισσότερο ευσταθείς από την άλλη μας το δίνει η ενέργεια που χρειάζεται το σύστημα για να “ξεφύγει” από τη μία και να μεταβεί στην άλλη.

Τέλος, από την τρέχουσα έρευνα που γίνεται στο θέμα της επίλυσης μιας τροποποιημένης εξίσωσης

Young-Laplace εξάγουμε τα εξής πρώιμα συμπεράσματα:

- Είναι δυνατή η επίλυση μια γενικής εξίσωσης Young-Laplace στη διεπιφάνεια, υγρού-αερίου, υγρού στερεού και στο τριπλό σημείο. Η μορφή που θα πρέπει να ακολουθεί η καμπυλότητα είναι να παρουσιάζει μια μέγιστη τιμή, ύστερα από μια απότομη μεταβολή, στο τριπλό σημείο, και στη συνέχεια να καταλήγει στο μηδέν.
- Με την εξίσωση που χρησιμοποιούμε καταλήγουμε σε κάποια ενδιαφέροντα αποτελέσματα, όπου εμφανίζεται και η μακροσκοπική αλλά και η μικροσκοπική γωνία επαφής, ακόμα όμως το θέμα είναι ανοιχτό καθώς δεν επιτεύχθηκε η απαλοιφή του βοηθητικού όρου σύγκλισης της εξίσωσης.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: ΚΑΜΠΥΛΟΤΗΤΑ

A.1. Γενικά Στοιχεία

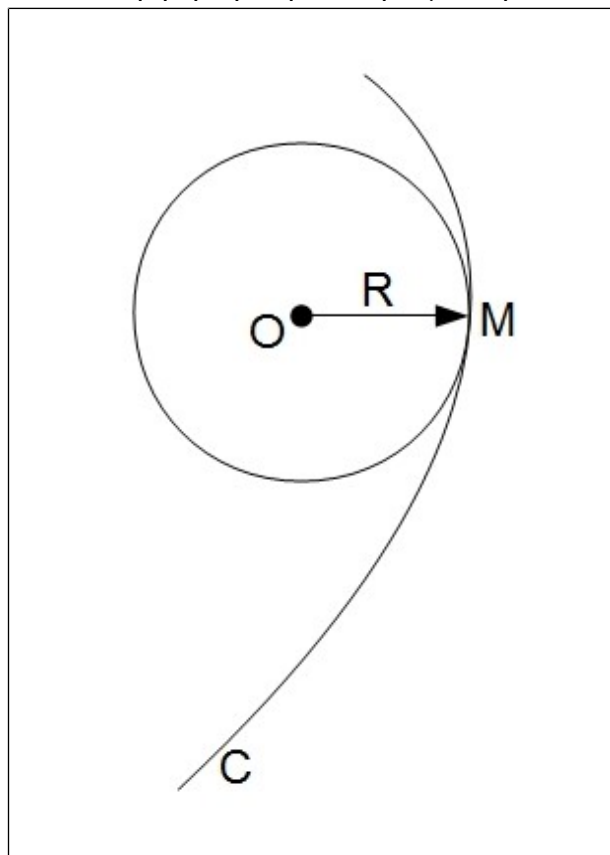
Στην περίπτωση μιας καμπύλης (C), η καμπυλότητα σε ένα σημείο M δίνεται από την εξίσωση:

$$\kappa = \frac{1}{R}, \quad (\text{A-1})$$

όπου:

R = ακτίνα καμπυλότητας της καμπύλης στο σημείο M , δηλαδή η ακτίνα του κύκλου που “ταιριάζει” καλύτερα στην καμπύλη εκεί από οποιονδήποτε άλλο κύκλο. (σχήμα A.1). Ο κύκλος αυτός ονομάζεται κύκλος καμπυλότητας και το κέντρο του κέντρο καμπυλότητας. Ο κύκλος αυτός βρίσκεται στο απτόμενο επίπεδο της καμπύλης C στο σημείο M και στην κοίλη ή εσωτερική πλευρά της C . [Παπαϊωάννου 2003]

Η καμπυλότητα όπως και οι ακτίνες καμπυλότητας είναι μεγέθη με πρόσημο. Η ακτίνα καμπυλότητας μπορεί να είναι θετική ή αρνητική όταν η καμπύλη είναι κοίλη ή κυρτή αντίστοιχα.



(Σχήμα A.1) – Ακτίνα καμπυλότητας R μια καμπύλης C σε ένα σημείο M

Στην περίπτωση μιας επιφάνειας, ένα οποιοδήποτε επίπεδο που περιέχει το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια, την τέμνει κατά μήκος μια καμπύλης. Κάθε μία από τις καμπύλες αυτές έχει τη δική της καμπυλότητα. Η μέση τοπική καμπυλότητα (H) μιας επιφάνειας ορίζεται από τις κύριες καμπυλότητες κ_1 και κ_2 ως εξής [Pressley 2010]:

$$H = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2). \quad (\text{A-2})$$

Οι δύο κύριες καμπυλότητες κ_1 και κ_2 βρίσκονται σε κάθετα επίπεδα. Εισάγοντας τις ακτίνες καμπυλότητας στην σχέση (A-2) προκύπτει:

$$H = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right). \quad (\text{A-3})$$

Η καμπυλότητα μια επιφάνειας, επίσης συνδέεται με το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια, από την εξίσωση:

$$2H = \nabla_s \cdot \vec{n}, \quad (\text{A-4})$$

όπου:

$\nabla_s = \text{O}$ τελεστής επιφανειακής απόκλισης.

$\vec{n} = \text{Το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια.}$

Στη σχέση (A-4) η φορά του μοναδιαίου κάθετου διανύσματος (\vec{n}) στην επιφάνεια καθορίζει το πρόσημο της καμπυλότητας.

A.2. Υπολογισμοί καμπυλότητας

Παρακάτω παρουσιάζεται η μέθοδος υπολογισμού της καμπυλότητας της επιφάνειας της σταγόνας [Weatherburn 1937,1955]. Ο τύπος της καμπυλότητας εισάγονται στην εξίσωση Young-Laplace. Το διπλάσιο της μέσης τοπικής καμπυλότητας (σχέση A-4) υπολογίζεται ως εξής:

$$\nabla_s \cdot \vec{n} = \frac{2FM - EN - GL}{H^2}, \quad (\text{A-5})$$

όπου:

$G, E, F = \text{θεμελιώδη μεγέθη πρώτης τάξης της επιφάνειας:}$

$$G = \vec{p}^2 H^2, \quad (\text{A-6})$$

$$E = \vec{q}^2 H^2, \quad (\text{A-7})$$

$$F = -\vec{p} \cdot \vec{q} H^2 . \quad (\text{A-8})$$

Ακόμα, $L, M, N =$ θεμελιώδη μεγέθη δεύτερης τάξης της επιφάνειας:

$$L = \vec{F}_{uu} \cdot \vec{n} , \quad (\text{A-9})$$

$$M = \vec{F}_{uv} \cdot \vec{n} , \quad (\text{A-10})$$

$$N = \vec{F}_{vv} \cdot \vec{n} . \quad (\text{A-11})$$

Με

$$\vec{p} = \frac{(\vec{F}_v \times \vec{n})}{H} , \quad (\text{A-12})$$

$$\vec{q} = \frac{(\vec{n} \times \vec{F}_u)}{H} , \quad (\text{A-13})$$

$$\vec{n} = \text{κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια} = \frac{\vec{F}_v \times \vec{F}_u}{|\vec{F}_v \times \vec{F}_u|} , \quad (\text{A-14})$$

$$\vec{F}_v = \frac{\partial \vec{F}}{\partial v} , \quad F_u = \frac{\partial \vec{F}}{\partial u} , \quad F_{vv} = \frac{\partial \vec{F}^2}{\partial v^2} , \quad F_{uu} = \frac{\partial \vec{F}^2}{\partial u^2} ,$$

$\vec{F} =$ ανυσματική εξίσωση της επιφάνειας της σταγόνας (βλ. Παράρτημα Β),

$u, v =$ οι μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για την παραμετροποίηση της επιφάνειας, και

$$H = \vec{n} \cdot (\vec{F}_v \times \vec{F}_u) . \quad (\text{A-15})$$

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β: ΕΜΒΑΔΟΝ ΚΑΙ ΠΡΟΒΟΛΗ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ

Αν μια λεία επιφάνεια A δίνεται από την ανυσματική εξίσωση:

$$\vec{R}(u, v) = f_1(u, v)\vec{i} + f_2(u, v)\vec{j} + f_3(u, v)\vec{k} \quad (\text{B-1})$$

με $(u, v) \in L$.

όπου L είναι το πεδίο τιμών των παραμέτρων u, v , και $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ τα καρτεσιανά διανύσματα βάσης στη x, y και z διεύθυνση αντίστοιχα, τότε το εμβαδόν E της A είναι:

$$E = \iint_L |\vec{R}_u \times \vec{R}_v| dE, \quad (\text{B-2})$$

όπου:

\vec{R}_u = το άνυσμα που παράγεται με μερική παραγωγή του \vec{R} ως προς u .

\vec{R}_v = το άνυσμα που παράγεται με μερική παραγωγή του \vec{R} ως προς v .

Αν η επιφάνεια A είναι επίπεδη τότε μπορούμε να υπολογίσουμε το εμβαδόν της προβολής της σε κάποιο επίπεδο αναφοράς. Αυτό δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$E_\pi = E \langle \vec{n}, \vec{m} \rangle, \quad (\text{B-3})$$

όπου το μοναδιαίο κάθετο άνυσμα στο επίπεδο της επιφάνειας A υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\vec{n} = \frac{\langle \vec{F}_u, \vec{F}_v \rangle}{|\vec{F}_u \times \vec{F}_v|} \quad (\text{B-4})$$

και \vec{m} = το μοναδιαίο κάθετο άνυσμα στο επίπεδο αναφοράς που θέλουμε να υπολογίσουμε το εμβαδόν της προβολής της A . [Παπαϊωάννου 2003]

Θα εφαρμόσουμε τους παραπάνω τύπους για να υπολογίσουμε τα στοιχειώδη εμβαδά και προβολές επιφανειών που θα χρησιμοποιήσουμε στην παρούσα εργασία.

B.1. Επιφάνεια σε κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων

Η ανυσματική εξίσωση \vec{R} που μας δίνει την έκφραση της επιφάνειας σε κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων (βλ. Κεφάλαιο 3, παράγραφο 3.1.) είναι:

$$F(z, \varphi) = (r - a \cos \varphi - b \sin \varphi)\vec{e}_r + (a \sin \varphi - b \cos \varphi)\vec{e}_\varphi + (z - z_0)\vec{k}, \quad (\text{B-5})$$

όπου: $z, \varphi =$ μεταβλητές του κυλινδρικού συστήματος συντεταγμένων που χρησιμοποιούνται να να παραμετροποιήσουμε την επιφάνεια,

$$a = r_0 \cos \varphi_0 ,$$

$$b = r_0 \sin \varphi_0 ,$$

με (r_0, φ_0, z_0) : οι κυλινδρικές συντεταγμένες του σημείου O του συστήματος αναφοράς.

Από τη σχέση (B-2) υπολογίζουμε το εμβαδόν της επιφάνειας A :

$$E = \iint_L r \left[1 + \left(\frac{\partial r}{\partial z} \right)^2 \right] dz d\varphi . \quad (\text{B-6})$$

Αν θεωρήσουμε ένα στοιχειώδες εμβαδόν, το οποίο προσεγγίζει ένα ορθογώνιο, τότε μπορούμε να υπολογίσουμε την προβολή του πάνω σε ένα κύλινδρο. Έτσι από τον τύπο (B-3) προκύπτει:

$$dE_\pi = r \sqrt{1 + \left(\frac{\partial r}{\partial z} \right)^2} dz d\varphi . \quad (\text{B-7})$$

B.2. Επιφάνεια σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων

Για το σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων (βλ. Κεφάλαιο 4, παράγραφο 4.1.), η ανυσματική εξίσωση της επιφάνειας έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned} \vec{F}(\theta, \varphi) = & (r - a \sin \theta \cos \varphi - b \sin \theta \sin \varphi - c \cos \theta) \vec{e}_r \\ & + (c \sin(\theta) - a \cos \theta \cos \varphi - b \cos \theta \sin \varphi) \vec{e}_\theta \\ & + (a \sin \varphi - b \cos \varphi) \vec{e}_\varphi , \end{aligned} \quad (\text{B-8})$$

όπου:

$$a = r_0 \sin \theta_0 \cos \varphi_0 ,$$

$$b = r_0 \sin \theta_0 \sin \varphi_0 ,$$

$$c = r_0 \cos \theta_0 ,$$

με $(r_0, \theta_0, \varphi_0)$: οι σφαιρικές συντεταγμένες του σημείου O του συστήματος αναφοράς.

Από τη σχέση (B-2) υπολογίζουμε το εμβαδόν της επιφάνειας A :

$$E = \iint_L r \sin \theta \sqrt{r^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \theta} \right)^2} d\theta d\varphi . \quad (\text{B-9})$$

Η προβολή ενός στοιχειώδους εμβαδού dE πάνω σε μια σφαίρα μας υπολογίζεται ως (από τη σχέση B-3):

$$dE_{\pi} = r^2 \sin \theta d\theta d\varphi . \quad (\text{B-10})$$

Αντίστοιχοι υπολογισμοί μπορούν να γίνουν και όταν οι μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για να παραμετροποιήσουμε την επιφάνεια είναι οι (s, φ) (βλ. Κεφάλαιο 5):

$$E = \iint_L r \sin \theta \sqrt{r^2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial s} \right)^2} ds d\varphi , \quad (\text{B-11})$$

$$dE_{\pi} = r^2 \sin \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial s} \right) ds d\varphi . \quad (\text{B-12})$$

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Ξενόγλωσση

1. Adamson, A. W. and Gast, A. P. “*Physical Chemistry of Surfaces*” John Wiley & Sons, Inc, New York, 1997
2. Barrett, R., Berry M., Chan, T. F., Demmel, J., Donato, J., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C. and Van der Vorst, H. “*Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*”, SIAM, Philadelphia, 1994
3. Ben-Israel, A. “*A Newton-Raphson Method for the Solution of Systems of Equations*”, Journal of Mathematical Analysis and Applications 15, 243-252 (1966)
4. Brochard-Wyart, F. and de Gennes, P. G. “*Dynamics of partial wetting*”, Advances in Colloid and Interface Science, 39 (1992) 1-11, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam
5. Brown, R. A., Ph. D. Thesis “*The shape and stability of three-dimensional interfaces*”, University of Minnesota, March 1979
6. Butt, H., Graf, K. and Kappl, M. “*Physics and Chemistry of Interfaces*” WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, Weinheim, 2003
7. Chan, T. F. C. and Keller, H. B. “*Arc-length continuation and multi-grid techniques for nonlinear elliptic eigenvalue problems*”, Siam J. Sci. Stat. Comput., Vol. 3, No. 2, June 1982
8. DasGurta, S., Schonberg, J. A., Kim, I. Y. and Wayner, P. C. “*Use of the Augmented Young-Laplace Equation to Model Equilibrium and Evaporating Extended Minisci*”, Journal of Colloid and Interface Science 157, 332-342 (1993)
9. De Gennes, P. G., Brochard, F. and Quéré, D. “*Capillarity and Wetting Phenomena*”, Springer, New York, 2004
10. Drygiannakis, A.I., Papathanasiou, A.G. and Boudouvis, A.G. “*Mechanisms of equilibrium shape transitions of liquid droplets in electrowetting*”, Journal of Colloid and Interface Science 326 (2008) 451–459
11. Drygiannakis, A.I., Papathanasiou, A.G. and Boudouvis, A.G. “*On the Connection between Dielectric Breakdown Strength, Trapping of Charge, and Contact Angle Saturation in Electrowetting*”, Langmuir, 2009, 25 (1), 147-152

12. Finlayson, B.A. and Scriven, L.E. “*The method of weighted residuals – A review*”, Applied Mechanics review, Vol. 19, No. 9, September 1966
13. Hood, P. “*Frontal solution program for unsymmetric matrices*”, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 10, 379-399 (1976)
14. Keller, H. B. “*Numerical Solution of Bifurcation and Nonlinear Eigenvalue Problems*”, Applications of Bifurcation Theory, P. Rabinowitz ed., Academic Press, 1977
15. Luo, C., Xiang, M., Liu, X. and Wang, H. “*Transition from Cassie-Baxter to Wenzel States on microline-formed PDMS surfaces induced by evaporation or pressing of water droplet*”, Microfluid Nanofluid (2011) 10:831–842
16. Pashos, G., Kavousanakis, M. E., Spyropoulos, A. N., Palyvos, J. A. and Boudouvis, A. G. “*Simultaneous solution of large-scale linear systems and eigenvalue problems with a parallel GMRES method*”, Journal of Computational and Applied Mathematics 227 (2009) 196-205
17. Pressley, A. “*Elementary Differential Geometry*”, Springer, London, 2010
18. Quéré D. and Reyssat M. “*Non-adhesive lotus and other hydrophobic materials*”, Phil. Trans. R. Soc. A 2008 366, 1539-1556
19. Ruckenstein, E. and Berim, G. O. “*Microscopic description of a drop on a solid surface*”, Advances in Colloid and Interface Science 157 (2010) 1–33
20. Strang, G. and Fix, G.J. “*An analysis of the Finite Element Method*”, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1973
21. Weatherburn, C. E. “*Differential Geometry of three dimensions*” Cambridge university press, Cambridge 1955
22. Weatherburn, C. E. “*On certain useful vectors in differential geometry*”, Compositio Mathematica, tome 4 (1937), p. 342-345
23. Zienkiewicz, O.C. and Taylor R.L. “*The finite element method*”, McGraw-Hill, Oxford, 2000

Ελληνόγλωσση

1. Finney, R. L. και Giordano, F. R. “*Απειροστικός λογισμός*”, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 2005

2. Sokolnikoff, I. S. και Redheffer, R.M. “*Μαθηματικά για φυσικούς και μηχανικούς*”, Πανεπιστημιακές εκδόσεις ΕΜΠ, Αθήνα 2001
3. Δρυγιαννάκης, Α. Ι., Διδακτορική διατριβή “*Διερεύνηση φαινομένων αλληλεπίδρασης τριχοειδών και ηλεκτροστατικών δυνάμεων στη μικρο-ρευστομηχανική*”, Αθήνα, 2009
4. Καβουσανάκης, Μ. Ε., Διδακτορική διατριβή “*Αδρομερής προσομοίωση περίπλοκων φυσικοχημικών και βιολογικών συστημάτων με μεθόδους ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων, διακλάδωσης και ομοιοτυπίας*”, Αθήνα, 2007
5. Μπεργελές, Γ. “*Υπολογιστική ρευστομηχανική*”, Εκδόσεις Συμεών, Αθήνα 2006
6. Μπουντουβής, Α. Γ. “*Υπολογιστική ανάλυση με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων*”, Αθήνα, 1992
7. Παπαγεωργίου, Γ. Σ. και Τσίτουρας Χ.Γ. “*Αριθμητική ανάλυση με εφαρμογές σε Matlab και Mathematica*”, Πανεπιστημιακές εκδόσεις ΕΜΠ, Αθήνα, 2001
8. Παπαϊωάννου, Α. Θ. “*Ανύσματα και τανυστές*”, Κοράλι, Αθήνα, 2003
9. Ρακιντζής, Ν. Θ. “*Φυσικοχημεία*”, Παπασωτηρίου, Αθήνα 1994

