

# Etude mathématique et numérique en Electromouillage

Claire Scheid

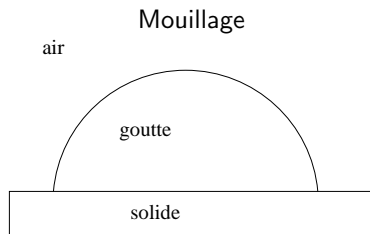
*Laboratoire Jean Alexandre Dieudonné, Nice*

*Travaux réalisés en collaboration avec*

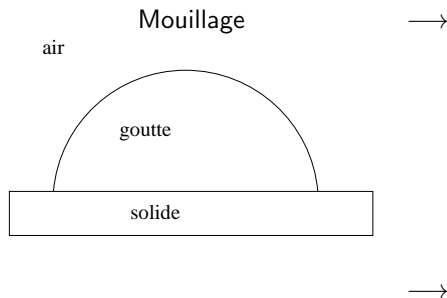
*Patrick Witomski (LJK, Grenoble) et Patrick Ciarlet Jr. (ENSTA, Paris).*

14 Novembre 2013, Journée Fed3G - MaiMoSiNE  
– "Mouillage, dé mouillage, imprégnation" –

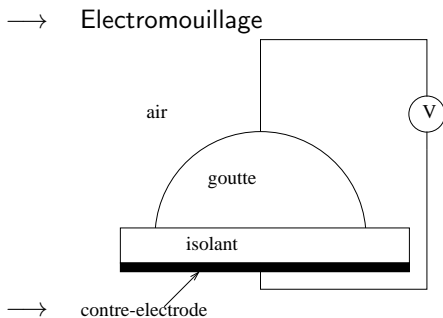
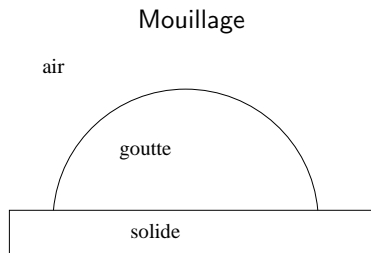
# Expérience d'électromouillage statique



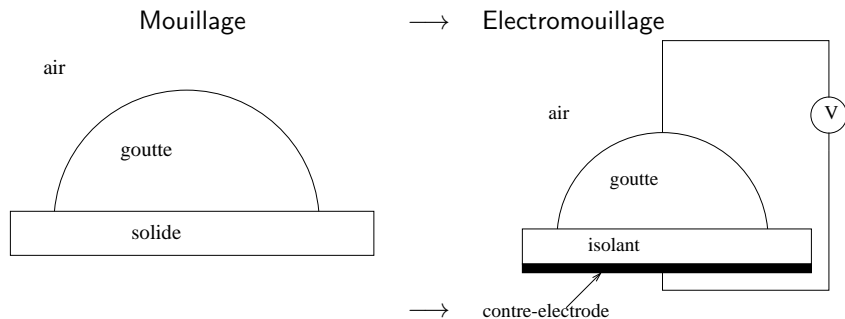
# Expérience d'électromouillage statique



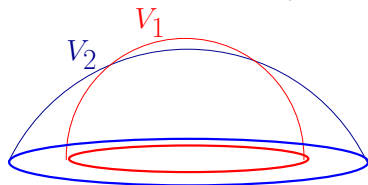
# Expérience d'électromouillage statique



# Expérience d'électromouillage statique



Modifie l'affinité entre le liquide et le solide



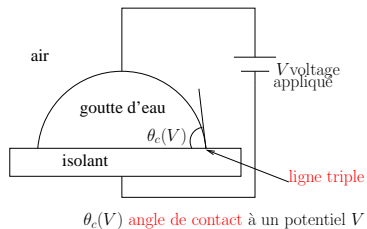
# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - Problématique
- 2 Etude du modèle
  - Formulation complète
  - Conséquences
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - Approximation globale
  - Approximation couplée locale-globale
- 4 Un mot du cas 3D

# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - Problématique
- 2 Etude du modèle
  - Formulation complète
  - Conséquences
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - Approximation globale
  - Approximation couplée locale-globale
- 4 Un mot du cas 3D

# Observations et approximation



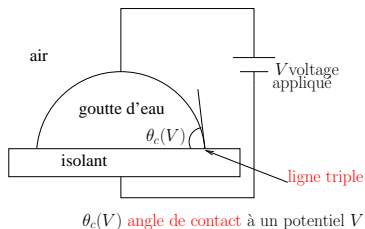
- A  $V = 0$  Volt,  $\theta_c = \theta_Y$  angle de Young

$$\sigma_{LG} \cos(\theta_Y) = \sigma_{GS} - \sigma_{LS}$$

A small diagram to the right of the equation shows a horizontal line representing the interface. A curved arrow above the line indicates the surface tension force  $\sigma_{LG}$  acting at an angle  $\theta_Y$  to the horizontal. Two horizontal arrows below the line represent the surface energy forces  $\sigma_{GS}$  and  $\sigma_{LS}$ .



# Observations et approximation

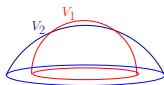


- A  $V = 0$  Volt,  $\theta_c = \theta_Y$  angle de Young

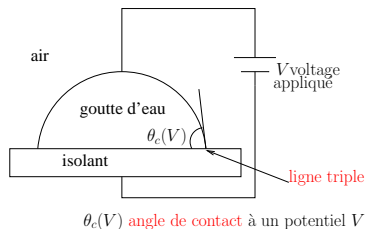
$$\sigma_{LG} \cos(\theta_Y) = \sigma_{GS} - \sigma_{LS}$$

A diagram showing a horizontal line representing the contact line. A curved arrow above the line represents the liquid-gas surface tension  $\sigma_{LG}$  acting at an angle  $\theta_Y$  to the horizontal. Two horizontal arrows pointing outwards from the contact line represent the solid-gas ( $\sigma_{GS}$ ) and solid-liquid ( $\sigma_{LS}$ ) surface tensions.

- Augmenter  $V$  augmente la **nature mouillante** de la goutte



# Observations et approximation

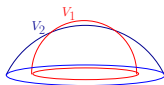


- A  $V = 0$  Volt,  $\theta_c = \theta_Y$  angle de Young

$$\sigma_{LG} \cos(\theta_Y) = \sigma_{GS} - \sigma_{LS}$$

The diagram shows a contact line with a horizontal line representing the solid surface. A vertical line represents the liquid surface. The angle between the solid surface and the liquid surface is  $\theta_Y$ . Arrows indicate the forces acting on the contact line:  $\sigma_{GS}$  (solid-gas surface tension) pointing to the right,  $\sigma_{LS}$  (liquid-solid surface tension) pointing to the left, and  $\sigma_{LG}$  (liquid-gas surface tension) pointing upwards.

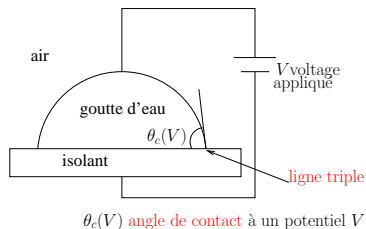
- Augmenter  $V$  augmente la **nature mouillante** de la goutte



- **Approximation condensateur plan**

$$\cos(\theta_c(V)) = \cos(\theta_Y) + CV^2, \quad C > 0$$

# Observations et approximation

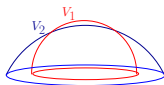


- A  $V = 0$  Volt,  $\theta_c = \theta_Y$  angle de Young

$$\sigma_{LG} \cos(\theta_Y) = \sigma_{GS} - \sigma_{LS}$$

The diagram shows a contact line with a curved arrow above it representing surface tension  $\sigma_{LG}$  pulling to the left, and two horizontal arrows below it representing the difference in surface energies  $\sigma_{GS} - \sigma_{LS}$  pulling to the right.

- Augmenter  $V$  augmente la **nature mouillante** de la goutte



## • Approximation condensateur plan

$$\cos(\theta_c(V)) = \cos(\theta_Y) + CV^2, \quad C > 0$$

↪ Mais un phénomène de **saturation** est observé

# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - **Problématique**
- 2 Etude du modèle
  - Formulation complète
  - Conséquences
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - Approximation globale
  - Approximation couplée locale-globale
- 4 Un mot du cas 3D

# Problématique : Questions

Quelles sont :

- la *forme*, la courbure
- l'*angle de contact* à un potentiel donné  $V$ ?

# Problématique : Questions

Quelles sont :

- la forme, la courbure
- l'*angle de contact* à un potentiel donné  $V$ ?

# Problématique : Questions

Quelles sont :

- la forme, la courbure
- *l'angle de contact* à un potentiel donné  $V$ ?

# Problématique :

Quelles sont :

- la forme, la courbure
- l'*angle de contact* à un potentiel donné  $V$ ?

**Approche physique** : Buehrle et al.(2003), Bienia (2005), Papathanasiou et al. (2005), Adamiak (2006)

$$\rightarrow \theta_c(V) = \theta_Y, \quad \forall V \geq 0 !$$

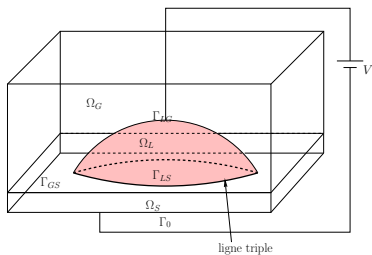
Buehrle and al.(2003), Bienia (2005) (analyse physique et modèles approchés)



# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - Problématique
- 2 Etude du modèle
  - **Formulation complète**
  - Conséquences
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - Approximation globale
  - Approximation couplée locale-globale
- 4 Un mot du cas 3D

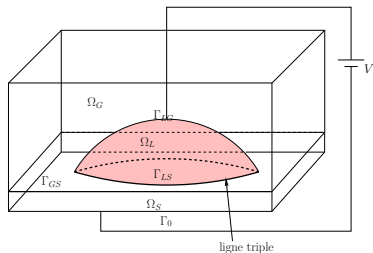
# Notations



$$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS},$$

(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

# Notations

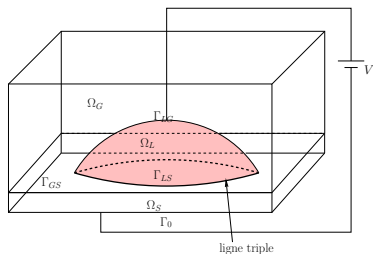


$$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS},$$

(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

**Energie de la goutte:**

# Notations



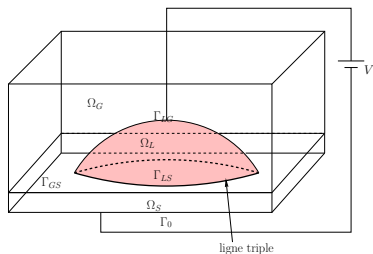
$$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS},$$

(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

**Energie de la goutte:**

$$\mathcal{E}(\Omega_L, V) =$$

# Notations

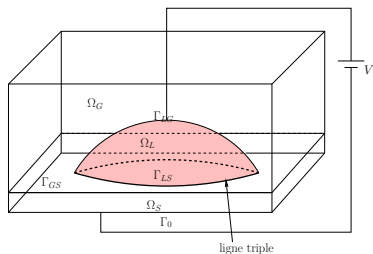


$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS}$ ,  
(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

**Energie de la goutte:**

$$\mathcal{E}(\Omega_L, V) = \underbrace{\alpha \int_{\Omega_L} z d\Omega}_{\text{Energie potentielle}}$$

# Notations

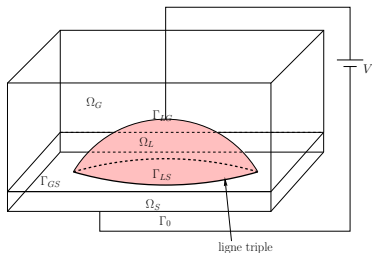


$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS}$ ,  
(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

**Energie de la goutte:**

$$\mathcal{E}(\Omega_L, V) = \underbrace{\alpha \int_{\Omega_L} z d\Omega}_{\text{Energie potentielle}} + \underbrace{\mu \int_{\Gamma_{LS}} d\sigma + \int_{\Gamma_{LG}} d\sigma}_{\text{Energie capillaire}}$$

# Notations



$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS}$ ,  
(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

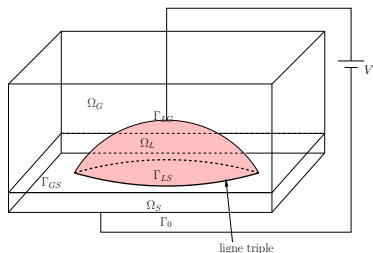
**Energie de la goutte:**

$$\mathcal{E}(\Omega_L, V) = \underbrace{\alpha \int_{\Omega_L} z d\Omega}_{\text{Energie potentielle}} + \underbrace{\mu \int_{\Gamma_{LS}} d\sigma + \int_{\Gamma_{LG}} d\sigma}_{\text{Energie capillaire}} - \underbrace{\frac{\delta}{2} \int_{\Omega} \varepsilon |\nabla \phi^\Omega|^2 d\Omega}_{\text{Energie électrostatique}}$$

$\alpha, \mu, \delta$  : Paramètres physiques

$\varepsilon$  : permittivité ( $\varepsilon = \varepsilon_G$  dans  $\Omega_G$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_S$  dans  $\Omega_S$ )

# Notations



$\Omega = \Omega_G \cup \Omega_S \cup \Gamma_{GS}$ ,  
(extérieur de la goutte,  
domaine blanc)

**Energie de la goutte:**

$$\mathcal{E}(\Omega_L, V) = \underbrace{\alpha \int_{\Omega_L} z d\Omega}_{\text{Energie potentielle}} + \underbrace{\mu \int_{\Gamma_{LS}} d\sigma + \int_{\Gamma_{LG}} d\sigma}_{\text{Energie capillaire}} - \underbrace{\frac{\delta}{2} \int_{\Omega} \varepsilon |\nabla \phi^\Omega|^2 d\Omega}_{\text{Energie électrostatique}}$$

**Fonction coût**

$$J(\Omega) := \mathcal{E}(\Omega_L, V) = J_{grav}(\Omega) + J_{LS}(\Omega) + J_{LG}(\Omega) + J_{elec}(\Omega).$$

$\alpha, \mu, \delta$  : Paramètres physiques

$\varepsilon$  : permittivité ( $\varepsilon = \varepsilon_G$  dans  $\Omega_G$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_S$  dans  $\Omega_S$ )



# Le potentiel: Problème de transmission

$$\left\{ \begin{array}{ll}
 \operatorname{div}(\varepsilon_i \nabla \phi^\Omega) = 0 & \text{dans } \Omega_i \quad i = G, S \\
 \phi^\Omega = V & \text{sur } \Gamma_{LG} \cup \Gamma_{LS} \\
 \phi^\Omega = 0 & \text{sur } \Gamma_0 \\
 \phi_G^\Omega = \phi_S^\Omega & \text{sur } \Gamma_{GS} \\
 \varepsilon_G \nabla \phi_G^\Omega \cdot \vec{N}_G = -\varepsilon_S \nabla \phi_S^\Omega \cdot \vec{N}_S & \text{sur } \Gamma_{GS} \\
 \varepsilon_i \nabla \phi_i^\Omega \cdot \vec{N}_i = 0 & i = G, S \text{ sur les frontières artificielles}
 \end{array} \right.$$

- $\phi^\Omega$  dépend de  $\Omega$ .
- $\Omega$  présente un coin rentrant à cause de la ligne triple  
 $\Rightarrow$  Perte de régularité, singularité du potentiel

# Forme optimale

Pour  $V \geq 0$  et un volume donné  $vol$ ,

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \Omega_L^* \text{ tel que :} \\ \mathcal{E}(\Omega_L^*, V) = \min_{\{\Omega_L; \text{Vol}(\Omega_L)=vol\}} \mathcal{E}(\Omega_L, V) \end{array} \right.$$

- **Minimisation d'une énergie** sous la contrainte de conserver son volume.  
*Optimisation sous contrainte* traitée par un Lagrangien

- La forme de goutte minimale vérifie **une équation d'Euler-Lagrange**.

$$J'(\Omega) = \lambda C'(\Omega)$$

$\rightsquigarrow$  Sens donné aux dérivées grâce à la notion de dérivée de forme (Henrot et Pierre (2005), Murat et Simon (1976)).

- A rapprocher d'un **bilan des forces** sur un élément de surface élémentaire.

$$\sigma_K = P + \frac{\varepsilon E_{elec}^2}{2}$$

*Equation de Young Laplace.*

# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - Problématique
- 2 Etude du modèle
  - Formulation complète
  - **Conséquences**
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - Approximation globale
  - Approximation couplée locale-globale
- 4 Un mot du cas 3D

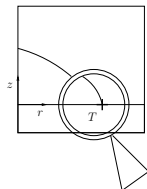
# Conséquences

## Théorème

L'angle de contact  $\theta_c$  est indépendant du potentiel appliqué  $V \geq 0$  i.e.

$$\theta_c(V) = \theta_Y, \forall V \geq 0$$

Pour le prouver on manipule l'équation d'Euler-Lagrange et on fait un zoom sur la ligne triple.



# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - Problématique
- 2 Etude du modèle
  - Formulation complète
  - Conséquences
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - **Approximation globale**
  - Approximation couplée locale-globale
- 4 Un mot du cas 3D

# Approximation globale

A un potentiel donné  $V$ , calcul numérique de :

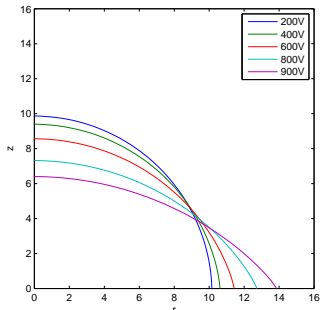
- La **forme optimale**
  - Entrées : tensions de surface, potentiel, volume
  - Sortie :  $(\omega, \lambda)$  point selle
  - Méthode : Eléments finis, algorithme d'Uzawa, minimisation BFGS.
- La **courbure** de la goutte
  - Approximation de la courbe par des courbes de Bézier.
- L'**angle de contact** au point triple.

Calculs effectués sur la base d'"**Electrocap**" code développé par **J. Monnier** et **P. Chow Wing Bom** (LJK).

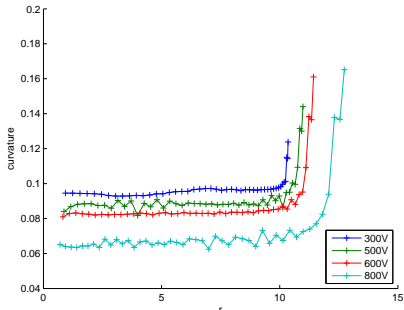
# Forme et courbure de la goutte

Potentiels variables, angle de Young de  $90^\circ$

Forme



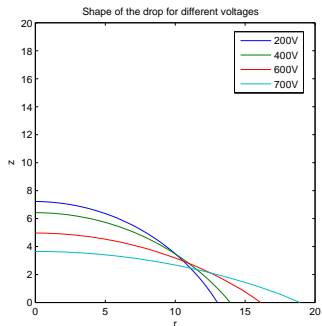
Courbure



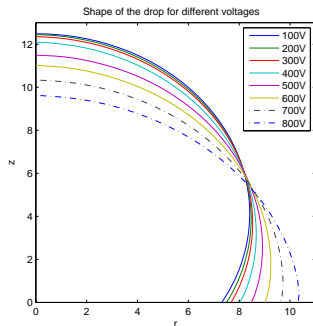
- ▷ Les formes globales correspondent aux expériences
- ▷ Explosion de la courbure au voisinage du point triple

# Forme et courbure de la goutte

Forme pour  $\theta_Y = 60^\circ$



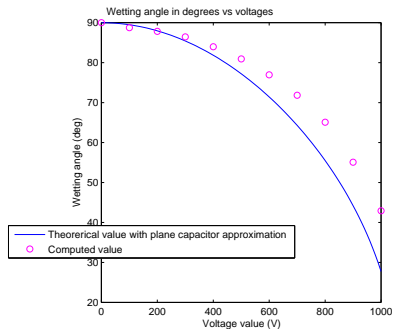
Forme pour  $\theta_Y = 120^\circ$



- ▷ Les formes globales correspondent aux expériences
- ▷ Explosion de la courbure au voisinage du point triple



# Angle de contact numérique



- ▷  $\theta_Y = 90^\circ$
- ▷ Déviation de la valeur de l'angle de contact par rapport à l'approximation condensateur plan.

Mais

- ▷ L'angle de contact numérique n'est pas constant
- ▷ Pas de phénomène de saturation

Pourquoi ?

## Pourquoi ?

- ① Singularité du potentiel au voisinage du point triple  $\Rightarrow$  Nécessité d'une approche précise du potentiel  $\Rightarrow$  EF  $\mathbb{P}_1$  pas suffisants ?

## Pourquoi ?

- 1 Singularité du potentiel au voisinage du point triple  $\Rightarrow$  Nécessité d'une approche précise du potentiel  $\Rightarrow$  EF  $\mathbb{P}_1$  pas suffisants ?
- 2 Modèle global  $\Rightarrow$  non adapté à la recherche d'une information locale  $\Rightarrow$  Modification du modèle ?

- ④ Singularité du potentiel au voisinage du point triple  $\Rightarrow$  EF  $\mathbb{P}_1$  pas suffisants ?

**Modifier l'approximation du potentiel**

- ④ Singularité du potentiel au voisinage du point triple  $\Rightarrow$  EF  $\mathbb{P}_1$  pas suffisants ?

**Prendre en compte la singularité  $\phi_S^{\Omega^*}$**



Méthode du Complément Singulier



P.Ciarlet Jr., J.He, 2003  
pour un problème de Poisson

- ④ Singularité du potentiel au voisinage du point triple  $\Rightarrow$  EF  $\mathbb{P}_1$  pas suffisants ?

Prendre en compte la singularité  $\phi_S^{\Omega^*}$



Méthode du Complément Singulier



P.Ciarlet Jr., J.He, 2003  
pour un problème de Poisson



Pas de modifications significatives  
 $\Rightarrow$  Agir sur le modèle lui même

# Plan

- 1 Introduction
  - Observations et approximation
  - Problématique
- 2 Etude du modèle
  - Formulation complète
  - Conséquences
- 3 Résultats numériques : cas axisymétrique
  - Approximation globale
  - **Approximation couplée locale-globale**
- 4 Un mot du cas 3D

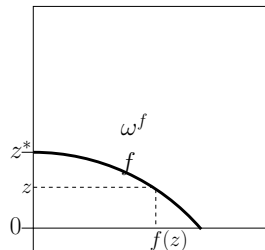


# Principe

*Idée* : correction de la forme de la goutte au voisinage du point triple.

# Principe

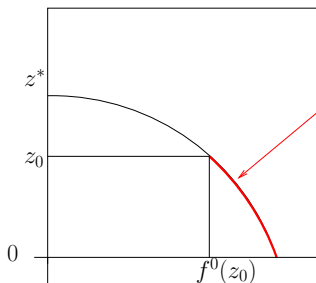
*Idée* : correction de la forme de la goutte au voisinage du point triple.



Se donner  $\omega \leftrightarrow$  se donner une fonction  $f$

# Principe

*Idée* : correction de la forme de la goutte au voisinage du point triple.

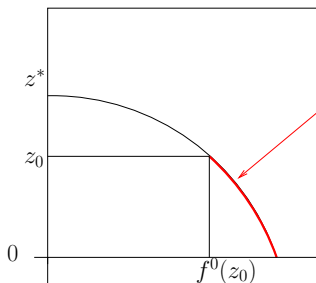


à modifier

- $V \geq 0$ , *vol* fixé
- $(\omega^0, \lambda^0)$  point selle numérique calculé avec l'approximation globale ( $\omega^0 \leftrightarrow f^0$ )
- $\omega^0$  bonne approximation au dessus d'un certain  $z_0 > 0$ .

# Principe

**Idée** : correction de la forme de la goutte au voisinage du point triple.



à modifier

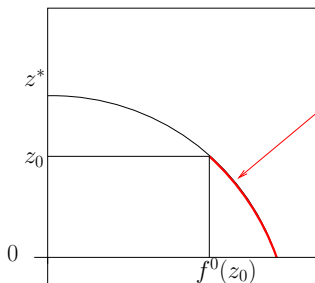
- $V \geq 0$ , vol fixé
- $(\omega^0, \lambda^0)$  point selle numérique calculé avec l'approximation globale ( $\omega^0 \leftrightarrow f^0$ )
- $\omega^0$  bonne approximation au dessus d'un certain  $z_0 > 0$ .

- Equation issue de la condition nécessaire d'optimalité :

$$\begin{cases} f'' = \frac{1 + f'^2}{f} - (1 + f'^2)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{\delta}{2} \|\nabla \varphi^{\omega^f}(f(\cdot), \cdot)\|^2 + \lambda^0 \right) \\ f(z_0) = f^0(z_0) \\ f'(z_0) = f^{0'}(z_0) \end{cases}$$

# Principe

*Idée* : correction de la forme de la goutte au voisinage du point triple.



à modifier

- $V \geq 0$ , *vol* fixé
- $(\omega^0, \lambda^0)$  point selle numérique calculé avec l'approximation globale ( $\omega^0 \leftrightarrow f^0$ )
- $\omega^0$  bonne approximation au dessus d'un certain  $z_0 > 0$ .

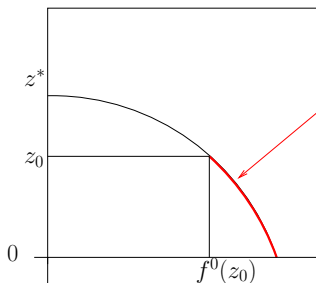
- Equation issue de la condition nécessaire d'optimalité :

$$\begin{cases} f'' = \frac{1 + f'^2}{f} - (1 + f'^2)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{\delta}{2} \|\nabla \varphi^{\omega^f}(f(\cdot), \cdot)\|^2 + \lambda^0 \right) \\ f(z_0) = f^0(z_0) \\ f'(z_0) = f^{0'}(z_0) \end{cases}$$

- EDO couplée avec l'EDP du calcul du potentiel

# Principe

*Idée* : correction de la forme de la goutte au voisinage du point triple.



à modifier

- $V \geq 0$ , vol fixé
- $(\omega^0, \lambda^0)$  point selle numérique calculé avec l'approximation globale ( $\omega^0 \leftrightarrow f^0$ )
- $\omega^0$  bonne approximation au dessus d'un certain  $z_0 > 0$ .

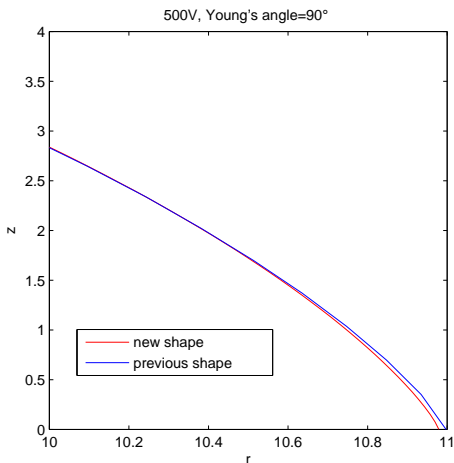
- Equation issue de la condition nécessaire d'optimalité :

$$\begin{cases} f'' = \frac{1 + f'^2}{f} - (1 + f'^2)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{\delta}{2} \|\nabla \varphi^{\omega^f}(f(\cdot), \cdot)\|^2 + \lambda^0 \right) \\ f(z_0) = f^0(z_0) \\ f'(z_0) = f^{0'}(z_0) \end{cases}$$

- EDO couplée avec l'EDP du calcul du potentiel
- Résolu numériquement par un algorithme RK4.

# Résultats pour 500V, $\theta_Y = 90^\circ$

Comparaison avec les formes précédentes



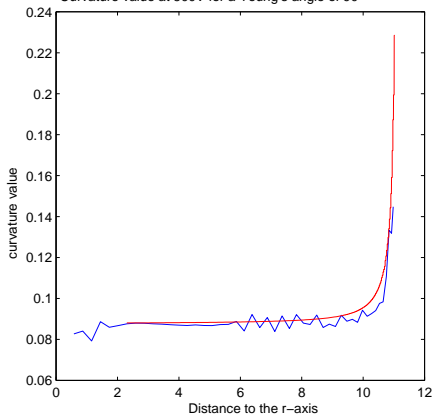
- Formes modifiées au voisinage du point triple

La nouvelle forme a une énergie plus faible

# Courbure : 500V, $\theta_Y = 90^\circ$

## Comparaison de la courbure

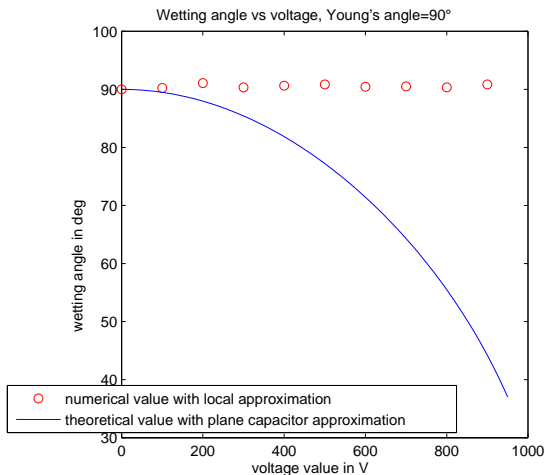
Curvature value at 500V for a Young's angle of  $90^\circ$



- Meilleure vue de l'explosion de la courbure



# Angles de contact pour différents V



- Visualisation de l'invariance de l'angle de contact

mais

- Toujours pas de saturation

Meilleurs résultats avec la Méthode du Complément Singulier

# Un mot du cas 3D

- Besoin d'une bonne approximation du **champ électrostatique** et de **sa trace sur le bord de la goutte**
- Méthode du Complément Singulier en 3D moins efficace qu'en 2D.

*Méthode adoptée :*

- **Calcul du champ**, plutôt que du potentiel.
- **Formulation faible à poids** sur la divergence du champ pour résoudre le problème induit par la singularité (Costabel, Dauge, *Numer. Math.* 2002; Ciarlet Jr. et al., *M2AN*, ).

*Point de vue adopté :*

- **Analyse numérique** plutôt qu'implémentation.

↪ Rétablit la légitimité d'utiliser les éléments finis  $\mathbb{P}_1$ .

# Conclusion

- Modélisation du phénomène d'électromouillage.
  - Par **optimisation de forme**
  - **Invariance** de l'angle de contact au niveau theorique
- Simulation numérique en axisymétrie :
  - Traitement de la singularité du potentiel et modèle local
  - **Invariance de l'angle de contact numérique**
  - Calcul précis de la valeur de la **courbure** et visualisation de la **forme au voisinage du point triple**
- Analyse numérique en 3D :
  - Formulation champ plutôt que potentiel
  - Formulation variationnelle à poids
  - Permet d'avoir une estimation d'erreur sur la norme de la trace sur le bord de la goutte.