

# Simulation numérique de l'hystérésis du mouillage d'une goutte sur une paroi.

Jean-Baptiste Dupont<sup>1</sup>, Dominique Legendre<sup>1</sup> & Anna-Maria Morgante<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse  
UMR CNRS 5502

Allées du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France

<sup>2</sup>RENAULT, Technocentre, 1 avenue du Golf, 78288 Guyancourt Cedex France -  
[anna-maria.morgante@renault.com](mailto:anna-maria.morgante@renault.com)

## Résumé :

*La forme d'une goutte sur un plan incliné ou soumise à un écoulement est étudiée à l'aide de la simulation numérique. Nous développons pour cela un modèle numérique permettant de simuler le comportement de la ligne de contact entre une interface liquide-gaz et une paroi solide. Le modèle numérique est présenté et validé par comparaison aux résultats de la littérature. Nous montrons qu'il est ainsi possible de reproduire numériquement trois phénomènes essentiels : le mouillage statique, le mouillage dynamique et l'hystérésis de l'angle de contact.*

## Abstract :

*The shape of a drop on an inclined wall or submitted to a shear flow is considered. We develop a numerical approach to simulate the behaviour of the contact line formed by the liquid, the gaz and the wall. The numerical model is presented and validated by comparison with previous works. This model is shown to be able to describe the 3 main phenomenon: the static, the dynamic and the hysteresis of a contact line.*

## Mots-clefs :

### Goutte, angle de contact, hystérésis

## 1 Introduction

Le comportement d'une goutte posée sur un plan incliné ou soumise à un écoulement cisailé présente malgré la simplicité apparente de ce problème un intérêt académique d'actualité. D'un point de vue numérique de telles études sont rendues délicates par la prise en compte de l'hystérésis de l'angle de contact (voir Spelt (2005) et Schleizer & Bonnecaze (1999)). Le modèle numérique doit permettre de simuler la dynamique de la déformation de la goutte puis sa mise en mouvement en reproduisant ainsi le passage du statique au dynamique en tenant compte de l'hystérésis de l'angle de contact.

Nous présentons ici le principe de l'approche numérique développée pour étudier de telles situations. Les premières simulations de validation 2D sont présentées. Elles concernent la forme d'une goutte sur une surface horizontale hydrophile ou hydrophobe, la mise en mouvement d'une goutte sur une paroi que l'on incline progressivement et finalement la déformation et la mise en mouvement d'une goutte sous l'effet d'un écoulement cisailé.

## 2 Simulation numérique de l'hystérésis de l'angle de contact

Les simulations numériques sont réalisées à l'aide du code JADIM développé à l'IMFT. Nous utilisons dans cette étude sa version "Volume Of Fluid" qui consiste à suivre les évolutions d'une interface au travers du transport du taux de présence  $C$  qui vaut 0 ou 1 en fonction

de la phase présente dans la maille considérée. Dans l'approche développée dans JADIM l'interface n'est pas reconstruite de sorte que celle-ci s'étale numériquement sur une épaisseur maîtrisée à quelques mailles (Bonometti & Magnaudet (2007)). Nous présentons ici l'implémentation numérique du modèle physique de mouillage réalisé dans le cadre de ce travail. Nous souhaitons ainsi reproduire numériquement trois phénomènes essentiels : le mouillage statique, le mouillage dynamique et l'hystérésis de l'angle de contact.

Concernant le mouillage statique, il faut qu'une interface à l'équilibre respecte à la paroi un angle constant. Cet effet ne doit se répercuter que lors du calcul du terme source capillaire dans le bilan de quantité de mouvement (Brackbill *et al.* (1992)) :

$$\mathbf{F}_{v,(i,j,k)} = -\sigma \kappa_{(i,j,k)} \nabla C_{(i,j,k)} \quad \text{avec} \quad \kappa_{(i,j,k)} = \nabla \cdot \mathbf{n}_{(i,j,k)} \quad \text{et} \quad \mathbf{n}_{(i,j,k)} = -\frac{\nabla C_{(i,j,k)}}{\|\nabla C_{(i,j,k)}\|} \quad (1)$$

Il faut donc imposer à la normale à l'interface  $\mathbf{n}_{(i,j,k)}$  de prendre l'angle d'équilibre au point triple  $\mathbf{n}_{(i,j,k)} = \sin(\theta_{eq}) \cdot \mathbf{n}_{\parallel} + \cos(\theta_{eq}) \cdot \mathbf{n}_{\perp}$  où  $\mathbf{n}_{\parallel}$  est la normale parallèle à la paroi et  $\mathbf{n}_{\perp}$  la normale perpendiculaire. Comme l'interface n'est pas reconstruite il n'est pas possible d'imposer directement cette condition à la paroi. Nous avons déterminé la valeur du taux de présence à la paroi  $C_p$  qui, utilisée dans (1), permet de vérifier la bonne orientation de la normale. Par exemple pour une paroi de normale  $e_z$  on montre :

$$C_p^{(i,j)}(\theta_{eq}) = \frac{9C_{(i,j,k)} - C_{(i,j,k+1)}}{8} + \frac{3}{8} \Delta z \frac{\cos(\theta_{eq})}{\sin(\theta_{eq})} \sqrt{(\partial_x C)^2 + (\partial_y C)^2} \quad (2)$$

L'intérêt de cette méthode est sa généralité qui permet de l'utiliser quelque soit l'épaisseur numérique de l'interface en imposant la valeur de l'angle de mouillage dans toutes les cellules contenant l'interface. A noter que la condition à la limite  $C_p$  intervient uniquement dans l'étape de calcul de la force capillaire dans le bilan de quantité de mouvement. En effet, la vitesse normale à la paroi étant nulle,  $C_p$  n'intervient pas dans l'équation de transport de  $C$  qui garde ainsi son caractère conservatif.

Concernant l'implémentation numérique de l'angle de contact dynamique  $\theta_d$ , nous imposons tout simplement le taux de présence  $C_p(\theta_d)$  à la paroi à l'aide de l'équation (2) dans laquelle  $\theta_{eq}$  est remplacée par  $\theta_d$ . L'angle de contact dynamique  $\theta_d$  est calculé localement à partir du modèle de Dussan (Ngan & Dussan (1989)) qui propose de décrire la forme de l'interface à l'échelle macroscopique tout en introduisant une condition de glissement permettant de prendre en compte la perte de validité de l'approche "milieu continu" à l'échelle du point triple. Pour cela nous calculons la vitesse de l'interface parallèle à la paroi  $U_{lt,(i,j,k)}$  en projetant la vitesse moyenne dans la maille considérée  $\mathbf{U}_{(i,j,k)}$  sur la composante parallèle à la paroi de la normale à l'interface, soit  $U_{lt,(i,j,k)} = \mathbf{U}_{(i,j,k)} \cdot \mathbf{n}_{\parallel}$ .

L'implémentation numérique de l'hystérésis de l'angle de contact est plus délicate car l'angle avec la paroi dépend de la direction de sollicitation de l'interface. En effet, lorsque l'on incline progressivement la paroi sur laquelle est posée une goutte, celle-ci ne se met pas immédiatement en mouvement. L'angle à l'avant augmente progressivement jusqu'à atteindre une valeur limite qui correspond à la mise en mouvement du point triple. Cet angle limite est l'angle d'avancée  $\theta_A$ . A l'arrière, l'angle diminue progressivement jusqu'à atteindre l'angle de recul  $\theta_R$ . La différence entre ces 2 angles correspond à l'hystérésis de l'angle de contact. La valeur de l'angle dépend donc du signe de la vitesse normale à l'interface. Si  $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} < 0$  alors  $\theta < \theta_R$ , si  $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} = 0$  alors  $\theta_R \leq \theta \leq \theta_A$  et si  $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} > 0$  alors  $\theta_A < \theta$ . Pour reproduire l'hystérésis de l'angle de contact, la méthode utilisée consiste à déterminer l'angle d'équilibre  $\theta^*$  qui annule la quantité de mouvement dans la maille contenant le point triple. Si  $\theta_R \leq \theta^* \leq \theta_A$  alors l'interface est immobile et l'angle imposé à la paroi est  $\theta^*$  et la valeur de  $C_p$  à la paroi est calculée avec  $\theta^*$ .

Si  $\theta^* < \theta_R$  ou  $\theta_A < \theta^*$  alors la valeur de l'angle est imposée à  $\theta_R$  ou  $\theta_A$  si l'interface était jusqu'à cet instant immobile. Les fluides se mettent alors localement en mouvement sous l'effet du déséquilibre local de quantité de mouvement. L'angle dynamique est ensuite calculé comme expliqué ci-dessus en fonction de la vitesse de glissement de l'interface à la paroi.

A noter que le modèle de Dussan impose une contrainte sur l'échelle des mailles à la paroi. En effet ce modèle décrit l'angle dynamique dans la région intermédiaire  $r \sim 10 \mu m$  comprise entre la région contrôlée par les forces à longue portée ( $\sim 0.1 \mu m$ ) et la région macroscopique ( $\sim l_c$ ,  $l_c$  étant la longueur capillaire) (Voir par exemple Ngan & Dussan (1989)). Ainsi, cette approche nous impose l'utilisation de mailles à la paroi qui doivent être du même ordre de grandeur que  $r$ , soit  $\Delta x = \Delta y = \Delta z \sim 10 \mu m$ .

## 2.1 Equilibre d'une goutte sur une paroi horizontale

Les premiers tests de validation ont été réalisés en considérant une goutte 2D à l'équilibre sur une paroi. Pour cela, un demi-disque de liquide de rayon  $R$  est initialement posé sur une surface plane horizontale. Comme l'angle initial est  $\theta_{init} = 90^\circ \neq \theta_{eq}$ , l'interface de la goutte se trouve dans une situation hors équilibre. Nous avons fait des tests pour des parois hydrophiles et hydrophobes. Le rayon initial de la goutte est décrit à l'aide de 40 mailles environ.

La figure 1 présente un exemple de résultat pour une paroi hydrophile ( $\theta_{eq} = 50^\circ$ ) en l'absence de gravité. Les iso- $C$  sont reportées pour la valeur  $C = 0.5$  généralement attribuée à la position de l'interface, ce que confirme ici la comparaison avec la position théorique, mais aussi pour les valeurs  $C = 0.05$  et  $C = 0.95$  afin de montrer l'étalement numérique de l'interface. Les données physiques sont :  $R = 0.01m$ ,  $\rho_L = 1000 kg.m^{-3}$  et  $\mu_L = 10^{-2} Pa.s$  pour le liquide,  $\rho_G = 1 kg.m^{-3}$  et  $\mu_G = 10^{-5} Pa.s$  pour le gaz et la tension de surface est  $\sigma = 0,072 N.m^{-1}$ . Dans ces conditions, la goutte est à l'équilibre une calotte sphérique de rayon  $R_{th,eq} = 2.032 cm$ ,  $L_{th,eq} = 3,11cm$  est la longueur de son étalement et  $P_{th,eq} = 3.543 Pa$  est la pression capillaire.

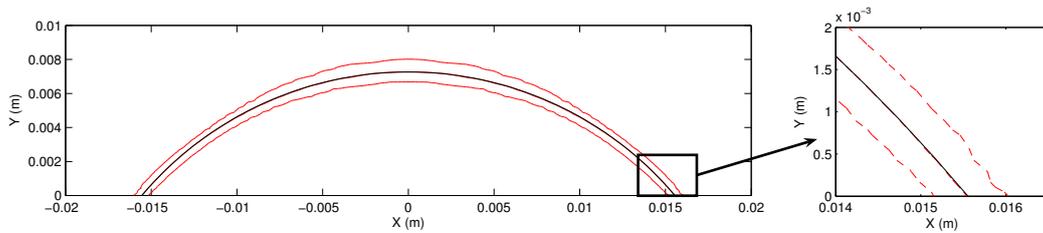


FIG. 1 – Forme d'une goutte à l'équilibre sur une paroi hydrophile ( $\theta_{eq} = 50^\circ$ ). A gauche : vue d'ensemble. A droite : Agrandissement de la région du point triple. - - - Simulation (isovaleurs  $C = 0.05/0.5/0.95$ ), — forme théorique

La figure 2 présente l'interface de la flaque à l'équilibre sur une paroi hydrophobe ( $\theta_{eq} = 150^\circ$ ) en présence de gravité. Dans cette situation, la gravité tend à diminuer l'épaisseur  $e$  de la goutte tandis que la force capillaire tend à minimiser l'aire interfaciale tout en maintenant l'angle  $\theta_{eq}$ . L'équilibre entre le gradient de pression et la force capillaire permet d'obtenir l'épaisseur théorique  $e_{th} = 2l_c \sin(\theta_{eq}/2)$  où  $l_c$  est la longueur capillaire. Les données physiques sont :  $R = 0.01m$ ,  $\rho_L = 1000 kg.m^{-3}$ ,  $\mu_L = 10^{-1} Pa.s$ ,  $\rho_G = 1 kg.m^{-3}$ ,  $\mu_G = 10^{-5} Pa.s$ ,  $\sigma = 0,148 N.m^{-1}$  et  $g = 9,81 m.s^{-2}$ . La longueur capillaire est alors  $l_c = 3,88 mm$  et l'épaisseur théorique est  $e_{th} = 7,50 mm$ . On trouve numériquement  $e_{num} = 7,22 mm$ .

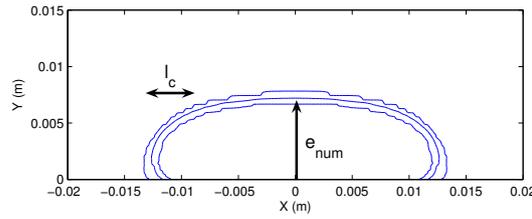


FIG. 2 – Goutte à l'équilibre sur une paroi hydrophobe  $\theta_{eq} = 150^\circ$  en présence de gravité.

### 3 Goutte sur un plan incliné

Nous considérons maintenant une goutte positionnée sur une paroi que l'on incline progressivement. L'équilibre des forces de gravité et de capillarité permet de déterminer l'angle d'inclinaison avec l'horizontal  $\alpha_{th}$  de mise en mouvement de la goutte  $\rho_L A_L g \sin\alpha_{th} = \sigma (\cos\theta_R - \cos\theta_A)$  où  $A_L$  est la surface de la goutte. Les propriétés sont  $\rho_L = 1000 \text{ kg/m}^3$ ,  $\mu_L = 10^{-2} \text{ Pa.s}$ ,  $\rho_L = 1 \text{ kg/m}^3$ ,  $\mu_L = 2.10^{-5} \text{ Pa.s}$  et  $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ . La tension de surface vaut  $0,036 \text{ N.m}^{-1}$ ,  $0,072 \text{ N.m}^{-1}$  ou  $0,144 \text{ N.m}^{-1}$ , le nombre de Eötvös  $EO = \rho_L g R^2 / \sigma$  prenant les valeurs  $EO = 0,5, 1$  ou  $2$ . Trois conditions d'hystérésis différentes sont considérées. Le domaine simulé est un canal de dimension  $L \times H = 5 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$  décrit par  $400 \times 80$  mailles. La goutte est initialement un demi-disque de rayon  $R = H/2$  décrit par 40 mailles.

La comparaison entre l'angle donné par les simulations numériques  $\alpha_{num}$  et l'angle théorique  $\alpha_{th}$  est reportée dans le tableau 1 alors que la figure 3 présente la forme de la goutte au moment de la mise en mouvement. On remarque que les angles mesurés coïncident parfaitement avec la théorie. A l'exception du cas  $EO = 1$  et  $\theta_R = 40^\circ$  pour lequel la différence est plus importante, dans tous les autres cas,  $\alpha_{num}$  décrit à 1 ou 2 degrés près  $\alpha_{th}$ . On remarquera la grande influence des paramètres ( $\theta_A$ ,  $\theta_R$  et  $EO$ ) sur  $\alpha_{th}$ . Ainsi, pour  $EO = 2$ , la gravité domine la tension de surface, ce qui implique qu'à partir d'une inclinaison limite, la goutte ne peut rester accrochée à la paroi pour les valeurs d'hystérésis choisies et se met en mouvement. A l'inverse, pour une tension de surface qui domine la gravité ( $EO = 0,5$ ), la goutte peut rester accrochée à la paroi jusqu'à la position verticale.

$\alpha_{th}/\alpha_{num}$	$(\theta_R, \theta_A) = (80^\circ, 100)$	$(\theta_R, \theta_A) = (60^\circ, 120^\circ)$	$(\theta_R, \theta_A) = (40^\circ, 140^\circ)$
$EO = 0,5$	$26^\circ/27^\circ$	Pas de mise en mvt	Pas de mise en mvt
$EO = 1$	$13^\circ/14^\circ$	$40^\circ/38^\circ$	$79^\circ/62^\circ$
$EO = 2$	$6^\circ/10^\circ$	$19^\circ/21^\circ$	$29^\circ/31^\circ$

TAB. 1 – Angles de mise en mouvement théorique  $\alpha_{th}$  et numérique  $\alpha_{num}$

### 4 Goutte soumise à un cisaillement

Dans un premier temps nous considérons une goutte 2D dans un écoulement de Couette en régime visqueux afin de confronter les résultats avec ceux de la littérature obtenus en écoulement de Stokes (Spelt (2005) et Schleizer & Bonnecaze (1999)). Initialement, la goutte est sphérique et l'angle de contact est  $\theta_i = 60^\circ$ . La comparaison impose  $\mu_L = \mu_G = \mu$  et  $\rho_L = \rho_G = \rho$ . Les simulations ont été réalisées dans un domaine de longueur  $L = 1,5H$  pour  $Ca = \mu U_p h / H \sigma = 0.05, 0.1$  et  $0.15$  (respectivement  $Re = \rho U_p h^2 / H \mu = 0.01, 0.02$  et  $0.03$ ) où  $U_p$  est la vitesse de la paroi supérieure,  $H$  la hauteur du canal et  $h$  la hauteur initiale de la goutte. Le maillage est régulier et la hauteur initiale  $h$  de la goutte contient 20 mailles. La

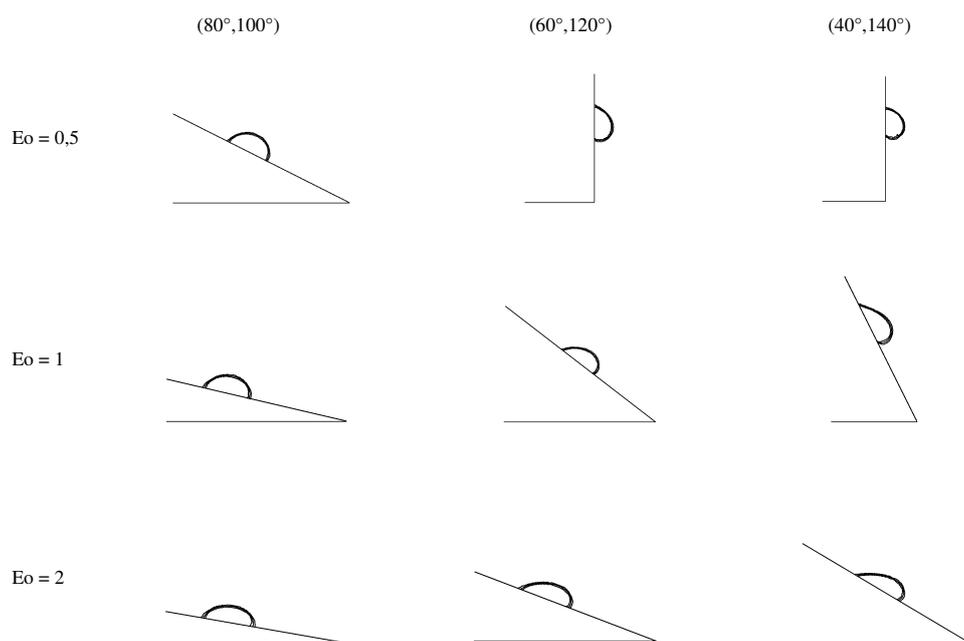


FIG. 3 – Gouttes sur une paroi inclinée lors de la mise en mouvement, en fonction du nombre de Eötvös  $Eo$  et de l’hystérésis de l’angle de contact  $(\theta_R, \theta_A)$

figure 4 montre que les profils de goutte de nos simulations sont en parfait accord avec ceux de Schleizer & Bonnecaze (1999).

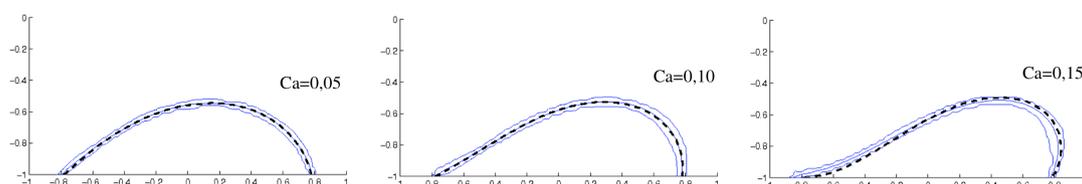


FIG. 4 – Comparaison entre les profils de goutte issus de nos simulations (isocontours du taux de présence  $C = 0, 05/0, 5/0, 95$ ) avec les résultats de Schleizer & Bonnecaze (1999).

Dans le cas général de la mise en mouvement d’une goutte de hauteur initiale  $h$  dans un canal de hauteur  $H$ , le problème est contrôlé par le nombre de Eötvös  $Eo$ , l’hystérésis de l’angle de contact  $(\theta_R, \theta_A)$ , les rapports  $\mu_L/\mu_G$ ,  $\rho_L/\rho_G$  et  $h/H$ , le nombre capillaire  $Ca$  et le nombre de Reynolds  $Re = \rho_G j_{G,d} h/\mu_L$  où  $j_{G,d}$  est la vitesse débitante de gaz au-dessus de la goutte,  $Q = (H - h) j_{G,d}$  étant le débit dans le canal. Afin de nous focaliser sur l’effet du cisaillement induit par le gaz, les paramètres physiques sont choisis pour que la gravité soit négligeable devant la tension de surface ( $Eo \ll 1$ ). Les rapports de viscosité et de densité sont tels que  $\mu_L/\mu_G = 500$  et  $\rho_L/\rho_G = 1000$ . Le domaine physique simulé est un canal de dimension  $L \times H = 5mm \times 1mm$  et est décrit par  $400 \times 80$  mailles. La goutte est initialement un demi-disque de rayon  $h$  décrit par 40 mailles. Les propriétés des fluides sont  $\rho_L = 1000kg/m^3$ ,  $\mu_L = 10^{-2}Pa.s$ ,  $\rho_G = 1kg/m^3$ ,  $\mu_G = 2.10^{-5}Pa.s$ . La vitesse moyenne débitante  $Q/H$  est prise dans la gamme de 0 à 10 m/s. Le nombre capillaire vérifiant alors  $Ca < 10^{-3}$ , les effets visqueux sont négligeables devant la tension de surface. Les nombres pertinents sont finalement le nombre de Reynolds  $Re$ , le rapport des hauteurs  $h/H$  et l’hystérésis de l’angle de contact  $\Delta\theta = \theta_A - \theta_R$ . Nous étudions 3 tailles de goutte  $h = 0, 2mm, 0, 5mm$  et  $0, 8mm$  et 3 hystérésis  $\Delta\theta = 100^\circ - 80^\circ, \Delta\theta = 120^\circ - 60^\circ$

et  $\Delta\theta = 140^\circ - 40^\circ$ . Pour chaque cas, nous mesurons la valeur seuil du nombre de Reynolds  $Re_s = \rho_G j_{G,d} h / \mu_L$  correspondant à la mise en mouvement de la goutte. La figure 5 compare les formes de gouttes pour les 3 tailles et les 3 gammes d'hystérésis. Alors que la goutte de taille  $h/H = 0,2$  ne connaît pas de déformation notable et par conséquent de mise en mouvement, les gouttes de taille supérieure sont fortement déformées et ensuite mises en mouvement pour les Reynolds  $Re_{h/H=0,4}^{80^\circ-100^\circ} = 0.44$ ,  $Re_{h/H=0,8}^{80^\circ-100^\circ} = 0.38$ ,  $Re_{h/H=0,4}^{60^\circ-120^\circ} = 0.72$ ,  $Re_{h/H=0,8}^{60^\circ-120^\circ} = 0.76$ ,  $Re_{h/H=0,4}^{40^\circ-140^\circ} = 0.85$  et  $Re_{h/H=0,8}^{40^\circ-140^\circ} = 1,10$ . Nous voyons ainsi que malgré une forte hystérésis, une goutte de taille comprise entre  $h/H = 0,2$  et  $h/H = 1$  est sensible au cisaillement induit par le débit de gaz et se met en mouvement pour un débit d'autant faible que sa taille est importante.



FIG. 5 – Déformation de gouttes par cisaillement de gaz, pour les hystérésis ( $80^\circ, 100^\circ$ ) (gauche), ( $60^\circ, 120^\circ$ ) (milieu) et ( $40^\circ, 140^\circ$ ) (droite), pour 3 tailles de goutte  $h/H = 0,2, 0,4$  et  $0,8$ .

## 5 Conclusions

Nous avons présenté l'approche numérique implémentée dans JADIM pour décrire le comportement de la ligne triple liquide-gaz-solide. La particularité de ce code est de ne pas reconstruire l'interface ce qui ne permet pas d'imposer directement la pente de l'interface à la paroi. Différents tests ont été réalisés pour valider cette approche. Il s'agit de l'étalement d'une goutte sur une paroi hydrophile ou hydrophobe, de la mise en mouvement d'une goutte posée sur une paroi que l'on incline progressivement ou qui est soumise à un cisaillement. Nous montrons qu'il est ainsi possible avec cette approche de reproduire numériquement trois phénomènes essentiels : le mouillage statique, le mouillage dynamique et l'hystérésis de l'angle de contact.

**Remerciements** Nous remercions RENAULT (Technocentre, Guyancourt) et l'ADEME pour le financement des travaux.

## Références

- Bonometti T. & Magnaudet J. 2007 An interface capturing method for incompressible two-phase flows. Validation and application to bubble dynamics. *Int. J. of Multiphase Flow* **33(2)** 109-133.
- Brackbill J., Kothe D.B. & Zemach C. 1992 A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.* **100** 335-354.
- Ngan C. G. & Dussan E. B. 1989 On the dynamics of liquid spreading on solid surfaces. *J. Fluid. Mech.* **209** 191-226.
- Spelt P. D.M. 2005 A level-set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis. *J. Comput. Phys.* **207** 389-404
- Schleizer A. D. & Bonnecaze R. T. 1999 Displacement of a two-dimensional immiscible droplet adhering to a wall in shear and pressure-driven flows. *J. Fluid Mech.* **383** 29-54.