



HAL
open science

Modélisation des effets capillaires en mécanique des milieux discrets

Jean-Paul Caltagirone

► **To cite this version:**

Jean-Paul Caltagirone. Modélisation des effets capillaires en mécanique des milieux discrets. 2016. hal-01251670

HAL Id: hal-01251670

<https://hal.science/hal-01251670v1>

Preprint submitted on 6 Jan 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation des effets capillaires en mécanique des milieux discrets

Jean-Paul Caltagirone

Université de Bordeaux
Institut de Mécanique et d'Ingénierie
Département TREFLE, UMR CNRS n° 5295
16 Avenue Pey-Berland, 33607 Pessac Cedex
calta@ipb.fr

Résumé

La modélisation des effets capillaires est abordée à partir des concepts développés en mécanique des milieux discrets. La force capillaire est portée par le segment sur lequel est dérivée l'équation du mouvement discrète. La formulation présentée et la méthodologie numérique mise en oeuvre permettent de retrouver exactement des solutions analytiques simples comme la loi de Laplace. Une attention toute particulière est consacrée à l'obtention de l'état de repos de gouttes, de bulles, ou de ménisques ; il est montré que ces états d'équilibre statiques ne peuvent être obtenus qu'en considérant, au sein de l'équation du mouvement, un potentiel vectoriel qui accumule les contraintes de cisaillement.

Le mouillage a été modélisé en utilisant uniquement la définition de l'angle de contact statique ; les évolutions de la forme des interfaces sont aussi soumises aux forces inertielle et visqueuse avant de satisfaire l'angle de mouillage à l'état de repos. Une méthode de marqueurs de type front-tracking a été développée pour simuler le comportement de gouttes et de bulles où la courbure est calculée sur le maillage lagrangien et le mouvement est simulé sur un maillage eulérien non structuré à base de polygones ou de polyèdres. L'évolution des mousses est modélisée par une approche simplifiée permettant de prendre en compte le comportement d'un grand nombre de bulles.

Mots clés

Mécanique des milieux discrets, mécanique des milieux continus, décomposition de Hodge-Helmholtz, effets capillaires, loi de Laplace.

Modeling of Capillary Effects in Discrete Mechanics

Abstract

The modeling of the capillary effects is approached starting from the concepts developed in discrete mechanics. The capillary force is supported by the edge on which is derived the discrete momentum equation. The formulation presented and the numerical methodology put in work make it possible to find exactly simple analytical solutions like the law of Laplace. A very detailed attention is devoted to obtaining the at rest state of drops, bubbles, or meniscuses ; it is shown that these static states of equilibrium can be obtained only while considering, within the momentum equation, a vector potential which accumulates shear stresses.

Wetting was modelled by using only the definition of the static contact angle ; the evolutions of the shape of the interfaces are also subjected to the inertial and viscous forces before satisfying the angle with damping to the at rest state. A method of markers of front-tracking type was developed to simulate the behavior of drops and of bubbles where the curvature is computed on the lagrangian grid and the momentum is simulated on a eulerian not structured grid containing polygons or polyhedrons. The evolution of foams is modelled by a simplified approach making it possible to take into account the behavior of a large number of bubbles.

Keywords

Discrete Mechanics, Continuum Mechanics, Hodge-Helmholtz decomposition, capillary effects, Laplace's law.

1 Introduction

La mécanique des milieux discrets initiée en 2013 a été formalisée depuis dans un ouvrage [3]. Elle correspond à une vision différente de celle établie sur la base du concept de milieu continu et qui est aujourd'hui ce que l'on désigne par la mécanique des milieux continus. Même si ces deux approches sont différentes et les équations très différentes elles donnent les mêmes solutions pour des problèmes simples notamment à propriétés physiques constantes.

Le cas des écoulements multiphasiques traités ici induisent des variations discontinues des propriétés physiques qui mettent en défaut le formalisme de milieu continu. La différentiation et l'intégration comme les autres résultats de l'analyse ont été de considérables outils dans la description des lois de la Nature. Même si le calcul infinitésimal a été développé dès le moyen âge ce sont les savants d'Oxford et de Cambridge au XVII siècle et en particulier Isaac Newton qui développa l'analyse et Gottfried Leibniz qui le formalisa et qui introduisit les notations encore utilisées aujourd'hui. En mécanique, le paradigme dominant depuis plus de deux siècles est le milieu continu.

D'une part le problème de la dérivation d'une quantité discontinue pose un réel problème qui n'a pas été résolu en écrivant des équations aux discontinuités ou en considérant des sauts de celles-ci. Mais le problème le plus important est relatif à la confusion entre propriétés physiques et variables, notamment la masse volumique peut être les deux mais pas dans la même équation. L'adoption d'une loi d'état comme une équation susceptible d'obtenir le même nombre d'équations que d'inconnues a introduit une incohérence supplémentaire. Ces difficultés et bien d'autres sont liées à la notion de milieu continu où toutes les quantités sont réduites en un point matériel. Pour retrouver la notion de direction celle de référentiel a d'emblée pris une importance abusive. Les conséquences du choix de milieu continu sont nombreuses et ont favorisé l'adoption des outils de l'analyse ou de la géométrie différentielle qui apparaissent aujourd'hui comme surabondants pour une description cohérente de la mécanique. C'est ainsi que le concept de tenseur n'est absolument pas utile à cette description et conduit à des conditions de compatibilité supplémentaires à respecter. Les problèmes évoqués ici comme d'autres relatés dans [3] conduisent à l'abandon de cette hypothèse de milieu continu au profit d'une description essentiellement basée sur des concepts simples de géométrie différentielle.

L'objet de la mécanique des milieux discrets est la dérivation d'équations représentatives de la physique à partir de principes parfaitement établis comme le principe fondamental de la dynamique présenté par Isaac Newton dans ses *Principia*. A cette époque Newton avait une vision discrète de la force représentée par un bipoint et une orientation. En restant dans le champ d'une mécanique classique une équation du mouvement doit pouvoir représenter fidèlement un certain nombre de phénomènes ou d'effets comme la viscosité, l'inertie, la dissipation, la propagation des ondes, la gravité, les effets capillaires, la rotation, etc. Il a été exceptionnel que des résultats scientifiques d'importance aient pu être établis à partir de considérations physiques et d'intuitions. La voie la plus simple reste l'utilisation de principes parfois associés à des postulats pour établir une équation dont il est illusoire vouloir en comprendre le sens sans sa résolution. Les interactions entre les phénomènes physiques décrits par les différents termes qui composent cette équation sont effectivement complexes à appréhender sans le recours à des applications concrètes et incontournables. Ainsi bâtir une équation est le moyen de comprendre la réalité.

L'équation reprise ici a déjà permis de retrouver tous les résultats issus de l'équation de Navier-Stokes lorsque celle-ci est utilisée dans le cadre d'écoulements à propriétés constantes. Mais le champ couvert par l'équation du mouvement de la mécanique discrète est beaucoup plus large. La mécanique des fluides et des solides sont maintenant qu'une seule et même mécanique, seules les propriétés physiques changent; ainsi une formulation en vitesse permet de

calculer les vitesses et déplacements mais aussi les contraintes de pression et de cisaillement de manière simultanée [5], [2]. Cette formulation sans tenseur n'est assortie d'aucune condition de compatibilité pour passer des contraintes aux déplacements.

L'équation du mouvement se présente comme un extracteur naturel de Hodge-Helmholtz d'un vecteur en composantes solénoïdale et irrotationnelle. Elle a permis d'apporter une cohérence aux méthodes de projection vectorielle et scalaire [1], [6] sur le relèvement de la pression à partir d'un champ de vitesse solénoïdal obtenu à l'issue d'un processus purement cinématique.

Cette cohérence se retrouve aussi dans la prise en compte de termes sources intégrés à l'équation du mouvement discrète notamment pour les écoulements induits par les effets capillaires à travers un terme capillaire en adéquation avec la notion d'accélération sur un segment.

2 Concept de milieu discret

2.1 Topologies

La mécanique discrète est basée sur la topologie élémentaire représentée sur la figure (1). Celle-ci est composée de segments Γ en nombre quelconque mais définissant un plan Σ ; si ce n'était pas le cas cette surface serait décomposée en triangles. Les vecteurs unitaires du segment orienté est \mathbf{t} et celui de la normale au plan orienté désigné par \mathbf{n} , ils sont orthogonaux par définition $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. Le segment est aussi défini par ses extrémités (a, b) . Une discontinuité peut être attribuée au point c sur un ou plusieurs segments de cet assemblage élémentaire. On comprend que certaines opérations s'effectueront dans l'espace même si l'on considère qu'un problème plan, comme le rotationnel de la vitesse par exemple. Cette topologie permet de construire tout type de topologies 2D de polygones ou 3D de polyèdres à nombre de côtés ou de faces quelconques.

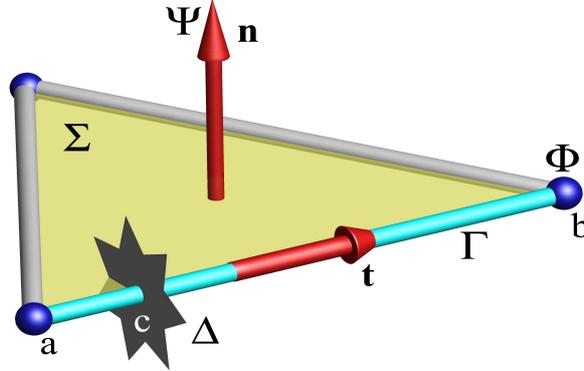


FIGURE 1. Topologie élémentaire de la mécanique des milieux discrets : trois segments rectilignes Γ délimités par des points définissent une face plane Σ . Les vecteurs unitaires de la normale à la face \mathbf{n} et du vecteur porté par Γ sont orthogonaux, $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. Les localisations associées aux points (a, b) sont $(p, \rho, \chi_T, \nabla \cdot \mathbf{V})$, respectivement la pression, la masse volumique, la compressibilité et la divergence de la vitesse. Celles associées aux segments sont la composante de vitesse, le gradient de pression et le rotationnel dual du rotationnel $\boldsymbol{\Omega}$ ($\mathbf{V}, \nabla p, \nabla_d \times \boldsymbol{\Omega}$). Celles relatives aux faces sont $(\boldsymbol{\omega}, \mu, \boldsymbol{\Omega} = \nabla_p \times \mathbf{V})$ le potentiel vecteur, la viscosité et le rotationnel primal de la vitesse. Le segment Γ peut être intercepté par une discontinuité Δ située en c sur celui-ci.

La longueur du segment $d = [a, b]$ peut être aussi petite que nécessaire et tendre vers zéro mais en aucun cas cette topologie n'est réductible à un point contrairement à la notion de milieu continu. Cette réduction est homothétique et conserve les angles; ainsi les notions de rotationnel et de circulation sur le contour conservent tout leur sens. Par contre la réduction ne conserve pas

la courbure de l'espace ce qui est un élément essentiel de la mécanique des milieux discrets.

Le vocabulaire de discret introduit ici n'a pas de lien avec la structure de la matière composée de molécules, atomes, ... ; l'équation du mouvement restera valable tant que le libre parcours moyen des molécules est petit devant la longueur d du segment Γ . La mécanique discrète se différencie par contre de la mécanique des milieux continus en un sens où la topologie élémentaire n'est jamais réductible à un point. Les principes même de la mécanique des milieux continus ne sont plus applicables comme la différentiation par exemple. La notion de référentiel galiléen est remplacée par un référentiel local. Toutes ces notions sont développées dans l'ouvrage sur ce concept [3].

Comme l'objet de cet article est l'application de ces notions aux écoulements dominés par la capillarité celles-ci seront étendues aux discontinuités Δ introduites par le changement de milieu en c sur le segment. Cette singularité peut être une discontinuité de contact ou une onde de choc. Dans le cas des écoulements diphasiques à interfaces séparées c'est une discontinuité de contact, seules les propriétés, la masse volumique ρ , la viscosité μ et le coefficient de compressibilité isotherme χ_T sont discontinues au point c . Pour ce type d'écoulements la vitesse est continue au voisinage et sur l'interface. La composante de la vitesse sur le segment Γ est ainsi supposée constante sur toute la longueur du segment, seules les propriétés subissent une discontinuité. Pour une onde de choc il en est autrement, les propriétés du fluide mais aussi la composante de la vitesse sont discontinues de part et d'autre du choc.

Dans les deux cas il ne peut y avoir de conservation de la quantité de mouvement $\rho \mathbf{V}$ sur Γ , ce n'est pas un principe fondamental de la mécanique. Lorsque ce pseudo-principe est évoqué c'est pour associer la loi de la dynamique à une conservation de la quantité de mouvement alors qu'elle exprime la conservation de l'accélération ; si on multiplie toute l'équation par la masse volumique on peut appeler celle-ci conservation de la quantité de mouvement. Il est à remarquer que la masse volumique dont il s'agit est liée à la masse inertie et à la masse grave qui sont égales (Principe d'Equivalence) et dont elle est issue.

2.2 Théorèmes généraux

Alors que la mécanique a été établie principalement en s'appuyant sur le théorème de la divergence pour l'affectation d'un flux sur une surface au volume puis à un point, la mécanique des milieux discrets dérive l'équation du mouvement à partir du théorème fondamental de l'analyse et de ses conséquences, le théorème de Stokes en particulier.

Ces théorèmes fondamentaux sont rappelés brièvement.

Si $\mathbf{F}(x)$ est uniformément et continument différentiable sur $[a, b]$ le théorème fondamental de l'analyse ou théorème fondamental du calcul différentiel et intégral s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}'(x) = \mathbf{f}(x) \\ \int_a^b f(t) dt = F(b) - F(a) \end{array} \right. \quad (1)$$

Le théorème de Stokes qui découle de théorème précédent permet de calculer le rotationnel lié à une surface comme la circulation sur son contour :

$$\int_{\Gamma} \mathbf{V} \cdot \mathbf{t} dl = \iint_{\Sigma} \nabla \times \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} ds \quad (2)$$

Ce théorème est d'une portée considérable, il permet de calculer le rotationnel sur une surface sans connaître explicitement la vitesse elle-même, il suffit de connaître ses composantes sur un

contour fermé. La notion de référentiel pour définir un vecteur vitesse en un point devient moins indispensable. Par ailleurs comme le rotationnel n'est pas défini en un point ou sur une ligne, cet opérateur n'est défini que comme un passage à la limite en continu.

Le théorème de la divergence ou de Green-Ostrogradski qui découle du théorème de Stokes permettra de calculer le relèvement des quantités définies au point :

$$\iint_{\Sigma} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \, ds = \iiint_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{V} \, dv \quad (3)$$

La dérivation de l'équation discrète du mouvement étant réalisée sur un segment Γ il est indispensable de savoir comment interpréter le produit de deux fonctions sur celui-ci. Une version du théorème des accroissements finis est le théorème de la valeur moyenne généralisé (conséquence du théorème de Rolle) pour les intégrales : $\exists c \in [a, b]$ tel que :

$$\int_a^b f(x) g(x) \, dx = f(c) \int_a^b g(x) \, dx$$

Ce théorème valable qu'en dimension un est particulièrement adapté à l'approche développée. Pour les écoulements diphasiques la valeur de la masse volumique sur le segment pourra ainsi être encadrée à partir de ses valeurs aux extrémités a et b .

Deux propriétés importantes en continu, $\nabla \times \nabla p = 0$ et $\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{V} = 0$ s'avèrent indispensables en milieu discret. Si l'on désigne par l'indice h les quantités discrètes il est aisé de montrer, sur la topologie primale, que le rotationnel discret d'un gradient discret est nul :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_a^b \nabla p \cdot \mathbf{t} \, dl = p_b - p_a \\ \int_{\Gamma} \nabla p \cdot \mathbf{t} \, dl = 0 \\ \iint_{\mathcal{S}} \nabla \times (\nabla p) \cdot \mathbf{n} \, ds = 0 \\ \nabla_h \times (\nabla_h p) = 0 \end{array} \right. \quad (4)$$

De même la divergence discrète du rotationnel primal discret calculée sur le volume dual est bien nulle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \Gamma_i = \sum_{i=1}^n \iint_{\mathcal{S}} \nabla \times \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \, ds = 0 \\ \iint_{\mathcal{S}} (\nabla \times \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} \, ds = 0 \\ \iiint_{\mathcal{V}} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) \, ds = 0 \\ \nabla_h \cdot (\nabla_h \times \mathbf{V}) = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

Ces propriétés confèrent à l'équation du mouvement discrète la capacité à représenter l'accélération comme la somme d'un gradient et d'un rotationnel c'est à dire d'écrire formellement une décomposition de Hodge-Helmholtz.

2.3 Masses volumiques au repos et inertielle

La différentiation propre au milieu continu conduit à des impasses pour les milieux discrets où les discontinuités ne permet pas la dérivation simple des fonctions. L'introduction d'équations aux discontinuités ne règle pas le problème, on écrit simplement des relations de saut comme des conditions à satisfaire sans réellement apporter de solutions pour traduire ceux-ci à partir des variables continues voisines.

L'exemple de l'équation de continuité ou de conservation de la masse est emblématique des difficultés rencontrées pour définir les masses volumiques aux points ρ et sur le segment ρ_v . Ces deux quantités correspondent à des concepts physiques différents. La masse volumique ρ_v est celle qui est associée à la vitesse, à l'inertie ; le principe d'équivalence l'identifie à la masse volumique gravitaire (masse grave). La masse volumique définie au point représente une quantité au repos ou dans un mouvement de translation uniforme lorsque l'on suit une particule au cours de son mouvement.

En mécanique des milieux continus ces deux quantités, ρ et ρ_v sont confondues et rien ne permet plus de les distinguer. C'est ainsi que la dérivée partielle peut être calculée simplement dans une formulation non conservative ou conservative :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{V} - \mathbf{V} \cdot \nabla \rho = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) \quad (6)$$

Cette équation est associée fortement à l'équation du mouvement en mécanique des fluides et la masse volumique qui y apparait est considérée comme une variable à part entière.

En mécanique des milieux discrets la masse volumique qui apparait dans l'équation du mouvement est ρ_v alors que la variable de l'équation de conservation de la masse est la masse volumique au repos ρ :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{V} \quad (7)$$

Examinons les différences sur les équations (6) et (7). L'équation (6) est incohérente en milieu discret ; en effet la masse volumique est évaluée sur les points, la composante de vitesse \mathbf{V} sur le segment et $\mathbf{V} \cdot \nabla \rho$ est ensuite affecté au point. Le gradient de la masse volumique qui est une fonction discontinue n'a pas de sens. la forme conservative $\nabla \cdot (\rho \mathbf{V})$ n'est pas plus de sens car la masse volumique ρ doit être évaluée sur le segment puis la divergence affecte le produit sur le point.

L'équation (7) qui est la forme lagrangienne de la conservation de la masse est par contre cohérente puisque le produit $\rho \nabla \cdot \mathbf{V}$ est bien calculé sur le point comme ρ et $\nabla \cdot \mathbf{V}$ et le résultat est bien affecté au point.

Dès lors les équations du mouvement et de la conservation de la masse sont disjointes, l'équation de continuité sert uniquement à exprimer l'évolution de la masse volumique en lagrangien tandis que la conservation du mouvement est autonome et de son côté l'évolution de la composante de la vitesse sur un segment toujours en suivant le domaine au cours de son mouvement. Il est clair que l'autonomie de l'équation du mouvement est obtenue à la description de la pression en fonction directe de la vitesse elle-même. Par ailleurs aucune loi d'état ne vient introduire d'incohérences, les propriétés physiques sont simplement supposées connues à chaque instant.

L'évolution temporelle de la masse volumique et de la vitesse comme celles des autres quantités d'accumulation doit être obtenue par l'advection à la vitesse \mathbf{V} . Comme celle-ci ne peut être quantifiée par $\mathbf{V} \cdot \nabla \rho$ il est nécessaire de trouver une solution pour translater les différentes quantités sur un temps dt sur le segment Γ et calculer la masse volumique ρ_v .

Pour des écoulements diphasiques à phases séparées le calcul de ρ_v peut être mené simplement en utilisant le théorème des accroissements finis ou théorème de la moyenne sur le segment Γ d'extrémités a et b en considérant que la vitesse \mathbf{V} est constante sur ce segment :

$$\frac{1}{d} \int_a^b \rho \mathbf{V} dx = \frac{\rho_v}{d} \int_a^b \mathbf{V} dx = \rho_v \mathbf{V} \quad (8)$$

Pour une interface en c , si $x < c$, $\rho = \rho_a$ et si $x > c$, $\rho = \rho_b$ on trouve :

$$\rho_v = \frac{1}{d} \left(\int_a^c \rho_a dx + \int_c^b \rho_b dx \right) \quad (9)$$

et, si on introduit une fonction de partage $\psi \in [0, 1]$, on a :

$$\rho_v = \psi \rho_a + (1 - \psi) \rho_b \quad (10)$$

avec $\psi = [ac]/[ab]$.

2.4 Equation discrète du mouvement

Les concepts précédents permettent de dériver l'équation du mouvement discrète sur le segment Γ . Les développements de ces calculs sont donnés dans [3]. L'équation du mouvement s'écrit :

$$\underbrace{\frac{d\mathbf{V}}{dt}}_{\text{accélération}} = -\nabla \left(\underbrace{\frac{p^o}{\rho}}_{\text{accu-p}} - \underbrace{dt c_L^2 \nabla \cdot \mathbf{V}}_{\text{propagation}} \right) + \nabla \times \left(\underbrace{\frac{\omega^o}{\rho}}_{\text{accu-r}} - \underbrace{dt c_T^2 \nabla \times \mathbf{V}}_{\text{diffusion}} \right) \quad (11)$$

où c_L et c_T sont les célérités longitudinales et transversales. Cette équation inclut :

- les effets d'inertie ;
- les effets visqueux ;
- la propagation des ondes longitudinales et transversales ;
- la dissipation des ondes longitudinales et transversales ;
- les autres effets éventuels : la trainée de Darcy et autres forces massiques.

L'équation (11) est à compléter par des accumulateurs de la masse, de la pression et des contraintes mécaniques. Le système se présente alors sous la forme d'une équation vectorielle à résoudre et de potentiels à mettre à jour à partir de $\nabla \cdot \mathbf{V}$ et $\nabla \times \mathbf{V}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla \left(\frac{p^o}{\rho} - \frac{dt}{\rho \chi_T} \nabla \cdot \mathbf{V} \right) + \nabla \times \left(\frac{\omega^o}{\rho} - \frac{dt \mu}{\rho} \nabla \times \mathbf{V} \right) + \mathbf{g} \\ p = p^o - \frac{dt}{\chi_T} \nabla \cdot \mathbf{V} \\ \omega = \omega^o - \mu dt \nabla \times \mathbf{V} \\ \rho = \rho^o - \rho^o dt \nabla \cdot \mathbf{V} \end{array} \right. \quad (12)$$

où p^o et ω^o sont la pression et la contrainte de cisaillement-rotation. La masse volumique qui apparaît dans l'équation du mouvement est celle qui est associée à l'inertie ρ_v et celle qui est écrite dans la conservation de continuité est la masse volumique au repos. ρ_v est un simple paramètre physique dans l'équation et elle peut être intégrée dans les opérateurs gradient et rotationnel alors ρ constitue une variable à part entière dans la conservation de la masse.

A l'issue de la résolution de ce système toutes les quantités $(p, \rho, \boldsymbol{\omega}, \mathbf{V})$ sont advectées à la vitesse du fluide. Cette étape peut être réalisée au mieux par un transport lagrangien.

Une alternative à l'advection de la vitesse elle-même correspond à la transformation de l'équation du mouvement en une forme eulérienne :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} - \mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{V} = -\nabla \left(\frac{p^o}{\rho} - \frac{dt}{\rho \chi T} \nabla \cdot \mathbf{V} + \frac{\|\mathbf{V}\|^2}{2} \right) + \nabla \times \left(\frac{\boldsymbol{\omega}^o}{\rho} - \frac{dt}{\rho} \nabla \times \mathbf{V} \right) + \mathbf{g} \quad (13)$$

où $\mathbf{g} = \nabla \phi + \nabla \times \psi$ est la force massique qui peut être décomposée à son tour en un gradient et un rotationnel.

Comme on peut le constater sur l'équation (13) le terme en $\|\mathbf{V}\|^2$ a été intégré dans le gradient, celui-ci correspond à la pression dynamique qui peut être associé à la pression d'accumulation p^o pour donner la pression de Bernouilli. Tous les termes sont des gradients ou des rotationnels à l'exception de $\mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{V}$ qui contient les deux et dont on ne sait pas expliciter sa décomposition dans le cas général.

La forme la plus adaptée à la vision discrète initiale est donnée par le système (12) ; l'idée sous-jacente est le suivi de l'évolution du système physique au cours de son mouvement d'un équilibre mécanique à un autre. Que ce système soit transporté dans le cadre d'un mouvement dans un référentiel galiléen ou non ne change pas ces équilibres entièrement gouvernés par l'équation lagrangienne du mouvement.

2.5 Méthodologies de résolution

La littérature propose une multitude de méthodes pour représenter les évolutions d'interfaces dans un écoulement mais chacune possède des inconvénients. Toutefois toutes les méthodes ne se valent pas et certaines sont préférées à d'autres pour résoudre un problème bien spécifique.

Pour des écoulements pilotés par les effets de tension de surface il est essentiel de définir un terme capillaire de bonne qualité ; l'élément capital est bien sûr la précision sur le calcul de la courbure. Les méthodes basées sur une représentation de l'interface liée au maillage (type VOF par exemple) ont pour inconvénient la mauvaise qualité de la courbure obtenue en utilisant directement la fonction de volume ; des lissages adaptés permettent d'améliorer un peu la qualité aux prix de la dégradation de l'information locale.

Il s'avère que le calcul de la courbure par une technique lagrangienne fournit des résultats de grande qualité pour des courbes représentées par des chaînes de marqueurs ou pour des surfaces 3D maillées. La géométrie différentielle s'applique aisément pour le calcul de propriétés des surfaces (normale, courbure, ...). Elles permettent de déconnecter les topologies des surfaces (gouttes, bulles) du maillage sous-jacent et de faciliter le suivi des structures sous-maille.

Dans cet esprit deux méthodologies sont préférentiellement utilisées, une méthode de type front-tracking à base de chaînes de marqueurs ou de surfaces 3D maillées et une méthode basée sur l'adaptation du maillage à l'évolution des structures, la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian). Cette dernière technique sera brièvement présentée ci-dessous. Elle a été adaptée à la mécanique des milieux discrets car elle nécessite un découplage des milieux et la définition des propriétés, masse volumique et viscosité très précise. En effet l'utilisation d'une équation du mouvement de type Navier-Stokes et des conditions aux limites associées dégrade fortement la solution au voisinage des interfaces. La méthode à base de marqueurs et de surfaces 3D sera présentée plus en détail dans la section suivante.

Le transport du maillage par le mouvement du milieu (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) [7] nécessite de redéfinir la dérivée particulière en fonction de la vitesse du maillage $\dot{\mathbf{V}}$. Si $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi, t)$ sont les coordonnées du domaine physique et ξ celles du maillage mobile, la vitesse du maillage

est donnée par :

$$\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}\right)_{\xi} = \widehat{\mathbf{V}} \quad (14)$$

La dérivée matérielle du fluide s'écrit ainsi :

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{v} - \widehat{\mathbf{V}}) \cdot \nabla \mathbf{V} \quad (15)$$

où $\partial \mathbf{V} / \partial t$ est la dérivée temporelle de la vitesse en gardant les coordonnées ξ fixées.

Cette technique nécessite de modifier la position des noeuds qui constituent l'interface ce qui introduit une première difficulté. Le problème principal réside toutefois dans la dégradation de la qualité du maillage au cours de l'évolution de l'interface et la nécessité, de temps à autre de modifier la structure de celui-ci par un remaillage et le changement de connectivités et donc du graphe.

Ces difficultés montrent bien les deux problématiques sous-jacentes à la résolution de l'équation du mouvement, d'abord une évaluation lagrangienne du mouvement et ensuite l'advection du mouvement dans le temps. Elle est vraie pour les scalaires mais aussi pour les vecteurs.

Un exemple d'utilisation de la méthode ALE est donné sur la figure (2). Il correspond à une goutte d'huile quasi-cylindrique en ascension relative dans un liquide (eau) contenu entre deux plans verticaux.

Les caractéristiques sont les suivantes : la masse volumique et la viscosité dans le fluide léger et dans le fluide lourd sont $\rho_l = 900 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_h = 1000 \text{ kg m}^{-3}$, $\mu_l = 0.1 \text{ Pa s}$, $\mu_h = 0.001 \text{ Pa s}$, la tension de surface est $\sigma = 0.045 \text{ N m}^{-1}$, $H = 0.05 \text{ m}$, $L = 0.025 \text{ m}$, $h = 0.015 \text{ m}$, $D = 0.01 \text{ m}$. La gravité est égale $g = 9 : 81 \text{ m s}^{-2}$ dans la direction verticale.

Le maillage hybride utilisé comporte environ 700000 mailles, avec une taille de maille dans la zone de l'interface qui est égale à $\Delta r = 1.3 \cdot 10^{-6} \text{ m}$. La figure 2 montre le détail de ce maillage hybride tri-quad utilisé pour réaliser les simulations.

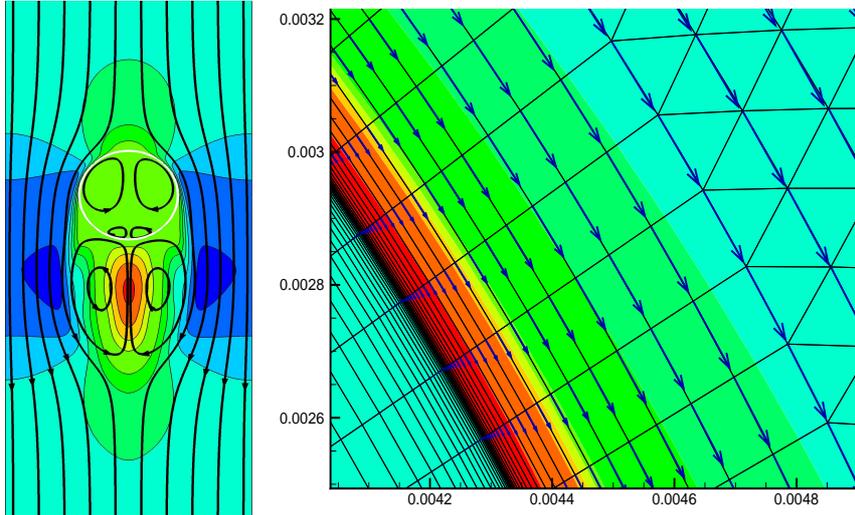


FIGURE 2. Ecoulement autour du cylindre pour les conditions $\mu_l = 0.1 \text{ Pa s}$, $\mu_h = 0.001 \text{ Pa s}$, $\rho_l = 900 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_h = 1000 \text{ kg m}^{-3}$; la figure de gauche montre les lignes de courant à l'intérieur et à l'extérieur de la goutte ainsi que les lignes de courant. La figure de droite représente le rotationnel en couleur et les vecteurs vitesses. Le maillage comporte ≈ 700000 mailles et la maille la plus fine suivant le rayon est $\Delta r \approx 1.3 \mu\text{m}$.

L'examen des couches limites pour différents temps montre que leurs épaisseurs sont de l'ordre de $200 \mu m$. Des mailles de l'ordre de $10 \mu m$ semblent suffisantes pour capter les couches limites qui se situent dans l'eau. Pour des fluides moins visqueux il sera nécessaire de raffiner la zone de l'interface avec des maillages encore plus fins.

Cette approche ALE possède quelques inconvénients mais il permet d'appréhender en continu les écoulements de couche limite aux voisinage de parois mobiles. En présence de parois de vitesses différentes cette méthodologie reste l'une des seules permettant d'accéder aux structures les plus fines des écoulements.

Comme les autres les méthodes évoquées ici elle possède des inconvénients posés notamment par la coalescence de structures ou leur fragmentation. Il est alors nécessaire de remailler le domaine.

Le choix adopté ici est basé sur la précision des écoulements dominés par la capillarité et, pour cette raison, les exemples montrés sont très simples. La plupart de ceux-ci correspondent à des solutions théoriques analytiques qui permettent une validation incontournable des méthodologies utilisées.

3 Modélisation des effets capillaires

3.1 Modélisation de la courbure

La courbure locale est l'une des quantités importante qui doit être évaluée et intégrée dans la force capillaire ajoutée à l'équation du mouvement.

En géométrie différentielle les opérations de calcul de la courbure sont réalisés directement sur des surfaces. On considère généralement le trièdre de Frenet composé de vecteurs unitaires formant une base orthonormée directe $(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b})$. Le vecteur \mathbf{t} est un vecteur tangent à la surface Σ au point M tandis que \mathbf{n} est le vecteur orthogonal à la surface au même point. Le vecteur \mathbf{b} est intitulé le vecteur binormal défini par le produit vectoriel $\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$. Le plan (\mathbf{n}, \mathbf{t}) est appelé plan osculateur, (\mathbf{n}, \mathbf{b}) est appelé plan normal et (\mathbf{b}, \mathbf{t}) est appelé plan rectifiant. La courbure est définie comme la divergence surfacique de la normale à l'interface.

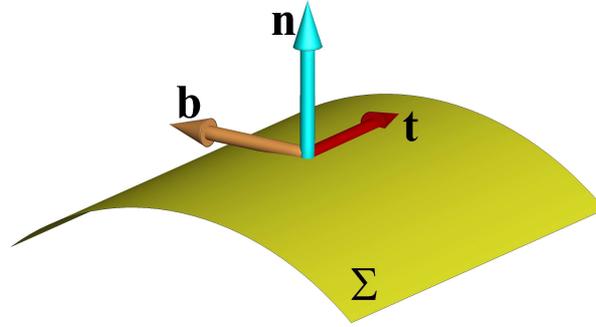


FIGURE 3. Conditions aux limites entre deux milieux ; le plan \mathcal{A} est défini par le vecteur tangent \mathbf{t} et la normale à l'interface \mathbf{n} .

Le rayon de courbure correspondant au plan (\mathbf{n}, \mathbf{t}) sera noté r (figure (3)) et le rayon de torsion sera noté t ; leur définitions sont associées aux dérivées des vecteurs de la base :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{t}}{ds} = \frac{1}{r(s)} \mathbf{n} \\ \frac{d\mathbf{b}}{ds} = \frac{1}{t(s)} \mathbf{n} \end{cases} \quad (16)$$

où s est l'abscisse curviligne le long de Γ . Les inverses des rayons de courbure et de torsion seront appelés courbure $\kappa = 1/r$ et torsion $\tau = 1/t$. Nous introduirons le vecteur de Darboux $\boldsymbol{\omega}$ de la base $(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b})$:

$$\boldsymbol{\omega} = \tau \mathbf{t} + \kappa \mathbf{b} \quad (17)$$

celui-ci qui permet d'écrire les formules de Frenet de manière synthétique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{t}}{ds} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{t} \\ \frac{d\mathbf{b}}{ds} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{b} \\ \frac{d\mathbf{n}}{ds} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n} \end{array} \right. \quad (18)$$

où $\boldsymbol{\omega}$ est fonction de l'abscisse curviligne s .

Ces bases de la géométrie différentielle appliquées à des contours ou à des surfaces permettent, avec d'autres concepts, de bâtir une série d'outils propres aux géométries traitées de manière lagrangienne. Le calcul de la normale, de la courbure moyenne, des intersections de lignes et de surfaces ou de surfaces entre elles, ... peuvent réalisées de manière très précise et indépendante de la topologie sous-jacente à la résolution de l'équation du mouvement. Du point de vue pratique la plupart des opérations purement géométriques de la géométrie euclidienne ou non peuvent être réduits à des produits scalaires et vectoriels.

La vision eulérienne du calcul de quantités telle que la courbure introduit des notions comme les lignes de niveaux ou de fonctions de volume non conformes à la réalité des écoulements diphasiques. La masse volumique, la viscosité et la compressibilité sont des quantités discrètes affectées aux fluides des deux côtés de l'interface. Associée à l'équation de Navier-Stokes cette vision mène à des approximations, des interpolations, des lissages, des erreurs qui inhibent la bonne représentativité du modèle.

En mécanique des milieux discrets le vecteur tangent \mathbf{t} est le vecteur unitaire du segment Γ limité par ses deux extrémités (figures (1) et (4)). Les segments sont rectilignes et les surfaces de la topologie primale sont planes. Dans le cas où les faces des polyèdres ne le sont pas elles devront être décomposées en éléments plus simples de manière à définir qu'une même normale orientée par face. Dans le cas représenté sur la figure (4) la courbure discrète sera associée à la divergence de la normale d'une face à l'autre.

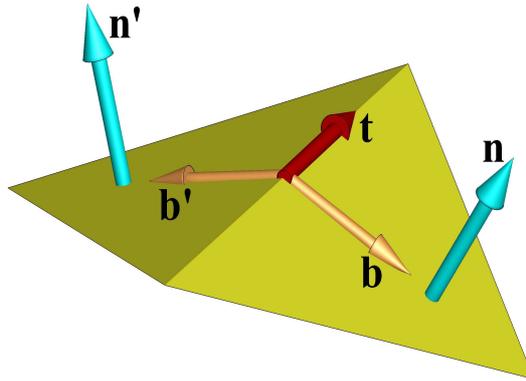


FIGURE 4. Surface discrète où la courbure est calculée comme la divergence de la normale \mathbf{n} sur les deux faces adjacentes au vecteur \mathbf{t} .

Afin de présenter la méthodologie développée le plus simplement possible considérons un domaine plan et un maillage non structuré à bases de triangles présenté sur la figure (5). L'extension à des tessellations plus complexes est cependant immédiate. La chaîne de marqueurs initiale est tout d'abord superposée au maillage principal. Un marqueur n'appartient qu'à une seule cellule

primale et son affectation est obtenue par une méthode de lancer de rayon utilisant un algorithme très rapide. Chaque chaîne de marqueurs possède sa propre connectivité qui permet de connaître les voisins de l'un d'entre eux.

Parallèlement chaque noeud du maillage primal est à l'intérieur ou à l'extérieur d'une chaîne fermée ; pour les chaînes ouvertes ce noeud sera à gauche ou à droite d'une chaîne qui est orientée. Une valeur d'une fonction de phase ξ égale à zéro ou un suivant que le noeud est à l'extérieur ou à l'intérieur du polygone à n côtés formé par la chaîne des n marqueurs. Un algorithme très efficace permet de réaliser cette opération.

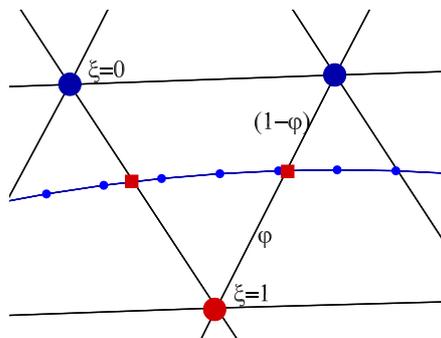


FIGURE 5. Schéma de principe de la détection de l'interface sur le maillage principal.

Il devient alors très simple de détecter quel segment de la chaîne entre deux marqueurs intercepte le segment Γ du maillage primal par un algorithme aussi très performant utilisable aussi en 3D pour l'interception d'un plan et d'un droite. La position de l'interface définie par les marqueurs sur le segment orienté Γ permet alors de préciser la valeur d'un paramètre $\psi \in [0, 1]$ qui servira notamment à calculer la valeur de la masse volumique ρ_v affectée au segment.

La courbure locale est calculée en lagrangien directement à partir de la normale définie par deux marqueurs. Cette procédure conduit à une valeur exacte dans le cas d'un cercle ou d'une sphère et est d'ordre deux dans le cas général par rapport à une distance caractéristique séparant deux marqueurs. Dans tous les cas la précision sera bien meilleure que toute autre méthode eulérienne. La valeur de la courbure sera ensuite affectée au segment Γ de la topologie primale qui intercepte la chaîne de marqueurs.

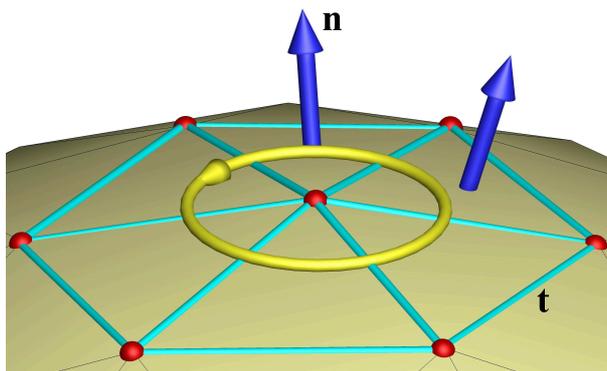


FIGURE 6. Représentation du stencil utilisé pour calculer la courbure sur une surface 3D.

Le calcul de la courbure sur une surface en dimension trois est réalisé de manière analogue en considérant l'ensemble des faces connectées à un point de la surface représentée sur la figure (6). Un algorithme robuste permet de fournir une valeur très précise de la courbure sur une surface

tessellée à base de triangles. Les connectivités de cette surface permettent de faire ce calcul mais aussi de suivre l'évolution de la surface au cours de sa déformation.

Dans le cas général d'interfaces non cylindriques ou non sphériques les variations de la courbure engendrent inéluctablement des mouvements dus à la partie solénoïdale non nulle du terme $\sigma \kappa \nabla \xi$. La question soulevée ici porte sur le taux de convergence en espace de la détermination de la courbure à partir de la position des marqueurs.

Afin d'évaluer ce taux de convergence un exemple dont on connaît la solution analytique est choisi, le choix d'une ellipse de rayons $a = 1$ et $b = 0.75$ est adopté. La courbure théorique est donnée par :

$$\sigma = \frac{a b}{(a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta)^{3/2}} \quad (19)$$

pour $\theta = [0, 2\pi]$, $x = \cos \theta$ et $y = \sin \theta$.

La figure (7) montre la convergence en norme L^2 en fonction du nombre de marqueurs n de la courbure calculée à partir de trois marqueurs consécutifs de la chaîne.

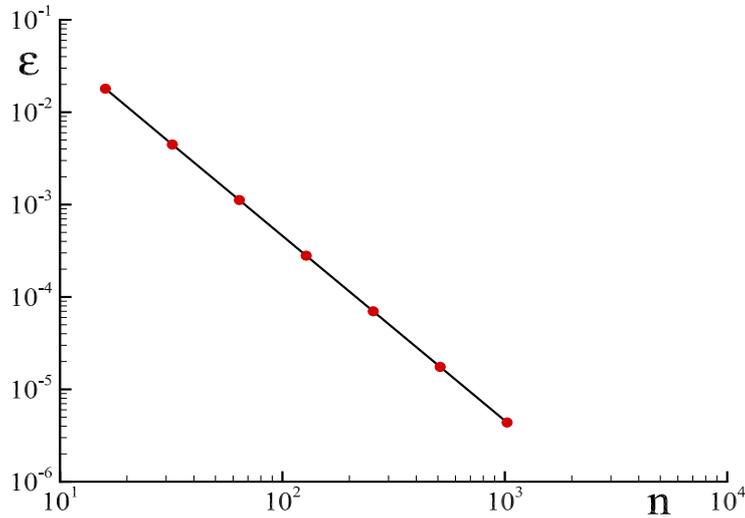


FIGURE 7. Convergence en espace à l'ordre deux sur la courbure d'une ellipse $a = 1$, $b = 0.75$

Ce calcul à base d'un produit vectoriel fournit une solution exacte pour un cercle dont la courbure est constante et l'ordre deux pour le cas de l'ellipse traité ici. Cet ordre de convergence est basé sur une longueur caractéristique qui est la distance entre deux marqueurs. Comme l'augmentation du nombre de marqueurs sur une chaîne de huit pas à la bonne représentativité du mouvement du fluide et n'est pas pénalisant en terme de temps de calcul on comprend que la précision obtenue sur la courbure sera toujours plus importante que celle associée à la description du mouvement du fluide.

3.2 Mouillage, angle de contact

Le problème de la simulation des effets capillaires en présence d'une paroi nécessite de prendre en compte les propriétés intrinsèques de celle-ci, principalement son mouillage aux fluides du milieu environnant. Traditionnellement c'est l'angle de contact statique θ compris entre 0 pour une surface mouillante (ou hydrophile pour l'eau) et 180 degrés pour une surface non mouillante

(ou hydrophobe pour l'eau). En réalité la gamme des angles de contact est plus restreinte. Cet angle de contact entre une surface solide et un couple de fluides (ou bien entre trois fluides) est mesurable par des techniques simples mais soignées.

La modélisation de l'évolution de la ligne triple due aux seuls effets capillaires ou à la superposition d'un écoulement d'ensemble est plus délicat. Certains auteurs définissent un angle de contact dynamique qui n'a aucun sens, les équilibres dynamiques au voisinage de la ligne triple sont très complexe et il est inutile de proposer des lois simplistes pour appréhender celui-ci. Seule l'équation du mouvement possède la propriété de gestion de toutes les interactions des effets de toute nature, compressibilité, inertie, effets capillaires, effets visqueux, ... et vouloir les traduire en lois est illusoire. Seul l'angle de contact statique θ est le paramètre adéquat.

La chaîne de $n = 128$ marqueurs initialement équidistants représente la goutte figure(8) à l'instant initial sous la forme d'un demi-cercle de rayon $R = 10^{-2}m$. Le choix d'un angle de contact différent de 90 degrés conduit à un autre équilibre qui respecte cette condition par exemple $\theta = \pi/6$ sur la planche du bas de la même figure(8). Ces deux états correspondent à l'état de repos où la vitesse est strictement nulle (à la précision machine).

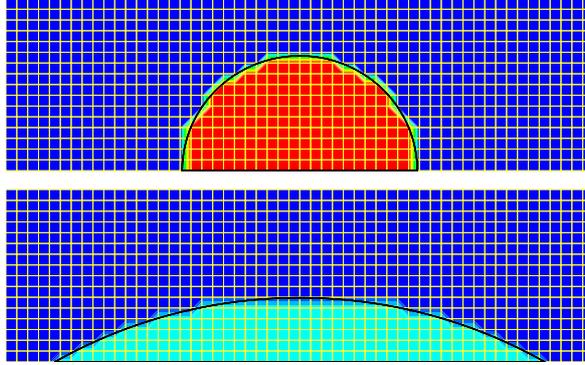


FIGURE 8. Goutte sur un plan sans gravité ; en haut l'état d'équilibre à l'instant initial où l'angle de contact est de 90 degrés ; la pression est exactement égale à sa valeur théorique $p_c = 100$ et le système est au repos ($\mathbf{V} \equiv 0$). En bas l'équilibre mécanique pour un angle de contact θ de 30 degrés, la valeur de la pression est égale à $p_c = 24.0143$; les vitesses sont aussi nulles.

La seule information nécessaire pour traduire l'équilibre statique mais aussi les évolutions de la goutte au cours de son étalement est l'angle de contact statique θ , en aucun cas l'angle de contact ne doit être imposé strictement. L'équilibre mécanique d'une goutte au cours de son mouvement est intimement lié aux équilibres des différentes contributions de l'équation du mouvement discrète, inertie, viscosité rotation, pression. Évidemment cet angle ne peut pas respecté tant que l'équilibre ne correspond pas à l'état de repos c'est à dire une vitesse strictement nulle. Si la gravité n'est pas prise en compte alors les effets capillaires sont entièrement compensés par le potentiel scalaire, la pression. En présence de la gravité il sera nécessaire de retenir le potentiel vecteur ω dans l'équation du mouvement pour obtenir l'état de repos.

La méthodologie pour contraindre la goutte à évoluer naturellement vers son état d'équilibre statique consiste à imposer la courbure du marqueur situé à l'intersection du plan et de la chaîne. Ce procédé extrêmement simple à mettre en oeuvre conduit à une évolution naturelle de l'interface. Cette évolution est gouvernée par l'importance relative de chaque terme de l'équation du mouvement.

Si l'on définit le volume de la portion de cercle en équilibre sur le plan par $\pi R_o^2/2$ avec R_o le rayon du cercle équivalent de même surface, on trouve la courbure par un simple calcul

géométrique à imposer :

$$\kappa = \sqrt{\frac{(\theta - \sin \theta)}{\pi R_o^2}} \quad (20)$$

Dans le cas présent on a $R_o = 10^{-2}$ et $\theta = \pi/6$ soit $\kappa = 1/R = 24.014347$ et comme $\gamma = 1$ la pression capillaire p_c est égale κ .

Les deux états de figure(8) sont des états d'équilibre statique où la vitesse est strictement nulle et la pression constante égale à la différence de pression capillaire. L'évolution d'un état vers l'autre c'est à dire l'étalement à volume constant de la goutte hémisphérique en une portion de cercle est donnée plus loin dans le chapitre consacré aux exemples.

3.3 Notion de vitesse capillaire

La solution de dissocier le mouvement de l'interface du à des effets capillaires de l'advection simple par l'écoulement environnant est séduisante surtout pour les petites échelles spatiales où les structures diphasiques peuvent être d'ordre de grandeur de la taille du maillage sous-jacent. Dans ce cas l'action du mouvement d'ensemble se décorrèle de celui des effets capillaires et l'interface décrite par les marqueurs peut devenir rapidement perturbée.

De plus la pression capillaire devient plus importante voire beaucoup plus importante que les variations de la pression dans l'écoulement global. Ce gradient de pression capillaire ne participe en aucun cas au mouvement d'ensemble; on peut rappeler que toute fonction continue dont on prend le gradient qui est ajouté à l'équation du mouvement ne produit aucun effet sur le mouvement, seule la définition de la pression est modifiée. Dans ces conditions le calcul de pression capillaire n'est pas utile.

La modification de la position des marqueurs peut alors être calculée à partir d'une vitesse nommée ici vitesse capillaire \mathbf{V}_c qui ne servira qu'à tenir compte des mouvements relatifs des interfaces par les effets de tension capillaire. Une analyse rapide menée à partir de l'équation du mouvement elle-même conduit à l'expression de la vitesse capillaire :

$$\mathbf{V}_c = \frac{\gamma}{\rho} dt \kappa \nabla \xi = \sigma dt \kappa \nabla \xi \quad (21)$$

où $\nabla \xi$, la normale à l'interface et κ , la courbure, sont calculées très précisément à l'aide de concepts simples de la géométrie différentielle. On perçoit ici l'intérêt d'utiliser une tension superficielle σ définie par $\sigma = \gamma/\rho$ où γ est la tension de surface classique mesurée par des procédés statiques. La masse volumique $\rho = \rho_v$ qui apparait ici est celle qui correspond à la notion d'inertie (issue de la masse inerte). Il serait beaucoup plus judicieux de redéfinir la tension de surface habituelle comme une grandeur dynamique. En fait \mathbf{V}_c/dt représente l'accélération d'un point situé sur l'interface et on conçoit aisément que celle-ci dépende d'une masse volumique qui pourrait être la masse volumique moyenne des deux fluides en présence.

Les évolutions spatiales de la position des marqueurs doivent être contraintes par la variation de volume de la structure (goutte, bulle, ...). Dans le cas d'écoulements incompressibles la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ peut être maintenue en calculant le volume du polyèdre défini par l'ensemble des marqueurs d'une même structure. Dans le cas des écoulements compressibles sera traité de manière analogue mais en tenant compte de la divergence locale de l'écoulement principal.

Le problème de l'advection dû au mouvement d'ensemble doit être à son tour réglé par un mouvement rigidifié de l'ensemble des marqueurs appartenant à une même structure. Le cas de très petites bulles sous-maille peut ainsi être appréhendé simplement. Pour des structures plus grandes l'advection pourrait cependant déformer ceux-ci par l'écoulement moyen.

L'intégration temporelle peut être réalisée en deux étapes où la courbure est évaluée aux instants $(n + 1/2)$ et $(n + 1)$ pour trouver la nouvelle position du marqueur :

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \frac{dt}{2} \left(\mathbf{V}_c^{n+1} + \mathbf{V}_c^{n+1/2} \right) \quad (22)$$

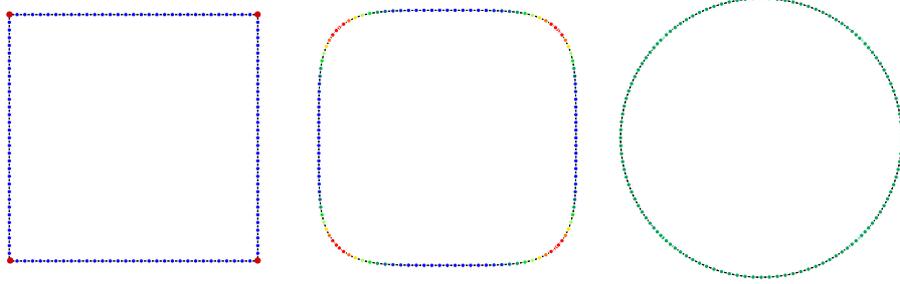


FIGURE 9. Transformation d'un carré défini par 128 marqueurs en un cercle de même volume en utilisant la vitesse capillaire; la couleur des marqueurs désigne la courbure κ .

Cette procédure est précise à l'ordre deux. D'autres schémas de type Rung-Kutta (RK2 ou RK4) peuvent être utilisées pour une précision égale ou plus élevée.

La figure (9) montre la transformation d'un carré défini par 128 marqueurs en un cercle de même volume. Ici les marqueurs ne sont pas redistribués sur la chaîne mais l'évolution d'une chaîne en forme de carré permet cependant de trouver une évolution robuste et très précise. La courbure du cercle ainsi calculée tend exactement vers la valeur $\kappa = 1/R$ où R est le rayon du cercle de même surface que le carré.

Cette méthodologie est très robuste et évite d'intégrer un terme source parfois très important dans l'équation du mouvement sans un réel intérêt. Lorsque la courbure devient très importante et ses variations aussi la décomposition en un gradient et un rotationnel réalisée implicitement par l'équation du mouvement devient délicate et conduit parfois à la divergence du calcul.

3.4 Décomposition de Hodge-Helmholtz

Soit à décomposer le vecteur \mathbf{g} en une partie irrotationnelle et une autre solénoïdale $\mathbf{g} = \nabla\varphi - \nabla \times \boldsymbol{\varpi}$. Les parties à rotationnel et à divergence nuls correspondent physiquement aux mouvements rigidifiants (translation et rotation uniformes) et de ce fait pourront être éliminés préalablement pour un problème de physique.

Le système à résoudre est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla(\varphi^o - \nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \times (\boldsymbol{\varpi}^o - \nabla \times \mathbf{V}) + \mathbf{g} \\ \varphi = \varphi^o - \nabla \cdot \mathbf{V} \\ \boldsymbol{\varpi} = \boldsymbol{\varpi}^o - \nabla \times \mathbf{V} \end{cases} \quad (23)$$

où la dérivée $d\mathbf{V}/dt$ peut être remplacée par $\varepsilon\mathbf{V}$ où ε est un petit paramètre. L'équation vectorielle sur l'inconnue \mathbf{V} est résolue et les potentiels φ et $\boldsymbol{\varpi}$ sont simplement ré-actualisés. On calcule ensuite $\mathbf{V}_\varphi = \nabla\varphi$ et $\mathbf{V}_\boldsymbol{\varpi} = \nabla \times \boldsymbol{\varpi}$.

Les conditions initiales sont $\mathbf{V} = 0$, $\varphi^o = 0$ et $\varpi^o = 0$. Si vecteur \mathbf{g} est connu analytiquement il doit être projeté sur le maillage primal, Marker And Cell par exemple, sinon il résulte de la phase de prédiction de \mathbf{V} et donc à divergence et à rotationnel non nuls.

La résolution de l'équation vectorielle peut être résolue en intégrant dans le temps mais ce n'est pas nécessaire. Une seule étape suffit pour trouver la solution du problème soit $\mathbf{V} = 0$ (à la précision machine). Mais $\nabla \cdot \mathbf{V}$ et $\nabla \times \mathbf{V}$ ne sont pas nuls (de quelques ordres de grandeur) et permettent de remonter φ et ϖ qui satisfont ainsi :

$$\mathbf{g} = \nabla\varphi - \nabla \times \varpi \quad (24)$$

La résolution du système vectoriel linéaire est réalisée par une méthode directe LU et le résidu est nul à 10^{-15} près. Les deux champs $\nabla\varphi$ et $\nabla \times \varpi$ sont orthogonaux et définis à une constante près.

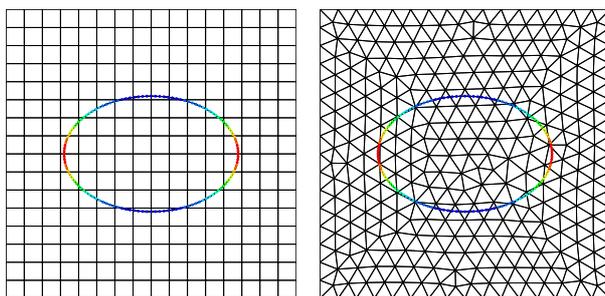


FIGURE 10. Courbure définie sur les marqueurs répartis sur une ellipse d'axes $(1, 0.75)$; le maillage de gauche est structuré cartésien et le maillage de droite est non structuré.

Exemple sur la gravité : si $\mathbf{g} = (0, -g)$ est la gravité qui dérive d'un potentiel scalaire on trouve $\varphi = -g y + Cte$ et $\varpi = 0$.

D'autres exemples sont disponibles dans différents documents dont l'article [5], où cette équation sert à calculer l'équilibre statique d'un solide.

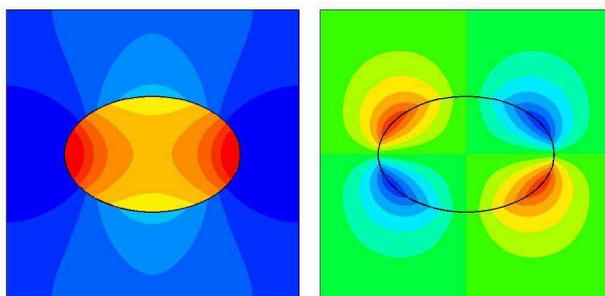


FIGURE 11. Décomposition de Hodge-Helmholtz du terme capillaire $\sigma \kappa \nabla \xi$ pour un maillage de 512^2 . La pression p^o est représentée à gauche, le saut de pression entre l'intérieur et l'extérieur de l'ellipse est la pression capillaire; à droite la composante du potentiel vecteur suivant z , $\omega^o \cdot \mathbf{e}_z$ montre les contraintes de cisaillement générées par les forces capillaires.

Afin de préciser l'importance de la décomposition de Hodge-Helmholtz pour les effets capillaires prenons l'exemple d'une ellipse montrée sur la figure (10) soumise à des effets de tension

de surface. Les marqueurs sont répartis sur une ellipse d'axes $(1, 0.75)$. La courbure sur les segments du maillage primal sont calculées et la position de l'interface sur chacun des segments est précisée par la fonction ψ définie plus haut. L'intérêt de la méthodologie présentée est d'être indépendante de la topologie primale à base de polygones ou de polyèdres.

Une fois calculé le terme source capillaire à décomposer $\mathbf{g} = \sigma \kappa \nabla \xi$ sur le maillage principal, l'équation (23) est résolue en une seule itération et les accumulateurs p^o et $\boldsymbol{\omega}^o \cdot \mathbf{e}_z$ sont ensuite mis à jour. La figure (11) montre ces deux champs dont le gradient, ∇p^o et le rotationnel, $\nabla \times \boldsymbol{\omega}^o$ vérifient la condition l'orthogonalité. On constate le saut de pression à l'interface entre les deux fluides. Le champ $\boldsymbol{\omega}^o$ mesure la contrainte de rotation à maintenir pour assurer l'équilibre statique de cette ellipse. Alors que le gradient de pression n'est pas une force motrice, le potentiel vecteur $\boldsymbol{\omega}^o$ génère le mouvement s'il n'est pas équilibré par le terme $\mu \nabla \times \mathbf{V}$. L'ellipse tend à réduire les variations de courbure en modifiant sa forme.

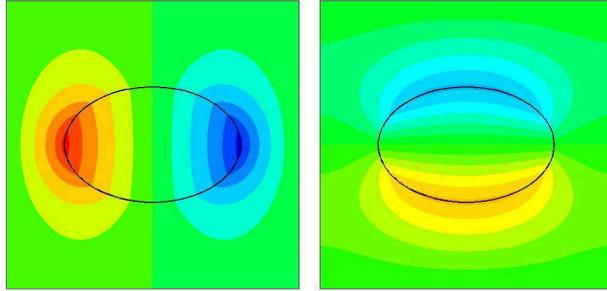


FIGURE 12. Champ de vitesse à l'instant initial représenté par ses composantes $\mathbf{V} \cdot \mathbf{e}_x$ et $\mathbf{V} \cdot \mathbf{e}_y$ dans le cas où la contrainte d'incompressibilité n'est pas appliquée. Ce champ de vitesse est celui qui génère l'effondrement de l'ellipse sous le seul effet des forces capillaires.

Toutefois le mouvement global de l'ellipse tend à augmenter la pression à l'intérieur en assurant sur toute sa surface une vitesse centripète; en effet la courbure étant partout positive l'ellipse s'effondre sur elle-même. C'est ce que l'on peut observer sur la figure (12) où les vitesses horizontales et verticales représentent un confinement de l'ellipse. Dans le cadre d'une simulation complète où la contrainte d'incompressibilité est intégrée à l'équation du mouvement les vitesses verticales seraient bien entendu inversées. La prise en compte de tous les termes de l'équation du mouvement y compris les termes d'inertie conduirait à un mouvement oscillatoire réduit au cours du temps par les forces de viscosité et à une situation d'équilibre statique où l'objet serait un cercle de même surface.

3.5 Intégration en temps

3.5.1 Rotation globale et locale

En mécanique des milieux discrets les composantes de la vitesse sont les seules inconnues du problème et sont constantes sur chacun des segments de la topologie primale. La vitesse elle-même est une quantité secondaire qui peut être calculée au barycentre de la cellule primale à partir des métriques locales et dont la connaissance n'est pas nécessaire. Elle le devient pour calculer la position des marqueurs en 2D et en 3D au cours du temps. Cette vitesse est désignée par \mathbf{V}_M et son évaluation est réalisée par une moyenne barycentrique sur l'ensemble des composantes \mathbf{V} du polygone ou du polyèdre constituant la cellule primale.

Un autre quantité importante peut être calculée à partir de \mathbf{V} , le rotationnel $\boldsymbol{\Omega} = \nabla \times \mathbf{V}$

qui représente le vecteur rotation de la topologie primale. Ce calcul est réalisé par plan ou directement sur le polyèdre. Cette rotation est locale, le mouvement de rotation d'ensemble, l'un des mouvements rigidifiant a d'emblée été écarté comme le mouvement de translation uniforme. $\mathbf{\Omega}$ représente ainsi la déformation de la cellule primale.

Si l'on nomme \mathbf{V}_p la vitesse d'un marqueur dont la position est \mathbf{x}_p , on peut évaluer celle-ci à partir de $\mathbf{\Omega}$ et de la distance orthogonale \mathbf{r} de la particule à la droite support de \mathbf{V}_M passant par le barycentre. Cette vitesse est égale à :

$$\mathbf{V}_p = \mathbf{V}_M + \nabla \times \mathbf{V} \times \mathbf{r} \quad (25)$$

L'évolution des marqueurs au sein de l'écoulement peut se calculer directement avec une approximation de la vitesse locale à la position actuelle du marqueur ou à partir de la vitesse moyenne \mathbf{V}_M dans la topologie primale et du rotationnel $\mathbf{\Omega}$ sur cette même topologie à partir de l'expression (25). La précision de la localisation des particules dans l'écoulement dépend bien sûr de celle de la vitesse évaluée sur les segments et donc de la discrétisation spatiale. En mécanique des milieux discrets l'ordre de convergence est strictement égal à deux quel que soit la nature de la topologie élémentaire, polygonale ou polyédrale. C'est ainsi que toutes les solutions correspondant à des polynômes d'ordre inférieurs ou égal à deux seront retrouvées exactement sur tous les maillages. Cette précision dépend aussi du choix de la méthode d'intégration temporelle et de son ordre théorique. Les erreurs en espace et en temps s'ajoutent et il convient de s'assurer de la cohérence des deux discrétisations.

Il est à remarquer que même si la discrétisation en espace est à l'ordre deux les seules informations contenues au sein d'une cellule primale ne permettent d'obtenir que l'ordre un sur le déplacement du marqueur au cours du temps. Cela est dû aux interactions entre une cellule et ses voisines décrites par l'équation du mouvement. L'augmentation de la précision de la position des marqueurs ne pourra être assurée que par l'utilisation d'informations contenues dans les topologies primales voisines.

Il faut dissocier la rotation globale du référentiel donnée par $\mathbf{V} = \mathbf{\Omega}^o \times \mathbf{R}$ où, $\mathbf{\Omega}^o$ correspond à la vitesse de rotation en bloc où \mathbf{R} le vecteur de rayon de giration R , de la rotation locale.

3.5.2 Ecoulement en bloc

Un des cas emblématique du transport lagrangien est l'écoulement de rotation en bloc défini par $\mathbf{V} \cdot \mathbf{e}_\theta = \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}$ où ici $\mathbf{\Omega}$ est un vecteur constant et \mathbf{r} la distance au centre de rotation $(0,0)$. Une particule sans masse dans cet écoulement doit revenir à sa position initiale après une rotation de 2π . Le marqueur est initialement en $(1,0)$.

Deux schémas d'intégration de type Runge-Kutta sont testés sur cet écoulements, RK2 et RK4. Si la méthode est d'ordre deux ou plus la solution attendue est exacte. C'est le cas de ces deux méthodes d'ordre deux et quatre. La figure (13) montre bien que le marqueur revient à sa position initiale après 10 pas de temps lorsque la dérivée de la vitesse donnée de manière exacte soit $\mathbf{V}_p = (-\sin t \mathbf{e}_x, \cos t \mathbf{e}_y)$ quel que soit le pas de temps. Lorsque la vitesse des marqueurs est définie par les marqueurs eux-mêmes avec $\mathbf{V}_p = (-v \mathbf{e}_x, u \mathbf{e}_y)$ la précision est uniquement égale à un.

Cet ordre un obtenu avec des méthodes d'ordres supérieurs n'est pas surprenant dans la mesure où la précision spatiale n'est pas prise en compte puisqu'il n'a pas de maillage associé. La précision des méthodes de Runge-Kutta dépendent à la fois des pas de temps et d'espace. Dans la réalité la vitesse des marqueurs est évaluée à partir de méthodes de résolution de l'équation du mouvement à l'ordre deux en espace. On peut ainsi attendre un ordre global égal à deux en espace et en temps.

3.5.3 Ecoulements de Couette et de Poiseuille

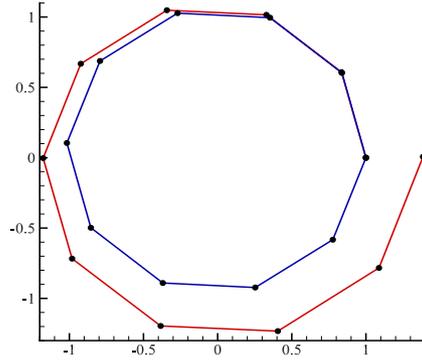


FIGURE 13. Rotation d'un marqueur avec un schéma RK4 avec 10 pas de temps avec $\mathbf{V}_p = (-v \mathbf{e}_x, u \mathbf{e}_y)$ (en rouge) et avec $\mathbf{V}_p = (-\sin t \mathbf{e}_x, \cos t \mathbf{e}_y)$ (en bleu) où la solution est exacte.

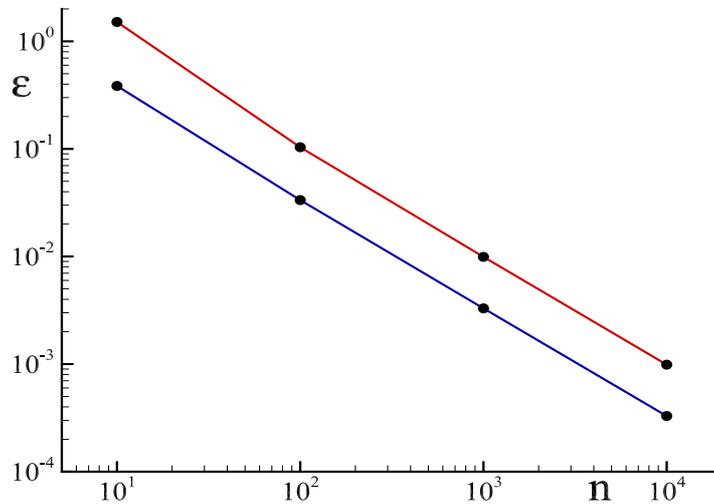


FIGURE 14. Convergence en temps à l'ordre un avec des schémas RK2 (rouge) et RK4 (bleu) en utilisant uniquement l'information des marqueurs $\mathbf{V} = (-v \mathbf{e}_x, u \mathbf{e}_y)$

Les écoulements de Couette plan et de Poiseuille stationnaires sont aussi deux cas importants pour tester les différentes méthodologies liées à la mécanique des fluides. Comme leurs solutions correspondent à des polynômes d'ordre inférieur ou égal à deux la solution numérique peut être appréhendé exactement avec une méthode précise à l'ordre deux. C'est le cas de la méthodologie basée sur la mécanique discrète. Les solutions (\mathbf{V}, p) sont exactes quelles que soient la discrétisation spatiale utilisée, nombre de degrés de liberté et topologies primales (polygones et polyèdres). Les lignes de courant sont des rectilignes et parallèles aux parois et les isobares (pour Poiseuille) orthogonales à ces mêmes parois. Le rotationnel est strictement constant pour Couette plan et linéaire pour Poiseuille.

Pour ces écoulements les deux termes non nuls sont le gradient de pression (pour Poiseuille) $-\nabla p$ et le terme visqueux $-\nabla \times (\mu \nabla \times \mathbf{V})$ où le rotationnel extérieur est dual et le rotationnel interne est primal. Ces deux termes, un rotationnel et un gradient, étant égaux ils ne peuvent être égaux qu'à une constante. Dans le cas de domaines bornés la décomposition de Hosge-Helmholtz n'est pas unique, les champs solénoïdal et irrotationnel ne sont définis qu'à un vecteur constant près. Dans notre cas les champs uniformes ont été écartés d'emblée mais la pression comme ω ne

sont cependant définis qu'à une constante près. Par contre la vitesse doit satisfaire les conditions aux limites physiques du problème.

Pour l'écoulement de Couette l'application de l'expression (25) pour le calcul de la vitesse en n'importe quel point du domaine est exacte et donc la position des marqueurs est aussi exacte. Le cas de l'écoulement est plus complexe : même si la solution sur \mathbf{V} est exacte sur 3 points la vitesse du marqueur ne serait pas exacte si les informations sont limitées à une seule cellule primale. Pour retrouver une vitesse de marqueur exacte pour cet écoulement il serait nécessaire d'étendre l'utilisation d'informations sur deux cellules.

Ces écoulements comportent de la rotation (constante ou linéaire suivant y) alors que les lignes de courant sont rectilignes. Ceci confirme que la rotation locale correspond à une déformation. L'expression (25) permet de retrouver un vecteur \mathbf{V}_p parallèle à \mathbf{V}_M .

4 Vérification et validation

Les exemples donnés ci-dessous correspondent à des situations géométriques très simples qui visent à valider la méthodologie décrite précédemment. Ils constituent cependant une base incontournable pour le développement de méthodes censés représenter les effets capillaires. En effet si une méthode ne fournit qu'une solution approchée de la loi de Laplace on peut légitimement s'interroger sur l'utilisation de cette méthode sur des cas plus complexes.

Une grande importance est donnée ici sur l'obtention de l'état de repos par une simulation des effets capillaires. Pour un système isolé, une goutte d'eau sur un plan dans une boîte par exemple, l'état final de l'évolution de la forme de la goutte doit être non seulement stationnaire mais les vitesses doivent être strictement nulles. Des écoulements persistants au voisinage de la ligne triple ne seraient pas conformes à la conservation de l'énergie. Nous verrons que l'équation de Navier-Stokes conduit à ce type d'incohérence.

4.1 Loi de Laplace

Le cas emblématique des effets capillaires est l'équilibre d'une goutte cylindrique ou sphérique. Le problème posé ici est relative à la capacité de l'ensemble des méthodologies décrites à maintenir un état de repos à long terme. Pour l'obtenir la décomposition de Hodge-Helmholtz conduit à définir la tension de surface σ et la courbure κ comme des constantes. Si la tension de surface n'est pas constante des courants de type Marangoni se développent à la surface de la goutte et si la courbure n'est pas constante ce sont des courants normaux à l'interface qui sont générés.

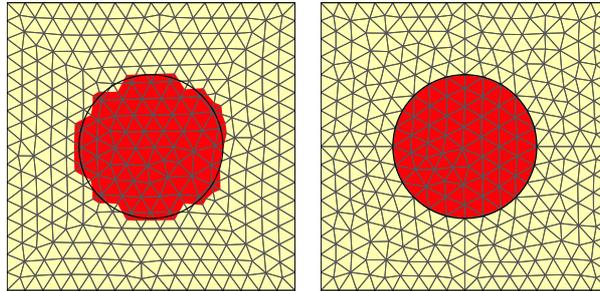


FIGURE 15. *Pression capillaire dans une goutte de rayon $R = 2.5 \cdot 10^{-3}m$ et pour une tension de surface constante $\gamma = 1$. A gauche, un maillage non conforme au disque et une chaîne de marqueurs pour représenter le disque et, à droite, un maillage non structuré conforme au disque. Dans les deux cas la pression est exacte et la vitesse est strictement nulle.*

Considérons le cas d'une tension de surface constante $\gamma = 1$. Les marqueurs sont préalablement disposés sur un cercle et deux cas peuvent se présenter ; soit la courbure est constante à la précision machine ce qui est le cas si les marqueurs sont disposés exactement sur le cercle de rayon R , soit des erreurs existent et dans ce cas des mouvements des marqueurs sont initiés par les différences de courbure. Dans ce dernier cas la méthodologie présentée conduit à un repositionnement des marqueurs sur le cercle. Dans le cas général la courbure fournie à l'aide de chaînes de marqueurs est d'ordre deux mais dans le cas du cercle elle est exacte.

Pour une courbure calculée exactement à l'aide d'une chaîne de marqueurs le terme source $\sigma \kappa \nabla \xi$ est injecté dans l'équation du mouvement. Comme la courbure est constante et non nulle la goutte s'effondre sur elle-même avec une vitesse égale à la vitesse capillaire. Mais le milieu est supposé incompressible et une force égale et opposée s'exerce sur l'interface. L'équilibre est

obtenu instantanément et la pression est uniforme à l'intérieur de la goutte et égale à $p_c = \gamma/R$ en 2D ou $p_c = 2\gamma/R$ pour une sphère ou $p_c = \gamma\kappa$ en général.

La figure (15) montre deux exemples correspondant respectivement à un maillage structuré non conforme au cercle et un autre qui est conforme à la géométrie circulaire. Dans les deux cas la courbure est exactement égale à $\kappa = 1/R$ et la pression obtenue à l'issue d'une seule itération est égale à $p_c = 400 Pa$ et la vitesse tant à l'extérieur qu'à l'intérieur de la goutte est strictement nulle.

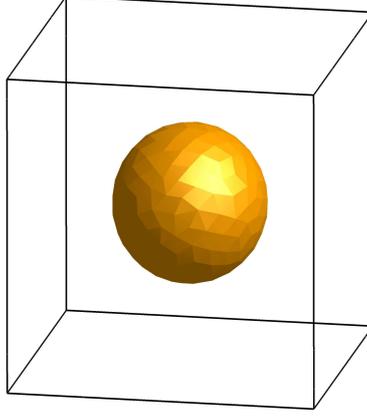


FIGURE 16. Pression dans une sphère au sein d'un cube ; la pression est homogène dans toute la sphère et la différence de pression de part et d'autre de sa surface est égale à $\sigma\kappa\nabla\xi$; la vitesse est strictement nulle dans les deux milieux.

Le même résultat est obtenu avec une sphère décrite par une surface à base de triangles contenue dans un cube maillé par des hexaèdres réguliers ; la figure (16) montre simplement l'isovaleur de la pression constante au sein de la goutte.

4.2 Ecoulements à la surface de bulles

Les variations de température à la surface d'une bulle engendrent des mouvements rapides et de grandes amplitudes dus à l'effet Marangoni. La tension de surface en fonction de la température est donnée par la relation :

$$\sigma = \sigma_0 \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^n \quad (26)$$

où T_C est la température critique et n un exposant proche de l'unité (11/9 soit 1.22). La tension superficielle s'annule donc au point critique lors de la disparition du ménisque dans l'expérience de Natterer. On constate que la tension superficielle diminue lorsque la température augmente. Cette variation est à l'origine de l'instabilité de Marangoni et de l'instabilité de Bénard-Marangoni suivant la valeur de la gravité.

Pour l'eau on peut écrire :

$$\sigma = 0.147 \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^{11/9} \quad (27)$$

Le cas montré sur la figure (17) est un simple exemple sans référence visant à montrer les potentialités et la versatilité de la méthodologie. Les courants de surface induits par l'effet Marangoni peuvent être calculés à l'extérieur, à l'intérieur et sur la sphère.

Dans le cas présenté l'équation du mouvement est résolue en 2D sur la surface sphérique de la bulle. Un champ de température non uniforme est fixé arbitrairement et le terme $\gamma(T) \kappa \nabla \xi$ est injecté dans l'équation du mouvement ; ici κ est supposé constante.

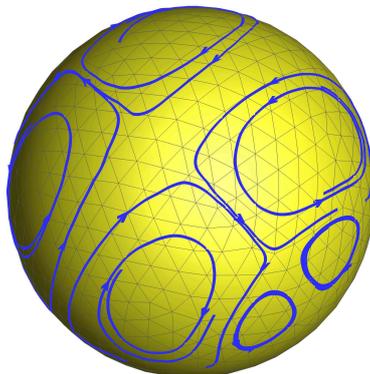


FIGURE 17. Trajectoires à la surface d'une bulle de savon présentant des variations de la tension de surface.

Les lignes de courant à la surface de la sphère montrent l'existence de recirculations contra-rotatives cohérentes. Il est à noter que l'épaisseur du film est constante et contrainte à l'être par la condition d'incompressibilité surfacique $\nabla_s \cdot \mathbf{V} = 0$. Dans la réalité on peut observer des accumulations dues à la gravité ou aux tourbillons eux-mêmes.

4.3 Bulles, gouttes et multimatériaux

A partir de la méthodologie mise en oeuvre un certain nombre de cas d'intérêt pratique peuvent être simulés. Seuls les cas de structures, bulles, gouttes, en recombinaison sous forme de fragmentation ou de coalescence reste encore à réaliser. La gestion de chaînes de marqueurs sous forme de structures évolutives n'est pas un problème insurmontable et a déjà été réalisé par plusieurs auteurs, voir par exemple l'ouvrage édité par A. Prosperetti et G. Tryggvason [7].

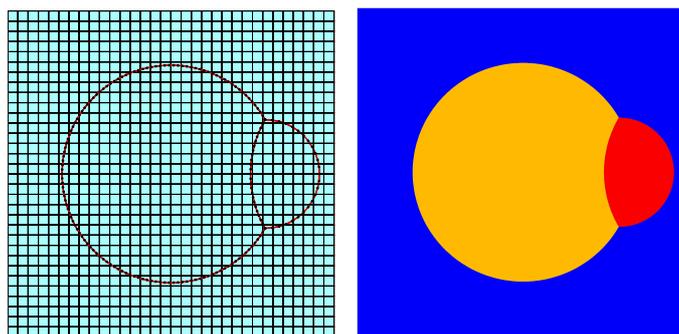


FIGURE 18. Deux gouttes non miscibles en équilibre statique dans un troisième milieu ; la pression dans chaque structure est égale à $(p_i - p_j)/\kappa = Cte$; à gauche on montre les deux chaînes de marqueurs sur un maillage cartésien et à droite une reconstruction lagrangienne. Les pressions obtenues sont exactes.

Les cas de bulles, gouttes et des multimatériaux en interactions peuvent être appréhendés simplement avec des chaînes de marqueurs et des surfaces maillées 3D avec une précision non

égalable avec des méthodes de type "Volume Of Fluid" ou "LevelSet". La gestion de matériaux différents au sein de la même maille en maillage structuré ou non structuré s'avère relativement aisé.

Associée à des méthodologies qui relèvent de la mécanique des milieux discrets les interfaces sont définies par les marqueurs et par leurs positions dans les cellules. Ainsi la masse volumique ρ_v est parfaitement calculée sur chaque segment Γ et la viscosité affectée uniquement aux faces. Contrairement à une approche de type milieu continu aucune interpolation n'est nécessaire pour évaluer ces quantités sur d'autres localisations dans le stencil.

La figure (18) montre le résultat d'une simulation statique où la géométrie correspond à l'état de repos mais où la pression ainsi que la vitesse sont nulles. En une itération l'équation du mouvement traduit l'effondrement des bulles contrarié par l'incompressibilité imposés à tous les milieux. Instantanément la pression est égale à la valeur théorique et la géométrie est parfaitement conservée, la vitesse obtenue étant nulle. En continuant la simulation cet état de repos est conservé. La règle de Plateau prédisant pour cette géométrie des angles de contact de 120 degrés entre les surfaces est parfaitement respecté.

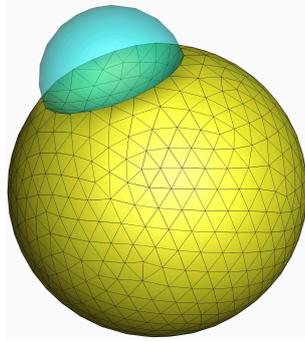


FIGURE 19. Deux gouttes non miscibles en équilibre statique définies par des surfaces maillées 3D;

L'extension du même problème pour une surface 3D est donnée sur la figure (19). La gestion du mouvement des structures en 2D ou en 3D peut être envisagée de deux manières différentes. La première méthode consiste comme sur la figure (18) à plonger la géométrie étudiée dans un maillage structuré ou non structuré et à calculer le mouvement à l'intérieur des bulles et à l'extérieur par la résolution de l'équation du mouvement. L'alternative est d'utiliser le concept de vitesse capillaire appliqué pour le cas de la figure (19) pour calculer les évolutions des marqueurs en considérant uniquement l'incompressibilité sans à calculer les mouvements des fluides. Le choix dépendra bien sûr du problème qui est posé. Dans le cas de la recherche de l'état d'équilibre d'une structure complexe la seconde méthode sera la plus adaptée.

La méthodologie développée est particulièrement adaptée au cas des bulles où la différence principale est liée à la présence de deux interfaces doublant les effets capillaire par rapport aux gouttes. De chaque côté de l'interface le gaz peut être le même ou bien différent. Le film n'est pas décrit explicitement et son épaisseur est nulle. Il est possible toutefois d'affecter une épaisseur au film et de la faire varier sous l'influence de forces (gravité, inertie, ...) par la résolution de l'équation du mouvement sur la surface 3D. La divergence surfacique n'étant pas forcément nulle l'épaisseur de l'interface peut ainsi varier au cours de son évolution.

Les exemples suivants sont réalisés avec une épaisseur nulle. La figure (20) montre l'équilibre de 3 bulles en 2D et en 3D. Dans chaque cas les angles de contact entre les bulles satisfont la règle de Plateau soit $\theta = 120$ degrés. Chaque surface en contact avec le milieu extérieur est une portion de cercle ou de sphère et, comme les bulles ont le même volume, la pression interne est

la même et les surfaces internes sont planes. L'angle de contact entre une bulle et le plan est par contre égal à 90 degrés. Cela est dû au fait que la surface est mouillante et à l'existence de deux interfaces, une bulle ne peut se maintenir sur une surface sèche.

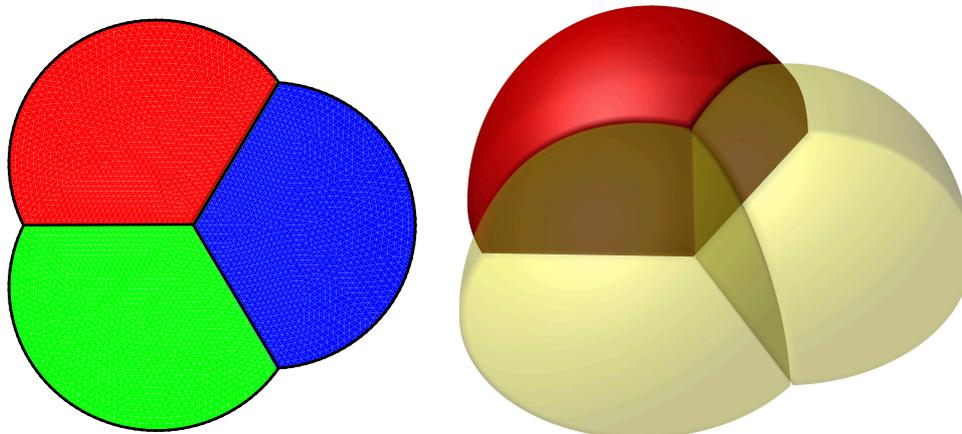


FIGURE 20. *Trois bulles 2D de même rayon en équilibre à gauche et trois bulles en 3D sur un plan mouillant.*

Dans un assemblage de bulles la pression qui règne dans le gaz contenu chacune d'elle est pratiquement uniforme, la gravité joue un rôle mineur mais pas tout à fait négligeable. Il est alors possible de calculer l'évolution de cet assemblage sans avoir recours à un maillage.

4.4 Simulation d'une mousse en équilibre

La méthodologie présentée peut être étendue à la simulation de l'évolution des mousses, au moins des mousses sèches. Il est illusoire de vouloir simuler ces structures par des méthodes purement eulériennes compte tenu de l'épaisseur des films constituant cette mousse.

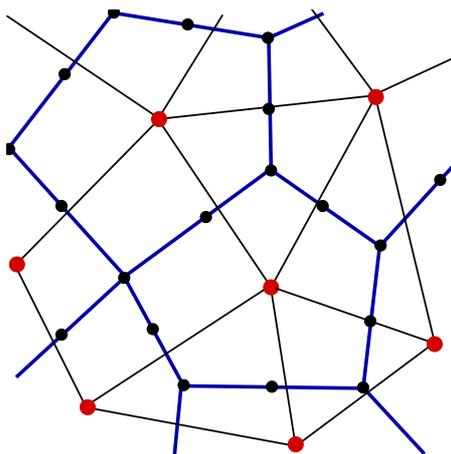


FIGURE 21. *Schéma de principe de la modélisation d'une mousse sèche ; les membranes curvilignes de la mousse sont en bleu, la localisation de la pression sont les points en rouge et les points noirs sont les marqueurs qui permettent de calculer la courbure. Les vitesses sont calculées sur les segments reliant les points de pression.*

Il est par contre envisageable d'affecter un seul point de pression par bulle et de calculer l'évolution de la mousse à travers une vitesse sur un segment reliant chaque bulle avec les autres.

En tenant compte de l'incompressibilité du milieu chaque bulle pourra ainsi se déformer tout en gardant un même volume. La réorganisation de la mousse sera réalisée à partir du calcul de la courbure locale du film. Comme les films sont toujours des portions de cercle, trois points seulement servent à les définir. Toute perturbation sera compensée par un mouvement de l'interface considérée et donc de l'ensemble de la mousse pour satisfaire à la contrainte d'incompressibilité. Le schéma de principe de la modélisation d'une mousse est représentée sur la figure (21).

L'équation qui régit l'évolution d'une mousse sèche est la suivante :

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \nabla \left(p^o - \frac{dt}{\chi T} \nabla \cdot \mathbf{V} \right) + \gamma \kappa \nabla \xi \quad (28)$$

La courbure κ est calculée en lagrangien à partir des chaînes de marqueurs; la vitesse \mathbf{V} représente la vitesse de l'interface puisque, par définition, le film liquide est imperméable au gaz. Les interfaces se déforment au cours du temps pour assurer un nouvel équilibre mécanique qui conduit au repos; les surfaces sont alors des portions de sphères (ou des portions de cercle en 2D). A l'équilibre statique on retrouve $\nabla p^o + \gamma \kappa \nabla \xi = 0$ soit $\nabla (p^o + \gamma \kappa \xi) = 0$.

La pression dans chacune des bulles satisfait alors à condition $(p_i - p_j)/\kappa = Cte$ où p_j est la pression dans les bulles voisines de la bulle d'indice i .

Le problème du mûrissement de la mousse est plus complexe à simuler, il nécessite de rendre compte de la courbure entre deux interfaces; en ce point la courbure est plus importante que celle des deux interfaces adjacentes. Les forces capillaires associées en ce point sont alors plus grandes et les films sont soumis à un drainage au profit de la ligne triple où une accumulation de liquide vient modifier la courbure. Ce drainage conduit à réduire l'épaisseur du film jusqu'à éclatement de l'interface, la recomposition de la mousse s'opère ainsi vers des bulles de plus grand volume.

4.5 Etalement d'une goutte

L'évolution d'une goutte d'eau (de rayon initial 1 cm) sur un plan partiellement mouillant est un problème classique qui possède l'avantage de correspondre, à l'équilibre, à un état de repos. Celui-ci est représenté sur la figure (8) pour un angle de contact de θ de 30 degrés, la valeur de la pression finale est égale à $p_c = 24.0143$ alors que la pression initiale était de $p_c = 100$ (pour $\gamma = 1$).

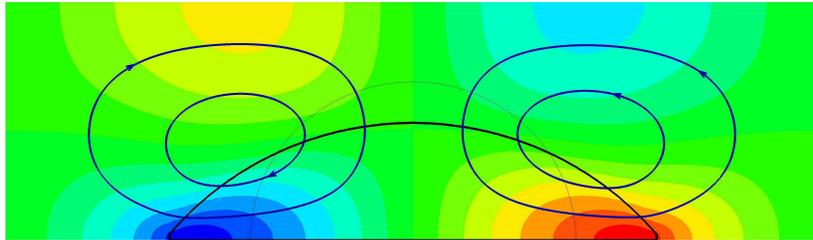


FIGURE 22. *Etalement d'une goutte sur une surface glissante à partir de l'état correspondant au demi-cercle; les couleurs représentent l'intensité de la vitesse horizontale et les lignes de courant montrent la circulation du fluide dans la cavité. La pression pour les états initial et final est montrée par la figure (8).*

La méthodologie numérique de traitement du mouillage a été décrite plus haut; du point de vue pratique on impose aux marqueurs situés sur le plan une courbure imposée, celle de l'état de repos.

La condition initiale adoptée correspond à une goutte hémisphérique posée sur le plan sec et l'angle de contact à cet instant est de θ de 90 degrés. Le déséquilibre est bien sûr observé sur la ligne triple où cet angle ne satisfait pas la condition statique. Un mouvement du fluide à l'extérieur et à l'intérieur de la goutte tend à étaler la goutte et comme la condition d'incompressibilité est imposée le volume de celle-ci reste constant et sa hauteur diminue. La figure (22) donne un instantané de la forme et du mouvement du fluide mais à cet instant la condition de raccordement n'est pas respectée non plus. Il ne peut pas y avoir un raccordement instantané et l'angle de contact ne peut pas être imposé. L'angle de contact varie ainsi au cours de l'étalement de la goutte en fonction des forces d'inertie, de la viscosité et des forces capillaires en présence. L'état final est celui représenté sur la figure (8).

Dans ce problème le terme source dérive d'un seul potentiel scalaire, la pression capillaire. Ce ne serait plus le cas si on tient compte de la gravité : même si la gravité dérive d'un potentiel la surface d'équilibre n'est plus un cercle et le terme $\gamma \kappa \nabla \xi + \rho \mathbf{g}$ comporte une composante solénoïdale non nulle. Cette composante issue du terme source ne peut être compensée qu'avec l'accumulateur vectoriel $\boldsymbol{\omega}$ de l'équation du mouvement discrète. De très nombreux auteurs ont simulé cette dernière situation avec l'équation de Navier-Stokes et différentes méthodes de suivi d'interface mais aucun (à notre connaissance) ne mentionne l'existence de courants parasites persistants au voisinage de la ligne triple. Si $\boldsymbol{\omega}^o$ n'est pas présent c'est le terme inertiel qui n'est pas nul et donc les vitesses aussi.

L'exemple suivant sur le mouvement et l'équilibre de l'ascension capillaire précise cette notion capitale.

4.6 Ascension capillaire dans un tube ou entre deux plans

Le cas présenté reprend en partie celui de [4] de la montée capillaire entre deux plans. De l'eau est aspirée par capillarité dans un tube de $r = 1 \text{ mm}$ de rayon jusqu'à une hauteur fixée par les équilibres entre la force de gravité $\rho \mathbf{g}$ et les forces capillaires $\gamma \kappa \nabla \xi$ et donnée par la loi de Jurin :

$$h = \frac{\gamma}{\rho g r \cos \theta} \quad (29)$$

Dans le cas où la surface interne du tube est partiellement mouillante, un $\cos \theta$ y apparait.

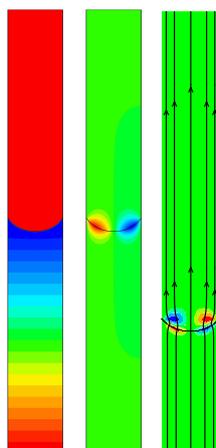


FIGURE 23. *Equilibre mécanique statique défini par les deux potentiels scalaire p^o (à gauche) et vectoriel $\boldsymbol{\omega}^o$ (au centre). La figure de droite est un instantané de l'ascension obtenu avec une chaîne de marqueurs où sont représentées les lignes de courant et la vitesse horizontale.*

De très nombreux articles sont consacrés à ce problème ([8], [9]) et ne donnent en général que la vitesse de l’ascension capillaire ou la hauteur d’ascension au cours du temps sans préciser vraiment quel est l’état réellement atteint lorsque la hauteur h est constante. Or le terme source de l’équation du mouvement $\sigma \kappa \nabla \xi + \mathbf{g}$ n’est pas un gradient pur et sa décomposition de Hodge-Helmholtz montre que les deux potentiels scalaire $\varphi^o = p^o/\rho$ et vectoriel $\varpi^o = \boldsymbol{\omega}^o/\rho$ ne sont pas nuls.

Pour obtenir ces deux potentiels l’équation (23) est résolue à partir de champs de vitesse, pression et potentiel vectoriel nuls. L’équation de la statique (30) est finalement vérifiée ; elle est vraie pour les fluides, les solides et inclue des termes sources correspondant à des forces massiques d’origine variée.

$$-\nabla \varphi^o + \nabla \times \varpi^o + \sigma \kappa \nabla \xi + \mathbf{g} = 0 \quad (30)$$

Les potentiels obtenus à l’équilibre statique sont représentés sur la figure (23). Il est clair que le ménisque se maintient à une hauteur h que par ce qu’il existe des forces de cisaillement/rotation qui équilibrent exactement le poids de la colonne d’eau avec une vitesse nulle en tout point du domaine. L’absence du potentiel $\boldsymbol{\omega}^o$ dans l’équation de Navier-Stokes ne permet pas d’accorder de sens aux résultats obtenus avec cette équation pour ce problème où la vitesse n’est jamais nulle. S’il en était ainsi le bilan énergétique de ce système isolé serait en défaut.

L’équation (23) permet non seulement de représenter l’évolution de l’ascension capillaire à partir d’une situation initiale où le ménisque est à la hauteur $h = 0$ mais aussi de trouver exactement la valeur théorique donnée par la loi de Jurin (29) pour un état de repos ($\mathbf{V} = 0$). Les deux champs $\nabla \varphi^o$ et $\nabla \times \varpi^o$ étant orthogonaux leur égalité ne pourrait être réalisée que s’ils sont égaux à une constante ce qui veut dire les termes en gradient et les termes en rotationnel doivent être nuls séparément. Les conditions aux limites aux limites du problème physique sont bien vérifiées par la solution obtenue notamment la pression aux deux extrémités du tube est égale à zéro et la pression dans la zone du ménisque est bien négative par rapport à sa valeur aux extrémités.

5 Conclusions

La modélisation des écoulements multiphasiques à interfaces discontinues constituent un enjeu important tant du point de vue de la physique que des applications potentielles. Une grande partie des méthodes considèrent l’interface diffuse de manière explicite comme les méthode de type phase-field ou de manière implicite, la plupart des autres, qui nécessitent des interpolations sur les propriétés aux voisinage de l’interface. Ces interpolations arbitraires sur la masse volumique et la viscosité induisent une pollution des champs de vitesse, de pression, etc. Par ailleurs la qualité de la courbure locale de beaucoup de méthodes sont médiocres et nécessitent des lissages ou des interpolations supplémentaires qui contribuent à augmenter la diffusion de l’information.

Il existe toutefois des solutions théoriques qui permettent de trancher facilement sur la qualité d’une méthodologie complète ; c’est le cas notamment de la loi de Laplace où la pression capillaire est constante dans la goutte ; il s’agit d’obtenir un état de repos, pas de réduire les courants parasites induits.

L’origine de nombreuses difficultés n’est pas simplement due à la méthodologie numérique de transport des interfaces, elle est en lien direct avec la formulation mathématique de l’équation du mouvement. La vision continue de la mécanique en est la principale cause, la différentiation des propriétés discontinues n’est pas sans poser des problèmes de fond.

Références

- [1] Ph. Angot, J-P. Caltagirone, and P. Fabrie. A fast vector penalty-projection method for incompressible non-homogeneous or multiphase navier-stokes problems. *Applied Mathematics Letters*, 25(11) :1681–1688, 2012.
- [2] S. Bordère and J-P. Caltagirone. A multi-physics and multi-time scale approach for modeling fluid-solid interaction and heat transfer. *Comput. and Struc.* <http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruc.2015.10.009>, 164 :38–52, 2016.
- [3] J-P. Caltagirone. *Discrete Mechanics*. ISTE, John Wiley & Sons, London, 2015.
- [4] J-P. Caltagirone. Equilibres statique et dynamique de l’ascension capillaire. *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01200464>, 2015.
- [5] J-P. Caltagirone. Quelles différences entre un fluide et un solide? *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01187052>, 2015.
- [6] J-P. Caltagirone and S. Vincent. A Kinematics Scalar Projection Method (KSP) for Incompressible Flows with Variable Density. *Open Journal of Fluid Dynamics*, doi : [10.4236/ojfd.2015.52019](https://doi.org/10.4236/ojfd.2015.52019), 5 :171–182, 2015.
- [7] A. Prosperetti and G. Tryggvason. *Computational Methods for Multiphase Flows*. Cambridge University Press, Cambridge UK, 2007.
- [8] H. Washburn. The dynamics of capillary flow. *Phys. Rev.*, 17 :273–283, 1921.
- [9] Y. Yamamoto, Ito, T., T. Wakimoto, and K. Katoh. Numerical simulations of spontaneous capillary rises with very low capillary numbers using a front-tracking method combined with generalized navier boundary condition. *International Journal of Multiphase Flow*, 51 :22–32, 2013.