

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Theoretische Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Theoretical Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Mathematische Modellierung und Simulation der Wechselwirkung von Substraten mit Strömungen durch verallgemeinerte Gradientenflüsse**

**Title** **Mathematical modeling and simulation of substrate-flow interaction using generalized gradient flows**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **PE 1782/2-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Dirk Peschka**  
Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)  
Forschungsgruppe Modellierung, Analysis u Skalenübergänge  
von Volumen-Grenzschicht-Prozessen  
Berlin

**Arbeitgeberzusage Statement by Employer** Die Erklärung zur Arbeitgeberfunktion liegt noch nicht vor.  
A statement regarding employer status has not yet been received.

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>PE 1782/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>225.450</b>		
<b>Dr. Dirk Peschka</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>209.700</b>
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>15.750</b>
Gäste / Visiting Researchers			4.500
Publikationen / Publications			2.250

Reisen / Travel			9.000
-----------------	--	--	-------

## Zusammenfassung

Der Antrag im Schwerpunktprogramm „Dynamic Wetting of Flexible, Adaptive and Switchable Surfaces“ (SPP 2171) befasst sich mit der thermodynamisch konsistenten Behandlung von Strömungen auf Substraten, deren Dynamik stark an die Eigenschaften bzw. die Dynamik dieses Substrates gekoppelt ist. Methodisch konzentriert sich die Arbeit dabei auf sogenannte Gradientenflüsse, d.h. Modellbeschreibungen bei denen konservative Kräfte im optimalen Gleichgewicht mit dissipativen Reibungskräften stehen. Während solche Beschreibungen im klassischen Fall von quadratischer Dissipation im Volumen bereits relativ gut untersucht sind, ist das Ziel des vorliegenden Antrages die systematische Erweiterung dieser Ansätze auf nicht-quadratische Dissipation unter der Einbeziehung von Grenzflächen und Kontaktlinien. Insbesondere für Entnetzungsprozesse haben die Vorarbeiten des Antragstellers klar gezeigt, dass die Einbeziehung solcher Ansätze von essentieller Bedeutung für physikalisch realistische Beschreibungen ist.

In der theoretischen Beschreibung geht es hierbei vor allen Dingen um Kontinuumsmodelle mit scharfen Grenzflächen und bewegten Kontaktlinien, wobei hier sowohl (Navier)-Stokes Gleichungen als auch reduzierte Modelle für dünne Filme betrachtet werden sollen. Neben der Entwicklung von Modellstrukturen ist die Implementation entsprechender numerischer Verfahren auf Basis von finiten Elementen ein integraler Bestandteil dieses Antrages. Hier stehen besonders die Fragestellungen der numerischen Behandlung von verallgemeinerten Gradientenstrukturen mit Hysterese und die Bewegung von Gebieten mit sogenannten „Arbitrary Lagrangian Eulerian“ Verfahren im Vordergrund.

Die entwickelten Methoden sollen dann auf unterschiedlichen Anwendungsszenarien anderer Projekte des Schwerpunktprogramms übertragen werden: Naheliegend ist der Vergleich der numerischen Methoden mit unterschiedlichen numerischen Verfahren anderer Kollegen. Weiterhin erlaubt die energetische Formulierung die Beschreibung chemisch heterogener Substrate (z.B. energetischer Stufen), mit denen z.B. die Entnetzungsdynamik von Tropfen direkt beeinflusst werden kann. Die konkrete Entwicklung der Volumen/Grenzflächen/Kontaktlinien-Kopplung ist in Zusammenarbeit mit anderen Projekten geplant. Die Kopplung an Substrate mit einer eigenen Dynamik soll für poröse Substrate, Substrate mit „Surfactants“ und deformierbare Substrate erfolgen.

## Summary

The proposal in the priority program "Dynamic Wetting of Flexible, Adaptive and Switchable Surfaces" (SPP 2171) considers the thermodynamically consistent treatment of flows over substrates whose dynamics is strongly coupled to the properties or the dynamics of this substrate. Methodically, the work concentrates on so-called gradient flows, i.e. model descriptions in which conservative forces are in optimal equilibrium with dissipative friction forces. While such descriptions are already well studied in the classical case, i.e. quadratic dissipation in volume, the aim of the present proposal is the systematic extension of these approaches to non-quadratic dissipation and the inclusion of free interfaces and contact lines. Especially for dewetting processes, the preliminary work of the applicant has clearly shown that the inclusion of such approaches is of essential importance for physically realistic .

The theoretical description is mainly concerned with continuum models with sharp interfaces and moving contact lines, where both (Navier)-Stokes equations and reduced models for thin films will be considered. In addition to the development of model structures, the implementation of numerical methods based on finite elements is an integral part of this proposal. In particular, the numerical treatment of generalized gradient structures with

hysteresis and the movement of regions with so-called Arbitrary Lagrangian Eulerian methods are the main topics.

The developed methods will then be transferred to different applications of other projects in the priority program: Numerical methods will be compared with different approaches of other colleagues. Furthermore, the energetic formulation allows the description of chemically heterogeneous substrates (e.g. energetic steps), with which, e.g., the dewetting dynamics of droplets can be directly influenced. The concrete development of the volume/interface/contact line coupling is planned in cooperation with other projects. The coupling to substrates with their own dynamics will take place for porous substrates, substrates with "surfactants" and deformable substrates.