



HAL
open science

Modélisation de l'accélération capillaire en mécanique discrète

Jean-Paul Caltagirone

► **To cite this version:**

Jean-Paul Caltagirone. Modélisation de l'accélération capillaire en mécanique discrète. 2019. hal-02010152

HAL Id: hal-02010152

<https://hal.science/hal-02010152>

Preprint submitted on 6 Feb 2019

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 de l'accélération capillaire en mécanique discrète

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 écoulements régis principalement par la capillarité pose deux problèmes distincts, celui de la caractérisation des propriétés géométriques des interfaces et un autre sur les accélérations induites par ces effets capillaires. L'approche continue des interfaces conduit quelquefois à une modélisation physique des effets capillaires non pertinente. Pour obtenir une modélisation physique cohérente des termes capillaires de l'équation du mouvement dans le cadre d'une description discrète des interfaces il est nécessaire que les effets soient aussi issus d'une vision discrète. La mécanique discrète abandonne la notion de milieu continu et formule l'équation fondamentale de la dynamique en termes d'accélération. Les opérateurs de la géométrie différentielle discrète sont ainsi parfaitement adaptés à cette équation du mouvement qui s'exprime sous la forme d'une décomposition de Hodge-Helmholtz en une composante solénoïdale et une autre irrotationnelle tout comme l'accélération capillaire. Notamment le calcul de l'angle diédral permet de signer la courbure et d'introduire des comportements directionnels de surface. Après l'introduction de quelques éléments de mécanique discrète la modélisation physique des effets capillaires est présentée dans le détail. A partir de ce modèle les simulations menées à l'aide de l'équation du mouvement discrète peuvent être réalisées sur une surface maillée, dans des volumes formés de cellules polyédriques ou bien en interaction entre surfaces et volumes, conformes ou non. Quelques exemples permettent de montrer l'intérêt de cette approche.

Mots clés : Mécanique discrète, géométrie différentielle discrète, décomposition de Hodge-Helmholtz, effets capillaires, effet Marangoni, mouillage partiel

1 Introduction

La mécanique discrète définit toutes les actions appliquées sur un milieu ou une particule comme la somme de deux termes, les composantes irrotationnelle et solénoïdale des termes correspondants à celle-ci au sein de l'équation du mouvement. La version discrète de cette décomposition de Hodge-Helmholtz (DHHD) permet de modéliser tous les termes sources mais aussi les actions fondamentales comme l'inertie et les contraintes de pression et de cisaillement. Les effets capillaires peuvent aussi être décomposés *a posteriori* par une DHHD mais il est légitime et nettement préférable de modéliser *a priori* ces effets à l'aide d'une quantité nommée potentiel capillaire.

Le problème a trait à la simulation des écoulements diphasiques à surface libre mais avant d'aborder cette étape il est nécessaire de répondre à deux enjeux, la caractérisation des propriétés géométriques et la modélisation des effets capillaires au sein de l'équation du mouvement. Depuis de nombreuses décennies la caractérisation des propriétés géométriques des interfaces, notamment la courbure, et la modélisation des effets ont fait l'objet d'innombrables travaux dont un des plus connus est le modèle global "Continuum Surface Force" (CSF) [4]. De nombreuses publications recensent les différentes stratégies pour représenter les écoulements diphasiques de toutes natures, voir par exemple [13] pour un exposé complet.

La géométrie différentielle est le cadre théorique général adéquat pour définir les propriétés d'objets définis comme des variétés différentielles, notamment la courbure. La mécanique discrète abandonne les notions de dérivation en un point, d'analyse, d'intégration qui ont marqué les évolutions de la mécanique classique ou relativiste au cours de ces deux derniers siècles. Le point

de vue discret adopté d'emblée permet de bâtir une stratégie de représentation des phénomènes physiques à partir d'objets de dimensions finies caractérisés par exemple, par la longueur d du segment Γ de la figure (1) ; la réduction homothétique de cet objet à une distance nulle permettrait de reformuler les équations de la physique. Le discret n'est pas une restriction du continu. La géométrie différentielle discrète (Discrete Differential Geometry ou DDG) est le formalisme idéal pour définir les propriétés géométriques de surface. Les excellents travaux de la DDG [12, 3, 10, 8] proposent des algorithmes très efficaces pour le calcul de la courbure, des normales ainsi que des opérateurs de lissage des surfaces maillées.

Toutefois le problème n'est pas de donner une méthode pour que la courbure soit la meilleure possible pour un maillage déterminé mais de définir des actions (accélérations) qui soient les plus consistantes possible avec la formulation proposée. De ce point de vue cette étude se présente comme une extension à la physique discrète des concepts issus de la mécanique discrète.

2 Formulation discrète

2.1 Bases du milieu discret

La vision proposée ici repose sur l'existence d'une loi unique pour certains domaines de la physique, la mécanique en particulier. Cette loi est construite sur les deux principes dérivés des observations de Galilée, le principe de relativité et celui d'équivalence des masses inertielle et gravitationnelle. Ces deux principes suggèrent l'existence d'une variable absolue invariante indépendante de tout repère spatial. Cette quantité est l'accélération $\boldsymbol{\gamma}$ que prendrait un milieu ou une particule sous l'influence de l'accélération qui lui est imposée. Compte tenu du principe d'équivalence, la loi générique est écrite :

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{g} \quad (1)$$

Cette loi est conforme à la seconde loi de Newton, $m \boldsymbol{\gamma} = \mathbf{F}$, mais ici le vecteur \mathbf{g} est l'ensemble des forces par unité de masse appliquées au milieu ou à la particule. La loi (1) exprime la conservation de l'accélération considérée comme une quantité absolue. La vitesse est quant à elle une quantité relative dont seules les variations temporelles et spatiales apparaissent dans l'équation du mouvement. C'est une différence fondamentale avec les précédentes théories de la mécanique classique ou relativiste qui sont basées sur la notion de vitesse. Cette loi (1) est la pierre angulaire de la mécanique discrète développée ces dernières années [5].

La masse considérée dans la loi fondamentale de la dynamique en mécanique classique ou newtonienne est la masse au repos $m = m_0$ constante. Dans le cas général la masse, ou la masse volumique, dépend de la vitesse. En relativité restreinte et générale l'équation s'écrit $d(m_r \mathbf{V})/dt = \mathbf{F}$ où la masse m_r est relativiste $m = m_r = \gamma m_0 = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c_0^2}$. En mécanique des milieux continus la conservation de la masse conduit à une équation du mouvement locale de la forme $\rho d\mathbf{V}/dt = \rho \mathbf{g}$. La mécanique discrète où $\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{g}$ correspond à une troisième vision qui n'est pas en contradiction avec les deux premières, c'est une approche alternative.

Tout vecteur peut être décomposé en une partie irrotationnelle et une autre à divergence nulle :

$$\boldsymbol{\gamma} = -\nabla\phi + \nabla \times \boldsymbol{\psi} \quad (2)$$

Nous adopterons comme principe que tout vecteur peut être écrit sous cette forme. Cette décomposition est parfois présentée avec un troisième terme harmonique, à la fois solénoïdal et irrotationnel ; En fait, ce terme est étroitement associé aux mouvements globaux uniformes qui doivent disparaître de la formulation en vertu du principe de relativité. La vitesse est une variable

dont la valeur absolue n'est pas requise. En mécanique discrète, elle est considérée comme un simple lagrangien mis à jour par l'accélération $\mathbf{V} = \mathbf{V}^o + dt \boldsymbol{\gamma}$ où \mathbf{V}^o est la vitesse à l'instant t^o et dt le temps entre deux observations du phénomène.

L'accélération s'écrit donc comme la somme des deux termes $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\gamma}_\phi + \boldsymbol{\gamma}_\psi$, qui représentent les accélérations directe et induites et qui peuvent être modélisées en fonction de la vitesse et des propriétés de transport. La vitesse \mathbf{V} comporte également deux composantes mis à niveau par les composantes de l'accélération $\mathbf{V}_\phi = \boldsymbol{\gamma}_\phi dt$ et $\mathbf{V}_\psi = \boldsymbol{\gamma}_\psi dt$ qui représentent les flux circulant sur le segment Γ et, comme ces deux champs sont issus d'opérateurs orthogonaux, ils n'ont aucune interaction directe. En fait, il n'est pas possible, en général, d'extraire les composantes de la vitesse \mathbf{V} en appliquant directement une décomposition locale discrète de Hodge-Helmholtz, le résultat dépend étroitement des conditions aux limites [2]. Heureusement, le champ \mathbf{V} est relatif et n'est qu'une variable secondaire ; c'est la décomposition de l'accélération $\boldsymbol{\gamma}$, la quantité absolue, qui est recherchée sous forme de potentiels et celle-ci est possible à travers la loi fondamentale (1).

2.2 Topologies géométriques primale et duale

La notion de milieu continu est également abandonnée, de même que celle de référentiel global ; il existe une topologie géométrique discrète locale représentée sur la figure (3) composée d'une topologie primale et d'une autre duale. Le segment orienté Γ de vecteur unitaire \mathbf{t} et d'extrémités a et b définit l'élément de base de la topologie primale qui forme avec deux autres segments la surface plane \mathcal{S} dont la normale unitaire orientée est \mathbf{n} telle que $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$ (figure 1 (a)).

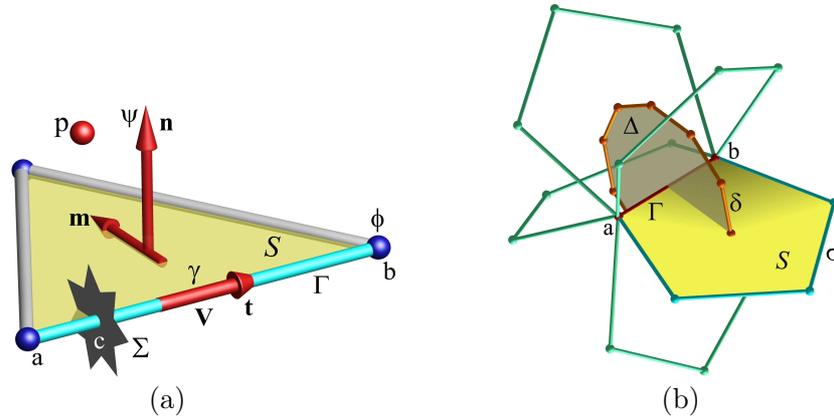


FIGURE 1. (a) Structure géométrique élémentaire de la mécanique discrète dans le repère direct $(\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{t})$: trois arêtes rectilignes Γ délimitées par des points définissent une face plane \mathcal{S} . Le vecteur unitaire \mathbf{n} sur la face et le vecteur porté par Γ sont orthogonaux, $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. Le bord Γ peut être intercepté par une discontinuité Σ située en c , entre les extrémités a et b de Γ . ϕ et $\boldsymbol{\Psi}$ sont respectivement les potentiels scalaire et vectoriel. (b) La machine virtuelle du mouvement en mécanique discrète : l'accélération du milieu le long du bord Γ est due à la différence du potentiel scalaire ϕ entre les extrémités du bord $[a, b]$ du vecteur unité \mathbf{t} , à l'action de circulation du vecteur \mathbf{V} sur le contour des différentes facettes primales \mathcal{S} induisant une accélération sur Γ . La particule p possède une vitesse et une accélération dont les projections sur les arêtes Γ sont soit respectivement $\boldsymbol{\gamma}$ et \mathbf{V} .

Le potentiel scalaire ϕ est défini uniquement aux extrémités de la topologie primale. Une éventuelle discontinuité de contact ou onde de choc Σ coupe le segment Γ en c . La normale au plan \mathcal{S} est associée à un pseudo-vecteur $\boldsymbol{\psi}$ tel que son rotationnel se projette sur le segment

Γ . La figure (1(b)) représente l'élément polyédral discret composé de surfaces primales \mathcal{S} sous forme de polygones plans; le contour δ et la surface Δ forment la topologie duale. Le milieu matériel, un flot de particules ou une particule isolée représentés par une sphère p sur la figure (1(a)) est doté d'une vitesse et d'un spin mais seules les composantes de la vitesse et celles du moment cinétique sont représentées sur chaque segment Γ . Alors qu'en mécanique classique lagrangienne il n'est pas possible d'attribuer une rotation de la particule p sur elle-même, la projection de son mouvement, translation et rotation sur Γ permettrait de tenir compte par exemple des interactions électrodynamiques.

La présentation des opérateurs différentiels peut être très différente selon le degré de formalisation de la géométrie différentielle [11]. La présentation succincte et non exhaustive donnée ici repose sur une approche physique simple permettant de définir les opérateurs associés au basculement d'une topologie à une autre, à partir d'informations scalaires ou vectorielles. Il convient de rappeler que, bien que la notion classique de milieu continu ait été écartée, le matériau est une structure géométrique où les directions des segments et de la normale aux surfaces sont également préservées à toutes les échelles d'observation.

L'opérateur gradient appliqué à un scalaire ϕ , $\nabla\phi$, représente la différence de ce scalaire sur une distance d entre a et b dans une direction donnée. Contrairement au concept de milieu continu, le vecteur gradient défini ici ne comporte qu'un seul composante, attribué en tant que scalaire à l'arête Γ . Le gradient d'un vecteur dans l'espace n'a pas de sens, c'est une opération illégale en mécanique discrète. Le gradient est calculé uniquement sur un bipoint $[ab]$ lié par une arête. Le rotationnel primal d'un vecteur \mathbf{W} , $\nabla \times \mathbf{W}$, est associée à la circulation de ses composants \mathbf{V} sur tous les bords Γ constituant la topologie primale. Il est représenté par un vecteur \mathbf{n} orthogonal à la surface primale. Cette surface est considérée comme plane. Cette restriction apparente disparaît à mesure que la surface ds tend vers zéro; cependant, cela restera une condition préalable à l'application des théorèmes de la géométrie différentielle dans le contexte particulier discuté ici. La divergence représente le flux d'un vecteur \mathbf{W} , $\nabla \cdot \mathbf{W}$, sur toutes les facettes de la surface duale. Le scalaire obtenu est attribué au seul point à l'intérieur du volume dual. Le flux est calculé à partir des composantes \mathbf{V} sur les arêtes Γ du vecteur lui-même. Si le vecteur \mathbf{W} est un rotationnel, calculé comme la circulation d'un autre vecteur sur chaque frontière primale, la divergence sera alors strictement nulle. Le rotationnel du vecteur \mathbf{W} , $\nabla \times \mathbf{W}$ représente physiquement le flux du vecteur \mathbf{W} dans la partie de la surface duale associée au bord Γ . Ce flux est calculé en utilisant la circulation du vecteur, ou plutôt de ses composantes, sur la limite délimitant la partie duale qui, en général, n'est pas plane. Le résultat de cette opération est affecté à l'arête Γ sous forme de vecteur ou d'un scalaire sur un segment orienté.

La circulation du vecteur \mathbf{V} le long du contour de la surface primale permet de calculer le rotationnel primal porté par le vecteur unitaire \mathbf{n} ; la circulation le long du contour δ de la surface Δ est le rotationnel dual qui projette le résultat sur le segment Γ . Il est à noter que le nombre de plans de normales \mathbf{n} associé au segment Γ est arbitraire, cinq dans la figure (1 (b)). Dans le contexte d'un milieu continu, la nécessité d'utiliser un référentiel nous amène à considérer les trois composantes des vecteurs, les neuf composantes d'un tenseur de second ordre, etc. Les mêmes raisons nécessitent l'introduction des quatre composantes de l'espace-temps, le tenseur de Riemann de quatrième ordre dans la théorie de la relativité. La description discrète permet de satisfaire d'emblée la notion d'indifférence matérielle et de pouvoir représenter la notion de polarisation sans utiliser de tenseur.

Les topologies primale et duale ainsi définies permettent de satisfaire à deux propriétés essentielles : $\nabla_h \times \nabla_h \phi = 0$ et $\nabla_h \cdot (\nabla_h \times \psi) = 0$ quelles que soient les topologies basées sur des surfaces planes, des polygones ou des polyèdres et quelles que soient les fonctions régulières ϕ et ψ . Ces conditions sont absolument nécessaires pour une décomposition complète de Hodge-Helmholtz appliquée ici à l'accélération. Chaque vecteur peut être décomposé en une partie solénoïdale et une autre irrotationnelle, mais les potentiels scalaire et vectoriel n'ont pas la même importance

en fonction de la nature du vecteur. En électromagnétisme, ϕ et \mathbf{A} ne proviennent pas du même vecteur et ne s'expriment pas avec les mêmes unités. En mécanique, le potentiel scalaire et le potentiel vecteur de la vitesse n'ont pas une importance physique particulière mais peuvent être utilisés pour projeter la vitesse sur un champ à divergence nulle. Seules l'accélération γ et ses potentiels ϕ et ψ ont des propriétés physiques incontestables.

Il est à noter que ϕ^o et ψ^o sont les contraintes à l'instant t , où toutes les forces appliquées avant cet instant sont «mémorisées». Le formalisme présenté ici nous permet de prendre en compte toute l'histoire du milieu, c'est-à-dire son évolution dans le temps à partir d'un état neutre initial. Pour un état de contrainte instantané donné, il peut exister plusieurs chemins par lesquels cet état peut être atteint, et (ϕ^o, ψ^o) contiendra la totalité de l'histoire du milieu. Il n'est pas utile de connaître les contraintes locales et instantanées, dans la mesure où ces deux potentiels auront accumulé des contraintes au fil du temps; ces quantités sont aussi appelées «accumulateurs» ou «potentiels de stockage». Ces potentiels peuvent donc être utilisés pour prendre en compte le comportement de milieux dans le concept de mémoire continue.

Les notions de vitesse et de célérité spécifiques à ce contexte discret doivent être précisées. Le vecteur vitesse \mathbf{V} ou ses composantes sur chaque segment orienté Γ de la topologie géométrique primale représente l'amplitude de la vitesse du milieu matériel ou de la particule; sa dérivée matérielle $d\mathbf{V}/dt$ est l'accélération γ . La célérité c correspond à la vitesse du front d'onde, c'est un scalaire constant égal à c , par exemple à c_0 la vitesse de la lumière dans le vide; dans le cas général cette propriété est fonction d'autres variables. La vitesse \mathbf{V} est constante sur le segment Γ alors que la célérité est définie sur les points a ou b .

2.3 Equation du mouvement discrète

L'équation de mouvement est établie pour tous les milieux, fluides, solides ou vide. Les propriétés peuvent être quelconques en particulier les fluides peuvent être compressibles ou incompressibles, les rhéologies newtoniennes ou complexes, non linéaires, viscoélastiques, viscoplastiques, à seuils, etc. Les comportements des solides peuvent correspondre à différentes lois de comportement, du solide élastique aux lois de comportements complexes; le traitement temporel instationnaire du modèle permet de traiter les cas de grandes déformations et de grands déplacements tout en conservant la masse. Les milieux électromagnétiques peuvent avoir des propriétés correspondant à celles d'un fluide, d'un solide ou du vide; des états persistants tels que l'accumulation de charges électriques, l'aimantation permanente ou les effets d'hystérésis sont implicitement incorporés dans la formulation.

La dérivation de l'équation de mouvement précédemment réalisée [6] mène au système d'équations génériques de la mécanique discrète :

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma = -\nabla(\phi^o - dt c_t^2 \nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla \times (\psi^o - dt c_t^2 \nabla \times \mathbf{V}) + \mathbf{g} \\ \alpha_l \phi^o - dt c_l^2 \nabla \cdot \mathbf{V} \mapsto \phi^o \\ \alpha_t \psi^o - dt c_t^2 \nabla \times \mathbf{V} \mapsto \psi^o \\ \mathbf{V}^o + \gamma dt \mapsto \mathbf{V}^o \end{array} \right. \quad (3)$$

La quantité ϕ^o est le potentiel scalaire à l'équilibre et ψ^o est le potentiel vectoriel à l'équilibre. Le terme source \mathbf{g} , une accélération, représente tous les autres effets pouvant être appliqués. Les facteurs α_l et α_t sont des quantités physiques permettant d'exprimer la persistance d'effets à long terme. Par exemple, le temps de relaxation des contraintes de cisaillement dans un milieu fluide est d'un ordre de grandeur de τ_f environ $10^{-12} s$ et le facteur α_t peut légitimement être mis à zéro

pour les applications courantes. Dans la terminologie de la mécanique des milieux continus la quantité $\nabla\phi$ est un vecteur polaire au même titre que $\nabla \times \boldsymbol{\psi}$ alors que $\boldsymbol{\psi}$ est un vecteur axial ou un pseudo-vecteur. En l'absence de tout mouvement de la particule ou du milieu et en présence d'un terme source \mathbf{g} , l'équation devient $-\nabla\phi^o + \nabla\boldsymbol{\psi}^o + \mathbf{g} = 0$. Ces potentiels expriment la persistance d'un phénomène physique tel que le potentiel électrique et l'aimantation permanente en électromagnétisme ou la pression et la contrainte de cisaillement dans un milieu solide en mécanique.

Les célérités longitudinales c_l et transversales c_t sont des propriétés intrinsèques du milieu, de la matière ou du vide ; ces quantités dépendent de multiples variables, mais elles seront simplement connues dans l'espace et dans le temps. La définition de ces célérités dépend également du phénomène physique étudié, de l'électromagnétisme, de la mécanique des fluides, etc. La vitesse \mathbf{V} est une quantité totalement indépendante de la célérité, les deux notions étant strictement disjointes. La vitesse est une variable secondaire, un lagrangien, qui est mise à jour à partir de l'accélération et du temps dt entre deux observations du système physique, $\mathbf{V} = \mathbf{V}^o + dt \boldsymbol{\gamma}$.

Le système (3) est composé d'une équation vectorielle dont la variable est \mathbf{V} et de trois mises à jour des potentiels et de la vitesse. L'accélération $\boldsymbol{\gamma}$ peut être remplacée par la dérivée matérielle $\boldsymbol{\gamma} = d\mathbf{V}/dt$ pour donner une loi implicite. La dérivée matérielle elle-même peut être remplacée en exprimant les termes d'inertie $\boldsymbol{\gamma}_i = \partial\mathbf{V}/\partial t - \nabla \times (|\mathbf{V}|^2/2 \mathbf{n}) + \nabla(|\mathbf{V}|^2/2)$. La forme des termes inertiels discutés dans [6] est applicable quel que soit le milieu considéré, fluide ou solide.

L'équation du système (3) est écrite avec des quantités exprimées uniquement avec la longueur et le temps des unités fondamentales, alors que les équations dédiées Navier-Stokes, Navier-Lamé, Maxwell impliquent l'ensemble des unités fondamentales, longueur L , temps T , masse M , intensité I et parfois température Θ .

3 Modélisation des effets capillaires

La modélisation physique discrète présentée ne dépend pas d'une méthodologie numérique particulière. Différentes techniques eulériennes ou lagrangiennes peuvent être effectivement utilisées pour calculer les propriétés de l'interface notamment la courbure et pour évaluer les forces capillaires au sein de l'équation du mouvement. Ces techniques peuvent être mixées pour plus de stabilité ou de précision. Le but recherché en mécanique discrète étant la cohérence entre propriétés géométriques, accélération capillaire et interactions avec les autres effets physiques, il devient nécessaire que les effets capillaires soient représentés par les deux termes d'une décomposition de Hodge-Helmholtz.

3.1 Calcul de la courbure en géométrie différentielle

La géométrie différentielle discrète est le cadre adéquat pour définir des propriétés des interfaces comme la courbure ou mener des opérations comme le lissage de surfaces, le calcul des géodésiques ou même résoudre des équations de Poisson. Les concepts sont parfaitement adaptés à un traitement numérique algébrique ultérieur. Plusieurs techniques sont utilisées pour calculer la courbure moyenne, la courbure de Gauss et les courbures principales [12], [9]. Même si ces méthodes donnent d'excellents résultats sur des maillages surfaciques à base de triangles réguliers celles-ci sont basées sur une vision globale de la courbure en un point ; les directions principales de la courbure ne correspondent pas en général à la direction des segments Γ du maillage surfacique. De plus les nœuds de la topologie primale peuvent être placés exactement sur une sphère y compris pour un maillage très irrégulier et donner des résultats variables suivant la méthode utilisée. Le problème posé n'est pas tant d'obtenir de bonnes valeurs de la courbure pour des objets simples que d'imposer la conformité de celle-ci à la mécanique discrète notamment de définir

des courbures longitudinale et transversale suivant une décomposition de Hodge-Helmholtz.

En géométrie plane classique la courbure locale est calculée en lagrangien directement à partir de la normale définie par trois marqueurs. Cette procédure conduit à une valeur exacte dans le cas d'un cercle 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. 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 capillaire.

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 (2). Un algorithme robuste permet de fournir une valeur très précise de la courbure sur une surface tessellée par des 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.

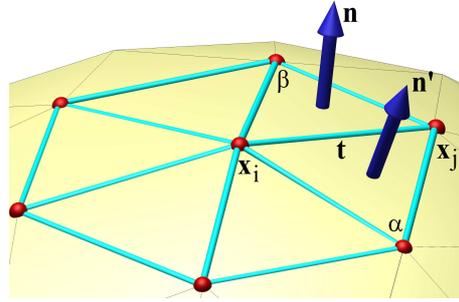


FIGURE 2. Représentation du stencil utilisé pour calculer la courbure sur une surface 3D représentée par un maillage à base de triangles [12].

Meyer et al. [12] définissent la courbure normale $\kappa^N(\theta)$ en fonction des courbures principales κ_1 et κ_2 , $\kappa^N(\theta) = \kappa_1 \cos^2(\theta) + \kappa_2 \sin^2(\theta)$; la courbure moyenne κ_H étant l'intégrale sur 2π de la courbure normale satisfait bien la définition $\kappa_H = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$. Le calcul de la courbure moyenne est réalisé pratiquement sur un stencil tel que celui représenté sur la figure 2 formé sur la base de triangles dans l'espace. Des éléments de géométrie différentielle conduisent ces auteurs à donner une expression de l'opérateur $\mathbf{K}(\mathbf{x}_i)$ exprimant la courbure moyenne normale au point \mathbf{x}_i :

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}_i) = \frac{1}{2\mathcal{A}} \sum_{j \in N_1(i)} (\cotg \alpha_{ij} + \cotg \beta_{ij}) (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (4)$$

où \mathcal{A} est l'aire de la surface de Voronoï attaché au point central ($\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$) les extrémités des segments et α_{ij} et β_{ij} les angles opposés au vecteur $(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$. La courbure moyenne κ_H est calculée comme la moitié de la valeur absolue de cette quantité (4). L'expression de Meyer et al. [12] fournit une excellente évaluation de la courbure locale pour toute surface 3D maillée par des triangles réguliers.

Les concepts de la géométrie différentielle discrète sont bien sûr basés sur leurs équivalents continus comme le théorème de Frenet mais les notions de milieu continu doivent être revisités notamment la dérivation en un point qui n'a quelquefois plus de sens, par exemple à l'un des sommets de la topologie (2).

3.2 Calcul des courbures conformes à la mécanique discrète

En mécanique discrète la courbure définie par des points sur une surface Σ n'est pas forcément en adéquation avec l'effet capillaire recherché sur une topologie géométrique discrète. Le maillage de l'interface peut comporter des irrégularités importantes alors que les points des sommets sont bien placés sur celle-ci. A l'instar des autres termes de l'équation du mouvement les effets capillaires sont représentés par deux courbures κ_t et κ_v associées au repère local $(\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{t})$ attaché à chaque segment Γ .

Pour calculer les courbures longitudinale κ_t et transversale κ_v les données disponibles du problème sont la position des points sur l'interface \mathbf{x}_i , les vecteurs tangents \mathbf{t} et les normales aux facettes \mathbf{n} . Considérons l'interface de la figure (3) et particulièrement les deux facettes de normales \mathbf{n} et \mathbf{n}' associées au vecteur unitaire \mathbf{t} . Par construction les normales \mathbf{n} et \mathbf{n}' orthogonales à \mathbf{t} sont dans un même plan et on a $\|\mathbf{n} \wedge \mathbf{n}'\| = \|\mathbf{n}\| \|\mathbf{n}'\| \sin \theta$ avec $\theta = \widehat{\mathbf{n} \mathbf{n}'}$. La quantité $\|\mathbf{n} \wedge \mathbf{n}'\|$ est l'aire du parallélogramme construit sur les deux vecteurs. Dans ce cas ces vecteurs sont unitaires $\|\mathbf{n}\| = \|\mathbf{n}'\| = 1$ et $\|\mathbf{n} \wedge \mathbf{n}'\| = \sin \theta$. Il est nécessaire de définir une longueur caractéristique afin de calculer la courbure; la quantité choisie est la longueur du l'arc $\widehat{c c'}$ qui est approximé en discret par la distance définie par la norme $\|c c'\|$.

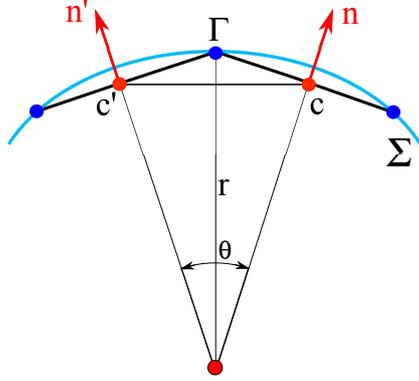


FIGURE 3. Calcul de la courbure κ_v sur le segment Γ .

La courbure affectée au segment Γ est égale à :

$$\kappa_v = \frac{\mathbf{n} \wedge \mathbf{n}'}{\|c c'\|} \quad (5)$$

où le symbole \wedge définit le produit extérieur qui correspond à la composante normale au plan considéré, par exemple (x, y) , du produit vectoriel noté avec le symbole \times . En l'absence de repère global le produit extérieur est particulièrement adapté à l'écriture des lois de la mécanique discrète. Contrairement au produit vectoriel qui est défini pour un espace à trois dimensions, le produit extérieur est défini pour tout espace vectoriel de dimension n . Cette quantité peut prendre des valeurs positives ou négatives suivant la valeur de θ dans le repère direct orienté $(\mathbf{m}, \mathbf{n}, \mathbf{t})$.

Pour des points situés sur un cercle de rayon r et une longueur caractéristique égale à la longueur de l'arc, la courbure sur le segment Γ est exacte, $\kappa_v = 1/r$; le cas particulier $\theta = 90^\circ$ redonne bien $\|c c'\| = r$. Pour une longueur discrète $\|c c'\|$ la courbure est aussi exacte quel que soit le nombre de marqueurs équidistants sur le cercle.

L'angle dièdre ou diédral φ est le complémentaire de l'angle θ de la figure (3), $\varphi = \pi - \theta$. Si la surface est convexe ou concave par rapport à la normale \mathbf{n} cet angle φ peut être plus petit ou plus grand que π . Pour supprimer cette indétermination il est possible d'introduire la fonction

atan2 à deux entrées et d'écrire :

$$\varphi = \text{atan2} \left((\mathbf{n} \wedge \mathbf{t}) \times (\mathbf{t} \wedge \mathbf{n}') \cdot \frac{\mathbf{t}}{\|\mathbf{t}\|}, (\mathbf{n} \wedge \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{t} \wedge \mathbf{n}') \right) \quad (6)$$

La distance associée est prise égale à $\delta = (\mathcal{A} + \mathcal{A}')/d$ où \mathcal{A} et \mathcal{A}' sont les aires des polygones du dièdre et d la longueur de l'arête Σ . Cette définition de la littérature reste toutefois difficile à implémenter car dépendant du choix de l'orientation de \mathbf{t} . La définition (5) de la courbure sur le segment κ_v diffère de celle utilisant l'angle diédral φ tel que $\cos(\varphi) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'$; si θ peut facilement se déduire de φ , la dimension caractéristique liée à κ_v est égale à $\|c'c\|$, celle relative à l'angle diédral est égale à δ [10]. Dans le cas où, pour un même angle diédral, pour des triangles déformés la longueur δ varie et les valeurs de la courbure en sont affectées. De plus, en deux dimensions d'espace, cette définition perd son sens.

Les topologies de la mécanique discrète introduisent les orientations des vecteurs unitaires des arêtes et des normales qui sont en complète cohérence avec les opérateurs discrets, rotationnels primal et dual, gradient et divergence. De ce fait l'expression (7) permet de signer la courbure sans connaître la convexité de la surface.

$$\kappa_v = \frac{\mathbf{n} \wedge \mathbf{n}'}{\|c'c\|} \quad (7)$$

Cette forme de la courbure directionnelle associée à l'arête permet son application à tout type de topologies, polygones et polyèdre convexes ou concaves. Sa signature est essentielle pour décrire les mouvements liés aux effets capillaires. La figure (4) représente le dièdre élémentaire d'une surface polyédrique tessellée à base de triangles.

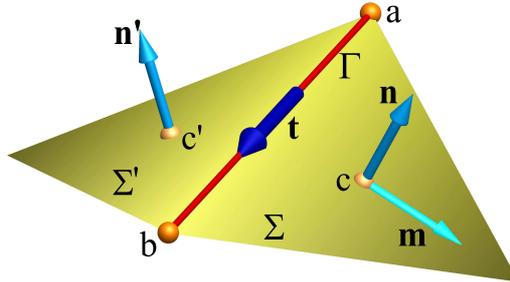


FIGURE 4. Calcul de la courbure κ_v sur une arête Γ à partir des normales \mathbf{n} et \mathbf{n}' des deux surfaces planes Σ et Σ' .

La courbure en soi n'induit pas d'écoulement à la surface d'une goutte ou d'une bulle. Afin de rechercher les variations de la courbure sur la surface celle qui est associée à l'arête Γ doit donc être utilisée pour rechercher les courbures sur les points de la surface primale et sur les facettes de la surface duale. En deux dimensions d'espace, c'est à dire pour une surface polygonale, les arêtes sont aussi les sommets de la topologie géométrique primale.

En mécanique discrète et en dimension trois la notion de courbure prend un sens différent. S'il existe de nombreuses méthodes pour évaluer la courbure locale moyenne d'une interface la courbure discrète doit être définie comme les variations des vecteurs unitaires \mathbf{t} et \mathbf{m} le long de leurs abscisses curvilignes respectives représentés sur la figure (5). Les deux courbures principales correspondantes sont nommées courbure longitudinale κ_l et courbure transversale κ_t ; La courbure longitudinale est affectée au point et la courbure transversale est localisée sur la face de la topologie primale. La courbure moyenne ne dépend pas de la base (\mathbf{t} , \mathbf{m}) choisie; la topologie géométrique primale de l'interface Σ comporte en effet des segments Γ dans toutes les directions

mais la condition $\mathbf{t} \cdot \mathbf{m} = 0$ est supposée vérifiée. La courbure moyenne perd son sens dans la mesure où, comme pour tous les autres effets en mécanique discrète, les effets longitudinaux associés à l'opérateur gradient sont complétés par les effets induits portés par le rotationnel dual.

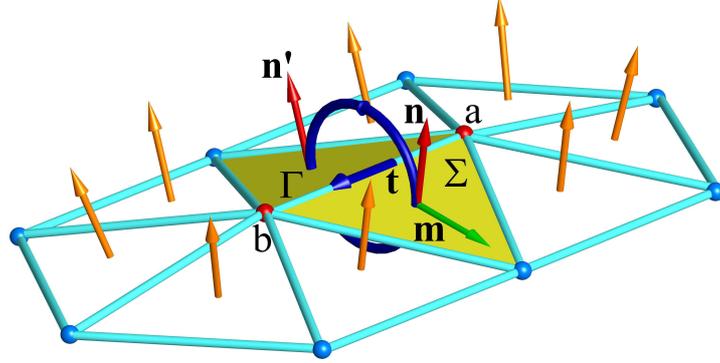


FIGURE 5. Stencil de l'interface Σ pour le calcul des courbures longitudinale et transversale respectivement attachées aux points et aux facettes dans le cas d'une courbure moyenne positive ; le repère local de l'interface vérifie toujours la condition $\mathbf{t} \cdot \mathbf{m} = 0$.

Le cas présenté sur la figure (5) correspond à des courbures longitudinale et transversale positives. Pour l'exemple donné sur la (6) la courbure κ_l est négative et κ_t est positive et la courbure moyenne est nulle ; c'est une portion une caténoïde, une surface minimale basée sur deux cercles.

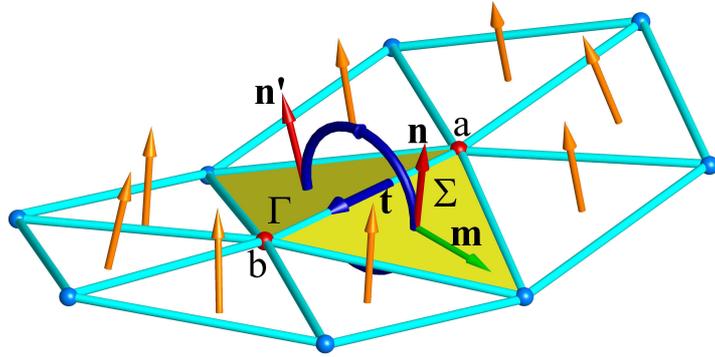


FIGURE 6. Stencil de l'interface Σ pour le calcul des courbures longitudinale et transversale respectivement attachées aux points et aux facettes dans le cas d'une courbure moyenne nulle ; le repère local de l'interface vérifie toujours la condition $\mathbf{t} \cdot \mathbf{m} = 0$.

La courbure moyenne définie en géométrie différentielle continue ou discrète correspond à une globalisation des effets longitudinaux et transversaux ; c'est une mesure de l'intensité de variation de la normale à la surface mais ne définit pas la convexité de celle-ci de manière intrinsèque. A partir des vecteurs \mathbf{n} de part et d'autre du segment Γ on calcule κ_v la courbure affectée à toutes les arêtes de l'interface Σ . Puis on calcule κ_l et κ_t les courbures affectées à chaque point et à chaque cellule en relation avec le vecteur \mathbf{t} comme des moyennes. La courbure locale de l'interface $\kappa = \kappa_l + \kappa_t$ ne s'identifie pas à celle définie à partir des courbures principales, en particulier κ_l et κ_t ne correspondent pas aux valeurs minimale et maximale. Celles-ci sont étroitement associées aux accélérations dans les directions du repère local (\mathbf{m}, \mathbf{t}) ; en effet les phénomènes capillaires

n'ont pas de raison d'être globalisés à travers une courbure moyenne. Cette première voie consiste à définir des courbures longitudinale κ_l et transversale κ_t comme des moyennes à partir de la courbure sur le segment κ_v .

Le maillage réalisé avec des logiciels spécialisés montre que chaque nœud peut être interconnecté avec un nombre variable de cellules (4, 5, 6, 7) et le résultat sur la courbure dépend de la régularité de cette topologie primale. Par exemple, pour des points situés exactement à la surface d'une sphère, la courbure calculée à partir de ceux-ci peut être elle-même exacte si 4 de ces points non alignés sont utilisés pour trouver le rayon de courbure alors que la courbure discrète ne donnera qu'une approximation. Il est donc inutile de vouloir chercher une hypothétique convergence spatiale de la courbure en fonction du nombre de points de la topologie géométrique primale. Avec un même mailleur automatique et des maillages raffinés l'erreur sur la courbure reste de même ordre de grandeur ce qui n'est d'ailleurs pas si mal. Diverses techniques de lissage issues de la géométrie différentielle discrète peuvent améliorer l'erreur absolue sur un même maillage.

L'influence du calcul de la qualité de la courbure sur les mouvements générés par les effets capillaires est un sujet que de nombreux auteurs ont étudié mais qui reste d'un intérêt très limité. La réduction des "courants parasites" dépend non seulement de la qualité de la courbure mais aussi de l'implémentation des termes capillaires dans l'équation du mouvement. Il est certain que ces tourbillons parasites sont générés par la composante rotationnelle du terme capillaire. La méthode de projection cinématique scalaire ou vectorielle [7, 1] permet répondre à ce problème en supprimant complètement ces *artefact*, y compris pour des fluides dont le rapport de masse volumique est important.

3.3 L'accélération capillaire comme une décomposition de Hodge-Helmholtz

En cinématique la courbure peut être vue comme la norme du vecteur accélération pour un mobile parcourant la courbe à vitesse constante égale à l'unité. L'accélération capillaire peut être aussi vue comme la somme des variations des courbures longitudinale et transversale :

$$\mathbf{g}_c = \nabla (\sigma_l \kappa_l) - \nabla \times (\sigma_t \kappa_t \mathbf{n}) \quad (8)$$

où les tensions de surface par unité de masse σ_l et σ_t sont évalués en fonction de la température locale.

En fait il est possible d'obtenir une formulation en adéquation complète avec le formalisme de la mécanique discrète en posant $\boldsymbol{\kappa}_v = \kappa_v \mathbf{t}$. On dispose ainsi d'une représentation orientée des effets capillaires. A partir des vecteurs $\boldsymbol{\kappa}_v$ il sera possible de définir des opérateurs surfaciques unitaires spécifiques affectés aux nœuds et aux cellules :

$$\kappa_l = \nabla \cdot \boldsymbol{\kappa}_v = \frac{1}{l_l} \sum_v^n d_v \boldsymbol{\kappa}_v \cdot \mathbf{t} \quad \kappa_t = \nabla \times \boldsymbol{\kappa}_v = \frac{1}{l_t} \sum_v^m d_v \boldsymbol{\kappa}_v \cdot \mathbf{t} \quad (9)$$

où n est le nombre de cellules associées à un nœud et m le nombre de segments formant une cellule de la topologie primale. Le résultat de la seconde définition du scalaire κ_t est en fait porté par la normale \mathbf{n} à la facette. Les opérateurs des expressions (9) ne correspondent pas aux définitions habituelles des milieux continus. Ici d_v est la longueur de chaque segment Γ et les opérateurs discrets sont définis par des distances qui correspondent aux longueurs l_l et l_t des contours délimitant respectivement les topologies duale et primale. On retrouve la notion de valeur moyenne pondérée par les longueurs d_v .

Ainsi l'accélération capillaire prend une forme identique à l'équation discrète du mouvement :

$$\mathbf{g}_c = \nabla (\phi_c^o - \sigma_l \nabla \cdot \boldsymbol{\kappa}_v) + \nabla \times (\psi_c^o - \sigma_t \nabla \times \boldsymbol{\kappa}_v) \quad (10)$$

Les potentiels scalaire ϕ_c^o et vectoriel ψ_c^o accumulent les contraintes résultant des mouvements dus aux seuls effets capillaires. Ils s'ajoutent naturellement aux potentiels ϕ^o et ψ^o de l'accélération locale γ du milieu considéré. La valeur de l'accélération \mathbf{g}_c définie par (10) comporte deux contributions séparées dont les origines sont dues à des effets orthogonaux mais qui dont leurs projections s'ajoutent sur le segment Γ .

La notion de courbure moyenne en milieu continu pose un problème de cohérence. La globalisation des effets longitudinaux et transversaux à travers une seule courbure κ et la modélisation des mouvements capillaires par $\sigma \nabla \kappa$ conduit à privilégier une direction, celle du segment Γ . Par ailleurs il est nécessaire de connaître *a priori* la courbure κ_l sur les points qui ne peut être que le résultat d'une moyenne numérique car la normale sur un point n'est pas définie. En mécanique des milieux continus tous les termes sources issus d'un potentiel sont écrits sous la forme d'un gradient de celui-ci, par exemple pour les effets gravitationnels comme pour les effets capillaires.

En mécanique discrète on définit un potentiel en tout point de l'espace et on écrit l'accélération comme une décomposition de Hodge-Helmholtz ; par exemple pour les effets capillaires le potentiel $\phi_c = \sigma \kappa$ permet de calculer l'accélération (10) dans un repère local d'un espace à n dimensions.

4 Utilisation de l'accélération capillaire

4.1 Variations de la tension superficielle sur une bulle

Les écoulements à la surface d'une bulle ou d'un film de forme quelconque peuvent être initiés par des variations de la tension de surface γ qui ne varie d'ailleurs qu'en fonction de la température ; ces variations prennent la forme $\gamma = \gamma_0 (1 - T/T_c)^n$ où γ_0 est une constante et T_c la température du point triple du fluide considéré. Pour l'eau on a $\gamma_0 = 0.147$ et l'indice $n = 11/9$. En mécanique discrète le paramètre physique caractérisant la tension de surface est égal à $\sigma = \gamma/\rho$. Dans l'expression (10) cette quantité prend deux déterminations σ_l et σ_t . Comme on peut le constater les variations de la tension de surface et celles de la courbure n'interviennent qu'au sein d'un seul et même terme nommé potentiel capillaire $\phi_c = \sigma \kappa$ et l'accélération capillaire de l'équation du mouvement s'écrit aussi $\mathbf{g}_c = -\nabla \phi_c + \nabla \times \psi_c$ où $\psi_c = \phi_c \mathbf{n}$. Si on introduit les rayons de courbure dans les directions \mathbf{t} et \mathbf{m} soit r_l et r_t on peut reformuler l'accélération capillaire :

$$\mathbf{g}_c = \nabla \left(\phi_c^o - \frac{\sigma_l}{r_l} \right) + \nabla \times \left(\psi^o - \frac{\sigma_t}{r_t} \mathbf{n} \right) \quad (11)$$

Considérons le cas d'une bulle de rayon R constituée d'un film d'eau savonneuse d'épaisseur initiale e^o dans l'air. Si le rayon est suffisamment petit on peut considérer que la bulle est sphérique et que les courbures sont constantes et égales à $\kappa_l = \kappa_t = 1/R$. Des variations régulières de la température d'intensité $\pm \delta T$ sont imposées sur la surface aux sommets d'un cube inscrit à la sphère et la tension de surface est ensuite calculée. Toutefois on ne tiendra pas compte du transfert de chaleur lié à l'advection du fluide dans l'épaisseur du film. Les données de ce problème ne sont pas explicitées ici car ce cas n'est qu'une démonstration de l'intérêt du modèle physique présenté.

La simulation des écoulements de type Marangoni à la surface de la bulle est réalisée à partir du système d'équations (3) et des termes sources (10). La topologie primale sphérique est constituée d'une tessellation de type icosaèdre basée sur $n = 2700$ triangles. Toutes les quantités sont attribuées aux points ou aux cellules de la surface sphérique et les opérateurs discrets sont aussi surfaciques.

Comme la tension de surface décroît lorsque la température augmente les courants de Marangoni sont dirigés des sources froides vers les sources chaudes. En l'absence de gravité les

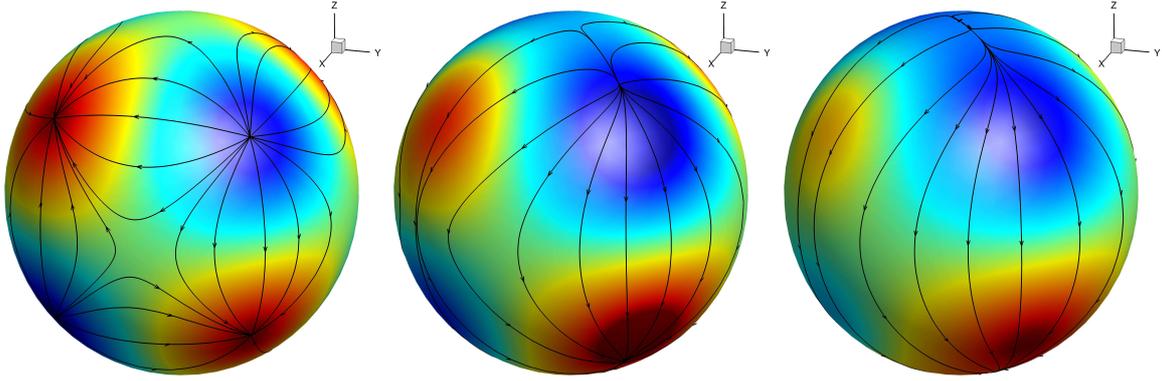


FIGURE 7. *Écoulement généré par des variations de tension de surface σ en fonction de la température ; instantané représentant les lignes de courant à la surface de la sphère et l'épaisseur du film liquide. À gauche sans la présence de gravité, au centre avec une gravité de g_1 et à droite avec une gravité de $g_2 > g_1$.*

courants sont réguliers comme le montre la figure de gauche des représentations (7). Lorsque la gravité est associée aux termes sources de l'équation discrète avec $-g_1 \mathbf{e}_z$ et $-g_2 \mathbf{e}_z$ avec $g_2 > g_1$ l'écoulement perd sa symétrie et la vitesse est principalement dirigée vers le bas.

La bulle est constituée de 2 interfaces de mêmes courbures mais les effets capillaires et la pression dans la bulle sont ainsi doublés ; ce n'est pas la courbure qui vaut deux fois celle d'une goutte mais bel et bien la présence de deux interfaces qui double la tension de surface affectée à la bulle. L'interface est considérée comme mince mais il est possible d'en calculer l'épaisseur e variable dans l'espace et le temps à partir de la vitesse surfacique \mathbf{V} sous la forme :

$$e = e^o - dt e^o \nabla \cdot \mathbf{V} \quad (12)$$

Si l'eau et l'air sont incompressibles la divergence de surface n'est par contre pas nulle. Dans les cas où la gravité n'est pas nulle le drainage de l'eau vers le bas entraîne un amincissement de l'épaisseur de l'interface dans la partie haute de la bulle qui conduit à son éclatement lorsque l'épaisseur devient d'ordre de grandeur de l'échelle moléculaire.

Ce simple exemple peut être traité de manière plus réaliste en introduisant le transfert de chaleur par diffusion et convection au sein du film liquide. Les échanges avec l'air intérieur à la sphère et avec l'air extérieur peuvent être introduits sans difficulté par le couplage volumique entre maillages conformes ou non à celui de l'interface. La simulation de l'éclatement de la bulle serait en revanche plus délicate à réaliser.

4.2 Transformation d'un polygone

Considérons le cas d'un polygone à n côtés de la figure (8) dont la normale extérieure est \mathbf{n} et qui présente des convexités positives et négatives. Ce polygone est construit à partir d'un cercle de rayon unitaire qui est déformé à partir d'une fonction $\mathbf{x}_i = r \{\sin \theta, \cos \theta\}$ avec $r = 1 + 0.7 \cos(5 \theta)$. Même si le théorème de Frenet permet de calculer les forces capillaires locales celles-ci ne permettent pas de représenter la dynamique réelle si les interactions avec les arêtes voisines ne sont pas prises en compte.

Le problème doit donc être traité dans sa globalité à partir du modèle physique visant à définir une accélération capillaire et par suite la vitesse capillaire. L'équation du mouvement

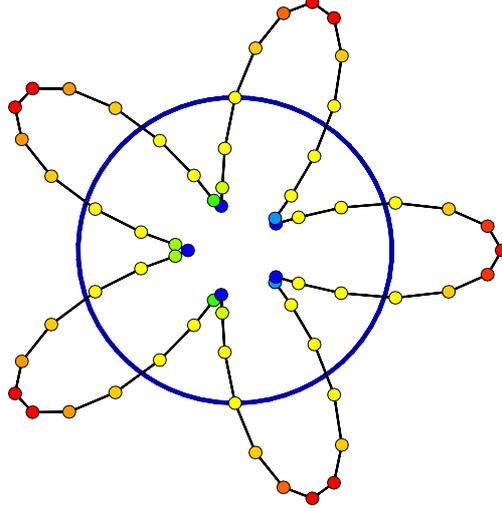


FIGURE 8. Transformation d'un polygone, représentés par 64 points reliés par des segments dont la courbure locale est variable, $\kappa_l \in [-20, 4]$, en un cercle de courbure constante.

discrète (3) est simplifiée pour tenir compte du caractère unidirectionnel du problème posé :

$$\begin{cases} \gamma = -\nabla (\phi^o - dt c_l^2 \nabla \cdot \mathbf{V}) + \nabla (\sigma_l \kappa_l) \\ \psi^o - dt c_l^2 \nabla \times \mathbf{V} \mapsto \psi^o \\ \mathbf{V}^o + \gamma dt \mapsto \mathbf{V}^o \end{cases} \quad (13)$$

Dans ce cas particulier la courbure est calculée à partir des deux segments adjacents et la courbure κ_v est affectée à une arête orthogonale au plan puis associée au sommet entre ces deux segments. En une dimension d'espace le mouvement est irrotationnel par nature et la contribution du second terme disparaît donc du système d'équations initial. Les effets capillaires n'induiront pas *a priori* de rotation intrinsèque.

La résolution du système (13) à partir du potentiel $\sigma_l \kappa_l$ avec $\sigma_l = 1$ engendre un mouvement caractérisé par la vitesse \mathbf{V} sur le segment qui tend à rapprocher les nœuds d'un point central. Tous les sommets du polygone sont toutefois liés implicitement par l'opérateur $\nabla \nabla \cdot \mathbf{V}$ à travers la célérité c_l conditionnant l'incompressibilité du mouvement ou l'élasticité du polygone considéré comme un fil souple. L'incompressibilité totale est assurée à la précision machine lorsque la valeur de c_l est très importante. A partir de la vitesse, la divergence conduit à calculer le potentiel scalaire ϕ^o et donc au déplacement des sommets du polygone suivant la normale \mathbf{n} par l'expression $\mathbf{x} = \mathbf{x}^o + dt (\phi^o - p_m) \mathbf{n}$. En effet, comme seule la condition $\nabla \phi^o = \nabla \kappa_l$ est assurée et que la courbure est variable, le potentiel ϕ^o n'est défini qu'à une constante près.

Le système d'équations est robuste et conduit à la convergence de la simulation vers une solution stationnaire où tous les points sont exactement sur un cercle et à une courbure constante strictement égale à l'unité, celle du cercle non perturbé. La solution obtenue ne conserve pas la longueur de la chaîne. Des contraintes peuvent être ajoutées en tant que lagrangiens au sein de l'équation vectorielle ou en simulant le volume par un maillage en assurant ainsi l'incompressibilité volumique.

4.3 Transformation d'un polyèdre

Le problème traité ici correspond à un exemple tridimensionnel similaire à la transformation du polygone en deux dimensions d'espace. Une sphère de rayon unité tessellée par des triangles est déformée dans les directions y et z avec des facteurs de forme de 0.5 et 0.75. La figure (9) montre la déformation initiale et les lignes de courant dirigées vers les zones à plus faibles courbures. Dans ce cas l'objet est convexe et les courbures diédrales κ_v sont toutes positives.

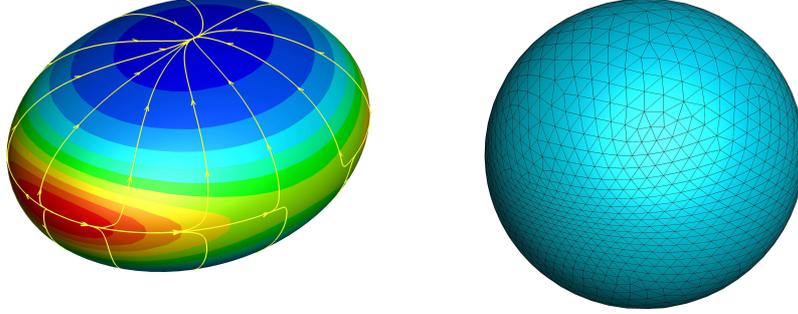


FIGURE 9. Transformation d'une forme ellipsoïdale en sphère.

La résolution du système d'équations (3) est réalisée en 2D surfacique avec un terme source égal à $\nabla\kappa$. La courbure et la topologie primale variant au cours du temps conduit à recalculer à tout instant les nouvelles positions des sommets mais aussi les nouvelles métriques. La solution converge vers une sphère de rayon constant égal à l'unité. La figure (9) de droite montre le maillage utilisé sur la topologie finale.

Le cas d'un polyèdre concave est maintenant abordé en utilisant la courbure moyenne et la courbure diédrale. La figure (10) illustre le champ de courbure dans les deux cas.

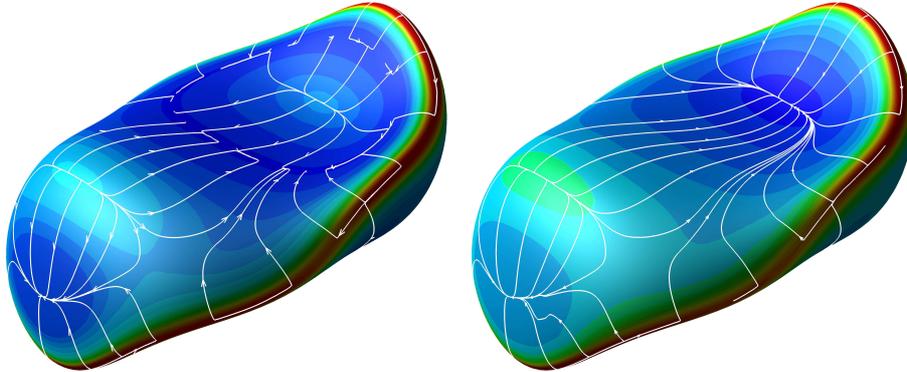


FIGURE 10. Courbure moyenne à gauche et courbure diédrale sur un objet concave.

On constate que la courbure moyenne calculée à partir de l'expression (4) n'est pas signée et ne représente que l'intensité de celle-ci. Il en résulte que les mouvements se limitent à des régions où la courbure est positive, les lignes de courant ne franchissent pas les zones de courbures nulles. Dans ce cas la convexité doit être recherchée avant de pouvoir réaliser une simulation des mouvements capillaires. La courbure diédrale donnée par l'expression (7) est par contre signée d'emblée. Les lignes de courant sont émises des zones de courbures positives directement vers les courbures négatives. Lors d'un traitement entièrement volumique, pour une goutte maillée

par exemple, la courbure moyenne peut suffire car la pression est transmise par le liquide pour déformer dans le bon sens les zones concaves.

4.4 Transformation d'un film cylindrique en caténoïde

Le traitement de surface non fermées, des portions de surface par exemple, exige de fixer des conditions de bord sur la vitesse ; dans ce cas la pression de chaque côté de l'interface est la même et l'équilibre mécanique ne dépend que de la configuration spatiale imposée par les conditions aux limites. Considérons une surface cylindrique de rayon R et de hauteur H où les bords sont définis par les deux cercles. Lorsqu'une tension de surface est appliquée la figure d'équilibre est une caténoïde, l'une des surfaces minimales engendrée par deux cercles. Dans le cas de surfaces développables la courbure de Gauss, le produit des courbures principales, est nulle ; c'est le cas du cylindre et de toutes les surfaces formées lors de l'évolution vers la caténoïde. Pour le cylindre initial la courbure moyenne est égale à $\kappa_m = 0.5$ conformément à sa définition $\kappa_m = (\kappa_1 + \kappa_2)/2$ où κ_1 et κ_2 sont les courbures principales égales à 0 et 1.

La figure (11) représente une surface cylindrique maintenue par les deux cercles de rayon unité et de hauteur $H = 1.4$ maillée par des triangles.

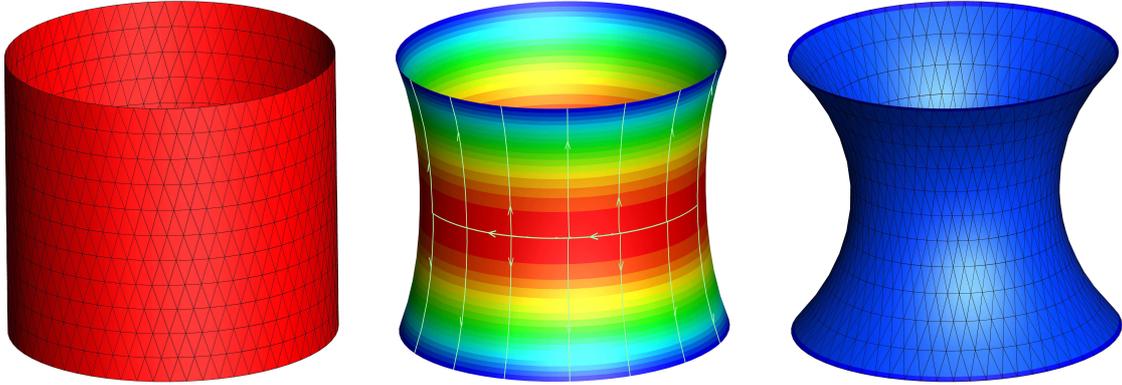


FIGURE 11. Evolution d'un film cylindre de rayon $R = 1$ et de hauteur $H = 1.4$ en une caténoïde sous l'effet de la tension de surface.

La simulation est réalisée à partir du système d'équations (3) où la courbure et les vitesses sont maintenues à zéro sur les deux cercles. Compte tenu des conditions aux limites imposées sur les cercles les forces capillaires sont initiées en premier lieu au voisinage des extrémités pour s'étendre dans la région centrale. Progressivement la courbure moyenne décroît sur toute la surface et tend vers zéro. La figure (11) montre une étape intermédiaire où la courbure la plus importante occupe la zone centrale et la solution d'équilibre mécanique correspondant à une courbure moyenne nulle. Corrélativement la vitesse décroît et tend aussi vers zéro. La courbure moyenne calculée à partir de la loi (4) varie de $\kappa_m = 0.5$ à zéro pour l'état d'équilibre.

Les valeurs de la courbure diédrale (5) sont positives ou négatives mais les courbures longitudinale et transversale, κ_l et κ_t , sont toutes les deux positives et égales à 0.5 tout au long de l'évolution.

4.5 Contrôle et optimisation de formes

La courbure est une quantité essentielle car elle définit des effets physiques de toutes natures, la capillarité bien sûr mais aussi le mouvement des objets ou des fluides en mécanique ou en théorie de la relativité. La notion de courbure spatiale et spatio-temporelle peut être étendue à d'autres quantités comme la vitesse pour définir l'inertie. En fait les courbures longitudinale et transversale d'un potentiel permettent de donner un sens intrinsèque lié au seul repère local ; elles conduisent à abandonner des définitions du milieu continu liées à des référentiels galiléens, inertiels voire absolus.

Parmi les applications potentielles de l'équation (3) il existe celle de contrôle de formes et par là même de leur optimisation. Considérons un exemple très simple d'un cercle unité d'un plan décrit par les n sommets d'un polygone et autant d'arêtes qui les lient. La courbure diédrale entre arête est constante et peut être calculée aisément. Il est possible d'imposer une courbure différente sur chacun des sommets du polygone ce qui initie une vitesse sur les segments concernés à l'aide du terme $\nabla\kappa$ et un déplacement des sommets égal à $\mathbf{U} = \mathbf{V} dt$. Sur les segments où la variation de courbure est nulle, l'accélération et la vitesse seront nulles.

Sur le cercle initial de la figure (12) la courbure initiale $\kappa = 1$ est modifiée sur deux zones centrées respectivement sur $\pi/2$ et sur π , l'une positivement et l'autre négativement en imposant $\kappa_1 = 0.5$ et $\kappa = -0.26$. La résolution de l'équation (13) conduit au déplacement des points du cercle initial dans les zones concernées ; l'algorithme est très précis et robuste.

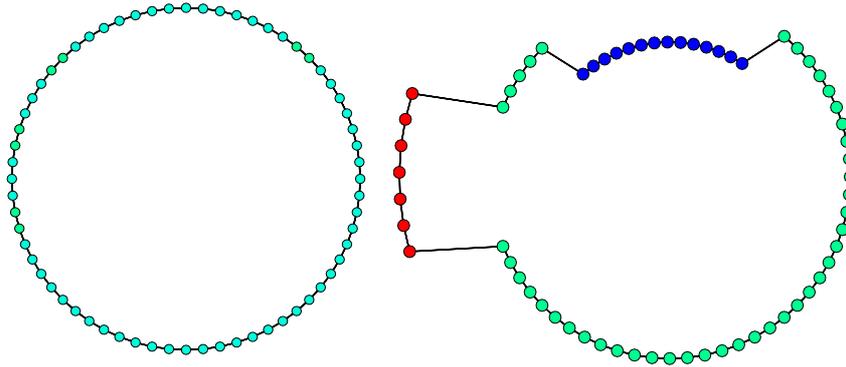


FIGURE 12. Déformation d'une forme par une variation de la courbure ; à gauche les points du polygone initial et à droite la forme modifiée où la couleur des points correspond au potentiel $\phi^o = -0.26, 0, 0.5$.

Cet exemple élémentaire synthétique montre la capacité de la méthodologie à modifier les formes ouvertes et fermées, les surfaces polygonales ou polyédriques, les fonctions continues ou discontinues en fonction de la seule courbure diédrale. Ici le gradient de courbure a été imposé mais les contraintes imposées peuvent être de toute nature. Notamment la forme de la topologie primale peut être calculée en fonction des résultats d'une simulation d'un écoulement dans un volume. Dans ce cas le système d'équations (3) permet de calculer la vitesse de l'écoulement dans le volume et ce même système résolu sur la topologie de l'objet permet de réagir à diverses contraintes comme la valeur de la traînée sur chaque facette de celui-ci. Ce couplage spatio-temporel ouvre la voie à l'optimisation de formes.

5 Conclusions

De nombreux cas d'écoulements diphasiques avec ou sans mouillage total ont déjà été réalisés, ils sont décrits dans le chapitre (5) de la référence [6]. Cette présentation complète ces résultats précédents en proposant une approche intégralement cohérente avec celle de l'équation du mouvement discrète. Les propriétés géométriques des interfaces sont représentées par des concepts bien connus en géométrie différentielle discrète (DDG). L'accélération capillaire \mathbf{g}_c s'écrit comme toutes les autres sous la forme d'une décomposition de Hodge-Helmholtz discrète (DHHD) en une composante irrotationnelle et une autre solénoïdale.

Cette modélisation des effets capillaires ne dépend pas des méthodologies numériques associées à la capture de la courbure ou à celle de la résolution de l'équation du mouvement. Toutes ces techniques nécessitent d'adapter ces techniques numériques à la modélisation présentée. L'abandon de la notion de milieu continu n'obère en rien la juste représentation des phénomènes ; il conduit d'ailleurs à l'émergence d'une physique discrète parfaitement compatible avec les notions de géométrie différentielle discrète.

Références

- [1] Ph. Angot, J-P. Caltagirone, and P. Fabrie. A kinematic vector penalty projection method for incompressible flow with variable density. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris, Elsevier Masson*, Ser I :1124–1131, 2016.
- [2] H. Bhatia, G. Norgard, V. Pascucci, and P.T. Bremer. The Helmholtz-Hodge Decomposition - A Survey. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 99(1), 2012.
- [3] M. Botsch, L. Kobbelt, M. Pauly, P. Alliez, and B. Lévy. *Polygon Mesh Processing*. A.K. Peters Ltd., Natick, Massachusetts, 2010.
- [4] J. Brackbill, D. Koth, and C. Zemack. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100 :335–54, 1992.
- [5] J-P. Caltagirone. *Discrete Mechanics*. ISTE, John Wiley & Sons, London, 2015.
- [6] J-P. Caltagirone. *Discrete Mechanics, concepts and applications*. ISTE, John Wiley & Sons, London, 2019.
- [7] 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, 5 :171–182, 2015.
- [8] K. Crane, F. de Goes, M. Desbrun, and P. Schröder. Digital geometry processing with discrete exterior calculus. In *ACM SIGGRAPH 2013 courses*, SIGGRAPH '13, New York, NY, USA, 2013. ACM.
- [9] K. Crane and M. Wardetzky. Discrete differential geometry : an applied introduction. *Notices of the AMS*, Communication :1153–1159, 2018.
- [10] K. Crane and M. Wardetzky. A glimpse into discrete differential geometry. *Notices of the AMS*, Communication :1153–1159, 2018.
- [11] J.E. Marsden, T. Ratiu, and R. Abraham. *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications*. Springer-Verlag Publishing, 3^e edition, New-York, 2002.
- [12] M. Meyer, M. Desbrun, P. Schröder, and Barr A.H. *Discrete Differential-Geometry Operators for Triangulated 2-Manifolds*. In : Hege HC., Polthier K. (eds) Visualization and Mathematics III. Mathematics and Visualization, Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.
- [13] A. Prosperetti and G. Tryggvason. *Computational Methods for Multiphase Flows*. Cambridge University Press, Cambridge UK, 2007.