

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

Margherita CASTELLANO, CMAP - École Polytechnique - Palaiseau

Nous nous intéressons dans ce travail à l'analyse numérique d'un modèle de champ de phases avec surfactants, initialement introduit par Laradji et al. [3]. Ce modèle représente la dynamique de séparation de phases entre l'eau et l'air en présence de surfactants, avec de nombreuses applications, par exemple en pharmacologie, en biologie et en physique. Nous nous proposons de décrire cette dynamique avec deux équations de Cahn-Hilliard couplées. L'équation de Cahn-Hilliard représente le processus de séparation de phases de deux fluides non-miscibles, selon lequel les fluides se séparent spontanément et forment des sous-domaines de phases pures [1]. Nous utilisons ainsi une première équation de Cahn-Hilliard pour décrire la dynamique de séparation de phases entre l'eau et de l'air. Nous nous plaçons sous l'hypothèse que ces derniers occupent l'entière du domaine considéré, et que leurs concentrations ϕ_1 et ϕ_2 vérifient donc la relation $\phi_1 + \phi_2 = 1$. Il suffit alors d'étudier l'évolution d'une seule des concentrations $\phi = \phi_1$ (appelé paramètre d'ordre et à valeurs dans $[-1, 1]$, pour lequel la valeur -1 correspond à l'air et la valeur 1 correspond à l'eau), le comportement de l'autre étant donné par $1 - \phi$. Les surfactants (diminutif de *Surface Active Agents*), sont des molécules vivant à l'intérieur de l'eau et constituées à la fois d'une partie hydrophile et d'une partie hydrophobe, ce qui les conduit à s'agréger les uns aux autres vers la surface de l'eau [2]. Nous modélisons ce comportement à travers une deuxième équation de Cahn-Hilliard, représentant les surfactants comme un fluide se séparant de l'eau. Notons c la concentration des surfactants, à valeurs dans $[0, 1]$. Le système est le suivant : On cherche $\phi : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ et $c : (0, T) \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, telles que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t \phi = M_\phi \Delta \mu & \forall (t, x) \in (0, T) \times \Omega, \\ \mu = -\epsilon_\phi \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_\phi} f'_\phi(\phi) + \partial_\phi W(\phi, c) & \forall (t, x) \in (0, T) \times \Omega, \\ \partial_t c = M_c \Delta \eta & \forall (t, x) \in (0, T) \times \Omega, \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_c(c) + \partial_c W(\phi, c) & \forall (t, x) \in (0, T) \times \Omega, \\ \nabla \phi \cdot \vec{n} = \nabla c \cdot \vec{n} = \nabla \mu \cdot \vec{n} = \nabla \eta \cdot \vec{n} = 0, & \forall (t, x) \in (0, T) \times \partial \Omega, \end{array} \right.$$

où Ω est un ouvert borné de \mathbb{R}^d ($d = 2$ ou 3), ϵ_ϕ et ϵ_c représentent les épaisseurs d'interface associées respectivement à ϕ et à c , et $W(\phi, c)$ le potentiel de couplage. Les potentiels f_ϕ et f_c sont des potentiels à double puits qui garantissent la non-miscibilité des phases, donnés respectivement par $f_\phi(\phi) = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2$ et $f_c(c) = c^2(1 - c)^2$. Les coefficients de diffusion M_ϕ et M_c sont des paramètres physiques appelés mobilité. L'une des principales difficultés rencontrées réside dans le choix du potentiel $W(\phi, c)$, choix significatif pour concilier à la fois la vraisemblance physique du modèle, le caractère bien posé du système et la stabilité du schéma numérique [4]. On propose ici une méthode volumes finis associée à ce modèle, et on réalise l'analyse numérique de ce schéma (estimation d'énergie, existence, convergence, ...). On présentera également des simulations numériques permettant de valider le modèle.

- [1] J.-W. Cahn, J.-E. Hilliard. *Free energy of a nonuniform system. I. interfacial free energy*. The Journal of Chemical Physics, **28(2)**, 258–267, 1958. doi :10.1063/1.1744102.
- [2] J. H. Clint. *Surfactant aggregation*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [3] M. Laradji, H. Guo, M. Grant, M. J. Zuckermann. *The effect of surfactants on the dynamics of phase separation*. Journal of Physics : Condensed Matter, **4(32)**, 6715, 1992.
- [4] J. Zhang, C. Chen, J. Wang, X. Yang. *Efficient, second order accurate, and unconditionally energy stable numerical scheme for a new hydrodynamics coupled binary phase-field surfactant system*. Computer Physics Communications, **251**, 107122, 2020.