HAL
open science

Analyse théorique et numérique au voisinage du point triple en électromouillage

Claire Scheid

To cite this version:

Claire Scheid. Analyse théorique et numérique au voisinage du point triple en électromouillage. Mathématiques [math]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2007. Français. NNT : . tel-00204047

HAL Id: tel-00204047

https://theses.hal.science/tel-00204047v1

Submitted on 11 Jan 2008

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.

THÈSE

présentée devant

l'Université Joseph Fourier de Grenoble

par

Claire SCHEID

pour obtenir le titre de :

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER DE GRENOBLE

Spécialité : Mathématiques Appliquées

Analyse théorique et numérique au voisinage du point triple en électromouillage

Date de soutenance : 25 Octobre 2007

Composition du jury :

M.	Eric	BONNETIER	PRÉSIDENT
M.	Patrick	CIARLET	RAPPORTEUR
M.	Antoine	HENROT	RAPPORTEUR
M.	Bruno	BERGE	EXAMINATEUR
M.	Patrick	WITOMSKI	EXAMINATEUR

Préparée au sein du laboratoire Jean Kuntzmann

Remerciements

Je souhaite en premier lieu remercier Patrick Witomski, Professeur à l'Université Joseph Fourier, qui m'a encadrée au cours de ces trois années. Malgré un emploi du temps souvent chargé, il m'a consacré un temps conséquent et précieux. Ses conseils toujours très avisés, sa capacité à trouver les mots justes dans les périodes de doute ont su me pousser et me motiver. Il s'est montré patient, pédagogue et m'a permis d'apprendre à me construire un chemin dans le monde de la recherche.

Je remercie Patrick Ciarlet, Enseignant-chercheur à l'ENSTA, et Antoine Henrot, Professeur à l'IECN, d'avoir accepté de rapporter sur ce travail de thèse. Par nos discussions et sa lecture minutieuse du manuscrit, Patrick Ciarlet m'a permis d'améliorer grandement ce travail. Les suggestions, commentaires et l'aide d'Antoine Henrot a permis d'ouvrir des perspectives très intéressantes pour approfondir ce travail.

Je remercie Bruno Berge, Professeur à l'ENS de Lyon, à l'origine de l'électromouillage, d'avoir accepté d'être membre de mon jury de thèse. Sa culture physique sur le problème est pour moi essentielle pour étoffer ce travail.

Je remercie enfin Eric Bonnetier, Professeur à l'Université Joseph Fourier, dont l'incroyable culture mathématique m'a toujours impressionnée, de m'avoir fait l'honneur de présider cette thèse.

Le bureau 56 restera pour moi un endroit très chaleureux malgré la relative irrespirabilité de l'été, le froid des hivers et nos attaques incessantes de la faune environnante (mouches, guêpes, punaises...). Je suis très heureuse d'avoir pu partager ce grand bureau avec Claire pendant ces trois années. Nos discussions et pauses tellement bienvenues ont été pour moi des plus bénéfiques sur mon travail. L'arrivée de Florian puis Innocent a ensuite rempli les deux places restées vides pour amener encore un peu plus de vie et de chaleur à cet endroit.

Merci à tous les membres du laboratoire avec qui j'ai pu avoir d'intéressantes discussions, mathématiques ou autres : Carine, Irène, Elise, Elie, Ange, Thomas et bien d'autres encore que je ne cite pas mais que je n'oublie que sur le papier. Un grand merci également à tout le personnel administratif du laboratoire et de l'école doctorale pour sa compétence, son efficacité et sa gentillesse.

Ces trois ans sur Grenoble n'auraient pas été les mêmes sans Boris, Hadrien, Sandrine, Vincent, Mélanie, Olga, Jos, Jan-Paul, Cyrille, Valentina, Giovanni, Jérémy, Malika, Samuel, Michel, Maxime, Nicolas, Benjamin... Que ce soit au cours de bons repas, autour d'un jeu ou lors d'une de nos belles randonnées, j'ai pu grâce à eux passer des moments absolument inoubliables.

Je n'oublie pas non plus toute ma famille et belle-famille pour leur éternel soutien au cours de ces trois années... et de toutes les autres bien sûr !

Enfin un énorme merci à Christophe pour m'avoir supportée durant ces années et pour son soutien inestimable. Sa patience, sa compréhension, sa gentillesse et ses conseils des plus perspicaces m'ont menée au bout de ce projet.

Table des matières

Introduction **9**

1 Modélisation de l'électromouilage **15**
1.1 Le problème d'électromouillage 15
1.1.1 Mouillage 15
1.1.2 Electromouillage 17
1.2 Description du problème mathématique 20
1.2.1 Dispositif expérimental 20
1.2.2 Le potentiel électrostatique 21
1.2.3 L'énergie de la goutte 23
1.3 La recherche de formes optimales, dérivation de forme 23
1.3.1 Domaines admissibles 24
1.3.2 Notion de dérivée directionnelle. 25
1.3.3 Condition nécessaire d'optimalité 26
1.4 Dérivation de l'énergie par rapport à la forme 27
1.4.1 Dérivées des énergies gravitationnelle, capillaire et du terme de contrainte de volume 27
1.4.2 Dérivée de l'énergie électrostatique 28
1.5 Formulation de la condition nécessaire d'optimalité 30
1.6 Conclusion 30

2 Le cas axisymétrique **31**
2.1 Passage en axisymétrique 31
2.1.1 Les notations axisymétriques 32
2.1.2 Le problème donnant le potentiel 35
2.2 Etude de la régularité du potentiel 36
2.2.1 Cas d'un domaine 2D 37
2.2.2 Le cas 3D axisymétrique 41
2.2.3 Application à notre problème 43
2.3 L'angle est indépendant du potentiel appliqué 47

2.3.1 Expression de la fonction coût et de la condition nécessaire d'optimalité . . . 48
2.3.2 Calcul des différentes contributions . . . 50
2.3.3 Valeur de l'angle de mouillage . . . 59
2.4 Conclusion . . . 59

3 Approximation numérique : Approche optimisation de forme et traitement des singularités 61
3.1 Principe . . . 61
3.1.1 Algorithme . . . 62
3.1.2 Aspect général des approximations . . . 63
3.1.3 Mise en oeuvre . . . 66
3.2 Première approximation du potentiel par éléments finis . . . 70
3.2.1 Mise en œuvre . . . 70
3.2.2 Résultats numériques . . . 72
3.2.3 Conclusion . . . 82
3.3 Introduction des singularités . . . 83
3.3.1 Mise en œuvre . . . 83
3.3.2 Résultats numériques . . . 86
3.3.3 Conclusion . . . 87
3.4 La Méthode du Complément Singulier . . . 88
3.4.1 Principe . . . 88
3.4.2 Le problème de transmission avec conditions de Dirichlet homogène . . . 89
3.4.3 Traitement numérique . . . 100
3.4.4 Application au problème d'électromouillage . . . 101
3.4.5 Résultats numériques . . . 104
3.5 Conclusion . . . 105

4 Une approximation double échelle 107
4.1 Motivation . . . 107
4.2 Notations . . . 107
4.3 Un point de vue physique . . . 108
4.3.1 Notations . . . 109
4.3.2 Bilan des forces extérieures . . . 109
4.3.3 Retour au cas $3D$ axisymétrique . . . 112
4.4 Ecriture de l'équation en utilisant la condition nécessaire d'optimalité 114
4.4.1 Condition nécessaire d'optimalité . . . 115
4.4.2 Etude du terme électrostatique . . . 116
4.4.3 Etude du terme d'interface liquide-gaz . . . 122
4.4.4 Etude du terme d'interface liquide-solide . . . 123

4.4.5 Etude du terme de contrainte 124
4.4.6 Conclusion 125
4.5 Ecriture du modèle continu 126
4.5.1 Résumé 126
4.5.2 Notations et définitions 127
4.5.3 Principe 128
4.6 Aspects théoriques sur les équations différentielles ordinaires : Les solutions au sens de Carathéodory 129
4.6.1 Définition des solutions 130
4.6.2 Théorème d'existence et d'unicité 130
4.7 Algorithme 131
4.7.1 Choix pour l'algorithme 131
4.7.2 Algorithme de résolution 132
4.7.3 Etude de la constructibilité de l'algorithme 133
4.8 Conclusion 145

5 Résultats numériques 147
5.1 Mise en oeuvre 147
5.1.1 Intégration numérique de l'équation différentielle ordinaire 147
5.1.2 Vérification des conditions de constructibilité de l'algorithme 150
5.1.3 Choix des conditions initiales 151
5.2 Résultats numériques : analyse et comparaison 157
5.2.1 Forme au voisinage du point triple et valeur numérique de la courbure 158
5.2.2 Valeur de l'angle de mouillage numérique 161
5.2.3 Retour à la physique du problème 166
5.3 Conclusion 170

6 Etude théorique de l'angle de contact dans le modèle tridimensionnel 171
6.1 Principe 171
6.2 Notations 173
6.2.1 Le domaine 173
6.2.2 Expression des opérateurs différentiels dans les coordonnées (s, ρ, φ) 176
6.3 Expression des champs de déformations 177
6.3.1 Forme générale 177
6.3.2 Un champ de vecteur particulier 179
6.4 Etude des contributions capillaires 181
6.4.1 Terme sur Γ_{LS} 181
6.4.2 Le terme sur Γ_{LG} 183

6.5 Le terme électrostatique 189
6.5.1 Etude du potentiel 189
6.5.2 Etude de la contribution électrostatique 193
6.5.3 Résumé 196
6.6 Une généralisation à des coefficients de tension superficielle non constants 196
6.7 Conclusion 198

Conclusion **199**

Bibliographie **204**

Table des figures **205**

Introduction

Suivant la surface sur laquelle est posée une goutte de liquide, celle-ci adopte différentes formes (figure 1).

FIG. 1 – Différentes situations de mouillage : plastique, fleur, feuille

L'étude de l'étalement d'un liquide sur un solide (ou un liquide) est appelée **mouillage**.

Ce phénomène est étroitement relié à la capillarité qui est l'étude des interfaces entre deux liquides non miscibles ou entre un liquide et l'air. On trouvera une excellente étude de la capillarité et du mouillage dans [dGBWQ02].

La forme qu'adopte une goutte de liquide déposée sur un solide dépend de la nature du matériau sur lequel elle est posée, mais aussi de la nature de la goutte elle même (eau, huile...). Une goutte d'eau est plus étalée lorsqu'elle a plus d'affinité avec le solide sur lequel elle est posée (matériau plutôt hydrophile), et moins étalée dans le cas contraire (matériau plutôt hydrophobe). Ainsi une goutte d'eau s'étale sur du verre propre mais pas sur du plastique (figure 2).

Réussir à contrôler le mouillage d'un liquide sur un solide est un objectif naturel et qui présente beaucoup d'intérêts au niveau industriel.

A partir des travaux de Gabriel Lippmann en électrocapillarité (1875, [Lip75]), Bruno Berge ([Ber93], [BP00]) a eu l'idée d'observer l'effet de l'introduction d'un champ électrique dans une situation de mouillage d'un liquide sur un solide isolant : c'est l'expérience d'**électromouillage**.

Il a montré qu'avec ce processus on peut augmenter l'affinité entre le liquide et le solide en jeu (figure 3).

FIG. 2 – Surface hydrophobe (*gauche*)/hydrophile (*droite*)

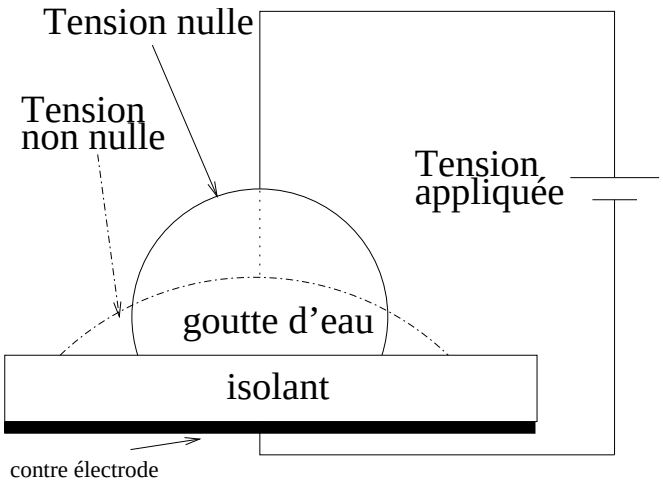


FIG. 3 – *Expérience d'électromouillage :* Une goutte d'eau est placée dans l'air sur une surface isolante. Une tension est appliquée au système entre la goutte et une contre-électrode métallique placée sous l'isolant. La goutte s'écrase sous le fait du champ électrostatique.

Ce phénomène est aujourd'hui à la base de nombreuses applications dont nous allons faire un inventaire non exhaustif.

Une des premières applications industrielles a été développée par Bruno Berge lui-même. Si on considère la goutte d'eau comme une lentille optique, l'application du potentiel électrostatique modifiant son affinité avec le solide, modifie sa forme et donc sa focale. Créée en 2002 par Bruno Berge, l'entreprise Varioptic (voir le site de la société : http ://www.varioptic.com/en/) développe des lentilles à focales variables sur ce principe. Ce procédé présente beaucoup d'avantages puisqu'il permet de créer des lentilles de taille très petite, de coût de fabrication réduit et dont on peut faire varier la focale très rapidement ([BP00]). Ces lentilles sont maintenant destinées aux marchés des caméras numériques miniatures dans les téléphones portables ou les webcams (voir figure 4).

FIG. 4 – Lentilles liquides commercialisées par Varioptic, http ://www.varioptic.com.

Une autre application de l'électromouillage consiste à remarquer qu'on peut non seulement contrôler le mouillage d'une goutte fixe, mais que l'on peut de plus faire bouger la goutte.

Ce procédé est développé en microfluidique, car il est possible d'agir sur des gouttes de taille microscopique.

Par exemple la technique d'électromouillage est intégrée dans les "laboratoires sur puces" ("lab on a chip"). Ce sont des puces permettant de retrouver les techniques d'analyses de laboratoires, mais à des échelles bien inférieures à ceux-ci. Les "laboratoires sur puces" permettent ainsi de réaliser rapidement des analyses biologiques et des opérations complexes sur de très petites quantités d'échantillons (séparation des constituants, analyse rapide de l'échantillon à l'aide d'un ordinateur). Ceci favorise ainsi le diagnostic au chevet du malade.

Beaucoup d'expérimentateurs s'intéressent maintenant au développement de ces "lab on a chip" mais aussi au développement de micropuces ("microchip") dans lesquelles on déplace une goutte de taille microscopique. On peut citer de façon non exhaustive les équipes du LETI du CEA de Grenoble (Y.Fouillet, site du LETI : http ://www-leti.cea.fr/), du LEGI de Grenoble (L.Davoust), de l'Université de Californie Los Angeles (R.Garell), de l'Université de Twente au Pays Bas (F.Mugele), tous travaillant dans ce domaine.

On est également capable de déplacer des gouttes macroscopique de l'ordre du mm. La figure 5 représente le transport d'un embryon de poisson zèbre par électromouillage par le groupe de R.Garell de l'Université de Californie de Los Angeles.

On peut enfin citer l'utilisation de cette technique pour les pixels pour papier électronique ([HF03, RCHFS04] et [Pap]) ainsi qu'une technique d'affichage digital (destiné aux baladeurs et mobiles) récemment développée par Liquavista ([Liq]), nouvelle société financée par des fonds issus de Philips.

FIG. 5 – Transport d'un embryon de poisson par électromouillage (UCLA http ://www.chem.ucla.edu/dept/Organic/Garrell/research ultralarge style1.html)

Il est clair que pour permettre le développement de telles applications, des expériences et une étude physique du phénomène d'électromouillage ont été menées. Revenons donc à ces études [1]. La figure 6 présente un schéma d'une expérience type ainsi qu'une photo présentant la goutte dans laquelle on a introduit l'électrode. Lors des études expérimentales réalisées sur une goutte d'eau dans l'air

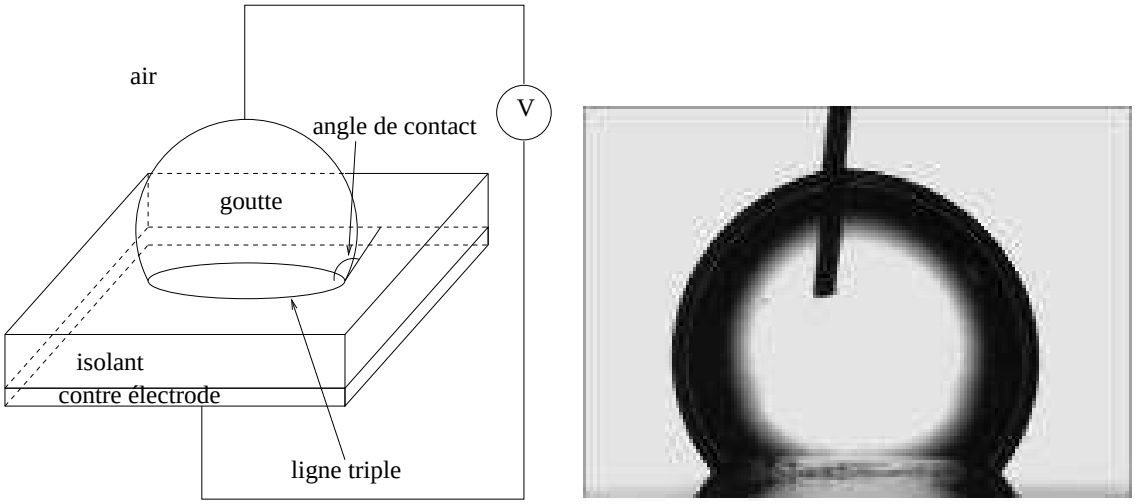


FIG. 6 – *Gauche :* Principe de l'expérience d'électromouillage, *Droite :* Photo d'expérience, image : http ://mtg.tnw.utwente.nl/research/micro/

déposée sur une surface isolante, les expérimentateurs ont constaté un étalement progressif de la goutte à mesure que le potentiel augmente.

En première approximation, un modèle physique a été proposé. Il s'agit de considérer le système goutte-isolant comme un condensateur plan. Cette approximation permet de prévoir le comportement de la goutte et prédit un étalement d'amplitude croissante, jusqu'à l'étalement complet, à mesure que le potentiel appliqué croît. Ce modèle semble correspondre aux expériences jusqu'à un certain potentiel critique au delà duquel les physiciens observent un blocage de la goutte.

[1] On pourra trouver un très intéressant récapitulatif physique de l'état de l'art en électromouillage dans [MB05].

Beaucoup d'explications ont été avancées ([QB01], [VVB99], [VP99], [PB05]...) : éjection de gouttelettes à partir d'un certain potentiel, ionisation de l'air, chargement de la surface isolante etc... Aucune ne fait encore l'unanimité à ce jour, mais beaucoup de ces tentatives d'explication ont un point en commun : elles attribuent un rôle crucial à la **divergence du champ électrique au voisinage de l'interface entre les trois phases** (la ligne triple liquide solide et gaz, voir figure 6). Il est donc nécessaire de mieux connaître la géométrie de la goutte à ce niveau.

C'est un problème auquel les physiciens de l'électromouillage s'intéressent. Ainsi dans [BHM03] on trouve des simulations numériques sur un modèle de goutte infinie dans une direction. Il en est alors extrait des conclusions sur la forme de la goutte au voisinage du point triple. Il ressort notamment de cet article un résultat, issu de raisonnements physiques, prédisant l'invariance de l'angle de contact à la ligne triple (figure 6) par rapport au potentiel appliqué. C'est un résultat fort et perturbant vu la prédiction et les observations macroscopiques des expériences. En suivant un modèle analytique approché il est possible de retrouver l'invariance de l'angle ([Bie05], 2005). Il y aurait donc une différence entre l'angle de contact observé ("macroscopique") et l'angle de contact réel (constant et "microscopique"). Pour les physiciens, ce résultat "*semble* un fait acquis" (citation M.Bienia dans sa thèse en 2005).

Du point de vue mathématique, des travaux antérieurs ont été menés par S.Bouchereau dans sa thèse en 1997 ([Bou97]). Il a établi un modèle mathématique pour l'électromouillage qu'il a également exploité numériquement en utilisant une approche optimisation de forme. Ces simulations numériques ont été améliorées en 2D par P.Chow Wing Bom au cours de son stage de Master en 2003 ([CWB03]). Ces travaux présentaient une étude globale de la forme de la goutte sous champ. Ils n'avaient pas pu mettre en évidence la forme de goutte au voisinage du point triple, ni le phénomène de saturation.

Continuer et préciser ces travaux mathématiques en s'inscrivant dans les travaux physiques fut l'idée de départ de cette thèse. Elle a consisté en l'étude mathématique de la forme d'une goutte en électromouillage et en particulier la compréhension de la géométrie au voisinage de la ligne triple.

Ainsi on commencera au **chapitre 1** par décrire précisément l'expérience d'électromouillage et la physique du problème pour motiver notre travail. Puis nous établirons un modèle mathématique décrivant le phénomène d'électromouillage dans l'espace (en suivant celui de [Bou97]). Ceci nous amènera à considérer un problème de minimisation sous contrainte, car la goutte minimise son énergie sous une contrainte de volume. En cherchant un point selle du lagrangien associé à notre problème, nous dériverons, à l'aide de la théorie de la dérivation de forme une condition nécessaire d'optimalité vérifiée par la forme de la goutte.

Le modèle du chapitre 1 est entièrement tridimensionnel. Il permet d'une part de traiter exhaustivement le cas axisymétrique (voir chapitres 2 à 5) et d'autre part d'obtenir des généralisations (voir chapitre 6). Dans le **chapitre 2**, pour le cas d'une géométrie axisymétrique, nous nous sommes tout d'abord particulièrement intéressés à la singularité du champ électrostatique au voisinage du point triple (solide, liquide, gaz). Nous montrons ensuite mathématiquement le résultat local prédit dans [BHM03] sur la valeur de l'angle de contact au point triple : celui-ci est indépendant du potentiel électrostatique appliqué.

L'étape suivante de notre travail, développée dans le **chapitre 3** consiste alors à se tourner vers les aspects numériques afin de simuler au mieux les formes de gouttes à un potentiel donné. Avec comme base un code C++ développé sur ce modèle au laboratoire Jean Kuntzmann, nous tentons d'améliorer les résultats numériques décrivant la forme de goutte en prenant en compte le comportement singulier du potentiel électrostatique dans l'approximation. L'analyse des résultats obtenus permet de conclure que ces premières approximations numériques donnent une bonne approximation macroscopique de la forme de la goutte, mais ne permettent pas de visualiser ce qui se passe au niveau du point triple.

L'objet du **chapitre 4** est donc d'écrire un modèle local qui va permettre de faire un zoom au voisinage du point triple. Ce modèle est établi à la fois par des voies physiques et mathématiques. Nous développons et étudions un algorithme pour ce nouveau modèle. Enfin nous l'implémentons dans le **chapitre 5** où nous analysons alors les résultats numériques obtenus et tentons d'en déduire les conséquences physiques.

Enfin le **chapitre 6** consiste en une généralisation du chapitre 2 au cas d'une forme de goutte tridimensionnelle. Nous montrons que la valeur de l'angle de contact à la ligne triple est indépendante du potentiel appliqué pour des coefficients de tensions de surfaces aussi bien constants que variables.

Chapitre 1

Modélisation de l'électromouilage

Ce premier chapitre est consacré principalement à la compréhension du phénomène d'électromouillage et à la mise en place d'un modèle mathématique 3D.

On commencera par donner les bases physiques nécessaires pour comprendre ce phénomène (section 1.1). Puis nous passerons à sa formalisation mathématique. Il s'agira de fournir les notations et quantités caractérisant le problème (section 1.2). En seconde partie nous verrons que le problème d'électromouillage se ramène à la minimisation de l'énergie de la goutte sous une contrainte de volume (section 1.3). Nous établirons alors une condition nécessaire d'optimalité (section 1.5) en utilisant les dérivées de forme (section 1.4).

1.1 Le problème d'électromouillage

Comme décrit en introduction, une des motivations de l'électromouillage a été de réussir à contrôler le mouillage d'un liquide sur un solide.

Nous allons donc commencer par décrire une situation de mouillage pour comprendre les phénomènes qui entrent en jeu. Puis nous passerons à l'électromouillage. La référence essentielle de cette section est le livre [dGBWQ02].

1.1.1 Mouillage

On considère une goutte de liquide mouillant un solide. Si le liquide est complètement étalé sur le solide on parlera de *mouillage total*. Dans le cas contraire, on parlera de *mouillage partiel*. On peut se demander ce qui fait que la goutte adopte une forme précise.

A l'équilibre, la surface d'un liquide peut être considérée comme une membrane tendue. C'est ce qui lui donne sa forme. La tension de cette "membrane" est nommée "**tension superficielle**" ou "**tension de surface**". Elle s'oppose aux déformations que peut subir le liquide et dépend de la nature de ce qui se

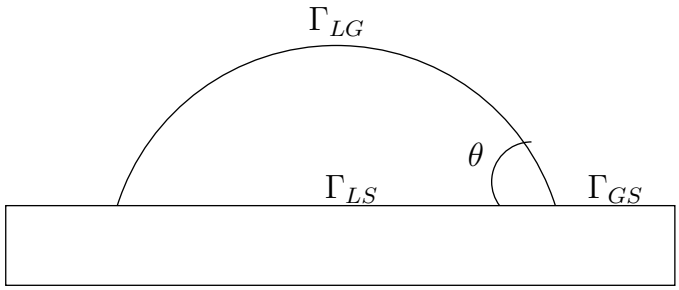


FIG. 1.1 – Mouillage d'une goutte sur un solide ; angle de contact

trouve à la surface du liquide (du gaz, un autre liquide, un solide). La tension superficielle peut donc être définie comme la tension qui existe à la surface de séparation de deux milieux.

On peut ainsi la définir entre deux fluides, entre un fluide et un solide, entre un fluide et un gaz.

La tension superficielle peut aussi être considérée comme une force par unité de longueur ou comme une énergie par unité de surface.

Si on revient à la situation de mouillage d'une goutte sur un solide, il existe trois interfaces, chacune étant caractérisée par des tensions de surface :

- Liquide-Solide à l'interface Γ_{LS}, tension de surface notée σ_{LS}
- Liquide-Gaz à l'interface Γ_{LG}, tension de surface notée σ_{LG}
- Gaz-Solide à l'interface Γ_{GS}, tension de surface notée σ_{GS}

La goutte va alors adopter la forme qui *minimise son énergie de surface à volume constant*. En l'absence de toute autre force (en particulier, on néglige la gravité), l'énergie de surface de la goutte est donnée par les seules contributions capillaires E_{cap} :

$$E_S = E_{cap} = \sigma_{LS}\text{mes}(\Gamma_{LS}) + \sigma_{LG}\text{mes}(\Gamma_{LG}) + \sigma_{GS}\text{mes}(\Gamma_{GS})$$

où pour une surface Γ, mes(Γ) désigne sa mesure. Si on considère que le solide n'est pas infini, la mesure de Γ_{LS} est égale à une constante près à la mesure de Γ_{GS}. La goutte va donc, de façon équivalente, minimiser l'énergie suivante (qu'on notera encore E_S) :

$$E_S = (\sigma_{LS} - \sigma_{GS})\text{mes}(\Gamma_{LS}) + \sigma_{LG}\text{mes}(\Gamma_{LG})$$

Dans ce cas la goutte adopte la forme d'une calotte sphérique.

La ligne d'interface liquide-solide-gaz est appelée **ligne triple** ou **ligne de contact**. La goutte est aussi caractérisée par son **angle de mouillage** ou **angle**

de contact (défini par θ sur la figure 1.1). L'expression du cosinus de cet angle est donné par la **relation de Young** (1805) ([Fin86]) :

$$\cos(\theta) = \frac{\sigma_{GS} - \sigma_{LS}}{\sigma_{LG}} \tag{1.1}$$

L'angle défini par cette relation sera appelé angle de Young et noté θ_Y.
On retiendra :

$$\boxed{\cos(\theta_Y) = \frac{\sigma_{GS} - \sigma_{LS}}{\sigma_{LG}}} \tag{1.2}$$

Remarque 1.1.1 *Si on considère que la goutte est aussi soumise à la force de gravité, la forme n'est alors plus une calotte sphérique mais s'en trouve plus "écrasée". Cependant dans le cas de très petites gouttes (en général d'un ordre inférieur ou égal au mm), on peut considérer que seules les forces de tension superficielles sont prépondérantes et donc que l'on peut négliger la force de gravité.*

Nous allons maintenant passer à la description de l'électromouillage.

1.1.2 Electromouillage

Pour contrôler le mouillage d'une goutte sur un solide, il existe une méthode qui consiste à traiter la surface (sur laquelle est posée la goutte) pour la rendre plus ou moins mouillante. Mais ceci présente le désavantage d'être une méthode non réversible. Une fois que le matériau est traité, pour changer le caractère mouillant de la goutte il faut changer le traitement qui a été effectué au solide. De plus ce traitement nécessite une modification du liquide et/ou du solide entrant en jeu. Il paraissaît donc très intéressant de mettre en oeuvre une autre méthode de contrôle du mouillage.

Gabriel Lippmann a découvert (1870, [Lip75]) le phénomène d'électrocapillarité, qui, par électrification d'un système de deux liquides non miscibles permet d'en contrôler l'interface. Suivant ce même principe, B. Berge eut l'idée d'appliquer une tension électrique dans l'expérience de mouillage sur un polymère isolant ([Ber93]). L'expérience basique de l'électromouillage est résumée sur la figure 1.2. On considère une goutte de liquide parfaitement conducteur mouillant partiellement un polymère isolant d'épaisseur e et de permittivité diélectrique ε. On applique alors une différence de potentiel V entre cette goutte et une contre-électrode placée sous le polymère.

Lorsque V est nulle, on se retrouve dans une situation de mouillage comme décrit dans le paragraphe précédent. Lorsque V est non nul, la goutte adopte la forme qui minimise son énergie de surface. L'introduction du potentiel électrostatique dans le système rajoute un terme d'énergie électrostatique E_{elec} dans

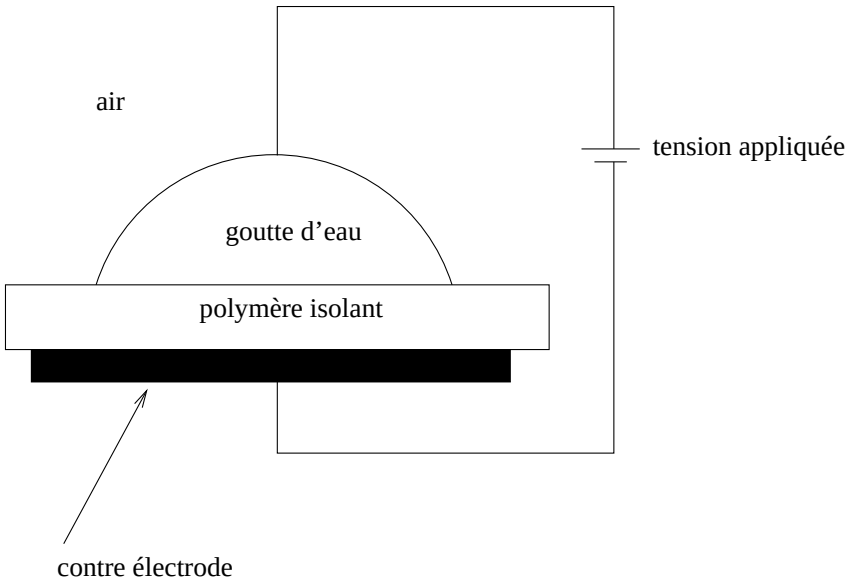


FIG. 1.2 – Expérience d'électromouillage

l'énergie de la goutte E_S. Elle est alors donnée par :

$$E_S = E_{cap} + E_{elec}$$

Remarque 1.1.2 *On suppose là aussi pour l'instant que la goutte est suffisamment petite pour négliger le terme de gravitation.*

Approximation condensateur plan Une première approximation peut être faite si l'on considère le système goutte chargée+contre-électrode comme un condensateur plan.

De ce fait on est en mesure, en considérant le condensateur comme parfait, d'exprimer l'énergie électrostatique. On a

$$E_{elec} = -\frac{1}{2}CV^2$$

avec C la capacité du condensateur équivalent donnée par

$$C = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon}{e} \text{mes}(\Gamma_{LS})$$

et ε_0 est la permittivité du vide.

Remarque 1.1.3 *Le signe moins provient du fait que le potentiel est appliqué par un générateur extérieur.*

Si on observe alors l'énergie résultante, on a :

$$\begin{aligned} E_S &= (\sigma_{LS} - \sigma_{GS})\text{mes}(\Gamma_{LS}) + \sigma_{LG}\text{mes}(\Gamma_{LG}) - \frac{1}{2}\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{e}V^2\text{mes}(\Gamma_{LS}) \\ &= (\underbrace{\sigma_{LS} - \frac{1}{2}\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{e}V^2}_{=:\sigma_{LS}(V)} - \sigma_{GS})\text{mes}(\Gamma_{LS}) + \sigma_{LG}\text{mes}(\Gamma_{LG}) \end{aligned} \tag{1.3}$$

On peut donc voir ce phénomène comme une situation de mouillage pur mais dont on ferait varier la tension superficielle σ_{LS} en fonction du voltage avec :

$$\sigma_{LS}(V) = \sigma_{LS} - \frac{1}{2}\frac{\varepsilon_0\varepsilon}{e}V^2$$

Lorsque la goutte est soumise au potentiel V, elle a alors la forme d'une calotte sphérique. On peut définir l'**angle de contact** $\theta(V)$ comme dans la situation de mouillage : il dépend du potentiel V et il est donné par la relation dite de Young-Laplace que l'on appellera aussi relation de Lippmann :

$$\cos(\theta(V)) = \frac{\sigma_{GS} - \sigma_{LS}(V)}{\sigma_{LG}} = \cos(\theta_Y) + \frac{\varepsilon_0\varepsilon}{2e\sigma_{LG}}V^2 \tag{1.4}$$

Cette formule prédit un étalement croissant de la goutte à mesure que le potentiel croît, jusqu'à atteindre une situation de mouillage total lorsque V est suffisamment grand.

Cette approximation a aussi son domaine de validité. Elle n'est plus valide si $\cos(\theta_Y) + \frac{\varepsilon_0\varepsilon}{2e\sigma_{LG}}V^2 > 1$.

La suite logique est de voir ce que donne cette approximation au niveau des expériences physiques.

Expériences physiques Des expériences ont été menées. Elles mettent en avant la concordance des mesures avec la théorie du condensateur plan jusqu'à une valeur critique du potentiel au delà de laquelle la goutte semble bloquée et n'évolue plus : c'est ce qu'on appelle le phénomène de **saturation**.

Pour de très grands potentiels (après saturation), les physiciens ont aussi observé une instabilité au niveau de la ligne de mouillage, la goutte éjectant de fines gouttelettes d'eau. ([QB01], [VVB99], [Bie05]...)

L'approximation condensateur plan semble être valide seulement jusqu'à un potentiel critique. Du fait de la forme de la goutte, la charge est infinie à la ligne triple. Ce caractère du champ électrostatique n'est pas pris en compte dans l'approximation condensateur plan.

Comme précisé dans l'introduction, la majorité des tentatives d'explication de ce phénomène de saturation attribue un grand rôle à cette singularité du champ

au voisinage de la ligne triple.

Il nous faut donc pour espérer décrire correctement le phénomène calculer effectivement le potentiel électrostatique sans faire l'approximation condensateur plan.

Le but de la section suivante est d'écrire mathématiquement un modèle sans faire d'approximation sur le potentiel électrostatique. La capacité correspondante sera alors exprimée en fonction du gradient du potentiel électrostatique. Concrètement nous cherchons à exprimer l'énergie d'une forme de goutte à potentiel donné.

1.2 Description du problème mathématique

Nous étudions l'évolution de la forme d'une goutte de liquide sur un polymère isolant lorsqu'elle est soumise à une différence de potentiel. Nous allons écrire un modèle mathématique 3D (que l'on retrouve dans [Bou97]) qui permettra d'examiner aussi bien le cas axisymétrique que d'envisager des développements à des formes non symétriques.

1.2.1 Dispositif expérimental

On se place dans un repère orthonormé de $\mathbb{R}^3$. La face supérieure du film polymère, sur lequel est posée la goutte est dans le plan (Oxy).

On utilisera les indices L,S et G pour désigner les domaines liquide, solide et gazeux. Un couple d'indice LS,LG,... sera relatif à une interaction liquide-solide, liquide-gaz,...

On notera Ω_e le domaine borné dans lequel se situe le dispositif expérimental et seront menés les calculs.

Notations :

On désignera par :

Ω_L le domaine de $\mathbb{R}^3$ occupé par le liquide dans l'espace et Γ_L son bord.

Γ_{LS} l'interface liquide-solide.

Γ_{LG} l'interface liquide-gaz.

Ω_G le domaine de $\mathbb{R}^3$ occupé par le gaz et Γ_G son bord.

Ω_S le domaine de $\mathbb{R}^3$ occupé par le solide et Γ_S son bord.

Γ_0 le bord de Ω_e où la contre-électrode s'applique.

Γ_{eG} et Γ_{eS} les frontières extérieures de Ω_e

$\Omega = \Omega_e \setminus \overline{\Omega}_L$

ε_G, ε_S et ε_L les permittivités respectives de Ω_G, Ω_S et Ω_L.

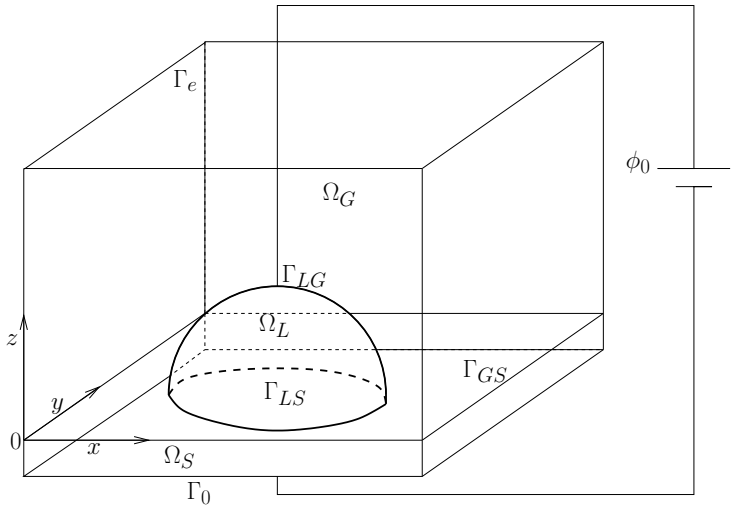


FIG. 1.3 – Domaine 3D

$\overrightarrow{N_i}$, i valant $L, G, S, LS, LG, GS...$, les normales sortantes respectives aux surfaces Γ_i.

Ω_S, Ω_G, Ω_L, Ω sont donc inclus dans Ω_e.

L'interface solide-liquide-gaz sera appelée **ligne triple**.

Remarque 1.2.1 *Dans la suite on notera ϕ_0, plutôt que V, la différence de potentiel appliquée.*

1.2.2 Le potentiel électrostatique

L'application d'une différence de potentiel ϕ_0 entre la contre-électrode Γ_0 et la goutte Ω_L crée un potentiel électrostatique dans tout l'espace. La goutte est supposée parfaitement conductrice ; le potentiel est donc constant dans Ω_L. Mais la répartition des charges ne l'est pas : elle dépend de la forme de la goutte.
On notera ϕ^Ω le potentiel électrique créé hors de la goutte i.e. sur $\Omega_e \setminus \overline{\Omega}_L$ et ϕ^Ω_G sa restriction à Ω_G, ϕ^Ω_S sa restriction à Ω_S.
On négligera les effets électrostatiques loin de la goutte.

ϕ^Ω est alors solution du système d'équations aux dérivées partielles :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\varepsilon_i \nabla \phi^\Omega_i) = 0 \quad & \text{dans } \Omega_i, \quad i = G, S. \\ \phi^\Omega_G = \phi_0 \quad & \text{sur } \Gamma_{LG} \\ \phi^\Omega_S = \phi_0 \quad & \text{sur } \Gamma_{LS} \\ \phi^\Omega_S = 0 \quad & \text{sur } \Gamma_0 \end{aligned}$$

A l'interface solide-gaz, on a les relations de transmission suivantes :

$$\begin{array}{ll} \phi_G^\Omega = \phi_S^\Omega & \text{sur } \Gamma_{SG} \\ \varepsilon_G \nabla \phi_G^\Omega . \overrightarrow{N_G} = -\varepsilon_S \nabla \phi_S^\Omega . \overrightarrow{N_S} & \text{sur } \Gamma_{SG} \end{array}$$

sur la frontière artificielle, on impose :

$$\varepsilon_i \nabla \phi_i^\Omega . \overrightarrow{N_i} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{ei}, \quad i = G, S.$$

Ecrivons ce système sous forme faible. On note $H^1(\Omega)$ l'espace de Sobolev classique et on pose

$$H_0(\Omega) = \{\psi \in H^1(\Omega); \psi = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \cup \Gamma_{LS} \cup \Gamma_{LG}\} \tag{1.5}$$

$$H(\Omega) = \{\psi \in H^1(\Omega); \psi = 0 \text{ sur } \Gamma_0,\ \psi = \phi_0 \text{ sur } \Gamma_{LS} \cup \Gamma_{LG}\} \tag{1.6}$$

En notant ε l'application définie sur Ω par

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_G & \text{sur } \Omega_G \\ \varepsilon_S & \text{sur } \Omega_S \end{cases}$$

la formulation faible s'écrit :

$$(FV)_\Omega \begin{cases} \text{trouver } \phi^\Omega \in H(\Omega) \text{ tel que} \\ \forall \psi \in H_0(\Omega), \quad \displaystyle\int_\Omega \varepsilon \left(\nabla \phi^\Omega \,.\, \nabla \psi\right) d\Omega = 0 \end{cases}$$

où $(\,.\,.\,)$ est le produit scalaire euclidien de $\mathbb{R}^3$.

Grâce au théorème de Lax-Milgram, on peut montrer que le problème admet une unique solution $\phi^\Omega \in H(\Omega)$.

Dans la suite on notera

$$a_\Omega(\phi, \psi) = \int_\Omega \varepsilon \left(\nabla \phi \,.\, \nabla \psi\right) d\Omega \tag{1.7}$$

1.2.3 L'énergie de la goutte

Le potentiel $\phi_0 \geq 0$ étant donné, l'équilibre de la goutte Ω_L correspond à un minimum de l'énergie du système. On prendra en compte les énergies de tension superficielle, gravitationnelle et électrostatique. On notera σ_{LS}, σ_{GS} et σ_{LG} les tensions de surface relatives aux différentes interfaces. Pour une goutte Ω_L et un potentiel ϕ_0, l'énergie du système est :

$$\mathcal{E}(\Omega_L, \phi_0) = \underbrace{\rho g \int_{\Omega_L} z d\Omega}_{\text{Energie potentielle}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{LG}} \sigma_{LG} d\sigma + \int_{\Gamma_{LS}} \sigma_{LS} d\sigma + \int_{\Gamma_{GS}} \sigma_{GS} d\sigma}_{\text{Energie capillaire}} - \underbrace{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon ||\nabla \phi^{\Omega}||^2 d\Omega}_{\text{Energie électrostatique}}$$

où $||.||$ désigne la norme euclidienne dans $\mathbb{R}^3$.

Remarque 1.2.2 *Le terme* $\frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon ||\nabla \phi^{\Omega}||^2 d\Omega$ *est donc l'équivalent du terme* $\frac{1}{2} C \phi_0^2$ *donné dans le cas du condensateur plan.*

A une constante additive près, on a :

$$\mathcal{E}(\Omega_L, \phi_0) = \rho g \int_{\Omega_L} z d\Omega + \int_{\Gamma_{LG}} \sigma_{LG} d\sigma + \int_{\Gamma_{LS}} (\sigma_{LS} - \sigma_{GS}) d\sigma - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon ||\nabla \phi^{\Omega}||^2 d\Omega$$

où l'énergie électrostatique est affectée du signe moins puisque cette énergie est imposée par un générateur extérieur. Cette intégrale dépend de Ω_L puisque $\Omega = \Omega_e \setminus \overline{\Omega_L}$ et ϕ^{Ω} est la solution de la formulation variationnelle $(FV)_{\Omega}$.

1.3 La recherche de formes optimales, dérivation de forme

On soumet la goutte Ω_L de volume *vol* à une différence de potentiel ϕ_0. La forme optimale Ω_L^* de la goutte correspond à un minimum de l'énergie :

$$\mathcal{E}(\Omega_L^*, \phi_0) = \min_{\{\Omega_L ; \text{volume}(\Omega_L) = vol\}} \mathcal{E}(\Omega_L, \phi_0)$$

L'évaluation de la fonction $\mathcal{E}(\Omega_L, \phi_0)$ demande la résolution d'un problème d'équations aux dérivées partielles sur le domaine $\Omega = \Omega_e \setminus \overline{\Omega_L}$. Ω_S est fixé mais Ω_G et donc Ω dépendent de Ω_L, c'est une difficulté majeure du problème.

Il est clair que se donner Ω_L est équivalent à se donner un domaine Ω, et dans la suite **on prendra Ω comme variable**.

En introduisant les paramètres

$$\alpha = \frac{\rho g}{\sigma_{LG}}, \quad \mu = \frac{\sigma_{LS} - \sigma_{GS}}{\sigma_{LG}}, \quad \delta = \frac{1}{\sigma_{LG}} \tag{1.8}$$

il est donc équivalent de minimiser

$$J(\Omega) = \alpha \int_{\Omega_L} z d\Omega + \mu \int_{\Gamma_{LS}} d\sigma + \int_{\Gamma_{LG}} d\sigma - \frac{\delta}{2} \int_{\Omega} \varepsilon ||\nabla \phi^{\Omega}||^2 d\Omega$$

En utilisant que $\Omega = \Omega_e \setminus \overline{\Omega_L}$, il est équivalent de minimiser la fonctionnelle que l'on notera également J :

$$J(\Omega) = -\alpha \int_{\Omega} z d\Omega + \mu \int_{\Gamma_{LS}} d\sigma + \int_{\Gamma_{LG}} d\sigma - \frac{\delta}{2} \int_{\Omega} \varepsilon ||\nabla \phi^{\Omega}||^2 d\Omega \tag{1.9}$$

On cherchera à minimiser J sur un ensemble de domaines admissibles obtenus par de petites déformations régulières d'un domaine de référence. On précisera ce point au paragraphe 1.3.1.

L'objectif est ensuite de déterminer une condition nécessaire d'optimalité pour un domaine Ω. Pour cela nous allons chercher à donner un sens à la dérivée de la fonctionnelle J. La principale difficulté étant que l'on cherche à dériver sur un ensemble de domaines qui n'a pas la structure habituelle requise pour définir une dérivée au sens usuel.

Pour obtenir une condition nécessaire d'optimalité, il faut tout d'abord préciser la classe des domaines sur lesquels on minimise.

1.3.1 Domaines admissibles

On aura besoin de donner un sens à des formulations intégrales sur des domaines ou des bords de domaines. On travaillera donc avec des ouverts Ω à bord lipschitzien. Pour cela on choisit de prendre des déformations d'ouverts à bord lipschitzien, obtenues par des applications suffisamment régulières, de façon à conserver le caractère lipschitzien des domaines [Sim91].

Remarque 1.3.1 *Plus précisément, on travaillera avec des ouverts du type décrit précédemment et dont les parties de la frontière sont régulières par morceaux.*

On note

$$\mathcal{C}^1(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3) := \left\{ U_{/\overline{\Omega}}; U \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \right\}$$

que l'on munit de la norme infinie

$$||U||_\infty = \sup_{x \in \overline{\Omega}} |U(x)| + \sup_{x \in \overline{\Omega}} |DU(x)|$$

où DU est la différentielle de U.

On introduit l'ensemble des déplacements admissibles

$$\mathcal{U}(\overline{\Omega},\mathbb{R}^3) = \left\{U \in \mathcal{C}^1(\overline{\Omega},\mathbb{R}^3); ||U||_\infty < 1, U_{z/\Omega_S} \equiv 0 \text{ et } U_{/\Gamma_e} \equiv 0\right\}$$

Enfin pour $U \in \mathcal{C}^1(\overline{\Omega},\mathbb{R}^3)$, on notera $\Omega + U$ l'ensemble $(Id+U)(\Omega)$.
Soit Ω^0 un domaine fixé de référence du type décrit dans le paragraphe 1.2.1.
On définit

$$\mathcal{D}_{ad} := \left\{\Omega^0 + U, U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^0},\mathbb{R}^3)\right\}$$

On cherche donc une condition nécessaire d'optimalité sur la solution du problème suivant

$$(P)\begin{cases} \text{Trouver } \Omega^* \in \mathcal{D}_{ad} \text{ tel que} \\ \\ J(\Omega^*) = \min\limits_{\{\Omega\in\mathcal{D}_{ad}; C(\Omega)=0\}} J(\Omega) \end{cases}$$

où $C(\Omega)$ traduit la contrainte de volume :
$C(\Omega) = \text{volume}(\Omega_e \setminus \overline{\Omega}) - vol = \text{volume}(\Omega_L) - vol$.
On admettra l'existence d'une solution à ce problème.

Nous allons maintenant donner un sens à la dérivation de la fonction J par rapport à un domaine Ω grâce à la notion de dérivée de forme. C'est une notion classique dont on pourra trouver le détail dans [HP05, MS76]. On en donnera ici une version plus faible mais qui nous suffit pour traiter notre problème.

1.3.2 Notion de dérivée directionnelle.

Définition 1.3.2 *Une fonction J définie sur $\mathcal{D}_{ad}$ et à valeurs dans $\mathbb{R}$ admet une dérivée directionnelle en un point Ω de $\mathcal{D}_{ad}$ dans une direction $U \in \mathcal{U}$ si la fonction $J^* : W \mapsto J((I+W)(\Omega))$ définie sur $\mathcal{U}(\bar{\Omega},\mathbb{R}^3)$ à valeurs dans $\mathbb{R}$ admet une dérivée directionnelle au point 0 dans la direction U (au sens usuel de $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^3)$). La dérivée directionnelle de J en Ω dans la direction U sera notée :*

$$DJ(\Omega).U := DJ^*(0).U$$

Nous allons maintenant pouvoir écrire une condition nécessaire d'optimalité sur J.

Pour $\Omega \in \mathcal{D}_{ad}$, et $\lambda \in \mathbb{R}$, on note $\mathcal{L}(\Omega,\lambda) = J(\Omega) - \lambda C(\Omega)$ le lagrangien associé à notre problème d'optimisation sous contrainte.

Chercher une solution Ω^* du problème (P) nous amène à trouver un point selle de $\mathcal{L}$.

Nous allons chercher une condition nécessaire pour qu'un couple $(\Omega^*,\lambda^*) \in \mathcal{D}_{ad} \times \mathbb{R}$ soit un point selle de $\mathcal{L}$.

1.3.3 Condition nécessaire d'optimalité

Proposition 1.3.3 *Si (Ω^*, λ^*) est un point selle de $\mathcal{L}$, et si J et C admettent une dérivée directionnelle au point Ω^* dans la direction $U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3)$, alors*

$$DJ(\Omega^*).U = \lambda^* DC(\Omega^*).U$$

Démonstration :
(Ω^*, λ^*) point selle de $\mathcal{L} \Leftrightarrow \forall \Omega \in \mathcal{D}_{ad}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R},$

$$\mathcal{L}(\Omega^*, \lambda) \leq \mathcal{L}(\Omega^*, \lambda^*) \leq \mathcal{L}(\Omega, \lambda^*)$$

Soit $U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3)$. Pour $t \in [-1, 1]$, tU est un élément de $\mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3)$. Et donc l'ensemble $\Omega^* + tU$ est encore un élément de $\mathcal{D}_{ad}$.
On a donc :

$$\mathcal{L}(\Omega^*, \lambda^*) \leq \mathcal{L}(\Omega^* + tU, \lambda^*), \quad \forall t \in [-1, 1]$$

En explicitant la valeur de $\mathcal{L}$, on obtient :

$$J(\Omega^*) - \lambda^* C(\Omega^*) - J(\Omega^* + tU) + \lambda^* C(\Omega^* + tU) \leq 0, \quad \forall t \in [-1, 1]$$

En reprenant les notations de la définition, on en déduit que :

$$J^*(tU) - J^*(0) - \lambda^* \left[C^*(tU) - C^*(0)\right] \geq 0, \quad \forall t \in [-1, 1]$$

En divisant par $t > 0$ et en faisant tendre t vers 0, on obtient :

$$DJ^*(0).U - \lambda^* DC^*(0).U \geq 0$$

En procédant de même avec $t < 0$, on en conclut que

$$\forall U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3), \quad DJ^*(0).U - \lambda^* DC^*(0).U = 0$$

Et donc par définition même de la dérivée de forme :

$$\forall U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3), \quad DJ(\Omega^*).U - \lambda^* DC(\Omega^*).U = 0$$

■

Nous allons donc dans la suite chercher, si elles existent, les expressions des dérivées de J et C par rapport à un domaine.

1.4 Dérivation de l'énergie par rapport à la forme

L'énergie

$$J(\Omega) = \underbrace{-\alpha \int_\Omega z d\Omega}_{J_{grav}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{LG}} d\sigma}_{J_{LG}} + \underbrace{\mu \int_{\Gamma_{LS}} d\sigma}_{J_{LS}} \underbrace{-\frac{\delta}{2} \int_\Omega \varepsilon ||\nabla \phi^\Omega||^2 d\Omega}_{J_{elec}} \tag{1.10}$$

est la somme des quatre termes $J_{grav}, J_{LG}, J_{LS}, J_{elec}$.

La contrainte de volume est, quant à elle, donnée par :

$$C(\Omega) = \mathrm{Vol}(\Omega_e \setminus \overline{\Omega}) - vol \tag{1.11}$$

Les trois premiers termes de J ainsi que C sont des intégrales par rapport à une surface ou à un domaine d'une fonction indépendante de ce même domaine. On dispose de résultats classiques sur la dérivation par rapport à un domaine de tels termes (voir par exemple [MS76]). On n'entrera donc pas dans les détails de la dérivation de ces termes. On s'attardera plus sur le terme singulier de notre problème : la contribution électrostatique J_{elec}.

1.4.1 Dérivées des énergies gravitationnelle, capillaire et du terme de contrainte de volume

Soit $\Omega \in \mathcal{D}_{ad}$ et $U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)$.

- La dérivée de J_{grav} au point Ω et dans la direction U s'obtient en suivant la définition 1.3.2 et les résultats de [MS76] et [HP05].
  On obtient

$$DJ_{grav}(\Omega).U = DJ^*_{grav}(0).U = \alpha \int_\Omega U_z d\Omega + \alpha \int_\Omega z \mathrm{div}(U) d\Omega \tag{1.12}$$

- On peut de la même façon exprimer la différentielle de C qui s'apparente au terme J_{grav}.

$$DC(\Omega).U = -\int_\Omega \mathrm{div}(U) d\Omega \tag{1.13}$$

- Les dérivées des termes J_{LG} et J_{LS} s'obtiennent de manière analogue en utilisant un résultat de dérivation par rapport à une surface :

$$DJ_{LG}(\Omega).U = \int_{\Gamma_{LG}} \mathrm{div}(U) d\sigma - \int_{\Gamma_{LG}} \left(\overrightarrow{N_{LG}} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N_{LG}} \right) d\sigma \tag{1.14}$$

$$DJ_{LS}(\Omega).U = \mu \int_{\Gamma_{LS}} \mathrm{div}(U) d\sigma - \mu \int_{\Gamma_{LS}} \left(\overrightarrow{N_{LS}} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N_{LS}} \right) d\sigma \tag{1.15}$$

où ${}^tDU$ est la transposée de la matrice Jacobienne de U

1.4.2 Dérivée de l'énergie électrostatique

Nous allons étudier plus en détail le terme électrostatique J_{elec} ([MW05]).
Soit $W \in \mathcal{U}(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)$, par la définition 1.3.2

$$J^*_{elec}(W) = -\frac{\delta}{2} \int_{\Omega+W} \varepsilon \left|\left|\nabla \phi^{\Omega+W}\right|\right|^2 d\Omega$$

Posons pour alléger les notations $F := Id + W$. Comme $W \in \mathcal{U}(\overline{\Omega}, \mathbb{R}^3)$, F est inversible.

On considère les deux problèmes variationnels transportés suivants :

$$(FV)_{F(\Omega)} \begin{cases} \text{Trouver } \phi^{F(\Omega)} \in H(F(\Omega)) \text{ tel que} \\ \forall \psi \in H_0(F(\Omega)), \quad a_{F(\Omega)}(\phi^{F(\Omega)}, \psi) = \displaystyle\int_{F(\Omega)} \varepsilon \left(\nabla \phi^{F(\Omega)} \cdot \nabla \psi\right) d\Omega = 0 \end{cases}$$

$$(FV)^T_{\Omega} \begin{cases} \text{Trouver } \phi^F \in H(\Omega) \text{ tel que} \\ \forall \psi \in H_0(\Omega), \quad \displaystyle\int_{\Omega} \varepsilon \left({}^t(DF^{-1} \circ F)\nabla \phi^F \cdot {}^t(DF^{-1} \circ F)\nabla \psi\right) |\det(DF)| d\Omega = 0 \end{cases}$$

Les problèmes $(FV)_{F(\Omega)}$ et $(FV)^T_{\Omega}$ admettent chacun une solution unique.
L'application $T_0 : \psi \in H_0(F(\Omega)) \mapsto \psi \circ F \in H_0(\Omega)$ est un isomorphisme de $H_0(F(\Omega))$ dans $H_0(\Omega)$. On peut de même définir T de $H(F(\Omega))$ dans $H(\Omega)$, car ϕ_0 est une constante ; T est aussi un isomorphisme.
Ces deux problèmes sont donc équivalents.

On notera dans la suite, pour $\phi \in H(\Omega)$ et $\psi \in H_0(\Omega)$

$$\tilde{a}(F, \phi, \psi) := \int_{\Omega} \varepsilon \left({}^t(DF^{-1} \circ F)\nabla \phi \cdot {}^t(DF^{-1} \circ F)\nabla \psi\right) |\det(DF)| d\Omega \qquad (1.16)$$

Par unicité des solutions aux deux problèmes variationnels, on a

$$\phi^F = \phi^{F(\Omega)} \circ F$$

Et donc

$$\int_{F(\Omega)} \varepsilon \left|\left|\nabla \phi^{F(\Omega)}\right|\right|^2 d\Omega = \int_{\Omega} \varepsilon \left|\left|{}^t(DF^{-1} \circ F)\nabla \phi^F\right|\right|^2 |\det(DF)| d\Omega$$

Posons alors pour $\phi \in H(\Omega)$,

$$\tilde{J}_{elec}(F,\phi) = -\frac{\delta}{2}\int_\Omega \varepsilon \left|\left|{}^t(DF^{-1}\circ F)\nabla\phi\right|\right|^2 |\det(DF)| d\Omega \tag{1.17}$$

On a en quelque sorte découplé les variables F et ϕ^F dans l'expression de J^*_{elec}.

On peut montrer avec le théorème des fonctions implicites que $\tilde{J}_{elec}$ est $\mathcal{C}^1$ et que $W \mapsto \phi^{Id+W}$ est différentiable ([Sim91]). Un résultat classique de contrôle optimal ([MS76] V-10) nous permet alors d'écrire

$$\forall U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega},\mathbb{R}^3), \quad DJ^*_{elec}(0).U = D_F\tilde{J}_{elec}(Id,\phi^\Omega).U - D_F\tilde{a}(Id,\phi^\Omega,p^\Omega).U \tag{1.18}$$

où la notation D_F désigne la différentielle partielle par rapport à la variable F de $\tilde{J}_{elec}$ et $\tilde{a}$, et $p^\Omega \in H_0(\Omega)$ est l'état adjoint solution de l'équation

$$\forall \tilde{\phi} \in H_0(\Omega), \quad D_\phi\tilde{a}(Id,\phi^\Omega,p^\Omega).\tilde{\phi} = D_\phi\tilde{J}_{elec}(Id,\phi^\Omega).\tilde{\phi} \tag{1.19}$$

où la notation D_ϕ désigne la différentielle partielle par rapport à la variable ϕ.

La différentielle de (1.16) et (1.17) par rapport à ϕ lorsque $F = Id$ donne :

$$\forall \tilde{\phi} \in H_0(\Omega), \quad D_\phi\tilde{a}(Id,\phi^\Omega,p^\Omega).\tilde{\phi} = a_\Omega(p^\Omega,\tilde{\phi}) \tag{1.20}$$

et

$$D_\phi\tilde{J}_{elec}(Id,\phi^\Omega).\tilde{\phi} = -\delta a_\Omega(\phi^\Omega,\tilde{\phi}) \tag{1.21}$$

ϕ^Ω étant solution du problème variationnel $(FV)_\Omega$, on déduit de (1.19), (1.20), et (1.21) que $\forall\tilde{\phi} \in H_0(\Omega)$, $a_\Omega(p^\Omega,\tilde{\phi}) = 0$.

Et donc comme $p^\Omega \in H_0(\Omega)$,

$$p^\Omega = 0$$

(1.18) devient alors

$$\forall U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega},\mathbb{R}^3), \quad DJ^*_{elec}(0).U = D_F\tilde{J}_{elec}(Id,\phi^\Omega).U$$

On est ramené à une intégrale sur un domaine fixe et en utilisant les formules de différentiation sous le signe intégral ([Sim91]), on obtient finalement, comme $DJ_{elec}(\Omega).U = DJ^*_{elec}(0).U$:

$$\boxed{DJ_{elec}(\Omega).U = -\frac{\delta}{2}\int_\Omega \varepsilon||\nabla\phi^\Omega||^2\mathrm{div}(U)d\Omega + \frac{\delta}{2}\int_\Omega \varepsilon\left(({}^tDU + DU)\nabla\phi^\Omega \cdot \nabla\phi^\Omega\right)d\Omega} \tag{1.22}$$

Remarque 1.4.1 *En supposant plus de régularité sur le domaine Ω, il est possible d'écrire le terme de dérivée électrostatique comme une intégrale sur le bord de Ω.*

1.5 Formulation de la condition nécessaire d'optimalité

Par la proposition 1.3.3, si un couple (Ω^*, λ^*) de $\mathcal{D}_{ad} \times \mathbb{R}$ est un point selle de $\mathcal{L}$ alors

$$\begin{aligned} &\forall U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3), \\ &\quad DJ_{grav}(\Omega^*).U + DJ_{LG}(\Omega^*).U + DJ_{LS}(\Omega^*).U + DJ_{elec}(\Omega^*).U = \lambda^* DC(\Omega^*).U \end{aligned} \tag{1.23}$$

où les termes utilisés sont définis en (1.12), (1.13), (1.14), (1.15) et (1.22).

La formulation que l'on obtient ici est vérifiée pour tout domaine optimal 3D de $\mathcal{D}_{ad}$. Elle peut être utilisée pour des simulations numériques en particulier à fort potentiel ϕ_0.

Nous allons au chapitre suivant en donner une première application pour calculer l'angle de contact pour des formes à géométrie axisymétrique.

1.6 Conclusion

Ce premier chapitre a permis la compréhension du phénomène d'électromouillage. Nous avons établi un modèle mathématique que l'on retrouve dans [Bou97]. Ce modèle est complètement tridimensionnel et consiste en la minimisation de l'énergie sous une contrainte de volume. La notion de dérivée de forme nous a alors permis d'en extraire une condition nécessaire d'optimalité. Dans ce chapitre nous ne nous sommes pas penchés sur les problèmes d'existence et unicité de la solution du problème de minimisation ni sur une éventuelle condition suffisante d'ordre deux car ce n'était pas l'optique de ce travail, mais ce pourrait être l'objet de travaux ultérieurs intéressants. On pourra trouver des études de problèmes du même type dans [HP05] et on supposera dans la suite l'existence d'un tel domaine optimal.

Nous allons maintenant exploiter ce modèle dans le cas d'une géométrie axisymétrique.

Chapitre 2

Le cas axisymétrique

Le chapitre précédent a permis de mettre en place un modèle mathématique pour l'électromouillage. Dans ce chapitre nous étudions un cas particulier fournissant déjà beaucoup d'informations : le cas d'une géométrie axisymétrique. Cela signifie que nous supposons que la goutte recherchée est invariante par rotation autour de l'axe (Oz) (en gardant les notations du chapitre 1, voir figure 1.3).

Ainsi il suffit seulement d'observer une section 2D de la goutte. La ligne triple devient alors un **point triple** liquide-solide-gaz et nous pouvons définir un **angle de contact** entre le liquide et le solide au point triple.

Le but de ce chapitre est de poser le problème de l'électromouillage en axisymétrique et de démontrer un résultat essentiel concernant l'angle de contact de la goutte.

La section 2.1 permettra de décrire le domaine, les différents espaces considérés et le potentiel électrostatique en intégrant le caractère axisymétrique.

Ensuite en section 2.2 nous étudierons plus précisément la régularité du potentiel. En effet il est essentiel de remarquer que, le potentiel étant calculé dans un domaine comportant un coin rentrant (du fait de la ligne triple), il n'est pas aussi régulier qu'on pourrait l'espérer.

Enfin, après avoir écrit la condition nécessaire d'optimalité en y intégrant le caractère axisymétrique, nous l'utiliserons pour montrer, par un choix judicieux de déformations, que **la valeur de l'angle de contact est indépendante du potentiel appliqué**. Sa valeur est donc celle de l'angle de contact à potentiel nul, i.e. l'angle de Young.

2.1 Passage en axisymétrique

Le fait de considérer une goutte à géométrie axisymétrique nous permet de ramener toute notre étude tridimensionnelle à une étude bidimensionnelle. Toutes

les quantités devenant elles aussi axisymétriques, nous pourrons nous contenter d'étudier leur analogue bidimensionnel issu du passage en axisymétrique.

2.1.1 Les notations axisymétriques

2.1.1.1 Le domaine

Supposons que le domaine Ω de $\mathbb{R}^3$ soit axisymétrique. On choisira d'exprimer un point de l'espace en coordonnées cylindriques.

On se place alors dans un repère orthonormé de $\mathbb{R}^2$ et on note ω le domaine 2D associé à Ω en 3D. On définit de façon analogue ω_L, ω_S, ω_G, ω_e, γ_{LS}, γ_{LG}, γ_{GS}, γ_e.
Ils sont définis comme sur la figure 2.1 :

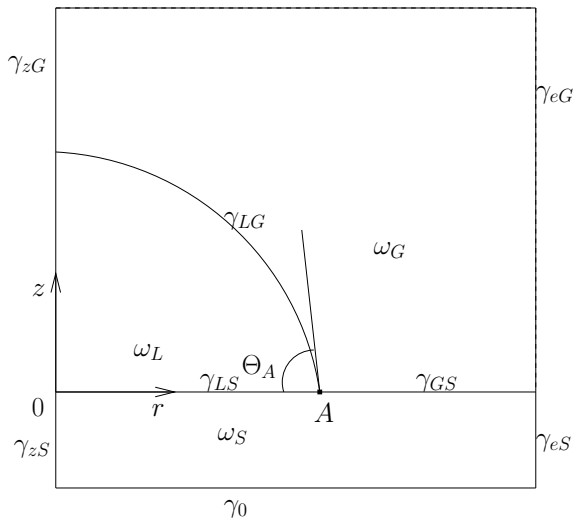


FIG. 2.1 – Domaine 2D issu du domaine 3D axisymétrique

γ_e est constitué des frontières extérieures solide γ_{eS} et gaz γ_{eG}. γ_z est constitué des frontières γ_{zG} et γ_{zS} sur l'axe (Oz).

On notera A le point triple et Θ_A l'angle de contact.

(r, θ, z) représenteront les coordonnées cylindriques de Ω centrées en O.

$(\,.\,.\,.)$ désignera, suivant les vecteurs en jeu, le produit scalaire de $\mathbb{R}^3$ ou de $\mathbb{R}^2$.

2.1.1.2 Espaces et quantités axisymétriques

On définit pour ω domaine de $\mathbb{R}^2$ associé à un domaine Ω de $\mathbb{R}^3$ axisymétrique les espaces analogues à ceux définis pour le domaine Ω :

- $$\mathcal{C}^1(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2) := \left\{ u_{/\overline{\omega}}; u \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2) \right\}$$

  que l'on munit de la norme infinie

  $$||u||_\infty = \sup_{x \in \overline{\omega}} |u(x)| + \sup_{x \in \overline{\omega}} |Du(x)|$$

  où Du est la différentielle de u.

- $\mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2) = \left\{ u \in \mathcal{C}^1(\overline{\omega}, \mathbb{R}^2); ||u||_\infty < 1, u_{z/\omega_S} \equiv 0,\ u_{/\gamma_e} \equiv 0,\ \text{et}\ (u_r)_{/\gamma_z} \equiv 0 \right\}$ où (u_r, u_z) sont les composantes de u dans $\mathbb{R}^2$.

Plaçons nous au minimum d'énergie Ω^* et considérons ω^* le domaine 2D associé.
Choisissons une direction de déformation $U \in \mathcal{U}(\overline{\Omega^*}, \mathbb{R}^3)$ invariante par rotation d'axe (Oz).

On peut trouver

$$\begin{array}{rrl} u : & \overline{\omega^*} \to & \mathbb{R}^2 \\ & (r,z) \mapsto & (u_r(r,z), u_z(r,z)) \\ \text{telle que} & u \in \mathcal{U}(\overline{\omega^*}, \mathbb{R}^2) & \text{et si} \\ \check{U} : & \overline{\Omega^*} \to & \mathbb{R}^3 \text{ (muni des coordonnées cartésiennes)} \\ & (r,\theta,z) \mapsto & (u_r(r,z)\cos(\theta), u_r(r,z)\sin(\theta), u_z(r,z)) \end{array}$$

alors

$$U(r\cos(\theta), r\sin(\theta), z) = \check{U}(r, \theta, z) \tag{2.1}$$

De même, on a des relations et notations analogues pour les normales sortantes aux différents bords. Lorsqu'il n'y a pas ambiguïté sur la surface γ (resp. Γ) considérée, on notera $\overrightarrow{n}$ (resp $\overrightarrow{N}$) pour $\overrightarrow{n_\gamma}$ (resp $\overrightarrow{N_\Gamma}$).
Il existe

$$\begin{array}{rrl} \overrightarrow{n}: & \mathbb{R}^2 \to & \mathbb{R}^2 \\ & (r,z) \mapsto & (n_r(r,z), n_z(r,z)) \end{array}$$

tel que si

$$\begin{array}{rrl} \tilde{N}: & \mathbb{R}^3 \to & \mathbb{R}^3 \text{ (muni des coordonnées cartésiennes)} \\ & (r,\theta,z) \mapsto & (n_r(r,z)\cos(\theta), n_r(r,z)\sin(\theta), n_z(r,z)) \end{array}$$

alors

$$\overrightarrow{N}(r\cos(\theta), r\sin(\theta), z) = \tilde{N}(r,\theta,z)$$

Remarque 2.1.1 $(n_r)_{/\gamma_z} \equiv 0$

La direction de déformation et la normale sont donc entièrement déterminées par la donnée des applications du plan u et $\overrightarrow{n}$.

- On donne aussi les domaines admissibles axisymétriques.
  Pour $\hat{\omega}$ domaine lipschitzien de référence fixé :

$$\mathcal{D}_{ad} := \left\{(Id+u)(\hat{\omega}), u \in \mathcal{U}(\bar{\hat{\omega}}, \mathbb{R}^2)\right\} \tag{2.2}$$

  On a pour u et U associés comme dans (2.1),

$$\operatorname{div}(U) = \frac{u_r}{r} + \operatorname{div}(u) \tag{2.3}$$

  où $\operatorname{div}(u) = \dfrac{\partial u_r}{\partial r} + \dfrac{\partial u_z}{\partial z}$
  et

$$\left(\overrightarrow{N} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N}\right) = \left(\overrightarrow{n} \cdot {}^t Du \overrightarrow{n}\right) \tag{2.4}$$

  pour les normales aux différentes surfaces considérées.

  On notera

$$\operatorname{div}_\gamma(u) = \operatorname{div}(u) - \left(\overrightarrow{n} \cdot {}^t Du \overrightarrow{n}\right) \tag{2.5}$$

  la **divergence surfacique** de la surface γ

- Définitions des différents espaces.

Nous allons utiliser les ensembles analogues au cas 3D, mais dans le cas axisymétrique. Ces espaces seront donc tous définis pour la mesure $rdrdz$. Pour un domaine ouvert ω de $\mathbb{R}^2$ quelconque :

$\check{L}^2(\omega)$ l'espace des fonctions de carré intégrable pour la mesure $rdrdz$.

$\check{H}^1(\omega)$ l'espace de Sobolev associé à la mesure $rdrdz$

$\check{H}^1_0(\omega) = \{u \in \check{H}^1(\omega); u = 0 \text{ sur } \gamma_0 \cup \gamma_{LS} \cup \gamma_{LG}\}$

$\check{H}^1_\gamma(\omega) = \{u \in \check{H}^1(\omega); u = 0 \text{ sur } \gamma_0,\ u = \phi_0 \text{ sur } \gamma_{LS} \cup \gamma_{LG}\}$

Les espaces de Sobolev d'ordre s pour la mesure $rdrdz$ seront eux aussi notés $\check{H}^s(\omega)$

Plus généralement, s'il n'y a pas ambiguïté, tout espace surmonté d'un ˇ sera l'espace associé à l'espace dans le cas 3D pour la mesure axisymétrique. Sinon la définition précise de l'espace sera spécifiée.

2.1.2 Le problème donnant le potentiel

Comme toutes les données sont axisymétriques, le potentiel ϕ^Ω l'est aussi (voir par exemple [BDM99] p 14-15). Cela nous permet donc de définir un potentiel φ^ω en les variables (r, z). Il est solution du problème variationnel suivant

$$(\mathcal{F}v)_\omega \begin{cases} \text{Trouver } \varphi^\omega \in \check{H}^1_\gamma(\omega) \text{ tel que,} \\ \\ \forall v \in \check{H}^1_0(\omega), \quad \int_\omega \varepsilon\,(\nabla\varphi^\omega \,.\, \nabla v)\, rdrdz = 0 \end{cases}$$

où $(.\,.\,.)$ désigne ici le produit scalaire euclidien dans $\mathbb{R}^2$.
Dans la suite on notera pour $\varphi \in \check{H}^1(\omega)$ et $v \in \check{H}^1(\omega)$,

$$\check{a}_\omega(\varphi, v) = \int_\omega \varepsilon\,(\nabla\varphi \,.\, \nabla v)\, rdrdz \tag{2.6}$$

A ϕ^Ω on associe donc φ^ω solution du problème 2D associé donné sous sa forme faible.
On peut vérifier que ϕ^Ω est solution faible du problème donnant le potentiel sur Ω si et seulement si φ^ω est solution faible du problème 3D axisymétrique associé.

Remarque 2.1.2 *Si on pose :*

- $\Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}$

  et

- *pour* $i \in \{G, S\}$, φ_i^ω *la restriction de* φ^ω *à* ω_i,

alors φ^Ω *est solution faible du système d'équations aux dérivées partielles :*

$$\begin{aligned}
\varepsilon_i \Delta_r \varphi_i^\omega &= 0 \ \textit{dans}\ \omega_i, \quad i = G, S. \\
\varphi_G^\omega &= \varphi_0 \ \textit{sur}\ \gamma_{LG} \\
\varphi_S^\omega &= \varphi_0 \ \textit{sur}\ \gamma_{LS} \\
\varphi_S^\omega &= 0 \ \textit{sur}\ \gamma_0 \\
\varphi_G^\omega &= \varphi_S^\omega \ \textit{sur}\ \gamma_{SG} \\
\varepsilon_G \nabla \varphi_G^\omega . \overrightarrow{n_G} &= -\varepsilon_S \nabla \varphi_S^\omega . \overrightarrow{n_S} \ \textit{sur}\ \gamma_{SG} \\
\varepsilon_i \nabla \varphi_i^\omega . \overrightarrow{n_i} &= 0 \ \textit{sur}\ \gamma_{ei}, \quad i = G, S.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Dans la suite de l'étude du modèle, nous aurons besoin de connaître précisément la régularité de φ^ω. C'est l'objet de la section suivante.

2.2 Etude de la régularité du potentiel

Ce paragraphe va nous permettre de préciser le comportement du gradient du potentiel au voisinage de la ligne triple.
En observant les domaines admissibles, on remarque qu'ils présentent un coin rentrant au niveau du point triple A. Ceci a pour effet une perte de régularité du potentiel.
Donnons nous un domaine ω issu d'un domaine 3D à géométrie axisymétrique. Le potentiel φ^ω est solution du problème variationnel $(\mathcal{F}v)_\omega$.

Etudier la régularité de φ^ω sur ω nous amène à étudier **l'opérateur laplacien axisymétrique Δ_r en transmission dans un domaine à coin** i.e. l'opérateur $\varepsilon\Delta_r$ où

$$\varepsilon = \varepsilon_G \text{ dans } \omega_G \text{ et } \varepsilon = \varepsilon_S \text{ dans } \omega_S.$$

Les singularités dans des domaines à coins ont été largement étudiées. Ainsi on dispose de résultats dans des cas proches du nôtre :

1. L'**opérateur laplacien dans un domaine à coins 2D et 3D** a été étudié notamment par P.Grisvard et M.Dauge dans [Gri85],[Gri92], [Dau88].
2. Le cas de l'**opérateur laplacien axisymétrique** Δ_r a lui aussi été traité dans [BDM99] dans le cas de domaines à coins 2D et 3D.

3. L'**opérateur laplacien en transmission** que l'on pourrait noter $\varepsilon\Delta$ a quant à lui été étudié par K.Lemrabet dans [Lem77] pour un domaine 2D à coins et dans [Lem78] pour un domaine général 3D à coins.

Chacun des points 1., 2. et 3. n'est pas suffisant pour traiter totalement notre cas. Cependant dans ces trois cas, on retrouve une structure commune de démonstration adaptable au cas de notre opérateur.

C'est pourquoi nous allons commencer par rappeler les résultats connus. Nous aborderons d'abord le cas de domaines 2D et de l'opérateur laplacien pour présenter de façon simple la structure de démonstration utilisée (en section 2.2.1). Puis après avoir énoncé les résultats connus dans le cas 3D axisymétrique pour l'opérateur laplacien (en section 2.2.2), nous dériverons un résultat pour l'opérateur Δ_r en transmission. Cela reposera essentiellement sur l'adaptation du point 3. (cas 3D) au cas axisymétrique. Enfin nous énoncerons le résultat de régularité dans notre cas précis.

2.2.1 Cas d'un domaine 2D

2.2.1.1 L'opérateur laplacien

C'est le cas le plus simple, détaillé dans [Gri85] et [Gri92], mais qui illustre bien le principe de démonstration qui sera utilisé pour chaque généralisation. On considère un domaine ω de $\mathbb{R}^2$ polygonal à n arêtes (notées γ_j) et sommets (notés A_j). Pour $f \in L^2(\omega)$, on note $\varphi \in H^1(\omega)$ la solution variationnelle de l'équation :

$$(\mathcal{P}_\Delta) \left\{ \begin{array}{rcl} \Delta\varphi & = & f \\ \varphi & = & 0 \text{ sur } \gamma_j, \quad \forall j \in [1,n] \end{array} \right.$$

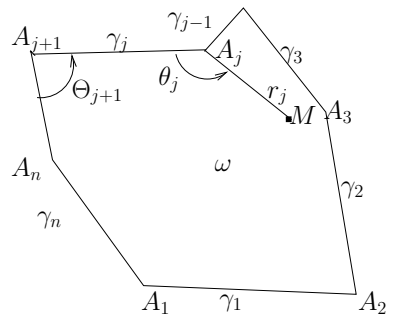


FIG. 2.2 – Cas du polygone

On cherche à étudier la régularité de φ au voisinage d'un coin. Si Θ_j est l'angle entre γ_j et γ_{j-1} (voir figure 2.2), P.Grisvard montre dans [Gri92] p.52 le

Théorème 2.2.1 *Il existe un nombre fini de réels c_j tels que*

$$\varphi - \sum_{\Theta_j > \pi} c_j S_j \in H^2(\omega)$$

où $S_j(r_j, \theta_j) = r_j^{\frac{\pi}{\Theta_j}} \sin(\frac{\pi\theta_j}{\Theta_j})\eta_j(r_j)$ *avec*

- (r_j, θ_j) *les coordonnées polaires centrées au coin A_j correspondant (figure 2.2), telles que l'arête γ_{j-1} corresponde à $\theta_j = 0$.*
- η_j *est une fonction à support compact centré autour de A_j n'intersectant pas le support des autres η_k pour $k \neq j$*

On a $S_j \in H^1(\omega) \setminus H^2(\omega)$ si $\Theta_j > \pi$.

Remarque 2.2.1 *Avant d'exposer la structure de démonstration du théorème 2.2.1, nous donnons un résultat utile pour la suite.*

On note $D(L^2(\omega), \Delta) := \{v \in L^2(\omega)$ tels que $\Delta v \in L^2(\omega)\}$. Dans [Gri92] p.27, P.Grisvard montre qu'on peut définir sur cet espace une notion de trace t_j sur chaque arête γ_j, pour $j \in [1, n]$.

Principe de la démonstration : On rappelle le principe général de la démonstration du théorème 2.2.1.

1. On commence par établir une estimation a priori sur $\varphi \in H^2(\omega) \cap H_0^1(\omega)$:

   $$||\varphi||_{H^2(\omega)} \leq C(\omega)||\Delta\varphi||_{L^2(\omega)}$$

   où $C(\omega)$ est une constante positive qui ne dépend que du diamètre de ω.

2. Cette estimation nous permet de dire que l'opérateur laplacien Δ considéré comme un opérateur de $H^2(\omega) \cap H_0^1(\omega)$ dans $L^2(\omega)$ est injectif et d'image fermée ([Gri85] page 208).

3. On caractérise alors N l'orthogonal de $\Delta(H^2(\omega) \cap H_0^1(\omega))$ dans $L^2(\omega)$.

   $$L^2(\omega) = \Delta(H^2(\omega) \cap H_0^1(\omega)) \oplus^{\perp} N$$

   On montre que

   $$N = \left\{v \in D(L^2(\omega), \Delta) \text{ tels que } \Delta v = 0 \text{ dans } \omega, t_j(v) = 0 \text{ sur } \gamma_j, \forall j \in [1, n]\right\}$$

4. Les éléments de N sont $\mathcal{C}^\infty$ sauf au voisinage des coins.

   Si on note m le nombre de coins rentrants du polygone, les éléments de N peuvent s'exprimer comme combinaison linéaire de m fonctions linéairement indépendantes. On en déduit donc que N est de dimension finie égale au nombre de coins rentrants du polygone.

5. Reste alors à remarquer que pour $j \in [1, n]$, tel que A_j est un coin rentrant, ΔS_j n'est pas orthogonal à N, donc n'est pas dans l'image de $H^2(\omega) \cap H_0^1(\omega)$ par Δ. Comme ces fonctions sont linéairement indépendantes et que leur nombre est exactement m, on en déduit le résultat du théorème par unicité de la solution du problème $(\mathcal{P}_\Delta)$ (au sens variationnel).

Remarque 2.2.2 *Ce résultat peut être généralisé au cas d'un polygone curviligne i.e. un polygone à arêtes courbes régulières (voir [Gri85] définition 1.4.5.1 p.34). Les domaines admissibles que nous considérons rentrent dans ce cadre.*

On dispose donc d'un résultat de décomposition de la solution du problème $(\mathcal{P}_\Delta)$ pour un domaine polygonal curviligne dans le cas de l'opérateur laplacien.

Passons maintenant à l'opérateur laplacien en transmission.

2.2.1.2 Un problème de transmission 2D

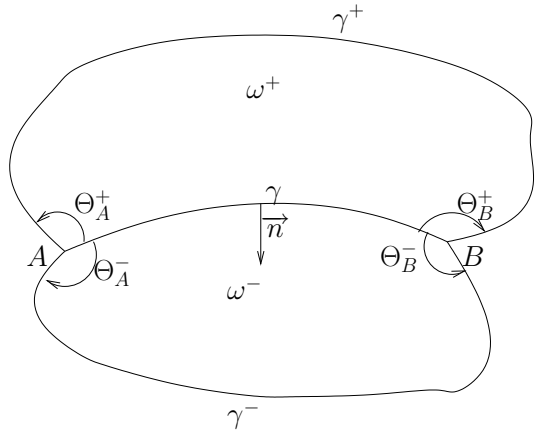


FIG. 2.3 – Domaine considéré dans le cas d'un problème de transmission

Nous allons donner une version "allégée" du résultat établi par K.Lemrabet dans [Lem77], suffisante pour comprendre notre problème. On reprend ses notations.

On considère un domaine 2D, ω, formé de deux composantes ω^- et ω^+. Chacune de ces deux composantes est supposée à bords courbes comme décrit sur la figure 2.3.

Le bord de ce domaine ω est lui aussi séparé en deux composantes γ^+ et γ^-. On notera γ la courbe qui partage le domaine ω en ses deux composantes.
A et B sont les extrémités de γ. Soit $M \in \{A, B\}$, on note :

- $\Theta_M^\pm$ l'angle que font les tangentes à γ avec $\gamma^\pm$.
- (r_M, θ_M) les coordonnées polaires centrées en M telles que γ coïncide localement avec $\theta_M = 0$.
  On choisit de compter Θ_M^+ positivement et Θ_M^- négativement.
- η_M fonction $\mathcal{C}^\infty$ à support compact inclus dans ω qui vaut 1 au voisinage de M et 0 en dehors d'une boule centrée en M.

Pour une fonction h définie sur tout ω, on notera h^+ sa restriction à ω^+, et h^- sa restriction à ω^-.

Soit $f \in L^2(\omega)$ et $(p^+, p^-) \in (\mathbb{R}^{+*})^2$. On cherche (φ^+, φ^-) solution du problème de transmission suivant :

$$(\mathcal{PT}_\Delta) \begin{cases} p^+\Delta\varphi^+ &= f^+ & \text{dans } \omega^+ \\ p^-\Delta\varphi^- &= f^- & \text{dans } \omega^- \\ \varphi^+ &= 0 & \text{sur } \gamma^+ \\ \varphi^- &= 0 & \text{sur } \gamma^- \\ \varphi^+ &= \varphi^- & \text{sur } \gamma \\ p^+\dfrac{\partial\varphi^+}{\partial n} &= p^-\dfrac{\partial\varphi^-}{\partial n} & \text{sur } \gamma, \text{où } n \text{ est la normale sortante à } \omega^+ \end{cases}$$

En adaptant la démarche de P.Grisvard au cas d'un problème de transmission, K.Lemrabet a détaillé les étapes 1., 2., 3., 4. et 5. précédentes. Il en résulte le :

Théorème 2.2.2 *Il existe d'uniques réels c_M^k tels que :*

$$\varphi^\pm - \sum_{\substack{M=A,B \\ 0<\nu_M^k<1}} c_M^k S_M^{k,\pm} \in H^2(\omega^\pm)$$

avec

$$S_M^{k,+}(r_M, \theta_M) = \frac{p^-}{\cos(\nu_M^k \Theta_M^+)} r_M^{\nu_M^k} \sin(\nu_M^k(\theta_M - \Theta_M^+))\eta_M(r_M, \theta_M), \quad \theta \in]0, \Theta_M^+[$$

$$S_M^{k,-}(r_M, \theta_M) = \frac{p^+}{\cos(\nu_M^k \Theta_M^-)} r_M^{\nu_M^k} \sin(\nu_M^k(\theta_M - \Theta_M^-))\eta_M(r_M, \theta_M), \quad \theta \in]\Theta_M^-, 0[$$

où :
ν_M^k *est l'unique solution dans* $]0,1[$ *de l'équation* $p^+ \tan(\nu_M^k \Theta_M^-) = p^- \tan(\nu_M^k \Theta_M^+)$.

Démonstration : La démarche pour démontrer ce théorème est la même que celle pour un problème sans transmission. K.Lemrabet se place tout d'abord dans le cas d'un polygone. Il démontre une inégalité a priori (étape 1.) qui permet de décomposer l'espace $L^2(\omega^+) \times L^2(\omega^-)$ en une somme directe orthogonale (étape 2.). Puis il caractérise les éléments de l'espace N (étape 3.) et détermine la dimension de cet espace (étape 4.). La décomposition de la solution suit (étape 5.).

Enfin le résultat est généralisé à des frontières polygonales courbes (qui donne donc un résultat plus général que celui énoncé).

En résumé : Si la frontière est polygonale curviligne, il y a les singularités dues à un coin qui touche l'interface entre les deux domaines et les singularités dues aux coins qui ne touchent pas l'interface. Ces dernières sont données par les fonctions classiques du théorème précédent de P.Grisvard pour des coins rentrants.

Cette section a donc permis d'avoir une idée du type de singularités qui apparaissent pour l'opérateur Δ simple et en transmission.

Nous allons maintenant nous intéresser au cas des domaines 3D axisymétriques.

Après avoir énoncé un résultat de décomposition (analogue du théorème 2.2.1) issu de l'étude de l'opérateur Δ_r, nous dériverons de l'étude de l'opérateur Δ 3D en transmission un résultat de décomposition (analogue du théorème 2.2.2) pour l'opérateur Δ_r en transmission.

2.2.2 Le cas 3D axisymétrique

Nous commencerons cette section par une remarque :

Remarque 2.2.3 *Tout comme dans la section 2.2.1, les résultats seront énoncés pour le cas de polygones, mais peuvent être généralisés au cas de polygones curvilignes.*

Nous allons donner des résultats qui ont été établis dans le cas 3D axisymétrique, puis nous les généraliserons à notre problème de transmission.

2.2.2.1 Problème classique

On considère un domaine axisymétrique issu de la rotation d'un polygone autour d'une de ses arêtes que l'on considérera être sur (Oz). On note γ_z l'arête

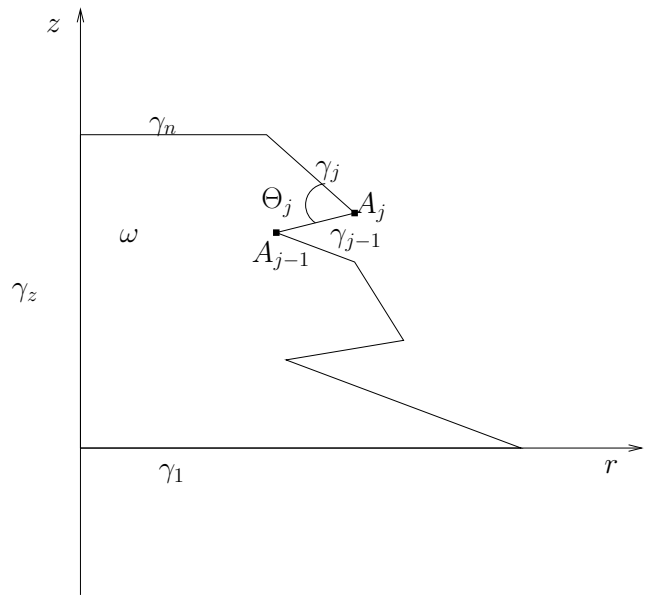


FIG. 2.4 – Domaine 2D engendrant le domaine 3D axisymétrique

qui touche (Oz) et γ le reste de la frontière qui est une union de n arêtes notées γ_i, $i = 1..n$ (voir figure 2.4).

A priori le domaine 3D peut alors présenter plusieurs types de coins. Des coins issus des arêtes γ_j et des coins issus des arêtes qui touchent γ_z (ici γ_1 et γ_n) que l'on appellera coins coniques.

Pour simplifier on supposera que les deux arêtes de γ qui touchent l'axe (Oz) font un angle de $\dfrac{\pi}{2}$ avec l'axe. Ceci supprime les coins coniques et il n'y a alors pas de contribution singulière au voisinage de l'axe (Oz).

On s'intéresse à la régularité de la solution variationnelle de

$$(\mathcal{P}_{\Delta_r}) \left\{ \begin{array}{rcl} \Delta_r \varphi & = & f \\ \varphi & = & 0 \text{ sur } \gamma_j, \quad \forall j \in [1, n] \end{array} \right.$$

Les singularités pour un tel problème sont soit de nature conique soit dues aux coins issus des arêtes γ_j. Pour le domaine considéré ici, il n'y a pas de singularités coniques. Il est montré dans [BDM99] que, de plus, les fonctions singulières aux coins issus des arêtes γ_j sont les mêmes que dans le cas 2D. En effet, au voisinage de ces coins, il existe $c > 0$ tel que $r > c$. La partie principale du laplacien axisymétrique est alors équivalente à un laplacien 2D classique. On a le :

Théorème 2.2.3 *Il existe $c_j \in \mathbb{R}$ tels que*

$$\varphi - \sum_{\Theta_j > \pi} c_j S_j \in \check{H}^2(\omega)$$

où $S_j(r_j, \theta_j) = r_j^{\frac{\pi}{\Theta_j}} \sin(\frac{\pi\theta_j}{\Theta_j})\eta_j(r_j)$ avec

- *(r_j, θ_j) les coordonnées polaires centrées au coin A_j correspondant*
- *η_j fonction à support compact centré autour de A_j n'intersectant pas le support des autres η_k pour $k \neq j$*

Pour aboutir au résultat qui nous intéresse, il reste donc à rajouter la transmission dans le problème $(\mathcal{P}_{\Delta_r})$. Pour cela nous allons nous servir de résultats 3D établis pour l'opérateur Δ et les appliquer au cas 3D axisymétrique pour généraliser le théorème ci-dessus et le théorème 2.2.2.

2.2.2.2 Cas de la transmission

K.Lemrabet a démontré dans [Lem78], les points concernant l'inégalité a priori dans le cas 3D ainsi que la caractérisation de l'espace N correspondant (étapes 1., 2., 3. de la démonstration). Il suffit alors d'appliquer les mêmes méthodes que dans [ACL03] et [Lem77] pour trouver que la dimension de l'espace N est égal au nombre de coins rentrants (étape 4.). On retrouve la même conclusion que dans le cas 2D. Les singularités issues du problème 2D sont les mêmes que les singularités du problème 3D axisymétrique. On ne réécrit pas le théorème, mais son expression est similaire à celle des paragraphes précédents. On va plutôt détailler le théorème dans notre cas précis dans la section suivante.

2.2.3 Application à notre problème

Revenons à notre problème d'électromouillage.

On suppose que (ρ, θ) sont les coordonnées polaires centrées au point triple (voir figure 2.5).

2.2.3.1 Enoncé du théorème de régularité

On a le théorème suivant :

Théorème 2.2.4 *Il existe un unique $c \in \mathbb{R}$ tel que pour $i \in \{G, S\}$:*

$$\varphi_i^\omega - cS_i \in \check{H}^2(\omega_i)$$

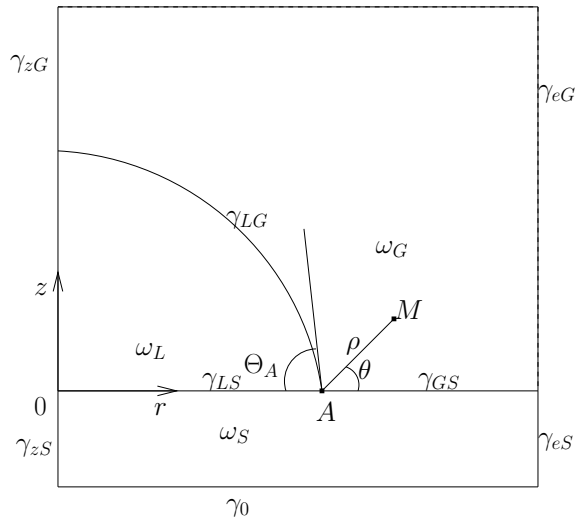


FIG. 2.5 – Coordonnées polaires centrées au point triple.

avec

$$S_G(\rho,\theta) = \frac{\varepsilon_S}{\cos(\nu(\pi-\Theta_A))}\rho^\nu \sin(\nu(\theta-(\pi-\Theta_A)))\eta(\rho,\theta), \quad \theta \in]0,\pi-\Theta_A[$$

$$S_S(\rho,\theta) = \frac{\varepsilon_G}{\cos(\nu\pi)}\rho^\nu \sin(\nu(\theta+\pi))\eta(\rho,\theta), \quad \theta \in]-\pi,0[$$

où :

η est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ à support compact, telle que $\eta \equiv 1$ dans un voisinage de A et nulle hors d'un cercle centré en A.

ν est l'unique solution dans $]0,1[$ de l'équation

$$\varepsilon_S \tan(\nu(\pi-\Theta_A)) = -\varepsilon_G \tan(\nu\pi). \tag{2.8}$$

On connaît donc le comportement de φ^ω au voisinage du point triple. De plus la forme de la singularité est connue explicitement ce qui nous permet de préciser la régularité de φ^ω.

2.2.3.2 Conséquences sur la régularité du potentiel

Commençons par donner des précisions sur ν.

Proposition 2.2.4 *Pour tout $\Theta_A \in]0,\pi[$, il existe une unique solution à l'équation (2.8), $\nu(\Theta_A)$ appartenant à $]0,1[$. De plus $\nu(\Theta_A) \in]\frac{1}{2},1[$ et croît lorsque Θ_A croît.*

Démonstration : Commençons par montrer, pour Θ_A fixé dans $]0,\pi[$, l'existence et l'unicité de la solution ν à l'équation (2.8).

Posons $\alpha = \pi - \Theta_A$ et

$$g(x) = \varepsilon_S \tan(x\alpha) + \varepsilon_G \tan(x\pi)$$

- *Domaine de définition de g :*

$$\mathcal{D}_g = \mathbb{R} \setminus \left(\left\{ \frac{\pi}{2\alpha} \left[\frac{\pi}{\alpha} \right] \right\} \cup \left\{ \frac{1}{2} [1] \right\} \right)$$

Pour $k \in \mathbb{N}$, on notera

$$x_k := \frac{\pi}{2\alpha} + \frac{k\pi}{\alpha}$$

et

$$y_k := \frac{1}{2} + k$$

Nous cherchons les solutions de l'équation $g(x) = 0$ dans $]0,1[$.

- Cherchons donc si des valeurs interdites (x_k ou y_k) peuvent se situer dans l'intervalle $[0,1]$:
  - $y_k \in [0,1] \Leftrightarrow k = 0$. On a alors $y_0 = \frac{1}{2}$.
  - Cherchons sous quelles conditions sur k, on a $x_k \in [0,1]$.

$$\begin{aligned} x_k \in [0,1] \quad &\Leftrightarrow \quad 0 \leq \frac{\pi}{2\alpha} + \frac{k\pi}{\alpha} \leq 1 \\ &\Leftrightarrow \quad 0 \leq \frac{(2k+1)\pi}{2\alpha} \leq 1 \\ &\Leftrightarrow \quad -\frac{1}{2} \leq k \leq \frac{2\alpha - \pi}{2\pi} \end{aligned} \tag{2.9}$$

Il nous faut alors distinguer deux cas :

- Si $\Theta_A \in]0, \frac{\pi}{2}[$, alors

$$0 < \frac{2\alpha - \pi}{2\pi} < \frac{1}{2}$$

Donc le seul k qui puisse vérifier (2.9) est $k = 0$ et dans ce cas

$$x_0 = \frac{\pi}{2\alpha} \in]\frac{1}{2}, 1[.$$

- Si $\Theta_A \in [\frac{\pi}{2}, \pi[$, alors

$$-\frac{1}{2} < \frac{2\alpha - \pi}{2\pi} \leq 0$$

Il n'y a donc dans ce cas aucun k qui convienne sauf si $\Theta_A = \frac{\pi}{2}$ et dans ce cas $x_k = 1$ pour $k = 0$.

- Nous sommes maintenant en mesure d'écrire le *tableau de variation de* g, en distinguant les deux cas précédents.
  On pose $\beta = \varepsilon_S \tan(\alpha) \in \bar{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}$.
  - Si $\Theta_A \in]0, \frac{\pi}{2}[$, alors on a le tableau de variations suivant :

x	0		$\frac{1}{2}$		$\frac{\pi}{2\alpha}$		1
$g'(x)$		$+$	$\Vert$	$+$	$\Vert$	$+$	
g	0	$\nearrow$	$+\infty \Vert -\infty$	$\nearrow$	$+\infty \Vert -\infty$	$\nearrow$	$\beta < 0$

  On a $\beta < 0$, car $\alpha \in]\frac{\pi}{2}, \pi[$
  - Si $\Theta_A \in [\frac{\pi}{2}, \pi[$, alors on a le tableau de variations suivant :

x	0		$\frac{1}{2}$		1
$g'(x)$		$+$	$\Vert$	$+$	
g	0	$\nearrow$	$+\infty \Vert -\infty$	$\nearrow$	$\beta > 0$

  On a $\beta > 0$ ou $\beta = +\infty$, car $\alpha \in]0, \frac{\pi}{2}]$
- De ces deux tableaux on déduit l'existence et l'unicité de ν solution de (2.8) dans $]0, 1[$ et que de plus que $\nu \in]\frac{1}{2}, 1[$.

La deuxième étape est d'étudier la variation de ν en fonction de Θ_A.
Posons

$$f(\nu, \Theta) = \varepsilon_S \tan(\nu(\pi - \Theta)) + \varepsilon_G \tan(\nu\pi).$$

Par ce qui précède, on sait que

$$\forall \Theta \in]0, \pi[, \exists! \nu(\Theta) \in]\frac{1}{2}, 1[\text{ tel que } f(\nu, \Theta) = 0$$

De plus f est $\mathcal{C}^1$ en les deux variables et

$$\frac{\partial f}{\partial \nu}(\nu,\Theta) = \varepsilon_G \pi(1+\tan^2(\nu\pi)) + \varepsilon_S(\pi-\Theta)(1+\tan^2(\nu(\pi-\Theta))) > 0 \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \Theta}(\nu,\Theta) = -\varepsilon_S \nu(1+\tan^2(\nu(\pi-\Theta))) \tag{2.11}$$

Par le théorème des fonctions implicites, on montre qu'il existe une application $\nu : \Theta \to \nu(\Theta)$ définie sur $]0,\pi[$ telle que ν est dérivable sur $]0,\pi[$ et

$$\nu'(\Theta) = -\frac{\dfrac{\partial f}{\partial \Theta}(\nu(\Theta),\Theta)}{\dfrac{\partial f}{\partial \nu}(\nu(\Theta),\Theta)}, \quad \forall \Theta \in]0,\pi[$$

De plus vu le signe des différentielles (2.10) et (2.11), on déduit que

$$\nu'(\Theta) > 0, \quad \forall \Theta \in]0,\pi[.$$

■

On en déduit donc que lorsque l'angle de contact Θ_A augmente, ν augmente et donc la singularité devient plus faible. Et inversement lorsque Θ_A diminue.

Nous allons maintenant préciser la régularité de φ^ω. On a la

Proposition 2.2.5 *Il existe $\kappa > 0$ (dépendant de ω) tel que $\varphi_i^\omega \in \check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_i)$ pour $i \in \{G,S\}$*

Démonstration : Vu le théorème 2.2.4, il suffit d'étudier la régularité des fonctions S_G et S_S. De la proposition 2.2.4, on déduit que $\nu > \frac{1}{2}$, et donc il existe $0 < \kappa < \frac{1}{2}$ tel que $\nu \geq \frac{1}{2} + \kappa$. Ce qui nous permet de conclure au résultat.

■

Grâce à l'étude de P. Grisvard dans [Gri85], on sait que l'on peut définir la trace du gradient de φ_i^ω dans $\check{L}^2$ sur le bord de ω_i pour $i \in \{G,S\}$.

De plus on remarque que vu la forme de la singularité S_G et S_S, on a

$$\varphi_i^\omega \in \check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_i) \text{ et } \Delta_r \varphi_i^\omega \in \check{L}^2(\omega_i) \text{ pour } i \in \{G,S\}. \tag{2.12}$$

La régularité de φ^ω est donc connue et nous avons pu donner quelques propriétés particulières du potentiel qui pourront nous être utiles par la suite.

Nous sommes maintenant en mesure de prouver le résultat d'invariance de l'angle de contact par rapport au potentiel imposé ϕ_0.

2.3 L'angle est indépendant du potentiel appliqué

Nous donnons tout d'abord les expressions de la fonction coût, du lagrangien et de la condition nécessaire d'optimalité dans le cas axisymétrique. Puis par un choix particulier de directions admissibles, on en déduira le résultat voulu.

2.3.1 Expression de la fonction coût et de la condition nécessaire d'optimalité

2.3.1.1 La fonction coût

En introduisant le caractère axisymétrique, on donne l'expression analogue 2D (divisée par la constante 2π) de la fonction coût J donnée en (1.9) :

$$j(\omega) := j_{grav}(\omega) + j_{LS}(\omega) + j_{LG}(\omega) + j_{elec}(\omega) \tag{2.13}$$

où

$$j_{grav}(\omega) = -\alpha \int_{\omega} zrdrdz \tag{2.14}$$

$$j_{LS}(\omega) = \mu \int_{\gamma_{LS}} rds \tag{2.15}$$

$$j_{LG}(\omega) = \int_{\gamma_{LG}} rds \tag{2.16}$$

$$j_{elec}(\omega) = -\frac{\delta}{2} \int_{\omega} \varepsilon ||\nabla \varphi^{\omega}||^2 rdrdz \tag{2.17}$$

La contrainte de volume est quant à elle donnée par :

$$c(\omega) = \int_{\omega_L} rdrdz - \frac{vol}{2\pi} \tag{2.18}$$

2.3.1.2 Formulation de la condition nécessaire dans le cas axisymétrique

L'égalité (1.23) devient

$$\begin{gathered}\exists \lambda^* \in \mathbb{R} \text{ tel que } \forall u \in \mathcal{U}(\overline{\omega^*}, \mathbb{R}^2), \\ dj(\omega^*).u := dj_{grav}(\omega^*).u + dj_{LG}(\omega^*).u + dj_{LS}(\omega^*).u + dj_{elec}(\omega^*).u = \lambda^* dc(\omega^*).u\end{gathered} \tag{2.19}$$

On exprimera ces différentes quantités en détail dans les paragraphes suivants.

Les éléments $u \in \mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2)$ sont appelés *directions admissibles.*

2.3.1.3 Un choix particulier de directions admissibles

Précisons le bord γ_{LG} au voisinage du point triple. Par définition des domaines admissibles, ω^* est un ouvert lipschitzien, dont la frontière γ^*_{LG} est au moins $\mathcal{C}^1$. Notons A le point triple. Si on suppose que Θ_A, l'angle de contact en A, est dans l'intervalle $]0, \pi[$, alors il existe une boule ouverte B_A centrée en A et de rayon d_0 et une fonction $\mathcal{C}^1$ $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ telle que $(r, z) \in \gamma^*_{LG} \cap B_A \Leftrightarrow r = f(z)$ (théorème des fonctions implicites). Avec un tel paramétrage, on peut exprimer le cosinus de l'angle de mouillage en $A = (f(0), 0)$:

$$\cos(\Theta_A) = -\frac{f'(0)}{\sqrt{1 + f'(0)^2}} \tag{2.20}$$

Plaçons nous au minimum d'énergie ω^*.

On sait qu'en ce minimum

$$\exists \lambda^* \in \mathbb{R} \text{ tel que } \forall u \in \mathcal{U}(\overline{\omega^*}, \mathbb{R}^2), dj(\omega^*).u = \lambda^* dc(\omega^*).u$$

Nous cherchons à exploiter cette égalité afin d'en extraire une information sur la géométrie de la goutte au voisinage du point triple A. L'idée est de trouver des directions de déformations particulières u^p, $p \in \mathbb{N}^*$ dont les supports centrés en A se concentrent sur A lorsque p tend vers $+\infty$.

Choisissons la suite $(u^p)_{p \in \mathbb{N}^*}$ définie par :

$$\begin{array}{rccc} u^p : & \mathbb{R}^2 & \to & \mathbb{R}^2 \\ & (r, z) & \mapsto & (u^p_r, 0) \end{array}$$

où

$$\begin{array}{rccl} u^p_r : & \mathbb{R}^2 & \to & \mathbb{R} \\ & (r, z) & \mapsto & \begin{cases} \exp\left(\dfrac{1}{p^2((r - f(0))^2 + z^2) - 1}\right) & \text{si } (r - f(0))^2 + z^2 < \frac{1}{p^2} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \end{array}$$

Dans la suite on notera B_p la boule ouverte de centre A et de rayon $\frac{1}{p}$ et ∂B_p son bord.

Le support de u^p_r est donné par B_p. Soit $p_0 \in \mathbb{N}$ tel que pour $p \geq p_0$, B_p soit inclus dans B_A. Pour $p \geq p_0$, le support de u^p est donc inclus dans le voisinage où γ^*_{LG} est paramétré par f. De plus $\frac{u^p}{||u^p||_\infty} \in \mathcal{U}(\overline{\omega^*}, \mathbb{R}^2)$.

On peut donc écrire :

$$dj(\omega^*).\frac{u^p}{||u^p||_\infty} = \lambda^* dc(\omega^*).\frac{u^p}{||u^p||_\infty}, \quad \forall p \geq p_0$$

Et donc aussi :

$$dj(\omega^*).u^p = \lambda^* dc(\omega^*).u^p, \quad \forall p \geq p_0$$

Nous allons étudier au paragraphe suivant la limite de $dj(\omega^*).u^p$ et de $dc(\omega^*).u^p$ lorsque p tend vers $+\infty$.

2.3.2 Calcul des différentes contributions

Etudions chaque terme apparaîssant dans $dj(\omega^*).u^p$ et $dc(\omega^*).u^p$ pour $p \geq p_0$.

2.3.2.1 Le terme $dj_{grav}(\omega^*).u^p$

Avec (1.12) et (2.3), on a

$$dj_{grav}(\omega^*).u^p = \alpha \int_{\omega^*} u_z^p r dr dz + \alpha \int_{\omega^*} z u_r^p dr dz + \alpha \int_{\omega^*} z \mathrm{div}(u^p) r dr dz$$

Il est clair que

$$\int_{\omega^*} r u_z^p dx = 0, \text{ puisque } u_z^p = 0 \tag{2.21}$$

Comme $|u_r^p| \leq 1$, on a

$$\left| \int_{\omega^*} z u_r^p dr dz \right| \leq \int_{\omega^* \cap B_p} |z| dr dz \leq \pi \frac{1}{p^3} \tag{2.22}$$

Comme $u_z^p = 0$, on a $\displaystyle\int_{\omega^*} z \mathrm{div}(u^p) r dr dz = \int_{\omega^* \cap B_p} z \frac{\partial u_r^p}{\partial r}(r,z) r dr dz$

En posant $R := \sqrt{(r - f(0))^2 + z^2}$, on a :

$$\frac{\partial u_r^p}{\partial r}(r,z) = -2p^2 \frac{r - f(0)}{(p^2R^2 - 1)^2} \exp\left(\frac{1}{p^2R^2 - 1}\right)$$

et la majoration $\displaystyle\left|\frac{\partial u_r^p}{\partial r}(r,z)\right| \leq 2p^2 \frac{R}{(p^2R^2 - 1)^2} \exp\left(\frac{1}{p^2R^2 - 1}\right)$

De l'étude de $g : R > 0 \mapsto \displaystyle\frac{R}{(p^2R^2 - 1)^2} \exp\left(\frac{1}{p^2R^2 - 1}\right)$, on déduit que

$$|g(R)| \leq \frac{C}{p}$$

où C est un réel strictement positif.
Et donc

$$|\mathrm{div}(u^p)| \leq 2Cp \tag{2.23}$$

On obtient finalement

$$\left|\int_{\omega^*} z\mathrm{div}(u^p) r dr dz\right| \leq 2Cp \left|\int_{\omega^* \cap B_p} z r dr dz\right| = 2C\frac{\pi}{p^3}\left(f(0) + \frac{1}{p}\right) \tag{2.24}$$

D'où avec (2.22) et (2.24),

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} dj_{grav}(\omega^*).u^p = 0} \tag{2.25}$$

2.3.2.2 Le terme $dj_{LG}(\omega^*).u^p$

De (1.14), (2.3) et (2.4), on déduit

$$dj_{LG}(\omega^*).u^p = \int_{\gamma^*_{LG}} u^p_r(s) ds + \int_{\gamma^*_{LG}} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r ds$$

où on rappelle que div_γ est la divergence surfacique est donnée par (2.5).
On notera $\gamma(p)$ l'ordonnée de l'intersection de ∂B_p, avec γ^*_{LG}.

Comme $|u^p_r| < 1$, on a

$$\left|\int_{\gamma^*_{LG}} u^p_r(s) ds\right| \leq l(\gamma^*_{LG} \cap B_p)$$

où pour γ une courbe donnée de longueur finie, $l(\gamma)$ désigne la longueur de γ.
D'où

$$\lim_{p\to\infty} \int_{\gamma^*_{LG}} u^p_r(s) ds = 0. \tag{2.26}$$

L'étude du terme $\int_{\gamma^*_{LG}} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r ds$ contenant la divergence surfacique est un peu plus délicate et contribue au calcul final de l'angle de contact.

Nous allons montrer que ce terme a pour limite $-\dfrac{f(0)f'(0)(1+f'^2(0))^{-\frac{1}{2}}}{e}$ quand p tend vers $+\infty$.

$$\int_{\gamma^*_{LG}} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r ds = \int_{\gamma^*_{LG}} \mathrm{div}(u^p) r ds - \int_{\gamma^*_{LG}} \left({}^t Du^p \overrightarrow{n} \,.\, \overrightarrow{n}\right) r ds.$$

Comme

$$ {}^tDu^p = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial u_r^p}{\partial r} & 0 \\ \dfrac{\partial u_r^p}{\partial z} & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \overrightarrow{n} = \frac{1}{\sqrt{1+f'(z)^2}} \begin{pmatrix} -1 \\ f'(z) \end{pmatrix} $$

Il vient

$$ \begin{aligned} &\int_{\gamma_{LG}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r ds \\ &= \int_0^{\gamma(p)} \frac{\partial u_r^p}{\partial r} f(z)\sqrt{1+f'(z)^2}dz - \int_0^{\gamma(p)} \left(\frac{\partial u_r^p}{\partial r} - f'(z)\frac{\partial u_r^p}{\partial z}\right) \frac{1}{1+f'^2(z)} f(z)\sqrt{1+f'^2(z)}dz \\ &\qquad = \int_0^{\gamma(p)} f(z)f'(z)(1+f'^2(z))^{-\frac{1}{2}}[f'(z)\frac{\partial u_r^p}{\partial r} + \frac{\partial u_r^p}{\partial z}]dz \\ &\qquad = \int_0^{\gamma(p)} f(z)f'(z)(1+f'^2(z))^{-\frac{1}{2}}\frac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)]dz \end{aligned} $$

Posons $h(z) := f(z)f'(z)(1+f'^2(z))^{-\frac{1}{2}}$.

Nous allons maintenant montrer que

$$ \lim_{p\to+\infty} \int_{\gamma_{LG}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r ds = -\frac{1}{e}h(0) $$

Comme f appartient $\mathcal{C}^1([0,\gamma(p)],\mathbb{R})$, h est en particulier continue en 0 :

$$ \forall \varepsilon > 0, \quad \exists \delta(\varepsilon) > 0 \text{ tel que si } |z| < \delta(\varepsilon), \text{ alors } |h(z) - h(0)| < \varepsilon $$

On a :

$$ \left| \int_0^{\gamma(p)} h(z)\frac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)]dz + \frac{1}{e}h(0) \right| \leq \int_0^{\gamma(p)} |h(z)-h(0)| \left| \frac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)] \right| dz $$

$$ \text{car } \int_0^{\gamma(p)} \frac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)]dz = -\frac{1}{e} $$

En effectuant le même raisonnement que celui utilisé pour établir (2.23) et comme f' est bornée, on peut montrer que $\left|\dfrac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)]\right| \leq Dp$, avec D constante positive.

Soit alors $\varepsilon > 0$.

Comme $\gamma(p) \leq \dfrac{1}{p}$, on en déduit que

$$\forall p \geq \max\left(\frac{1}{\delta(\varepsilon)}, p_0\right),$$
$$\left|\int_0^{\gamma(p)} h(z)\frac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)]dz + \frac{1}{e}h(0)\right| \leq Dp\int_0^{\frac{1}{p}} |h(z)-h(0)|\,dz$$
$$\leq \varepsilon Dp\frac{1}{p} \leq D\varepsilon$$

En résumé

$$\lim_{p\to+\infty}\int_0^{\gamma(p)} (h(z)\frac{\partial}{\partial z}[u_r^p(f(z),z)] + \frac{1}{e}h(0))dz = 0$$

c'est-à-dire

$$\lim_{p\to+\infty}\int_{\gamma_{LG}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p)rds = -\frac{1}{e}h(0) \tag{2.27}$$

Et donc de (2.26) et (2.27), on déduit

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} dj_{LG}(\omega^*).u^p = -\frac{1}{e}h(0)} \tag{2.28}$$

2.3.2.3 Etude du terme $dj_{LS}(\omega^*).u^p$

Par (1.15), (2.3) et (2.4), on a $dj_{LS}(\omega^*).u^p = \mu\displaystyle\int_{\gamma_{LS}^*} u_r^p dr + \mu\int_{\gamma_{LS}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p)rdr$

Comme $\gamma_{LS} \cap \mathrm{support}(u^p) = \left[f(0)-\dfrac{1}{p}, f(0)\right]$ et u_r^p est bornée par 1, on a

$$\int_{\gamma_{LS}^*} u_r^p ds \leq (f(0) - (f(0) - \frac{1}{p})) = \frac{1}{p}$$

D'où

$$\lim_{p\to+\infty}\int_{\gamma_{LS}^*} u_r^p ds = 0 \tag{2.29}$$

C'est le second terme contenant la divergence surfacique $\displaystyle\int_{\gamma_{LS}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p)rdr$ sur γ_{LS} qui, comme pour le terme dj_{LG}, va contribuer au calcul final de l'angle de contact.

On a ${}^tDu^p = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial u_r^p}{\partial r} & 0 \\ \dfrac{\partial u_r^p}{\partial z} & 0 \end{pmatrix}$ et $\overrightarrow{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Donc $\displaystyle\int_{\gamma_{LS}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r dr = \int_{f(0)-\frac{1}{p}}^{f(0)} \frac{\partial u_r^p}{\partial r}(r,0) r dr + 0$

En effectuant une intégration par parties, on trouve

$$\int_{\gamma_{LS}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r dr = [r u_r^p(r,0)]_{f(0)-\frac{1}{p}}^{f(0)} - \int_{f(0)-\frac{1}{p}}^{f(0)} u_r^p(r,0) dr$$

Le second terme du membre de droite de cette égalité a une limite nulle quand p tend vers $+\infty$ car u_r^p est bornée par 1.

Il reste

$$[r u_r^p(r,0)]_{f(0)-\frac{1}{p}}^{f(0)} = \frac{f(0)}{e}$$

D'où l'on déduit

$$\lim_{p\to+\infty} \int_{\gamma_{LS}^*} \mathrm{div}_\gamma(u^p) r dr = \frac{f(0)}{e} \tag{2.30}$$

Et donc

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} dj_{LS}(\omega^*).u^p = \mu \frac{f(0)}{e}} \tag{2.31}$$

2.3.2.4 Le terme $dj_{elec}(\omega^*).u^p$

De (1.22) et (2.3), on déduit

$$\begin{aligned} dj_{elec}(\omega^*).u^p = & -\frac{\delta}{2}\int_{\omega^*} \varepsilon u_r^p ||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2 dr dz - \frac{\delta}{2}\int_{\omega^*} \varepsilon ||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2 \mathrm{div}(u^p) r dr dz \\ & + \frac{\delta}{2}\int_{\omega^*} \varepsilon \left[({}^tDu^p + Du^p)\nabla\varphi^{\omega^*} \cdot \nabla\varphi^{\omega^*}\right] r dr dz \end{aligned} \tag{2.32}$$

Ce sont les termes contenant les contributions électrostatiques dans la dérivée de l'énergie. On distingue les trois termes de (2.32).

1. Etude du premier terme $\displaystyle\int_{\omega^*} \varepsilon u_r^p ||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2 dr dz$, on va utiliser le théorème de convergence dominée de Lebesgue.
   On peut majorer $|\varepsilon|$ par sa norme infinie sur le domaine $||\varepsilon||_\infty$.

Puis on peut trouver M constante strictement positive telle que

$$\varepsilon u_r^p \chi_{B_p} ||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2 \leq ||\varepsilon||_\infty M ||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2 r$$

Comme on sait que $\varphi^{\omega^*} \in \check{H}^1(\omega^*)$, on en déduit que $||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2 r \in L^1(\omega^*)$ et est finie presque partout.

De plus

$$\varepsilon u_r^p \chi_{B_p} ||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2 \to 0 \text{ p.p., lorsque } p \to +\infty$$

Donc

$$\lim_{p \to +\infty} \int_{\omega^*} \varepsilon u_r^p ||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2 dr dz = 0 \tag{2.33}$$

2. Etude du second terme $\displaystyle\int_{\omega^*} \varepsilon ||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2 \mathrm{div}(u^p) r dr dz$. Il est plus délicat à traiter car il nécessite la comparaison du comportement des deux termes singuliers au voisinage de A : $\mathrm{div}(u^p)$ et $||\nabla \varphi^{\omega^*}||^2$.
   On dispose d'une majoration de la divergence de u^p donnée en (2.23). En ce qui concerne $||\nabla \varphi^{\omega^*}||$, on peut préciser le comportement de sa norme L^2 au voisinage du point A dans chaque domaine ω_S^* et ω_G^*.
   On choisit de travailler avec les coordonnées polaires (ρ, θ) centrées en A, comme décrit en figure 2.6. On utilise le théorème de régularité 2.2.4 énoncé

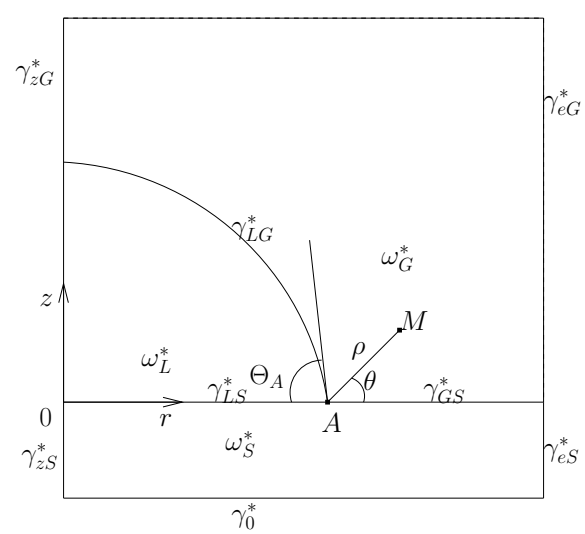


FIG. 2.6 – Coordonnées polaires centrées en A

en section 2.2.

Par la proposition 2.2.4, ν donné par ce théorème est tel que $\nu \in]\frac{1}{2}, 1[$.
Nous allons maintenant donner une majoration de la norme L^2 du module du gradient de $\varphi_i^{\omega^*}$ sur $\omega_i^* \cap B_p$ noté $||\nabla \varphi_i^{\omega^*}||^2_{\check{L}^2(\omega_i^* \cap B_p)}$.
En posant $g_i = \varphi_i^{\omega^*} - cS_i \in \check{H}^2(\omega_i^*)$, on a

$$||\nabla \varphi_i^{\omega^*}||^2_{\check{L}^2(\omega_i^* \cap B_p)} \leq 2\left[||c\nabla S_i||^2_{\check{L}^2(\omega_i^* \cap B_p)} + ||\nabla g_i||^2_{\check{L}^2(\omega_i^* \cap B_p)}\right].$$

Traitons d'abord le terme $||c\nabla S_i||^2_{\check{L}^2(\omega_i^* \cap B_p)}$.
Choisissons p suffisamment grand pour que $\eta_{/B_p} \equiv 1$, où on rappelle que η est la fonction de troncature intervenant dans l'expression de la partie singulière de la solution (voir théorème 2.2.4).
En calculant l'expression explicite de ∇S_i, on obtient la majoration suivante :

$$||\nabla S_i||^2 \leq D^* \rho^{2(\nu-1)}$$

où D^* est une constante strictement positive.
D'où

$$\begin{aligned} ||\nabla S_i||^2_{\check{L}^2(\omega^* \cap B_p)} &\leq (f(0) + \frac{1}{p}) \int_{\omega^* \cap B_p} ||\nabla S_i(\rho, \theta)||^2 \rho d\rho d\theta \\ &\leq D^*(f(0) + \frac{1}{p}) \int_{B_p} \rho^{2\nu-1} d\rho d\theta \\ &= D^*(f(0) + \frac{1}{p}) \frac{\pi}{\nu} p^{-2\nu} \end{aligned} \tag{2.34}$$

Pour majorer $||\nabla g_i||^2_{L^2(\omega_i^* \cap B_p)}$, on utilise l'injection de Sobolev donnée en [Nic00] p.27 qui donne en axisymétrique :

$$\check{H}^1(\omega_i^*) \subset \check{L}^5(\omega_i^*)$$

qui permet d'écrire

$$\int_{\omega_i^* \cap B_p} ||\nabla g_i||^2 r d\omega = \int_{\omega_i^*} \underbrace{\chi_{B_p}}_{\check{L}^{\frac{5}{3}}(\omega_i^*)} \underbrace{||\nabla g_i||^2}_{\check{L}^{\frac{5}{2}}(\omega_i^*)} r d\omega \leq (f(0) + \frac{1}{p}) \underbrace{||\chi_{B_p}||_{L^{\frac{5}{3}}(\omega_i^*)}}_{\text{mes}(B_p)^{\frac{3}{5}}} \underbrace{||\nabla g_i||_{\check{L}^5(\omega_i^*)}}_{K_i} \tag{2.35}$$

Des deux estimations (2.34) et (2.35), on déduit :

$$||\nabla \varphi_i^{\omega^*}||^2_{\check{L}^2(\omega_i^* \cap B_p)} \leq 2(f(0) + \frac{1}{p})[cD^* \frac{\pi}{\nu} p^{-2\nu} + K_i \text{mes}(B_p)^{\frac{3}{5}}]$$

pour $i \in \{S, G\}$
On peut alors écrire une estimation de la norme du gradient du potentiel sur tout le domaine ω^*

$$||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2_{\check{L}^2(\omega^*\cap B_p)} \leq 2(f(0)+\frac{1}{p})\left[cD^*\frac{\pi}{\nu}p^{-2\nu}+K^*\text{mes}(B_p)^{\frac{3}{5}}\right] \tag{2.36}$$

où $K^* = K_S + K_G$.

Reprenons maintenant le terme $\displaystyle\int_{\omega^*}\varepsilon||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2\text{div}(u^p)rdrdz$. Pour p assez grand on a l'inégalité (2.23) qui majore la divergence de u^P en fonction de p.
On en déduit donc l'existence d'une constante M strictement positive telle que

$$\begin{aligned}\int_{\omega^*}\varepsilon||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2\text{div}(u^p)rdrdz &\leq Mp\underbrace{\int_{\omega^*\cap B_p}||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2rdrdz}_{||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2_{\check{L}^2(\omega^*\cap B_p)}} \text{ par (2.23)}\\ &\leq 2Mp(f(0)+\frac{1}{p})\left[cD^*\frac{\pi}{\nu}p^{-2\nu}+K^*\frac{\pi^{\frac{3}{5}}}{p^{\frac{6}{5}}}\right]\end{aligned}$$

Et comme

$$-2\nu+1<0,$$

on en déduit que

$$\lim_{p\to+\infty}\int_{\omega^*}\varepsilon||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2\text{div}(u^p)rdrdz = 0 \tag{2.37}$$

3. Etude du dernier terme

$$\int_{\omega^*}\varepsilon\left[({}^tDu^p+Du^p)\nabla\varphi^{\omega^*}\cdot\nabla\varphi^{\omega^*}\right]rdrdz.$$

Ce terme est du même type que le précédent.
On a ${}^tDu^p + Du^p = \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u_r^p}{\partial r} & \frac{\partial u_r^p}{\partial z} \\ \frac{\partial u_r^p}{\partial z} & 0 \end{pmatrix}$.
En posant $\nabla\varphi^{\omega^*} = \begin{pmatrix} \delta_r \\ \delta_z \end{pmatrix}$

on obtient

$$\left[({}^tDu^p + Du^p)\nabla\varphi^{\omega^*} \cdot \nabla\varphi^{\omega^*}\right] = 2\frac{\partial u_r^p}{\partial r}(\delta_r)^2 + 2\frac{\partial u_r^p}{\partial z}\delta_r\delta_z$$

D'où l'on déduit

$$\left|\int_{\omega^*} \varepsilon\left[({}^tDu^p + Du^p)\nabla\varphi^{\omega^*} \cdot \nabla\varphi^{\omega^*}\right] rdrdz\right|$$
$$\leq 2||\varepsilon||_\infty \int_{\omega^*\cap B_p} \left(\left|\frac{\partial u_r^p}{\partial r}(\delta_r)^2 + \frac{\partial u_r^p}{\partial z}\delta_r\delta_z\right|\right) rdrdz$$
$$\leq 2||\varepsilon||_\infty \left[\int_{\omega^*\cap B_p} \left|\frac{\partial u_r^p}{\partial r}\right| ||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2 rdrdz + \frac{1}{2}\int_{\omega^*\cap B_p} \left|\frac{\partial u_r^p}{\partial z}\right| ||\nabla\varphi^{\omega^*}||^2 rdrdz\right]$$

Comme dans (2.23), on a

$$\left|\frac{\partial u_r^p}{\partial r}\right| \leq 2Cp \text{ et } \left|\frac{\partial u_r^p}{\partial z}\right| \leq Dp$$

De même :

$$r \leq f(0) + \frac{1}{p}$$

Par un raisonnement analogue à celui de l'étude précédente, on montre que

$$\lim_{p\to+\infty} \int_{\omega^*} \varepsilon\left[({}^tDu^p + Du^p)\nabla\varphi^{\omega^*} \cdot \nabla\varphi^{\omega^*}\right] rdrdz = 0 \tag{2.38}$$

Et donc de (2.33), (2.37) et (2.38) on déduit :

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} dj_{elec}(\omega^*).u^p = 0} \tag{2.39}$$

2.3.2.5 Conclusion

Par des raisonnements analogues, on montre que

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} dc(\omega^*).u^p = 0} \tag{2.40}$$

et de (2.25), (2.28), (2.31), (2.39), et (2.40), on déduit

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} dj(\omega^*).u^p = \frac{1}{e}[-h(0) + \mu f(0)]} \tag{2.41}$$

2.3.3 Valeur de l'angle de mouillage

Au minimum d'énergie ω^*, on vérifie :

$$\exists \lambda^* \in \mathbb{R} \text{ tel que pour tout } p \text{ assez grand}, \quad dj(\omega^*).u^p = \lambda^* dc(\omega^*).u^p.$$

Donc

$$\lim_{p \to +\infty} dj(\omega^*).u^p = \lambda^* \lim_{p \to +\infty} dc(\omega^*).u^p$$

De (2.41) on déduit que

$$h(0) = \mu f(0)$$

Et donc si $f(0) \neq 0$, on en conclut que :

$$\mu = \frac{f'(0)}{\sqrt{1 + f'^2(0)}} \tag{2.42}$$

L'expression de droite n'est autre que l'opposé du cosinus de l'angle de contact

$$\boxed{\cos(\Theta_A) = -\mu} \tag{2.43}$$

Vu la définition de μ (donnée en (1.8) page 24) et de l'angle de Young (donnée en (1.2) page 17), on en déduit que la valeur de l'angle de contact pour une goutte optimale à géométrie axisymétrique est l'angle de Young θ_Y et ceci quelque soit le potentiel appliqué.

■

2.4 Conclusion

En utilisant les résultats du chapitre précédent dans le cas d'un domaine axisymétrique, nous avons montré, grâce à un résultat de régularité du potentiel, que l'angle de contact est égal à l'angle de Young. Il est donc indépendant du potentiel ϕ_0 appliqué et est égal à l'angle de mouillage donné par $-\mu$.

Il peut paraître surprenant de trouver un tel résultat au vu des résultats des expériences physiques. La goutte s'étale mais "doit" garder un angle de contact constant quelque soit le potentiel appliqué. Il est donc utile de s'intéresser à la visualisation des formes de goutte.

Ainsi, après cette étude plutôt théorique, nous allons donc nous concentrer sur l'aspect numérique du modèle. Nous souhaitons simuler numériquement les formes de goutte, les comparer aux résultats expérimentaux et tenter de visualiser l'invariance de l'angle de contact.

Chapitre 3

Approximation numérique : Approche optimisation de forme et traitement des singularités

Ce chapitre est consacré à une première approximation numérique du problème d'électromouillage. Le but est de simuler au mieux les formes de goutte à un potentiel et un volume donnés en gardant en mémoire le résultat du chapitre précédent concernant l'invariance de l'angle de contact.

La première partie de ce chapitre exposera l'algorithme utilisé pour calculer les formes de goutte et précisera les différentes notations discrètes nécessaires.

La seconde partie permettra de présenter les premiers résultats numériques obtenus en faisant une approximation classique par éléments finis du potentiel électrostatique.

Après avoir analysé ces résultats nous tenterons de les améliorer en précisant le calcul approché du potentiel électrostatique par une prise en compte la singularité du potentiel.

Une première idée simple consistera à rajouter une fonction singulière à la base éléments finis (voir aussi [Bou97] dans le cas d'un calcul de potentiel par des équations intégrales) c'est ce qui sera traité en troisième partie.

Puis la quatrième partie utilisera un traitement plus élaboré des singularités. Nous adapterons la Méthode du Complément Singulier (développée dans [ACLS03] pour les équations de Maxwell et dans [CH03] pour l'opérateur laplacien en 2D) au problème de transmission axisymétrique donnant le potentiel électrostatique.

3.1 Principe

Nous nous plaçons toujours dans le cas axisymétrique comme au chapitre 2.

On rappelle que le modèle décrit dans les chapitres précédents implique la résolution d'un problème d'optimisation sous contrainte de volume. Nous cherchons donc un point selle du Lagrangien associé à ce problème.

On gardera les notations du chapitre 2 et on adimensionne le problème. On va donc minimiser la fonctionnelle sur les domaines ω adimensionnés :

$$j(\omega) = \underbrace{\hat{\alpha}\int_{\omega} r d\omega}_{j_{grav}(\omega)} + \underbrace{\int_{\gamma_{LG}} r ds + \mu \int_{\gamma_{LS}} r ds}_{j_{cap}(\omega)} \underbrace{-\frac{\hat{\delta}}{2}\int_{\omega} \varepsilon ||\nabla \varphi^{\omega}||^2 r dr dz}_{j_{elec}(\omega)} \tag{3.1}$$

où $\hat{\alpha} = \frac{\rho g (L^*)^2}{\sigma_{LG}}$, $\quad \hat{\delta} = \frac{1}{\sigma_{LG} L^*}$

et

L^* est une longueur caractéristique du problème ($\approx 10^{-3}$).

De même la contrainte de volume est donnée par :

$$c(\omega) = \int_{\omega_L} r dr dz - \frac{\hat{v}ol}{2\pi} \tag{3.2}$$

où $\hat{v}ol = \frac{vol}{(L^*)^3}$.

Dans la suite on oubliera les ˆ de ces constantes, et on les notera α, δ et vol.

3.1.1 Algorithme

On reprend l'algorithme décrit dans [MW05] et plutôt que de travailler avec le lagrangien, nous introduisons le Lagrangien augmenté (c'est une démarche classique voir par exemple [FG82]) :

$$L_\tau : \mathcal{D}_{ad} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$

défini par :

$$L_\tau(\omega, \lambda) = j(\omega) + \lambda c(\omega) + \tau c(\omega)^2$$

λ est le multiplicateur de Lagrange et τ le paramètre de pénalisation.

On veut résoudre le problème de point selle suivant :

$$\text{Trouver } (\omega^*, \lambda^*) \in \mathcal{D}_{ad} \times \mathbb{R} \text{ tel que } L_\tau(\omega^*, \lambda^*) = \min_{\omega} \max_{\lambda} L_\tau(\omega, \lambda) \tag{3.3}$$

D'un point de vue algorithmique, on résout classiquement ce problème par l'**algorithme d'Uzawa**. On construit une suite d'itérés (ω^k, λ^k) convergeant vers le point selle recherché, de la façon suivante :

- On se donne ω^0 et λ^0.
- ω^k et λ^k étant donnés, on construit ω^{k+1} et λ^{k+1} tels que :
  étape 1. ω^{k+1} satisfait l'inégalité :

$$L_\tau(\omega^{k+1}, \lambda^k) \leq L_\tau(\omega, \lambda^k), \quad \forall \omega \in \mathcal{D}_{ad}$$

  étape 2. λ^{k+1} est tel que :

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \rho c(\omega^{k+1})$$

  où ρ constante strictement positive à choisir.
- **Sortie** Si $c(\omega^{k+1}) < \varepsilon_1 vol$, avec $\varepsilon_1 > 0$ donné.

L'**étape** 1. est un problème d'optimisation sans contrainte. Pour cette étape nous verrons que nous pourrons utiliser un algorithme de descente de type gradient (ici BFGS) qui utilise le calcul du gradient de forme de j et c (voir section 3.1.3).

Les choix de ρ et τ influent sur la vitesse de convergence de l'algorithme.

3.1.2 Aspect général des approximations

Dans l'algorithme d'Uzawa, nous avons besoin :
- de savoir représenter un domaine admissible ω de façon implémentable
- de travailler avec des éléments de $\mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2)$ (voir définition en 2.1.1.2).

C'est pourquoi, avant de décrire la démarche d'optimisation, nous commençons par préciser de façon assez générale ces deux points.

(a) **Approximation de la frontière d'un domaine admissible**

Soit ω un domaine admissible donné. Il est uniquement déterminé par sa frontière liquide-gaz γ_{LG}.

On suppose donnés N points sur γ_{LG} notés P_0, P_1, ..., P_{N-1}.

On approche alors γ_{LG} par la courbe γ_{LG}^h union des segments $[P_i, P_{i+1}]$ pour $i \in [0, N-2]$.

Pour $i \in [0, N-1]$ et $t \in [0, 1]$, on note $x_i(t)$ les fonctions linéaires par morceaux à valeurs réelles telles que

$$\forall j \in [0, N-1], \quad x_i(\frac{j}{N-1}) = \delta_{ij}, \text{ où } \delta_{ij} \text{ est le symbole de Kronecher.}$$

On trouvera un tracé des différentes fonctions en figure 3.1.

On note $h = \frac{1}{N}$.

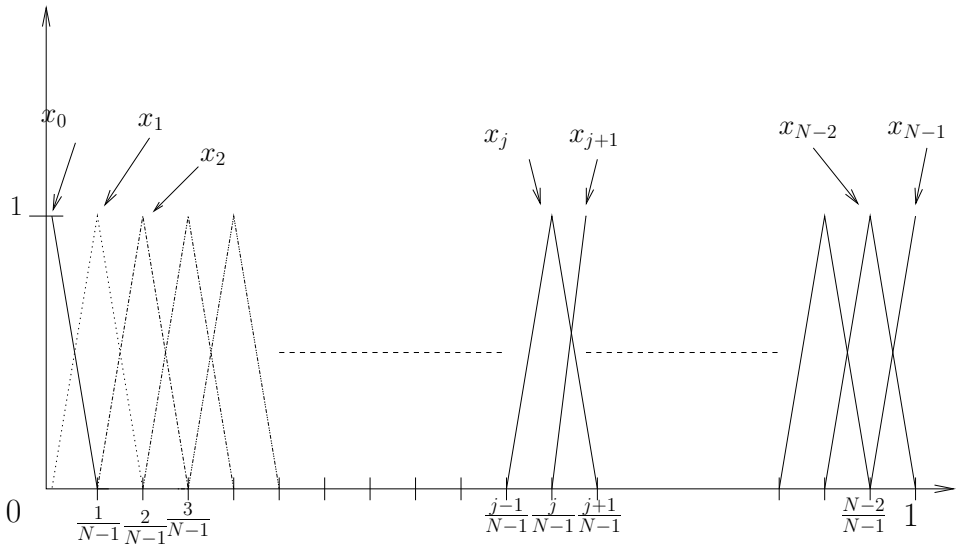


FIG. 3.1 – Les fonctions de base linéaires par morceaux

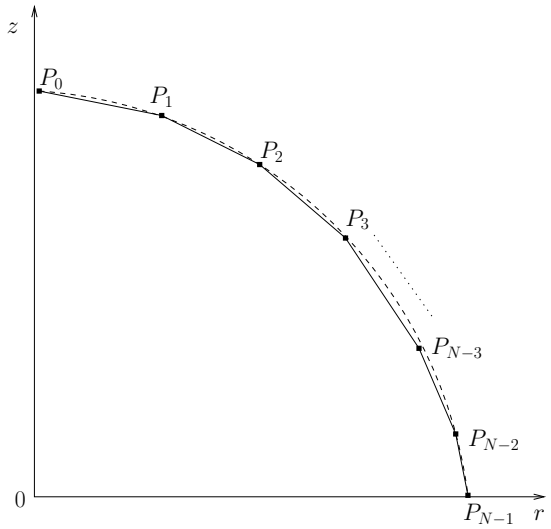


FIG. 3.2 – Approximation de la frontière γ_{LG}

On définit alors γ_{LG}^h comme la courbe donnée par le paramétrage

$$x^{\gamma_{LG}^h}(t) = \sum_{i=0}^{N-1} P_i x_i(t), \quad \forall t \in [0,1]$$

Les points P_0, P_1, ..., P_{N-1} de γ_{LG}^h sont appelés **points de contrôle** de

la goutte pour le domaine ω. γ_{LG}^h définit un domaine ω^h approximation du domaine ω.

Tout domaine admissible sera donc donné par un nombre fixé N de points de contrôle qui définiront sa frontière liquide-gaz.

On verra en section suivante comment est donné N et comment vont être déterminés les points $(P_i)_{i\in[0,N-1]}$.

(b) **Triangulation du domaine ω^h**

Afin de pouvoir approcher les quantités continues qui interviennent dans l'algorithme d'Uzawa (notamment le lagrangien et son gradient), nous travaillerons avec une triangulation du domaine ω^h.

Plus précisément, à γ_{LG}^h, donné par N points de contrôle, on associe une triangulation notée $\mathcal{T}_h$ du domaine ω^h.

On note :

- $N_{\mathcal{T}}$ le nombre de nœuds de la triangulation, et $(A_i)_{i=1..N_{\mathcal{T}}}$ les nœuds de cette même triangulation.
- Pour $i \in [1, N_{\mathcal{T}}]$, on considère ψ_i la fonction de base d'éléments finis de type Lagrange $\mathbb{P}_1$ associée au nœud A_i.
- $I = \left\{ i \in [0, N_{\mathcal{T}}] \text{ tels que } A_i \in \overset{\circ}{\widehat{\omega^h}} \right\}$ et $\mathcal{N}$ son cardinal
- $I_0 = \left\{ i \in [0, N_{\mathcal{T}}] \text{ tels que } A_i \in \gamma_0^h \right\}$
- $I_1 = \left\{ i \in [0, N_{\mathcal{T}}] \text{ tels que } A_i \in \gamma_{LG}^h \right\}$
  Les indices des points de contrôle P_i sont dans cet ensemble
- $I_2 = \left\{ i \in [0, N_{\mathcal{T}}] \text{ tels que } A_i \in \gamma_{LS}^h \right\}$
- $I_3 = \left\{ i \in [0, N_{\mathcal{T}}] \text{ tels que } A_i \in \gamma_{GS}^h \right\}$
- $I_4 = \left\{ i \in [0, N_{\mathcal{T}}] \text{ tels que } A_i \in \gamma_e^h \right\}$

(c) **Approximation de l'espace des déformations $\mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2)$**

Cet espace est de dimension infinie. Nous allons donc l'approcher par un espace vectoriel de dimension finie.

A partir des N points de contrôle sur la goutte, le principe d'approximation est de choisir N fonctions vectorielles de base $(V_i)_{i\in[0,N-1]}$ (dont le choix sera précisé ultérieurement) et on approche alors $\mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2)$ par $Vect(V_i, i = 0..N-1)$.

Ainsi tout $V \in \mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2)$ sera approché par

$$\sum_{i=0}^{N-1} \eta_i V_i \quad \text{pour } \eta_i \in \mathbb{R}, \quad \forall i \in [0, N-1]$$

Nous pouvons maintenant décrire la démarche utilisée pour mettre en œuvre l'algorithme d'Uzawa.

3.1.3 Mise en oeuvre

Dans cette section, on ne donnera que les grandes lignes de la mise en œuvre de l'algorithme d'Uzawa. Les détails pourront être trouvés dans [MW05] ou [CWB03].

3.1.3.1 Représentation du domaine de référence

Revenons à la définition d'un domaine admissible ω donnée en (2.2).

ω est image bilipschitzienne d'un domaine $\hat{\omega}$ de référence fixé. A partir de $\hat{\omega}$ on peut donc représenter tout domaine admissible ω.

Décrivons donc $\hat{\omega}$. Typiquement, $\hat{\omega}$ pourra être donné par un quart de cercle de centre O et de rayon choisi pour que le domaine vérifie la contrainte de volume.

On utilise l'approximation (a) de la section précédente pour $\hat{\omega}$:

On se donne N points de contrôle sur $\hat{\gamma}_{LG}$, $\hat{P}_0$, $\hat{P}_1$, ..., $\hat{P}_{N-1}$ et les $(\hat{P}_i)_{i\in[0,N-1]}$ pourront par exemple être choisis radialement équirépartis sur $\hat{\omega}$.

$\hat{\omega}$ est approché par $\hat{\omega}^h$, où $\hat{\omega}^h$ est donné par le paramétrage

$$\hat{x} = \sum_{i=0}^{N-1} \hat{P}_i x_i \quad \text{sur } [0,1].$$

A partir de l'approximation $\hat{\omega}^h$ de $\hat{\omega}$ nous allons maintenant décrire l'approximation ω^h de ω.

3.1.3.2 Représentation du domaine admissible

Pour tout domaine admissible ω on peut trouver $\hat{V} \in \mathcal{U}(\bar{\hat{\omega}}, \mathbb{R}^2)$ tel que

$$\omega = \left(Id + \hat{V}\right)(\hat{\omega})$$

On notera

$$\hat{F} = Id + \hat{V} \tag{3.4}$$

On utilise alors l'approximation (c) de la section précédente : Pour chaque $i \in [0, N-1]$, on choisit une fonction vectorielle $\hat{V}_i$ dans l'espace des déformations

de $\hat{\omega}$ vérifiant $\hat{V}_i = \frac{\hat{P}_i}{||\hat{P}_i||}$ sur $\hat{\gamma}_{LG}$. Ces fonctions seront approchées, grâce à la triangulation de $\hat{\omega}$, par éléments finis $\mathbb{P}_1$ par des fonctions $\hat{V}_i^h$.

On approche alors ω par le domaine

$$\omega^h = \hat{\omega}^h + \sum_{j=0}^{N-1} \eta_j \hat{V}_j^h(\hat{\omega}^h), \text{ avec } (\eta_j)_{j\in[0,N-1]} \in \mathbb{R}^N$$

Cette écriture permet d'obtenir les point de contrôles de ω^h :

$$P_i = \hat{P}_i + \sum_{j=0}^{N-1} \eta_j \hat{V}_j^h(\hat{P}_i)$$

Un domaine admissible quelconque sera donc entièrement déterminé par le N-uplet $(\eta_j)_{j\in[0,N-1]}$. Chercher un domaine optimal revient donc à chercher le N-uplet $(\eta_j)_{j\in[0,N-1]}$ qui résout le problème d'optimisation sous contraintes. C'est la **variable d'optimisation** du problème.

Reste donc à exprimer le lagrangien et sa différentielle en fonction de cette variable.

3.1.3.3 Expression du lagrangien et de son gradient

Le lagrangien augmenté $L_\tau(\omega, \lambda)$ est approché par $L_\tau(\omega^h, \lambda)$ qui peut donc être considéré comme une fonction du N-uplet $(\eta_j)_{j\in[0,N-1]}$:

$$\tilde{L}_\tau((\eta_j)_{j\in[0,N-1]}, \lambda) := L_\tau(\omega^h, \lambda)$$

L'**étape 1.** de l'algorithme d'Uzawa consiste donc à minimiser une fonction de plusieurs variables selon les N premières variables. Pour résoudre cette étape, on utilise un algorithme de descente de type BFGS qui nécessite le calcul du gradient de la fonctionnelle $\tilde{L}_\tau$. Plutôt que de discrétiser la fonctionnelle puis d'évaluer son gradient, on utilisera plutôt l'expression continue de la différentielle du lagrangien augmenté que nous discrétiserons ensuite : c'est ce que l'on appelle le gradient continu discrétisé.

On utilisera donc le vecteur à N composantes donné par

$$\left(DL_\tau(\omega^h, \lambda).V_i^h\right)_{i\in[0,N-1]}$$

avec $V_i^h = \hat{V}_i^h \circ \hat{F}^{-1}$ avec $\hat{F}$ définie en (3.4).

3.1.3.4 Calcul approché du potentiel

Lors de l'évaluation du lagrangien et de son gradient, il nous faut évaluer le potentiel électrostatique. Il peut y avoir plusieurs méthodes pour l'approcher (éléments finis, traitement de la singularité etc...). Dans cette section nous supposerons seulement que nous disposons d'une approximation $\varphi_h^{\omega^h}$ de φ^ω, mais nous ne détaillerons pas la méthode utilisée. En effet, le calcul du potentiel sera notre fil directeur pour les sections 3.2, 3.3, 3.4 qui suivent ; il y sera donc soigneusement détaillé ultérieurement.

3.1.3.5 Evaluation des intégrales

Le dernier point reste l'évaluation proprement dite du lagrangien augmenté et de son gradient. Ces deux quantités font apparaître des intégrales sur le domaine ou le bord du domaine. Nous utiliserons donc des formules de quadrature classiques à plus ou moins de points (surtout pour le terme contenant la contribution électrostatique qui demandera un traitement plus précis).

3.1.3.6 Résumé

Après s'être donné un domaine de départ (image du domaine de référence) $\eta^0 = (\eta_j^0)_{j\in[0,N-1]}$ et un réel λ^0 nous pouvons mettre en route l'algorithme de recherche du point selle. Lors de la mise en œuvre de l'algorithme d'Uzawa les variables d'optimisation seront les $(\eta_j)_{j\in[0,N-1]}$. A la forme convergée, on disposera donc d'un N-uplet η et d'un réel λ.

Nous terminons ce paragraphe en précisant le calcul de la courbure de la goutte qui sera effectué pour chaque forme de goutte convergée.

3.1.3.7 Calcul de courbure

Pour chaque forme convergée, afin de pouvoir observer le comportement de la goutte au voisinage de la ligne de mouillage, il sera calculé la courbure en utilisant une approximation locale aux moindres carrés de la courbe γ_{LG} par une courbe de Bézier ([DP98] pour un rappel complet sur les courbes de Bézier).

On pourra trouver une description précise de la méthode d'approximation et de sa validation dans [MW05, MWCWBS05].

Décrivons brièvement le calcul :

On rappelle qu'une courbe de Bézier C est donnée par $M \in \mathbb{N}^*$ points de Bézier C_i, $i = 1..M$.

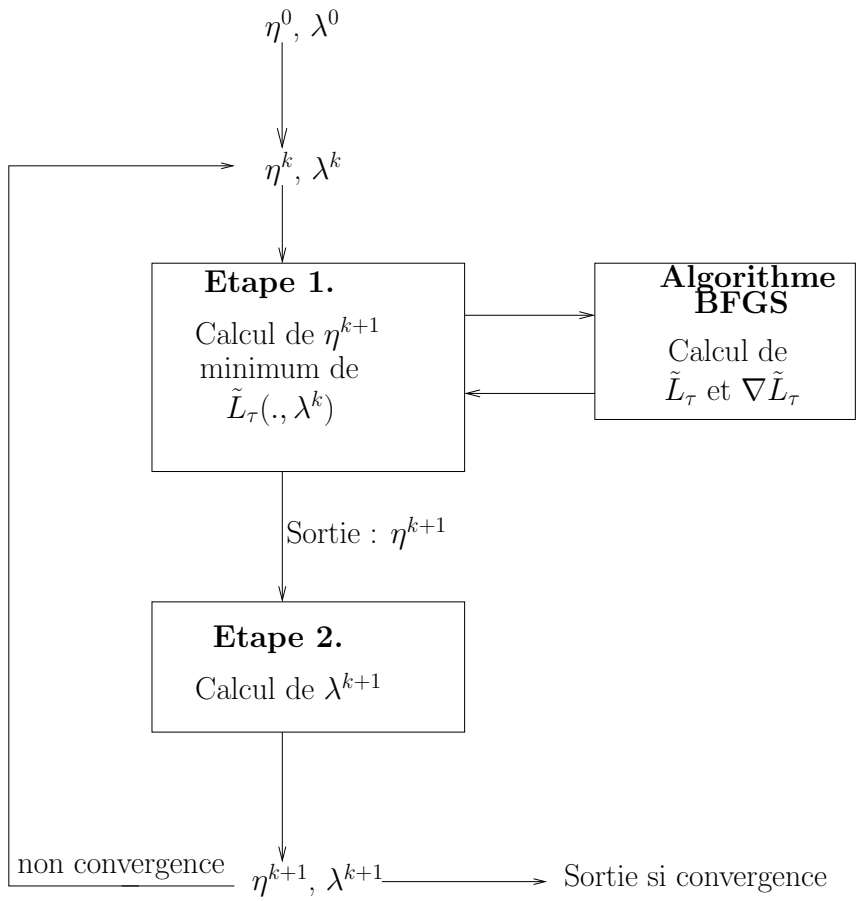


FIG. 3.3 – Résumé du procédé d'optimisation

Si $C(t) = (r(t), z(t))$ est un point de la courbe, alors :

$$C(t) = \sum_{j=1}^{M} C_j B_{j-1}^{M-1}(t), \text{ pour } t \in [0,1]$$

où $B_{j-1}^{M-1}(t)$ sont les polynômes de Bernstein donnés par : $B_j^m(t) = \binom{m}{j} t^j (1-t)^{m-j}$, et $\binom{m}{j}$ sont les coefficients binômiaux, pour m et j deux entiers.

On considère alors une interface liquide-gaz donnée par N points de contrôle, notés $P_i = (r_i, z_i)$ pour $i = 0..N-1$.

Pour un point P_i avec $i \in [2, N-3]$, on cherche la courbe de Bézier (avec $M = 3$) qui approche au mieux (au sens des moindres carrés) la courbe donnée par les 5 points de contrôle $(P_j)_{j\in[i-2,i+2]}$. En d'autres termes, si $(t_j)_{j\in[i-2,i+2]}$ est

une subdivision uniforme de $[0,1]$, on cherche $(C_i)_{i\in[1,3]}$ l'unique minimum de :

$$\sum_{k=i-2}^{i+2} ||\sum_{l=1}^{3} C_l B_{l-1}^{M-1}(t_k) - P_k||^2$$

Un traitement similaire est effectué pour les points extrémaux. Par exemple pour P_0, on cherche la courbe de Bézier approchant la courbe donnée par les points P_0,...,P_3.

Une fois la courbe de Bézier trouvée, l'expression de la courbure est donnée de façon explicite sans avoir à faire d'approximation sur les dérivées secondes.

3.1.3.8 Conclusion

Nous avons décrit dans ce paragraphe comment nous allons procéder en pratique pour calculer une forme de goutte à potentiel donné. Nous avons vu que le problème se ramène à une optimisation en dimension finie que nous résolvons par un algorithme d'Uzawa et un algorithme de descente BFGS. Enfin nous avons précisé un des traitements que nous effectuerons sur la forme convergée, qui consiste en le calcul de la courbure.

Reste maintenant à passer à l'implémentation proprement dite et aux résultats numériques.

Jusqu'à présent nous n'avons pas précisé le type d'approximation utilisé pour calculer le potentiel électrostatique. C'est maintenant ce qui va nous guider dans la suite de ce chapitre.

En effet, nous commencerons par présenter les résultats obtenus en approchant de façon classique le potentiel électrostatique, par éléments finis de type $\mathbb{P}_1$ Lagrange (en section 3.2).

Puis les deux sections suivantes tenteront d'améliorer les résultats obtenus dans le cas de l'approximation $\mathbb{P}_1$, en prenant en compte la singularité du potentiel (section 3.3 et section 3.4).

3.2 Première approximation du potentiel par éléments finis

Nous commençons donc par approcher le potentiel électrostatique par des éléments finis de type $\mathbb{P}_1$ Lagrange.

3.2.1 Mise en œuvre

Soit ω un domaine admissible donné.

A ce domaine, on associe une triangulation $\mathcal{T}_h$ donnée en section 3.1.2.

3.2.1.1 Approximation du potentiel

On rappelle que φ^ω est solution de :

$$(\mathcal{F}v)_\omega \begin{cases} \text{Trouver } \varphi^\omega \in \check{H}^1_\gamma(\omega) \text{ tel que,} \\ \forall v \in \check{H}^1_0(\omega), \quad \displaystyle\int_\omega \varepsilon \left(\nabla\varphi^\omega \,.\, \nabla v\right) r dr dz = 0 \end{cases}$$

où $(.\,.\,.)$ désigne le produit scalaire euclidien dans $\mathbb{R}^2$.
On pose

$$W^h := Vect\left((\psi_i)_{i\in[0,N_\mathcal{T}]}\right)$$

et

$$W^h_0 := \left\{v \in W^h \text{ tels que } v(A_i) = 0,\ \forall i \in I_0 \cup I_1 \cup I_2\right\}$$

$$W^h_\gamma := \left\{v \in W^h \text{ tels que } v(A_i) = 0,\ \forall i \in I_0 \text{ et } v(A_i) = \phi_0,\ \forall i \in I_1 \cup I_2\right\}$$

Dans l'approche éléments finis $\mathbb{P}_1$, on cherche

$$\varphi^{\omega^h}_h := \sum_{i=0}^{N_\tau} \lambda_i \psi_i \in W^h_\gamma, \quad \lambda_i \in \mathbb{R} \quad \forall i \in [0, N_\tau]$$

solution de

$$\int_{\omega^h} \varepsilon \left(\nabla\varphi^{\omega^h}_h \,.\, \nabla v\right) r dr dz = 0,\ \forall v \in W^h_0$$

Pour résoudre ce problème, nous sommes amenés à considérer les termes

$$\left(\int_{\omega^h} \varepsilon \left(\nabla\psi_i \,.\, \nabla\psi_j\right) r dr dz\right)_{(i,j)\in[0,N_\tau]^2} \tag{3.5}$$

et la matrice de rigidité axisymétrique associée.

Ces intégrales peuvent être calculées de façon exacte.

Trouver l'approximation du potentiel est alors classique d'une approche éléments finis $\mathbb{P}_1$.

On notera dans la suite

$$a^h(u,v) := \int_{\omega^h} \varepsilon \left(\nabla u \,.\, \nabla v\right) r dr dz \text{ pour } (u,v) \in W^h \times W^h$$

3.2.1.2 Approximation du lagrangien et de son gradient

Les différentes intégrales intervenant dans le calcul du lagrangien discrétisé ne peuvent être calculées exactement et demandent d'utiliser des formules de quadrature. Cependant des formules de quadratures avec peu de points suffisent (trois pour un triangle et deux pour une arête).
Dans les sections 3.3 et 3.4, nous verrons que nous ne modifierons que le calcul du potentiel électrostatique, donc les seules précisions supplémentaires à apporter seront les calculs des intégrales faisant intervenir le potentiel électrostatique.

Nous passons maintenant aux résultats numériques. Nous commencerons par donner les valeurs des paramètres utilisés et ferons des tests de validation du code. Ceci reste valable dans les sections suivantes 3.3 et 3.4. Nous passerons ensuite aux résultats numériques proprement dits pour l'approximation du potentiel par éléments finis $\mathbb{P}_1$.

3.2.2 Résultats numériques

Sur la base du code "Electrocap" développé par J. Monnier et P. Chow Wing Bom du laboratoire Jean Kuntzmann de Grenoble ([CWB03]), nous avons simulé la forme de goutte à un potentiel donné dans le cas axisymétrique. Il permet la mise en oeuvre de l'algorithme d'Uzawa pour trouver un point selle du lagrangien.

Le code, développé en C++, est basé sur la librairie éléments finis Rheolef développée par P. Saramito au Laboratoire Jean Kuntzmann de Grenoble ([SRE]). Le mailleur utilisé est Bamg ([Hec]) développé par F.Hecht. A chaque appel du simulateur un remaillage automatique est utilisé.

On pourra retrouver les résultats qui suivent dans [MWCWBS05].

3.2.2.1 Paramètres numériques et physiques

(a) **Les paramètres physiques** ont été fixés en se basant sur des données réalistes.
- Les coefficients de tension de surface (en N/m) : $\sigma_{LG} = 5\ 10^{-2}$.
- Une fois σ_{LG} fixés, se donner σ_{GS} et σ_{LS} revient à se donner un angle de Young θ_Y (qui est l'angle à $0V$). On rappelle en effet la relation :

$$\cos(\theta_Y) = \frac{\sigma_{GS} - \sigma_{LS}}{\sigma_{LG}}.$$

  Nous fixerons donc de façon indifférente σ_{GS} et σ_{LS} ou θ_Y. Nous en préciserons les valeurs lorsque nous donnerons les résultats numériques.
- L'épaisseur de l'isolant (en m) : $e = 200\ 10^{-6}$,
- Les permittivités diélectriques

  - relatives : $\varepsilon_S = 2$, $\varepsilon_G = 1$
  - absolue (en F/m) : $\varepsilon_0 = 8.85\ 10^{-12}$
- Le volume de la goutte (en L) : $vol = 40\ 10^{-9}$

Le nombre de Bond $\alpha = \frac{\rho g}{\sigma_{LG}}$ est petit ce qui signifie que dans la fonction coût *on négligera le terme gravitationnel.*

La fonction coût est alors donnée par :

$$j(\omega) \ = \ j_{cap}(\omega) \ + \ j_{elec}(\omega) \tag{3.6}$$

(b) **Les paramètres numériques** utilisés ont été fixés de façon à optimiser le temps de calcul et la précision du résultat :
- le paramètre de pénalisation : $\tau = 10^{-3}$.
- le paramètre de descente dans l'actualisation de λ : $\rho = 10^{-3}$
- Le paramètre de convergence pour l'algorithme d'Uzawa : $\varepsilon_1 = 10^{-3}$.
- Le nombre de points de contrôle a en général été fixé à $NPC := 50$. Nous pouvons l'augmenter pour accroître la précision sur la forme de la goutte. Mais si ce nombre est trop grand soit on observe des instabilités, soit le temps de calcul devient très grand pour un faible gain en précision.
- Le paramètre d'adimensionnement : $L^* = 200 \times 10^{-6}$.

3.2.2.2 Validation du code

(a) **Validation des composantes**
Toutes les composantes du code ont été validées (minimisation, algorithme de descente). En particulier le calcul du gradient continu discrétisé a été validé par rapport au calcul par différences finies du gradient du lagrangien discrétisé.

(b) **Validation à potentiel nul**
Dans la mise en oeuvre du code, il faut se donner une courbe initiale. Le plus souvent il sera bon de prendre une courbe a priori pas trop éloignée de la courbe convergée.

Nous avons effectué des tests simples à $0V$. La forme d'équilibre à potentiel nul pour un angle de Young de 90° et le volume donné (adimensionné) ci-dessus est le quart de cercle de rayon 10.

Nous avons donc choisi différentes formes de gouttes initiales (droite, "carré"...) et observé la forme convergée issue du code. On présente en figure 3.4 deux exemples de formes initiales choisies. Ces deux formes ont convergé vers la forme donnée en figure 3.5 à $0V$. Ce qui est bien cohérent avec la théorie.

(c) **Approximation condensateur plan numérique**
On rappelle que l'approximation condensateur plan consiste à considérer le système formé par la goutte dans l'air posée sur l'isolant comme un

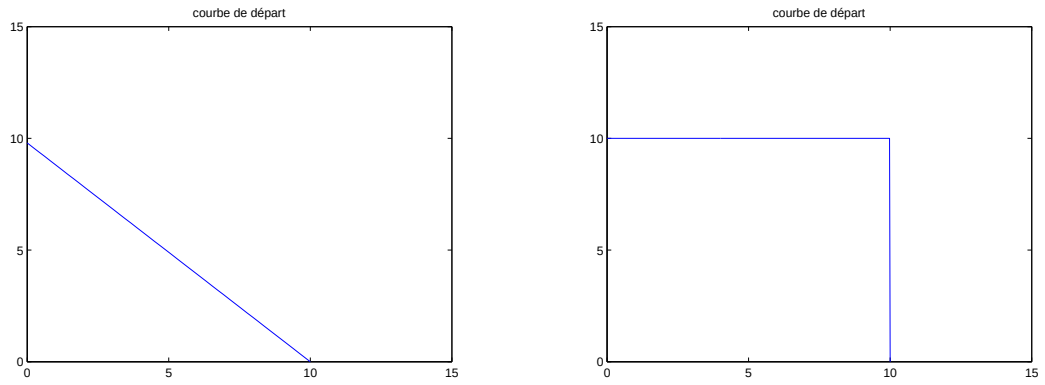


FIG. 3.4 – *Gauche :* Forme initiale correspondant à une droite, *Droite :* Forme initiale correspondant à un carré

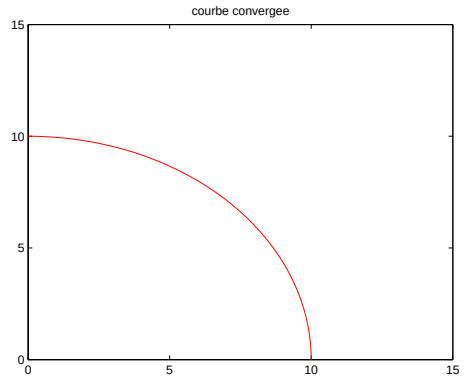


FIG. 3.5 – Forme convergée obtenue dans les deux cas

condensateur plan. Ceci permet de connaître la loi d'évolution de l'angle de contact noté θ_c en fonction du potentiel ϕ_0 imposé. On a alors **l'équation de Lippmann** :

$$\cos(\theta_c) = \cos(\theta_Y) + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_S}{2e\sigma_{LG}} \tag{3.7}$$

Avec notre modèle, nous sommes capables de prendre en compte une telle forme de goutte. En effet, faire cette approximation revient tout simplement à considérer notre modèle à potentiel nul mais avec une tension de surface σ_{LS} qui varie en fonction de ϕ_0 selon une loi connue donnée par :

$$\sigma_{LS}(\phi_0) = \sigma_{LS} - \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_S}{2e}\phi_0^2 \tag{3.8}$$

Ainsi, afin de valider le code nous avons simulé l'approximation de Lippmann en utilisant le code à potentiel nul et en ne faisant varier que la tension

de surface σ_{LS} pour chaque valeur du potentiel ϕ_0 en utilisant la formule donnée par l'approximation condensateur plan (3.8).

Ainsi, théoriquement pour ce modèle, l'angle de contact doit être donné par l'équation de Lippmann (3.7).

Numériquement on observe une bonne adéquation avec la théorie. La figure 3.6 donne les valeurs de l'angle de contact numérique (on mesure cet angle entre les deux derniers points de contrôle de la goutte) et l'angle théorique est fourni par l'équation de Lippmann.

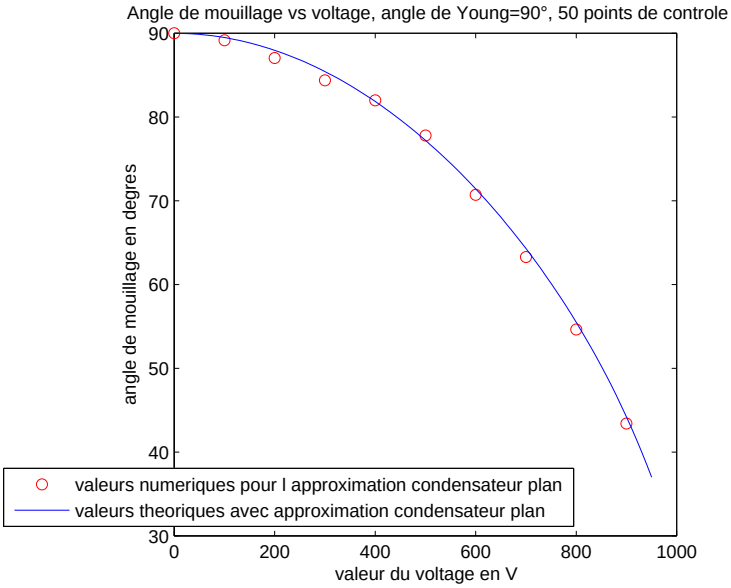


FIG. 3.6 – Approximation condensateur plan

Nous avons de plus calculé numériquement la courbure pour chaque valeur de $\sigma_{LS}(\phi_0)$. Si on se donne une valeur de ϕ_0 et donc une valeur de σ_{LS}, on remarque que numériquement la courbure reste constante en chaque point de la goutte.

On obtient donc là aussi une très bonne adéquation avec la théorie. En effet la forme de goutte solution est dans ce cas une calotte sphérique, donc la solution doit garder une courbure constante.

Remarque 3.2.1 *Ceci valide le code indépendamment du mode de calcul du potentiel électrostatique utilisé*

Nous passons maintenant à la simulation des formes de goutte à potentiel donné pour le modèle complet.

3.2.2.3 Forme de la goutte et angle de mouillage.

Maillage de la goutte La figure 3.7 donne un exemple de maillage de la goutte obtenu pour $\phi_0 = 400$ V (gauche) et un zoom du raffinement de maillage près du bord (droite). Tous les maillages contiennent approximativement 4000 éléments et 2000 sommets.
A chaque simulation la contrainte de volume est satisfaite à moins de 0.1%.

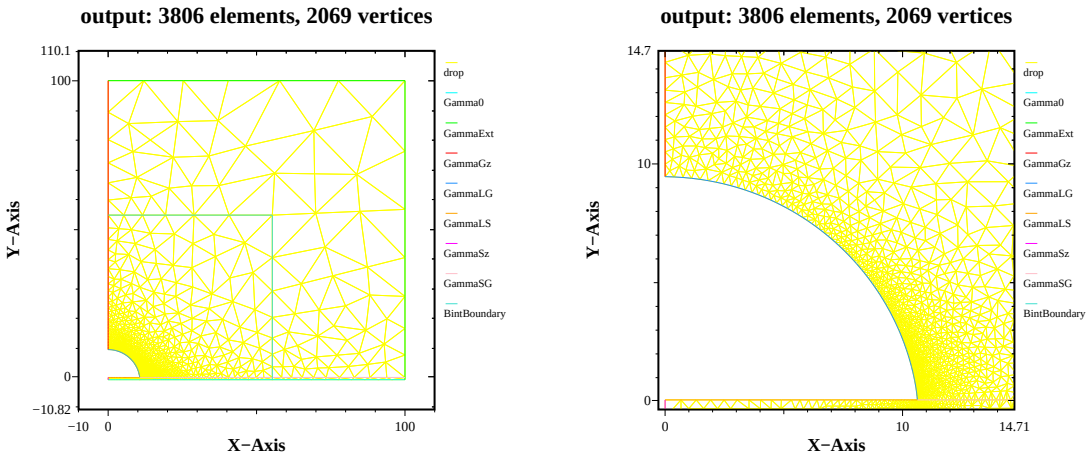


FIG. 3.7 – *Gauche,* Forme et maillage pour $\phi_0 = 400$ V ; *Droite,* Zoom près de la ligne de mouillage.

Forme de goutte à différents potentiels La Figure 3.8 présente la forme des gouttes pour différentes valeurs du potentiel ϕ_0 et pour un angle de Young θ_Y donné de 90°.

On remarque un étalement progressif de la goutte au fur et à mesure de l'augmentation du potentiel ϕ_0 imposé.

Les résultats obtenus pour des angles de Young différents sont qualitativement les mêmes. On ne donnera donc que quelques analogues des figures tracées pour le cas d'un angle de Young de 90°. On donne par exemple en figure 3.9, l'analogue

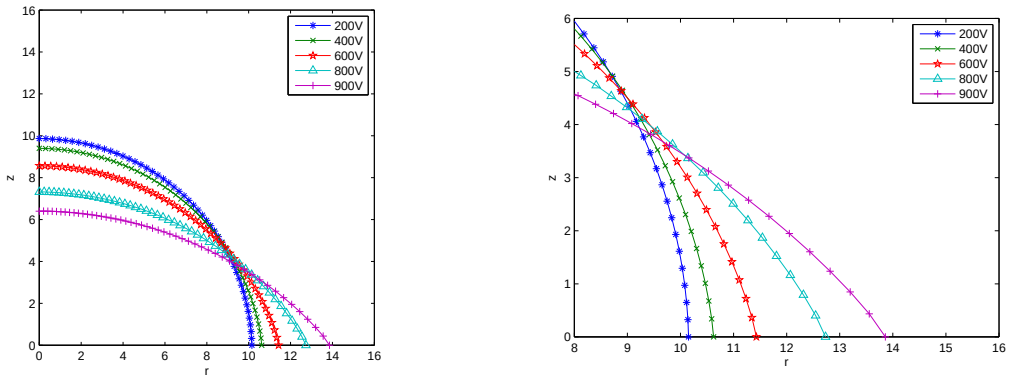


FIG. 3.8 – Forme de goutte pour différentes valeurs de ϕ_0. A droite : zoom au niveau du point triple.

de la figure 3.8 (gauche) pour un angle de Young de 60°. De même en figure 3.10 pour un angle de Young de 120°.

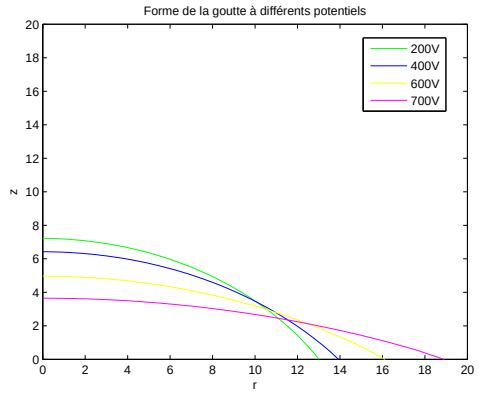


FIG. 3.9 – Evolution de la forme de goutte en fonction du potentiel pour un angle de Young de 60°

Nous observons que l'angle de contact ne semble pas être constant ; ceci est confirmé par ce qui suit.

Valeurs de l'angle de mouillage La figure 3.11 (gauche et droite) présente les valeurs de l'angle de mouillage en fonction de ϕ_0. Dans les deux figures, on a tracé à la fois la valeur numérique ainsi que la valeur prédite par l'équation de Lippmann.

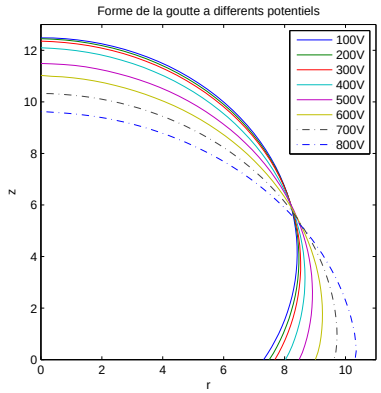


FIG. 3.10 – Evolution de la forme de goutte en fonction du potentiel pour un angle de Young de 120°

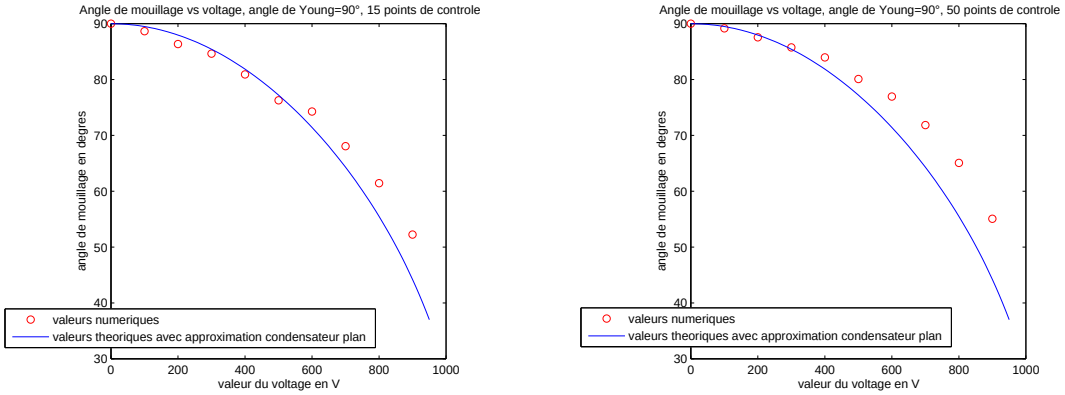


FIG. 3.11 – Angle de contact. Valeurs numériques et valeurs de l'angle données par l'approximation de Lippmann. *Gauche.* Avec $NPC = 15$ points *Droite.* Avec $NPC = 50$ points

Afin d'observer l'effet de la variation du nombre de points de contrôle, à gauche sont tracées les valeurs obtenues pour 15 points de contrôle ($NPC = 15$) et à droite les valeurs obtenues en utilisant 50 points de contrôle ($NPC = 50$).

Avec ce modèle numérique et avec un nombre de points de contrôle peu élevé (15 points), on constate que les résultats sont en accord avec les prédictions de l'approximation de Lippmann pour un potentiel $\phi_0 < 500V$. Pour des valeurs de ϕ_0 supérieures, les valeurs d'angles sont supérieures à celles prédites par l'approximation de Lippmann.
Lorsqu'on augmente le nombre de points de contrôle (50), l'accord avec la pré-

diction est bon jusqu'à un potentiel d'environ $350V$. Comme pour le cas de 15 points la valeur de l'angle numérique obtenue est supérieure à la valeur prédite par l'approximation condensateur plan.
Nous prendrons donc dans la suite en général 50 points de contrôle, car les valeurs sont ainsi plus précises.

Remarque 3.2.2 *Nous n'avons pas pu indéfiniment augmenter le nombre de points de contrôle : les algorithmes d'optimisation de forme deviennent instables quand la densité des points de contrôle devient du même ordre que la densité des points du maillage éléments finis.*

On constate donc que l'angle de contact n'est pas constant et se détache de la prédiction de l'approximation condensateur plan.

On rappelle que les résultats expérimentaux ([VVB99]) coïncident avec les résultats prédits par l'équation de Lippmann (3.7) seulement jusqu'à un potentiel appelé potentiel critique au delà duquel on constate une déviation par rapport à la prédiction puis une saturation de l'angle de contact.
Pour l'instant nous n'avons qu'observé une déviation par rapport à la prédiction de l'équation de Lipmman.

Comparaison des formes de gouttes. Pour renforcer l'idée de la déviation par rapport à l'approximation condensateur plan, nous traçons les courbes obtenues en "forçant" l'approximation condensateur plan (cf **validation du code** (b)) et celles obtenues pour le modèle classique. On présente par exemple en figure 3.12 les résultats à 800 V. On remarque une déviation de la forme de la goutte par rapport à la forme prédite par l'approximation condensateur plan.

Résumé : Avec ce modèle, nous avons constaté :

(a) Une correspondance avec l'approximation de Lippmann jusqu'à un potentiel d'environ 400V.

(b) Un décrochage au delà de cette valeur, avec des valeurs d'angle de contact supérieures à celle prédites par l'approximation condensateur plan

(c) Nous n'avons pas observé l'invariance de l'angle de contact par rapport au potentiel imposé.

(d) Nous n'avons pas observé de phénomène de saturation de l'angle de contact.

Pour aller plus loin dans l'analyse de la forme de la goutte, comme annoncé dans la section précédente, nous allons extraire les valeurs numériques de la courbure de la goutte en chaque point de celle-ci. On utilisera l'approximation locale par des courbes de Bézier décrite précédemment.

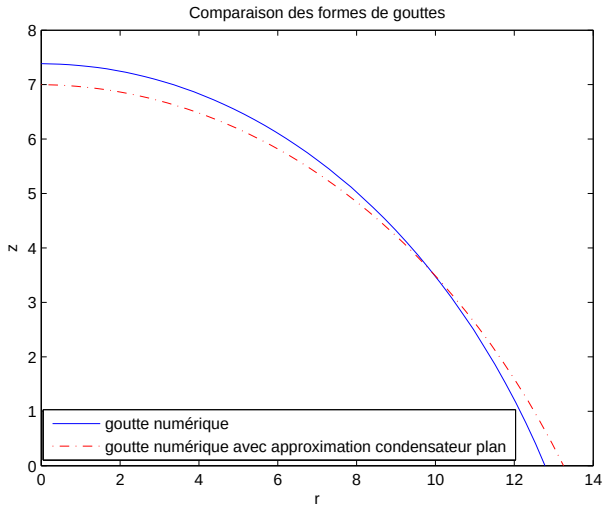


FIG. 3.12 – Forme de goutte comparée à l'approximation condensateur plan pour $\phi_0 = 800$ V

3.2.2.4 Courbure numérique

Effet de la variation du nombre de points de contrôle sur la courbure
Nous présentons dans la figure 3.13, un exemple de courbure calculée numériquement en chaque point de contrôle (ici $\phi_0 = 800$V). On présente les résultats pour 15, 30 et 50 points de contrôle.

La figure 3.14, présente les valeurs numériques de la courbure pour différentes valeurs du potentiel électrique ϕ_0 et pour 50 points de contrôle.

Nous pouvons faire trois remarques principales :

- Pour le calcul de courbure les résultats sont plus précis avec 50 points qu'avec 15 ou 30 points. Le comportement de la courbure au voisinage du point triple est moins apparent avec peu de points, ceci est dû au faible nombre de points de contrôle au voisinage de la ligne de mouillage.
- Pour un potentiel ϕ_0, la courbure est constante sauf lorsqu'on s'approche du point triple, où la courbure augmente.
- Si on observe l'évolution de la courbure pour un potentiel croissant ϕ_0, on remarque que (figure 3.14) :
  - Loin de la ligne triple, la valeur de la courbure décroît lorsque ϕ_0 croît.
  - Au voisinage de la ligne triple la variation de courbure devient plus importante. La courbure au voisinage du point triple augmente avec ϕ_0.

  Le fait qu'avec un potentiel croissant la courbure loin du point triple décroisse est en accord avec le fait que la goutte devrait ressembler à une

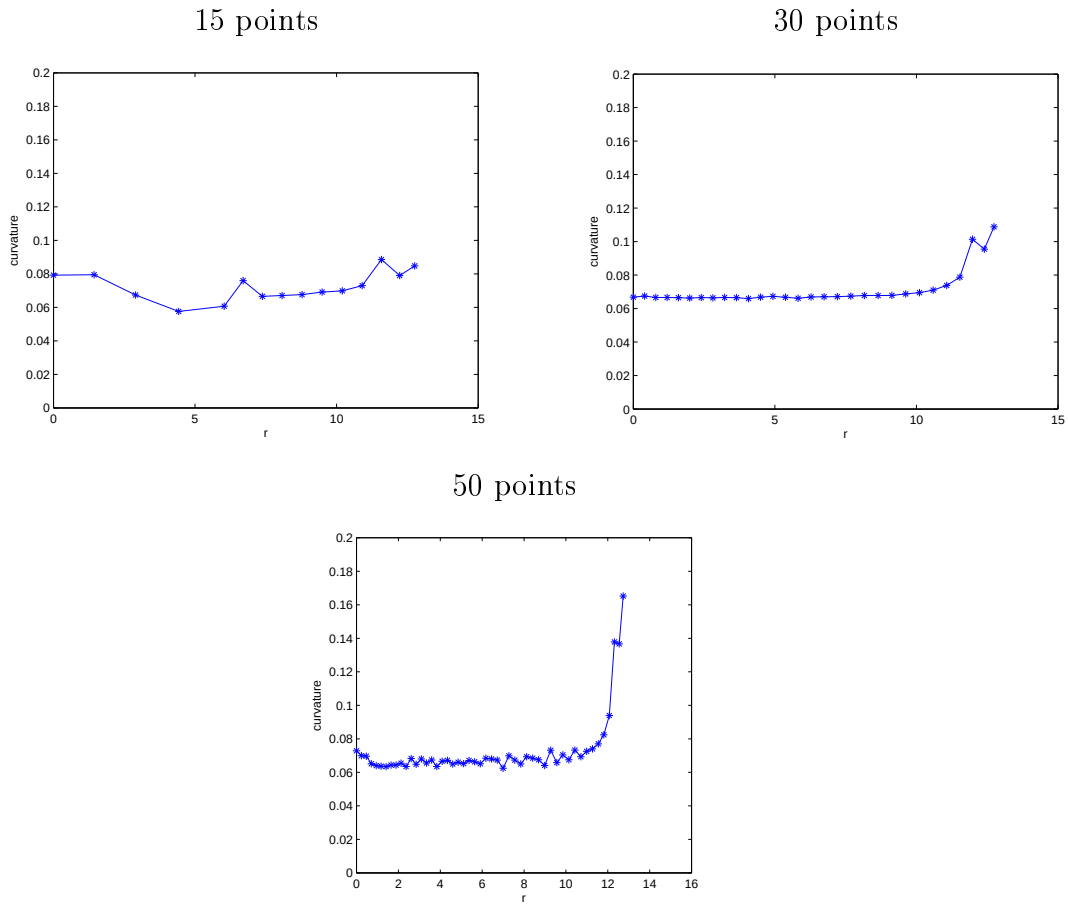


FIG. 3.13 – Exemple : $\phi_0 = 800$V. Valeurs numériques de la courbure pour 15, 30 et 50 points

portion de sphère avec un rayon croissant quand ϕ_0 croît (comme lors de la simulation de l'approximation condensateur plan dans le paragraphe 3.2.2.2 (c)).

La courbure augmente au voisinage du point triple : c'est en accord avec le fait que l'angle de contact est plus grand que la valeur prédite par l'équation de Lippmann. Cela signifie qu'il se passe quelque chose localement au voisinage du point triple. Ce phénomène est d'autant mieux capté que le nombre de points de contrôle est grand.

Pour toutes les simulations réalisées (avec différentes valeurs des paramètres, notamment de θ_Y), la courbure numérique a le même comportement que celui présenté en figure 3.14. Cependant plus l'angle de Young est petit, moins la visualisation de l'explosion de la courbure est nette. Pour mieux la visualiser il faut

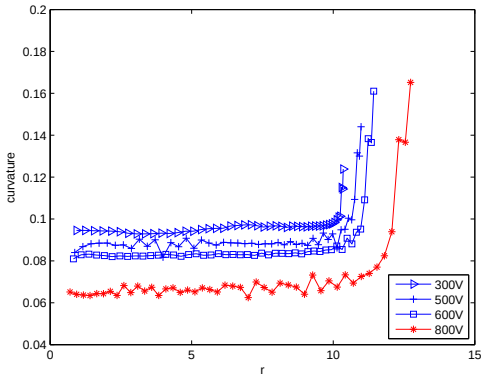


FIG. 3.14 – Courbure de la goutte pour quelques valeurs de ϕ_0 avec 50 points de contrôle

alors rajouter des points de contrôle près de la ligne triple.

3.2.3 Conclusion

Nous avons numériquement observé la forme des gouttes à potentiel donné. Celles-ci dévient des formes prédites par l'approximation condensateur plan. On retrouve également cette déviation lors du calcul de l'angle de contact qui a une valeur supérieure à celle prédite par cette approximation. Cependant nous n'avons pas exhibé de phénomène de blocage de l'angle de contact comme observé expérimentalement par les physiciens lors de leurs expériences.

De plus bien que la valeur numérique de l'angle de contact soit supérieure à celle prédite par l'approximation condensateur plan, nous n'avons pas non plus retrouvé le résultat théorique du chapitre 2 qui prédit un angle de contact constant pour tout potentiel ϕ_0 appliqué.

En ce qui concerne la courbure numérique de la goutte, elle est constante excepté dans un voisinage de la ligne de mouillage où elle augmente rapidement. Ces observations sont en accord avec les résultats expérimentaux obtenus dans [BVQM06] et [BHM03], qui ont observé cette augmentation de la courbure au voisinage du point triple.

Il paraît donc nécessaire de pousser plus loin l'analyse et l'approximation du potentiel pour mieux décrire la forme de la goutte au voisinage de la ligne de mouillage. Comme nous l'avons vu au chapitre 2, du fait du coin rentrant présent au niveau du point triple, le gradient du potentiel présente une singularité au voisinage de la ligne triple. Nous cherchons donc une meilleure approximation du

potentiel et de sa singularité. On peut penser à raffiner le maillage et augmenter le nombre de points de contrôle, mais cela reste coûteux et peut s'avérer instable. D'où l'idée de préciser le comportement du potentiel en traitant la singularité. Une première approximation consiste à introduire une fonction singulière qui représente le potentiel au voisinage du point triple (cette singularité est connue par le théorème 2.2.4).

3.3 Introduction des singularités

3.3.1 Mise en œuvre

3.3.1.1 Approximation du potentiel

Les résultats du paragraphe précédent permettent de visualiser une augmentation de courbure au niveau de la ligne triple, et une augmentation de l'angle de contact par rapport à celui prédit par l'approximation de Lippmann, mais nous n'avons pas encore retrouvé ce qui est théoriquement écrit dans le modèle : l'angle de contact est indépendant du potentiel appliqué. Dans la démonstration de l'invariance de l'angle de contact, l'argument essentiel a été de décomposer le potentiel φ^ω en une partie régulière et une partie singulière au voisinage du point triple. Nous allons donc introduire cette décomposition dans l'approximation du potentiel.

Rappelons le théorème 2.2.4 page 43 de décomposition du potentiel φ^ω : on se place dans les coordonnées polaires (ρ, θ) centrées au point triple comme dans le chapitre précédent (voir figure 2.6).

Théorème 3.3.1 *Il existe un unique $c \in \mathbb{R}$ tel que pour $i \in \{G, S\}$:*

$$\varphi_i^\omega - cS_i \in \check{H}^2(\omega_i)$$

avec

$$S_G(\rho, \theta) = \frac{\varepsilon_S}{\cos(\nu(\pi - \Theta_A))} \rho^\nu \sin(\nu(\theta - (\pi - \Theta_A)))\eta(\rho, \theta), \quad \theta \in]0, \pi - \Theta_A[$$

$$S_S(\rho, \theta) = \frac{\varepsilon_G}{\cos(\nu\pi)} \rho^\nu \sin(\nu(\theta + \pi))\eta(\rho, \theta), \quad \theta \in]-\pi, 0[$$

où :

η est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ à support compact, telle que $\eta \equiv 1$ dans un voisinage de A et nulle hors d'un cercle centré en A.

ν est l'unique solution dans $]0, 1[$ de l'équation

$$\varepsilon_S \tan(\nu(\pi - \Theta_A)) = -\varepsilon_G \tan(\nu\pi). \tag{3.9}$$

Vu l'équation vérifiée par ν, on a $\nu \in]\frac{1}{2}, 1[$.

On agrandit l'espace d'approximation de la solution φ^ω en rajoutant cette contribution singulière.

Notations. Nous commencerons par introduire quelques notations pour cette section :

Posons pour $(\rho, \theta) \in \omega$,

$$S(\rho,\theta) = \frac{\tilde{\varepsilon}(\rho,\theta)}{\cos(\nu\alpha(\rho,\theta))}\rho^\nu \sin(\nu(\theta - \alpha(\rho,\theta)))\eta(\rho,\theta)$$

avec

$$\alpha(\rho,\theta) = \begin{cases} \pi - \Theta_A & \text{si } (\rho,\theta) \in \bar{\omega}_G \\ -\pi & \text{si } (\rho,\theta) \in \omega_S \end{cases} \tag{3.10}$$

et

$$\tilde{\varepsilon}(\rho,\theta) = \begin{cases} \varepsilon_S & \text{si } (\rho,\theta) \in \bar{\omega}_G \\ \varepsilon_G & \text{si } (\rho,\theta) \in \omega_S \end{cases} \tag{3.11}$$

Vu la définition de ν, S est une fonction de $\check{H}^1(\omega)$.

On notera

$$\tilde{W}^h := Vect((\psi_i)_{i\in[0,N_\tau]}, S)$$

Puis

$$\tilde{W}_0^h := \left\{ v \in \tilde{W}^h \text{ tels que } v(A_i) = 0, \quad \forall i \in I_0 \cup I_1 \cup I_2 \right\}$$

$$\tilde{W}_\gamma^h := \left\{ v \in \tilde{W}^h \text{ tels que } v(A_i) = 0, \quad \forall i \in I_0 \text{ et } v(A_i) = \phi_0, \quad \forall i \in I_1 \cup I_2 \right\}$$

Approximation du potentiel électrostatique On cherche $\tilde{\varphi}_h^{\omega^h} \in \tilde{W}_\gamma^h$ telle que

$$\tilde{\varphi}_h^{\omega^h} = \sum_{i=0}^{N_\mathcal{T}} \tilde{\lambda}_i \psi_i + cS$$

et

$$a^h(\tilde{\varphi}_h^{\omega^h}, v) = \int_{\omega^h} \varepsilon \left(\nabla \varphi_h^{\omega^h} \cdot \nabla v \right) r dr dz = 0, \quad \forall v \in \tilde{W}_0^h$$

Nous devons donc déterminer les $N_\mathcal{T}+1$ inconnues qui déterminent $\varphi_h^{\omega^h}$. Connaissant les conditions aux bords, il ne reste plus que $\mathcal{N}+1$ inconnues à déterminer (où $\mathcal{N}$ est le nombre de points intérieurs à ω^h).

Comme pour la méthode des éléments finis, nous écrivons les $\mathcal{N}$ premières équations traduisant que :

$$a^h(\tilde{\varphi}_h^{\omega^h}, \psi_i) = 0, \quad \forall i \in I$$

Il nous faut alors une nouvelle équation relative à S. En posant

$$S_p := S - \sum_{i \in I_0 \cup I_1 \cup I_2} S(A_i)\psi_i$$

qui est un élément de W_0^h, on peut écrire :

$$a^h(\tilde{\varphi}_h^{\omega^h}, S_p) = 0$$

Ceci nous permet de mettre le problème sous forme matricielle et d'en extraire la matrice de rigidité associée.

Il faut alors calculer les coefficients $a^h(\psi_i, \psi_j)$ pour $(i, j) \in [0, N_{\mathcal{T}}]$ déjà calculés en section 3.2. Mais nous devons maintenant aussi calculer les coefficients $a^h(\psi_i, S)$ pour $i \in [0, N_{\mathcal{T}}]$, ainsi que le coefficient $a^h(S, S)$. Ces derniers sont des coefficients qui n'apparaissaient pas dans la section précédente.

La suite se déroule comme pour le cas de l'approximation par éléments finis $\mathbb{P}_1$ et demande l'inversion de la matrice de rigidité dont on peut montrer l'inversibilité. En effectuant les calculs, on se ramène à prouver que le coefficient $a^h(S_p, S_p)$ est non nul, ce qui est le cas. On ne reproduira pas ces calculs.

Remarque 3.3.1 *Il apparaît une fonction cut-off η dans S. Son choix est important, tout comme le choix de son domaine de définition. Comme dans [Bou97], on choisira η affine par morceaux à support compact, une boule de rayon inclus dans le dernier segment $[P_{N-2}, P_{N-1}]$ contenant le point triple.*

3.3.1.2 Approximation des intégrales

Il apparaît maintenant dans la matrice de masse des termes issus de la partie singulière ne pouvant plus être calculés de façon exacte. Le problème se pose également (comme dans le cas d'une approximation classique) pour le calcul du gradient du lagrangien. Nous approcherons ces intégrales de deux façons différentes, suivant qu'elles portent sur un triangle touchant le point triple ou pas.

Si le triangle ne touche pas le point triple on utilise des formules de quadrature classiques, mais avec plus de points que dans le paragraphe précédent.

Si le triangle touche le point triple on utilise une formule plus précise pour le calcul de l'intégrale, car on peut calculer une partie de l'intégrale exactement.

Nous pouvons maintenant donner les résultats numériques obtenus.

3.3.2 Résultats numériques

Nous avons implémenté le calcul du potentiel et effectué les calculs numériques pour les mêmes valeurs de paramètres physiques que dans la section 3.2 et pour différentes valeurs d'angles de Young.

Nous avons remarqué que le comportement qualitatif de la solution reste le même, que ce soit pour les formes de goutte ou pour la courbure. Il nous a donc paru plus pertinent de comparer des valeurs significatives du problème (énergie de la goutte, angle de contact, temps de calcul) plutôt que de représenter les courbes analogues de la section 3.2.

On présente dans le tableau 3.1 les valeurs comparées de l'angle de contact suivant les approximations utilisées (condensateur plan, éléments finis $\mathbb{P}_1$ ou fonction de base singulière). Nous avons effectué ce traitement de la singularité dans l'espoir de visualiser l'invariance de l'angle de contact, nous espérons donc observer une augmentation de l'angle de contact avec ce traitement.

Voltage	Approx. C. plan	Approx. $\mathbb{P}_1$	Fonction de base sing.
100V	89.49	88.73	88.72
200V	87.97	87.57	87.57
300V	85.43	85.75	86.13
400V	81.86	83.07	83.09
500V	77.22	79.20	79.40
600V	71.42	74.08	74.84

TAB. 3.1 – Valeurs de l'angle de mouillage selon les approximations

Nous présentons dans le tableau 3.2 les valeurs de l'énergie de la forme de goutte convergée suivant le type d'approximation utilisé (éléments finis $\mathbb{P}_1$ ou fonction de base singulière). Nous espérons ici observer une diminution de l'énergie par rapport à l'approximation par éléments finis $\mathbb{P}_1$.

Voltage	Approx. $\mathbb{P}_1$	Fonction de base sing.
100V	99.52	99.54
200V	97.94	97.90
300V	95.18	95.14
400V	90.71	90.70
500V	84.88	84.86
600V	77.19	77.28

TAB. 3.2 – Valeur de l'énergie de la goutte

Analyse des résultats

- Les valeurs numériques de l'angle de mouillage sont en moyenne plus élevées qu'avec la méthode d'approximation par éléments finis $\mathbb{P}_1$, mais la différence de l'ordre de $0.5° < 1°$ n'est pas significative.
- Les variations sur les valeurs de l'énergie ne sont pas non plus significatives.
- Le comportement qualitatif reste le même, tant au niveau des formes de goutte que de la courbure.

3.3.3 Conclusion

3.3.3.1 Analyse et limitations

1. Les résultats numériques laissent penser qu'il n'y a pas eu d'effets (ou très peu) en rajoutant la contribution singulière.
2. Le temps de calcul total à un potentiel donné reste relativement long (jusqu'à 3h) et bien plus long que le calcul classique du potentiel du fait du calcul des intégrales dans l'évaluation du gradient du lagrangien.

	0V	100V	400V	600V	700V
$\mathbb{P}_1$	45 s.	10 min	30min	1h	1h
Fonc. sing.	1 min	30min	1h	3h	3h

TAB. 3.3 – Comparaison des différents temps de calcul en fonction de l'approximation

Remarque 3.3.2 *Il est à noter que ces temps de calculs peuvent être réduits par un meilleur choix de forme initiale. Il est possible de calculer les formes tous les* $25V$ *pour avoir de meilleures formes initiales. (i.e. par exemple à* $700V$ *: au lieu de partir de la forme convergée à* $600V$*, on partirait de celle convergée à* $675V$*).*

3. Il reste un problème sur le caractère relativement arbitraire de la détermination de η et de son domaine de définition.
4. Il est possible de comparer la charge sur γ_{LG} avant et après introduction de la singularité. Celle-ci est modifiée et va dans le sens d'une explosion de la charge au point triple mieux captée. Cependant cela ne semble pas être pris en compte dans l'algorithme. Cela laisse à penser que la singularité n'est pas assez prise en compte. Il peut y avoir deux explications :
   (a) Soit c'est le calcul du potentiel qui n'est pas assez précis et n'approche pas bien la solution.

(b) Soit c'est le modèle de recherche du point selle qui n'est pas satisfaisant pour capter la singularité.

La solution qui consiste à rajouter des points de contrôle et donc augmenter la taille du maillage est limitée par le temps de calcul qui devient alors extrêmement long, ce qui n'est pas acceptable.
Pour remédier aux points 3. et 4.(a), nous allons tout d'abord changer la méthode d'approximation du potentiel en améliorant le traitement de la singularité.

Nous allons utiliser la Méthode du Complément Singulier[1].

3.4 La Méthode du Complément Singulier

3.4.1 Principe

Nous avons vu au paragraphe précédent certains désavantages de la méthode de la fonction de base singulière. Cette méthode demande en effet la détermination quelque peu arbitraire d'une fonction "cut-off" η, dans l'expression de la singularité. De plus, elle implique l'inversion d'une matrice de taille plus grande que la matrice de rigidité qui apparaît dans l'approximation éléments finis ; elle peut être mal conditionnée. La méthode du complément singulier va résoudre ces problèmes en traitant elle aussi la singularité de la solution.

Elle a tout d'abord été introduite pour résoudre les équations de Maxwell dans des domaines comportant des coins (Assous et al [ACS98, ACS00, ACL03, ACLS03]). Cette méthode a été reformulée par P.Ciarlet Jr et J.He dans [CH03] pour résoudre numériquement l'équation de Poisson dans un domaine 2D présentant un coin. Elle est aussi basée sur une décomposition de la solution en parties régulière et singulière. Mais elle permet de s'affranchir de la fonction "cut off" qui posait problème au paragraphe précédent en utilisant une autre décomposition de la solution. De plus, elle est basée sur l'évaluation explicite du coefficient de la singularité (noté c au paragraphe précédent) qui peut être totalement déterminé avec les données du problème. Il est aussi montré dans [CH03] la convergence de cette méthode.

Dans ce paragraphe, nous allons donc adapter cette méthode au problème du calcul du potentiel électrostatique en électromouillage. C'est un problème de transmission pour l'opérateur laplacien axisymétrique dans un domaine présentant un coin.

[1] Je remercie Patrick Ciarlet de m'avoir suggéré d'appliquer et expliqué la Méthode du Complément Singulier au cours de notre discussion lors des 5^{ièmes} Journées Singulières au CIRM

Nous aurons donc à adapter les formules, connues dans le cas de l'équation de Poisson, à ce cas plus général.

Un rappel clair de la méthode du complément singulier pour l'équation de Poisson pourra être trouvé dans [CH03].

3.4.1.1 Réduction à un problème modèle

Le problème électrostatique en électromouillage est un problème homogène à conditions aux bords inhomogène. Par un relèvement de la condition aux bords on peut donc se ramener à traiter le cas d'un problème inhomogène à conditions homogènes aux bords.

Ainsi, nous allons tout d'abord mettre en oeuvre la Méthode du Complément Singulier pour un problème elliptique axisymétrique de transmission avec conditions de Dirichlet homogène. Puis nous adapterons la méthode au problème de l'électromouillage qui présente des conditions mêlées inhomogènes.

3.4.2 Le problème de transmission avec conditions de Dirichlet homogène

3.4.2.1 Notations

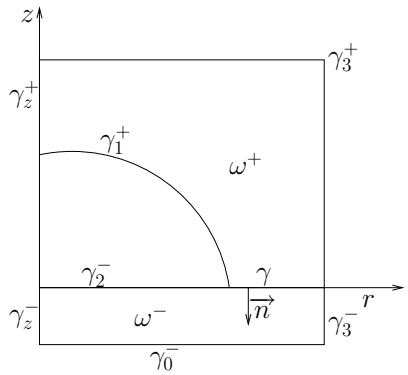


FIG. 3.15 – Le domaine

Le domaine Soit ω un domaine ouvert de $\mathbb{R}^2$ formé de deux composantes ω^+ et ω^- (voir figure 3.15).
La frontière $\partial\omega^+$ est l'union de :

- γ l'interface entre ω^+ et ω^-,
- γ_z^+ la partie de la frontière sur l'axe z dans ω^+,

- γ^+ la partie de la frontière qui n'est pas sur l'axe z et qui est dans $\partial\omega^+$.

$$\partial\omega^+ = \gamma_z^+ \cup \gamma^+ \cup \gamma$$

On note par analogie

$$\partial\omega^- = \gamma_z^- \cup \gamma^- \cup \gamma$$

- La frontière γ^+ est constituée de deux parties (voir figure 3.15) : γ_1^+, γ_3^+ (frontière de la boîte).
- La frontière γ^- est constituée de trois parties (voir figure 3.15) : γ_0^-, γ_2^-, γ_3^-.

On a $\omega = \omega^+ \cup \omega^- \cup \gamma$.

Les espaces considérés On utilisera comme dans le chapitre 2 les espaces associés à la mesure $rdrdz$. Ainsi pour un domaine ω de $\mathbb{R}^2$:

- $\check{L}^2(\omega)$ et $\check{H}^1(\omega)$ sont comme dans le chapitre 2.
- Dans ce paragraphe et seulement dans ce paragraphe, $\check{H}_0^1(\omega)$ désignera $\left\{v \in \check{H}^1(\omega) \text{ tels que } v = 0 \text{ sur } \gamma^+ \cup \gamma^-\right\}$
- Pour $s \in \mathbb{R}$, on notera de même $\check{H}^s$ l'espace de Sobolev associé à la mesure $rdrdz$.
- Pour une fonction ψ définie sur tout ω, on désignera par ψ^+ sa restriction à ω^+ et ψ^- sa restriction à ω^-.
- On pourra représenter un couple (φ^+, φ^-) par la notation vectorielle $\begin{pmatrix} \varphi^+ \\ \varphi^- \end{pmatrix}$

On se donne $\varepsilon = (\varepsilon^+, \varepsilon^-) \in \mathbb{R}^{+*} \times \mathbb{R}^{+*}$.

Définition 3.4.1 *On dira qu'un élément $(\varphi^+, \varphi^-) \in \check{H}^1(\omega^+) \times \check{H}^1(\omega^-)$ vérifie les conditions* (**BC**) *si, dans le cas où les traces sont bien définies,*

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \varphi^+ & = & \varphi^- & \textit{sur } \gamma \\ \varepsilon^+ \dfrac{\partial \varphi^+}{\partial n} & = & \varepsilon^- \dfrac{\partial \varphi^-}{\partial n} & \textit{sur } \gamma, \textit{ où } n \textit{ est la normale sortante à } \omega^+ \end{array} \right.$$

On notera alors

$$\mathcal{W} = \left\{(\varphi^+, \varphi^-) \in \left(\check{H}^2(\omega^+) \times \check{H}^2(\omega^-)\right) \cap \left(\check{H}_0^1(\omega^+) \times \check{H}_0^1(\omega^-)\right) \text{ t.q. } (\varphi^+, \varphi^-) \text{ vérifie } (BC)\right\}$$

L'opérateur laplacien axisymétrique On notera

- Δ_r l'opérateur *laplacien axisymétrique* dans $\mathbb{R}^2$ muni du repère (Orz) :

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

- $\mathcal{A}$ l'opérateur *laplacien axisymétrique de transmission* :

$$(-\varepsilon^+\Delta_r, -\varepsilon^-\Delta_r).$$

L'opérateur $\mathcal{A}$ agit sur $\mathcal{W}$.

Enfin on note :

$$D(L^2, \mathcal{A}) = \left\{(v^+, v^-) \in \check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-) \text{ tels que } (\varepsilon^+\Delta_r v^+, \varepsilon^-\Delta_r v^-) \in \check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)\right\}$$

Cet espace est muni de la norme

$$\varepsilon^+\left(||\Delta_r v^+||_{\check{L}^2(\omega^+)} + ||v^+||_{\check{L}^2(\omega^+)}\right) + \varepsilon^-\left(||\Delta_r v^-||_{\check{L}^2(\omega^-)} + ||v^-||_{\check{L}^2(\omega^-)}\right)$$

Il est possible de définir sur cet espace les traces sur γ^+, γ^- et les conditions (BC) par un opérateur que nous noterons T dans la suite. Ceci est prouvé dans un cas plus général 3D, dans [Lem78] p.553.

Les formes bilinéaires Soient

$\varphi = (\varphi^+, \varphi^-) \in \check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$, et $v = (v^+, v^-) \in \check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$.

On notera :

- $< \varphi, v >$ le produit scalaire dans $\check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$, i.e. :

$$< \varphi, v >= \int_{\omega^+} \varphi^+ v^+ r dr dz + \int_{\omega^-} \varphi^- v^- r dr dz$$

- Si U est un autre domaine ouvert de $\mathbb{R}^2$ inclus dans ω, on notera $< \varphi, v >_U$ le produit scalaire :

$$< \varphi, v >_U= \int_{U\cap\omega^+} \varphi^+ v^+ r dr dz + \int_{U\cap\omega^-} \varphi^- v^- r dr dz$$

- Pour $(\varphi^+, v^+) \in \check{H}^1(\omega^+) \times \check{H}^1(\omega^+)$,

$$a^+(\varphi^+, v^+) = \int_{\omega^+} \varepsilon^+ \nabla\varphi^+ \nabla v^+ r dr dz$$

- Pour $(\varphi^-, v^-) \in \check{H}^1(\omega^-) \times \check{H}^1(\omega^-)$,

$$a^-(\varphi^-, v^-) = \int_{\omega^-} \varepsilon^- \nabla\varphi^- \nabla v^- r dr dz$$

- Enfin, pour $(\varphi^+, v^+, \varphi^-, v^-) \in \check{H}^1(\omega^+) \times \check{H}^1(\omega^+) \times \check{H}^1(\omega^-) \times \check{H}^1(\omega^-)$,

$$a(\varphi, v) = a^+(\varphi^+, v^+) + a^-(\varphi^-, v^-)$$

- $(. \centerdot .)$ désignera le produit scalaire euclidien dans $\mathbb{R}^2$.

Ces notations posées, nous pouvons passer à l'équation proprement dite.

3.4.2.2 Equation du problème de transmission

Soit $f = (f^+, f^-) \in \check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$.

On considère (φ^+, φ^-) solution au sens des distributions de l'équation :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\varepsilon^+ \Delta_r \varphi^+ & = & f^+ & \text{dans } \omega^+ \\ -\varepsilon^- \Delta_r \varphi^- & = & f^- & \text{dans } \omega^- \\ \varphi^+ & = & 0 & \text{sur } \gamma^+ \\ \varphi^- & = & 0 & \text{sur } \gamma^- \\ (\varphi^+, \varphi^-) & \text{vérifie} & \text{les} & \text{conditions (BC)} \end{array} \right.$$

La formulation variationnelle associée est :

$$(\hat{\mathcal{F}}_v) \left\{ \begin{array}{c} \text{Trouver } \varphi \in \check{H}^1_0(\omega) \\ \text{telle que} \\ a(\varphi, v) = < f, v >, \quad \forall v \in \check{H}^1_0(\omega) \end{array} \right.$$

3.4.2.3 Décomposition en parties régulière et singulière

Au chapitre 2 nous avons donné un résultat (théorème 2.2.4) de décomposition. Pour exposer la méthode du complément singulier, nous allons avoir besoin d'une décomposition particulière de l'espace $\check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$ en somme directe orthogonale et de son utilisation explicite dans la démonstration du théorème 2.2.4.

Nous donnons 4 résultats déterminants pour la méthode du complément singulier.

Les résultats (a) et (b) qui suivent pourront être trouvés dans ([Lem78]) énoncés dans le cas 3D complet ; nous les énonçons dans le cas axisymétrique.

(a) **Inégalité a priori.**
On a une inégalité a priori sur les éléments de $\mathcal{W}$, qui nous permet de dire que $\mathcal{A}(\mathcal{W})$ est un sous-espace fermé de $\check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$.

(b) **Décomposition en somme directe orthogonale.** On introduit $\check{N}$ l'orthogonal de $\mathcal{A}(\mathcal{W})$ dans $\check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$. On a alors :

$$\check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-) = \mathcal{A}(\mathcal{W}) \oplus^{\perp} \check{N} \tag{3.12}$$

Une généralisation de la formule de Green permet de montrer que :

Proposition 3.4.2

$$\check{N} = \left\{(v^+, v^-) \in D(L^2, \mathcal{A}),\ \textit{tels que } \mathcal{A}v = 0 \ \textit{ et } T(v^+, v^-) = 0\right\}$$

Remarque 3.4.3 *Pour tout voisinage $\mathcal{V}$ du point triple, les éléments de $\check{N}$ sont dans l'espace $\mathcal{C}^\infty(\omega^+ \setminus \mathcal{V}) \times \mathcal{C}^\infty(\omega^- \setminus \mathcal{V})$.*

(c) **Dimension de l'orthogonal $\check{N}$.** En s'inspirant de [ACL03] on peut montrer que dans le cas 3D-axisymétrique et pour notre domaine qui contient un seul coin rentrant et pas de point anguleux conique :

Proposition 3.4.4

$$dim(\check{N}) = 1$$

(d) **La singularité duale.**
Soit $p_s = (p_s^+, p_s^-)$ une base de $\check{N}$

Définition 3.4.5 *p_s est appelée singularité duale. Elle est définie à une constante multiplicative près.*

La méthode du complément singulier consiste à utiliser la décomposition (3.12) pour en extraire une décomposition de la solution φ en une partie régulière et une partie singulière.

3.4.2.4 Décomposition de la solution de $(\hat{\mathcal{F}}v)$

(i) Comme $(f^+, f^-) \in \check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$, on déduit de (3.12) et de la proposition 3.4.4 :

Proposition 3.4.6 *Il existe $c \in \mathbb{R}$ et $(\varphi_R^+, \varphi_R^-) \in \mathcal{W}$ tels que :*

$$\begin{pmatrix} f^+ \\ f^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\varepsilon^+ \Delta_r \varphi_R^+ \\ -\varepsilon^- \Delta_r \varphi_R^- \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} p_s^+ \\ p_s^- \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

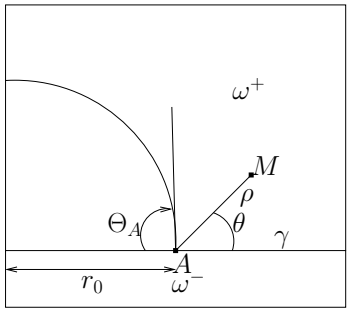


FIG. 3.16 – Les coordonnées polaires

(ii) On relève (p_s^+, p_s^-) en calculant ϕ_s comme la solution variationnelle de

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\varepsilon^+\Delta_r\phi_s^+ & = & p_s^+ & \text{dans } \omega^+ \\ -\varepsilon^-\Delta_r\phi_s^- & = & p_s^- & \text{dans } \omega^- \\ \phi_s^+ & = & 0 & \text{sur } \gamma^+ \\ \phi_s^- & = & 0 & \text{sur } \gamma^- \\ (\phi_s^+, \phi_s^-) & \text{vérifie} & \text{la} & \text{condition (BC)} \end{array}\right. \tag{3.14}$$

(iii) Par unicité de la solution du problème $(\hat{\mathcal{F}}_v)$, on peut alors écrire :

$$\boxed{\begin{pmatrix} \varphi^+ \\ \varphi^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_R^+ \\ \varphi_R^- \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} \phi_s^+ \\ \phi_s^- \end{pmatrix}} \tag{3.15}$$

(iv) On détermine c en utilisant l'orthogonalité de $\mathcal{A}(\mathcal{W})$ et $\check{N}$ dans $\check{L}^2(\omega^+) \times \check{L}^2(\omega^-)$. On trouve :

$$\boxed{c = \frac{< f, p_s >}{< p_s, p_s >}} \tag{3.16}$$

Nous allons choisir une singularité duale p_s puis indiquer comment on obtient ϕ_s solution de (3.14). Enfin φ_R se déduira de la formulation variationnelle $(\hat{\mathcal{F}}v)$.

On se place en coordonnées polaires centrées en A comme sur la figure 3.16 et on note r_0 la distance du point A à l'axe (Oz).

3.4.2.5 Un choix pour la singularié duale.

Notons

$$s^+ = \beta^+ \frac{r}{r_0} \rho^{-\nu} \sin(\nu(\theta - \alpha^+))$$

et

$$s^- = \beta^- \frac{r}{r_0} \rho^{-\nu} \sin(\nu(\theta - \alpha^-))$$

où

- ν est l'unique solution dans $]0,1[$ de l'équation

$$\varepsilon^- \tan(\nu(\pi - \Theta_A)) = -\varepsilon^+ \tan(\nu\pi)$$

- $\alpha^+ = \pi - \Theta_A, \quad \alpha^- = -\pi$
- $\beta^+ = \dfrac{\varepsilon^-}{\cos(\nu\alpha^+)}, \quad \beta^- = \dfrac{\varepsilon^+}{\cos(\nu\alpha^-)}$

Remarque 3.4.7 *s^+ (resp. s^-) est un élément de $\check{L}^2(\omega^+)$ (resp. $\check{L}^2(\omega^-)$) et vu son expression $\Delta_r s^+$ (resp. $\Delta_r s^-$) est dans $\check{H}^{-1}(\omega^+)$ (resp. $\check{H}^{-1}(\omega^-)$).*

Soit $(p_R^+, p_R^-) \in \check{H}^1(\omega^+) \times \check{H}^1(\omega^-)$ tel que $(p_R^+, p_R^-) = -(s^+, s^-)$ sur $\gamma^+ \times \gamma^-$, la solution variationnelle de :

$$a(p_R, v) =< \varepsilon \Delta_r s, v >, \forall v \in \check{H}_0^1(\omega) \tag{3.17}$$

On choisit alors :

$$\boxed{\begin{pmatrix} p_s^+ \\ p_s^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_R^+ \\ p_R^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} s^+ \\ s^- \end{pmatrix}} \tag{3.18}$$

On vérifie bien que $(p_s^+, p_s^-) \in \check{N}$.

3.4.2.6 Décomposition de ϕ_s.

Notons

$$\zeta^+ = \beta^+ \rho^\nu \sin(\nu(\theta - \alpha^+))$$

et

$$\zeta^- = \beta^- \rho^\nu \sin(\nu(\theta - \alpha^-))$$

Remarque 3.4.8 *ζ^+ (resp. ζ^-) est dans l'espace $\check{H}^1(\omega^+) \setminus \check{H}^2(\omega^+)$ (resp. $\in \check{H}^1(\omega^-) \setminus \check{H}^2(\omega^-)$) et $\Delta_r \zeta^+$ (resp. $\Delta_r \zeta^-$) est dans l'espace $\check{L}^2(\omega^+)$ (resp. $\check{L}^2(\omega^-)$).*

Vu l'équation (3.14) vérifiée par ϕ_s, on peut la décomposer sur la partie singulière (ζ^+, ζ^-) (analogue du théorème 2.2.4 où on enlève la fonction "cut-off"). On en déduit qu'il existe $\delta \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\boxed{\begin{pmatrix} \phi_s^+ \\ \phi_s^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_R^+ \\ \phi_R^- \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} \zeta^+ \\ \zeta^- \end{pmatrix}} \tag{3.19}$$

où $(\phi_R^+, \phi_R^-) \in \check{H}^2(\omega^+) \times \check{H}^2(\omega^-)$.

Remarque 3.4.9 *On passe d'une décomposition à une autre en écrivant simplement (on oublie les exposants + et −) :* $\phi_R + \zeta\eta = \underbrace{\phi_R + \zeta(\eta - 1)}_{\in \tilde{H}^2} + \zeta$

Une fois connu δ, on est en mesure, grâce à (3.14), de déterminer (ϕ_R^+, ϕ_R^-).

Reste donc à déterminer δ. On peut en donner une expression explicite.

Expression de δ En utilisant la même méthode que celle proposée par M.Moussaoui ([Mou84]), on on montre la

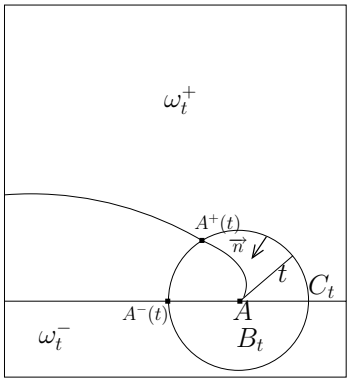
Proposition 3.4.10

$$\delta = \frac{< p_s, p_s >}{\nu r_0 \left[\varepsilon^+(\beta^+)^2 \left(\alpha^+ - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{2\nu}\right) - \varepsilon^-(\beta^-)^2 \left(\alpha^- - \frac{\sin(2\nu\alpha^-)}{2\nu}\right)\right]} \tag{3.20}$$

Démonstration : On note A le point triple, $B_t = B(A,t)$ la boule de centre A et de rayon t et C_t son bord.

On pose $\omega_t := \omega \setminus B_t, \quad \omega_t^+ := \omega_t \cap \omega^+, \quad \omega_t^- := \omega_t \cap \omega^-$

De même $C_t^+ := C_t \cap \omega^+$ et $C_t^- := C_t \cap \omega^-$.



Enfin on notera $A^+(t)$ le point d'intersection de C_t avec γ_1^+ de coordonnées polaires $(t, \Theta^+(t))$ et $A^-(t)$ le point d'intersection de C_t avec γ_2^- de coordonnées polaires $(t, \Theta^-(t))$.

Remarque 3.4.11 $\Theta^- \equiv \alpha^-$

On obtient à partir de (3.14) :

$$< -\varepsilon\Delta_r\phi_s, p_s >_{\omega_t} = < p_s, p_s >_{\omega_t} \tag{3.21}$$

Nous allons étudier plus particulièrement le membre de gauche de cette égalité puis passer à la limite quand t tend vers 0.

On notera ds la mesure linéique.

- Terme sur ω^+. Il est donné par :

$$< -\varepsilon^+\Delta_r\phi_s^+, p_s^+ >_{\omega_t^+} = -\int_{\omega_t^+} \varepsilon^+\Delta_r\phi_s^+ p_s^+ r dr dz$$

p_s est $\mathcal{C}^\infty$ dans ω_t. Il en est de même pour ϕ_s. On peut donc écrire :

$$\begin{aligned} < -\varepsilon^+\Delta_r\phi_s^+, p_s^+ >_{\omega_t^+} = \varepsilon^+ \Bigg[& -\int_{C_t^+} \frac{\partial\phi_s^+}{\partial n} p_s^+ t ds - \int_{\gamma\cap\omega_t^+} \frac{\partial\phi_s^+}{\partial n} p_s^+ r ds \\ & + \int_{\gamma\cap\omega_t^+} \frac{\partial p_s^+}{\partial n} \phi_s^+ r ds + \int_{C_t^+} \frac{\partial p_s^+}{\partial n} \phi_s^+ r ds \Bigg] \end{aligned} \tag{3.22}$$

où n est la normale sortante à ω_t^+.

- Terme sur ω^-.

De la même façon, on obtient

$$\begin{aligned} < -\varepsilon^-\Delta_r\phi_s^-, p_s^- >_{\omega_t^-} = \varepsilon^- \Bigg[& -\int_{C_t^-} \frac{\partial\phi_s^-}{\partial n} p_s^- t ds - \int_{\gamma\cap\omega_t^-} \frac{\partial\phi_s^-}{\partial n} p_s^- r ds \\ & + \int_{\gamma\cap\omega_t^-} \frac{\partial p_s^-}{\partial n} \phi_s^- r ds + \int_{C_t^-} \frac{\partial p_s^-}{\partial n} \phi_s^- t ds \Bigg] \end{aligned} \tag{3.23}$$

où n est la normale sortante à ω_t^-.

- Comme p_s et ϕ_s vérifient les conditions (BC), en additionnant les deux termes, il reste

$$\begin{aligned} < -\varepsilon\Delta_r\phi_s, p_s >_{\omega_t} = & \ \varepsilon^+ \left[-\int_{C_t^+} \frac{\partial\phi_s^+}{\partial n} p_s^+ t ds + \int_{C_t^+} \frac{\partial p_s^+}{\partial n} \phi_s^+ t ds \right] \\ & + \varepsilon^- \left[-\int_{C_t^-} \frac{\partial\phi_s^-}{\partial n} p_s^- t ds + \int_{C_t^-} \frac{\partial p_s^-}{\partial n} \phi_s^- t ds \right] \end{aligned} \tag{3.24}$$

- Examinons la contribution du terme

$$\varepsilon^+ \int_{C_t^+} \frac{\partial \phi_s^+}{\partial n} p_s^+ t ds$$

En utilisant les décompositions (3.19) et (3.18)

$$\phi_s^+ = \phi_R^+ + \delta\zeta^+$$

et

$$p_s^+ = p_R^+ + s^+$$

on déduit

$$\begin{aligned}
&\varepsilon^+ \int_{C_t^+} \frac{\partial \phi_s^+}{\partial n} p_s^+ r ds = \\
&\varepsilon^+ \left[\int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \phi_R^+}{\partial n} p_R^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta + \int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \phi_R^+}{\partial n} s^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta \right. \\
&\left. + \delta \int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \zeta^+}{\partial n} p_R^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta + \delta \int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \zeta^+}{\partial n} s^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta \right]
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Les termes faisant apparaître ϕ_R et/ou p_R tendent vers 0, du fait de la régularité de ces derniers.
Le seul terme ayant une contribution non nulle quand $t \to 0$ est le terme donné par

$$\delta\varepsilon^+ \int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \zeta^+}{\partial n} s^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta$$

En gardant les coordonnées polaires et les vecteurs de la base de Frenet (e_ρ, e_θ), on a $\dfrac{\partial \zeta^+}{\partial n} = -\dfrac{\partial \zeta^+}{\partial \rho}$, d'où en utilisant l'expression exacte de ζ^+

$$\begin{aligned}
&\delta\varepsilon^+ \int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \zeta^+}{\partial n} s^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta = \\
&-\delta \frac{\varepsilon^+}{r_0} \nu(\beta^+)^2 \int_0^{\Theta^+(t)} t^{\nu-1} \sin(\nu(\theta - \alpha^+)) t^{-\nu} \sin(\nu(\theta - \alpha^+))(r_0 + t\cos(\theta))^2 t d\theta
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Il reste

$$\delta\varepsilon^+ \int_0^{\Theta^+(t)} \frac{\partial \zeta^+}{\partial n} s^+(r_0 + t\cos(\theta)) t d\theta = -\delta \frac{\varepsilon^+}{r_0} \nu(\beta^+)^2 \int_0^{\Theta^+(t)} \sin^2(\nu(\theta - \alpha^+))(r_0 + t\cos(\theta))^2 d\theta \tag{3.27}$$

$\Theta^+(t)$ admet pour limite α^+ en 0. En développant le membre de droite de (3.27) suivant les puissances de t, on conclut que le seul terme ayant une possible contribution non nulle à la limite est :

$$-\delta\varepsilon^+\nu(\beta^+)^2 r_0 \int_0^{\Theta^+(t)} \sin^2(\nu(\theta-\Theta^+(t)))d\theta$$
$$= -\delta\varepsilon^+\nu(\beta^+)^2 r_0 \left(\frac{\Theta^+(t)}{2} - \frac{\sin(2\nu\Theta^+(t))}{4\nu}\right) \quad (3.28)$$

Ce qui donne en passant à la limite dans le membre de droite de (3.28) :

$$-\delta\varepsilon^+\nu(\beta^+)^2 r_0 \left(\frac{\alpha^+}{2} - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{4\nu}\right) \quad (3.29)$$

- On effectue le même raisonnement pour le terme

$$\varepsilon^+ \int_{C_t^+} \frac{\partial p_s^+}{\partial n}\phi_s^+ t ds$$

et on obtient que sa limite quand t tend vers 0 vaut

$$\delta\varepsilon^+\nu(\beta^+)^2 r_0 \left(\frac{\alpha^+}{2} - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{4\nu}\right) \quad (3.30)$$

- la contribution totale sur C_t^+ dans (3.24) vaut donc

$$\delta\varepsilon^+\nu(\beta^+)^2 r_0 \left(\alpha^+ - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{2\nu}\right) \quad (3.31)$$

- Par un raisonnement analogue, on trouve que la contribution sur C_t^- dans 3.24 vaut

$$\delta\varepsilon^-\nu(\beta^-)^2 r_0 \left(-\alpha^- + \frac{\sin(2\nu\alpha^-)}{2\nu}\right) \quad (3.32)$$

- En conclusion, grâce à (3.31) et (3.32), en passant à la limite quand t tend vers 0 dans (3.21), on trouve

$$< p_s, p_s >= \delta\nu r_0 \left[\varepsilon^+(\beta^+)^2\left(\alpha^+ - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{2\nu}\right) + \varepsilon^-(\beta^-)^2\left(-\alpha^- + \frac{\sin(2\nu\alpha^-)}{2\nu}\right)\right] \quad (3.33)$$

Et donc on en déduit que

$$\delta = \frac{< p_s, p_s >}{\nu r_0 \left[\varepsilon^+(\beta^+)^2\left(\alpha^+ - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{2\nu}\right) - \varepsilon^-(\beta^-)^2\left(\alpha^- - \frac{\sin(2\nu\alpha^-)}{2\nu}\right)\right]} \quad (3.34)$$

■

Remarque 3.4.12 *On peut vérifier que dans le cas où $\varepsilon^+ = \varepsilon^-$, la formule est bien cohérente avec celle obtenue dans le cas d'un problème sans transmission (voir [ACLS03]).*

3.4.2.7 Résumé

Nous avons utilisé différents résultats de décomposition pour en déduire une expression de la solution du problème $(\hat{\mathcal{F}}_v)$ en somme d'une partie régulière et une partie singulière. Nous avons de plus pu exprimer de façon explicite les différents coefficients.

Nous pouvons maintenant passer à l'aspect numérique du problème.

3.4.3 Traitement numérique

Nous allons décrire l'algorithme qui permet d'implémenter la méthode du complément singulier pour le problème de transmission $(\hat{\mathcal{F}}_v)$. Pour calculer numériquement la solution, nous devons exprimer numériquement φ_R, ϕ_S et c.

3.4.3.1 Démarche

Tout revient à approcher numériquement p_s. Numériquement tout s'organise cinq étapes.

1. Calcul de p_s, par le calcul de p_R en utilisant (3.18)
2. Calcul de c en utilisant 3.4.2.4 (iv)
3. Calcul de δ en utilisant la proposition 3.4.10
4. Calcul de ϕ_s, par le calcul de ϕ_R en utilisant (3.19) et (3.14)
5. Calcul de φ, par le calcul de φ_R en utilisant (3.15) et $(\hat{\mathcal{F}}v)$

On se donne une triangulation comme au paragraphe 3.1.2 page 65. On garde les notations de ce paragraphe. On notera donc A_i les nœuds du maillage, $N_{\mathcal{T}}$ leur nombre et ψ_i la fonction de base associée au nœud A_i pour $i \in [0, N_{\mathcal{T}}]$.

On notera I l'ensemble des indices des nœuds A_i tels que $A_i \in \overset{\circ}{\omega}{}^h$ et I_0 l'ensemble des indices des nœuds A_i tels que $A_i \in \gamma^+ \cup \gamma^-$.

Les parties régulières des décompositions (3.18), (3.19) et (3.15) sont approchées par des éléments finis de type Lagrange $\mathbb{P}_1$.

On introduit alors les formes linéaires suivantes :

Pour $(v^+, v^-) \in \check{H}^1(\omega^+) \times \check{H}^1(\omega^-)$

$$l_s(v) = \int_{\omega^+} \varepsilon^+ \Delta_r s^+ v^+ r dr dz + \int_{\omega^-} \varepsilon^- \Delta_r s^- v^- r dr dz$$

et

$$l_\zeta(v) = \int_{\omega^+} \varepsilon^+ \Delta_r \zeta^+ v^+ r dr dz + \int_{\omega^-} \varepsilon^- \Delta_r \zeta^- v^- r dr dz$$

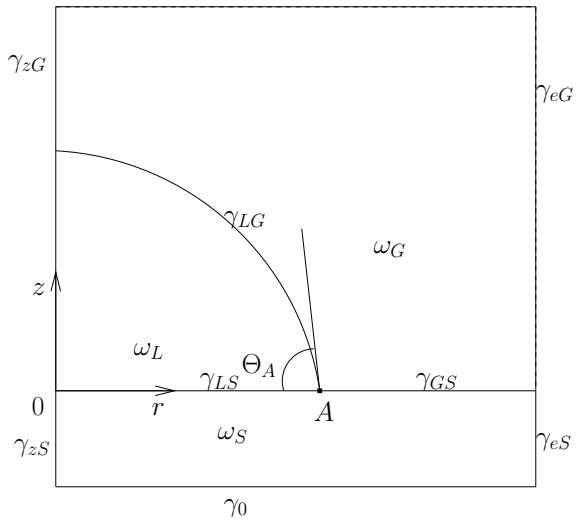
3.4.3.2 Détail des étapes

1. On approche la partie p_R par des éléments finis $\mathbb{P}_1$: $p_R^h \approx p_R$

   p_R est la solution variationnelle de (3.17)
   $$a(p_R, v) = l_s(v) \quad \forall v \in \check{H}_0^1(\omega)$$
   Ce problème est bien posé vu l'expression de s^+. En faisant un calcul explicite, on voit que les termes les plus singuliers disparaissent dans l'expression de $\Delta_r s^+$ et $\Delta_r s^-$.
   En passant aux expressions matricielles, on considère le vecteur de coordonnées $(p_R(A_i))_{i\in[0,N_{\mathcal{T}}]}$, dont vu les conditions aux bords, il ne reste qu'à déterminer $P_R^h := (p_R(A_i))_{i\in I}$.
   On doit alors résoudre $\mathbb{K}P_R^h = Q$, où $\mathbb{K}$ est la matrice de rigidité axisymétrique et Q est le vecteur de coordonnées $\left(l_s(\psi_i) + \sum_{j\in I_0} s(A_j)a(\psi_j, \psi_i)\right)_{i\in I}$.
2. On exprime ensuite
   $$c \approx c^h = \frac{< f, p_s^h >}{< p_s^h, p_s^h >}$$
3. Puis
   $$\delta \approx \delta^h = \frac{< p_s^h, p_s^h >}{\nu r_0 \left[\varepsilon^+(\beta^+)^2 \left(\alpha^+ - \frac{\sin(2\nu\alpha^+)}{2\nu}\right) - \varepsilon^-(\beta^-)^2 \left(\alpha^- - \frac{\sin(2\nu\alpha^-)}{2\nu}\right)\right]}$$
4. ϕ_R est solution de :
   $$a(\phi_R, v) = \delta^h l_\zeta(v) \quad \forall v \in \check{H}_0^1(\omega^+) \times H_0^1(\omega^-)$$
   De la même façon, on approche ϕ_R par éléments finis $\mathbb{P}_1$: $\phi_R \approx \phi_R^h$.
   Si on considère la forme matricielle de la formulation variationnelle discrétisée, on obtient
   $$\mathbb{K}\phi_R^h = q'$$
   Où $q' = \delta^h \left(l_\zeta(\psi_i) + \sum_{j\in I_0} \zeta(A_j)a(\psi_j, \psi_i)\right)_{i\in I}$ et par abus de notation ϕ_R^h représente le vecteur $(\phi_R^h(A_i))_{i\in I}$.
5. Enfin reste à calculer φ_R qui est solution variationnelle de :
   $$a(\varphi_R, v) =< f - cp_s, v >$$
   On l'approche elle aussi par éléments finis.
   La démarche est la même que pour les points 1. et 4..

3.4.4 Application au problème d'électromouillage

Nous allons appliquer la Méthode du Complément Singulier du paragraphe précédent, à notre problème qui lui a des conditions aux bords à la fois de type Neumann homogène et Dirichlet non homogène.



Pour ramener notre problème au cas détaillé précédemment nous considérerons un relèvement de la condition aux bords.

On garde les notations du cas modèle précédent en changeant les exposants $+$ en les indices G, et les exposants $-$ en les indices S. Les espaces $\check{H}^1_0(\omega)$ et $\check{H}^1_\gamma(\omega)$ sont ceux définis au chapitre 2.

On considère le problème variationnel dont $\varphi^\omega \in \check{H}^1_\gamma(\omega)$ est solution :

$$\forall v \in \check{H}^1_0(\omega), \quad \int_\omega \varepsilon\,(\nabla\varphi^\omega \,.\, \nabla v)\, r dr dz = 0$$

Relèvement de la condition aux bords Soit $R(\phi_0) \in \check{H}^1_\gamma(\omega)$ tel que :

- $((R(\phi_0))_G, (R(\phi_0))_S) \in (\check{H}^2(\omega_G) \times \check{H}^2(\omega_S))$,
- $\dfrac{\partial R(\phi_0)}{\partial n} = 0$ sur $\gamma_e = \gamma_{eG} \cup \gamma_{eS}$,
- $\begin{cases} (R(\phi_0))_G = (R(\phi_0))_S & \text{sur } \gamma_{GS} \\ \varepsilon_G \dfrac{\partial (R(\phi_0))_G}{\partial n} = \varepsilon_S \dfrac{\partial (R(\phi_0))_S}{\partial n} & \text{sur } \gamma_{GS},\ n \text{ normale sortante à } \omega_S \end{cases}$

Posons $\breve{\varphi}^\omega := \varphi^\omega - R(\phi_0) \in \check{H}^1_0(\omega)$. $\breve{\varphi}^\omega$ vérifie :

$$\forall v \in \check{H}^1_0(\omega), \quad \int_\omega \varepsilon\,(\nabla\breve{\varphi}^\omega \,.\, \nabla v)\, r dr dz = - < \varepsilon \Delta_r R(\phi_0), v > \tag{3.35}$$

On pose alors pour $i \in \{G, S\}$,

$$f_i := -\varepsilon_i \Delta_r (R(\phi_0))_i \in \check{L}^2(\omega_i)$$

On peut donc appliquer la Méthode du Complément Singulier avec f_G et f_S (on identifiera f avec le couple (f_G, f_S) par abus de notations).

Modification dans les expressions Les formes linéaires sont modifiées. On pose pour $v \in \check{H}^1(\omega)$:

$$\tilde{l}_s(v) = \int_{\omega_G} \varepsilon_G \Delta_r s_G v_G r dr dz + \int_{\omega_S} \varepsilon_S \Delta_r s_S v_S r dr dz - \int_{\gamma_{eG}} \frac{\partial s_G}{\partial n} v_G r ds - \int_{\gamma_{eS}} \frac{\partial s_S}{\partial n} v_S r ds$$

et

$$\tilde{l}_\zeta(v) = \int_{\omega_G} \varepsilon_G \Delta_r \zeta_G v_G r dr dz + \int_{\omega_S} \varepsilon_S \Delta_r \zeta_S v_S r dr dz - \int_{\gamma_{eG}} \frac{\partial \zeta_G}{\partial n} v_G r ds - \int_{\gamma_{eS}} \frac{\partial \zeta_S}{\partial n} v_S r ds$$

Détail des étapes du traitement numérique

1. p_R est la solution variationnelle de

$$a(p_R, v) = \tilde{l}_s(v) \quad \forall v \in \check{H}_0^1(\omega)$$

   Elle est approchée de façon classique.

2. On exprime ensuite

$$c \approx c_h = \frac{< f, p_s^h >}{< p_s^h, p_s^h >}$$

3. Puis $\delta \approx \delta_h$
4. ϕ_R est solution de :

$$a(\phi_R, v) = \delta^h \tilde{l}_\zeta(v) \quad \forall v \in \check{H}_0^1(\omega_G) \times H_0^1(\omega_S)$$

5. Reste enfin le calcul de φ^ω approchée directement.

Remarque 3.4.13 *On peut donner une expression de c indépendamment du relèvement $R(\phi_0)$. Numériquement on cherchera plutôt la solution $\tilde{\varphi}^\omega$ du problème translaté sur $\check{H}^1_{\tilde{\gamma}}(\omega) = \left\{\varphi \in \check{H}^1(\omega) \text{ tel que } \varphi = 0 \text{ sur } \gamma_{LG} \cup \gamma_{LS} \text{ et } \varphi = -\phi_0 \text{ sur } \gamma_0\right\}$.*

On considère alors le relèvement correspondant $\tilde{R}(\phi_0) \in H^1_{\tilde{\gamma}}(\omega)$.

Cette réduction permet d'écrire :

$$c = -\varepsilon_S \phi_0 \frac{\displaystyle\int_{\gamma_0} \frac{\partial p_s^h}{\partial n} d\sigma}{< p_s^h, p_s^h >}$$

dont le numérateur est bien défini et est calculable indépendamment du relèvement choisi.

Pour retrouver φ^ω, il suffira alors de rajouter la constante ϕ_0 à la solution trouvée.

3.4.5 Résultats numériques

Comme dans la précédente approximation, il nous faut seulement changer le calcul du potentiel.
La différence est qu'il y a plus d'intégrales à évaluer. Il y a maintenant 5 étapes, qui toutes demandent une évaluation approchée d'intégrales. Les intégrales singulières seront calculées de la même façon que précédemment. On approche l'intégrale par une formule de quadrature classique si on ne se trouve pas sur un triangle qui contient la singularité. On calcule plus exactement l'intégrale si on se situe sur un triangle qui a la singularité pour sommet.
Comme pour le cas précédent, suivant les approximations (condensateur plan, $\mathbb{P}_1$, fonction de base singulière (FS), Méthode du Complément Singulier (MCS)), on présente les valeurs obtenues pour l'angle de contact numérique (tableau 3.4) ainsi que les valeurs de l'énergie pour la forme de goutte convergée (tableau 3.5).

Voltage	Approx. C. plan	Approx. $\mathbb{P}_1$	FS	MCS
100V	89.49	88.73	88.72	88.77
200V	87.97	87.57	87.57	87.67
300V	85.43	85.75	86.13	85.9
400V	81.86	83.07	83.09	83.18
500V	77.22	79.20	79.40	79.86
600V	71.42	74.08	74.84	75.14
700V	64.30	67.57	68.59	68.95
800V	55.50	59.40	59.45	60.68

TAB. 3.4 – Valeurs de l'angle de mouillage suivant les approximations

On note que l'évolution de l'angle de contact va dans le sens d'une augmentation de sa valeur, cependant la différence reste petite et peu significative. En ce

Voltage	Approx. $\mathbb{P}_1$	FS	MCS
100V	99.52	99.54	99.50
200V	97.94	97.90	97.97
300V	95.18	95.14	94.65
400V	90.71	90.70	90.47
500V	84.88	84.86	84.12
600V	77.19	77.28	76.63
700V	67.13	67.15	66.22
800V	54.19	54.10	53.09

TAB. 3.5 – Valeur de l'énergie de la goutte selon les approximations

qui concerne les valeurs de l'énergie de la goutte, la diminution de celle-ci est un peu plus prononcée, mais reste cependant relativement petite.

Le temps de calcul est jusqu'à 1.5 voire 2 fois plus long , comparativement à la méthode de la fonction de base singulière. Il est maintenant nécessaire de calculer des intégrales de fonctions singulières sur tout le domaine ω, alors que précédemment ceci n'était effectué que sur le support de la fonction singulière, i.e. le dernier triangle. Ceci est coûteux en temps.

Remarque 3.4.14 *Il faut signaler que le calcul du potentiel en lui même ne prend pas de temps, c'est l'évaluation du gradient du lagrangien qui est coûteuse en temps.*

Même si les résultats sont voisins de ceux obtenus avec la méthode de la fonction de base singulière avec un temps de calcul plus important, cette méthode supprime d'une part le problème de la détermination de la fonction "cut off" et nous verrons d'autre part que c'est une meilleure approximation du potentiel. Ceci sera mis en avant au chapitre 5.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons simulé numériquement la forme de goutte en géométrie axisymétrique en utilisant le modèle qui mène à une recherche de point selle d'un lagrangien.

Nous avons observé l'étalement progressif de la goutte avec l'augmentation du potentiel ainsi qu'une déviation de la forme de goutte et de l'angle de contact par rapport à l'approximation condensateur plan. La courbure augmente au niveau du point triple. Cela est conforme aux observations physiques.

Cependant nous avons vu au chapitre 2 que le modèle utilisé ici prédit un angle de contact constant (égal à l'angle de Young) quel que soit le potentiel ϕ_0 appliqué.

Nos simulations ne nous ont pas montré cette invariance de l'angle, malgré les améliorations effectuées en 3.3 et 3.4 en prenant en compte la singularité du potentiel.

Le phénomène de saturation n'est pas non plus observé.

Ces simulations apportent une bonne approximation macroscopique de la forme de goutte, cependant la méthode de recherche de point selle du lagrangien reste trop "globale" pour capter ce qui se passe au niveau microscopique près du point triple. Nous avons remarqué la présence d'effets sur le potentiel lors des traitements de singularité, mais ceux-ci paraissent "effacés" par la mise en oeuvre de l'algorithme d'Uzawa.

C'est pourquoi il nous a semblé nécessaire d'établir un nouveau modèle "microscopique" capable de prendre en compte ces phénomènes localisés au niveau du point triple.

Nous considérons que le problème d'approximation du potentiel électrostatique a été bien résolu par la Méthode du Complément Singulier ; c'est elle qui nous permet d'approcher le mieux le potentiel électrostatique. Nous devons maintenant agir sur le modèle lui même.

Chapitre 4

Une approximation double échelle

4.1 Motivation

L'analyse des résultats de la section précédente a mis en évidence le caractère très localisé de la singularité du potentiel. Le modèle optimisation de forme ne suffit pas pour visualiser la forme de la goutte au voisinage du point triple. Pour mieux la décrire nous proposons de faire un "zoom" au niveau de la ligne de mouillage pour passer à une vision locale ; c'est l'objet de ce chapitre.

On commencera par introduire les notations qui seront utilisées tout au long de ce chapitre 4. La seconde partie sera consacrée à l'écriture d'un modèle local pour notre problème. Deux visions différentes, l'une physique et l'autre plus mathématique, nous permettrons d'en extraire l'équation principale.

Enfin, après un rappel théorique sur les équations différentielles à second membre intégrable, on s'intéressera à l'écriture mathématique du modèle et à un algorithme de résolution en vue de simulations numériques.

4.2 Notations

Paramétrisation du domaine Nous allons paramétrer les domaines axisymétriques considérés. Ces derniers sont entièrement déterminés par leur frontière γ_{LG}.

Soit $z^* > 0$ et f continue sur $I := [0, z^*]$, dérivable sur $[0, z^*[$, et dérivée infinie en z^*.

On notera ω^f le domaine 2D dont la frontière γ^f_{LG} est donnée par la courbe représentative de f. γ^f_{LS}, γ^f_{GS} désignent les différentes interfaces associées (voir 4.1).

Les hypothèses de régularité de f sont les hypothèses minimales que nous considérons pour définir un domaine ω^f. Dans la suite, on précisera les hypothèses

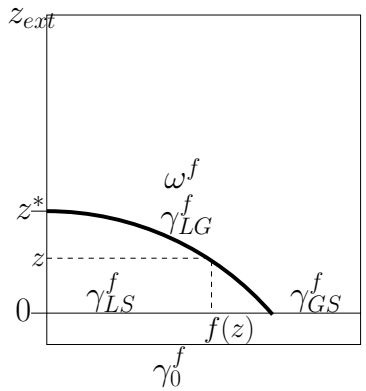


FIG. 4.1 – Paramétrage du domaine

supplémentaires nécessaires sur f. Avec ce paramétrage on définit le potentiel électrostatique associé.

Potentiel électrostatique En gardant les notations du chapitre 2, φ^{ω^f} est la solution du problème variationnel

$$(\mathcal{F}v)_{\omega^f} \begin{cases} \text{Trouver } \varphi^{\omega^f} \in \check{H}^1_\gamma(\omega^f) \text{ tel que,} \\ \forall v \in \check{H}^1_0(\omega^f), \quad \displaystyle\int_{\omega^f} \varepsilon \left(\nabla\varphi^{\omega^f} \cdot \nabla v\right) r dr dz = 0 \end{cases}$$

Ces notations introduites, nous allons maintenant établir une équation dont est solution f sur $[0, z^*[$, si ω^f est un minimum de la fonction coût sous la contrainte de volume.
On peut établir cette équation de deux façons. La première est issue de raisonnements plutôt physiques et géométriques tandis que la seconde nous permet de trouver cette équation directement en travaillant sur la condition nécessaire d'optimalité (2.19) page 48.

4.3 Un point de vue physique

Nous allons établir l'équation pour un domaine $3D$ axisymétrique, mais le raisonnement serait le même pour un domaine $3D$ quelconque.
L'équation traduit l'équilibre entre toutes les forces qui s'exercent sur la goutte. On négligera la force gravitationnelle, pour les mêmes raisons que dans le chapitre 3 : le nombre de Bond $\alpha = \frac{\rho g}{\sigma_{LG}}$ est petit.

Il s'agit, dans cette section, de faire un bilan des forces agissant sur la goutte à l'équilibre. Puis en revenant aux notations données en 4.2, on établira l'équation. Dans cette section on utilisera l'argument *suffisamment petit* et ses conséquences sans donner les justifications mathématiques.

4.3.1 Notations

Soit M un point de la goutte et dS une surface élémentaire de $\mathbb{R}^3$ de la goutte autour de M.

On note $\overrightarrow{n}$ la normale en M à la surface et on choisit un repère orthonormé (Oxy) tel que $(Oz) \parallel \overrightarrow{n}$.

dS est délimitée par les arcs $\overset{\frown}{AB}$ et $\overset{\frown}{CD}$, $\overset{\frown}{BC}$ et $\overset{\frown}{AD}$, issus de l'intersection de la surface avec les deux plans parallèles P_1 et P_2 et les deux plans P_3 et P_4, orthogonaux à P_1 et P_2 (voir figure 4.2). On suppose que si les plans sont *suffisamment* proches $AB \approx DC \approx dl$ et $BC \approx AD \approx dL$, avec $dl > 0$ et $dL > 0$.

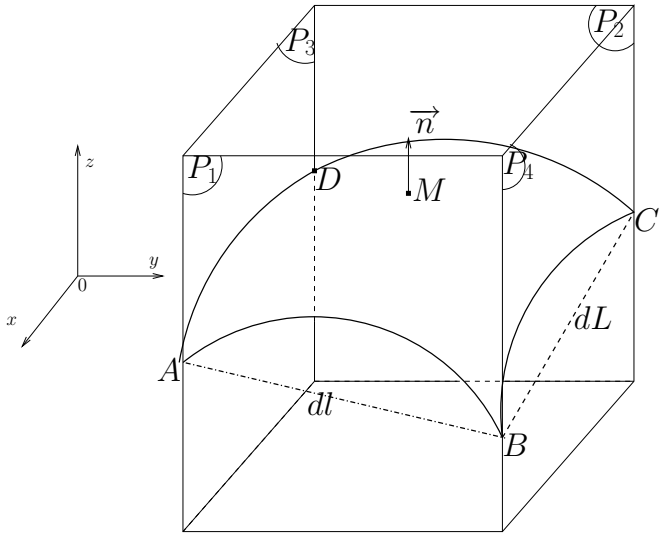


FIG. 4.2 – Surface élémentaire dS

A l'équilibre, la somme des forces agissant sur un petit élément de surface de la goutte est nulle. Faisons un bilan des forces agissant sur cette surface élémentaire dS.

4.3.2 Bilan des forces extérieures

Il y a deux types de forces : les forces de tension capillaires et les forces de pression atmosphérique et électrostatique.

Forces de tension capillaires Ces forces sont dues à la tension de surface à l'interface, elles vont avoir tendance à "étirer" la surface. Elles agissent sur la

surface par $\widehat{AB}$, $\widehat{CD}$, $\widehat{AD}$ et $\widehat{BC}$.

1. Cas de $\widehat{AD}$ et $\widehat{BC}$:

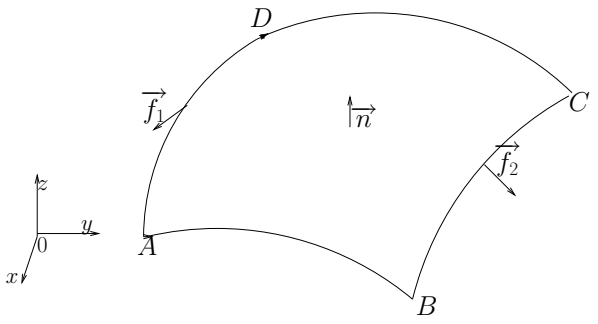


FIG. 4.3 – Forces capillaires agissant sur $\widehat{AD}$ et $\widehat{BC}$

Deux forces $\overrightarrow{f_1}$ et $\overrightarrow{f_2}$ agissent sur tout l'arc $\widehat{AD}$ et $\widehat{BC}$ respectivement. $\overrightarrow{f_1}$ (resp.$\overrightarrow{f_2}$) est parallèle au plan P_1 (resp.P_1) et tangente à la surface dS. Ces deux vecteurs ont même norme.

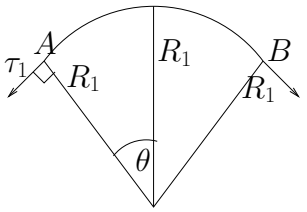


FIG. 4.4 – Coupe dans le plan P_1

On a les relations suivantes entre les composantes de f_1 et f_2 :
$\left(\overrightarrow{f_1}\right)_x = \left(\overrightarrow{f_2}\right)_x = 0$, $\left(\overrightarrow{f_1}\right)_y + \left(\overrightarrow{f_2}\right)_y = 0$ et $\left(\overrightarrow{f_1}\right)_z = \left(\overrightarrow{f_2}\right)_z$. Si dL est *suffisamment petit*, on connaît l'expression des forces :

$$\overrightarrow{f_1} = \int_{\widehat{AD}} \sigma_{LG}\overrightarrow{\tau_1}, \text{ avec } \overrightarrow{\tau}_1 \text{ vecteur tangent unitaire à } \widehat{AB} \text{ en } A$$

En considérant θ, R_1 donnés comme dans la figure 4.4, on obtient
$\left(\overrightarrow{f_1}\right)_z = \sigma_{LG}\int_{AD}\overrightarrow{\tau_1}.\overrightarrow{e_z} \approx -\sigma_{LG}dL\sin(\theta)$.

En effectuant le même calcul pour $\overrightarrow{f_2}$, on écrit

$$\left(\overrightarrow{f_1}\right)_z + \left(\overrightarrow{f_2}\right)_z \approx -2\sigma_{LG} dL \sin(\theta)$$

Mais comme dl est *suffisamment petit* on peut aussi écrire $\sin(\theta) \approx \dfrac{dl}{2R_1}$, voir figure 4.4.
D'où

$$\left(\overrightarrow{f_1}\right)_z + \left(\overrightarrow{f_2}\right)_z \approx -\sigma_{LG} \frac{dldL}{R_1} \tag{4.1}$$

2. On effectue le même raisonnement pour les arcs $\widehat{AB}$ et $\widehat{CD}$ et on obtient que sur l'axe (Oz) la somme des forces vaut :

$$-\sigma_{LG} \frac{dldL}{R_2} \tag{4.2}$$

La contribution des forces de tension capillaire est donc donnée par la somme de (4.1) et (4.2) :

$$-\sigma_{LG} dldL \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) \tag{4.3}$$

A un facteur multiplicatif près, cette expression fait apparaître la courbure moyenne de la surface en M.

Les forces de pression atmosphérique et électrostatique $\overrightarrow{F_p}$.

Si P_{int} est la pression à l'intérieur du liquide, P_{ext} la pression à l'extérieur du liquide et P_{elec} est la pression électrostatique, on a

$$\overrightarrow{F_p} = \int_{dS} P\overrightarrow{n}\, ds = \int_{dS} (P_{int} - P_{ext} + P_{elec})\overrightarrow{n}\, ds$$

Si $\overrightarrow{E}$ est le champ électrique à l'extérieur de la goutte, la pression électrostatique vaut $P_{elec} = \dfrac{\sigma^2}{2\varepsilon_G}$ avec σ la charge surfacique donnée par $\sigma = \varepsilon_G ||\overrightarrow{E}|| = \varepsilon_G ||\nabla \varphi^{\omega^f}||$.

Remarque 4.3.1 *On rappelle que la goutte est supposée totalement conductrice donc* $||\overrightarrow{E}|| = 0$ *à l'intérieur de la goutte.*

On obtient

$$\begin{aligned} \left(\overrightarrow{F_p}\right)_z &= \int_{dS} P\overrightarrow{n} \cdot \overrightarrow{e}_z ds \\ &\approx PdldL \end{aligned} \tag{4.4}$$

Bilan La somme des forces s'exerçant sur toute la goutte est nulle à l'équilibre.

$$\overrightarrow{F}_{tension} + \overrightarrow{F}_p = \overrightarrow{0}$$

En projetant suivant z et en utilisant (4.3) et (4.4), on obtient

$$\boxed{\sigma_{LG}\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right) = P_{int} - P_{ext} + \frac{\varepsilon_G||\overrightarrow{E}||^2}{2}} \tag{4.5}$$

C'est l'équation connue sous le nom d'équation de Young-Laplace.

Reste à traduire l'équation (4.5) en fonction des notations introduites en 4.2 et dans le cas axisymétrique. On part du modèle 3D que l'on exploite dans le cas axisymétrique.

4.3.3 Retour au cas $3D$ axisymétrique

Supposons que

Hypothèse 4.3.2 *f est une application continue sur $[0, z^*]$, dérivable sur $[0; z^*[$ et deux fois dérivable sur $]0; z^*[$ telle que $f > 0$ sur $]0, z^*[$. De plus $f(z^*) = 0$ et $\lim_{z\to z^*} f'(z) = +\infty$.*

On note ω^f le domaine associé et Γ^f_{LG} la surface engendrée par la rotation de γ^f_{LG} autour de l'axe de z.

On notera (r, θ, z) les coordonnées cylindriques centrées en 0.

Paramétrisation de la surface On paramétrise la surface Γ_{LG} pour $(z, \theta) \in [0, z^*[\times[0, 2\pi[$ par

$$\psi : (z,\theta) \mapsto \left\{\begin{array}{lcl} x(z,\theta) & = & f(z)cos(\theta) \\ y(z,\theta) & = & f(z)sin(\theta) \\ z(z,\theta) & = & z \end{array}\right.$$

On a

$$\frac{\partial\psi}{\partial z} = \begin{pmatrix} f'(z)\cos(\theta) \\ f'(z)\sin(\theta) \\ 1 \end{pmatrix}$$

et

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = \begin{pmatrix} -f(z)\sin(\theta) \\ f(z)\cos(\theta) \\ 0 \end{pmatrix}$$

La normale en un point de la surface est donnée par :

$$\overrightarrow{N} = \frac{\dfrac{\partial\psi}{\partial z} \wedge \dfrac{\partial\psi}{\partial\theta}}{\left\| \dfrac{\partial\psi}{\partial z} \wedge \dfrac{\partial\psi}{\partial\theta} \right\|}$$

Donc

$$\overrightarrow{N} = \frac{1}{f(z)\sqrt{1+f'^2(z)}} \begin{pmatrix} -f(z)\cos(\theta) \\ -f(z)\sin(\theta) \\ f(z)f'(z) \end{pmatrix} \text{ au point } (f(z),\theta,z) \quad \forall z \in [0, z^*[$$

Courbure moyenne de la surface Γ_{LG} Pour cela nous allons calculer la première et seconde forme fondamentale de ψ puis calculer la trace de la matrice représentative de l'endomorphisme de Weingarten (voir [RDO98] p.184).

Notons F_1 la première forme fondamentale et F_2 la seconde forme fondamentale. Nous pouvons les calculer grâce à l'hypothèse de régularité faite sur f en début de cette section.

On a

$$F_1 = \begin{pmatrix} \left\| \dfrac{\partial\psi}{\partial z} \right\|^2 & \dfrac{\partial\psi}{\partial z} \cdot \dfrac{\partial\psi}{\partial\theta} \\ \dfrac{\partial\psi}{\partial z} \cdot \dfrac{\partial\psi}{\partial\theta} & \left\| \dfrac{\partial\psi}{\partial\theta} \right\|^2 \end{pmatrix}$$

et

$$F_2 = \begin{pmatrix} \overrightarrow{N} \cdot \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2} & \overrightarrow{N} \cdot \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z\partial\theta} \\ \overrightarrow{N} \cdot \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z\partial\theta} & \overrightarrow{N} \cdot \dfrac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} \end{pmatrix}$$

D'où

$$F_1 = \begin{pmatrix} 1+f'^2(z) & 0 \\ 0 & f^2(z) \end{pmatrix}$$

et

$$F_2 = \begin{pmatrix} -\dfrac{f''(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} & 0 \\ 0 & \dfrac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} \end{pmatrix}$$

ceci pour $z \in]0; z^*[$.

On en déduit l'expression de l'endomorphisme de Weingarten W :

$$W = F_1^{-1}F_2 = \begin{pmatrix} -\dfrac{f''(z)}{(1+f'^2(z))^{\frac{3}{2}}} & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{f(z)\sqrt{1+f'^2(z)}} \end{pmatrix} \text{ pour } z \in]0; z^*[.$$

Les valeurs propres κ_1 et κ_2 de l'endomorphisme de Weingarten sont données par :

$$\kappa_1(z) = -\frac{f''(z)}{(1+f'^2(z))^{\frac{3}{2}}}$$

et

$$\kappa_2(z) = \frac{1}{f(z)\sqrt{1+f'^2(z)}}$$

De l'équation (4.5) et de l'expression de la courbure moyenne, on déduit que :

$$\boxed{-\frac{f''(z)}{(1+f'^2(z))^{\frac{3}{2}}} + \frac{1}{f(z)\sqrt{1+f'^2(z)}} = \frac{P_{int}-P_{ext}}{\sigma_{LG}} + \frac{\varepsilon_G||\nabla\varphi^{\omega^f}||^2}{2\sigma_{LG}}} \tag{4.6}$$

Dans le cas où f, représentant la forme de goutte à l'équilibre, vérifie l'hypothèse 4.3.2, on a donc obtenu une équation différentielle ordinaire dont est solution f. Elle traduit que la courbure moyenne de la surface est donnée par la somme des forces de pression atmosphérique et électrostatique. Ce dernier terme électrostatique dépend de f.

Remarque 4.3.3 *Cette équation différentielle qui montre bien l'aspect physique du problème, introduit le terme $P_{int} - P_{ext}$. En utilisant la condition nécessaire d'optimalité au paragraphe suivant, on verra que l'obtient une relation donnant facilement $P_{int} - P_{ext}$.*

4.4 Ecriture de l'équation en utilisant la condition nécessaire d'optimalité

On peut également retrouver l'équation (4.6) en utilisant la condition nécessaire d'optimalité exposée en (2.19). Cette méthode va nous permettre de prendre en compte explicitement la contrainte de volume.

4.4.1 Condition nécessaire d'optimalité

Plaçons nous, à potentiel et volume donné, au minimum de l'énergie de la goutte. Notons toujours f la fonction définissant ce domaine optimal ω^f. On rappelle la notation de la section 2.1 :

$$\mathcal{U}(\bar{\omega}^f, \mathbb{R}^2) = \left\{ u \in \mathcal{C}^1(\overline{\omega^f}, \mathbb{R}^2); ||u||_\infty < 1, u_{z_{/\omega_S^f}} \equiv 0,\ u_{/\gamma_e^f} \equiv 0,\ \text{et}\ (u_r)_{/\gamma_z} \equiv 0 \right\}$$

On dispose de la condition nécessaire d'optimalité du chapitre 2, donnée en (2.19) page 48.

Proposition 4.4.1 *Si ω^f est un minimum de l'énergie sous la contrainte de volume, alors :*

$$\exists \lambda \in \mathbb{R}^* \text{ tel que } dj(\omega^f).u = dj_{LG}(\omega^f).u + dj_{LS}(\omega^f).u + dj_{elec}(\omega^f).u$$
$$= \lambda dc(\omega^f).u, \quad \forall u \in \mathcal{U}(\bar{\omega}^f, \mathbb{R}^2) \quad (4.7)$$

où :
φ^{ω^f} est solution $(\mathcal{F}v)_{\omega^f}$.

$$dj_{LG}(\omega^f).u = \int_{\gamma_{LG}^f} u_r(s)ds + \int_{\gamma_{LG}^f} div_\gamma(u) r ds \quad (4.8)$$

$$dj_{LS}(\omega^f).u = \mu \int_{\gamma_{LS}^f} u_r dr + \mu \int_{\gamma_{LS}^f} div_\gamma(u) r dr \quad (4.9)$$

$$dj_{elec}(\omega^f).u = -\frac{\delta}{2} \int_{\omega^f} \varepsilon u_r ||\nabla \varphi^{\omega^f}||^2 dr dz - \frac{\delta}{2} \int_{\omega^f} \varepsilon ||\nabla \varphi^{\omega^f}||^2 div(u) r dr dz$$
$$+ \frac{\delta}{2} \int_{\omega^f} \varepsilon \left(({}^t Du + Du) \nabla \varphi^{\omega^f} \cdot \nabla \varphi^{\omega^f} \right) r dr dz \quad (4.10)$$

$$dc(\omega^f).u = -\int_{\omega^f} u_r dr dz - \int_{\omega^f} div(u) r dr dz \quad (4.11)$$

Remarque 4.4.2 *On néglige le terme de gravitation car la goutte est assez petite par rapport à une longueur caractéristique (le nombre de Bond est petit). On retrouverait des termes analogues dans le cas où on laisse la contribution gravitationnelle.*

Le but est de donner une expression de chacun des termes (4.8), (4.9), (4.10) et (4.11) en fonction de f et des autres données du problème.

On conviendra que :
- Pour alléger les notations, on notera ω^f par ω et on fera de même pour γ_{LS}^f, γ_{LG}^f etc...

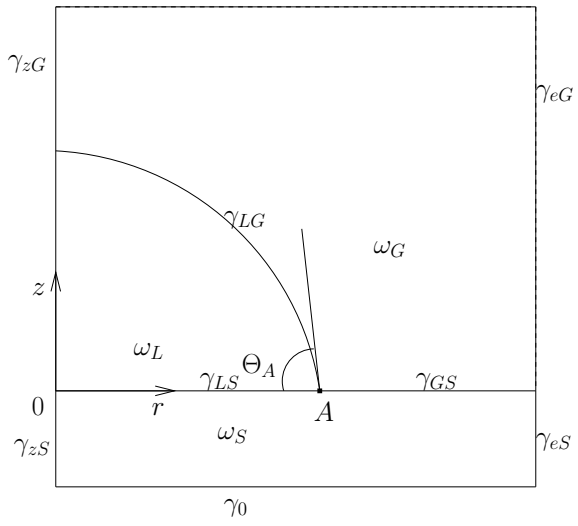


FIG. 4.5 – Domaine axisymétrique 2D

- Si ψ est une fonction définie sur tout le domaine ω, on notera ψ_G sa restriction à ω_G et ψ_S sa restriction à ω_S. Les notations sont rappelées dans la figure 4.5.
- Lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté sur le domaine considéré on notera φ^ω pour désigner φ^ω_G ou φ^ω_S suivant le domaine.

4.4.2 Etude du terme électrostatique

Nous allons étudier le terme donné en (4.10). Ce terme contient la contribution du gradient du potentiel. Pour étudier son expression, nous allons tout d'abord l'étudier sur des fonctions régulières puis par un argument de densité, nous en déduirons l'expression de (4.10) pour φ^ω.

1. **Cas régulier.** Prenons dans (4.10) φ définie sur ω telle que $\varphi_i \in \mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_i)$, pour $i \in \{G, S\}$.

   Posons

$$E := \frac{dj_{elec}}{\frac{\delta}{2}} = -\int_\omega \varepsilon u_r ||\nabla\varphi||^2 drdz - \int_\omega \varepsilon ||\nabla\varphi||^2 (\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}) rdrdz$$
$$+ \int_\omega \varepsilon \left(2\frac{\partial u_r}{\partial r}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z} + 2\frac{\partial u_z}{\partial z}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 \right) rdrdz \tag{4.12}$$

En utilisant la formule de Green sur ω_S et ω_G, E se décompose en $E_\omega + E_{\partial\omega}$, somme d'intégrales sur les domaines ω_S et ω_G et d'intégrales sur les bords $\partial\omega_S$ et $\partial\omega_G$.

(a) **Etude du terme E_ω**

On a

$$E_\omega = E_{\omega_S} + E_{\omega_G}$$

où pour $i \in \{G, S\}$,

$$E_{\omega_i} = \int_{\omega_i} \varepsilon \left(-||\nabla\varphi||^2 u_r + \frac{\partial}{\partial r}\left(r||\nabla\varphi||^2\right) u_r + \frac{\partial}{\partial z}\left(r||\nabla\varphi||^2\right) u_z \right) drdz$$
$$-2\int_{\omega_i} \varepsilon \left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 \right) u_r + \frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) u_r + \frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right) u_z \right.$$
$$\left. + \frac{\partial}{\partial z}\left(r\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 \right) u_z \right) drdz \tag{4.13}$$

Ce qui nous donne :

$$E_{\omega_i} = \int_{\omega_i} \varepsilon u_r \left[-||\nabla\varphi||^2 + ||\nabla\varphi||^2 + r\frac{\partial}{\partial r}\left(||\nabla\varphi||^2\right) \right.$$
$$\left. -2\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 - 2r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 - 2r\frac{\partial^2\varphi}{\partial r\partial z}\frac{\partial\varphi}{\partial z} - 2r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} \right] drdz$$
$$+ \int_{\omega_i} \varepsilon u_z \left[r\frac{\partial}{\partial z}\left(||\nabla\varphi||^2\right) - 2\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right) \right.$$
$$\left. -2r\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\frac{\partial\varphi}{\partial z} - 2r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r\partial z} - 2r\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 \right] drdz \tag{4.14}$$

Nous allons traiter séparément le terme en facteur de u_r de celui en facteur de u_z dans l'équation (4.14).

Terme en facteur de u_r Comme $\dfrac{\partial}{\partial r}\left(||\nabla\varphi||^2\right) = 2\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}\frac{\partial\varphi}{\partial r} + 2\frac{\partial^2\varphi}{\partial r\partial z}\frac{\partial\varphi}{\partial z}$, il reste :

$$\begin{aligned}\int_{\omega_i} \varepsilon u_r \left[-2\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 - 2r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} - 2r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right] drdz \\ = \int_{\omega_i} \varepsilon u_r \left[-2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\left(r\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{\partial\varphi}{\partial r} + r\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right)\right] \\ = \int_{\omega_i} \varepsilon u_r \left[-2r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\left(\Delta_r\varphi\right)\right] drdz \quad (4.15)\end{aligned}$$

Terme en facteur de u_z Il est similaire au terme en facteur de u_r, on obtient :

$$\begin{aligned}\int_{\omega} \varepsilon u_z \left[-2\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z} - 2r\frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} - 2r\frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right] drdz \\ = \int_{\omega} \varepsilon u_z \left[-2r\frac{\partial\varphi}{\partial z}\left(\Delta_r\varphi\right)\right] drdz \quad (4.16)\end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant donner une expression de E_{ω_i} puis de E_ω.

Simplification du terme E_ω

$$E_\omega = -2\int_{\omega_G} \varepsilon\left(\nabla u \,.\, \nabla\varphi\right)\left[\Delta_r\varphi\right] rdrdz - 2\int_{\omega_S} \varepsilon\left(\nabla u \,.\, \nabla\varphi\right)\left[\Delta_r\varphi\right] rdrdz \quad (4.17)$$

(b) **Etude du terme $E_{\partial\omega}$**
On note $\overrightarrow{n} = (n_r, n_z)$ la normale extérieure au bord considéré. On a alors,

$$E_{\partial\omega} = E_{\partial\omega_S} + E_{\partial\omega_G}$$

où pour $i \in \{G, S\}$

$$\begin{aligned}E_{\partial\omega_i} = &-\int_{\partial\omega_i} \varepsilon r||\nabla\varphi||^2(u_r n_r + u_z n_z)d\sigma \\ &+ 2\int_{\partial\omega_i} \varepsilon\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 u_r n_r r d\sigma + 2\int_{\partial\omega_i} \varepsilon\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z} u_r n_z r d\sigma \\ &+ 2\int_{\partial\omega_i} \varepsilon\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z} u_z n_r r d\sigma + 2\int_{\partial\omega_i} \varepsilon\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 u_z n_z r d\sigma\end{aligned}$$

D'où

$$E_{\partial\omega_i} = \int_{\partial\omega_i} \varepsilon \left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)^2 - \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 \right) (u_r n_r - u_z n_z) r d\sigma + 2\int_{\partial\omega_i} \varepsilon \frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial z}(u_r n_z + u_z n_r) r d\sigma \tag{4.18}$$

2. **Passage au cas non régulier**
Les expressions (4.17) et (4.18) on été obtenues pour $(\varphi_S, \varphi_G) \in \mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_S) \times \mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_G)$.
Il faut maintenant passer au cas où φ n'est plus aussi régulière.
En gardant les notations du chapitre 2, pour $\kappa > 0$ fixé, on note

$$\begin{aligned} \mathbb{D}_\kappa &:= \mathcal{D}(\check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_S) \times \check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G), \check{L}^2) \\ &= \Big\{(\varphi_S, \varphi_G) \in \check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_S) \times \check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G) \text{ tels que} \qquad (4.19) \\ &\quad \Delta_r \varphi_i \in \check{L}^2(\omega_i), \text{ pour } i \in \{G, S\}\Big\} \qquad (4.20) \end{aligned}$$

Cet espace est normé par

$$||\varphi||_{\mathbb{D}_\kappa} = ||\varphi||_{\check{H}^{\frac{3}{2}+\kappa}} + ||\Delta_r \varphi||_{\check{L}^2}$$

Par les résultats de décomposition du chapitre (2.12), on sait qu'il existe $\kappa > 0$ tel que

$$\varphi^\omega \in \mathbb{D}_\kappa$$

De plus, en adaptant le résultat de P.Grisvard de [Gri85] page 59, on a la densité de $\mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_S) \times \mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_G)$ dans $\mathbb{D}_\kappa$ pour la norme $||.||_{\mathbb{D}_\kappa}$.
Soit donc $(\varphi_G^n, \varphi_S^n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite de $\mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_G) \times \mathcal{C}^\infty(\bar{\omega}_S)$ qui converge vers $(\varphi_G^\omega, \varphi_S^\omega)$ dans $\mathbb{D}_\kappa$.

- Comme $\Delta_r \varphi_i^n$ converge en norme $\check{L}^2$ vers $\Delta_r \varphi_i$ pour $i \in \{G, S\}$, on passe à la limite dans (4.17).

- On peut de plus définir un prolongement de la notion de trace du gradient sur cet espace, notée T. (cf [Gri85])
La trace définie étant continue pour la norme considérée, on déduit que

$$T(\varphi_i^n) \to T(\varphi_i^\omega)$$

en norme $\check{L}^2$ du bord de ω_i pour $i \in \{G, S\}$.
On peut donc passer à la limite dans l'expression (4.18).

- **Conclusion** Les expressions données pour E_ω et $E_{\partial\omega}$ restent valables pour φ^ω.

3. **Expression de la dérivée de l'énergie électrostatique** On peut maintenant donner l'expression de E_ω et $E_{\partial\omega}$ pour le potentiel φ^ω.

Pour E_ω Vu l'équation vérifiée par φ^ω, on déduit que le terme E_ω est nul.

$$E_\omega = 0$$

Pour $E_{\partial\omega}$ On décompose chaque terme sur les différentes parties du bord dont sont composés $\partial\omega_G$ et $\partial\omega_S$.
La partie sur γ_z a une contribution nulle.

- *Sur γ_{eG} et γ_{eS} :*

$$\int_{\gamma_{ei}} \varepsilon \left(\left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \right)^2 - \left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} \right)^2 \right) (u_r n_r - u_z n_z) r d\sigma + 2 \int_{\gamma_{ei}} \varepsilon \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} (u_r n_z + u_z n_r) r d\sigma \quad \text{pour } i \in \{S, G\}. \tag{4.21}$$

Comme $u \in \mathcal{U}(\bar{\omega}, \mathbb{R}^2)$, on sait que

$$u_{/\gamma_{eG} \cup \gamma_{eS}} = 0$$

La contribution du terme (4.21) est donc nulle.

- *Sur γ_0* où $\overrightarrow{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$:

$$\int_{\gamma_0} \varepsilon \left(\left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \right)^2 - \left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} \right)^2 \right) u_z r d\sigma \quad - \quad 2 \int_{\gamma_0} \varepsilon \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} u_r r d\sigma \tag{4.22}$$

Par propriété des déformations, on a $(u_z)_{/\gamma_0} = 0$. Il reste donc :

$$-2 \int_{\gamma_0} \varepsilon \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} u_r r d\sigma \tag{4.23}$$

Comme φ^ω est constante sur γ_0, on déduit que (4.23) est nul.

- *Sur γ_{LS}* où $\overrightarrow{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$:

$$\int_{\gamma_{LS}} \varepsilon \left(\left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \right)^2 - \left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} \right)^2 \right) u_z r d\sigma + 2 \int_{\gamma_{LS}} \varepsilon \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r} \frac{\partial \varphi^\omega}{\partial z} u_r r d\sigma \tag{4.24}$$

Par propriété des déformations u et comme φ^ω est constante sur γ_{LS}, le terme (4.24) est nul.

- *Sur γ_{GS} :* Toujours par choix des déformations u, il reste

$$2\int_{\gamma_{GS}}\left[\varepsilon_G\frac{\partial\varphi_G^\omega}{\partial r}\frac{\partial\varphi_G^\omega}{\partial z}-\varepsilon_S\frac{\partial\varphi_S^\omega}{\partial r}\frac{\partial\varphi_S^\omega}{\partial z}\right]u_r r d\sigma \tag{4.25}$$

Par les conditions de transmission vérifiées par φ^ω (continuité à l'interface γ_{GS} et transmission des dérivées normales), on déduit que ce terme est nul.

- *Sur γ_{LG},* on a

$$\overrightarrow{n}=\frac{1}{\sqrt{1+f'^2}}\begin{pmatrix}-1\\ f'\end{pmatrix},\ \text{sur } [0,z^*[$$

et en z^*,

$$\overrightarrow{n}=(0,-1)$$

Le terme sur γ_{LG} est donc donné par

$$\begin{aligned}\int_0^{z^*}\varepsilon\left(\left(\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}\right)^2-\left(\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial z}\right)^2\right)(-u_r-f'(z)u_z)f(z)dz\\ +2\int_0^{z^*}\varepsilon\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial z}(f'(z)u_r-u_z)f(z)dz\end{aligned} \tag{4.26}$$

Or on sait que : $\forall z\in[0,z^*[$, $\varphi^\omega(f(z),z)=\phi_0$, donc :

$$f'(z)\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}+\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial z}=0,\quad \forall z\in]0,z^*[\tag{4.27}$$

On a donc une expression de $\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial z}$ sur γ_{LG} :

$$\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial z}=-f'(z)\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r},\quad \forall z\in]0,z^*[$$

En remplaçant dans (4.26), on obtient :

$$\begin{aligned}&\int_0^{z^*}\varepsilon\left(\left(\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}\right)^2-f'^2(z)\left(\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}\right)^2\right)(-u_r-f'(z)u_z)f(z)dz\\ &\qquad-2\int_0^{z^*}\varepsilon f'(z)\left(\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}\right)^2(f'(z)u_r-u_z)f(z)dz\\ &=\int_0^{z^*}\varepsilon\left(\frac{\partial\varphi^\omega}{\partial r}\right)^2\left(-\left(1+f'^2(z)\right)u_r+\left(1+f'^2(z)\right)f'(z)u_z\right)f(z)dz\end{aligned} \tag{4.28}$$

En conclusion, il reste :

$$\int_0^{z^*} \varepsilon \left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r}\right)^2 \left(1+f'^2(z)\right)\left(f'(z)u_z - u_r\right) f(z)dz$$

Mais la relation (4.27), permet d'ajouter que

$$||\nabla \varphi^\omega(f(z),z)||^2 = (1+f'^2(z))\left(\frac{\partial \varphi^\omega}{\partial r}\right)^2$$

Le terme sur γ_{LG} est donc donné par :

$$\int_0^{z^*} \varepsilon ||\nabla \varphi^\omega(f(z),z)||^2 \left(f'(z)u_z - u_r\right) f(z)dz \tag{4.29}$$

4. **Conclusion** Nous sommes maintenant en mesure d'exprimer le terme E. Toutes les contributions sont nulles sauf celle donnée par (4.29). Le terme $dj_{elec}(\omega).u$ se réduit donc à

$$\boxed{dj_{elec}(\omega).u = \frac{\delta}{2}\int_0^{z^*} \varepsilon ||\nabla \varphi_G^\omega(f(z),z)||^2 \left(f'(z)u_z - u_r\right) f(z)dz} \tag{4.30}$$

4.4.3 Etude du terme d'interface liquide-gaz

$dj_{LG}(\omega).u$ est donné par (4.8). Calculons le second terme de la somme dans le second membre de (4.8).

On rappelle que $\mathrm{div}_\gamma(u) = \mathrm{div}(u) - (\overrightarrow{n} \,.^t Du \overrightarrow{n})$ où $\overrightarrow{n}$ est la normale sortante à la surface considérée.

Comme $\overrightarrow{n} = \frac{1}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\begin{pmatrix} -1 \\ f'(z) \end{pmatrix}$ pour $z \in]0, z^*[$, on a

$$\begin{aligned}
&\int_{\gamma_{LG}} \mathrm{div}_\gamma(u) r ds = \int_0^{z^*} \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) f(z)\sqrt{1+f'(z)^2}dz \\
&- \int_0^{z^*} \left(\frac{\partial u_r}{\partial r} - f'(z)\left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z}\right) + \frac{\partial u_z}{\partial z} f'^2(z)\right) \frac{1}{1+f'^2(z)} f(z)\sqrt{1+f'^2(z)}dz \\
&= \int_0^{z^*} \left[\frac{\partial u_r}{\partial r}\frac{f(z)f'^2(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} + \frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z}\right)\right] dz \\
&= \int_0^{z^*} \left[\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\left(f'(z)\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z}\right) + \frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + f'(z)\frac{\partial u_z}{\partial r}\right)\right] dz \\
&\quad = \int_0^{z^*} \left[\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\frac{d}{dz}\left(u_r(f(z),z)\right) + \frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\frac{d}{dz}\left(u_z(f(z),z)\right)\right] dz
\end{aligned}$$

En faisant l'hypothèse 4.3.2, on peut intégrer par partie et on trouve

$$\begin{aligned}
&\int_{\gamma_{LG}} \mathrm{div}_\gamma(u) r ds \\
&= -\int_0^{z^*} \left[\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} \right) u_r(f(z),z) + \frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} \right) u_z(f(z),z) \right] dz \\
&\qquad + \left[\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} u_r(f(z),z) + \frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} u_z(f(z),z) \right]_0^{z^*}
\end{aligned}$$

Comme $f(z^*) = 0$, $\lim_{z\to z^*}(f'(z)(1+f'^2(z))^{-\frac{1}{2}}) = 1$ et $u_z(f(0),0) = 0$, il reste :

$$\begin{aligned}
&\int_{\gamma_{LG}} \mathrm{div}_\gamma(u) r ds \\
&= -\frac{f(0)f'(0)}{\sqrt{1+f'^2(0)}} u_r(f(0),0) - \int_0^{z^*} \left[\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} \right) u_r(f(z),z) \right. \\
&\qquad \left. + \frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} \right) u_z(f(z),z) \right] dz \qquad (4.31)
\end{aligned}$$

De plus

$$\int_{\gamma_{LG}} u_r(s) ds = \int_0^{z^*} u_r(f(z),z)\sqrt{1+f'^2(z)} dz \qquad (4.32)$$

De (4.31) et (4.32), on déduit que le terme sur γ_{LG} est :

$$\begin{aligned}
dj_{LG}(\omega).u &= -\frac{f(0)f'(0)}{\sqrt{1+f'^2(0)}} u_r(f(0),0) \\
&+ \int_0^{z^*} \left[-\frac{d}{dz}\left(f(z)f'(z)(1+f'^2(z))^{-\frac{1}{2}} \right) + \sqrt{1+f'^2(z)} \right] u_r(f(z),z) dz \\
&\qquad - \int_0^{z^*} \left[\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}} \right) \right] u_z(f(z),z) dz \qquad (4.33)
\end{aligned}$$

4.4.4 Etude du terme d'interface liquide-solide

$dj_{LS}(\omega)$ est donné par (4.9).

Comme $\overrightarrow{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$, on a

$$\int_{\gamma_{LS}} \mathrm{div}_\gamma(u) r dr = \int_0^{f(0)} \left(\frac{\partial u_r}{\partial r}(r,0) + \frac{\partial u_z}{\partial z}(r,0) \right) r dr - \int_0^{f(0)} \frac{\partial u_z}{\partial z}(r,0) r dr$$

D'où

$$\int_{\gamma_{LS}} \mathrm{div}_\gamma(u) r dr = [r u_r(r,0)]_0^{f(0)} - \int_0^{f(0)} u_r(r,0) dr$$
$$= f(0) u_r(f(0),0) - \int_0^{f(0)} u_r(r,0) dr$$

Donc

$$dj_{LS}(\omega).u \quad = \quad \mu \left[\int_0^{f(0)} u_r(r,0) dr + f(0) u_r(f(0),0) - \int_0^{f(0)} u_r(r,0) dr \right]$$

On déduit

$$\boxed{dj_{LS}(\omega).u = \mu f(0) u_r(f(0),0)} \tag{4.34}$$

4.4.5 Etude du terme de contrainte

$dc(\omega).u$ est donné par la relation (4.11).

En utilisant la formule de Green sur le second terme du second membre, on trouve :

$$dc(\omega).u = -\int_\omega u_r dr dz + \int_\omega u_r dr dz - \int_{\partial\omega} (u \cdot \overrightarrow{n})\, r d\sigma$$
$$= -\int_{\partial\omega} (u \cdot \overrightarrow{n})\, r d\sigma \tag{4.35}$$

On observe le terme (4.35) sur chaque partie du bord de ω. Par propriété des déformations u, le seul terme ayant une contribution est celui apparaissant sur le bord γ_{LG}. En utilisant les expressions de $\overrightarrow{n}$ et $d\sigma$ sur γ_{LG} (déjà données en section 4.4.3), on trouve :

$$\boxed{dc(\omega).u = -\int_0^{z^*} f(z)(f'(z) u_z - u_r) dz} \tag{4.36}$$

4.4.6 Conclusion

De (4.30), (4.33), (4.34), (4.36), et (4.7) on déduit que si f vérifie l'hypothèse 4.3.2, alors il existe $\lambda \in \mathbb{R}^*$ tel que

$$\begin{aligned}
&-\frac{f(0)f'(0)}{\sqrt{1+f'^2(0)}}u_r(f(0),0)+\mu f(0)u_r(f(0),0)\\
&\qquad+\int_0^{z^*}\left[-\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right)+\sqrt{1+f'^2(z)}\right]u_r(f(z),z)dz\\
&\qquad\qquad-\int_0^{z^*}\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right)u_z(f(z),z)dz\\
&+\frac{\delta}{2}\int_0^{z^*}\varepsilon||\nabla\varphi^\omega(f(z),z)||^2\left(f'(z)u_z-u_r\right)f(z)dz=-\lambda\int_0^{z^*}f(z)(f'(z)u_z-u_r)dz
\end{aligned}$$

On a montré au chapitre 2 que l'angle de contact est égal à l'angle de Young (voir équation (2.43)), ce qui signifie que :

$$\mu-\frac{f'(0)}{\sqrt{1+f'^2(0)}}=0$$

Remarque 4.4.3 *Sous des hypothèses de régularité plus fortes, on retrouve que l'on doit avoir la valeur de l'angle de contact égale à l'angle de Young.*

Il reste donc dans l'égalité précédente :

$$\begin{aligned}
&\int_0^{z^*}\left[-\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right)+\sqrt{1+f'^2(z)}\right]u_r(f(z),z)dz\\
&\qquad\qquad-\int_0^{z^*}\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right)u_z(f(z),z)dz\\
&+\frac{\delta}{2}\int_0^{z^*}\varepsilon||\nabla\varphi^\omega(f(z),z)||^2\left(f'(z)u_z-u_r\right)f(z)dz=-\lambda\int_0^{z^*}f(z)(f'(z)u_z-u_r)dz
\end{aligned}$$

En choisissant $u_z\equiv 0$, on en déduit que $\forall u_r\in\mathcal{C}^\infty(\bar{\omega},\mathbb{R})$:

$$\begin{aligned}
&\int_0^{z^*}\left[-\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right)+\sqrt{1+f'^2(z)}\right]u_r(f(z),z)dz\\
&\qquad-\frac{\delta}{2}\int_0^{z^*}\varepsilon||\nabla\varphi^\omega(f(z),z)||^2f(z)u_r(f(z),z)dz=\lambda\int_0^{z^*}f(z)u_r(f(z),z)dz
\end{aligned}$$

D'où $\forall z \in]0, z^*[$,

$$\boxed{\frac{d}{dz}\left(\frac{f(z)f'(z)}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right) - \sqrt{1+f'^2(z)} + \frac{\delta}{2}\varepsilon_G||\nabla\varphi^{\omega^f}(f(z),z)||^2 f(z) = -\lambda f(z)} \tag{4.37}$$

Remarque 4.4.4 *En prenant $u_r \equiv 0$ et u_z non identiquement nulle, on obtient la même équation*

Remarque 4.4.5 *En développant l'équation (4.37), on retrouve la forme de l'équation (4.6) trouvée dans la section précédente. Cependant la méthode exposée dans cette section possède plusieurs avantages. La forme de l'équation trouvée est en effet plus explicite. Dans le second membre de (4.6), il apparaît le terme $\frac{P_{int}-P_{ext}}{\sigma_{LG}}$ (correspondant à un facteur multiplicateur près aux forces de pression atmosphériques). Ce terme trouve son analogue dans l'équation (4.37) en le terme λ qui est le multiplicateur de Lagrange associé au point selle considéré : cette deuxième forme est donc calculable pour le problème que l'on étudie.*

Grâce à cette équation, nous allons pouvoir expliciter le modèle utilisé par la suite.

4.5 Ecriture du modèle continu

En reprenant l'idée de la fin du chapitre précédent, nous cherchons donc un modèle qui rende compte du phénomène microscopique qui se déroule au voisinage du point triple.

Nous avons pu établir par des voies aussi bien physiques que mathématiques une équation locale vérifiée par la forme de goutte optimale à potentiel et volume donné.

L'idée du nouveau modèle que nous allons décrire dans cette section est un couplage entre l'approximation globale (donnée par la forme convergée de l'algorithme d'Uzawa) et l'équation (4.37). On considérera que la courbe convergée issue de l'algorithme d'Uzawa est une bonne approximation macroscopique, mais qu'il faut la corriger au voisinage du point triple. Cette correction va s'effectuer avec l'aide de l'équation (4.37) qui contrairement au modèle macroscopique possède l'avantage d'être ponctuelle et donc de pouvoir "zoomer" au niveau du point triple.

4.5.1 Résumé

Les équations trouvées dans les paragraphes 4.3 et 4.4 précédents contiennent les mêmes informations, à ceci près que la méthode d'obtention par la condition

nécessaire d'optimalité est plus adaptée aux notations de notre problème, dans la mesure où λ équivaut à se donner le terme de pression $P_{int} - P_{ext}$.

Nous travaillerons donc avec l'équation (4.37). Elle fait apparaître la norme (pour le produit scalaire) de $\nabla\varphi^{\omega^f}$ sur le bord γ^f_{LG}.

On pose $\eta := \dfrac{\varepsilon_G\delta}{2}$ où on rappelle que $\delta = \dfrac{1}{\sigma_{LG}L^*}$ avec L^* constante d'adimensionnement du problème.

Si ω est solution du problème d'optimisation sous contrainte de volume, et si f (vérifiant l'hypothèse 4.3.2) est telle que $\omega^f = \omega$ alors :

$$\begin{cases} \varphi^{\omega^f} \text{ solution de } (\mathcal{F}v)_{\omega^f}. \\ et \\ \left(\dfrac{ff'}{\sqrt{1+f'^2(z)}}\right)' - \sqrt{1+f'^2(z)} + f(z)\eta||\nabla\varphi^{\omega^f}(f(z),z)||^2 = -\lambda f(z) \quad \forall z \in]0,z^*[\end{cases}$$

Remarque 4.5.1 -*On remarque que l'on peut aussi définir cette équation différentielle ordinaire pour presque tout z si on affaiblit l'hypothèse 4.3.2, en remplaçant l'hypothèse f deux fois dérivable par f'' existe presque partout sur* $[0,z^*]$. *L'équation (4.37) sera alors vérifiée presque partout.*

Avant de décrire le modèle local nous introduisons des notations et définitions pour cette section.

4.5.2 Notations et définitions

On notera pour a et b deux réels

$$\mathcal{W}(a,b) := \left\{f \in \mathcal{C}^0([a,b]),\ \text{telle que } f \in \mathcal{C}^1(]a,b]) \text{ et } f'' \text{ existe p.p. sur } [a,b]\right\}$$

Changement de variable On pose $t = z^* - z$.

On considérera f comme une fonction de la variable t. Pour des raisons de concordance des notations, on posera $T^* := z^*$.

f paramétrant un domaine ω^f sera alors exprimée en la variable t sur $[0,T^*]$, ce qui va permettre de travailler sur l'équation différentielle avec des "temps" croissants (voir figure 4.6).

Remarque 4.5.2 *Vu les formes de gouttes, nous pouvons supposer que f est strictement positive sur* $]0,T^*]$.

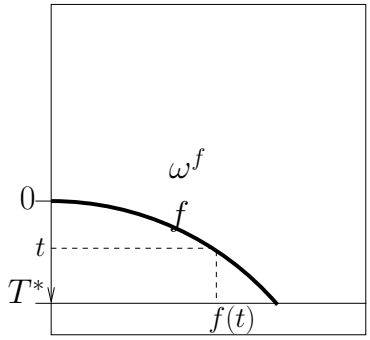


FIG. 4.6 – Paramétrage du domaine

Définition 4.5.3 *Soit $t^0 > 0$ et f^0 une fonction de $\mathcal{W}(0, T^*)$. On dira que f est solution du* ***problème couplé*** *$(\mathcal{PC}_{t^0}^{f^0})$ si :*

φ^{ω^f} solution de $(\mathcal{F}v)_{\omega^f}$ et f toujours strictement positive est solution de

$$\begin{cases} f''(t) = \dfrac{1 + f'^2(t)}{f(t)} - (1 + f'^2(t))^{\frac{3}{2}}(\eta||\nabla\varphi^{\omega^f}(f(t), T^* - t)||^2 + \lambda), \quad \text{p.p. } t \text{ dans } [t^0, T^*] \\ f(t^0) = f^0(t^0) \\ f'(t^0) = f^{0'}(t^0) \\ \text{et } f_{/[0,t^0]} = f^0 \end{cases} \tag{4.38}$$

ω^f est le domaine 2D associé qui est bien défini car f est $\mathcal{C}^1$ sur $]0, T^*]$.

Définition 4.5.4 *f une fonction de $\mathcal{W}(0, T^*)$ est solution du* ***problème complet*** *$\mathcal{P}_{t^0}^{f^0}$ si :*

$$\begin{cases} (1) & f \text{ solution du problème couplé } \mathcal{PC}_{t^0}^{f^0} \\ (2) & \omega^f \text{ associé vérifie la contrainte de volume} \end{cases}$$

4.5.3 Principe

Soit ϕ_0 potentiel donné et *vol* un volume donné. On suppose que l'on dispose d'un domaine ω^0 (et λ multiplicateur de Lagrange associé) donnant une approximation globale de la forme de goutte. Typiquement, ω^0 sera donné par l'approximation globale du chapitre 3.

On représentera ω^0 par f^0 définie sur $I := [0, T^*]$, avec $T^* > 0$.

Idée : On considère que cette forme de goutte est une bonne approximation jusqu'à un certain $t^0 > 0$ (à préciser ultérieurement). Cela signifie que l'on consi-

dère que macroscopiquement ω^0 est une bonne approximation de la forme de goutte. Au delà de t^0 nous allons "brancher" le modèle équation différentielle donné par (4.37) pour corriger localement la forme de goutte.

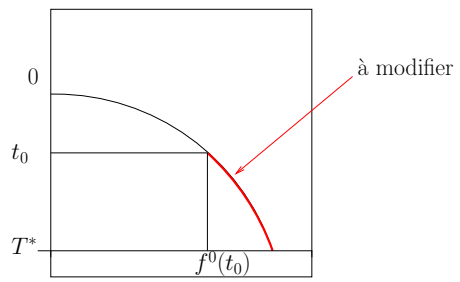


FIG. 4.7 – Principe

Pour $f^0 \in \mathcal{W}(0, T^*)$ et t^0 donnés, on cherche donc f solution du **problème complet** $\mathcal{P}_{t^0}^{f^0}$

Remarque 4.5.5 *Résoudre le problème complet implique de résoudre à la fois l'équation aux dérivées partielles donnant le potentiel sur γ_{LG}^f, mais aussi l'équation différentielle ordinaire qui apparaît en (1).*

Le second membre de cette équation est non seulement non linéaire mais fait apparaître la norme du gradient du potentiel sur le bord liquide-gaz. Si l'on se réfère à l'étude du chapitre 2, on sait que la fonction qui apparaît dans le second membre de l'équation différentielle est dans $L^1(I)$. Il faut donner un sens à ces solutions. C'est pourquoi nous allons introduire quelques notions sur les équations différentielles à second membre discontinu dont nous aurons besoin par la suite.

4.6 Aspects théoriques sur les équations différentielles ordinaires : Les solutions au sens de Carathéodory

L'équation différentielle ordinaire précédente est du second ordre. Sa particularité, en plus du second membre qui dépend d'une équation aux dérivées partielles, est d'avoir un second membre intégrable. Plus précisément, ici le second membre de l'équation est intégrable sur un intervalle (l'intervalle où est définie l'interface γ_{LG}^f).

Nous introduisons une notion de solution au sens de Carathéodory. Les démonstrations des résultats de ce paragraphe pourront être trouvées par exemple dans [Son98](en annexe du livre), [Fil85], [Car68].

Soit $n \in \mathbb{N}$. On considère l'équation différentielle ordinaire donnée par :

$$x'(t) = f(t, x(t)) \quad (E)$$

On supposera que

$$f : I \times U \to \mathbb{R}^n$$

- est une fonction vectorielle, I un intervalle de $\mathbb{R}$ et U un ouvert de $\mathbb{R}^n$.
- (H1) : $f(., x) : I \to \mathbb{R}^n$ est mesurable pour tout x fixé dans U.
- (H2) : $f(t, .) : U \to \mathbb{R}^n$ est continue pour tout t fixé dans I

On cherche à donner un sens à des solutions de (E).

4.6.1 Définition des solutions

On définit la notion de solution pour une telle équation différentielle.

Définition 4.6.1 *Soit J un intervalle de $\mathbb{R}$ tel que $J \subseteq I$. Soit t^0 un point de J et x^0 un point de U, alors $x : J \to U$ est une solution de (E) si x est une fonction absolument continue telle que l'on ait*

$$x(t) = x^0 + \int_{t^0}^{t} f(v, x(v))dv$$

pour tout t dans J.

Ces solutions sont appelées solutions au sens de Carathéodory.

4.6.2 Théorème d'existence et d'unicité

En établissant un lemme de Gronwall, on peut montrer le théorème suivant :

Théorème 4.6.1 *Supposons que $f : I \times U \to \mathbb{R}^n$ satisfait les conditions suivantes*

- *(H1) et (H2), où U est un ouvert de $\mathbb{R}^n$ et I est un intervalle de $\mathbb{R}$.*
- *(C1) f est localement lipschitz en x, i.e. pour tout x^0 dans U, il existe un nombre réel ρ strictement positif et un fonction localement intégrable : $\alpha : I \to \mathbb{R}^+$ telle que la boule $\mathcal{B}_\rho(x^0)$ de rayon ρ et de centre x^0 est contenue dans U et*

$$||f(t, x) - f(t, y)|| \leq \alpha(t)||x - y||$$

pour tout t dans I et (x, y) dans $\mathcal{B}_\rho(x^0) \times \mathcal{B}_\rho(x^0)$.

- *(C2) f est localement intégrable en t, i.e. pour tout x^0 fixé, il existe une fonction localement intégrable $\beta : I \to \mathbb{R}^+$ telle que :*

$$||f(t, x^0)|| \leq \beta(t)$$

pour presque tout t dans I.

Alors pour tout couple (t^0, x^0) dans $I \times U$, il existe un intervalle $J \subseteq I$ ouvert dans I et il existe une solution x de (E) sur J, avec la propriété suivante : Si $y : J' \to U$ est une autre solution de (E), où $J' \subseteq I$, alors nécessairement :

$$J' \subseteq J \text{ et } y = x \text{ sur } J'$$

La solution x est appelée la solution maximale du problème avec conditions initiales sur l'intervalle I.

De plus on dispose de la

Proposition 4.6.2 *Si la solution de l'équation différentielle reste dans un compact sur l'intervalle J tout entier alors la solution est définie pour tout temps t dans I.*

Elle nous permet de prolonger les solutions de l'équation différentielle.

Une fois ce cadre posé, nous pouvons expliciter l'algorithme que nous allons utiliser en vue de calculer numériquement la solution f.

4.7 Algorithme

A potentiel et volume donné, on considère que l'algorithme d'optimisation de forme donne une bonne approximation de la forme globale de la goutte. Soit donc ω^0 et f^0 associés la forme issue de l'algorithme d'optimisation de forme. On dispose également du multiplicateur de Lagrange λ associé à cette forme.

4.7.1 Choix pour l'algorithme

Nous avons vu qu'il faut choisir $t^0 > 0$ au delà duquel on cherche une solution de $\mathcal{P}_{t^0}^{f^0}$. Vu la définition, c'est choisir à partir de quel "moment" la goutte ne représente pas correctement la goutte optimale.

Ce modèle ayant pour but une correction locale de la forme de goutte obtenue numériquement par l'approximation globale, on peut donc supposer que t^0 pourra sûrement être choisi proche de la ligne de mouillage.

Mais nous préciserons le choix de t^0 "en pratique" lors de la mise en oeuvre numérique au chapitre 5. Il s'agit ensuite de décrire un algorithme de résolution de l'équation différentielle donnée par (4.37).

On oubliera la contrainte de volume (i.e. on observe le problème couplé $\mathcal{PC}_{t^0}^{f^0}$) et il faudra en pratique s'assurer a posteriori que celle-ci est bien vérifiée. Comme nous raisonnons par conditions nécessaires, il nous faudra aussi vérifier que l'énergie est diminuée. Nous le vérifierons numériquement au chapitre 5.

4.7.2 Algorithme de résolution

Exposons le principe général de l'algorithme choisi pour résoudre l'équation différentielle.

- Initialisation : f^0 donnée sur $[0, T^*]$, $t^0 \in]0, T^*[$ donné, λ donné. On pose $f_0 := f^0$.
- **Itération** : $n \geq 0$. f_n donnée sur $[0, T^*]$. f_{n+1} est la solution du problème $(\mathcal{P}_n)$, où

$$(\mathcal{P}_n) \begin{cases} f''_{n+1} = \dfrac{1 + f'^2_{n+1}}{f_{n+1}} - (1 + f'^2_{n+1})^{\frac{3}{2}}(\eta ||\nabla \varphi^{\omega^{f_n}}(f_n(.), T^* - .)||^2 + \lambda) \text{ p.p. sur } [t^0, T^*] \\ f_{n+1}(t^0) = f^0(t^0) \\ f'_{n+1}(t^0) = (f^0)'(t^0) \\ \text{ et } (f_{n+1})_{/[0,t^0]} = (f^0)_{/[0,t^0]} \end{cases}$$

La figure 4.8 présente de façon schématique cet algorithme.
On notera (E_n) la partie équation différentielle du problème $\mathcal{P}_n$ i.e.

$$(E_n) \begin{cases} f''_{n+1} = \dfrac{1 + f'^2_{n+1}}{f_{n+1}} - (1 + f'^2_{n+1})^{\frac{3}{2}}(\eta ||\nabla \varphi^{\omega^{f_n}}(f_n(.), T^* - .)||^2 + \lambda) \text{ p.p. sur } [t^0, T^*] \\ f_{n+1}(t^0) = f^0(t^0) \\ f'_{n+1}(t^0) = (f^0)'(t^0) \end{cases}$$

Nous allons étudier la constructibilité de l'algorithme. Pour cela il nous faut étudier le problème $(\mathcal{P}_n)$ et donc l'équation différentielle (E_n) à l'étape n pour $n \in \mathbb{N}$.

Supposons que T^*, f^0 et t^0 sont donnés par l'étape d'**initialisation**.

Pour $n \in \mathbb{N}$, on note $\mathcal{Q}_n$ la propriété :

f_n est bien définie de façon unique sur $[0, T^*]$

Prouver la constructibilité de l'algorithme revient à montrer que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \mathcal{Q}_n \text{ est vraie.}$$

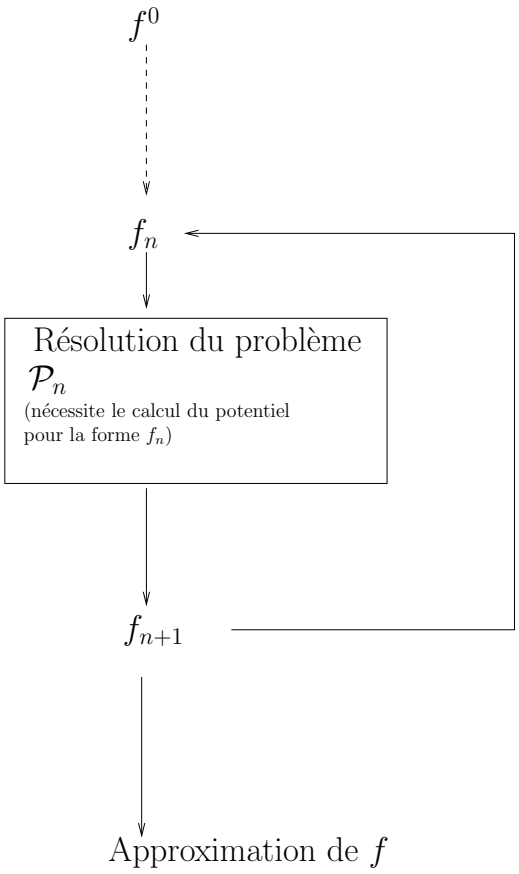


FIG. 4.8 – Principe de l'algorithme

Initialisation $\mathcal{Q}_0$ est vraie par donnée de f^0, t^0.

Il reste donc à montrer la propriété d'hérédité. La section suivante est consacrée à cette étude.

4.7.3 Etude de la constructibilité de l'algorithme

Dans cette section on supposera donc f^0, t^0 donnés comme dans la section précédente. On fixe également $n \in \mathbb{N}$ et on suppose que $\mathcal{Q}_n$ est vraie. On souhaite montrer que $\mathcal{Q}_{n+1}$ est vraie. Nous allons voir que nous obtiendrons cette propriété moyennant certaines hypothèses que nous serons en mesure de tester numériquement.

Grâce à $\mathcal{Q}_n$ on peut définir

$$S_n(t) := \eta||\nabla\varphi^{\omega^{f_n}}(f_n(t), T^* - t)||^2 + \lambda$$

S_n est positive et intégrable sur $[0, T^*]$ et dans la suite, on fera l'hypothèse :

Hypothèse 4.7.1 *S_n est une fonction définie sur $[0, T^*[$ continûment dérivable sur $]0, T^*[$ et croissante.*

Remarque 4.7.2 *On sait déjà que S_n est $\mathcal{C}^1$ sur $[0, T^*[$ par régularité de la solution φ^ω sur tout domaine ne contenant pas le point triple. De plus, connaissant la forme de la singularité de φ^ω, l'hypothèse de croissance est tout à fait acceptable.*

Nous savons déjà définir f_{n+1} sur $[0, t^0]$, car c'est la restriction de f^0 sur $[0, t^0]$. Reste donc à étudier l'équation différentielle (E_n) sur $[t^0, T^*]$.

4.7.3.1 Réécriture de (E_n)

Nous allons réécrire (E_n) sous la forme d'une équation différentielle vectorielle en dimension 2. Dans ce paragraphe, par mesure de clarté, nous adoptons une notation indépendante de n pour la fonction f_{n+1} recherchée.

On identifie f_{n+1} avec une fonction ξ et f'_{n+1} avec une fonction ζ. Si $\dot{\xi}$ et $\dot{\zeta}$ désignent les dérivées par rapport à t des fonctions ξ et ζ, on peut réécrire l'équation différentielle (E_n) sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{\xi}(t) = \zeta(t) \\ \dot{\zeta}(t) = \dfrac{1+\zeta^2(t)}{\xi(t)} - (1+\zeta^2(t))^{\frac{3}{2}} S_n(t) \\ \xi(t^0) = f^0(t^0) =: \xi^0 \\ \zeta(t^0) = (f^0)'(t^0) =: \zeta^0 \end{cases}$$

Puis en posant $X(t) = \begin{pmatrix} \xi(t) \\ \zeta(t) \end{pmatrix}$, on peut réécrire l'équation de façon vectorielle :

$$(\tilde{E}_n) \begin{cases} \dot{X}(t) = F_n(t, X(t)) \\ X(t^0) = X^0 \end{cases}$$

où $X^0 = \begin{pmatrix} \xi^0 \\ \zeta^0 \end{pmatrix}$ et $F_n(t, X) = \begin{pmatrix} \zeta \\ \frac{1+\zeta^2(t)}{\xi(t)} - (1+\zeta^2(t))^{\frac{3}{2}} S_n(t) \end{pmatrix}$ si $X = (\xi, \zeta)$.

Au fur et à mesure de cette section, chaque résultat obtenu sur les solutions de $(\tilde{E}_n)$ trouvera son analogue pour les solutions de (E_n).

4.7.3.2 Existence et unicité locale des solutions de $(\tilde{E}_n)$

Le second membre de l'équation différentielle est donné par la norme du gradient du potentiel (associé à la forme f_n) sur le bord. Nous allons définir grâce au paragraphe précédent les solutions de cette équation différentielle au sens de Carathéodory.

Remarque 4.7.3 *Connaissant la régularité de φ^ω, nous aurions pu aussi utiliser la théorie classique de Cauchy. Mais il nous a paru intéressant d'introduire cette notion de solution au sens de Carathéodory car elle ne demande pas plus de travail, est plus systématique et pourrait constituer une première étape (quitte à la généraliser à une notion de solution au sens de Filippov) pour une éventuelle étude complète du problème $\mathcal{P}_{t^0}^{f^0}$.*

Soit $\chi =]0, +\infty[\times\mathbb{R}$.
On définit F_n sur $I \times \chi$, où on rappelle que I est l'intervalle $[0, T^*]$.

$1^{\text{ière}}$ **étape** : On vérifie les hypothèses (H1) et (H2) du paragraphe 4.6 page 129.

F_n est mesurable en la variable t par propriété de S_n : *(H1) est vérifiée.*

F_n est $\mathcal{C}^1$ en la variable x sur χ : *(H2) est vérifiée.*

$2^{\text{ième}}$ **étape** : On vérifie les hypothèses (C1) et (C2) du théorème d'existence et unicité locale 4.6.1 page 130.

(C1) : Les fonctions de la seule variable x sont localement lipschitziennes en x. Vu la forme de F_n on en déduit donc que

$$||F_n(t, x_1) - F_n(t, x_2)|| \leq \alpha(t)||x_1 - x_2||$$

où $\alpha(t) = C_1^0 + C_2^0 S_n(t)$ est localement intégrable.

(C2) : Soit $x_0 \in \chi$ fixé. On pose $x_0 = (\xi_0, \zeta_0)$. On a alors :

$$||F(t, x_0)|| = (\zeta_0^2 + (\frac{1+\zeta_0^2}{\xi_0} - (1+\zeta_0^2)^{\frac{3}{2}} S_n(t))^2)^{\frac{1}{2}} \leq \underbrace{|\zeta_0| + \left|\frac{1+\zeta_0^2}{\xi_0}\right| + (1+\zeta_0^2)^{\frac{3}{2}} S_n(t)}_{=:\beta(t) \text{ p.p. en t}}$$

$\beta : I \to \mathbb{R}$ est localement intégrable.

Les hypothèses (H1), (H2), et conditions (C1), (C2) sont vérifiées. On peut donc appliquer le théorème 4.6.1, et on obtient l'existence et l'unicité locale à l'équation différentielle $(\tilde{E}_n)$.

Conclusion :
Il existe une unique solution maximale $X = (\xi, \zeta)$ de $(\tilde{E}_n)$, absolument continue définie sur un intervalle $J \subseteq I$ avec J ouvert dans I à valeurs dans $]0, +\infty[\times\mathbb{R}$.

On sait même que ξ est $\mathcal{C}^2$ sur $\overset{\circ}{J}$ vu l'hypothèse 4.7.1.

Résumé En revenant aux notations en dimension 1 et au problème $(\mathcal{P}_n)$, on en déduit la

Proposition 4.7.4 *Il existe $J_{n+1} \subseteq I$ et f_{n+1} une fonction absolument continue, de dérivée absolument continue sur $[0, t^0] \cup J_{n+1}$, telle que f_{n+1} soit la solution maximale de (E_n) sur J_{n+1} et coïncide avec f^0 sur $[0, t^0]$. f_{n+1} est de plus $\mathcal{C}^2$ sur $\overset{\circ}{J}_{n+1}$.*

La proposition 4.7.4 montre une partie de la propriété $\mathcal{Q}_n$. Il reste à étudier si la solution f_{n+1} est définie sur tout I. Nous allons commencer par étudier la concavité de la solution de l'équation différentielle.

4.7.3.3 Concavité de la solution

Revenons aux notations en dimension 2, i.e. on considère $X = (\xi, \zeta)$ la solution maximale de l'équation différentielle $(\tilde{E}_n)$ définie sur $J \subseteq I$.

On pose : $\beta^0 := \dfrac{\zeta(t^0)}{\sqrt{1 + (\zeta(t^0))^2}}$

Nous souhaitons montrer que

$$\forall t \in J, \quad \dot{\zeta}(t) \leq 0.$$

On supposera que les inégalités suivantes sont valables en t^0 :

$$\xi(t^0) > 0 \tag{4.39}$$

$$\zeta(t^0) > 0 \tag{4.40}$$

$$\frac{1}{\xi(t^0)\sqrt{1 + \zeta^2(t^0)}} - \lambda < 0 \tag{4.41}$$

et

$$\begin{cases} \text{soit } \dfrac{T^* - t^0}{\xi(t^0)\sqrt{1 + \zeta(t^0)^2}} - \beta^0 < 0 & (4.42) \\ \text{soit } \dfrac{2}{\xi(t^0)\sqrt{1 + \zeta^2(t^0)}} - \lambda < 0 & (4.43) \end{cases}$$

On note :

$$\begin{array}{rccc} v: & J & \to & \mathbb{R} \\ & t & \mapsto & \frac{1}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta^2(t)}} \end{array}$$

et

$$u = 2v - S_n.$$

u et v sont dérivables.

Nous allons montrer la :

Proposition 4.7.5 *Sous les hypothèses (4.39), (4.40), (4.41), (4.43), la fonction ξ est concave.*

Démonstration : Vu les équations différentielles vérifiées par ξ et ζ, on a :

$$\begin{aligned} v'(t) = \left(\frac{1}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta^2(t)}}\right)' &= -\frac{\zeta(t)}{\xi(t)}\left[\frac{1}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta^2(t)}} + \frac{\dot{\zeta}}{(1+\zeta(t))^{\frac{3}{2}}}\right] && (4.44) \\ &= -\frac{\zeta(t)}{\xi(t)}\left[\frac{2}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta^2(t)}} - S_n(t)\right] && (4.45) \\ &= -\frac{\zeta(t)}{\xi(t)}u(t) && (4.46) \end{aligned}$$

De l'hypothèse (4.41) et comme $S_n > \lambda$, on déduit :

$$\dot{\zeta}(t^0) < 0$$

Il existe donc un voisinage de t^0 dans lequel $\dot{\zeta} \leq 0$.

Supposons que la fonction ξ ne soit pas concave.

Notons alors t^* le premier instant où il existe $t^1 \in [t^0, T^*] \cap J$ tel que $\dot{\zeta}(t^*)$ s'annule et $\dot{\zeta}(t) > 0$ pour tout t dans $]t^*, t^1]$.

Il faut alors étudier deux cas :

1^{ier} cas : *En t^*, $\zeta(t^*) \geq 0$.*

Dans ce cas comme ζ et $\dot{\zeta}$ sont positives sur $[t^*, t^1]$, alors par (4.44), v est une fonction décroissante sur $[t^*, t^1]$.

Et donc

$$\forall t \in [t^*, t^1], \quad \frac{1}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta^2(t)}} \leq \underbrace{\frac{1}{\xi(t^*)\sqrt{1+\zeta^2(t^*)}} = S_n(t^*)}_{\substack{\uparrow \\ \text{car } \dot{\zeta}(t^*)=0}} \overset{\substack{\text{car } S_n \nearrow \\ \downarrow}}{\leq} S_n(t)$$

Ce qui implique $\dot{\zeta}(t) \leq 0, \quad \forall t \in [t^*, t^1]$ et contredit $\dot{\zeta}(t) > 0 \ \forall t \in]t^*, t^1]$.

$2^{\text{ième}}$ **cas :** *En t^*, $\zeta(t^*) < 0$.*
Ceci signifie qu'il existe $\tilde{t} \in [t^0, t^*]$ tel que $\zeta(\tilde{t}) = 0$.
Plusieurs cas peuvent alors se présenter :

(i) Soit $u(\tilde{t}) > 0$.
Dans ce cas

- Soit

$$\exists \tilde{t}^1 \in [t^0, \tilde{t}[\text{ tel que } u(\tilde{t}^1) = 0 \text{ et } u(t) > 0, \ \forall t \in [\tilde{t}^1, \tilde{t}].$$

v est donc une fonction décroissante sur $[\tilde{t}^1, \tilde{t}]$ d'après (4.46).

Remarque 4.7.6 *Ceci est le cas si c'est l'inégalité*

$$\frac{2}{\xi(t^0)\sqrt{1+\zeta^2(t^0)}} - \lambda < 0$$

qui est vérifiée.

Ce qui donne :

$$S_n(\tilde{t}) < 2v(\tilde{t}) < 2v(\tilde{t}^1) = S_n(\tilde{t}^1)$$

et contredit l'hypothèse de croissance de S_n.

- Soit u ne s'annule pas et donc $u > 0$ sur tout $[t^0, \tilde{t}]$.
On déduit donc de (4.46) que v est décroissante sur $[t^0, \tilde{t}]$.
De l'équation différentielle donnant $\dot{\zeta}$, on tire :

$$\frac{\zeta(t)}{\sqrt{1+\zeta(t)^2}} - \beta^0 \quad = \quad \int_{t^0}^{t} \frac{dt}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta(t)^2}} - \int_{t^0}^{t} S_n(t)dt \quad (4.47)$$

Et donc puisque $\zeta(\tilde{t}) = 0$ il vient :

$$0 = \beta^0 + \int_{t^0}^{\tilde{t}} \frac{dt}{\xi(t)\sqrt{1+\zeta(t)^2}} - \int_{t^0}^{\tilde{t}} S_n(t)dt = \beta^0 + \int_{t^0}^{\tilde{t}} v(t)dt - \int_{t^0}^{\tilde{t}} S_n(t)dt$$

Comme v et $-S_n$ sont décroissantes on déduit que :

$$\beta^0 + (\tilde{t} - t^0)\left(v(\tilde{t}) - S_n(\tilde{t})\right) \leq 0 \qquad (4.48)$$

Comme

$$u(\tilde{t}) = 2v(\tilde{t}) - S_n(\tilde{t})$$

De (4.48), on déduit :

$$u(\tilde{t}) \leq v(\tilde{t}) - \frac{\beta^0}{\tilde{t} - t^0} \tag{4.49}$$

Comme v est décroissante sur $[t^0, \tilde{t}]$, et grâce à (4.43) on a :

$$u(\tilde{t}) \leq v(t^0) - \frac{\beta^0}{T^* - t^0} < 0$$

Ce qui contredit l'hypothèse de (i).

(ii) Soit $u(\tilde{t}) < 0$.
Dans ce cas $\exists \tilde{t}^1 \in]\tilde{t}, t^*]$ tel que $u(t) < 0,\ \forall t \in]\tilde{t}, \tilde{t}^1]$.
v est donc une fonction décroissante sur $]\tilde{t}, \tilde{t}^1]$.

Nous allons en déduire que u est alors négative sur tout $]\tilde{t}, t^*]$.

Supposons qu'il existe $\tilde{t}^2 \in [\tilde{t}, t^*]$ tel que $u(\tilde{t}^2) = 0$ (on choisit $\tilde{t}^2$ le plus petit de ces instants).
On a donc

$$S_n(\tilde{t}) > 2v(\tilde{t}) > 2v(\tilde{t}^2) = S_n(\tilde{t}^2)$$

Contradiction avec l'hypothèse de croissance de S_n.

Donc u est strictement négative sur tout $[\tilde{t}, t^*]$:
Contradiction avec $\dot{\zeta}(t^*) = 0$.

(iii) Soit $u(\tilde{t}) = 0$.
Comme $u'(t) = -2\frac{\zeta(t)}{\xi(t)}u(t) - S_n'(t)$, alors $u'(\tilde{t}) = -S_n'(\tilde{t}) < 0$
Et donc, u devient négative pour $t > \tilde{t}$ dans un voisinage de $\tilde{t}$. On peut alors réappliquer le raisonnement du cas précédent pour en déduire que $\dot{\zeta}(t^*) < 0$: **Contradiction**.

On en déduit donc que la fonction $\dot{\zeta}$ est négative sur tout l'intervalle d'existence de la solution.
La solution est donc concave.

■

Supposons maintenant que les inégalités (4.39), (4.41) ainsi que les inégalités suivantes :

$$\zeta(t^0) < 0 \tag{4.50}$$

et

$$\frac{2}{\xi(t^0)\sqrt{1 + \zeta(t^0)^2}} - \lambda < 0 \tag{4.51}$$

sont vérifiées. On peut également montrer la :

Proposition 4.7.7 *Si les inégalités (4.39), (4.41), (4.50), (4.51) sont vérifiées, alors ξ est concave.*

Démonstration : Par (4.51), $u(t^0) < 0$. On se retrouve donc dans la même situation que (b)(ii) de la démonstration de la proposition 4.7.5. On en déduit donc le résultat.

■

Dans la suite on fera l'hypothèse suivante

Hypothèse 4.7.8 *Soit les inégalités (4.39), (4.40), (4.41), (4.43) sont vérifiées, soit les inégalités (4.39), (4.50), (4.41), (4.51) sont vérifiées.*

4.7.3.4 Temps maximal d'existence de la solution de $(\tilde{E}_n)$

On cherche à savoir si $X = (\xi, \zeta)$ est globale, i.e. si $J = I \cap [t^0, +\infty[$.
Dans la suite on notera :

- g la fonction définie par

$$g : \begin{array}{ccc} \mathbb{R} & \to &]-1,1[\\ x & \mapsto & \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \end{array}$$

- $\hat{m} = \beta^0 - \int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt$

  Puis si $\hat{m} > -1$,

- $m := g^{-1}\left(\beta^0 - \int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt\right)$
- $\tilde{m} = \min(\xi^0, m(T^* - t^0) + \xi^0)$

Remarque 4.7.9 *Jusqu'à présent nous n'imposons pas de conditions sur t^0 et celui-ci est fixé de façon arbitraire. Cependant, il ne faut pas perdre de vue que les quantités définies ci-dessus dépendent de t^0.*

Nous allons montrer la

Proposition 4.7.10 *Sous l'hypothèse 4.7.8, si $\hat{m} > -1$ et $\tilde{m} > 0$, alors la solution maximale X de l'équation différentielle $(\tilde{E}_n)$ est définie sur tout $I \cap [t^0, +\infty[$.*

Démonstration : On sait par la proposition 4.6.2 page 131 que si la solution reste dans un compact pour tout temps alors la fonction est définie pour tout $t > t^0$ où $t \in I$.

Etablissons donc des bornes sur X la solution maximale de $(\tilde{E}_n)$ définie sur l'intervalle $J \subseteq I$.

De ce qui précède, la concavité de ξ assure une **majoration** de ζ et ξ.

Reste donc à établir une **minoration de la solution**.

On a

$$\dot{\zeta}(t) \geq -(1+\zeta^2)^{\frac{3}{2}} S_n(t)$$

Donc en intégrant

$$\frac{\zeta(t)}{\sqrt{1+\zeta^2(t)}} \geq \underbrace{\frac{\zeta(t^0)}{\sqrt{1+\zeta^2(t^0)}}}_{=\beta^0} - \int_{t^0}^{t} S_n(t)dt, \quad \forall t \in J$$

Comme $\displaystyle\int_{t^0}^{t} S_n(t)dt \leq \int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt$, on déduit que :

$$\frac{\zeta(t)}{\sqrt{1+\zeta^2(t)}} = g(\zeta(t)) \geq \hat{m} > -1 \tag{4.52}$$

et donc

$$\zeta(t) \geq m > -\infty, \quad \forall t \in J \tag{4.53}$$

On a $\dot{\xi} = \zeta$ sur J intervalle borné inclus dans I, donc

$$\xi(t) \geq \tilde{m} > 0 \quad \forall t \in J \tag{4.54}$$

■

Revenons maintenant à l'équation différentielle (E_n)**.** Nous voulions montrer, en supposant que $\mathcal{Q}_n$ est vraie, que la propriété $\mathcal{Q}_{n+1}$ est vraie, et donc que l'on peut intégrer les solutions de l'équation différentielle (E_n) jusqu'en T^*. On donne les analogues des quantités définies en dimension 2 en intégrant cette fois la dépendance par rapport à n et par rapport à t^0. On note donc :

- $\alpha(t^0) = (f^0)'(t^0), \quad \beta(t^0) = \dfrac{\alpha(t^0)}{\sqrt{1+(\alpha(t^0))^2}}$
- $\hat{m}_n(t^0) = \beta(t^0) - \displaystyle\int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt$

  Puis si $\hat{m}_n(t^0) > -1$,

- $m_n(t^0) = g^{-1}(\hat{m}_n(t^0))$
- $\tilde{m}_n(t^0) = \min(f^0(t^0), m(t^0)(T^* - t^0) + f^0(t^0))$

On fait les hypothèses suivantes :

$$\mathbb{H}_1 : \quad f^0(t^0) > 0 \tag{4.55}$$

$$\mathbb{H}_2 : \quad \frac{1}{f^0(t^0)\sqrt{1+\alpha(t^0)^2}} - \lambda < 0 \tag{4.56}$$

$$\mathbb{H}_3 : \quad \text{Si } \alpha(t^0) > 0, \text{ alors } \begin{cases} \dfrac{T^* - t^0}{f^0(t^0)\sqrt{1+\alpha(t^0)^2}} - \beta(t^0) < 0 & (4.57) \\ \text{ou} & \\ \dfrac{2}{f^0(t^0)\sqrt{1+\alpha(t^0)^2}} - \lambda < 0 & (4.58) \end{cases}$$

$$\mathbb{H}_4 : \quad \text{Si } \alpha(t^0) < 0, \text{ alors } \frac{2}{f^0(t^0)\sqrt{1+\alpha(t^0)^2}} - \lambda < 0 \tag{4.59}$$

$$\mathbb{H}_5 : \quad \hat{m}_n(t^0) > -1 \tag{4.60}$$

$$\mathbb{H}_6 : \quad \tilde{m}_n(t^0) > 0 \tag{4.61}$$

alors par ce qui précède :

Si l'ensemble des hypothèses $\mathbb{H}_i$ pour $i \in [1,6]$ sont vérifiées, alors f_{n+1} est définie sur tout I ($\mathcal{Q}_{n+1}$ est vraie), l'équation différentielle (E_n) est intégrable jusqu'en T^*.

Reste à déterminer le temps initial t^0 Remarquons que les quatre premières hypothèses $\mathbb{H}_i$ pour $i \in [1,4]$ ne dépendent que de t^0. Quant aux deux dernières, $\mathbb{H}_5$ et $\mathbb{H}_6$, elles dépendent à la fois de n et t^0.

Comme f^0 est définie sur tout $[0, T^*]$ et $(f^0)'$ sur $]0, T^*]$, les fonctions ci-dessus, vues comme des fonctions de la variable t^0, sont elles aussi définies sur $]0, T^*]$.

Supposons que, connaissant f^0, il est possible de choisir t^0 pour que les quatre premières hypothèses $\mathbb{H}_1$, $\mathbb{H}_2$, $\mathbb{H}_3$, $\mathbb{H}_4$, soient vérifiées quitte à prendre t^0 proche de T^*.

Comme

$$\lim_{t^0 \to T^*} \hat{m}_n(t^0) > -1, \quad \text{et} \lim_{t^0 \to T^*} \tilde{m}_n(t^0) > 0$$

on sait que l'on peut choisir t_n^0 tel que les hypothèses $\mathbb{H}_5$ et $\mathbb{H}_6$ soient vérifiées.

Le problème de la détermination d'un tel t_n^0 est qu'il dépend de n.

Nous verrons cependant qu'en pratique (chapitre 5) les formes cherchées sont toujours concaves et que le choix de t^0 pour vérifier $\mathbb{H}_1$, $\mathbb{H}_2$, $\mathbb{H}_3$, $\mathbb{H}_4$ permet de vérifier $\mathbb{H}_5$ et $\mathbb{H}_6$ pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Conclusion : Dans la suite nous supposerons que $\mathcal{Q}_n$ est vraie, $\forall n \in \mathbb{N}$ pour un choix judicieux de t^0 et donc que l'algorithme est bien constructible.

Remarque 4.7.11 *Les conditions de constructibilité ne sont bien sûr pas optimales et ne restent que des conditions suffisantes de constructibilité.*

4.7.3.5 Quelques précisions

Nous supposons ici que les solutions f_n sont concaves.

Nous allons tenter de préciser (4.60) et (4.61). On souhaiterait pour cela établir une majoration de $\int_{t^0}^{T^*} S_n$ indépendamment de n ce qui implique de trouver une majoration de $\displaystyle\int_{\gamma_{LG}^{f_n}} ||\nabla \varphi^{\omega_{f_n}}||^2$.

On va tout d'abord établir un résultat de régularité sur les potentiels $\varphi^{\omega^{f_n}}$.

Régularité. $\varphi^n := \varphi^{\omega^{f_n}}$ est solution d'un problème de transmission axisymétrique. On peut la décomposer en une partie régulière et une partie singulière (paragraphe 2.2.3). En observant la partie singulière on déduit que la restriction de φ^n à $\omega_G^{f_n}$ est dans l'espace $H^{\frac{3}{2}+\kappa_n}(\omega_G^{f_n})$, pour un $\kappa_n > 0$ donné par la forme de la partie singulière de la solution.

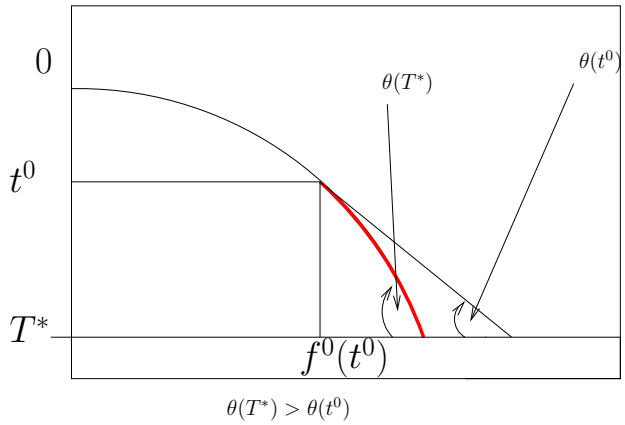


FIG. 4.9 – Régularité de la fonction φ^n

A priori κ_n dépend de n. Cependant, si on a la condition de concavité, on s'assure que la solution aura un angle de contact plus élevé que celui donné par la pente de la tangente en t^0 voir figure 4.9). Toujours par les remarques sur la régularité de la partie singulière du paragraphe 2.12, on déduit qu'il existe $\kappa > 0$ tel que pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\frac{1}{2} > \kappa_n > \kappa > 0$. Et donc

$$\varphi^n \in H^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G^{f_n}) \text{ indépendamment de } n \in \mathbb{N}.$$

En s'aidant de ce résultat nous allons majorer le gradient du potentiel sur l'interface liquide-gaz.

Majoration De [BDM99] page 46, on déduit une majoration de la norme $H^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G^{f_n})$ de φ^n.

Proposition 4.7.12 *Il existe une constante $C(\omega_G^{f_n})$ ne dépendant que du diamètre de $\omega_G^{f_n}$ tel que :*

$$||\varphi^n||_{H^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G^{f_n})} \leq C(\omega_G^{f_n})||R(\phi_0)||_{L^2(\omega_G^{f_n})}$$

où $R(\phi_0)$ est le relèvement de la condition de Dirichlet au bord comme au paragraphe 3.4.4.

On peut choisir $R(\phi_0)$ telle que $||R(\phi_0)||_{L^2(\omega_G^{f_n})} \leq \phi_0 \text{mes}(\omega_G^{f_n})$. Où mes désigne la mesure du domaine 3D axisymétrique obtenu à partir de $\omega_G^{f_n}$. De plus, vu la forme de $\omega_G^{f_n}$ son diamètre est constant.

On conclut alors que la norme $H^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G^{f_n})$ de φ^n est majorée de façon indépendante de la fonction f_n choisie par une constante du type $M\phi_0$ où M est indépendante de n.

De ce résultat on peut en déduire le

Corollaire 4.7.13 *Avec les mêmes notations que précédemment :*

$$\int_0^{T^*} ||\nabla\varphi^n(f_n(t),t)||^2 dt \leq C'(\omega^{f_n})M^2\phi_0^2$$

Démonstration : On sait par [Gri85] que l'application trace des dérivées est prolongeable sur l'espace $H^{\frac{3}{2}+\kappa}(\omega_G^{f_n})$, qu'elle est continue et de norme qui dépend de ω^{f_n}. On en déduit donc que :

$$\int_0^{T^*} ||\nabla\varphi^n(f_n(t),t)||^2 dt \leq ||\nabla\varphi^n||^2_{L^2(\gamma_{LG}^n)} \leq C'(\omega^{f_n})M^2\phi_0^2$$

■

On a donc établi une majoration de S_n.

Nous allons supposer que l'on peut majorer $C'(\omega^{f_n})$ par une constante indépendante de n.

On obtient alors une majoration de $\int_0^{T^*} S_n(t)dt$ de façon indépendante de n :

$$\int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt \leq C + \lambda(T^* - t^0)$$

avec $C > 0$.

En supposant que l'on peut trouver t^0 tel que

$$\beta(t^0) - C - \lambda(T^* - t^0) - 1 > 0$$

et

$$\min(f^0(t^0), f^0(t^0) + (T^* - t^0)g^{-1}(\beta(t^0) - C - \lambda(T^* - t^0))) > 0$$

on en déduit que t^0 peut être choisi de façon indépendante de n pour que l'algorithme soit constructible.

Cette condition suffisante n'est cependant pas pratique car elle dépend de conditions difficilement vérifiables. En particulier la connaissance de M et $C'(\omega^{f_n})$ est théorique.

Pour la partie numérique, on vérifiera que les conditions de constructibilité de l'algorithme sont satisfaites.

4.8 Conclusion

Ce chapitre a permis la mise en place d'un modèle couplant l'approximation globale et une correction locale de la forme de la goutte. La résolution du modèle local nécessite la résolution de l'équation aux dérivées partielles donnant le potentiel à l'extérieur de la goutte simultanément avec la résolution d'une équation différentielle ordinaire. Nous avons alors décrit un algorithme possible pour résoudre ce problème. Des conditions suffisantes de constructibilité ont été extraites. Une étude intéressante reste à mener : la démonstration de la convergence de l'algorithme proposé. Pour traiter ce problème, on pourrait envisager une utilisation des théorèmes de points fixes ainsi que la théorie des équations différentielles à seconds membres discontinus de Filippov [Fil85] (qui généralise la notion de solution au sens de Carathéodory donnée dans ce chapitre).

Chapitre 5

Résultats numériques

Ce chapitre est consacré à l'aspect numérique du modèle décrit dans le chapitre précédent. Après avoir expliqué la mise en oeuvre de l'algorithme, nous vérifierons numériquement que l'algorithme est bien constructible et détaillerons le choix des conditions initiales (section 5.1). Enfin nous présenterons les résultats numériques ainsi que leur analyse et interprétation (section 5.2).

Avant de commencer, précisons que tout au long de ce chapitre, on nommera "approximation globale" l'approximation issue de l'algorithme d'Uzawa du chapitre 3 avec le calcul du potentiel par la méthode du complément singulier (paragraphe 3.4 page 88). L'"approximation locale" désignera l'algorithme décrit au chapitre précédent.

5.1 Mise en oeuvre

5.1.1 Intégration numérique de l'équation différentielle ordinaire

On rappelle l'algorithme de résolution : on se place à potentiel $\phi_0 > 0$ et volume *vol* fixés.

- **Initialisation** : f^0 donnée et définie sur $[0, T^*]$ ($T^* > 0$), $t^0 \in]0, T^*[$ et λ (multiplicateur de Lagrange associé à la forme f^0) donnés.
- **Itération** : f_n donnée sur $[0, T^*]$. f_{n+1} est la solution du problème $(\mathcal{P}_n)$, où

$$(\mathcal{P}_n) \left\{ \begin{array}{l} f''_{n+1} = \dfrac{1 + f'^2_{n+1}}{f_{n+1}} - (1 + f'^2_{n+1})^{\frac{3}{2}} S_n, \text{ p.p. sur } [t^0, T^*] \\ f_{n+1}(t^0) = f^0(t^0) \\ f'_{n+1}(t^0) = (f^0)'(t^0) \\ \text{ et } \ (f_{n+1})_{/[0,t^0]} = (f^0)_{/[0,t^0]} \end{array} \right.$$

avec $S_n(t) = \eta ||\nabla \varphi^{\omega^{f_n}}(f_n(.), T^* - .)||^2 + \lambda$

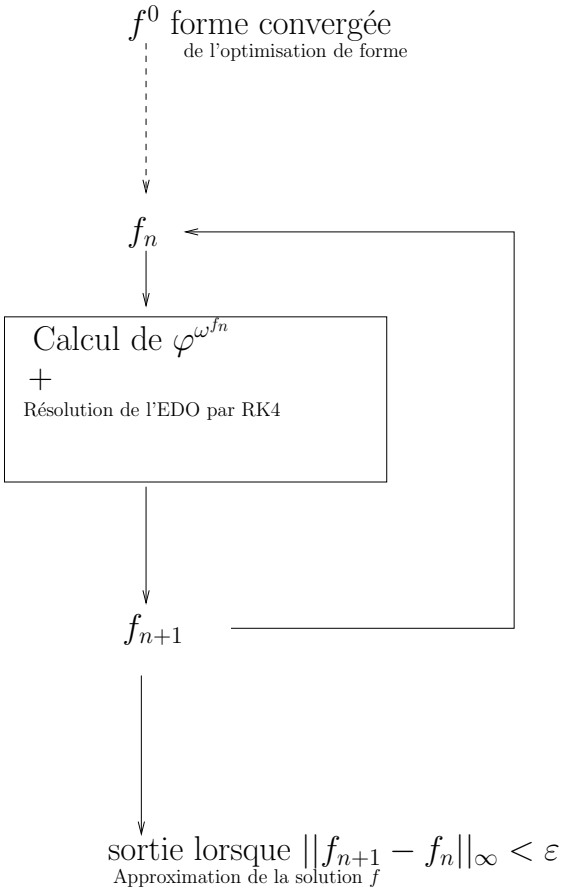


FIG. 5.1 – Résumé du principe de l'algorithme à potentiel ϕ_0 donné

- **Sortie** : Si $||f_{n+1} - f_n||_\infty < \varepsilon ||f^0||_\infty$, pour $\varepsilon > 0$ donné.
  On rappelle que

$$(E_n) \begin{cases} f''_{n+1} = \dfrac{1 + f'^2_{n+1}}{f_{n+1}} - (1 + f'^2_{n+1})^{\frac{3}{2}} S_n, \text{ p.p. sur } [t^0, T^*] \\ f_{n+1}(t^0) = f^0(t^0) \\ f'_{n+1}(t^0) = (f^0)'(t^0) \end{cases}$$

Pour l'étape d'**initialisation**, f^0 est donnée par la forme convergée issue de l'algorithme global à potentiel ϕ^0.

Pour l'étape d'**itération** : $n \in \mathbb{N}$ donné, pour la forme donnée f_n, on calcule le potentiel associé à cette forme à l'aide du module calculant le potentiel dans l'"approximation globale". La singularité est numériquement prise en compte à l'aide de la méthode du complément singulier (cf. paragraphe 3.4 page 88).

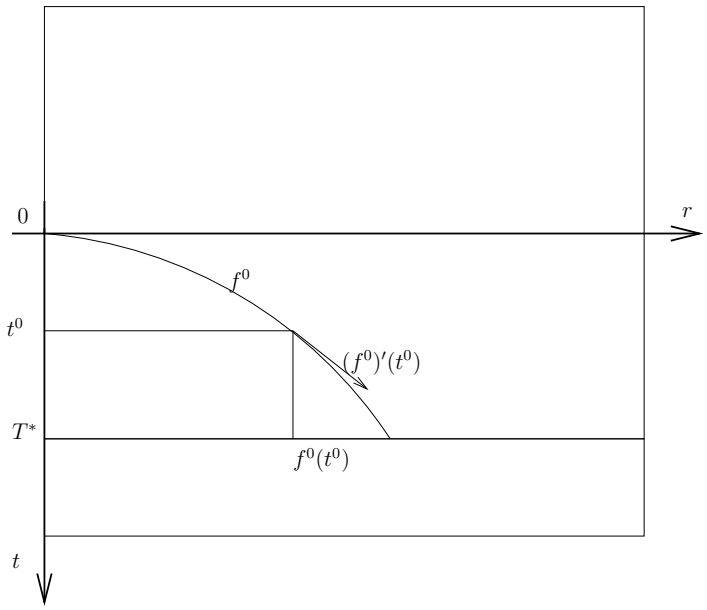


FIG. 5.2 – t^0 donne la taille de la boîte dans laquelle on applique le modèle local.

L'équation différentielle ordinaire est ensuite résolue par une méthode de Runge Kutta d'ordre 4 à pas adaptatif. Le code source de [RK] est utilisé.

La forme de sortie sera la forme obtenue lorsque le critère de **sortie** est vérifié.

On donne un récapitulatif de cet algorithme en figure 5.1.

La résolution est soumise au choix de t^0 qui revient à choisir un point de départ pour brancher le modèle local (cf figure 5.2). On ne calcule la solution de l'équation différentielle (E_n) que dans une boîte de taille $T^* - t^0$.

Mais, indépendamment de ce choix, nous allons tout d'abord vérifier si les conditions de constructibilité de l'algorithme, énoncées au chapitre précédent, peuvent être vérifiées.

Remarque 5.1.1 *f^0 est la courbe issue de l'algorithme d'optimisation de forme. Elle est donc donnée de façon discrète par N points de contrôles. (voir chapitre 3)*

5.1.2 Vérification des conditions de constructibilité de l'algorithme

Nous avons pu tester numériquement les conditions de constructibilité de l'algorithme.

5.1.2.1 Vérification des conditions de concavité

Pour tout choix de t^0, (4.55) est vérifiée.

On donne un exemple de calcul des valeurs qui interviennent dans le tableau 5.1.

Choisir t^0 c'est se donner un point de départ sur f^0 pour brancher le modèle local. Ainsi, plutôt que de renseigner le tableau avec les valeurs de t^0, on choisit de donner le numéro de point de contrôle associé à la valeur de t^0 choisie. Ici la goutte a 50 points de contrôle. Le premier point de contrôle est celui situé sur l'axe des z, puis plus le numéro du point de contrôle est élevé plus on se rapproche du point triple.

Dans le tableau qui suit la valeur de l'angle de Young est de 90°. Les courbes f^0 obtenues par l'algorithme global sont toutes telles que $\alpha(t^0) > 0$ donc on ne vérifiera pas (4.59). Enfin on ne vérifiera (4.58) que lorsque (4.57) n'est pas vérifié.

Potentiel	N° pt. cont.	$\alpha(t^0)$	$\frac{1}{f^0(t^0)\sqrt{1+(\alpha(t^0))^2}} - \lambda$	$\frac{T^* - t^0}{f^0(t^0)\sqrt{1+(\alpha(t^0))^2}} - \beta(t^0)$	$\frac{2}{f^0(t^0)\sqrt{1+(\alpha(t^0))^2}} - \lambda$
100V	10	3.18	-0.10	-0.01	-
100V	30	0.77	-0.10	-0.02	-
100V	45	0.14	-0.10	0.02	$-5 * 10^{-3}$
200V	45	0.17	-0.10	-0.01	-
300V	45	0.20	-0.09	-0.04	-
400V	45	0.41	-0.09	-0.03	-
500V	45	0.35	-0.08	-0.17	-
800V	45	0.85	-0.05	-0.52	-

TAB. 5.1 – Vérification des conditions de concavité dans le cas d'un angle de Young de 90°

Nous donnons plusieurs exemples de choix de t^0 pour un potentiel de 100V. Pour les autres potentiels on se contente de ne donner qu'un exemple car les conclusions restent les mêmes quel que soit le choix de t^0.

Remarque 5.1.2 *Les conditions de concavité restent des conditions suffisantes*

et certainement pas optimales. Il se peut donc que celles-ci ne soient pas vérifiées dans certains cas sans pour autant que la solution ne soit pas concave. En pratique, toutes les solutions calculées sont concaves.

5.1.2.2 Vérification des conditions de minoration

On rappelle que les conditions (4.60) et (4.61) assuraient une minoration de la solution.

On présente dans le tableau 5.2 les valeurs de $\int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt$ et celle de la borne associée $1+\beta(t^0)$. Il s'agit donc de vérifier que :

$$\int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt < 1+\beta(t^0)$$

et que

$$m_n(t^0) = g^{-1}\left(\beta(t^0) - \int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt\right)(T^* - t^0) + f^0(t^0) > 0$$

où on rappelle que g est la fonction définie par

$$\begin{array}{rccc} g: & \mathbb{R} & \to &]-1,1[\\ & x & \mapsto & \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \end{array}$$

Ces valeurs dépendent évidemment de t^0 et de n, mais quelles qu'en soient les valeurs choisies les conclusions restent les mêmes.

Comme précédemment, plutôt que de renseigner le tableau 5.2 avec les valeurs de T^*-t^0 on donnera le numéro du point de contrôle choisi comme point de départ. On donnera seulement un exemple pour deux valeurs différentes de taille de boîte t^0 pour un potentiel égal à 100V. Les comportements sont les mêmes pour les autres potentiels.

Les paramètres sont les mêmes que pour la section précédente. Il y a 50 points de contrôles.

En observant les valeurs inscrites dans le tableau 5.2, on conclut que numériquement les conditions de minoration sont vérifiées.

5.1.3 Choix des conditions initiales

Soit f^0 donné et $n \in \mathbb{N}$.

Pour résoudre l'équation différentielle (E_n), il faut tout d'abord choisir t^0, c'est-à-dire fixer à partir de quel moment on branche le modèle local. Nous avons

Potentiel	$N°$ point de contrôle	$\int_{t^0}^{T^*} S_n(t)dt$	$1+\beta(t^0)$	$m_n(t^0)$
100V	30	1.14	1.61	4.27
100V	45	0.26	1.14	9.59
200V	45	0.29	1.17	9.77
300V	45	0.33	1.20	9.88
400V	45	0.38	1.25	10.05
500V	45	0.46	1.33	10.29
800V	45	0.81	1.65	11.42

TAB. 5.2 – Vérification des conditions de minoration

vu que nous sommes libres dans le choix de t^0. Nous choisissons de prendre un point de contrôle comme point de départ ; t^0 est alors fixé.

De plus, du fait du caractère discret de la courbe représentative de f^0, définir la seconde donnée, $(f^0)'(t^0)$, pose un problème de nature différente de celui du choix de t^0.

Nous commencerons par traiter le problème du choix de la pente de départ (indépendamment du choix de t^0), puis nous continuerons avec celui du choix de t^0.

5.1.3.1 Choix de l'angle de départ

La courbe est donnée par N points de contrôles reliés entre eux par des segments de droite. De ce fait la valeur de la pente en un point de contrôle ne nous est pas donnée de façon unique

Donnons nous P_{N_0} le point choisi associé à la taille de boîte choisie (i.e. associé à t^0).

Pour imposer un angle de départ, nous avons donc une petite marge de manoeuvre entre l'angle donné par la pente du segment $[P_{N_0-1}, P_{N_0}]$ et celle du segment $[P_{N_0}, P_{N_0+1}]$. Que nous accorde cette marge de manoeuvre ?
Il ne faut pas oublier que la solution exacte de l'équation différentielle vérifie la contrainte de volume. Cette liberté nous permet, par ce que l'on pourrait appeler une méthode de tir, de régler la pente de départ pour que la contrainte de volume soit satisfaite au mieux.

Pour un point de départ P_{N_0} donné, on parlera :

-d'*angle précédent* pour l'angle donné par la pente du segment $[P_{N_0-1}, P_{N_0}]$

-d'*angle moitié* pour l'angle donné par la moyenne des pentes des segments

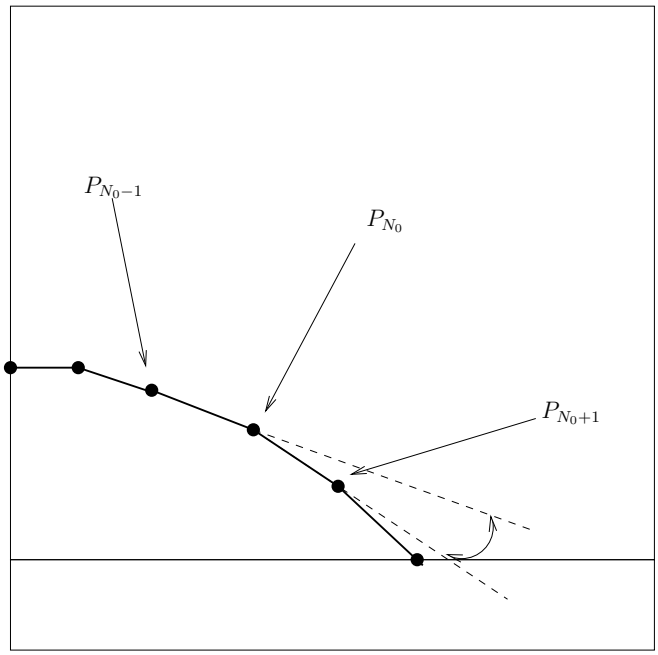


FIG. 5.3 – choix pour l'angle de départ

$[P_{N_0}, P_{N_0+1}]$ et $[P_{N_0-1}, P_{N_0}]$

-d'*angle suivant* pour l'angle donné par la pente du segment $[P_{N_0}, P_{N_0+1}]$

Pour ces trois angles de départ, nous donnons un exemple de calcul de courbes et de la contrainte de volume associée à 300V et pour un angle de Young de 90°. Les comportements sont analogues pour des angles différents évoluant dans l'intervalle (*angle précédent, angle suivant*).

Dans les figures 5.4, 5.5 et 5.6, 5.7, la courbe en trait continu représente la courbe d'initialisation f^0 et les points calculés sont représentés par des cercles. Dans les figures 5.6 et 5.7, nous avons effectué un zoom au niveau de la courbe calculée pour mieux voir les variations engendrées par des variations d'angle initial.

On présente dans le tableau 5.3 les contraintes de volume associées. Les chiffres donnés représentent l'erreur relative (en %) en volume pour les courbes obtenues. La courbe de départ vérifie la contrainte de volume à 0.02%.

On remarque que l'erreur relative peut être multipliée par 10 par rapport à la courbe de départ suivant le choix de cette condition initiale.

Dans la suite, les courbes tracées seront celles obtenues après avoir effectué cette méthode de tir.

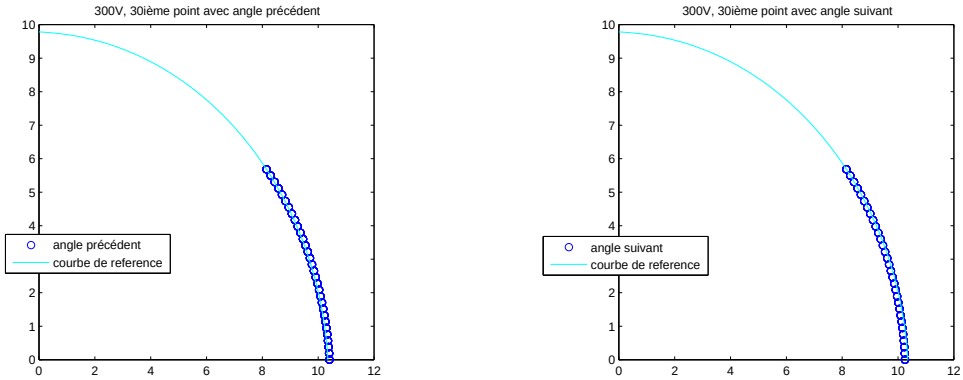


FIG. 5.4 – *Gauche,* Pour un angle de départ égal à l'angle précédent ;*Droite,* Pour un angle de départ égal à l'angle suivant

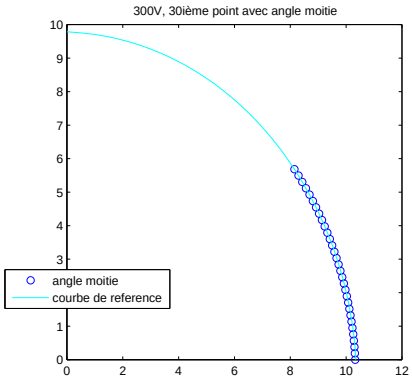


FIG. 5.5 – Pour un angle de départ égal à l'angle moitié

courbe de départ	0.02%
angle précédent	0.12%
angle moitié	0.003%
angle suivant	0.12%

TAB. 5.3 – Erreur relative en valeur absolue sur la contrainte de volume en fonction de la pente de départ choisie

5.1.3.2 Choix de t^0

L'intérêt du modèle décrit au chapitre précédent est d'être ponctuel au voisinage du point triple. Cependant, l'équation reste valable pour tout $t \in]0, T^*[$. Numériquement nous avons pu observer que l'algorithme est toujours constructible pour toute valeur de t^0. Il est donc aussi possible d'intégrer l'équation à

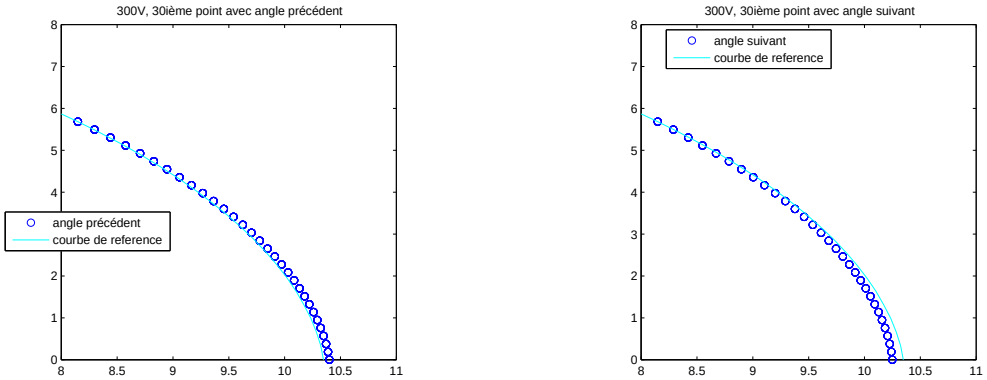


FIG. 5.6 – *Gauche,* Pour un angle de départ égal à l'angle précédent ;*Droite,* Pour un angle de départ égal à l'angle suivant

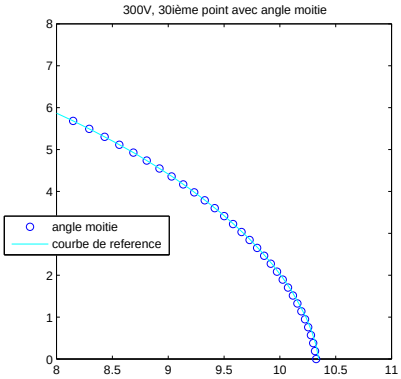


FIG. 5.7 – Pour un angle de départ égal à l'angle moitié

partir de t^0 proche de 0.

Choisir t^0 équivaut à choisir un point de contrôle sur la goutte donnée par l'"approximation globale" (cf figure 5.2).

A un jeu de paramètres physiques donné, des simulations ont été effectuées pour différentes valeurs de t^0.

1. *Un effet localisé*

   Nous nous sommes autorisés à choisir t^0 relativement petit proche de 0.

   Nous avons ainsi pu confirmer que l'effet de ce modèle reste principalement localisé au voisinage du point triple.

   La figure 5.8 présente un zoom au niveau du point triple effectué à 300V. La

courbe en trait continu représente f^0. On note bien que le décrochage par rapport à l'ancienne courbe ne s'effectue qu'au voisinage du point triple.

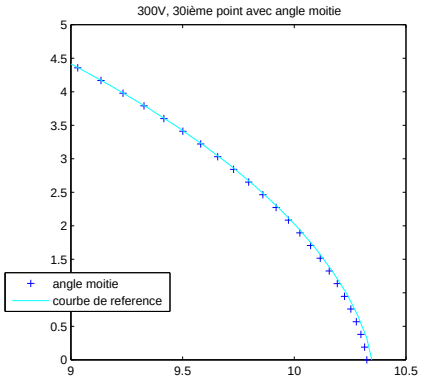


FIG. 5.8 – Zoom mettant en avant le décrochage au niveau du point triple.

2. *Influence du paramètre t^0 sur les informations locales*
   On cherche à savoir quelle influence a t^0 sur la position du point triple et la valeur de l'angle de contact.

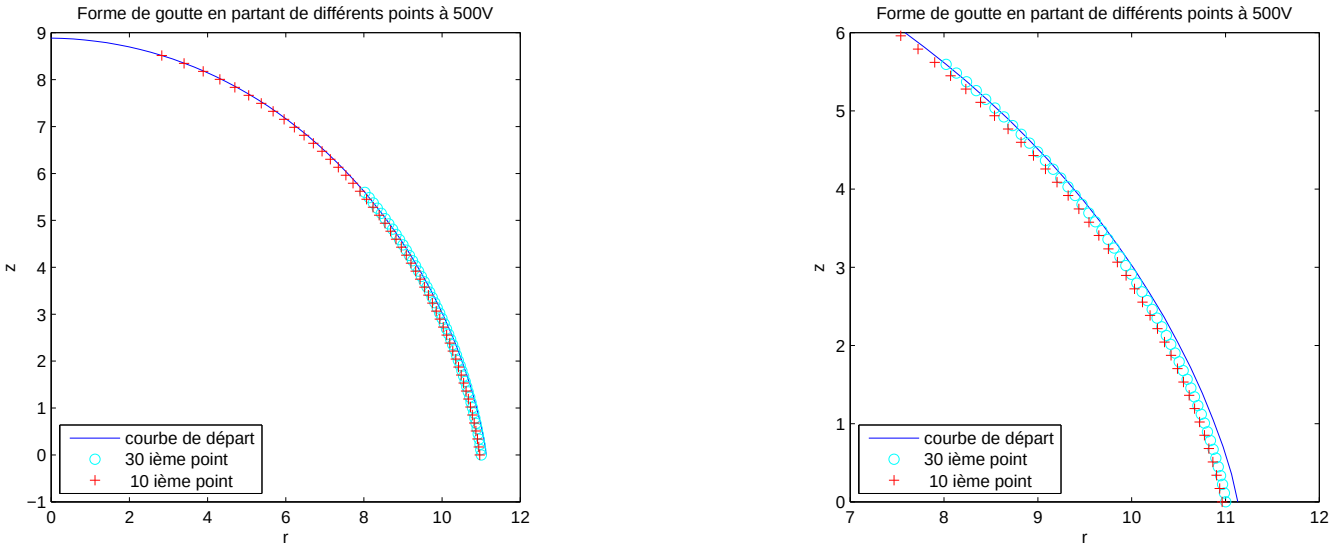


FIG. 5.9 – *Gauche,* Pour un point de départ aux $10^{\text{ième}}$ et $30^{\text{ième}}$ point de contrôle ;*Droite,* Zoom.

Si on observe la figure 5.9, on peut remarquer que le choix de t^0 n'est pas déterminant en ce qui concerne la position du point triple.

On présente dans le tableau 5.4 les abscisses des points triples correspondants :

courbe de départ	$10^{\text{ième}}$ point	$30^{\text{ième}}$ point
11.13	10.98	11.00

TAB. 5.4 – Abscisse des points triples pour différentes valeur de t^0

Ce qui fait une variation relative de 1% entre la courbe initiale et les courbes modifiées, et une variation de 0.18% entre les deux courbes. On considèrera donc que seule la variation entre courbe de départ et courbe modifiée est significative.
De plus nous avons remarqué que le choix de t^0 n'a pas d'influence significative sur la valeur de l'angle de contact.
Les résultats sont analogues pour des voltages et un angle de Young différents.

3. *Conclusion*
Pour avoir seulement une information locale (i.e. point triple et angle de contact) le choix de t^0 n'est donc pas déterminant. Cependant, afin d'avoir une information plus précise sur la forme de la goutte, il pourra être judicieux de choisir un t^0 correspondant à un point relativement éloigné du point triple.
Ensuite on pourra remarquer à quel moment la courbe commence à "décrocher" de la courbe initiale et n'effectuer le calcul qu'à partir de ce moment pour avoir un gain de temps et ne pas recalculer la forme de goutte avant t^0.

Nous pouvons maintenant exposer les résultats numériques obtenus. Nous présentons tout d'abord les formes et courbures de goutte obtenues puis mettons en avant les valeurs numériques de l'angle de contact.

5.2 Résultats numériques : analyse et comparaison

Pour chaque simulation, nous avons adapté au mieux les conditions initiales. Nous avons utilisé les mêmes valeurs de paramètres physiques (volume, tension de surface, permittivité) que dans le chapitre 3. On présente ici les formes convergées, obtenues en moyenne au bout de 4 itérations de l'algorithme pour un critère de sortie correspondant à $\varepsilon \approx 10^{-2}, 10^{-3}$.

5.2.1 Forme au voisinage du point triple et valeur numérique de la courbure

5.2.1.1 Etude de la forme de goutte au voisinage du point triple

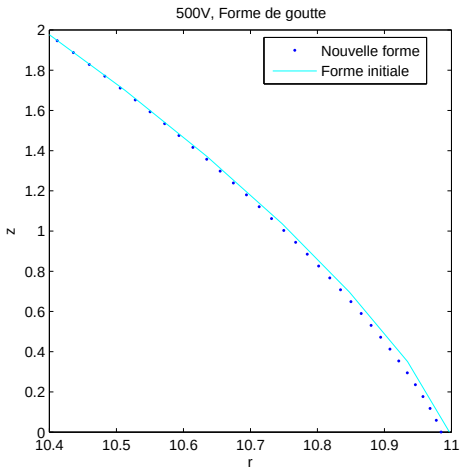


FIG. 5.10 – Evolution de la forme de goutte au voisinage du point triple pour un potentiel de 500V et un angle de Young de 90°.

Nous observons l'effet du modèle sur la forme de la goutte au voisinage du point triple.
On présente sur la figure 5.10 un zoom au voisinage du point triple présentant l'évolution de la forme de la goutte.

Remarque 5.2.1 *Les courbes obtenues sont qualitativement les mêmes pour des potentiels différents et des valeurs différentes de l'angle de Young.*

On remarque une déviation au niveau de la ligne de mouillage. Ceci laisse présager une augmentation de la courbure plus forte que pour l'approximation globale. Ce qui est confirmé par ce qui suit.

5.2.1.2 Calcul numérique de la courbure

Dans le chapitre 3, nous avons pu, grâce à une approximation de la courbe avec des courbes de Bézier, avoir des valeurs numériques de la courbure en chaque point de contrôle de la goutte. La courbure de la goutte était constante loin du

point triple, mais elle augmentait de façon significative au voisinage de ce dernier. Le modèle développé dans le chapitre 4 est donné par une équation différentielle ordinaire. En regardant la section 4.3, on remarque que cette équation traduit simplement que la courbure moyenne de la courbe est donnée explicitement par la partie contrainte de volume et gradient du potentiel électrostatique.
Ce modèle nous permet donc de calculer la courbure sans faire d'approximation de la courbe. A la forme convergée, on est donc en mesure de calculer les valeurs de la courbure en chaque point.
Les résultats obtenus sont présentés en figure 5.11

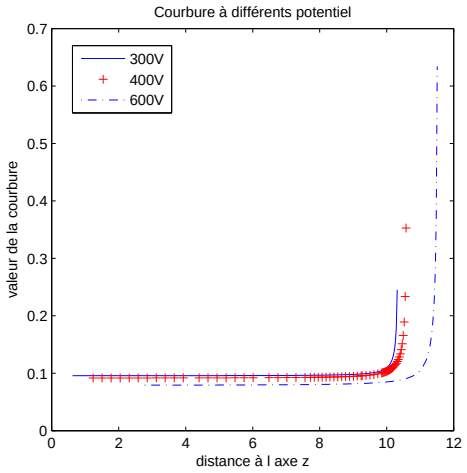


FIG. 5.11 – Courbure numérique en chaque point pour différentes valeurs du potentiel et un angle de Young de 90°.

On fait les mêmes remarques que dans le chapitre 3. La courbure est globalement constante loin du point triple, mais croît rapidement à mesure que l'on s'en approche.

▷*Comparaison avec les valeurs obtenues au chapitre 3*

Il est intéressant de comparer les valeurs obtenues dans ce chapitre à celles obtenues au chapitre 3.

On présente sur la figure 5.12 les valeurs de la courbure obtenues pour un potentiel de 500V et un angle de 90° pour les deux méthodes.

La courbure issue de l'approximation globale a été lissée (approximation de la courbe par des polynômes, fonction "polyfit" de Matlab).

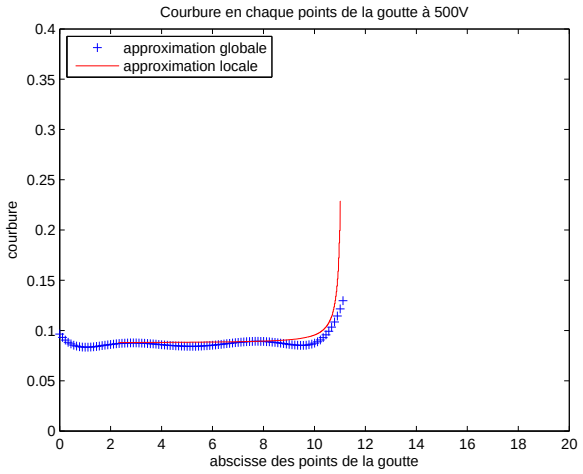


FIG. 5.12 – Comparaison de la courbure numérique en chaque point pour un potentiel de 500V et un angle de Young de 90°.

On remarque des évolutions qualitatives similaires de la courbure. La valeur moyenne loin du point triple est la même, tandis que l'on visualise mieux l'explosion de la courbure au voisinage de la ligne de mouillage. Cette remarque traduit le fait que notre modèle a eu un effet local. Nous avons pu "capter" les valeurs de la courbure plus proche du point triple, ce que ne permettait pas le modèle global. L'explosion du gradient du potentiel est mieux décrite.

5.2.1.3 Energie de la goutte et contrainte de volume

Le but étant de trouver une forme minimisant l'énergie sous la contrainte de volume, il est intéressant de regarder l'effet du modèle local sur ces deux quantités. Le tableau 5.5 présente les valeurs de l'énergie de la goutte pour différentes valeurs de potentiel imposées. Il permet la comparaison avec les valeurs données par l'algorithme global du chapitre 3. Observons également les valeurs de la contrainte de volume (tableau 5.6). On comparera plutôt les valeurs relatives de la contrainte de volume. Les valeurs sont donc données en pour-cent.

L'énergie de la nouvelle forme de goutte est inférieure à celle obtenue grâce à l'algorithme optimisation de forme. Cependant on remarque que les variations sont relativement petites. Ceci pourrait expliquer que l'ancien modèle n'ait pu atteindre cette valeur. C'est une variation trop faible pour que le modèle global puisse détecter un changement de forme.

En ce qui concerne les valeurs de contraintes de volume, on remarque qu'elles sont conformes à celles obtenues avec l'algorithme optimisation de forme. Nous

Voltage	Modèle global	Modèle local
100V	99.50	99.50
200V	97.97	97.91
300V	94.65	94.62
400V	90.47	90.39
500V	84.12	84.05
600V	76.63	76.39
700V	66.22	65.81
800V	53.09	52.91

TAB. 5.5 – Valeurs comparées de l'énergie de la goutte

Voltage	Modèle global	Modèle local
100V	0.02%	0.02%
200V	0.08%	0.07%
300V	0.02%	0.02%
400V	0.08%	0.08%
500V	0.01%	0.003%
600V	0.01%	0.01%
700V	0.04%	0.04%
800V	0.002%	0.002%

TAB. 5.6 – Erreur relative sur le volume

avions déjà étudié le problème de la contrainte de volume au paragraphe 5.1.3.1. Nous avons donc adapté la donnée de l'angle de départ pour que la contrainte de volume soit satisfaite au mieux.

L'analyse de la forme de la goutte a montré une modification au voisinage du point triple et une meilleure visualisation de l'explosion de la courbure. Il reste à observer les valeurs numériques de l'angle de contact obtenues.

5.2.2 Valeur de l'angle de mouillage numérique

La résolution numérique de l'équation différentielle nous permet d'extraire également la valeur de l'angle de mouillage.

Les seuls paramètres physiques que nous ferons bouger seront le voltage et la valeur de l'angle de Young. Les autres paramètres physiques sont inchangés et restent égaux à ceux utilisés dans le paragraphe 3.2.

Voici les résultats obtenus pour un angle de Young de 90°.

On remarque que les valeurs numériques trouvées sont globalement constantes.

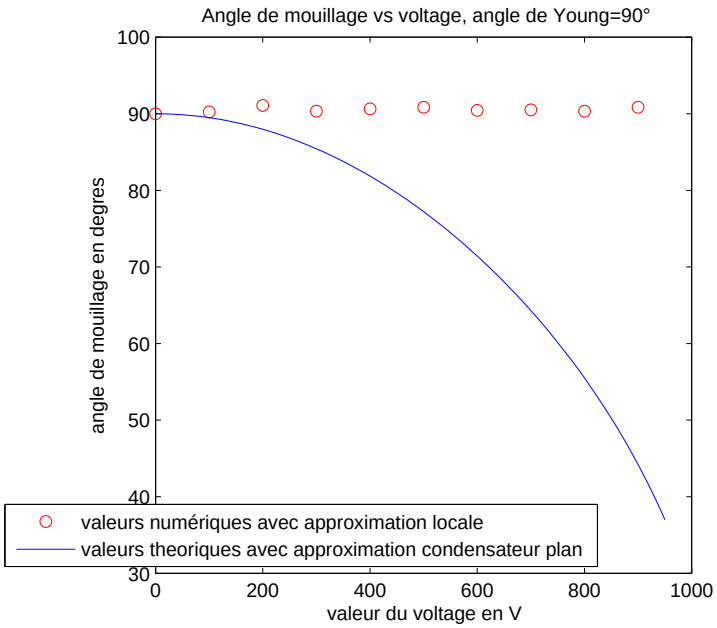


FIG. 5.13 – Valeur numérique de l'angle de contact comparé à la valeur de l'angle donné par l'approximation de Lippmann

La valeur de la constante est 90° ce qui correspond bien à la valeur de l'angle de Young dans ce cas.

Voltage	Erreur commise
100V	+0.2%
200V	1%
300V	+0.4%
400V	+0.7%
500V	+0.9%
600V	+0.5%
700V	+0.5%
800V	+0.4%
900V	+0.9%

TAB. 5.7 – Erreur commise sur l'angle de contact par rapport à la valeur théoriquement prédite (ici 90°)

On donne également le tableau 5.7 qui donne l'erreur relative (en %) entre l'angle calculé numériquement et la valeur donnée de l'angle de Young.

On peut donner les résultats et un tableau analogue dans le cas d'un angle de Young de valeur différente : ici 60° (figure 5.14, tableau 5.8) et 120°(figure 5.15, tableau 5.9).

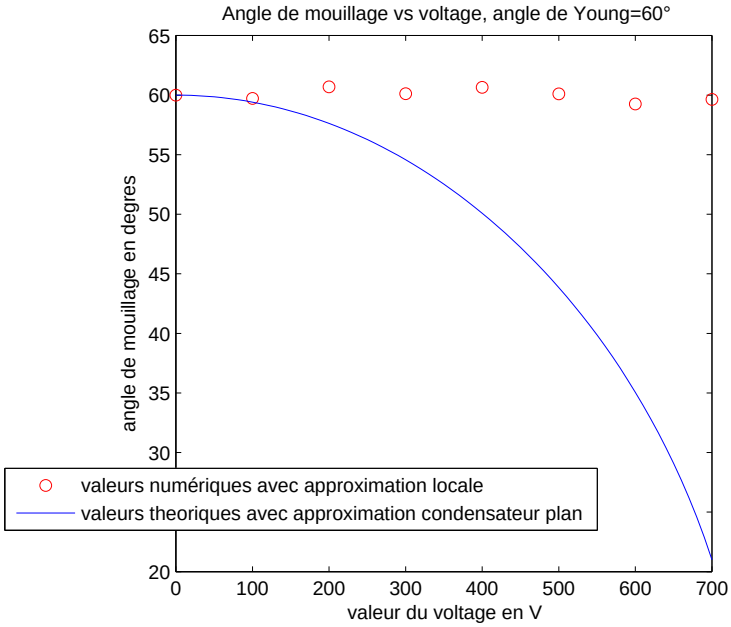


FIG. 5.14 – Valeur numérique de l'angle de contact comparé à la valeur de l'angle donné par l'approximation de Lippmann

Voltage	Erreur commise
100V	+0.4%
200V	+1%
300V	+0.2%
400V	+1%
500V	−1%
600V	−0.5%

TAB. 5.8 – Erreur commise sur l'angle de contact par rapport à la valeur théoriquement prédite (ici 60°)

Analyse des résultats Les valeurs obtenues dans les tableaux 5.7, 5.8 et 5.9 sont issues de l'intégration numérique et ne sont pas calculées comme c'était le cas dans le chapitre 3 en prenant la pente au deux derniers points de contrôles.

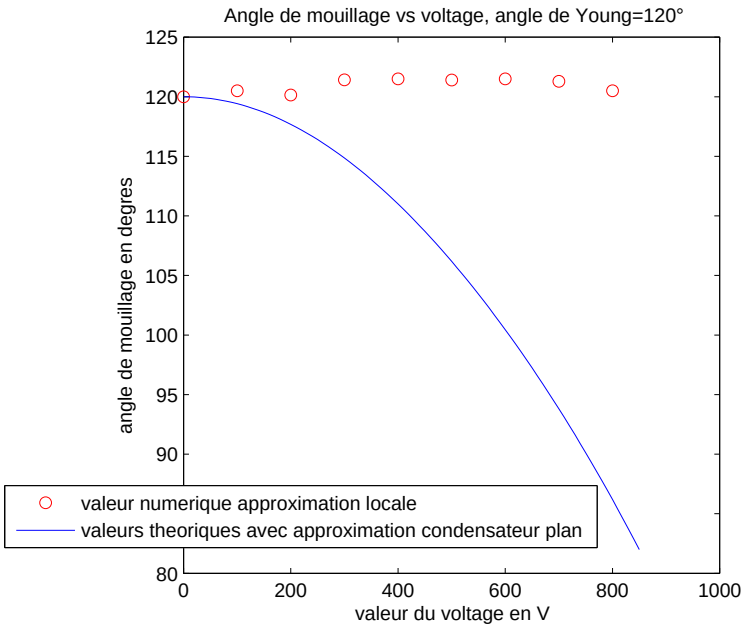


FIG. 5.15 – Valeur numérique de l'angle de contact comparé à la valeur de l'angle donné par l'approximation de Lippmann

Voltage	Erreur commise
100V	+0.7%
200V	+0.1%
300V	+1%
400V	+1.3%
500V	+1.2%
600V	+1.3%
700V	+1%
800V	+0.4%

TAB. 5.9 – Erreur commise sur l'angle de contact par rapport à la valeur théoriquement prédite (ici 120°)

Les valeurs des angles de contact numériques trouvés sont conformes à la prédiction théorique du modèle. Nous retrouvons l'invariance de la valeur de l'angle de contact par rapport au potentiel appliqué (qui constitue le résultat du chapitre 2). Sa valeur est bien égale à celle de l'angle de Young θ_Y (l'angle de contact à 0V), dans chacun des cas.

L'erreur sur la valeur de l'angle est d'au plus 1% dans le cas d'un angle de Young de 90°, ce qui signifie que l'on obtient pour valeurs de l'angle de contact

un angle compris entre 89° et 91°. Pour un angle de Young de 60°, on obtient des valeurs comprises entre 59.4° et 60.4°. On a donc une très bonne adéquation avec la théorie. C'est également le cas dans l'exemple présenté pour 120°.

Nous tenons à signaler l'influence du paramètre λ (valeur numérique issue du code "approximation globale"), multiplicateur de Lagrange. Si on modifie la valeur de ce multiplicateur il est possible de faire varier la valeur finale de l'angle de contact. Rigoureusement λ devrait être actualisé à chaque modification de la forme de la goutte. Cependant, vu les variations de la contrainte de volume, la valeur de λ n'en sera que très peu modifiée et nous avons choisi de ne pas le faire.

Nécessité de la prise en compte de la singularité et d'un calcul précis du potentiel Avant de mettre en oeuvre la Méthode du Complément Singulier, nous avons dans un premier temps implémenté le modèle local avec le calcul du potentiel enrichi de la fonction de base singulière. Les formes de goutte étaient alors calculées dans des boites de plus en plus petites afin d'augmenter la précision de nos calculs. Nous devions donc faire un zoom de plus en plus précis pour améliorer les résultats. Nous présentons dans le tableau 5.10 les valeurs obtenues par cette méthode comparativement à celles obtenues par la méthode du complément singulier.

Voltage	FS	MCS
$100V$	90.5°	90.18°
$200V$	89.6°	90.85°
$300V$	89.7°	90.36°
$400V$	90.34°	90.63°
$500V$	88.91°	90.8°
$600V$	88.85°	90.45°
$700V$	87.70°	90.36°
$800V$	87.30°	90.8°

TAB. 5.10 – Valeurs des angles de contact en fonction du potentiel pour l'approximation par la fonction de base singulière (colonne de gauche) et par la Méthode du Complément Singulier (colonne de droite)

Nous remarquons une nette dégradation des valeurs obtenues pour l'approximation par la fonction singulière à mesure que le potentiel devient élevé.

Les résultats obtenus sont donc moins bons sur deux points

- Le temps de convergence est bien plus élevé qu'avec la méthode du complément singulier. Il faut plus d'itérations pour converger. Il est nécessaire de faire un calcul progressif sur des boites dont la taille diminue au fur et à mesure afin d'augmenter le zoom et la précision.

- A haut potentiel, les valeurs numériques trouvées sont moins précises et l'erreur avec la valeur théorique est plus grande.

Pour étudier précisément l'angle de contact et la forme de la goutte au voisinage du point triple, il faudrait donc allier au traitement de la singularité le modèle local. Alors que pour obtenir une forme macroscopique de goutte, l'approximation globale par l'algorithme d'Uzawa et un calcul du potentiel $\mathbb{P}_1$ suffit.

5.2.3 Retour à la physique du problème

Il peut être maintenant intéressant de retourner à des valeurs physiques non adimensionnées, pour donner quelques conclusions. On rappelle que l'isolant a pour épaisseur $200\mu m$, la goutte un volume de $4 * 10^{-8} m^3$.

Visualisation de l'angle de Young Nous avons pu numériquement constater que plus le potentiel est élevé et moins il est "facile" de visualiser l'angle de Young. Même conclusion plus l'angle de Young est petit.

Ainsi nous avons voulu savoir de quel ordre de grandeur il faudrait zoomer pour visualiser l'angle local.

Plaçons nous à $\theta_Y = 90°$. En admettant une erreur de 2% sur la valeur de l'angle, il est possible d'observer, à $200V$ l'angle local de Young à une distance de $58\mu m$ du point triple.

A $400V$, il faut déjà être à une distance de $0.3\mu m$ du point triple pour observer un angle de 88°. En restant à une distance de $58\mu m$, on observerait alors un angle de 83°.

Pour un angle de Young de 60°, à 200V pour visualiser un angle de 58°, il faut se trouver à une distance d'environ $37\mu m$ du point triple.

On peut tracer la distance de visualisation en fonction du potentiel appliqué. Dans la figure 5.16, on trace par exemple la distance de visualisation d'un angle de 85° en fonction du potentiel appliqué pour une expérience correspondant à un angle de Young de 90°. On peut tracer des courbes de comportements similaires pour d'autres valeurs d'angle plus ou moins proches de l'angle de Young.

L'angle de Young reste un angle mathématique local et ponctuel et semble donc difficile à observer expérimentalement au moins à haut voltage.

Qu'observe-t-on dans les expériences ? Ce qui est mesuré au cours des expériences physiques est un angle macroscopique.

Définissons en chaque point de la goutte un angle θ, angle de la pente de la tangente en ce point avec l'horizontale comme dans la figure 5.17.

Nous traçons dans les figures 5.18 et 5.19 le cosinus de l'angle θ en fonction de la distance à l'axe r et pour plusieurs valeurs de potentiel appliqué.

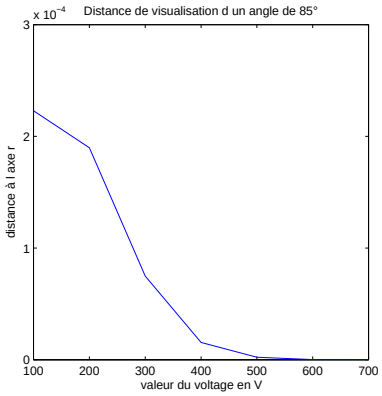


FIG. 5.16 – Distance de visualisation d'un angle de 85° en fonction du potentiel appliqué

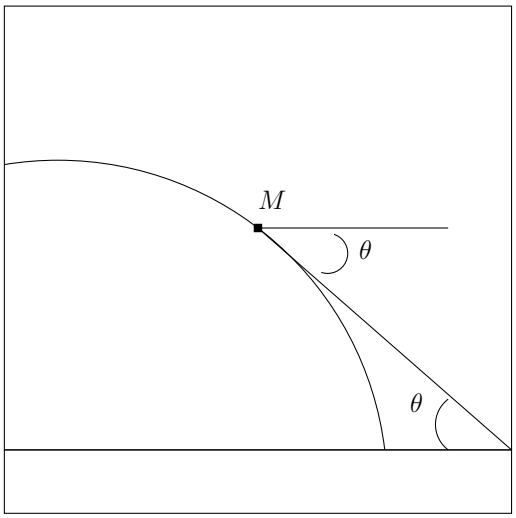


FIG. 5.17 – Angle de la pente de la tangente en chaque point

On remarque que loin du point triple, les courbes ont un comportement linéaire. A mesure que l'on s'approche du point triple (qui correspond à $z = 0$) le comportement perd sa linéarité pour devenir fortement non linéaire près du point triple.

On interpole la partie linéaire de ces courbes par des droites, i.e. on prolonge la partie linéaire jusqu'au point triple et donc jusqu'à ce que cette droite coupe l'axe des z (voir figure 5.20). On donne dans les tableaux 5.11 et 5.12 les angles de

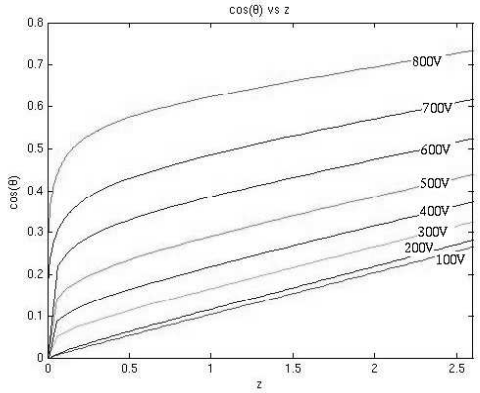


FIG. 5.18 – cosinus de l'angle en fonction de la distance pour plusieurs valeurs de potentiel ; pour un angle de Young de 90°

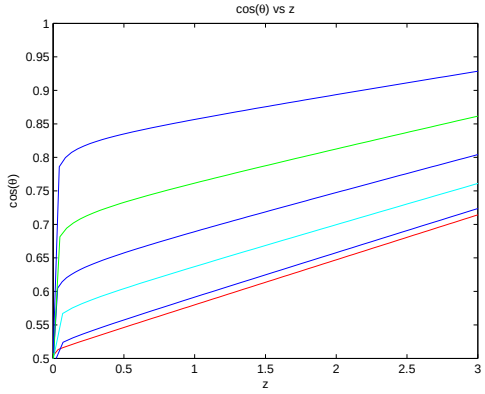


FIG. 5.19 – cosinus de l'angle en fonction de la distance pour plusieurs valeurs de potentiel ; pour un angle de Young de 60°. De bas en haut : potentiel croissant à partir de 100V et tous les 100V

contact trouvés pour un angle de Young de 90° et 60°(ils correspondent à l'angle associé au cosinus donné par l'ordonnée à l'origine des droites tracées) :

Il y a une forte adéquation entre les résultats trouvés et ceux prédits par la loi de Lippmann. Ce qui confirmerait que le détachement par rapport à la prédiction débute là où débute le comportement non linéaire de la courbe.

Saturation de l'angle macroscopique de contact Nous savons que les physiciens ont observé lors de leurs mesures une bonne adéquation avec l'approximation condensateur plan jusqu'à un certain voltage au delà duquel la goutte se bloque. Ici pour nos paramètres physiques et un angle de Young de 90°, nous savons qu'expérimentalement cette limite est atteinte à 700V.

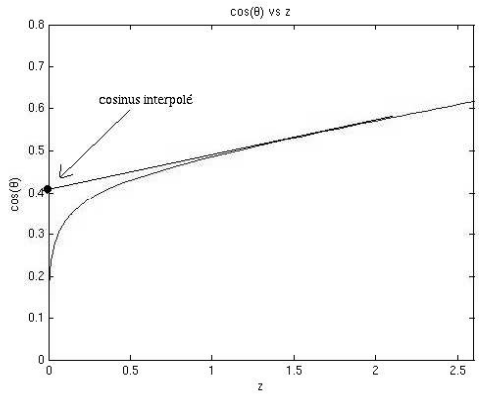


FIG. 5.20 – Interpolation de la partie linéaire de la courbe du cosinus de l'angle θ en fonction de la distance à l'axe r

ϕ_0	valeur interpolée	condensateur plan
100V	89	89.49
200V	88,5	87.97
300V	85.98	85.43
400V	82.25	81.85
500V	78.46	77.21
600V	72.54	71.42
700V	65	64.30
800V	55.94	55.50

TAB. 5.11 – Angle de contact estimé pour la partie linéaire comparée à l'approximation condensateur plan ; pour un angle de Young de 90°.

ϕ_0	valeur interpolée	condensateur plan
100V	59.00	59.41
200V	58.33	57.62
300V	54.54	54.57
400V	50.58	50.09
500V	44.35	43.84
600V	34.91	35.05

TAB. 5.12 – Angle de contact estimé pour la partie linéaire comparée à l'approximation condensateur plan ; pour un angle de Young de 60°.

Cependant nous ne trouvons pas d'indication d'un blocage de l'angle de contact dans nos simulations numériques. Le phénomène de saturation n'est pas écrit dans le modèle.

5.3 Conclusion

Le modèle présenté depuis le chapitre 4 consiste en une correction locale au niveau du point triple de la forme de goutte obtenue par optimisation de forme. Grâce à ce modèle nous avons pu visualiser les corrections effectuées au niveau du point triple pour la forme de goutte elle-même, sa courbure, ainsi que son angle de contact. Nous avons ainsi retrouvé numériquement l'invariance de l'angle de contact de façon précise.

On retrouve l'utilisation de l'équation de Young-Laplace pour simuler des formes de goutte dans plusieurs articles de physique :

- Dans [BHM03], la goutte considérée est de rayon infini. Des conditions initiales relativement arbitraires sont imposées.
- Dans [PB05], la goutte considérée est axisymétrique et la condition d'angle de Young au point triple est imposée comme une condition aux bords. C'est également le cas dans [Ada06] qui utilise un modèle linéarisé approché pour simuler les formes de goutte.

Dans le modèle proposé ici, la valeur de l'angle contact local n'intervient qu'implicitement (voir obtention de l'équation dans la section 4.4) et n'est pas une donnée imposée aux bords. Le fait d'avoir une première approximation globale de la goutte permet également d'avoir un problème avec des conditions initiales réalistes.

Nous avons également estimé l'échelle sur laquelle l'angle de Young est visualisable en réalité et avons conclu à la difficulté pratique de son observation. L'angle de Young reste un angle de contact mathématique.

Nous n'avons visualisé aucun signe de blocage de l'angle macroscopique de contact. Il semble que ce phénomène ne soit pas inscrit dans notre modèle. Il faudrait alors le modifier et peut-être prendre en compte les phénomènes d'ionisation de l'air ou d'éjection de gouttelettes pour espérer visualiser un blocage.

Chapitre 6

Etude théorique de l'angle de contact dans le modèle tridimensionnel

Ce chapitre consiste en une généralisation du résultat établi au chapitre 2 à des formes non axisymétriques : l'invariance de l'angle de contact par rapport au potentiel appliqué.

Nous allons utiliser des méthodes similaires au cas 3D-axisymétrique : nous écrirons donc la condition nécessaire d'optimalité, puis par un choix particulier de directions admissibles nous retrouverons le résultat d'invariance de l'angle.

Ce chapitre va s'organiser comme suit :

On commencera par rappeler le principe de démonstration utilisé. Ensuite nous adapterons les notations et coordonnées au cas 3D complet.

Puis par un choix particulier de déformations nous étudierons la contribution de chaque terme entrant en jeu.

Enfin après avoir énoncé le résultat, nous donnerons une généralisation à des coefficients de tension de surface non constants.

6.1 Principe

On reprend les notations 3D introduites dans le chapitre 1 (voir figure 6.1). Si Ω est un domaine optimal, alors $\exists \lambda \in \mathbb{R}^*$ tel que

$$DJ(\Omega).U = \lambda DC(\Omega).U \tag{6.1}$$

pour tout $U \in \mathcal{U}(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^3)$ avec

$$DJ(\Omega).U = DJ_{grav}(\Omega).U + DJ_{LG}(\Omega).U + DJ_{LS}(\Omega).U + DJ_{elec}(\Omega).U \tag{6.2}$$

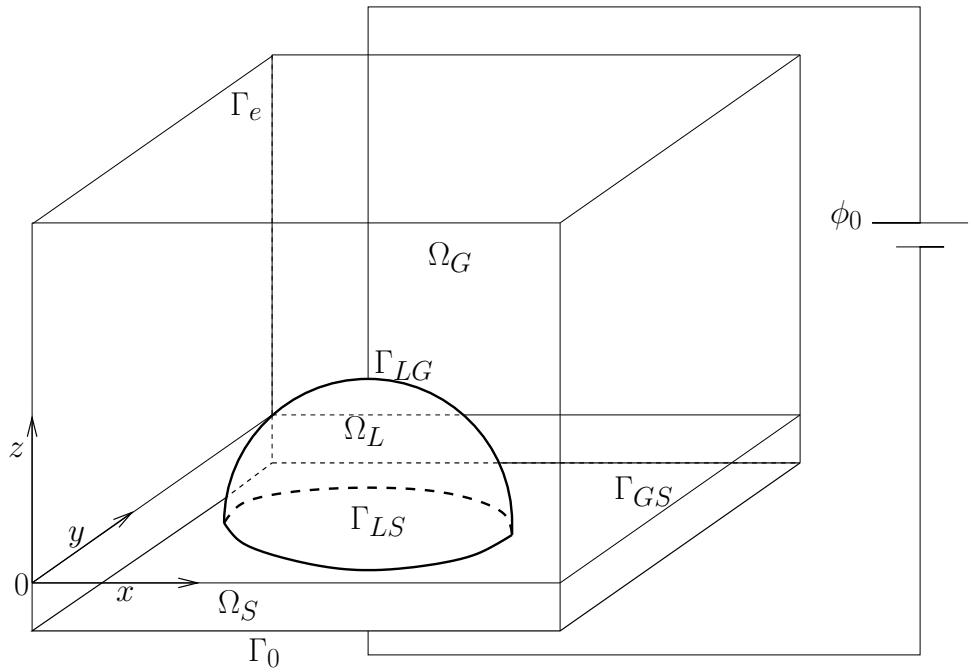


FIG. 6.1 – Notations dans le cas 3D

On rappelle les expressions des différentes dérivées :

$$DJ_{grav}(\Omega).U = \alpha \int_\Omega U_z d\Omega + \alpha \int_\Omega z \mathrm{div}(U) d\Omega \tag{6.3}$$

$$DC(\Omega).U = \int_\Omega \mathrm{div}(U) d\Omega \tag{6.4}$$

$$DJ_{LG}(\Omega).U = \int_{\Gamma_{LG}} \mathrm{div}(U) d\sigma - \int_{\Gamma_{LG}} \left(\overrightarrow{N_{LG}} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N_{LG}} \right) d\sigma \tag{6.5}$$

$$DJ_{LS}(\Omega).U = \mu \int_{\Gamma_{LS}} \mathrm{div}(U) d\sigma - \mu \int_{\Gamma_{LS}} \left(\overrightarrow{N_{LS}} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N_{LS}} \right) d\sigma \tag{6.6}$$

$$\begin{aligned} DJ_{elec}(\Omega).U = & -\frac{\delta}{2} \int_\Omega \varepsilon ||\nabla \phi^\Omega||^2 \mathrm{div}(U) d\Omega \\ & + \frac{\delta}{2} \int_\Omega \varepsilon \left(({}^t DU + DU) \nabla \phi^\Omega \cdot \nabla \phi^\Omega \right) d\Omega \end{aligned} \tag{6.7}$$

où $\overrightarrow{N_{LG}}$ (resp. $\overrightarrow{N_{LS}}$) est la normale unitaire sortante à Γ_{LG} (resp. Γ_{LS})

Le principe de démonstration reste le même qu'en 3D axisymétrique. L'idée est de construire une suite de déformations U^p à support compact dont le support se concentre sur la ligne triple lorsque $p \to +\infty$.

On a alors, en appliquant la condition nécessaire d'optimalité à $\frac{U^p}{||U^p||_\infty}$, pour $p \in \mathbb{N}$

$$DJ(\Omega).U^p = \lambda DC(\Omega).U^p \tag{6.8}$$

Puis il suffit de faire tendre p vers $+\infty$ et observer la limite de chacun des deux membres de l'équation.

Commençons par introduire notations et coordonnées.

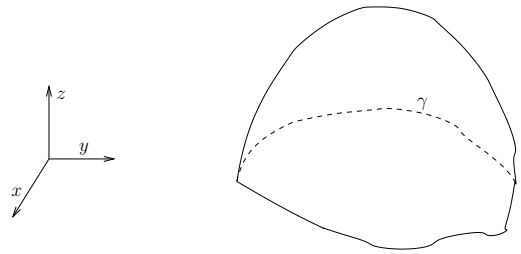
6.2 Notations

6.2.1 Le domaine

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^3$ définissant une forme de goutte (voir figure 6.1). On choisit un repère orthonormé tel que Γ_{LS} soit dans le plan (Oxy).

Paramétrage de la ligne de mouillage. On considère Γ ligne de mouillage de la goutte. C'est une courbe fermée dans (Oxy) que l'on supposera $\mathcal{C}^2$. On note l_Γ sa longueur.

Soit alors γ un paramétrage de Γ par l'abscisse curviligne.



Pour s appartenant à $[0, l_\Gamma]$, on notera

$$\gamma(s) = \begin{pmatrix} \gamma_x(s) \\ \gamma_y(s) \\ 0 \end{pmatrix}$$

On a

- $\gamma(0) = \gamma(l_\Gamma)$ car Γ est une courbe fermée

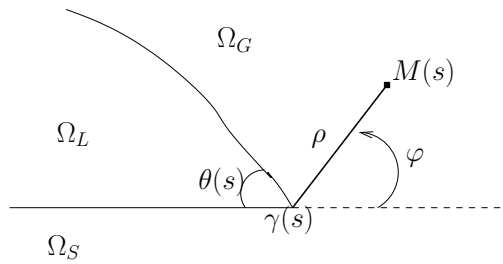


FIG. 6.2 – Coupe dans le plan $\mathcal{P}_s$

- $||\gamma'(s)||^2 = 1$ et $(\gamma'(s) \cdot \gamma''(s)) = 0$, $\forall s \in [0, l_\Gamma]$.

Paramétrage d'un point au voisinage du point triple. Pour $s \in [0, l_\Gamma]$, on note $\mathcal{P}_s$ le plan orthogonal à $\gamma'(s)$ en $\gamma(s)$.

Soit $M(s)$ un point de $\mathcal{P}_s$.

Il existe alors un unique couple $(\rho, \varphi) \in]0, +\infty[\times[-\pi, \pi[$ tel que :

$$\overrightarrow{OM}(s) = \gamma(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma'^{\perp}(s) + \rho\sin(\varphi)\overrightarrow{e_z}$$

où

$$\gamma'^{\perp}(s) = \begin{pmatrix} -\gamma'_y(s) \\ \gamma'_x(s) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Donc

$$\overrightarrow{OM(s)} = \begin{pmatrix} \gamma_x(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma'_y(s) \\ \gamma_y(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma'_x(s) \\ \rho\sin(\varphi) \end{pmatrix}$$

Définition 6.2.1 *Soit $s \in [0, l_\Gamma]$ fixé. L'angle formé entre les tangentes à Γ_{LG} et Γ_{LS} dans le plan $\mathcal{P}_s$ est appelé angle de contact et noté $\theta(s)$.*

Hypothèse 6.2.2 *On suppose qu'il existe ρ_0 et un petit voisinage V_{ρ_0} de la ligne de mouillage tel que : $\forall M \in V_{\rho_0}$, $\exists! s \in [0, l_\Gamma]$ tel que $M \in \mathcal{P}_s$ et ses coordonnées (ρ, φ) dans $\mathcal{P}_s$ sont telles que $\rho < \rho_0$.*

Tout $M \in V_{\rho_0}$ peut alors s'exprimer de façon unique en coordonnées (s, ρ, φ). Nous pouvons maintenant introduire de nouvelles coordonnées.

Nouvelles coordonnées. Considérons l'application suivante :

$$\begin{array}{rccc} \chi : & \underbrace{[0,l_\Gamma]\times]0,\rho_0[\times[-\pi,\pi[}_{\mathcal{V}_{\rho_0}} & \to & V_{\rho_0} \\ & (s,\rho,\varphi) & \mapsto & \begin{pmatrix} \gamma_x(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y'(s) \\ \gamma_y(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x'(s) \\ \rho\sin(\varphi) \end{pmatrix} \end{array}$$

Si γ est $\mathcal{C}^2$, alors χ est différentiable et :

$$D\chi(s,\rho,\varphi) = \begin{bmatrix} \gamma_x'(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s) & \cos(\varphi)\gamma_y'(s) & -\rho\sin(\varphi)\gamma_y'(s) \\ \gamma_y'(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s) & -\cos(\varphi)\gamma_x'(s) & \rho\sin(\varphi)\gamma_x'(s) \\ 0 & \sin(\varphi) & \rho\cos(\varphi) \end{bmatrix}$$

Calculons $\det(D\chi)$:

$$\begin{aligned} \det(D\chi) = &-(\gamma_y'(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s))(\rho\cos^2(\varphi)\gamma_y'+\rho\sin^2(\varphi)\gamma_y') \\ &+(\gamma_x'(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s))(-\rho\cos^2(\varphi)\gamma_x'-\rho\sin^2(\varphi)\gamma_x') \end{aligned}$$

En utilisant que $\gamma_x'(s)^2+\gamma_y'(s)^2=1$ et en notant

$$\det(\gamma',\gamma'') = \gamma_x'(s)\gamma_y''(s)-\gamma_y'(s)\gamma_x''(s) \tag{6.9}$$

on obtient

$$\boxed{\det(D\chi) = -\rho(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))} \tag{6.10}$$

Cherchons à quelles conditions $D\chi$ est inversible.

Comme γ' et γ'' sont orthogonaux et que $||\gamma'||=1$

$$\det(\gamma',\gamma'') = \pm||\gamma'||||\gamma''|| = \pm||\gamma''||$$

on a

$$1-\rho||\gamma''|| \le 1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'') \le 1+\rho||\gamma''||$$

Comme $||\gamma''||$ n'est pas identiquement nulle car c'est le paramétrage d'une courbe fermée, on peut poser

$$M := \max_{s\in[0,l_\Gamma]} ||\gamma''(s)|| > 0$$

et choisir $\tilde{\rho}_0 = \min\{\rho_0, \dfrac{1}{M}\}$ de telle sorte que $\det(D\chi)\neq 0$.

Comme dans le paragraphe précédent, on peut donc représenter de manière unique tout point M de $V_{\tilde{\rho}_0}\subset V_{\rho_0}$ par ses coordonnées (s,ρ,φ).

Dans la suite on considèrera donc

$$\chi : \underbrace{[0,l_\Gamma]\times]0,\tilde{\rho}_0[\times[-\pi,\pi[}_{\mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}} \to V_{\tilde{\rho}_0}$$

Calculons alors $(D\chi(s,\rho,\varphi))^{-1}$:

$$(D\chi(s,\rho,\varphi))^{-1} = \frac{1}{\det(D\chi)} * \left[\begin{array}{ccc} -\rho\gamma'_x & -\rho\gamma'_y & 0 \\ -\rho\cos(\varphi)(\gamma'_y - \rho\cos(\varphi)\gamma''_x) & \rho\cos(\varphi)(\gamma'_x + \rho\cos(\varphi)\gamma''_y) & -\rho\sin(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \\ \sin(\varphi)(\gamma'_y - \rho\cos(\varphi)\gamma''_x) & -\sin(\varphi)(\gamma'_x + \rho\cos(\varphi)\gamma''_y) & -\cos(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \end{array} \right] \quad (6.11)$$

6.2.2 Expression des opérateurs différentiels dans les coordonnées (s,ρ,φ)

Soit $U : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$. Nous allons exprimer $\tilde{U} := U \circ \chi$.

Le but ici est d'exprimer les dérivées partielles de U en fonction de celles de $\tilde{U}$.

Pour tout $(s,\rho,\varphi) \in \mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}$, on a

$$U(\chi(s,\rho,\varphi)) = \tilde{U}(s,\rho,\varphi)$$

et donc

$$DU(\chi(s,\rho,\varphi)) = D\tilde{U}(s,\rho,\varphi) \circ (D\chi(s,\rho,\varphi))^{-1}$$

Ce qui nous donne en utilisant la représentation matricielle :

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} \quad \frac{\partial U}{\partial y} \quad \frac{\partial U}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial \tilde{U}}{\partial s} \quad \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \rho} \quad \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \varphi} \right) (D\chi(s,\rho,\varphi))^{-1} \quad (6.12)$$

Donc :

$$\det(D\chi)\frac{\partial U}{\partial x}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial \tilde{U}}{\partial s}\rho\gamma'_x(s) - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \rho}\rho\cos(\varphi)(\gamma'_y(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma''_x(s)) + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \varphi}\sin(\varphi)(\gamma'_y(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma''_x(s)) \quad (6.13)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U}{\partial y}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial \tilde{U}}{\partial s}\rho\gamma'_y(s) + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \rho}\rho\cos(\varphi)(\gamma'_x(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma''_y(s)) - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \varphi}\sin(\varphi)(\gamma'_x(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma''_y(s)) \quad (6.14)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U}{\partial z}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial \tilde{U}}{\partial \rho}\rho\sin(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) - \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \varphi}\cos(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \quad (6.15)$$

Nous allons utiliser ces expressions pour exprimer les dérivées des champs de déformation dans la section suivante.

6.3 Expression des champs de déformations

6.3.1 Forme générale

Les champs de déformation généraux pour l'équation (6.1) sont du type :

$$\begin{array}{rccl} U: & \Omega \subset \mathbb{R}^3 & \to & \mathbb{R}^3 \\ & (x,y,z) & \mapsto & (U_x(x,y,z), U_y(x,y,z), U_z(x,y,z)) \end{array}$$

Expression particulière en coordonnées (s,ρ,φ)**.** Considérons que cette déformation est à support inclus dans $V_{\tilde{\rho}_0}$. On peut, sur ce voisinage, utiliser les coordonnées précédemment définies.

On considère un type de déformation particulière de la forme :

$$\tilde{U}_x(s,\rho,\varphi) = U_x \circ \chi(s,\rho,\varphi) = -w(s,\rho,\varphi)\gamma_y'(s) \quad (6.16)$$

$$\tilde{U}_y(s,\rho,\varphi) = U_y \circ \chi(s,\rho,\varphi) = w(s,\rho,\varphi)\gamma_x'(s) \quad (6.17)$$

$$\tilde{U}_z(s,\rho,\varphi) = U_z \circ \chi(s,\rho,\varphi) = 0 \quad (6.18)$$

où w est au moins $\mathcal{C}^1$ sur le domaine considéré.

Remarque 6.3.1 *La déformation considérée est seulement une déformation selon x et y.*

Expression des dérivées Exprimons les dérivées de $\tilde{U}$ en fonction de celles de w.

On a :

$$\frac{\partial \tilde{U}_x}{\partial s} = -\frac{\partial w}{\partial s}\gamma_y' - w\gamma_y'' \qquad \frac{\partial \tilde{U}_y}{\partial s} = \frac{\partial w}{\partial s}\gamma_x' + w\gamma_x''$$

$$\frac{\partial \tilde{U}_x}{\partial \rho} = -\frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_y' \qquad \frac{\partial \tilde{U}_y}{\partial \rho} = \frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_x'$$

$$\frac{\partial \tilde{U}_x}{\partial \varphi} = -\frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_y' \qquad \frac{\partial \tilde{U}_y}{\partial \varphi} = \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_x'$$

Les dérivées de $\tilde{U}_z$ sont quant à elles évidemment toutes nulles.
Grâce à (6.13), (6.14) et (6.15) on trouve
Pour U_x :

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_x}{\partial x}(\chi(s,\rho,\varphi)) = (\frac{\partial w}{\partial s}\gamma_y'+w\gamma_y'')\rho\gamma_x'(s)+\frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_y'\rho\cos(\varphi)(\gamma_y'(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)) - \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_y'\sin(\varphi)(\gamma_y'(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)) \quad (6.19)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_x}{\partial y}(\chi(s,\rho,\varphi)) = (\frac{\partial w}{\partial s}\gamma_y'+w\gamma_y'')\rho\gamma_y'(s)-\frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_y'\rho\cos(\varphi)(\gamma_x'(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)) + \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_y'\sin(\varphi)(\gamma_x'(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)) \quad (6.20)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_x}{\partial z}(\chi(s,\rho,\varphi)) = \frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_y'\rho\sin(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) + \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_y'\cos(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \quad (6.21)$$

Et de même pour U_y :

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_y}{\partial x}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -(\frac{\partial w}{\partial s}\gamma_x'+w\gamma_x'')\rho\gamma_x'(s)-\frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_x'\rho\cos(\varphi)(\gamma_y'(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)) + \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_x'\sin(\varphi)(\gamma_y'(s)-\rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)) \quad (6.22)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_y}{\partial y}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -(\frac{\partial w}{\partial s}\gamma_x'+w\gamma_x'')\rho\gamma_y'(s)+\frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_x'\rho\cos(\varphi)(\gamma_x'(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)) - \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_x'\sin(\varphi)(\gamma_x'(s)+\rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)) \quad (6.23)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_y}{\partial z}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial w}{\partial \rho}\gamma_x'\rho\sin(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) - \frac{\partial w}{\partial \varphi}\gamma_x'\cos(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \quad (6.24)$$

Expression de la divergence De ces expressions on peut en déduire l'expression de $\mathrm{div}(U)$.

On a : $\mathrm{div}(U) = \dfrac{\partial U_x}{\partial x} + \dfrac{\partial U_y}{\partial y} + \dfrac{\partial U_z}{\partial z}$.

Tous calculs faits, on trouve :

$$\mathrm{div}(U) = -w\frac{\det(\gamma', \gamma'')}{1 + \rho\cos(\varphi)\det(\gamma', \gamma'')} - \frac{\partial w}{\partial \rho}\cos(\varphi) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial w}{\partial \varphi}\sin(\varphi) \tag{6.25}$$

Dans la suite c'est plus la divergence surfacique qui interviendra dans les termes de surface de la dérivée de forme de l'énergie. Elle est donnée par

$$\mathrm{div}(U) - \left(\overrightarrow{N} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N}\right)$$

où $\overrightarrow{N}$ est la normale unitaire sortante à la surface considérée.

Nous allons maintenant définir la suite de déformations que nous allons utiliser pour la démonstration du résultat.

6.3.2 Un champ de vecteur particulier

En gardant l'idée du cas 3D axisymétrique, nous construisons une suite de déformation U^p à support compact inclus dans $V_{\tilde{\rho}_0}$. On choisit dans (6.16) et (6.18) des fonctions w^p à variables séparées qui ne dépendent pas de φ de la forme

$$w^p : (s, \rho, \varphi) \mapsto \begin{cases} \overbrace{\exp\left(\dfrac{1}{\rho^2 p^2 - 1}\right)}^{=:u^p(\rho)} v(s) & \text{si } \rho < \dfrac{1}{p} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{6.26}$$

avec

- $p > \dfrac{1}{\tilde{\rho}_0}$ ce qui assure que le support de w^p est dans $\mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}$.
- v définie sur tout $[0, l_\Gamma]$ est telle que v soit $\mathcal{C}^1$.
- $\tilde{U}^p$ la fonction obtenue en gardant les notations de la section précédente définie dans $\mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}$.

On notera pour $p > \dfrac{1}{\tilde{\rho}_0}$

$$\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} := \left\{(s, \rho, \varphi) \in \mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0},\ \text{tel que } \rho < \frac{1}{p}\right\}$$

Expression des dérivées et de la divergence de U^p. Si $\rho < \dfrac{1}{p}$, on a :

$$\frac{\partial w^p}{\partial s} = u^p v'(s) \tag{6.27}$$

$$\frac{\partial w^p}{\partial \rho} = \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s) = -2\rho p^2(\rho^2 p^2 - 1)^{-2} u^p(\rho)v(s) \tag{6.28}$$

et

$$\frac{\partial w^p}{\partial \varphi} \equiv 0 \tag{6.29}$$

$$\tag{6.30}$$

On a donc en utilisant les expressions des différentielles établies en section précédente :

$$\begin{aligned}\det(D\chi)\frac{\partial U_x^p}{\partial x}(\chi(s,\rho,\varphi)) &= u^p(\rho)\left(v'(s)\gamma_y' + v(s)\gamma_y''\right)\rho\gamma_x'(s) \\ &+ \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\gamma_y'\rho\cos(\varphi)\left(\gamma_y'(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)\right)\end{aligned} \tag{6.31}$$

$$\begin{aligned}\det(D\chi)\frac{\partial U_x^p}{\partial y}(\chi(s,\rho,\varphi)) &= u^p(\rho)\left(v'(s)\gamma_y' + v(s)\gamma_y''\right)\rho\gamma_y'(s) \\ &- \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\gamma_y'\rho\cos(\varphi)\left(\gamma_x'(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)\right)\end{aligned} \tag{6.32}$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_x^p}{\partial z}(\chi(s,\rho,\varphi)) = \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\gamma_y'\rho\sin(\varphi)(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \tag{6.33}$$

$$\begin{aligned}\det(D\chi)\frac{\partial U_y^p}{\partial x}(\chi(s,\rho,\varphi)) &= -u^p(\rho)\left(v'(s)\gamma_x' + v(s)\gamma_x''\right)\rho\gamma_x'(s) \\ &- \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\gamma_x'\rho\cos(\varphi)\left(\gamma_y'(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)\right)\end{aligned} \tag{6.34}$$

$$\begin{aligned}\det(D\chi)\frac{\partial U_y^p}{\partial y}(\chi(s,\rho,\varphi)) &= -u^p(\rho)\left(v'(s)\gamma_x' + v(s)\gamma_x''\right)\rho\gamma_y'(s) \\ &+ \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\gamma_x'\rho\cos(\varphi)\left(\gamma_x'(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)\right)\end{aligned} \tag{6.35}$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial U_y^p}{\partial z}(\chi(s,\rho,\varphi)) \;=\; -\frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\gamma_x'\rho\sin(\varphi)(1\;+\;\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \tag{6.36}$$

Et de (6.25), on déduit l'expression de la divergence de U^p.

$$\mathrm{div}(U^p) = -u^p(\rho)v(s)\frac{\det(\gamma',\gamma'')}{1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')} - \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\cos(\varphi) \tag{6.37}$$

Majorations Par un raisonnement analogue à celui du cas axisymétrique on peut montrer que :

$$\left|\frac{du^p}{d\rho}\right| \leq Cp \tag{6.38}$$

On a également :

$$|u^p| \leq 1 \tag{6.39}$$

Ces majorations nous servirons dans les sections suivantes.

Nous allons maintenant étudier la contribution des différents termes (6.3), (6.4), (6.6), (6.5), (6.7) pour cette suite particulière de déformations.

6.4 Etude des contributions capillaires

6.4.1 Terme sur Γ_{LS}

Le terme qui intervient sur la surface Γ_{LS} dans la dérivée de l'énergie J est donné par (6.6) :

$$\mu\int_{\Gamma_{LS}}\mathrm{div}_\Gamma(U)d\sigma = \mu\int_{\Gamma_{LS}}\left[\mathrm{div}(U) - \left({}^tDU\overrightarrow{N_{LS}}\cdot\overrightarrow{N_{LS}}\right)\right]d\sigma \tag{6.40}$$

Détaillons ce terme pour le cas particulier de la déformation U^p donnée en section précédente.

La surface Γ_{LS} correspond à des points dont l'angle φ vaut $-\pi$.
On note :

$$\mathcal{W}_{LS}^p := \Gamma_{LS}\cap supp(u^p) = \left\{(s,\rho)\in[0,l_\Gamma]\times]0,\frac{1}{p}[\right\}$$

Plus précisément on peut donner un paramétrage ψ de Γ_{LS} :

$$\psi : (s,\rho)\mapsto\begin{pmatrix}\gamma_x(s)-\rho\gamma_y'(s)\\ \gamma_y(s)+\rho\gamma_x'(s)\\ 0\end{pmatrix}$$

On a alors

$$\frac{\partial\psi}{\partial s} = \begin{pmatrix} \gamma'_x(s) - \rho\gamma''_y(s) \\ \gamma'_y(s) + \rho\gamma''_x(s) \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \frac{\partial\psi}{\partial\rho} = \begin{pmatrix} -\gamma'_y(s) \\ \gamma'_x(s) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Donc

$$\frac{\partial\psi}{\partial s} \wedge \frac{\partial\psi}{\partial\rho} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 - \rho\det(\gamma', \gamma'') \end{pmatrix} \tag{6.41}$$

Ce qui nous permet d'écrire

$$\boxed{d\sigma = (1 - \rho\det(\gamma', \gamma''))dsd\rho} \tag{6.42}$$

De plus $\overrightarrow{N}_{LS} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ donc $\left({}^tDU^p\overrightarrow{N}_{LS} \cdot \overrightarrow{N}_{LS}\right) = \dfrac{\partial U^p_z}{\partial z} = 0$

D'où

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_{LS}} \left[\mathrm{div}(U^p) - \left({}^tDU^p\overrightarrow{N_{LS}} \cdot \overrightarrow{N_{LS}}\right)\right] d\sigma &= \int_{\mathcal{W}^p_{LS}} \mathrm{div}(U^p)(1 - \rho\det(\gamma', \gamma''))dsd\rho \\
&= \int_{\mathcal{W}^p_{LS}} \left[-u^p(\rho)v(s)\frac{\det(\gamma', \gamma'')}{1 - \rho\det(\gamma', \gamma'')} + \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\right](1 - \rho\det(\gamma', \gamma''))dsd\rho \\
&= \int_{\mathcal{W}^p_{LS}} \left[-u^p(\rho)v(s)\det(\gamma', \gamma'') + \frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)(1 - \rho\det(\gamma', \gamma''))\right] dsd\rho \\
&= -\int_0^{l_\Gamma} v(s)\int_0^{\frac{1}{p}} u^p(\rho)\det(\gamma', \gamma'')dsd\rho + \int_0^{l_\Gamma} v(s)\left[(1 - \rho\det(\gamma', \gamma''))u^p(\rho)\right]_0^{\frac{1}{p}} ds \\
&\quad + \int_0^{l_\Gamma} v(s)\int_0^{\frac{1}{p}} u^p(\rho)\det(\gamma', \gamma'')dsd\rho \\
&= -\int_0^{l_\Gamma} v(s)u^p(0)ds = -\int_0^{l_\Gamma} \frac{1}{e}v(s)ds
\end{aligned} \tag{6.43}$$

puisque $u^p(\frac{1}{p}) = 0$ et $u^p(0) = \frac{1}{e}$.

Conclusion

$$DJ_{LS}(\Omega).U^p = -\frac{1}{e}\int_0^{l_\Gamma} v(s)ds, \quad \forall p > \frac{1}{\tilde{\rho}_0} \tag{6.44}$$

Et donc

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} DJ_{LS}(\Omega).U^p = -\frac{1}{e}\int_0^{l_\Gamma} v(s)ds} \tag{6.45}$$

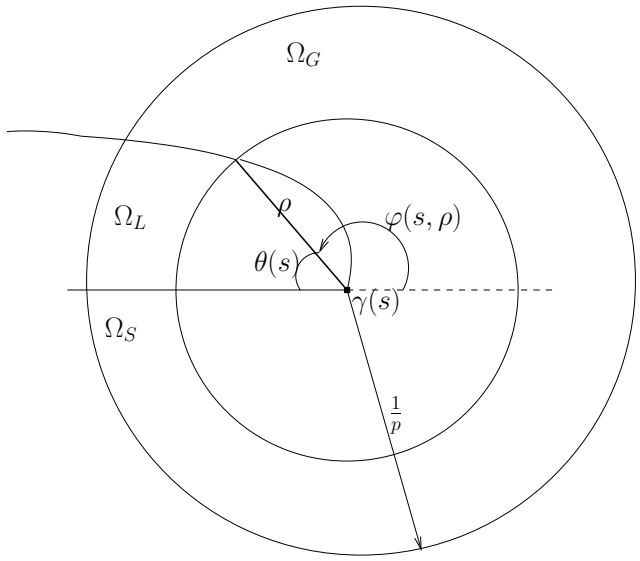


FIG. 6.3 – s fixé. Coupe dans le plan $\mathcal{P}_s$ de la surface Γ_{LG}

6.4.2 Le terme sur Γ_{LG}

Le terme qui intervient sur la surface Γ_{LG} dans la dérivée de l'énergie J est :

$$\int_{\Gamma_{LG}} \mathrm{div}_\Gamma(U^p)d\sigma = \int_{\Gamma_{LG}} \left[\mathrm{div}(U^p) - \left({}^tDU^p\overrightarrow{N_{LG}} \cdot \overrightarrow{N_{LG}}\right)\right] d\sigma \tag{6.46}$$

Paramétrage de Γ_{LG} On note

$$\mathcal{W}_{LG} := \{(s,\rho),\ \text{tel que } s \in [0,l_\gamma] \text{ et } \rho < \tilde{\rho}_0\}$$

et

$$\mathcal{W}^p_{LG} := \left\{(s,\rho),\ \text{tel que } s \in [0,l_\gamma] \text{ et } \rho < \frac{1}{p}\right\}$$

On suppose que la surface Γ_{LG} est régulière et qu'elle peut se représenter par le paramétrage :

$$\begin{array}{rccc} \psi : & \mathcal{W}_{LG} & \to & \Gamma_{LG} \\ & (s,\rho) & \mapsto & \begin{pmatrix} \gamma_x(s) + \rho\cos(\varphi(s,\rho))\gamma_y'(s) \\ \gamma_y(s) - \rho\cos(\varphi(s,\rho))\gamma_x'(s) \\ \rho\sin(\varphi(s,\rho)) \end{pmatrix} \end{array}$$

avec φ une fonction $\mathcal{C}^2$.

On a alors :

$$\frac{\partial\psi}{\partial s} = \begin{pmatrix} \gamma_x'(s) - \rho\frac{\partial\varphi}{\partial s}\sin(\varphi(s,\rho))\gamma_y'(s) + \rho\cos(\varphi(s,\rho))\gamma_y''(s) \\ \gamma_y'(s) + \rho\frac{\partial\varphi}{\partial s}\sin(\varphi(s,\rho))\gamma_x'(s) - \rho\cos(\varphi(s,\rho))\gamma_x''(s) \\ \rho\frac{\partial\varphi}{\partial s}\cos(\varphi(s,\rho)) \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\rho} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi(s,\rho))\gamma_y'(s) - \rho\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\sin(\varphi(s,\rho))\gamma_y'(s) \\ -\cos(\varphi(s,\rho))\gamma_x'(s) + \rho\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\sin(\varphi(s,\rho))\gamma_x'(s) \\ \sin(\varphi(s,\rho)) + \rho\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\cos(\varphi(s,\rho)) \end{pmatrix}$$

On pose $\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG} := \frac{\partial\psi}{\partial s} \wedge \frac{\partial\psi}{\partial\rho}$ et

$$\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG} = \begin{pmatrix} N_x \\ N_y \\ N_z \end{pmatrix}$$

En effectuant le produit vectoriel, on obtient :

$$N_x = \frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\gamma_x' + \left(\sin(\varphi) + \frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\cos(\varphi)\right)(\gamma_y' - \rho\cos(\varphi)\gamma_x'') \tag{6.47}$$

$$N_y = \frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\gamma_y' - \left(\sin(\varphi) + \frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\cos(\varphi)\right)(\gamma_x' + \rho\cos(\varphi)\gamma_y'') \tag{6.48}$$

$$N_z = \left(-\cos(\varphi) + \frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\sin(\varphi)\right)(1 + \rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \tag{6.49}$$

On sait de plus que :

$$d\sigma = ||\overrightarrow{\tilde{N}_{LG}}||dsd\rho \tag{6.50}$$

En utilisant que $||\gamma'|| = 1$ et $(\gamma' \cdot \gamma'') = 0$ on obtient

$$\boxed{d\sigma = \left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2 + \left(1 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\right)^2\rho^2\right)(1 + \rho\cos(\varphi(s,\rho))\det(\gamma',\gamma''))dsd\rho} \tag{6.51}$$

6.4.2.1 Evaluation de termes utiles pour la suite

Dans la suite on sera amené à évaluer les termes suivants :
$\gamma'_y N_y + \gamma'_x N_x$, $\gamma'_x N_y - \gamma'_y N_x$ et $\gamma''_x N_x + \gamma''_y N_y$.
En tenant compte du fait que $||\gamma'|| = 1$ et $(\gamma' \cdot \gamma'') = 0$, on a

1.
$$\gamma'_y N_y + \gamma'_x N_x = \frac{\partial \varphi}{\partial s}\rho \tag{6.52}$$

2.
$$\gamma'_x N_y - \gamma'_y N_x = -\left(\sin(\varphi) + \frac{\partial \varphi}{\partial \rho}\rho\cos(\varphi)\right)(1 + \rho\cos(\varphi)\det(\gamma', \gamma'')) \tag{6.53}$$

Expression de la divergence surfacique Observons l'expression surfacique sur Γ_{LG} dans le cas général

$$\begin{aligned}
&\int_{\Gamma_{LG}} \left[\mathrm{div}(U^p) - \left({}^tDU^p\overrightarrow{N_{LG}} \cdot \overrightarrow{N_{LG}}\right)\right] d\sigma \\
&\quad = \int_{\mathcal{W}^p_{LG}} \left[\mathrm{div}(U^p)||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}|| - \left({}^tDU^p\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG} \cdot \overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}\right)\frac{1}{||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}||}\right] ds d\rho \\
&\quad = \int_{\mathcal{W}^p_{LG}} \frac{1}{||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}||}\left[\mathrm{div}(U^p)||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}||^2 - \left({}^tDU^p\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG} \cdot \overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}\right)\right] ds d\rho
\end{aligned} \tag{6.54}$$

On a

$$\begin{aligned}
&\left({}^tDU^p\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG} \cdot \overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}\right) \\
&\quad = \frac{\partial U^p_x}{\partial x}N_x^2 + \frac{\partial U^p_y}{\partial y}N_y^2 + \left(\frac{\partial U^p_x}{\partial y} + \frac{\partial U^p_y}{\partial x}\right)N_xN_y + \frac{\partial U^p_x}{\partial z}N_xN_z + \frac{\partial U^p_y}{\partial z}N_yN_z
\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
&\mathrm{div}(U^p)||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}||^2 - \left({}^tDU^p\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG} \cdot \overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}\right) \\
&= \frac{\partial U^p_x}{\partial x}N_y^2 + \frac{\partial U^p_x}{\partial x}N_z^2 + \frac{\partial U^p_y}{\partial y}N_x^2 + \frac{\partial U^p_y}{\partial y}N_z^2 - \left(\frac{\partial U^p_x}{\partial y} + \frac{\partial U^p_y}{\partial x}\right)N_xN_y - \frac{\partial U^p_x}{\partial z}N_xN_z - \frac{\partial U^p_y}{\partial z}N_yN_z
\end{aligned} \tag{6.55}$$

A l'aide des expressions des dérivées de U^p et de sa divergence (données (6.31)-(6.37)) en fonction de celles de u^p et v, nous pouvons expliciter (6.55). Il est la somme de deux termes. L'un est proportionnel à u^p et et l'autre à $\dfrac{du^p}{d\rho}$.

6.4.2.2 Termes en facteur de u^p

En calculant le terme en facteur de u^p on trouve :

$$\frac{\rho}{\det(D\chi)}\left[(v(s)\gamma_y''\gamma_x' + v'(s)\gamma_y'\gamma_x')(N_y^2+N_z^2) - (v(s)\gamma_x''\gamma_y' + v'(s)\gamma_x'\gamma_y')(N_x^2+N_z^2)\right.$$
$$\left. - \left[v(s)(\gamma_y''\gamma_y' - \gamma_x''\gamma_x') + v'(s)((\gamma_y')^2 - (\gamma_x')^2)\right] N_xN_y\right]$$

On pose alors

$$\beta(s,\rho) := \frac{\rho}{\det(D\chi)}\left[(v(s)\gamma_y''\gamma_x' + v'(s)\gamma_y'\gamma_x')(N_y^2+N_z^2)\right.$$
$$\left. -(\gamma_x''\gamma_y' + v'(s)\gamma_x'\gamma_y')(N_x^2+N_z^2) - \left[(\gamma_y''\gamma_y' - \gamma_x''\gamma_x')v(s) + v'(s)((\gamma_y')^2 - (\gamma_x')^2)\right] N_xN_y\right] \tag{6.56}$$

Remarque 6.4.1 *On ne calcule pas explicitement β car cette forme nous suffira pour conclure. Par contre nous allons explicitement calculer le terme en facteur de $\dfrac{du^p}{d\rho}$.*

6.4.2.3 Termes en facteur de $\dfrac{du^p}{d\rho}$

On trouve

$$\frac{\rho\cos(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}\left[(\gamma_y' - \rho\cos(\varphi)\gamma_x'')\left(\gamma_y'(N_y^2+N_z^2) + \gamma_x'N_xN_y\right)\right.$$
$$\left. +(\gamma_x' + \rho\cos(\varphi)\gamma_y'')\left(\gamma_x'(N_x^2+N_z^2) + \gamma_y'N_xN_y\right)\right]$$
$$+\frac{\rho\sin(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))(\gamma_x'N_yN_z - \gamma_y'N_xN_z) \tag{6.57}$$

Et donc

$$\frac{\rho\cos(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}\left[(\gamma_y' - \rho\cos(\varphi)\gamma_x'')\left(N_y(\gamma_y'N_y + \gamma_x'N_x)) + \gamma_y'N_z^2\right)\right.$$
$$\left. +(\gamma_x' + \rho\cos(\varphi)\gamma_y'')\left(N_x(\gamma_x'N_x + \gamma_y'N_y) + \gamma_x'N_z^2\right)\right]$$
$$+\frac{\rho\sin(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))N_z(\gamma_x'N_y - \gamma_y'N_x) \tag{6.58}$$

En utilisant (6.52) il vient

$$N_x(\gamma_y'N_y+\gamma_x'N_x) = \left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2\gamma_x' + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\sin(\varphi) + \frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho^2\cos(\varphi)\right)(\gamma_y' - \rho\cos(\varphi)\gamma_x'')$$

et

$$N_y(\gamma'_y N_y+\gamma'_x N_x) = \left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2 \rho^2\gamma'_y - \left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\sin(\varphi) + \frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho^2\cos(\varphi)\right)(\gamma'_x+\rho\cos(\varphi)\gamma''_y)$$

En revenant à l'expression (6.58) et en utilisant (6.53), on obtient

$$\begin{aligned}
&\frac{\rho\cos(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}\Bigg[(\gamma'_y-\rho\cos(\varphi)\gamma''_x)\Bigg(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2\gamma'_y \\
&\qquad -\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho^2\cos(\varphi)\right)(\gamma'_x+\rho\cos(\varphi)\gamma''_y)+\gamma'_y N_z^2\Bigg) \\
&\qquad\qquad +(\gamma'_x+\rho\cos(\varphi)\gamma''_y)\Bigg(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2\gamma'_x \\
&\qquad +\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho^2\cos(\varphi)\right)(\gamma'_y-\rho\cos(\varphi)\gamma''_x)+\gamma'_x N_z^2\Bigg)\Bigg] \\
&\quad -\frac{\rho\sin(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}N_z(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2((\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\cos(\varphi))) \qquad (6.59)
\end{aligned}$$

On remarque que les termes en facteur de $\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\frac{\partial\varphi}{\partial s}\rho^2\cos(\varphi)\right)$ s'annulent, il ne reste donc plus que

$$\begin{aligned}
&\frac{\rho\cos(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}\Bigg[\gamma'_y(\gamma'_y-\rho\cos(\varphi)\gamma''_x)\left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2+N_z^2\right) \\
&\qquad\qquad +\gamma'_x(\gamma'_x+\rho\cos(\varphi)\gamma''_y)\left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2+N_z^2\right)\Bigg] \\
&\quad -\frac{\rho\sin(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}N_z(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2((\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\cos(\varphi))) \qquad (6.60)
\end{aligned}$$

Enfin en simplifiant les derniers termes, il reste

$$\begin{aligned}
&\frac{\rho\cos(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}\left[(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))\left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2+N_z^2\right)\right] \\
&\qquad -\frac{\rho\sin(\varphi)v(s)}{\det(D\chi)}N_z(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2((\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\cos(\varphi)))
\end{aligned}$$

En remplaçant enfin N_z par sa valeur et en utilisant (6.10) on obtient

$$\begin{aligned}
&- v(s)\Bigg[\cos(\varphi)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2 \\
&\qquad +(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2\Bigg(\cos(\varphi)(-\cos(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\sin(\varphi))^2 \\
&\qquad\qquad -\sin(\varphi)((\sin(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\cos(\varphi)))(-\cos(\varphi)+\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\sin(\varphi))\Bigg)\Bigg]
\end{aligned}$$

Il reste

$$\begin{aligned}
&- v(s)\Bigg[\cos(\varphi)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2 \\
&\qquad\qquad +(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2(\cos(\varphi)-\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\sin(\varphi))\Bigg]
\end{aligned}$$

Le terme en facteur de $\dfrac{du^p}{d\rho}$ est donc donné par :

$$\boxed{\alpha(s,\rho) := -v(s)\left[\cos(\varphi)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial s}\right)^2\rho^2+(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2(\cos(\varphi)-\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\rho\sin(\varphi))\right]} \tag{6.61}$$

6.4.2.4 Etude des intégrales

On veut donc calculer la limite quand $p\to+\infty$ de

$$\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\frac{1}{||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}||}\left[\beta(s,\rho)u^p(\rho)+\alpha(s,\rho)\frac{\partial u^p}{\partial\rho}(\rho)\right]dsd\rho$$

- La fonction φ est $\mathcal{C}^1$ en (s,ρ). On en déduit donc que $\frac{\beta(s,\rho)u^p}{||\overrightarrow{\tilde{N}_{LG}}||}$ est majorée sur $\mathcal{W}^p_{LG}$ indépendamment de p par un $M_\beta>0$, on en déduit par (6.39) que :
$$\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\beta(s,\rho)u^p(\rho)dsd\rho\le M_\beta\frac{l_\Gamma}{p}\to 0 \text{ quand } p\to+\infty$$
- Nous allons faire une intégration par partie en la variable ρ sur la partie en $\dfrac{du^p}{d\rho}$.
$$-\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\frac{1}{||\overrightarrow{\tilde{N}}_{LG}||}\alpha(s,\rho)\right)u^p(s,\rho,\varphi(s,\rho))dsd\rho+\int_0^{l_\Gamma}[\alpha(s,\rho)u^p(s,\rho,\varphi)]_0^{\frac{1}{p}}\,ds$$

Comme φ est $\mathcal{C}^2$, par le même raisonnement que pour la partie en u^p, on conclut que la limite du premier terme intégral quand p tend vers $+\infty$ est nulle.
Quant au terme qui subsiste, $\int_0^{l_\Gamma} [\alpha(s,\rho)u^p(\rho)]_0^{\frac{1}{p}}\, ds$, comme

$$[\alpha(s,\rho)u^p(\rho)]_0^{\frac{1}{p}} = -\alpha(s,0)u^p(0) = -\frac{1}{e}\cos(\varphi(s,0))v(s)$$

il reste :

$$\int_0^{l_\Gamma} [\alpha(s,\rho)u^p(\rho)]_0^{\frac{1}{p}} = -\int_0^{l_\Gamma} \frac{1}{e}\cos(\varphi(s,0))v(s)ds$$

Conclusion

$$\boxed{\lim_{p\to+\infty} DJ_{LG}(\Omega).U^p = -\int_0^{l_\Gamma} \frac{1}{e}\cos(\varphi(s,0))v(s)ds} \tag{6.62}$$

Nous allons maintenant nous intéresser au terme électrostatique, qui, comme pour le cas 3D axisymétrique demande une étude préliminaire sur la régularité de ϕ^Ω

6.5 Le terme électrostatique

Le terme volumique qui intervient est donné par

$$-\frac{\delta}{2}\int_\Omega \varepsilon||\nabla\phi^\Omega||^2 \mathrm{div}(U^p)d\Omega + \frac{\delta}{2}\int_\Omega \varepsilon\left(({}^tDU^p + DU^p)\nabla\phi^\Omega \,.\, \nabla\phi^\Omega\right) d\Omega \tag{6.63}$$

Nous allons traiter le premier terme qui intervient dans l'intégrale, le second se traite de la même façon.

Nous sommes amenés comme dans le cas axisymétrique à comparer le comportement de $\mathrm{div}(U^p)$ avec celui de $||\nabla\phi^\Omega||$ tous les deux singuliers au niveau de la ligne triple. Il nous faut donc commencer par étudier le comportement du potentiel au voisinage de la ligne triple.

6.5.1 Etude du potentiel

6.5.1.1 Etude de la régularité du potentiel

Dans [Bou97], on trouve une amélioration du résultat dû à K.Lemrabet [Lem78] qui nous donne la décomposition du potentiel en une partie singulière et une partie régulière dans le cas d'un problème de transmission 3D. On se place dans le même système de coordonnées (s,ρ,φ) qui existent au voisinage $\mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}$ du point triple.

Théorème 6.5.1 *[Bou97] Il existe dans $\mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}$ une unique fonction $c \in \mathcal{C}^\infty(0, l_\Gamma)$ telle que pour $i \in \{G, S\}$:*

$$\varphi_i^\omega - cS_i \in H^2(\omega_i)$$

avec

$$S_G(s,\rho,\varphi) = \frac{\varepsilon_S}{\cos(\nu(s)(\pi-\theta(s)))}\rho^{\nu(s)}\sin(\nu(s)(\varphi-(\pi-\theta(s))))\eta(s,\rho), \quad \varphi \in]0, \pi-\theta(s)[$$

$$S_S(s,\rho,\varphi) = \frac{\varepsilon_G}{\cos(\nu(s)\pi)}\rho^{\nu(s)}\sin(\nu(s)(\varphi+\pi))\eta(s,\rho), \quad \varphi \in]-\pi, 0[$$

où :

η est une fonction continue à support compact, telle que $\eta \equiv 1$ dans un voisinage du point $A(s)$ de coordonnées $\gamma(s)$ et nulle hors d'un cercle (du plan $\mathcal{P}(s)$) centré en $A(s)$.

$\nu(s)$ est l'unique solution dans $]0, 1[$ de l'équation

$$\varepsilon_S \tan(\nu(s)(\pi-\theta(s))) = -\varepsilon_G \tan(\nu(s)\pi)$$

.

En faisant une étude de cette équation, on peut montrer que $\nu(s) \in]\frac{1}{2}, 1[$.

On connaît donc l'expression explicite de la singularité.

Dans la suite, on abandonne par mesure de clarté les indices G et S (les calculs se mènent exactement de la même façon dans les deux cas).

On notera :

- $a(s) = \pi - \theta(s)$ dans Ω_G, $a(s) = -\pi$ dans Ω_S
- $b(s) = \dfrac{\varepsilon}{\cos(\nu(s)a(s))}$ pour $s \in [0, l_\Gamma]$
- $S(s,\rho,\varphi) = b(s)\rho^{\nu(s)}\sin(\nu(s)(\varphi - a(s)))$ dans Ω

Comme la surface Γ_{LG} est supposée $\mathcal{C}^2$ (au moins au voisinage du point triple), on déduit que θ, a, b sont réguliers sur $[0, l_\Gamma]$. Dans la suite nous aurons besoin d'exprimer les dérivées partielles et le gradient de la fonction cS.

On donne ces expressions dans le paragraphe suivant.

6.5.1.2 Expression du gradient de cS

On utilise les expressions (6.13), (6.14), (6.15) obtenues en section 6.2.2

$$\det(D\chi)\frac{\partial cS}{\partial x}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial cS}{\partial s}\rho\gamma_x'(s) - \frac{\partial cS}{\partial \rho}\rho\cos(\varphi)(\gamma_y'(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)) + \frac{\partial cS}{\partial \varphi}\sin(\varphi)(\gamma_y'(s) - \rho\cos(\varphi)\gamma_x''(s)) \quad (6.64)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial cS}{\partial y}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial cS}{\partial s}\rho\gamma_y'(s) + \frac{\partial cS}{\partial \rho}\rho\cos(\varphi)(\gamma_x'(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)) - \frac{\partial cS}{\partial \varphi}\sin(\varphi)(\gamma_x'(s) + \rho\cos(\varphi)\gamma_y''(s)) \quad (6.65)$$

$$\det(D\chi)\frac{\partial cS}{\partial z}(\chi(s,\rho,\varphi)) = -\frac{\partial cS}{\partial \rho}\rho\sin(\varphi)(1 + \rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) - \frac{\partial cS}{\partial \varphi}\cos(\varphi)(1 + \rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')) \quad (6.66)$$

En combinant ces trois expressions, et en n'utilisant que les propriétés concernant la norme de γ', l'orthogonalité des vecteurs γ' et γ'' et l'expression de $\det(\gamma',\gamma'') = \pm||\gamma''||$, on trouve l'expression suivante pour la norme du gradient dans les coordonnées (s,ρ,φ) :

$$||\nabla cS||^2 = \frac{1}{\det(D\chi)^2}\left[\left(\frac{\partial cS}{\partial s}\right)^2\rho^2 + \left(\frac{\partial cS}{\partial \rho}\right)^2\rho^2(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2 + \left(\frac{\partial cS}{\partial \varphi}\right)^2(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2\right]$$

$$||\nabla cS||^2 = \frac{1}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2}\left(\frac{\partial cS}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial cS}{\partial \rho}\right)^2 + \frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial cS}{\partial \varphi}\right)^2$$

On a

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial s} &= \rho^{\nu(s)}\left[(b'(s) + \ln(\rho)b(s)\nu'(s))\sin(\nu(s)(\varphi - a(s))) \right.\\ &\left. + b(s)(-\nu(s)a'(s) + \nu'(s)(\varphi - a(s)))\cos(\nu(s)(\varphi - a(s)))\right]\\ &= \rho^{\nu(s)-1}\left[(\rho b'(s) + b(s)\nu'(s)\rho\ln(\rho))\sin(\nu(s)(\varphi - a(s))) \right.\\ &\left. + \rho b(s)(-\nu(s)a'(s) + \nu'(s)(\varphi - a(s)))\cos(\nu(s)(\varphi - a(s)))\right]\\ &= \rho^{\nu(s)-1}h(s,\rho,\varphi) \quad (6.67)\end{aligned}$$

Avec h continue et telle que $\lim_{\rho\to 0} h(s,\rho,\varphi) = 0$ uniformément par rapport à (s,φ).

De même
$$\frac{\partial S}{\partial \rho} = b(s)\nu(s)\rho^{\nu(s)-1}\sin(\nu(s)(\varphi - a(s))) \tag{6.68}$$
Enfin
$$\frac{\partial S}{\partial \varphi} = b(s)\nu(s)\rho^{\nu(s)}\cos(\nu(s)(\varphi - a(s))) \tag{6.69}$$
On a
$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial cS}{\partial s} \\ \\ \dfrac{\partial cS}{\partial \rho} \\ \\ \dfrac{\partial cS}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c'(s)S + c(s)\dfrac{\partial S}{\partial s} \\ \\ c(s)\dfrac{\partial S}{\partial \rho} \\ \\ c(s)\dfrac{\partial S}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

En explicitant chaque terme on trouve que :

$$||\nabla cS||^2 = \frac{c'(s)^2S^2}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2} + \frac{c(s)^2}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2}\rho^{2\nu(s)-2}h(s,\rho,\varphi)^2$$
$$+ \frac{2c(s)c'(s)}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2}\rho^{\nu(s)-1}h(s,\rho,\varphi)S + c(s)^2b(s)^2\nu(s)^2\rho^{2\nu(s)-2} \tag{6.70}$$

Et donc
$$||\nabla cS||^2 = \rho^{2\nu(s)-2}k(s,\rho,\varphi) \tag{6.71}$$
où

$$k(s,\rho,\varphi) = \frac{\rho^2c'(s)^2b(s)^2\sin^2(\nu(s)(\varphi - a(s)))}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2} + \frac{c(s)^2}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2}h(s,\rho,\varphi)^2$$
$$+ \frac{2c(s)c'(s)}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))^2}\rho h(s,\rho,\varphi)b(s)\sin(\nu(s)(\varphi - a(s))) + c(s)^2b(s)^2\nu(s)^2 \tag{6.72}$$

Des propriétés précédentes on déduit que $k(s,\rho,\varphi)$ est majorée uniformément sur $\mathcal{V}_{\frac{1}{p}}$ indépendamment de p. Notons

$$M_k = \max_{\mathcal{V}_{\tilde{\rho}_0}} k(s,\rho,\varphi)$$

.

Cette étude préliminaire faite, nous pouvons étudier le terme $DJ_{elec}(\Omega).U^p$.

6.5.2 Etude de la contribution électrostatique

(6.63) page 189 est la somme de deux termes :

$$-\frac{\delta}{2}\int_{\Omega}\varepsilon||\nabla\phi^{\Omega}||^2\mathrm{div}(U^p)d\Omega \tag{6.73}$$

et

$$\frac{\delta}{2}\int_{\Omega}\varepsilon\left(({}^tDU^p+DU^p)\nabla\phi^{\Omega}\,.\,\nabla\phi^{\Omega}\right)d\Omega. \tag{6.74}$$

Nous n'allons traiter en détail que le terme (6.73). Le terme (6.74) se traite exactement de la même façon car il est du même ordre (comme dans le cas axisymétrique).

Dans (6.73) on fait apparaître une somme de deux termes. L'un présente u^p en facteur, l'autre $\frac{du^p}{d\rho}$.

On peut ainsi écrire :

$$\int_{\Omega}\varepsilon||\nabla\phi^{\Omega}||^2\mathrm{div}(U^p)d\Omega=\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)}\varepsilon\left(u^p(\rho)l(s,\rho,\varphi)+\frac{du^p}{d\rho}(\rho)m(s,\rho,\varphi)\right)dsd\rho d\varphi \tag{6.75}$$

où l et m sont obtenus grâce à l'expression de $\mathrm{div}(U^p)$ (6.37) et l'expression de $\det(D\chi)$ (6.10).

6.5.2.1 Terme en facteur de u^p

Ce terme est donné par :

$$\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)}\varepsilon u^p(\rho)\left(||\nabla\phi^{\Omega}||^2v(s)\frac{\det(\gamma',\gamma'')}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))}\rho(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))\right)dsd\rho d\varphi \tag{6.76}$$

ϕ^{Ω} est $H^1(\Omega)$, u^p est majorée par 1 et on peut majorer $\frac{\det(\gamma',\gamma'')}{(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))}$ indépendamment de p. On effectue donc le même raisonnement que dans le cas axisymétrique et on applique le théorème de convergence dominée de Lebesgue pour conclure sur la convergence de ce terme vers 0 lorsque p tend vers $+\infty$.

6.5.2.2 Terme en facteur de $\frac{du^p}{d\rho}$

Ce terme est donné par :

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}}\cap\Omega}\varepsilon\frac{du^p}{d\rho}(\rho)||\nabla\phi^{\Omega}||^2v(s)cos(\varphi)\det(D\chi)dsd\rho d\varphi \tag{6.77}$$

On écrira dans le voisinage $\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega$, et pour p assez grand : $\phi^{\Omega} = \phi_R^{\Omega} + c(s)S(s,\rho,\varphi)$, où S vaut S_S ou S_G suivant que l'on se trouve dans $\Omega = \Omega_S$ ou Ω_G.

On peut donc écrire :

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho) ||\nabla \phi^{\Omega}||^2 v(s) \cos(\varphi) \det(D\chi) ds d\rho d\varphi$$
$$\leq 2 \int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho) \left(||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2 + ||\nabla c(s) S||^2 \right) v(s) \cos(\varphi) \det(D\chi) ds d\rho d\varphi \quad (6.78)$$

1. Traitons la partie "régulière".

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho) ||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2 v(s) \cos(\varphi) \det(D\chi) ds d\rho d\varphi$$

On sait que $\phi_R^{\Omega} \in H^2(\Omega_i)$ pour $i \in \{G, S\}$.
Comme dans le cas axisymétrique, en utilisant l'injection de Sobolev $H^1(\Omega_i) \subset L^5(\Omega_i)$ et la majoration (6.38), on en déduit :

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega_i} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho) ||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2 v(s) \cos(\varphi) \det(D\chi) ds d\rho d\varphi$$
$$\leq Cp \int_{V_{\frac{1}{p}} \cap \Omega_i} ||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2 d\Omega$$
$$= Cp \int_{\Omega_i} \underbrace{\chi_{V_p}}_{L^{\frac{5}{3}}(\Omega_i)} \underbrace{||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2}_{L^{\frac{5}{2}}(\Omega_i)} d\Omega$$
$$\leq Cp \mathrm{mes}(V_p)^{\frac{3}{5}} ||\nabla \phi_R^{\Omega}||_{L^5(\Omega_i)} \quad (6.79)$$

avec C constante strictement positive.
D'où on déduit

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega_i} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho) ||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2 v(s) \cos(\varphi) \det(D\chi) ds d\rho d\varphi \to 0 \text{ quand } p \to +\infty$$

Et donc

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}} \cap \Omega} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho) ||\nabla \phi_R^{\Omega}||^2 v(s) \cos(\varphi) \det(D\chi) ds d\rho d\varphi \to 0 \text{ quand } p \to +\infty \quad (6.80)$$

2. Reste le terme "singulier".

$$\int_{\mathcal{V}_{\frac{1}{p}}\cap\Omega} \varepsilon \frac{du^p}{d\rho}(\rho)\left(||\nabla c(s)S||^2\right) v(s)\cos(\varphi)\det(D\chi)dsd\rho d\varphi$$

On peut faire indifféremment le même raisonnement sur Ω_G et Ω_G. Ainsi dans ce qui suit nous nous abstiendrons de mentionner les indices $i = G, S$. On doit étudier le terme

$$\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)} \varepsilon||\nabla c(s)S||^2\frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\cos(\varphi)\rho(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))dsd\rho d\varphi$$

De l'expression de S donnée en (6.71) et de la majoration (6.38), on déduit :

$$\left|\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)} \varepsilon||\nabla c(s)S||^2\frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\cos(\varphi)\rho(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))dsd\rho d\varphi\right|$$
$$\leq Cp\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)} \rho^{2\nu(s)-2}\left|k(s,\rho,\varphi)\right| v(s)\cos(\varphi)\rho(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma''))dsd\rho d\varphi \tag{6.81}$$

On sait que k, v, $\cos(\varphi)$, et $\det(\gamma',\gamma'')$ sont bornés indépendamment de p sur le compact considéré. Notons alors M ce majorant. On obtient

$$\begin{aligned}\left|\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)} \varepsilon||\nabla c(s)S||^2\frac{du^p}{d\rho}(\rho)v(s)\cos(\varphi)\rho(1+\rho\cos(\varphi)\det(\gamma',\gamma'')dsd\rho d\varphi\right| \\ \leq MCp\int_0^{l_\Gamma}\int_0^{\frac{1}{p}}\int_{-\pi}^{\varphi(s,\rho)} \rho^{2\nu(s)-2}\rho dsd\rho d\varphi \\ \leq 2\pi MCp\int_0^{l_\Gamma}\left[\rho^{2\nu(s)}\right]_0^{\frac{1}{p}} ds \\ \leq 2\pi MC\int_0^{l_\Gamma} p^{1-2\nu(s)}ds \end{aligned} \tag{6.82}$$

On conclut par le théorème de convergence dominée que ce terme tend vers 0 lorsque p tend vers $+\infty$ puisque $\frac{1}{2} < \nu(s) < 1$, $\forall s \in [0, l_\Gamma]$.

Par des raisonnements analogues, on trouve que (6.74) donne lui aussi une contribution nulle.

En conclusion,

$$\boxed{\lim_{p\to\infty} DJ_{elec}(\Omega).U^p = 0} \tag{6.83}$$

On peut de même montrer que

$$\lim_{p\to+\infty} DC(\Omega).U^p = 0 \tag{6.84}$$

et

$$\lim_{p\to+\infty} DJ_{grav}(\Omega).U^p = 0. \tag{6.85}$$

L'étude de ces deux termes présentant des raisonnement analogues à ceux déjà effectués ne présentent aucune difficulté et ne seront donc pas détaillés.

6.5.3 Résumé

En rassemblant les différentes contributions obtenues en (6.45), (6.62), (6.83), (6.84), (6.85), on obtient pour tout v $\mathcal{C}^1$ sur $[0, l_\Gamma]$:

$$-\frac{1}{e}\mu \int_0^{l_\Gamma} v(s)ds = \int_0^{l_\Gamma} \frac{1}{e}\cos(\theta(s))v(s)ds$$

D'où

$$\boxed{\cos(\theta(s)) = -\mu} \tag{6.86}$$

Ce qui signifie que l'angle est indépendant du potentiel appliqué.

6.6 Une généralisation à des coefficients de tension superficielle non constants

Jusqu'à maintenant, on a supposé que les coefficients de tension de surface étaient constants. En réalité, il peut arriver que ceux-ci dépendent du point de la surface où l'on se trouve. Nous allons essayer de généraliser ce que nous avons écrit pour le cas constant au cas de coefficients non constants. Plus précisément, on va supposer que les coefficients de tension de surface sont $\mathcal{C}^1$ sur la surface.

On va travailler avec le lagrangien non normalisé pour bien faire apparaître les quantités qui étaient constantes dans le cas précédent et qui maintenant ne le sont plus. L'expression de l'énergie devient alors :

$$L(\Omega, \lambda) = \rho g \int_{\Omega_L} z d\Omega - \int_{\Gamma_{LG}} \sigma_{LG} d\sigma + \int_{\Gamma_{LS}} (\sigma_{LS} - \sigma_{GS}) d\sigma - \frac{1}{2}\int_\Omega \varepsilon ||\nabla\phi^\Omega||^2 d\Omega$$

Nous allons donner les expressions des différentes différentielles. Les seules différentielles qui changent sont celles concernant les intégrales de surface, où les tensions de surface apparaissent. En utilisant les formules de [MS76] on obtient :

$$DJ_{grav}(\Omega).U = \rho g \int_\Omega U_z d\Omega + \rho g \int_\Omega z \mathrm{div}(U) d\Omega$$

$$DC(\Omega).U = \int_\Omega \mathrm{div}(U) d\Omega$$

$$DJ_{LG}(\Omega).U = \int_{\Gamma_{LG}} (\mathrm{grad}(\sigma_{LG}) \cdot U)\, d\sigma + \int_{\Gamma_{LG}} \sigma_{LG} \mathrm{div}(U) d\sigma - \int_{\Gamma_{LG}} \sigma_{LG} \left(\overrightarrow{N_{LG}} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N_{LG}} \right) d\sigma$$

$$DJ_{LS}(\Omega).U = \int_{\Gamma_{LS}} (\mathrm{grad}(\sigma_{LS} - \sigma_{GS}) \cdot U)\, d\sigma + \int_{\Gamma_{LS}} (\sigma_{LS} - \sigma_{GS}) \mathrm{div}(U) - \int_{\Gamma_{LS}} (\sigma_{LS} - \sigma_{GS}) \left(\overrightarrow{N_{LS}} \cdot {}^t DU \overrightarrow{N_{LS}} \right) d\sigma$$

$$DJ_{elec}(\Omega).U = -\frac{1}{2} \int_\Omega \varepsilon ||\nabla \phi^\Omega||^2 \mathrm{div}(U) d\Omega + \frac{1}{2} \int_\Omega \varepsilon \left(({}^t DU + DU) \nabla \phi^\Omega \cdot \nabla \phi^\Omega \right) d\Omega$$

La seule différence réside donc dans une étude supplémentaire des termes qui apparaissent. On rencontre deux types de termes "nouveaux" :

- $\displaystyle\int_{\Gamma_{LG}} (\mathrm{grad}(\sigma_{LG}) \cdot U)\, d\sigma$

  Il nous faut regarder la limite quand $p \to \infty$ de $\displaystyle\int_{\Gamma_{LG}} (\mathrm{grad}(\sigma_{LG}) \cdot U^p)\, d\sigma$ Si les tensions de surfaces sont supposées $\mathcal{C}^1$ sur la surface, alors dans ce cas, on obtient avec les mêmes raisonnements que précédemment que la limite d'un tel terme est nulle.
  Il suffit en effet de prouver que $\displaystyle\int_{\Gamma_{LG}} |U^p| d\sigma \to 0$ lorsque $p \to +\infty$. Or en reprenant les notations de la section 6.4, on a : $\displaystyle\int_{\Gamma_{LG}} |U^p| d\sigma \leq \mathrm{mes}(\mathcal{W}^p_{LG}) \to 0$ lorsque $p \to +\infty$.
- $\displaystyle\int_{\Gamma_{LG}} \sigma_{LG} \mathrm{div}(U) d\sigma$

  Ces termes peuvent se traiter de la même façon que pour l'étude du cas constant, cela ne rajoute pas de difficulté, ils sont intégrés dans les termes étudiés.

On va donc retrouver la même conclusion que dans le cas de coefficients constants :

L'angle de contact (défini comme en définition 6.2.1) est indépendant du potentiel ϕ_0 appliqué. Il est donné par la relation :

$$\boxed{\cos(\theta(s)) = -\frac{\sigma_{LS}(\gamma(s)) - \sigma_{GS}(\gamma(s))}{\sigma_{LG}(\gamma(s))}}$$

6.7 Conclusion

Nous avons établi dans ce chapitre une généralisation de la méthode utilisée dans le chapitre 2 pour obtenir un résultat d'invariance de l'angle de contact par rapport au potentiel électrostatique appliqué en 3D. Ce résultat repose sur la connaissance de la régularité du potentiel.

Enfin nous avons établi un résultat plus fort concernant l'angle de contact pour une forme de goutte dont les coefficients de tension de surface sont autorisés à varier de façon régulière sur les surfaces considérées. L'angle de contact n'est dans ce cas plus constant, mais varie du seul fait de la variation des coefficients de tension de surface et non du potentiel électrostatique.

Dans l'optique d'une nouvelle simulation numérique complètement tridimensionnelle, nous pouvons envisager de généraliser le modèle local établit précédemment. Nous serons alors amenés à résoudre une équations aux dérivées partielles donnant la forme de la surface de la goutte.

Conclusion

L'objectif de notre travail a été d'étudier plus précisément l'électromouillage à la suite de différents travaux mathématiques ([Bou97, CWB03]) et physiques ([BHM03]) effectués auparavant. Nous nous sommes ainsi essentiellement concentrés sur ce qui se passe au niveau du point triple.

Nous avons démontré mathématiquement pour le modèle utilisé que l'angle de contact à la ligne triple est indépendant du potentiel appliqué aussi bien pour des formes axisymétriques que pour des formes 3D quelconques. Dans le cas 3D, l'angle ne dépend que de l'abscisse curviligne le long de la ligne triple. Dans les deux cas, la démonstration a reposé sur la connaissance explicite de la singularité du potentiel électrostatique au voisinage du point triple.

Dans le cas d'une géométrie axisymétrique, avec comme point de départ le code établi lors de travaux antérieurs ([CWB03, MW05]), nous avons alors simulé, à potentiel donné, la forme de la goutte de façon macroscopique. Nous avons comparé les résultats numériques à l'approximation condensateur plan et avons retrouvé les conclusions de M. Bienia en ce qui concerne l'explosion de la courbure de la goutte au voisinage du point triple ([Bie05, BHM03]).

Dans l'idée de visualiser la forme de goutte et l'angle de contact (théoriquement constant) de façon plus locale, nous avons tout d'abord amélioré le calcul du potentiel électrostatique, singulier à la ligne triple. Une approche éléments finis classique et un traitement direct de la singularité et la Méthode du Complément Singulier ([CH03]) ont été implémentés et comparés pour le problème d'électromouillage. En analysant les résultats numériques obtenus, nous avons conclu à la nécessité du traitement de la singularité, mais aussi à son insuffisance.

Nous avons alors agi sur le modèle lui même et avons construit un modèle de correction locale de la forme de goutte au voisinage du point triple. Un algorithme de résolution a été proposé. Son étude théorique a porté sur sa constructibilité. L'étude du problème couplé et la convergence restent des problèmes ouverts.

Numériquement nous avons pu visualiser la correction effectuée sur les formes de goutte, et fait essentiel, nous avons visualisé l'invariance de l'angle de contact avec une bonne précision.

Nous n'avons cependant pas visualisé le phénomène de saturation qui n'est donc pas le fait de la divergence du champ au voisinage du point triple. Sa visualisation nécessitera donc la modification physique du modèle.

Pour poursuivre ce travail dans ce sens, il est possible de rajouter un terme de charge dans le second membre de l'équation donnant le potentiel afin de prendre en compte l'émission de charges qui se produit à partir d'un certain potentiel. Ceci serait adaptable à notre modèle actuel. Toute la difficulté réside dans l'expression de ce terme, qui au vu des quelques discussions mathématico-physiciennes ne semble pas trivial.

Il faudrait également envisager une simulation totalement 3D en intégrant la méthode de traitement de la singularité. L'adaptation du modèle local pourrait mener à la résolution d'une équation aux dérivées partielles sur la forme de la goutte couplée avec le calcul du potentiel. On pourrait aussi intégrer le cas de coefficients de tension superficielle non constants.

On pourrait aussi imaginer prendre en compte que la goutte n'est pas forcément totalement conductrice et qu'il peut se passer des recirculations dans la goutte. C'est d'ailleurs ce que commence à étudier le laboratoire LETI de façon plus expérimentale. Nous avons également commencé, avec Patrick Ciarlet, à explorer cette voie qui mène vraisemblablement également à un résultat d'invariance de l'angle de contact par rapport au potentiel appliqué.

Enfin signalons un dernier aspect très riche de l'étude de l'électromouillage : il pourrait être intéressant de généraliser les méthodes développées et les résultats obtenus au cas d'une goutte dynamique.

Bibliographie

[ACL03] F. Assous, P. Ciarlet.Jr et S. Labrunie – « Solutions of axisymmetric Maxwell equations », *Math. Meth.Appl.Sci.* **26** (2003), p. 861–896.

[ACLS03] F. Assous, P. Ciarlet.Jr, S. Labrunie et J. Segré – « Numerical solution to the time dependent Maxwell equations in axisymmetric singular domains : the singular complement method », *J. of Comp. Phys., 191* (2003), p. 147–176.

[ACS98] F. Assous, P. Ciarlet.Jr et E. Sonnendrucker – « Resolution of the Maxwell equations in a domain with rentrant corners », *Math.Model.Numer.Anal* **32** (1998), p. 359–389.

[ACS00] F. Assous, P. Ciarlet.Jr et J. Segré – « Numerical solution to the time dependant Maxwell equations in two-dimensional singular domains : the Singular Complement Method », *J.Comput.Phys.* **161** (2000), p. 218–249.

[Ada06] K. Adamiak – « Capillary and electrostatic limitations to the contact angle in electrowetting-on-dielectric », *Microfluid Nanofluid* **2** (2006), p. 471–480.

[BDM99] C. Bernardi, M. Dauge et Y. Maday – *Spectral methods for axisymmetric domains*, series in applied mathematics, elsevier éd., Gauthier-Villars, North Holland : Paris, Amsterdam, 1999.

[Ber93] B. Berge – « Electrocapillarité et mouillage de films isolants par l'eau », *C.R.A.S., III(317)* (1993), p. 157–163.

[BHM03] J. Buehrle, S. Herminghaus et F. Mugele – « Interface profiles near three-phase contact lines in electric fields », *Phys.Rev.Lett.* **91** (2003), no. 8.

[Bie05] M. Bienia – « Etude de déformation de goutte et de film mince induite électriquement », Thèse, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2005.

[Bou97] S. Bouchereau – « Modélisation et simulation numérique de l'electro-mouillage », Thèse, Université Joseph Fourier, 1997.

[BP00] B. Berge et J. Peseux – « Variable focal lens controlled by an external voltage : an application of electrowetting », *Eur.Phys.J.E.* **3** (2000), p. 159–163.

[BVQM06] M. Bienia, M. Vallade, C. Quilliet et F. Mugele – « Electrical-field-induced curvature increase on a drop of conducting liquid », *EuroPhys.Lett.* **74** (2006), p. 103.

[Car68] C. Caratheodory – *Vorlesungen über reele funktionen*, hardcover, troisième éd., AMS Chelsea, 1968.

[CH03] P. Ciarlet.Jr. et J. He – « La Méthode du Complément Singulier pour des problèmes scalaires 2d », *C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 336* (2003), p. 353–358.

[CWB03] P. Chow-Wing-Bom – *Modélisation numérique d'une lentille adaptative par optimisation de forme*, Mémoire, Rapport de stage de master 2 sous la direction de J.Monnier et P.Witomski, Université Joseph Fourier, Grenoble., 2003.

[Dau88] M. Dauge – « Elliptic boundary value problems on corner domains », vol. 1341, Lecture Notes in Mathematics, Springer Verlag : Berlin, 1988.

[dGBWQ02] P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart et D. Quéré – *Gouttes, bulles, perles et ondes*, belin éd., 2002.

[DP98] G. Demengel et J. Pouget – *Modèles de Bézier, des B-splines et des NURBS*, Ellipses éd., 1998.

[FG82] M. Fortin et R. Glowinski – *Méthodes de lagrangien augmenté : Application à la résolution numérique de problèmes aux limites*, dunod éd., 1982.

[Fil85] A. Filippov – *Differential Equations with Discontinuous Righthand Sides*, mathematics and its applications, kluwer academic publishers éd., 1985.

[Fin86] R. Finn – *Equilibrium capillary surfaces*, grundlehren der mathematischen wissenschaften (284) springer éd., 1986.

[Gri85] P. Grisvard – *Elliptic problems in nonsmooth domains*, Monographs and Studies in Mathematics 24, Pitman éd., 1985.

[Gri92] — , *Singularities in boundary value problems*, Masson, Springer-Verlag, RMA 22, éd., 1992.

[Hec] F. Hecht – « Freeware bamg (bidimensional anisotrope mesh generator) », `http://pauillac.inria.fr/cdrom/prog/unix/bamg/fra.htm`, INRIA.

[HF03] R. A. Hayesard et B. Feenstra – « Video speed electronic paper based on electrowetting. », *Nature* **425** (2003), p. 383–385.

[HP05] A. Henrot et M. Pierre – *Variation et optimisation de formes, une analyse géométrique*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg éd., 2005.

[Lem77] K. Lemrabet – « Régularité de la solution d'un problème de transmission », *J.Math. pures et appl.* **56** (1977), p. 1–38.

[Lem78] — , « An interface problem in a domain of R3 », *J.Mathematical Analysis and its Applications* **63** (1978), p. 549–562.

[Lip75] G. Lippmann – « Relations entre les phénomènes électriques et capillaires », Thèse, Faculté des Sciences, 1875.

[Liq] Liquavista – `http://www.liquavista.com/`.

[MB05] F. Mugele et J. Baret – « Electrowetting : from basis to applications », *J.Phys. : Condens. Matter* **17** (2005), p. 705–774.

[Mou84] M. Moussaoui – « Sur l'approximation des solutions du problème de Dirichlet dans un ouvert avec coins », p. 199–206, in : P.Grisvard, et al. (eds), Singularities and Constructive Method for their Treatment, vol. 1121, springer-verlag, éd., 1984.

[MS76] F. Murat et J. Simon – *Sur le contrôle optimal par un domaine géométrique*, Université Pierre et Marie Curie (paris vi), Laboratoire d'Analyse Numérique éd., 1976.

[MW05] J. Monnier et P. Witomski – « A shape inverse approach modelling electro-wetting », *6th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization, WCSM06* (Rio de Janeiro) (J. Herskovits, S. Mazorche et A. Canelas, éds.), ISSMO, May 2005, p. 1–10.

[MWCWBS05] J. Monnier, P. Witomski, P. Chow-Wing-Bom et C. Scheid – « Numerical modelling of electrowetting by a shape inverse approach », *en révision à SIAM* (2005).

[Nic00] S. Nicaise – *Analyse numérique et équations aux dérivées partielles : cours et problèmes résolus*, paris, dunod éd., 2000.

[Pap] `http://www.ipr-helpdesk.org/newsletter/12/html/FR/patentOfTheMonth.html`.

[PB05] A. Papathanasiou et A. Boudouvis – « A manifestation of the connection between dielectric breakdown strength and contact angle saturation in electrowetting », *Appl.Phys.Lett* **86** (2005), p. 164102.

[QB01] C. Quilliet et B. Berge – « Electrowetting : a recent outbreak », *Current opinion in Colloid and Interface Science* **6** (2001), p. 34–39.

[RCHFS04] T. Roques-Caumes, R. A. Hayes, B. Feenstra et L. Schlangen – « Liquid behavior inside a reflective display pixel based on electrowetting », *Journal of Applied Physics* **95(8)** (2004), p. 4389–4396.

[RDO98] E. Ramis, C. Deschamps et J. Odoux – *Cours de mathématiques, 5. applications de l'analyse à la géométrie*, dunod, paris éd., 1998.

[RK] Runge-Kutta-4 – `http://web.ujf-grenoble.fr/PHY/COURS/MIA/RungeKutta/`.

[Sim91] J. Simon – *Differenciacion de problemas de contorno respecto del domino*, universidad de sevilla facultad de matematicas departemento de analisis matematico éd., 1991.

[Son98] E. D. Sontag – *Mathematical control theory : Deterministic finite dimensional systems.*, second edition, springer, new york, series : textbooks in applied mathematics, number 6. hardcover éd., 1998.

[SRE] P. Saramito, N. Roquet et J. Etienne – « Freeware rheolef », `http://ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito/rheolef/`, LJK.

[VP99] H. Verheijen et M. Prins – « Reversible electrowetting and trapping of charge : model and experiments », *Langmuir* **15** (1999), p. 6616.

[VVB99] M. Vallet, M. Vallade et B. Berge – « Limiting phenomena for the spreading of water on polymer films by electrowetting », *Eur.Phys.J.B* **11** (1999), p. 583.

Table des figures

1 Différentes situations de mouillage : plastique, fleur, feuille 9
2 Surface hydrophobe (*gauche*)/hydrophile (*droite*) 10
3 *Expérience d'électromouillage :* Une goutte d'eau est placée dans l'air sur une surface isolante. Une tension est appliquée au système entre la goutte et une contre-électrode métallique placée sous l'isolant. La goutte s'écrase sous le fait du champ électrostatique. 10
4 Lentilles liquides commercialisées par Varioptic, http ://www.varioptic.com. 11
5 Transport d'un embryon de poisson par électromouillage (UCLA http ://www.chem.ucla.edu/dept/Organic/Garrell/research ultra-large style1.html) 12
6 *Gauche :* Principe de l'expérience d'électromouillage, *Droite :* Photo d'expérience, image : http ://mtg.tnw.utwente.nl/research/micro/ 12

1.1 Mouillage d'une goutte sur un solide ; angle de contact 16
1.2 Expérience d'électromouillage 18
1.3 Domaine 3D 21

2.1 Domaine 2D issu du domaine 3D axisymétrique 32
2.2 Cas du polygone 37
2.3 Domaine considéré dans le cas d'un problème de transmission . . 39
2.4 Domaine 2D engendrant le domaine 3D axisymétrique 42
2.5 Coordonnées polaires centrées au point triple. 44
2.6 Coordonnées polaires centrées en A 55

3.1 Les fonctions de base linéaires par morceaux 64
3.2 Approximation de la frontière γ_{LG} 64
3.3 Résumé du procédé d'optimisation 69
3.4 *Gauche :* Forme initiale correspondant à une droite, *Droite :* Forme initiale correspondant à un carré 74
3.5 Forme convergée obtenue dans les deux cas 74
3.6 Approximation condensateur plan 75
3.7 *Gauche,* Forme et maillage pour $\phi_0 = 400$ V ; *Droite,* Zoom près de la ligne de mouillage. 76

3.8 Forme de goutte pour différentes valeurs de ϕ_0. A droite : zoom au niveau du point triple. 77
3.9 Evolution de la forme de goutte en fonction du potentiel pour un angle de Young de 60° 77
3.10 Evolution de la forme de goutte en fonction du potentiel pour un angle de Young de 120° 78
3.11 Angle de contact. Valeurs numériques et valeurs de l'angle données par l'approximation de Lippmann. *Gauche.* Avec $NPC = 15$ points *Droite.* Avec $NPC = 50$ points 78
3.12 Forme de goutte comparée à l'approximation condensateur plan pour $\phi_0 = 800$ V 80
3.13 Exemple : $\phi_0 = 800$V. Valeurs numériques de la courbure pour 15, 30 et 50 points 81
3.14 Courbure de la goutte pour quelques valeurs de ϕ_0 avec 50 points de contrôle 82
3.15 Le domaine 89
3.16 Les coordonnées polaires 94

4.1 Paramétrage du domaine 108
4.2 Surface élémentaire dS 109
4.3 Forces capillaires agissant sur $\widehat{AD}$ et $\widehat{BC}$ 110
4.4 Coupe dans le plan P_1 110
4.5 Domaine axisymétrique 2D 116
4.6 Paramétrage du domaine 128
4.7 Principe 129
4.8 Principe de l'algorithme 133
4.9 Régularité de la fonction φ^n 143

5.1 Résumé du principe de l'algorithme à potentiel ϕ_0 donné 148
5.2 t^0 donne la taille de la boîte dans laquelle on applique le modèle local. 149
5.3 choix pour l'angle de départ 153
5.4 *Gauche,* Pour un angle de départ égal à l'angle précédent ;*Droite,* Pour un angle de départ égal à l'angle suivant 154
5.5 Pour un angle de départ égal à l'angle moitié 154
5.6 *Gauche,* Pour un angle de départ égal à l'angle précédent ;*Droite,* Pour un angle de départ égal à l'angle suivant 155
5.7 Pour un angle de départ égal à l'angle moitié 155
5.8 Zoom mettant en avant le décrochage au niveau du point triple. . 156
5.9 *Gauche,* Pour un point de départ aux $10^{\text{ième}}$ et $30^{\text{ième}}$ point de contrôle ;*Droite,* Zoom. 156

5.10 Evolution de la forme de goutte au voisinage du point triple pour un potentiel de 500V et un angle de Young de 90°. 158
5.11 Courbure numérique en chaque point pour différentes valeurs du potentiel et un angle de Young de 90°. 159
5.12 Comparaison de la courbure numérique en chaque point pour un potentiel de 500V et un angle de Young de 90°. 160
5.13 Valeur numérique de l'angle de contact comparé à la valeur de l'angle donné par l'approximation de Lippmann 162
5.14 Valeur numérique de l'angle de contact comparé à la valeur de l'angle donné par l'approximation de Lippmann 163
5.15 Valeur numérique de l'angle de contact comparé à la valeur de l'angle donné par l'approximation de Lippmann 164
5.16 Distance de visualisation d'un angle de 85° en fonction du potentiel appliqué 167
5.17 Angle de la pente de la tangente en chaque point 167
5.18 cosinus de l'angle en fonction de la distance pour plusieurs valeurs de potentiel ; pour un angle de Young de 90° 168
5.19 cosinus de l'angle en fonction de la distance pour plusieurs valeurs de potentiel ; pour un angle de Young de 60°. De bas en haut : potentiel croissant à partir de 100V et tous les 100V 168
5.20 Interpolation de la partie linéaire de la courbe du cosinus de l'angle θ en fonction de la distance à l'axe r 169

6.1 Notations dans le cas 3D 172
6.2 Coupe dans le plan $\mathcal{P}_s$ 174
6.3 s fixé. Coupe dans le plan $\mathcal{P}_s$ de la surface Γ_{LG} 183

Résumé

Nous étudions la déformation d'une goutte d'eau par électromouillage. La géométrie de la goutte près de la ligne de contact, au coeur de la compréhension complète du phénomène, soulève encore des interrogations. Ce travail y apporte des réponses théoriques et numériques. Un modèle utilisant l'optimisation de forme nous permet de montrer que l'angle de contact est indépendant du potentiel appliqué. Pour permettre une visualisation, nous simulons numériquement les formes macroscopiques de gouttes grâce à un code existant. Ceci étant insuffisant pour visualiser ce qui se passe à la ligne de contact, nous proposons deux voies. Nous améliorons l'approximation de la singularité du potentiel à la ligne de contact. Puis vu le caractère local de l'information recherchée, nous modifions le modèle global et extrayons un modèle différentiel local pour préciser les formes de gouttes à potentiel donné, effectuer un calcul précis de courbure, et enfin visualiser l'invariance de l'angle de contact.

Mots clefs : *Electromouillage, Optimisation de forme, Singularités dans des ouverts à coins, Traitement des singularités, Calcul variationnel*

Abstract

We study the deformation of a droplet by electrowetting. The geometry of the drop near the three phase contact line, essential to fully understand the phenomenon, raises questions. This work gives some theoretical and numerical answers. With a shape optimization model we prove that the contact angle is independent of the applied potential. Numerically, thanks to an existing code, we give the macroscopic shape of the drop. As it is inadequate to visualize what happens near the contact line, we follow two main ideas. First we improve the approximation of the singularity of the potential near the contact line (singular complement method). As we want to visualize a local effect, we modify the global model and extract a new differential local model. It allows us to make precise the shape of the drop at a given potential near the contact line. We give precise calculus of the curvature and observe the invariance of the contact angle.