



HAL
open science

Modélisation et simulation directe du mouillage partiel

Jean-Paul Caltagirone

► **To cite this version:**

| Jean-Paul Caltagirone. Modélisation et simulation directe du mouillage partiel. 2016. hal-01359616

HAL Id: hal-01359616

<https://hal.science/hal-01359616>

Preprint submitted on 2 Sep 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 et simulation directe du mouillage partiel

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 notion d'angle de contact pour modéliser le mouillage partiel est associée à celle d'équilibre statique et des modèles dérivés doivent être appliqués pour décrire le comportement des écoulements diphasiques instationnaires. La généralité de cette notion n'est pas non plus assurée en présence d'autres forces, par exemple la gravité, où l'angle de contact n'est pas celui appliqué même pour l'équilibre statique. Le concept de courbure de contact proposé ici permet de rendre compte de situations à l'équilibre statique mais aussi en dynamique.

Le cadre de la mécanique des milieux discrets définit l'accélération comme la somme des forces massiques sur une topologie discrète où les vecteurs sont représentés par leurs composantes sur un segment de dimension finie reliant deux points où s'expriment les quantités scalaires. L'équation du mouvement discrète s'écrit alors formellement comme une décomposition de Hodge-Helmholtz, la somme du gradient d'un potentiel scalaire et du rotationnel d'un potentiel vecteur. La modélisation des effets capillaires conduit, dans ce contexte, à formuler ces effets par le potentiel capillaire, le produit de la tension superficielle massique, de la courbure et d'une indicatrice de phase. Le gradient de ce potentiel scalaire est compatible avec l'ensemble des autres termes de l'équation du mouvement.

La formulation discrète respecte les principes fondamentaux de la mécanique notamment le principe d'équivalence et permet de retrouver les résultats classiques de la mécanique, fluides, solides ou ondes. Le terme capillaire sous la forme du gradient du potentiel capillaire regroupe les notions attachées aux forces capillaires, la pression capillaire, le mouillage partiel ou encore l'effet Marangoni. Plusieurs exemples confèrent une certaine confiance en cette description.

Mots clés : Mécanique des milieux discrets, mécanique des milieux continus, décomposition de Hodge-Helmholtz, effets capillaires, loi de Laplace, effet Marangoni.

Modeling and direct simulation of partial wetting

Abstract

The concept of contact angle to model the partial wetting is associated with that of static equilibrium and others models must be applied to describe the behavior of two-phase unsteady flows. The generality of this concept is not ensured in the presence of other forces, such as gravity, where the contact angle is not the same applied to the static equilibrium. The concept of contact curvature proposed here can account situations of static equilibrium but also unsteady flows.

The framework of discrete mechanics defines acceleration as the sum of the mass forces on a discrete topology where the vectors are represented by their components on an edge of finite length connecting two points where the scalar quantities are expressed. The equation of the discrete movement can be formally defined as a Hodge-Helmholtz decomposition, the sum of the gradient of a scalar potential and the curl of a vector potential. Modeling capillary effects lead, in this context, to formulate these effects by the capillary potential, the product of the mass surface tension, the curvature and a phase function. The gradient of the scalar potential is compatible with all the other terms of the equation of motion.

The discrete formulation respects the fundamental principles of mechanics in particular equivalence principle and can find the classical results of mechanics, in fluids, solids or waves. The capillary term written as a gradient of capillary potential includes the concepts attached to the capillary forces, the capillary pressure, the partial wetting or Marangoni effect. Several examples provide some confidence in this description.

Keywords : Discrete Mechanics, Continuum Mechanics, Hodge-Helmholtz decomposition, capillary effects, Laplace law, Marangoni effect.

1 Introduction

La modélisation des écoulements à surfaces libres dominés par la capillarité est un enjeu important pour un grand nombre d’industries où les échelles spatiales sont relativement petites, par exemple pour le développement de la micro-fluidique mais bien d’autres encore. Le phénomène de capillarité a surtout fait l’objet depuis longtemps d’observations expérimentales autour des bulles, gouttes, perles, lentilles, etc. Par ailleurs la simulation d’écoulements de toutes natures s’est développée à partir de méthodologies numériques visant principalement à discrétiser les équations de la mécanique sur un maillage volumique. Tout naturellement ces techniques numériques ont été utilisées pour appréhender les phénomènes observés. Encore aujourd’hui une bonne partie des écoulements diphasiques est basée sur des approches exclusivement eulériennes où les effets capillaires sont modélisés de manière volumique pour les rendre compatibles avec les équations de la Navier-Stokes [8]. Si les opérateurs surfaciques sont parfaitement adaptés pour caractériser certaines propriétés, courbure, normale, ... la projection de ces mêmes quantités sur un maillage volumique nécessite un certain nombre d’interpolations ou de lissage qui dégradent l’information.

Du point de vue numérique des progrès importants ont été réalisés depuis quelques années pour améliorer la description des surfaces tout en gardant une approche volumique pour la résolution des équations, une bonne revue de ces techniques est disponible [21]. L’appropriation de techniques issues de la géométrie différentielle et de l’imagerie [14] ont grandement contribué à améliorer la représentativité des simulations des écoulements à surfaces libres.

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. La modélisation du mouillage partiel a été appréhendée par des observations expérimentales anciennes basées sur la mesure de la tension interfaciale par une goutte posée sur un substrat, l’ascension capillaire dans un tube, ou encore la force d’arrachement d’une surface plongée dans un liquide. La principale caractéristique retenue pour la modélisation du mouillage 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 des surfaces réelles est plus restreinte. De très nombreux travaux parmi lesquels [20], [18], [16] utilisent ce concept pour définir le mouillage partiel comme un modèle associé aux conditions aux limites ; des modèles d’angle de contact dynamiques sont aussi utilisées pour rendre compte de la progression de la ligne triple sur le substrat.

Cette décorrélation entre observations et équation du mouvement est à l’origine de difficultés physiques qui s’accroissent avec la simulation numérique. Les nombreux modèles adoptés pour réaliser le lien compensent en partie cette séparation en apportant des solutions différentes pour un même problème dynamique. Il est donc nécessaire de revoir la modélisation du mouillage partiel en se servant des seuls paramètres physiques déjà intégrés dans l’équation elle-même.

La mécanique des milieux discrets [9] est le cadre choisi pour développer une formulation mathématique cohérente autour des effets capillaires et notamment du mouillage partiel. L’équation discrète du mouvement est dérivée sur une topologie primale composée de segments délimités par des points. Les quantités scalaires sont définies sur les points alors que les vecteurs, plus précisément les composantes des vecteurs, sont définis sur les segments orientés. Les topologies primale et duale ainsi construites confèrent des propriétés discrètes particulières, $\nabla \cdot \nabla \times \psi = 0$ et $\nabla \times \nabla \phi = 0$ quelles que soient les fonctions ϕ et ψ . L’équation du mouvement définit l’accélération γ comme une décomposition de Hodge-Helmholtz, la somme d’une composante solénoïdale et d’une composante irrotationnelle. Le terme source capillaire incluant le mouillage partiel sera écrit suivant le même principe.

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 \mathcal{S} ; 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 Σ 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.

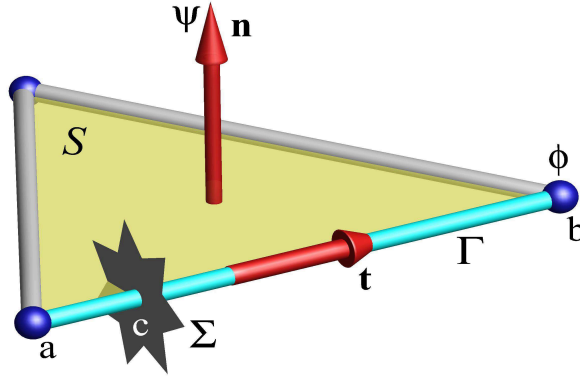


FIGURE 1. Topologie élémentaire de la mécanique des milieux discrets : trois segments rectilignes Γ délimités par des points définissent une face plane \mathcal{S} . Les vecteurs unitaires de la normale à la face \mathbf{n} et du vecteur porté par Γ sont orthogonaux, $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. 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 primal $\mathbf{\Omega}$ soit $(\mathbf{V}, \nabla p, \nabla_d \times \mathbf{\Omega})$. Celles relatives aux faces sont $(\boldsymbol{\omega}, \mu, \mathbf{\Omega} = \nabla_p \times \mathbf{V})$ le potentiel vecteur, la viscosité et le rotationnel primal de la vitesse. Le segment Γ peut être intercepté par une discontinuité Σ 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 sur ce concept sont développées dans l'ouvrage [9].

Comme l'objet de cet article est l'application de ces notions aux écoulements dominés par la capillarité celles-ci seront étendues aux discontinuités Σ 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 d'après le Principe d'Equivalence.

2.2 Equation discrète du mouvement

L'équation fondamentale de la dynamique ou seconde loi de Newton définit la quantité d'accélération comme étant égale à la somme des forces, $m \boldsymbol{\gamma} = \mathbf{F}$. Depuis les *Principia* [19] la formulation de l'équation du mouvement a été complétée par l'expression des forces en fonction de la vitesse ou du déplacement. Toutefois la masse apparaît encore explicitement dans toutes les formes de l'équation du mouvement notamment en fluide dans l'équation de Navier-Stokes. Pourtant la notion d'égalité de la masse grave et de la masse inerte était connue depuis Galileo Galilée et par Isaac Newton lui-même. Albert Einstein s'en est servi en tant que Principe d'Equivalence pour construire sa théorie sur la Relativité Générale. D'ailleurs dans un repère mobile la loi de la dynamique s'écrit aussi sous la forme $\mathbf{F} = m \boldsymbol{\gamma}$ où m est la masse en mouvement ; la loi de Newton ne permet pas d'accéder à la notion de masse au repos.

Le Principe d'Equivalence, l'un des points clés de la physique, est vérifié actuellement à 10^{-13} près. Des expériences en cours en vue de vérifier certaines hypothèses la mécanique quantique [22] permettront d'atteindre une précision de 10^{-15} .

Dès lors il devient inutile de garder une formulation où la masse intervient explicitement puisque celle-ci n'y joue aucun rôle. Tous les phénomènes décrits par l'équation du mouvement ne dépendent pas de la masse ou de la masse volumique comme par exemple la déviation des photons dénués de masse par un champ de gravité. L'équation du mouvement s'écrit en conséquence sous la forme :

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{g} \tag{1}$$

La masse est bien une notion concrète et il est légitime d'écrire sa conservation. Dans le cadre de la mécanique des milieux continus son association à l'équation du mouvement est absolument nécessaire, notamment en fluide où l'équation de Navier-Stokes n'est pas autonome. D'ailleurs sans son association avec la conservation de la masse l'équation de Navier-Stokes serait infondée.

La mécanique discrète [9] reste dans un cadre conceptuel similaire à la mécanique classique mais remet en cause la notion de milieu continu où toutes les variables sont associées à un point matériel ; cette description nécessite de définir un référentiel absolu et, par ailleurs, d'appliquer des règles de dérivation. La vision de milieu discret s'attache à décrire uniquement un mouvement

relatif dans un référentiel local. Il généralise le concept de repère galiléen aux mouvements de rotation uniforme.

Les concepts précédents permettent de dériver l'équation du mouvement discrète sur le segment Γ . Les développements de ces calculs sont donnés dans [9]. L'équation du mouvement s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla(\phi^o - dt c_L^2 \nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \times (\psi^o - dt c_T^2 \nabla \times \mathbf{V}) + \mathbf{g} \\ \phi = \phi^o - dt c_L^2 \nabla \cdot \mathbf{V} \\ \psi = \psi^o - dt c_T^2 \nabla \times \mathbf{V} \end{cases} \quad (2)$$

où c_L et c_T sont les célérités longitudinale et transversale. Le potentiel scalaire d'équilibre noté ϕ^o et le potentiel vectoriel d'équilibre ψ^o sont actualisés à chaque équilibre temporel par les opérateurs $\nabla \cdot \mathbf{V}$ et $\nabla \times \mathbf{V}$. \mathbf{V} est la composante de la vitesse sur le segment Γ de la topologie primale. L'équation vectorielle et les remontées des potentiels forment un système autonome ; la masse volumique n'y apparaît pas.

La conservation de la masse n'est pas requise mais elle n'en n'est pas moins assurée. La masse volumique ne réapparaît que dans l'expression des potentiels ϕ^o et ψ^o si on souhaite introduire la notion de pression. L'évolution lagrangienne de cette quantité n'est fonction que de la divergence de la vitesse. Dans le cas où le milieu est anisotherme il sera nécessaire d'établir une expression de la conservation du flux de chaleur Φ et de son potentiel scalaire, l'énergie sous une forme appropriée (enthalpie, température, énergie interne, entropie). Pour des évolutions isothermes le système (2) permet de calculer la composante de vitesse \mathbf{V} sur le segment Γ pour actualiser explicitement les potentiels. Les deux seuls paramètres physiques sont les célérités longitudinale et transversale qui peuvent être fonction d'autres paramètres physiques, par exemple la température pour la célérité du son.

Ce système (2) inclut les effets d'inertie, les effets visqueux, la propagation des ondes longitudinales et transversales et potentiellement la dissipation des ondes longitudinales et transversales, les autres effets éventuels : la traînée de Darcy et autres forces massiques. Le terme \mathbf{g} peut représenter la gravité, les forces centripète et centrifuge, les effets capillaires etc.

Il est possible d'exprimer les potentiels à partir des contraintes scalaire et vectorielle, la pression p et la contrainte de rotation ω . 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 $\nabla \times \mathbf{V}$:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla \left(\frac{p^o}{\rho} - \frac{dt}{\rho \chi_T} \nabla \cdot \mathbf{V} \right) + \nabla \times \left(\frac{\omega^o}{\rho} - \frac{dt \mu}{\rho} \nabla \times \mathbf{V} \right) + \mathbf{g} \\ p = p^o - \frac{dt}{\chi_T} \nabla \cdot \mathbf{V} \\ \omega = \omega^o - \mu dt \nabla \times \mathbf{V} \\ \rho = \rho^o - \rho^o dt \nabla \cdot \mathbf{V} \end{cases} \quad (3)$$

où p^o et ω^o sont la pression et la contrainte de cisaillement-rotation à l'équilibre mécanique. La masse volumique qui apparaît dans ce système d'équations est la masse volumique en mouvement. En effet la contribution d'une vitesse \mathbf{V}_o constante et uniforme disparaît complètement du système ; il en est de même, à un gradient d'une fonction scalaire près, d'un mouvement de rotation uniforme Ω_o .

A l'issue de la résolution de ce système toutes les quantités $(p, \rho, \omega, \mathbf{V})$ 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 :

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} - \mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{V} = -\nabla \left(\frac{p^o}{\rho} - \frac{dt}{\rho \chi_T} \nabla \cdot \mathbf{V} + \frac{\|\mathbf{V}\|^2}{2} \right) + \nabla \times \left(\frac{\boldsymbol{\omega}^o}{\rho} - \frac{dt \mu}{\rho} \nabla \times \mathbf{V} \right) + \mathbf{g} \quad (4)$$

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. A ce stade χ_T est le module d'élasticité et μ le module de cisaillement.

Comme on peut le constater sur l'équation (4) 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 Bernoulli. Tous les termes sont des gradients ou des rotationnels à l'exception de $\mathbf{V} \times \nabla \times \mathbf{V}$.

La forme la plus adaptée à la vision discrète initiale est donnée par le système (3) ; 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.

Dans le cas des fluides newtoniens la contrainte de cisaillement-rotation d'équilibre $\boldsymbol{\omega}$ est négligeable ; en effet le temps caractéristique de relaxation des effets de cisaillement est de l'ordre de grandeur de $\tau \approx 10^{-11}$ s. Le produit du temps d'observation entre deux états d'équilibre caractéristique par la célérité transversale c_T^2 doit être remplacé, à plus grandes constantes de temps, par la viscosité dynamique μ et le rapport μ/ρ est la viscosité cinématique. Par contre la compressibilité χ_T conserve la même signification en fluide et en solide.

Le système (2) ou le système (3) unifie la description du comportement des fluides, des solides et des milieux à comportements rhéologiques complexes [11] ; de nombreux exemples permettent de donner un certain crédit à cette description [6], [7]. La propagation des ondes de toute nature, y compris les ondes de choc [9], [1], [13], est bien représentée par ce système d'équations.

La forme de l'équation du mouvement (3) où tous les termes sont, soit un gradient d'un potentiel scalaire soit un rotationnel d'un potentiel vecteur, satisfait au principe de la décomposition de Hodge-Helmholtz. Cette décomposition sert pour les numériciens surtout à réaliser une projection dans un espace à divergence nulle [2], [4], [3], [5]. En général cette décomposition n'est pas unique pour un domaine borné et dépend des conditions aux limites. Cependant l'équation du mouvement a été expurgée des mouvements de translation et de rotation uniformes ce qui contribue à la non unicité de la solution. Par ailleurs les équations de la physique ne sont pas sous cette forme, par exemple l'équation de Navier-Stokes ce qui n'empêche pas celle-ci de bien représenter la réalité.

Pour l'instant cette décomposition ne peut être érigée en Principe mais rien n'interdit de l'appliquer. Son application à l'équation du mouvement n'enlève rien à sa représentativité et c'est même le contraire. Son extension possible aux autres lois de la physique reste à établir notamment en électromagnétisme où les équations de Maxwell sont dans une forme proche du système discret (3).

Les lois de conservation du flux de chaleur et de l'énergie ont été revisitées en considérant, comme pour la conservation de l'accélération, une loi vectorielle sur le flux de chaleur et une remontée du potentiel scalaire (température, énergie interne, enthalpie, entropie, ...) à partir de la conservation de l'énergie. Ainsi le segment Γ porte la composante de l'accélération $\boldsymbol{\gamma}$ et du flux de chaleur $\boldsymbol{\Phi}$. La dérivation de ces équations est donnée dans [9].

3 Modélisation des effets capillaires

3.1 Modélisation du mouillage partiel

L'objectif est ici de formuler le problème des effets capillaires en tenant compte à la fois de la pression générée spécifiquement par ces effets, des éventuelles variations de la tension superficielle massique σ en fonction de la température, de l'effet Marangoni, des variations de la courbure locale κ suivant l'abscisse curviligne liée à l'interface et de la mouillabilité du substrat définie par l'angle de mouillage partiel d'équilibre θ . Le seul terme source introduit dans l'équation du mouvement devra ainsi rendre compte de tous ces effets en dynamique où la présence de chacun d'eux est justifiée et parfaitement légitime.

Les principaux repères à respecter sont les expériences physiques indiscutables comme la surpression dans une goutte ou dans une bulle, la forme d'une petite goutte sur un plan, l'ascension gravitaire dans un petit capillaire, la forme d'une lentille entre deux autres fluides, l'instabilité de Marangoni ou de Bénard-Marangoni, etc. Des lois génériques correspondent à ces phénomènes bien expliqués à première vue, la loi de Laplace, de Jurin, de Plateau, de Young-Dupré, etc.

En plus de l'angle de contact on peut introduire le paramètre d'étalement $S = \gamma_{SG} - (\gamma_{SL} + \gamma_{LG})$ (où les milieux sont désignés par L pour le liquide, G pour le gaz, S pour le solide) qui permet de caractériser le mouillage : si $S \geq 0$ le mouillage est total et le fluide s'étale complètement sur le substrat et si $S < 0$ le mouillage est partiel.

Deux problèmes se posent ; le premier est de savoir si ces lois sont exactes ou approchées et le second si elles peuvent être retrouvées dans le cadre général comme la solution exacte de l'équation du mouvement.

Ces lois sont en général associées à des hypothèses et approximations qui sont oubliées ou passées sous silence dans un bon nombre d'ouvrages. C'est le cas par exemple de l'ascension capillaire ou même la solution à l'équilibre statique (le repos décrit par la loi de Jurin) conduit à une interface qui ne peut être une calotte sphérique. La loi de Jurin ne peut donc être strictement vérifiée qu'à la limite pour un diamètre de capillaire tendant vers zéro c'est à dire une hauteur théorique qui tend vers l'infini [10], [12]. L'association de forces de différentes nature, la gravité, la rotation, ... viennent modifier les équilibres mécaniques et remettre en cause les hypothèses adoptées.

L'observation des phénomènes physiques et leur description rudimentaire est insuffisante pour établir les équations de la mécanique permettant de retrouver ces résultats non seulement à l'équilibre statique mais aussi en évolution. Un bon modèle (ie. une équation représentative) doit être susceptible de redonner le bon comportement par une simulation directe. L'objet de cette note est donc d'établir un modèle capillaire décrivant de manière correcte tous les effets y compris le mouillage partiel.

Les forces capillaires dues aux différences de pression capillaire, aux variations de la courbure sur l'interface ou encore l'effet Marangoni sont très bien définies dans un repère lié à l'interface.

$$\gamma \kappa \delta; \quad \gamma \frac{d\kappa}{ds}; \quad \frac{d\gamma}{ds} = \frac{d\gamma}{dT} \frac{dT}{ds} \quad (5)$$

où ds est l'abscisse curviligne.

La difficulté est de traduire ces effets surfaciques curvilignes au sein d'un volume ; c'est l'objet de la modélisation de type CSF (Continuum Surface Tension) qui produit des *artefacts* sous forme de courants parasites. En mécanique des milieux discrets les forces sont attachées aux segments Γ de la topologie primale, il est alors logique de projeter toutes les effets capillaires sur le segment

où est calculée l'accélération. Quelle que soit la méthodologie utilisée, conforme ou non conforme aux interfaces, cette description vectorielle s'applique sans difficulté pour redonner les solutions exactes classiques sans courants parasites.

Pour commencer introduisons un paramètre physique $\sigma = \gamma/\rho$ où γ est la tension superficielle classique exprimée en $N m^{-1}$; σ est ainsi une tension superficielle par unité de masse. Dans le cadre de l'adoption du Principe d'Equivalence il est logique d'introduire dans le système (3) un paramètre qui ne dépend pas de la masse volumique. Du point de vue physique cela n'a rien de choquant, chaque milieu aura une valeur différente et à l'interface des deux fluides le rapport sera constant. Une observation unique faite par plusieurs auteurs peut donner lieu à des interprétations et à la définition de propriétés différentes. Ce paramètre tout comme γ peut dépendre de la température.

Le second paramètre incontournable est la courbure κ liée à la forme locale de l'interface. C'est un paramètre difficile à appréhender et dont les effets sont assez subtils, en particulier deux surfaces homothétiques n'ont pas les mêmes courbures.

Un troisième élément doit être associé aux deux premiers, c'est le saut d'une certaine quantité exprimant la notion de discontinuité des variables de part et d'autre de l'interface. Dans les équations de la mécanique classique les discontinuités de surface ou de choc sont des conditions associées à l'équation du mouvement. Dans le modèle de fluide fictif unique ce saut est exprimé par une fonction Heaviside. En mécanique des milieux discrets seule une indicatrice de phase ξ est introduite, elle vaut par exemple 0 dans un fluide et 1 dans l'autre. Dans le cas où l'interface coupe le segment Γ comme sur la figure (1) la fonction vaudra 1 sur a et 0 sur b .

Si l'on applique le principe qu'un vecteur peut être toujours représenté par la somme d'un gradient d'un potentiel scalaire et d'un rotationnel d'un potentiel vecteur il est alors possible de bâtir une formulation cohérente pour les effets capillaires. Les différents paramètres d'intérêt sont en fait associés au sein d'un même potentiel scalaire appelé potentiel capillaire $\phi_c = \sigma \kappa \xi$. Dans l'équation du mouvement l'accélération capillaire est donc décrite par le gradient de ce potentiel. Tous les mécanismes liés aux effets capillaires sont décrits par ce terme : le saut de pression de part et d'autre d'une interface, les mouvements dus à des variations de la courbure et les mouvements dus à l'effet Marangoni.

Les principales lois, dans leur acceptation des hypothèses adoptées, sont vérifiées par ce modèle physique. Par exemple la loi de Laplace pour une goutte au repos pour une tension superficielle constante et une courbure constante $\kappa = 1/R$; l'équation du mouvement se réduit à $\nabla p_c = \nabla(\gamma \kappa \xi)$ soit $p_c = \gamma/R$ à une constante près. C'est aussi vrai pour la loi de Jurin [10] lorsque le rayon du capillaire tend vers zéro.

Pour décrire la notion de mouillage partiel il n'est pas nécessaire d'introduire de nouveau paramètre physique comme l'angle de contact. Ce paramètre issu de l'observation ne dispose pas d'un degré de généralité suffisant. La courbure permet de tenir compte de l'observation des expérimentateurs. Dans le cas d'une goutte en équilibre statique la courbure locale est celle sur toute la surface de la goutte $\kappa = 1/R$. Pour une goutte hémisphérique posée sur une surface plane horizontale la courbure est toujours égale $1/R$ et la courbure sur la ligne de contact est donc égale à $\kappa = 1/R$; le gradient de courbure est nul au voisinage immédiat de la ligne triple. L'affectation d'une valeur différente de la courbure sur la ligne triple κ_c va engendrer inéluctablement un écoulement qui ne peut être réduit à zéro que si la courbure est partout égale à κ_c sur l'interface. Ce paramètre est désigné par "courbure de contact". La formulation du terme capillaire reste quant à elle inchangée.

L'équation du mouvement s'écrira donc :

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla(\phi^o - dt c_L^2 \nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \times (\psi^o - dt c_T^2 \nabla \times \mathbf{V}) + \nabla(\sigma \kappa \xi) \quad (6)$$

L'équilibre des forces défini par la loi de Young-Dupré pour un état de repos est bien représenté par cette équation (6) qui permet de retrouver cet état d'équilibre mais aussi de tenir compte des évolutions du système lorsqu'un déséquilibre est introduit.

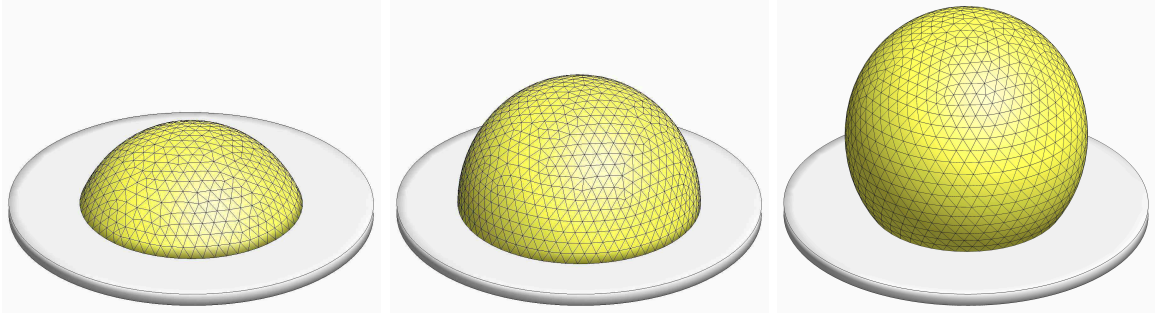


FIGURE 2. Simulation du mouillage d'une goutte sur une surface plane; de gauche à droite pour une courbure de contact égale à la courbure moyenne; la vitesse finale est égale à zéro et la pression égale à $p_c = \gamma \kappa$.

La figure (2) représente les différentes situations d'équilibre obtenues dans le cas d'un mouillage partiel à partir de la résolution du système (6).

La forme de la calotte sphérique est introduite directement et la courbure est calculée sur la topologie primale par une expression issue de la géométrie différentielle. Dans le cas d'une calotte sphérique la courbure est exacte ($\kappa = 1/R$) à la précision machine. Comme la courbure de contact $\kappa_c = \kappa$ la vitesse obtenue est nulle mais la pression capillaire est bien égale à $p_c = \gamma \kappa$. Le cas instationnaire de l'évolution d'une goutte sur un plan sera donné plus loin.

Une goutte de liquide sur un plan qui ne satisfait pas à l'équilibre suivant :

$$-\nabla p^o + \nabla (\gamma \kappa \xi) = 0 \quad (7)$$

engendrera inéluctablement un mouvement et des oscillations dues aux effets inertiels qui la conduira vers l'état d'équilibre où la pression sera égale à $p_c = \gamma \kappa$.

En présence de la gravité mais sans hystérésis et sans effets inertiels, la vitesse de la goutte sur un plan incliné d'un angle φ est constante et son accélération est nulle; l'équation qui régit l'équilibre mécanique est alors :

$$-\nabla p^o + \nabla (\gamma \kappa \xi) + \rho \sin \varphi \mathbf{g} = 0 \quad (8)$$

La gravité introduit une dissymétrie entre l'angle d'avancée et l'angle de reculée et la forme de la goutte ne correspond plus à un segment circulaire ou à une calotte sphérique. La solution ne peut être obtenue que par une résolution de l'équation (6).

Il existe bien sûr un lien entre les notions d'angle de contact et de courbure de contact, la relation est biunivoque pour les cas d'équilibres statiques sans forces extérieures. Du point de vue physique la courbure de contact correspond à une propriété locale et intrinsèque de la surface; c'est la courbure maximale que peut subir une interface avant de céder à un écoulement pour une recherche d'une autre position d'équilibre. Par exemple pour l'effet lotus la surface moyenne peut être considérée comme non mouillante mais cette caractéristique est liée aux fortes courbures de l'interface au voisinage des poils de la feuille. Les effets dus à la gravité sont compensées par les variations de la courbure alors que celle-ci est pratiquement constante loin des contacts. Dans le cas général il paraît impossible de prévoir à l'avance ce que serait l'angle de contact au repos en présence de forces comme la gravité par exemple.

Toutefois les équilibres statique et dynamique correspondent à une physique complexe et il est difficile d’apporter une réponse simple dans le cas général. La stratégie développée ici est de bâtir une équation du mouvement susceptible de rendre compte de tous les effets capillaires potentiels et d’utiliser ce modèle pour réaliser des simulations directes. Le terme $\nabla(\sigma \kappa \xi)$ semble contenir tous les effets attendus. Les quelques exemples donnés ci-dessous permettent en partie de justifier ce point de vue.

En utilisant la notion de courbure de contact il est certain que la courbure locale au voisinage de la ligne triple soit égale à κ_c à l’équilibre statique. Sans gravité, pour un mouillage total κ_c sera égal à zéro et pour une surface parfaitement non mouillante la courbure de contact devra être inférieure ou égale à l’inverse du rayon de la sphère qui ne serait plus en contact avec la surface. Mais encore une fois seule une équation du mouvement représentative permettra de redonner les phénomènes physiques attendus. La courbure de contact traduit directement l’équilibre ou le déséquilibre fixé par la résultante des accélérations sur la ligne triple.

Les cas d’hystérésis non traités ici pourront être appréhendés par ce même formalisme où les angles d’avancée et de reculée seront remplacés par deux courbures de contact différentes.

4 Méthodologie numérique

Il existe un bon nombre de méthodologies numériques pour simuler les écoulements diphasiques et suivre les interfaces au cours de leurs évolutions. Un certain nombre d’entre elles (Level-Set, Phase-Field, schémas hyperboliques, ...) consistent à élargir la zone de diffusion pour notamment calculer une courbure de qualité acceptable. D’autres (Volume Of Fluid [18], Moment Of Fluid [16], ...) calculent la progression des interfaces à partir d’une fonction couleur de manière géométrique mais la courbure est une fonction discontinue. Le plus souvent le calcul de la normale et celui de la courbure est réalisé avec un modèle de type CSF [8] (Continuum Surface Force) pour appréhender la normale et la courbure. Sachant que le moindre défaut de courbure génère des courants parasites, le calcul d’un état d’équilibre statique est inaccessible.

Seules les méthodes de marqueurs permettent d’atteindre la solution exacte, par exemple pour la vérification de la loi de Laplace pour une goutte ou une sphère. Dans le cas général ces techniques sont à l’ordre deux en espace (basée sur la distance entre deux marqueurs). Les marqueurs peuvent être des noeuds du maillage primal (méthodes ALE) et dans le cas le résultat est le même. Ces deux techniques seront utilisées ici pour la simulation directe du mouillage partiel.

4.1 Méthode de marqueurs

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 (3). 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 qui possède sa propre connectivité 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 en amont ou en aval 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.

Il devient alors très simple de détecter quel segment de la chaîne entre deux marqueurs

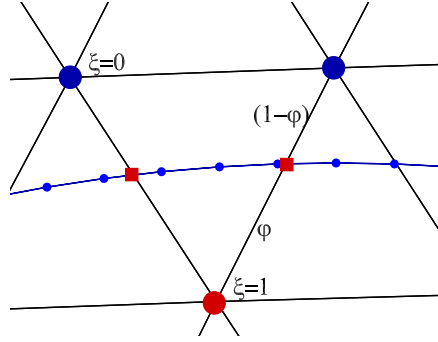


FIGURE 3. Schéma de principe de la détection de l'interface sur le maillage principal.

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 $\varphi \in [0, 1]$ 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.

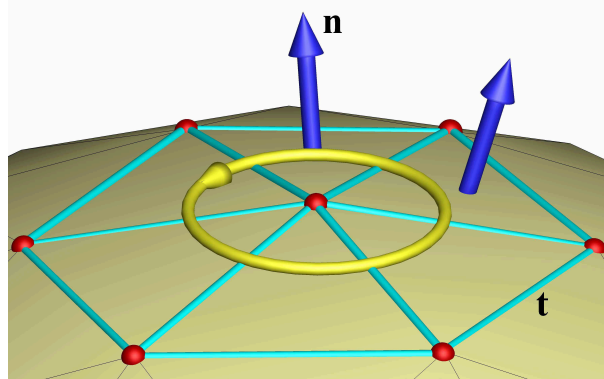


FIGURE 4. Représentation du stencil utilisé pour calculer la courbure sur une surface 3D.

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 (4). 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 au déséquilibre. 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

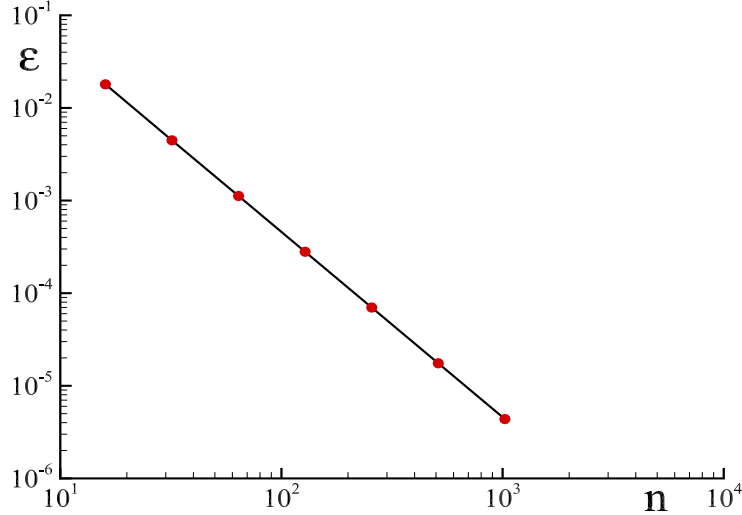


FIGURE 5. Convergence en espace à l'ordre deux sur la courbure d'une ellipse $a = 1$, $b = 0.75$, tirée de [13].

choisi, une ellipse de rayons $a = 1$ et $b = 0.75$. La courbure théorique est donnée par :

$$\kappa = \frac{a b}{(a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta)^{3/2}} \quad (9)$$

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

La figure (5) 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.

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.

L'exemple présenté correspond à une goutte (6) posée sur un plan dont les propriétés sont fixées. La chaîne est formée de $n = 128$ marqueurs initialement équidistants 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 (6). Ces deux états correspondent à l'état de repos où la vitesse est strictement nulle (à la précision machine).

La seule information nécessaire pour traduire l'équilibre statique mais aussi les évolutions de la goutte au cours de son étalement est la courbure de contact κ_c . 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 la courbure de contact ne peut pas être respectée tant que l'équilibre ne correspond pas à l'état de repos c'est à dire à 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.

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

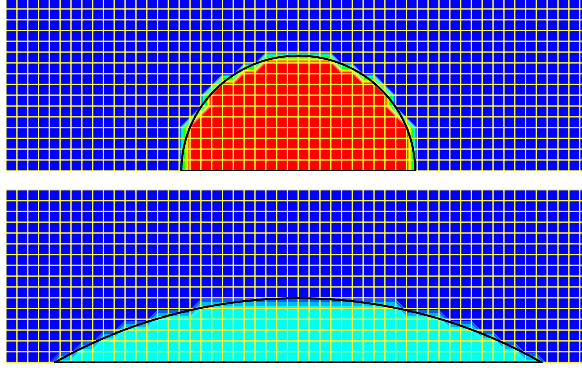


FIGURE 6. Goutte sur un plan sans gravité ; en haut l'état d'équilibre à l'instant initial où l'angle de contact est de 90 degrés ; la pression est exactement égale à sa valeur théorique $p_c = 100$ et le système est au repos ($\mathbf{V} \equiv 0$). En bas l'équilibre mécanique pour un angle de contact θ de 30 degrés, la valeur de la pression est égale à $p_c = 24.0143$; les vitesses sont aussi nulles [13].

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 $S = \pi R_o^2/2$ avec R_o le rayon du cercle équivalent de même surface, on trouve la courbure à imposer par un simple calcul géométrique :

$$\kappa = \sqrt{\frac{(\theta - \sin \theta)}{\pi R_o^2}} \quad (10)$$

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 la figure (6) 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.

4.2 Méthode lagrangienne eulérienne FronTALE

La méthode présentée succinctement maintenant est basée sur une double représentation de marqueurs connectés et d'un maillage volumique ; elle peut être considérée comme l'association de deux techniques existantes, la méthode FT (Front-Tracking) et la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian). Au sein du maillage volumique constitué par des polyèdres (tétraèdres, hexaèdres, prismes, ...) une surface particulière est définie comme une interface entre deux fluides immiscibles. La figure (4) donne une bonne idée de la représentation de celle-ci au sein d'un maillage volumique constitué de tétraèdres, les deux topologies étant conformes à tout instant.

Le maillage surfacique permet de réaliser toutes les opérations nécessitées par le calcul de la courbure et de la normale. Un certain nombre d'algorithmes issus du domaine de la géométrie donne accès à ces informations de manière précise et robuste. Par exemple la courbure d'une surface sphérique égale à $\kappa = 1/R$ tessellée par des triangles est obtenue à la précision machine. Pour des surfaces quelconques la précision sur la courbure est à l'ordre deux (basée sur la longueur caractéristique du segment). Si nécessaire une méthode de ray-tracing permet d'évaluer si un

point est à l'extérieur ou à l'intérieur d'un domaine polyédrique. La fonction de phase ξ égale à 0 ou 1 permet de marquer le fluide. Enfin le terme source capillaire est affecté à chaque segment de la surface à l'aide de l'opérateur gradient $\nabla(\sigma \kappa \xi)$. Ces segments appartiennent aux deux topologies, la surface et le volume.

Le maillage volumique est utilisé pour calculer la vitesse \mathbf{V} sur chaque segment Γ de la topologie primale à partir de l'équation du mouvement (4). Il est à noter que les équations discrètes ne nécessitent aucune méthode de discrétisation (EF, VF, DF, ...); cette équation (4) est prête à une utilisation directe à l'aide des opérateurs discrets gradient, rotationnels dual et primal ainsi que la divergence. La pression est ensuite remontée explicitement avec les mêmes opérateurs discrets.

La troisième phase consiste à calculer la vitesse de l'interface avec l'expression :

$$V|_{\Sigma} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{N} \quad (11)$$

où \mathbf{N} à la normale à l'interface. L'interface est ensuite advectée dans la direction de cette normale.

Comme l'interface et la trace de celle-ci au sein du maillage volumique sont conformes celui-ci est déformé. Une procédure de redistribution des noeuds est alors appliquée pour obtenir à chaque pas de temps une bonne qualité du maillage volumique. Toutes ces opérations ne nécessitent qu'une fraction (environ 10%) du temps de résolution de l'équation du mouvement.

Le principal avantage de cette méthodologie est l'absence d'interpolations sur les variables ou sur les caractéristiques. La masse volumique en mouvement est toujours la même pour un milieu donné et un segment de l'interface est forcément d'un côté ou de l'autre de celle-ci. De même la viscosité μ est localisée sur les faces de la topologie primale et donc affectée à un des fluides. Les autres caractéristiques physiques, conductivité thermique, coefficient de compressibilité, coefficient de dilatation, ... ont des localisations spécifiques et ne nécessitent aucune interpolation.

La méthode FronTALE permet de traiter les situations d'écoulements diphasiques dans des approches différentes, en lagrangien, en eulérien ou en méthode mixte (ALE). Pour des déplacements réduits il est commode d'utiliser une approche exclusivement lagrangienne, les points du maillage primal sont advectés par la vitesse. Pour des interfaces très fractionnées il est commode de revenir à une approche eulérienne sur un maillage fixe, seule l'interface est advectée avec la vitesse normale à celle-ci. Pour des grands déplacements l'approche la plus précise consiste à advecter les points situés sur l'interface avec la vitesse normale mais de déplacer les points affectés aux différents fluides pour sauvegarder un maillage de qualité. Les équations relatives à la méthode ALE introduisent la différence entre la vitesse locale du fluide et celle du maillage pour décrire la dérivée particulaire [15], [21]. Une procédure d'adaptation et de régularisation du maillage basée sur un lissage barycentrique est utilisée avant le passage à un autre pas de temps.

5 Exemples d'écoulements gouvernés par la capillarité

Le système d'équations (3) a été vérifié et validé sur de très nombreux cas monophasiques ou multimatériaux aussi bien en fluide qu'en solide ou encore pour la propagation des ondes. Les exemples donnés ci-dessous permettent d'illustrer la capacité de la formulation du terme capillaire à représenter de nombreuses situations où la capillarité a un effet dominant, et notamment lorsque la mouillabilité doit être prise en compte.

Le principal résultat de ce travail est la mise en forme du terme source en un gradient du potentiel capillaire regroupant tous les effets, saut de pression de part et d'autre d'une interface, la variation de la courbure, l'effet Marangoni, etc.

5.1 Ellipse en oscillation

Le premier cas 2D traité est celui d'une goutte d'eau elliptique dans une cavité carrée remplie d'air de côté $d = 10^{-3} m$. Initialement le grand rayon de l'ellipse est de $a = 3 \cdot 10^{-4} m$ et le petit rayon de $a = 2 \cdot 10^{-4} m$. L'eau a un masse volumique de $10^3 kg m^{-3}$ et une viscosité augmentée à $\mu = 10^{-2} Pa s$ pour réduire le temps d'oscillation ; l'air a un masse volumique de $1 kg m^{-3}$ et une viscosité de $\mu = 2 \cdot 10^{-5} Pa s$. La tension superficielle est égale à $\gamma = 0.073 N m^{-1}$.

La méthode utilisée celle décrite plus haut (Front-ALE). Le maillage de triangles utilisé est relativement grossier mais comme celui-ci est conforme à la géométrie de la goutte à chaque instant la précision obtenue est très satisfaisante.

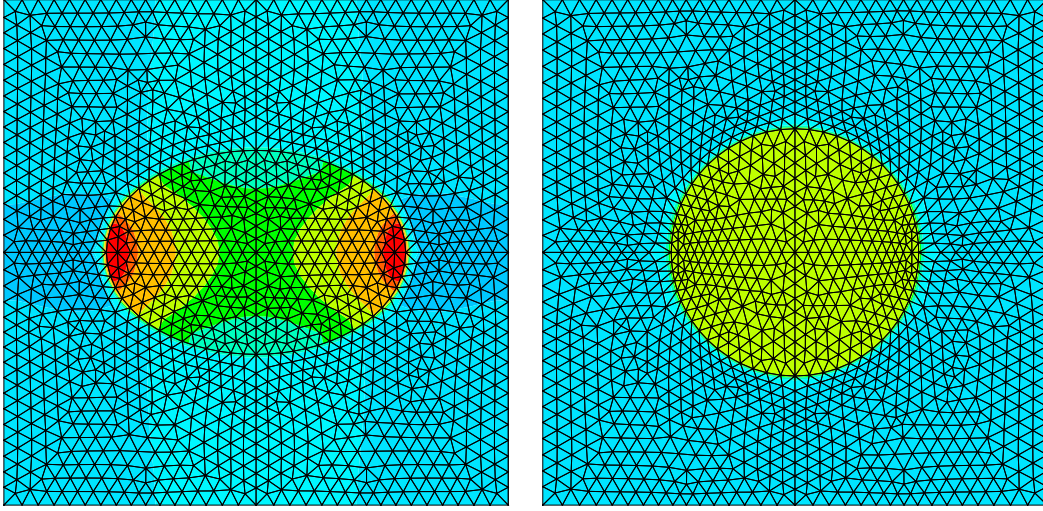


FIGURE 7. Evolution d'une ellipse au cours du temps à 10 itérations $p \in [-172, 352]$ et à 1000 itérations $p \in [-63.3, 234.6]$ avec $dt = 10^{-6} s$.

La figure (7) montre deux états de l'évolution de l'ellipse au cours du temps, un temps proche de l'état initial et à l'équilibre statique après convergence complète. Très rapidement les forces capillaires agissent sur la goutte pour la déformer, Et comme l'incompressibilité est requise et assurée par le coefficient de compressibilité proche de $0.444 \cdot 10^{-9}$ (correspondant à $c_L = 1500 m s^{-1}$), le volume (et la masse) est conservé exactement. Après un temps d'évolution assez long la goutte devient circulaire et son rayon de courbure devient constant égal à $R = 2.45 \cdot 10^{-4} m$ en conformité avec l'écart de pression constant entre les deux fluides $\Delta p = 297.9 Pa$.

La perturbation initiale étant relativement importante les écoulements externe et interne sont complexes à cause des effets inertiels importants. Un autre cas similaire a été réalisé avec un cercle de rayon $R = 10^{-3} m$ perturbé initialement avec un déviation de 0.1% de son diamètre.

Le quasi-cercle oscille autour de sa position moyenne et semble converger vers la solution théorique à l'équilibre mais ici la viscosité est celle de l'eau ($\mu = 10^{-2} Pa s$) ce qui nécessite un temps de convergence très important.

Les évolutions d'un point sur la surface du cercle sont données sur la figure (8). Les oscillations ne s'atténuent que lentement. Il est possible de comparer la fréquence des oscillations au résultat de la théorie linéaire [17] mais ici le cas est visqueux et la validation nécessite une étude complète qui sort du cadre de ce travail.

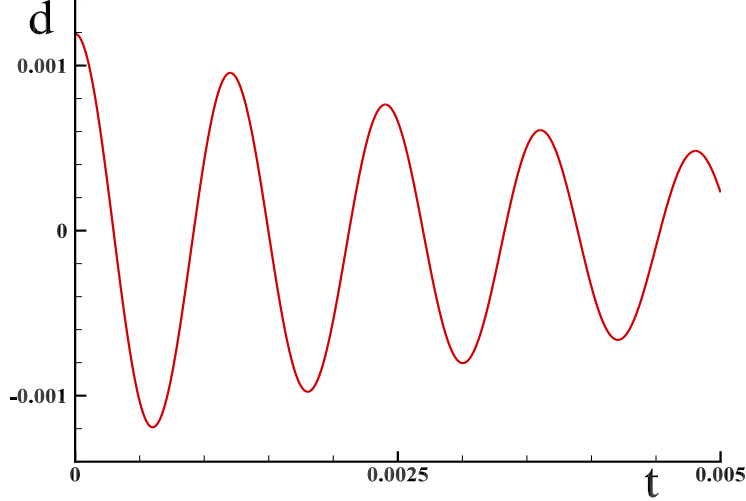


FIGURE 8. Evolution de la coordonnée d'un point sur une ellipse d'un rayon moyen de $10^{-3} m$ au cours du temps dans le domaine linéaire ; la perturbation initiale est de 0.1% du diamètre de la goutte et le pas de temps est de $dt = 10^{-6} s$. Les caractéristiques sont celles de l'eau (avec $\mu = 10^{-3} Pa s$) et de l'air et la tension de surface est de $\gamma = 0.073 N m^{-1}$.

5.2 Goutte en équilibre sur un plan

L'équilibre d'une goutte en équilibre sur un plan sans effet de la gravité est traité par une méthode de marqueurs sur un maillage structuré régulier de type Marker And Cell en cartésien non conforme à l'interface. Le problème posé consiste à vérifier que, si la courbure de contact κ_c est égale à la courbure constante de la goutte égale à $1/R$ pour une géométrie plane circulaire, l'état de repos peut être atteint. La tension de surface est considérée comme constante.

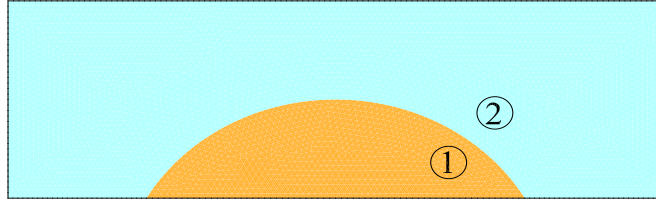


FIGURE 9. Modélisation du mouillage d'une goutte sur une surface plane ; Le rayon de courbure est égal à $R = 10^{-3} m$ et le centre est placé à $(0, -1.5 \cdot 10^{-3})$. La différence de pression capillaire est égale à $\Delta p_c = 10^3 Pa$ à la précision machine. La vitesse est strictement nulle.

Comme le rayon du cercle osculateur passant par trois marqueurs est exactement le même pour toute la chaîne de marqueurs la courbure calculée est exacte à la précision machine. Le terme $\nabla(\sigma \kappa \xi)$ devient $\sigma \kappa \nabla \xi$ et le saut de pression capillaire est ainsi égal à $p_c = \gamma \kappa$.

La simulation est réalisée avec une pression nulle et une vitesse aussi nulle comme condition initiale. L'équation (3) est résolue en un seul pas de temps pour deux milieux quasi-incompressible $\chi_T = 10^{-10}$. La solution obtenue en une seule étape correspond à une vitesse nulle à la précision machine et une pression égale à la valeur théorique exacte. Ce comportement est lié à la satisfaction de l'incompressibilité implicitement. En conclusion, si la courbure locale de contact est égale à la courbure de la goutte, alors on obtient bien l'équilibre statique. La figure (9) montre la solution obtenue où la pression interne à la goutte est supérieure à celle du milieu extérieur.

Le même problème est traité en maillage non structuré, ici pour un maillage à base de triangles réguliers. La goutte et son environnement sont représentés par deux domaines distincts séparés par l'interface initialement circulaire. Comme le montre la figure (10) l'indicatrice de phase est positionnée à 0 ou 1 suivant le fluide ; les noeuds de l'interface appartiennent arbitrairement au milieu ① et celle-ci intersecte les segments des triangles adjacents au milieu ② à une distance aussi petite que possible, en pratique la précision machine. Cette procédure supprime toute interpolation sur la masse volumique et sur la viscosité.

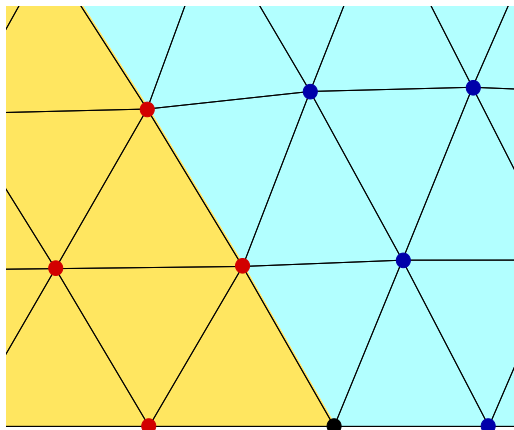


FIGURE 10. Modélisation du mouillage d'une goutte sur une surface plane ; les points \bullet sont sur l'interface où $\xi = 1$ et $\kappa^* = \kappa$, les points \bullet sont dans le fluide ② où $\xi = 0$ et le point \bullet est sur la ligne triple où $\xi = 1$ et $\kappa_c = \kappa$.

La ligne triple représentée par le point en noir sur la figure (10) appartient à la fois à l'interface et à la paroi solide. Il est possible d'affecter une valeur particulière de la courbure à ce point, la courbure de contact κ_c . Si cette valeur est la même que pour le reste de l'interface alors, comme pour la simulation en maillage structuré, la vitesse est nulle et la surpression dans la goutte est égale à $p_c = \gamma \kappa$. Dans un cas où $\kappa_c \neq \kappa$ les forces ne sont plus équilibrées sur la ligne triple et la résultante génère un mouvement qui s'étend par continuité au reste de la goutte.

En conclusion, que l'interface soit conforme ou non avec le maillage l'équilibre d'une goutte est assurée dès que $\kappa_c = \kappa$ en l'absence de gravité et l'angle de contact θ peut être aussi invoqué pour qualifier l'équilibre statique. Si la gravité ou une autre force est présente l'angle de contact n'est plus respecté alors que la courbure de contact est bien vérifiée à l'équilibre statique.

5.3 Etalement d'une goutte

5.3.1 Simulation en maillage non conforme

L'évolution d'une goutte d'eau sur un plan partiellement mouillant est un problème classique qui possède l'avantage de correspondre, à l'équilibre, à un état de repos. La forme initiale de la goutte correspond à un demi-cercle de rayon $R = 1 \text{ cm}$ posé sur plan horizontal et la gravité n'est pas prise en compte ; la tension de surface est constante et égale à $\gamma = 1$. Dès l'instant initial la pression dans la goutte est uniforme et égale à $p_c = 100 \text{ Pa}$. Le mouvement est généré par l'imposition d'une courbure de contact $\kappa_c = 24.0143$ sur les deux points du domaine représentant la ligne de contact ; cette valeur correspond pour la géométrie considéré à un angle de contact de $\theta = 30$ degrés.

Le gradient de courbure au voisinage de la ligne triple engendre un mouvement du fluide à l'extérieur et à l'intérieur de la goutte qui tend à étaler celle-ci et, comme la condition d'incom-

pressibilité est imposée, le volume de celle-ci reste constant et sa hauteur diminue. La figure (11) 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 (6).

La convergence vers cet état est assez longue mais lorsque celui-ci est atteint, la forme de l'interface est une portion de cercle dont la courbure est bien égale à κ_c , la vitesse est nulle et la valeur de la pression finale est égale à $p_c = 24.0143 \text{ Pa}$.

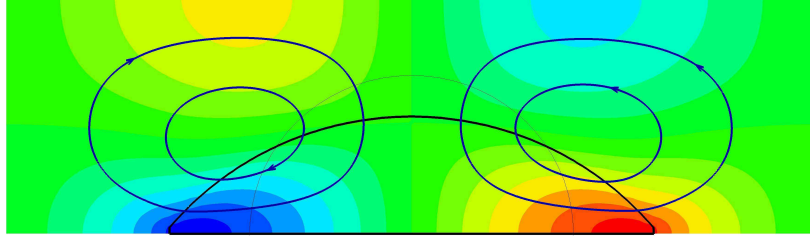


FIGURE 11. *Etalement d'une goutte sur une surface glissante à partir de l'état correspondant au demi-cercle ; les couleurs représentent l'intensité de la vitesse horizontale et les lignes de courant montrent la circulation du fluide dans la cavité. La pression pour les états initial et final est montrée par la figure (6).*

Le cas traité correspond du point de vue dynamique à une surface glissante où $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n} = 0$. Il est bien sûr possible d'imposer l'adhérence du fluide sur la paroi $\mathbf{V} = 0$ mais, aux échelles considérées la viscosité de l'eau étant faible cela ne change pas grand-chose sur la dynamique de l'étalement. Il n'en serait pas de même à plus petite échelle lorsque la couche limite dynamique est d'ordre de grandeur des dimensions de la goutte. Par contre la progression de la ligne triple ne peut être soumise à la contrainte dynamique, celle-ci glisse librement sur la paroi en fonction des forces exercées sur elle.

Il est à remarquer qu'en l'absence de forces extérieures, par exemple la gravité, l'angle de contact et la courbure de contact sont liés par des relations géométriques simples. Dans le cas présent c'est la surface de la goutte S qui est fixée initialement. Si la surface initiale de la calotte circulaire est égale à $S = \pi R^2/2$ celle-ci reste constante tout au long de la simulation, la méthodologie, en incompressible, conserve le volume et conserve aussi la masse. L'effet des efforts capillaires sur la ligne triple modifie la courbure locale mais à l'équilibre la forme de la goutte correspond à une calotte circulaire dont les caractéristiques peuvent être calculées aisément. Si r est le rayon de la calotte et θ l'angle de contact, on obtient :

$$S = \frac{r}{2} (2\theta - \sin(2\theta)) = \frac{1}{2\kappa} (2\theta - \sin(2\theta)) \quad (12)$$

Comme S est constant on peut calculer l'angle de contact à l'aide d'une méthode de Newton en résolvant l'équation (12). Notamment Lorsque $\theta = 0$ la courbure est nulle et lorsque l'angle de contact est égal à $\theta = 180^\circ$ la courbure est égale à $\kappa = \sqrt{2}/R$.

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 $\nabla(\sigma \kappa \xi) + \mathbf{g}$ comporte une composante solénoïdale non nulle. L'équilibre statique respecte la condition imposée sur la courbure de contact κ_c mais la forme de l'interface résulte de l'équilibre des forces en présence que seule l'équation (3) peut restituer.

5.3.2 Simulation en maillage conforme

Le même problème dynamique est maintenant traité avec la méthode FronTALE en 2D avec un maillage adaptatif à base de triangles réguliers. Une goutte ayant la forme d'un demi-cercle de rayon $R = 0.625 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ est posée sur un plan dont la mouillabilité peut être modifiée au cours du temps à partir de la courbure de contact κ_c . La masse volumique du fluide est égale à $\rho = 1000$ et sa viscosité égale $\mu = 10^{-2} \text{ kgm}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Le milieu extérieur est de l'air. La courbure du demi-cercle initial est égale à $\kappa = 1600$; dès l'instant initial on impose une courbure de contact $\kappa_c = 750$ pour simuler une surface mouillante et, à partir d'un temps égal à $t = 0.2 \text{ s}$ on modifie cette valeur qui est portée à $\kappa_c = 2230$ pour représenter une surface non mouillante. Le tableau (1) donne les caractéristiques de la goutte pour chacune des étapes de la simulation.

Courbure	Rayon du ménisque	Angle de contact	Pression capillaire
1600 m^{-1}	$0.625 \cdot 10^{-3} \text{ m}$	90°	112 Pa
750 m^{-1}	$1.333 \cdot 10^{-3} \text{ m}$	48.2°	52.5 Pa
2230 m^{-1}	$0.415 \cdot 10^{-3} \text{ m}$	150°	155.04 Pa

TABLE 1. Evolution d'une goutte posée sur un plan ; caractéristiques du ménisque pour chacune des étapes de la simulation.

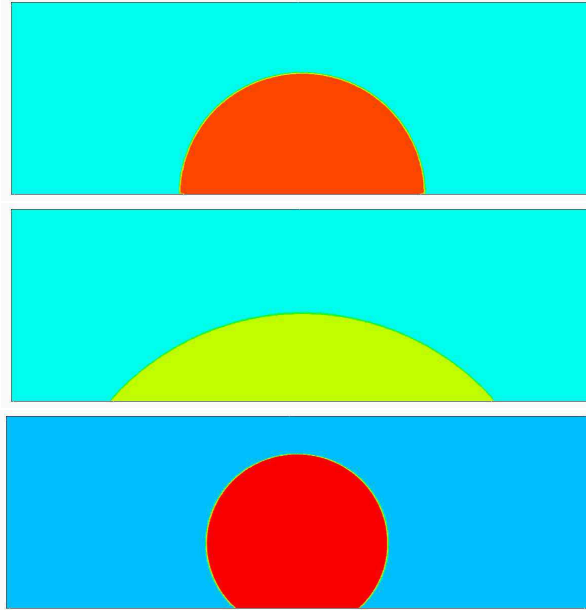


FIGURE 12. Simulation de l'évolution d'une goutte sur une surface plane en fonction de l'application de la courbure à la paroi. En haut une goutte en équilibre où la courbure $\kappa = 1600$ et l'angle de contact $\theta = 90^\circ$ sont donnés comme la condition initiale, au centre la courbure $\kappa_c = 750$ ($\theta = 48.2^\circ$) est imposée sur la ligne triple et à un temps de $t = 0.2 \text{ s}$ on impose $\kappa_c = 2230$ ($\theta = 150^\circ$).

La figure (12) montre la forme de la goutte à chaque état quasi-stationnaire où les vitesses sont négligeables. La pression à l'intérieur de la goutte y est alors quasiment constante. Dès que la κ_c est modifiée les forces exercées sur la ligne triple agissent pour ramener la goutte vers un état d'équilibre où la courbure de contact κ_c est satisfaite. Au cours du temps les vitesses

évoluent dans le domaine d'abord pour étaler la goutte jusqu'à un angle de contact de 48.2° où les champs de vitesse sont semblables à ceux de la figure (11) puis pour contracter l'interface jusqu'à un angle de contact de 150° .

La figure (13) exhibe l'évolution de la différence de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la goutte. En fait le terme $\nabla(\sigma\kappa\xi)$ est une accélération ; elle est importante à chaque modification

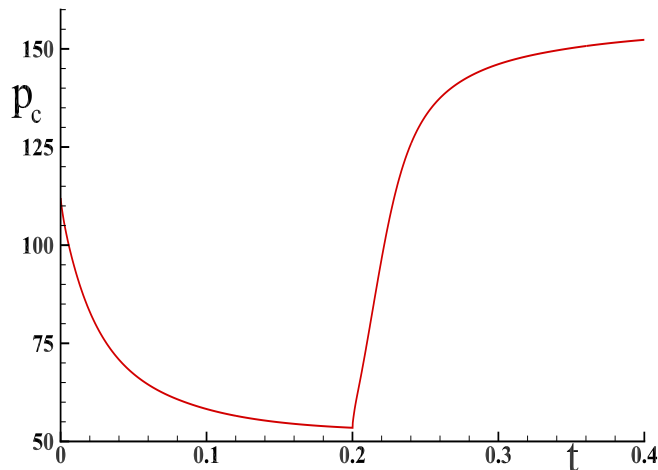


FIGURE 13. Evolution de la différence de pression (en Pa) moyenne p_c entre la goutte et l'extérieur sur une surface plane en fonction du temps pour des relative à des variations de la courbure à la paroi. Les asymptotes de la pression capillaire sont à $p_c = 52.5$ et $p_c = 155$.

de la courbure de contact pour devenir nulle dans un état proche de l'équilibre. Ce comportement est similaire à celui décrit dans [18].

5.4 Goutte soumise à la gravité

Lorsque la gravité est présente les équilibres statiques correspondant au repos sont plus délicats à décrire. Les solutions exactes sont beaucoup plus rares et la solution ne peut être obtenue que numériquement à partir de l'équation du mouvement (3).

Considérons ici le cas d'une goutte de forme semi-circulaire initialement en équilibre sur un plan ; l'angle de contact est alors de $\theta = 90^\circ$. A l'instant initial la gravité passe de 0 à $g = 100 \text{ m s}^{-2}$. Sous l'effet de la pesanteur la goutte s'écrase et sa forme est sensiblement modifiée. Sa courbure égale à $\kappa = 1600$ initialement devient variable le long de l'interface mais progressivement la courbure maximale tend vers la valeur imposée $\kappa_c = 1600$.

La figure (14) correspond à un état très proche de l'équilibre statique. On perçoit sur le champ de pression que les effets de la gravité sont sensibles. Contrairement à l'angle de contact θ la notion de courbure de contact κ_c est très robuste. Elle décrit simplement l'action des efforts exercés sur la ligne triple. Dans la description de milieu discret les accélérations remplacent avantageusement les forces ; de plus il n'est pas nécessaire d'introduire d'autres informations que celles déjà présentes dans l'équation du mouvement discrète. La courbure déjà présente pour décrire les effets capillaires sur toute interface sert aussi pour décrire les phénomènes liés à la ligne triple.

Par ailleurs le système (3) ne nécessite aucune conditions aux limites, qu'elle soit associée à une variable vectorielle comme la composante de vitesse \mathbf{V} ou bien scalaire. Toutes les contraintes sont traitées implicitement [9] au même titre que le mouillage partiel.

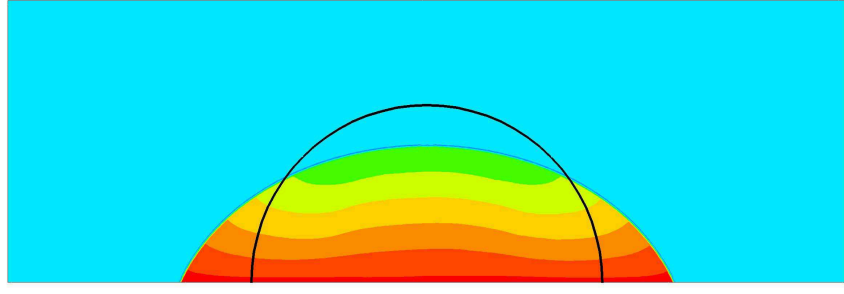


FIGURE 14. *Equilibre d'une goutte de rayon $R = 6.25 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ soumise à une gravité $g = -100 \text{ ms}^{-2}$ à partir d'une condition initiale nulle. Le champ de pression montre un écart de pression maximum de $\Delta p = 188.9 \text{ Pa}$ et la courbure $\sigma \in [835, 1574]$. La conservation de la masse est assurée à la précision machine.*

5.5 Ecoulement dans une lentille

Le cas de l'étalement d'une goutte de liquide entre deux autres fluides non miscibles est un peu différent de celui de la goutte posée sur un substrat solide; celui-ci possède en effet des propriétés de surface intrinsèques qui sont qualifiées de mouillantes ou de non mouillantes. Pour trois fluides non miscibles le positionnement de la ligne triple traduit un équilibre entre les fluides qui sont considérés comme totalement mouillants. Par ailleurs pour un substrat solide le déplacement normal à la paroi est négligeable ce qui n'est pas le cas pour trois fluides en présence.

Le problème est celui d'une goutte 2D initialement circulaire de rayon R où les points de la trace de la ligne triple sont localisés en $(R, 0)$ et (R, π) . La masse volumique du fluide de la goutte est de $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$ et sa viscosité est prise à $\mu = 10^{-2} \text{ Pa s}$ pour réduire le temps vers l'équilibre. La tension de surface entre le fluide de la goutte et celui du domaine supérieur (interface ①) sera nommée σ_{12} et σ_{13} pour le domaine inférieur (interface ②). La tension de surface correspondant aux fluides extérieurs à la goutte sera nommé σ_{23} . La lentille ne peut exister à l'équilibre que si la loi de Young-Dupré s'applique :

$$\sigma_{31} \mathbf{t}_{31} + \sigma_{12} \mathbf{t}_{12} = \sigma_{32} \mathbf{t}_{32} \quad (13)$$

où les vecteurs \mathbf{t} désignent les vecteurs unitaires sur la ligne triple. L'égalité traduit l'équilibre statique des trois fluides.

Le problème peut être traité en considérant un domaine occupé par les trois fluides ou bien en prenant en compte que le fluide de la goutte et ses deux interfaces et en introduisant l'effet du troisième fluide par l'intermédiaire d'une force exercée sur la ligne triple; l'interface ③ entre les fluides (2) et (3) ne sera pas explicitement représentée, seule son action sera modélisée. Ce dernier choix retenu.

L'impact du couple de fluides (32) sur la goutte est conditionné par la tension de surface σ_{32} ou par la courbure κ_c fixée sur la ligne triple. Dans le cas présenté les tensions de surface sont respectivement égales à $\sigma_{12} = 0.05$, $\sigma_{13} = 0.1$. Proche de l'équilibre statique les courbures sont égales à $\kappa_1 = 571$ et $\kappa_2 = 690$ alors que la courbure du cercle initial était égale à $\kappa = 1000$. Les vecteurs tangents correspondant sont égaux à $\mathbf{t}_{12} = (-0.364, 0.931)$, $\mathbf{t}_{31} = (-0.62, 0.78)$ et par voie de conséquence on a $\mathbf{t}_{32} = (0.984, -0.151)$. On constate que l'interface (32) n'est pas une horizontale ce qui est logique. Dans le cas où la gravité est prise en compte cette interface devient plane loin de la ligne triple mais la courbure n'est plus une constante le long de celle-ci. En présence de forces extérieures comme la gravité les interfaces ne sont plus des portions de

cercles ou des calottes sphériques, les angles de contact mesurés sans l'action de ces forces ne sont plus respectés.

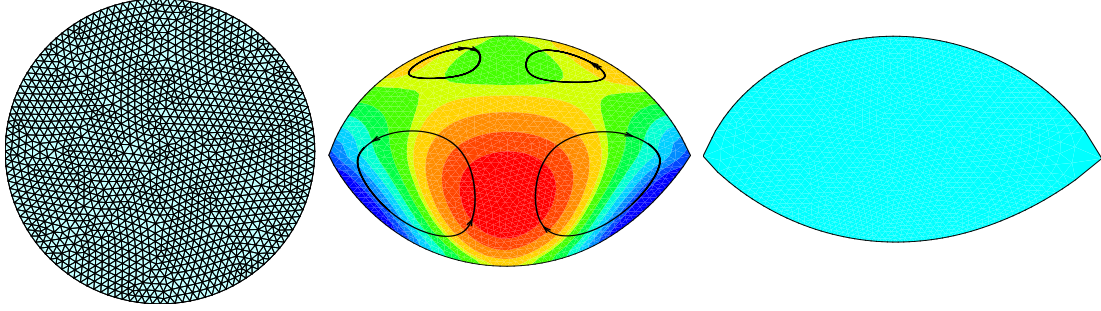


FIGURE 15. Evolution d'une lentille à partir de l'état initial où la goutte est circulaire (à gauche). L'action des deux autres fluides induit un mouvement qui tend à écarter les points de la ligne triple (au centre où la vitesse verticale est représentée); la figure de droite montre l'état final correspondant à l'équilibre statique.

La figure (15) montre l'évolution de la lentille au cours du temps ; elle a la forme d'un disque de rayon $R = 10^{-3} m$ initialement ; comme la tension de surface σ_{31} est plus grande que σ_{12} , la lentille ne reste pas symétrique par rapport à l'axe horizontal et le fluide monte globalement dans la lentille tout en créant des recirculations dues aux gradients de courbure. Les mouvements s'atténuent très lentement et le système converge vers l'état de repos.

5.6 Ascension capillaire dans un tube

L'ascension capillaire dans un tube ou entre deux plans est un cas particulièrement intéressant : l'équilibre statique et la hauteur atteinte par le fluide dans le tube dépendent non seulement des caractéristiques (tension de surface, rayon du tube, angle de contact) mais aussi de la gravité. La hauteur d'ascension h est donnée classiquement par la loi de Jurin :

$$h = \frac{\gamma}{\rho g r \cos \theta} \quad (14)$$

où r est le rayon du tube et θ est l'angle de contact correspondant à un mouillage partiel.

En fait cette loi est une approximation, elle ne peut être vérifiée exactement, la forme de l'interface ne peut être une calotte sphérique. En effet la courbure ne peut être constante que si l'équation suivante est satisfaite :

$$-\nabla p + \nabla (\gamma \kappa \xi) + \rho \mathbf{g} = 0 \quad (15)$$

Comme l'interface n'est pas orthogonale à la gravité un mouvement est induit et du rotationnel est généré par le non équilibre. Par ailleurs la tension de surface et la courbure étant constantes le second terme de (15) est un gradient pur et la pression ne peut être égale qu'à $p = \gamma \kappa$. La partie solénoïdale n'est donc pas compensée et l'équation n'est pas satisfaite.

La seule possibilité pour que l'interface soit une calotte sphérique est qu'il existe un potentiel vecteur d'équilibre $\boldsymbol{\omega}^o$ qui compense la partie solénoïdale de $\rho \mathbf{g}$. L'équation d'équilibre s'écrit alors $-\nabla p + \nabla (\gamma \kappa \xi) + \nabla \times \boldsymbol{\omega}^o + \rho \mathbf{g} = 0$. C'est l'hypothèse développée dans [10]. Ce cas représente un cas limite valable lorsque les effets de rotation persistants sont possibles, par exemple pour un fluide à rhéologie complexe où un cisaillement peut être conservé.

Dans le cas classique d'un fluide newtonien c'est donc que la surface libre du ménisque n'est pas une calotte sphérique et que la loi de Jurin n'est qu'une approximation valable uniquement si le rayon du tube tend vers zéro. La forme de l'interface n'est pas une figure géométrique simple, seule la résolution de l'équation d'évolution permet de l'obtenir :

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\nabla \left(\frac{p}{\rho} + dt c_L^2 \nabla \cdot \mathbf{V} \right) + \nabla (\sigma \kappa \xi) + \mathbf{g} \quad (16)$$

où, ici, le terme visqueux est négligé.

Le terme en $\nabla \cdot \mathbf{V}$ permet de vérifier la contrainte d'incompressibilité à tout instant. A convergence l'accélération devient nulle et l'équation (15) est alors satisfaite. La validation précise de ce problème à partir de la loi de Jurin s'avère plus complexe que les études sur le sujet ne peuvent le faire croire. Le problème instationnaire décrit dans un modèle par Washburn [23] l'est encore plus.

5.7 Ecoulement de type Marangoni dans une goutte

Même si la courbure initiale d'une goutte est constante des variations du potentiel capillaire $\phi_c = \sigma \kappa \xi$ le long de l'interface peut engendrer des mouvements sur celle-ci. C'est le cas si la tension interfaciale varie à cause de variations de la température, c'est l'effet Marangoni. On peut montrer en thermodynamique que la tension superficielle ne dépend que de la température pour un fluide pur $\sigma(T)$. Par exemple pour l'eau la tension interfaciale s'écrit $\sigma(T) = 0.147 (1 - T/T_c)^{11/9}$ où T_c est la température au point critique de l'eau.

Les mouvements dans une goutte ne s'effectuent pas uniquement en surface, la divergence surfacique n'est en effet pas nulle et des sources et des puits sont aisément repérés ; ceux-ci correspondent à des mouvements orthogonaux à la surface de la goutte qui n'a alors aucune raison de rester sphérique. La déformation de la surface sont de très faibles amplitudes mais génèrent à leur tour des gradients de courbure et donc un mouvement du fluide. Le cas réalisé

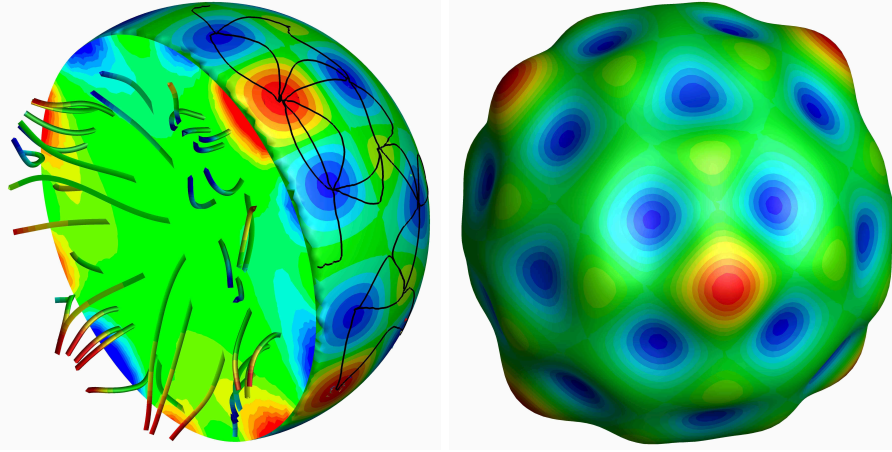


FIGURE 16. Courants de Marangoni sur une goutte d'eau de rayon $R = 1\text{ mm}$; à gauche on montre les trajectoires sur et dans la pseudo-sphère ; sur la figure de droite est représentée la surface libre où l'amplitude des variations du rayon est multipliée par 1000.

comme un simple exemple est celui d'une goutte d'eau de rayon $R = 1\text{ mm}$ soumis à des variations périodiques de la température à sa surface d'une amplitude de $\Delta T = 10^\circ\text{K}$. La figure (16) montre quelques trajectoires du fluide à l'intérieur du liquide et à sa surface ainsi que la déformée de la surface libre dans les tous premiers instants. Les variations du rayon de la pseudo-sphère en phase avec les variations de la température sont de l'ordre d'une fraction de micron. La tessellation en ondes périodiques de l'interface est aussi donnée sur cette figure.

La sphère initiale est composée de 450000 tétraèdres pour représenter le volume ; le maillage surfacique servant à calculer les propriétés de la surface (normales, courbures, ...) comporte 9100 triangles conformes au maillage volumique. Le terme source capillaire $\nabla(\sigma \kappa \xi)$ est intégré à l'équation du mouvement sur les segments formant la surface. Ici l'indicatrice de phase ξ est égale à 1 partout puisque le milieu extérieur n'est pas maillé ; c'est en effet inutile dans ce cas où l'air est supposé à pression uniforme. La solution du problème à chaque pas de temps représentée par le couple vitesse-pression (\mathbf{V}, p) permet de calculer la vitesse normale à l'interface et de déplacer celle-ci au cours du temps. Toutes les métriques sont recalculées à chaque itération en temps ce qui ne s'accompagne toutefois pas d'une augmentation sensible du temps de calcul. La divergence volumique est maintenue égale à zéro au cours de la simulation ce qui assure la conservation locale du volume.

6 Conclusions

La phénoménologie des écoulements dominés par la capillarité est souvent complexe. Les effets capillaires sont en compétition avec les autres forces, inertielles, visqueuses, gravitaire, etc. Dans le cas général il est impossible de prévoir le comportement de ces systèmes physiques. Seule une équation du mouvement représentative permet de restituer la physique réelle.

La notion d'angle de contact ne permet pas une intégration directe du mouillage dans l'équation du mouvement. Ce paramètre n'intervient que dans des modèles par l'intermédiaire de conditions aux limites. Il est issu d'observations à l'état d'équilibre statique mais son utilisation a été étendue aux cas de mouvements, par exemple par les notions d'angles d'avancée et de reculée ou encore d'angle de contact dynamique. Son extension aux cas instationnaires inertiels est contestable car il ne peut être fixé *a priori*, seul l'équilibre des forces, notamment sur la ligne triple, permet de reproduire la progression de l'interface.

Une des caractéristiques de la mécanique des milieu discrets est l'intégration de toutes les contraintes (compressibilité réelle du milieu, conditions aux limites, ...) dans l'équation du mouvement. Seules les propriétés physiques qui apparaissent au sein de cette équation vectorielle doivent pouvoir représenter tous les comportements possibles. La courbure permet de représenter à la fois les équilibres sur une interface entre deux fluides mais aussi celui de la ligne triple ou multiple pour un système multimatériaux.

D'autres perspectives sont offertes par cette formulation notamment la possibilité de représenter les phénomènes d'hystérésis en définissant les courbures de contact d'avancée et de reculée qui correspondent vraiment à la physique du mouillage partiel.

Les principales caractéristiques de la formulation proposée sont les suivantes :

- • la notion de courbure de contact correspond à une représentativité physique réelle du mouillage partiel ; en effet le mouillage d'un substrat idéal est une propriété intrinsèque qui peut être considérée comme une résistance à l'avancement du fluide ;
- • le terme capillaire $\nabla(\sigma \kappa \xi)$ est une accélération comme les autres termes de l'équation du mouvement discrète, la viscosité, l'inertie, la gravité, les forces de rotation, etc. L'équilibre dynamique est basé sur la somme vectorielle des accélérations sur la ligne triple ;
- • la forme, celle du gradient d'un potentiel scalaire, est cohérente avec l'écriture de l'accélération γ comme une décomposition de Hodge-Helmholtz, la somme du gradient d'un potentiel scalaire et du rotationnel d'un potentiel vecteur.

L'écriture du terme capillaire sous la forme du gradient d'une fonction scalaire est conforme avec la dérivation de l'équation du mouvement en milieu discret. Cela confère une cohérence, une robustesse, une précision, importantes pour la résolution de l'équation discrète.

Références

- [1] S. Amiroudine, J-P. Caltagirone, and A. Erriguible. A lagrangian-eulerian compressible model for the trans-critical path of near-critical fluids. *International Journal of Multiphase Flow*, 59 :15–23, 2014.
- [2] P. Angot, J.-P. Caltagirone, and P. Fabrie. A spectacular vector penalty-projection method for darcy and navier-stokes problems. volume 4, pages 39–47, 2011.
- [3] P. 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.
- [4] 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.
- [5] Ph. Angot, J-P. Caltagirone, and P. Fabrie. Fast discrete helmholtz-hodge decompositions in bounded domains. *Applied Mathematics Letters*, 26(4) :445–451, 2013.
- [6] S. Bordère and J-P. Caltagirone. A unifying model for fluid flow and elastic solid deformation : A novel approach for fluid structure interaction. *Journal of Fluid and Structures*, 51 :344–353, 2014.
- [7] 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.
- [8] J. Brackbill, D. Koth, and C. Zemack. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100 :335–54, 1992.
- [9] J-P. Caltagirone. *Discrete Mechanics*. ISTE, John Wiley & Sons, London, 2015.
- [10] J-P. Caltagirone. Equilibres statique et dynamique de l’ascension capillaire. *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01200464>, 2015.
- [11] J-P. Caltagirone. Quelles différences entre un fluide et un solide ? *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01187052>, 2015.
- [12] J-P. Caltagirone. Modélisation des effets capillaires en mécanique des milieux discrets. *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01251670>, 2016.
- [13] J-P. Caltagirone. Modélisation du changement de phase en mécanique des milieux discrets. 2016. *Hal*, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01320994>, 2016.
- [14] M. Desbrun, A.N. Hirani, M. Leok, and J.E. Marsden. Discrete exterior calculus. *arXiv*, math/0508341v2 :1–53, 2005.
- [15] J. Donea, A. Huerta, J-Ph. Ponthot, and A. Rodriguez-Ferran. *Arbitrary Lagrangian Eulerian Methods, Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley & Sons, Ltd. ISBN : 0-470-84699-2, 2004.
- [16] Y. Guo, Y. Lian, and M. Sussman. Investigation of drop impact on dry and wet surfaces with consideration of surrounding air. *Physics of Fluids*, 28, 2016.
- [17] L.D. Landau and E.M. Lifchitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, London, 1959.
- [18] D. Legendre and M. Maglio. Comparison between numerical models for the simulation of moving contact lines. *Computers & Fluids*, 113 :2–13, 2015.
- [19] I. Newton. *Principes Mathématiques de la Philosophie Naturelle traduit en français moderne d’après l’oeuvre de la marquise Du Châtelet sur les Principia*. fac-similé de l’édition de 1759 publié aux Editions Jacques Gabay en 1990, Paris, 1990.

- [20] A. Ponomarenko, D. Quéré, and C. Clanet. A universal law for capillary rise in corners, doi :10.1017/s0022112010005276. *J. Fluid Mech.*, 666 :146–154, 2011.
- [21] A. Prosperetti and G. Tryggvason. *Computational Methods for Multiphase Flows*. Cambridge University Press, Cambridge UK, 2007.
- [22] P. Touboul, G. Métris, V. Lebat, and A. Robert. The microscope experiment, ready for the in-orbit test of the equivalence principle. *Class. Quantum Grav.*, 29(184010) :14 pp, 2012.
- [23] H. Washburn. The dynamics of capillary flow. *Phys. Rev.*, 17 :273–283, 1921.